

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد، شماره ۳۱۷

تحلیل رگرسیون غیرخطی و کاربردهای آن

داگلاس ام. بیتز - دونالد جی. واتز

مترجمین

حجت رضایی پزند - ابوالقاسم بزرگ نیا

Bates, Douglas M.

بیتس، داگلاس

تحلیل رگرسیون غیرخطی و کاربردهای آن / داگلاس ام. بیتز، دونالد جی. واتز؛ مترجمین
حجت رضایی پزند، ابوالقاسم بزرگنیا. - مشهد: دانشگاه فردوسی مشهد، ۱۳۸۰.
نه، ۳۸۷ ص. - (انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد؛ ۳۱۷)

ISBN: 964-5782-48-1

۱۸۰۰۰ ریال

فهرست نویسی بر اساس اطلاعات فیبا.

Nonlinear regression analysis and its applications.

عنوان اصلی:

واژه‌نامه.

کتابنامه: ص. [۳۵۷] - ۳۷۵.

۱. برگشت (ریاضیات). ۲. الگوهای خطی (آمار). ۳. تخمین پارامتر. الف. واتس، دونالد
Watts, Donald G. ب. رضایی پزند. حجت، ۱۳۳۰ - ، مترجم ج. بزرگنیا، ابوالقاسم، ۱۳۱۲ -
، مترجم د. دانشگاه فردوسی مشهد. ه. عنوان.

۵۱۹/۵۳۶

۴ ت ۹ ب / ۲ / ۲۷۸ QA

۱۳۸۰

م ۸۱-۴۸۷

کتابخانه ملی ایران



داگلاس ام. بیتز - دونالد جی. واتز

تحلیل رگرسیون غیرخطی و کاربردهای آن

مترجمین

حجت رضایی پزند - ابوالقاسم بزرگنیا

وزیری، ۴۰۰ صفحه، ۱۰۰۰ نسخه، چاپ اول، بهار ۱۳۸۱

امور فنی و چاپ: مؤسسه چاپ و انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد

بها: ۱۸۰۰۰ ریال

ISBN: 964-5782-48-1

شابک ۹۶۴-۵۷۸۲-۴۸-۱

فهرست مطالب

فصل اول	۵
مروری بر رگرسیون خطی	۵
۱-۱- الگوی رگرسیون خطی	۵
۱-۱-۱- برآوردهای حداقل مربعات	۸
۱-۱-۲- نتایج استنباط نظریه نمونه گیری	۱۰
۱-۱-۳- نتایج استنباط درست نمایی	۱۱
۱-۱-۴- نتایج استنباط بیزی	۱۱
۱-۱-۵- تذکرها	۱۲
۲-۱- هندسه کمترین مربعات خطی	۱۴
۲-۱-۱- رویه انتظار	۱۴
۲-۲-۱- محاسبه برآوردهای کمترین مربعات	۱۷
۲-۲-۱-۳- نواحی استنباط پارامتر	۲۰
۲-۲-۱-۱- هندسه نتایج نظریه نمونه گیری	۲۱
۲-۲-۱-۲- فاصله های اطمینان حاشیه ای	۲۵
۲-۲-۱-۳- هندسه نتایج حداکثر درست نمایی	۲۹
۳-۱- فرضیات و ارزیابی الگو	۲۹
۳-۱-۱- فرضیات و مفاهیم آن	۳۰
۳-۲-۱- ارزیابی الگو	۳۳
۳-۲-۱-۱- رسم باقی مانده ها	۳۳
۳-۲-۱-۲- پایا کردن واریانس	۳۴
۳-۲-۱-۳- نابرازشی	۳۶
تمرین	۳۸

فصل دوم	۳۹
رگرسیون غیر خطی- برآورد تکراری و تقریبهای خطی	۳۹
۱-۲- الگوی رگرسیون غیر خطی	۳۹
۱-۱-۲- الگوهای خطی شدن	۴۱
۲-۱-۲- پارامترهای خطی شرطی	۴۳
۳-۱-۲- هندسه رویه انتظار	۴۳
۲-۲- تعیین برآوردهای کمترین مربعات	۴۶
۱-۲-۲- روش گوس - نیوتن	۴۷
۱-۱-۲-۲- عامل مرحله‌ای	۴۹
۲-۲-۲- هندسه کمترین مربعات غیر خطی	۵۰
۳-۲-۲- همگرایی	۵۶
۳-۲- کاربرد تقریب خطی در استنباط رگرسیون غیر خطی	۶۱
۱-۳-۲- ناحیه استنباط تقریبی برای پارامترها	۶۱
۲-۳-۲- نوار استنباط تقریبی برای پاسخ مورد انتظار	۶۷
۴-۲- کمترین مربعات غیر خطی از طریق مجموع مربعات	۷۰
۱-۴-۲- تقریب خطی	۷۰
۲-۴-۲- پیشی گرفتن	۷۳
۵-۲- کاربرد تقریب خطی	۷۴
تمرین	۷۵
فصل سوم	۷۷
ملاحظات عملی در رگرسیون غیر خطی	۷۷
۱-۳- شناخت الگو	۷۸
۱-۱-۳- تابع انتظار	۷۸
۲-۱-۳- جمله خطا	۸۰
۲-۳- تجزیه و تحلیل‌های مقدماتی	۸۱
۳-۳- مقادیر آغازین	۸۳

۸۳	۳-۳-۱- تفسیر رفتار تابع انتظار.....
۸۴	۳-۳-۲- تفسیر مشتقات تابع انتظار.....
۸۴	۳-۳-۳- تبدیل تابع انتظار.....
۸۷	۳-۳-۴- کاهش ابعاد.....
۸۸	۳-۳-۵- خطی بودن شرطی.....
۸۸	۳-۴-۴- تبدیلهای پارامتر.....
۸۸	۳-۴-۱- پارامترهای مقید.....
۹۰	۳-۴-۲- تسهیل در همگرایی.....
۹۱	۳-۵-۵- شیوه‌های تکراری دیگر.....
۹۱	۳-۵-۱- روش نیوتن - رافسون.....
۹۲	۳-۵-۲- تعدیل لونبرگ - مارکوارت.....
۹۳	۳-۵-۳- مشتقات عددی.....
۹۴	۳-۵-۴- روشهای مشتق - آزاد.....
۹۷	۳-۵-۵- حذف پارامترهای خطی شرطی.....
۹۸	۳-۶-۶- به دست آوردن همگرایی.....
۱۰۱	۳-۷-۷- ارزیابی برازش و پیرایش الگو.....
۱۰۴	۳-۸-۸- باقی مانده‌های وابسته.....
۱۰۹	۳-۹-۹- داده‌های تجمعی.....
۱۱۱	۳-۹-۱- برآورد پارامترها به روش انتگرال‌گیری مستقیم.....
۱۱۶	۳-۱۰-۱- مقایسه الگوها.....
۱۱۶	۳-۱۰-۱- الگوهای تودرتو.....
۱۱۷	۳-۱۰-۲- پارامترهای نمو و متغیرهای نشانگر.....
۱۲۱	۳-۱۰-۳- الگوهای ناتو در تو.....
۱۲۱	۳-۱۱-۱۱- پارامترها تابعی از سایر متغیرها.....
۱۲۳	۳-۱۲-۱۲- ارائه نتایج.....
۱۲۳	۳-۱۳-۱۳- مصرف نیتريت: یک مثال عملی.....
۱۲۴	۳-۱۳-۱- تحلیل مقدماتی.....
۱۲۶	۳-۱۳-۲- انتخاب الگو.....

۱۲۷	۳-۱۳-۳- مقادیر آغازین
۱۲۷	۳-۱۳-۴- ارزیابی برازش
۱۲۸	۳-۱۳-۵- پیرایش الگو
۱۲۹	۳-۱۳-۶- ارزیابی برازش
۱۲۹	۳-۱۳-۷- مختصرتر کردن الگو
۱۳۰	۳-۱۳-۸- ارزیابی برازش
۱۳۴	۳-۱۳-۹- مقایسه الگوها
۱۳۴	۳-۱۳-۱۰- گزارش نتایج
۱۳۵	۳-۱۴- طرح آزمایشها
۱۳۵	۳-۱۴-۱- ملاحظات کلی
۱۳۷	۳-۱۴-۲- معیار دترمینانی
۱۳۸	۳-۱۴-۳- طرح‌های آغازین
۱۴۱	۳-۱۴-۴- طرح‌های دنباله‌ای
۱۴۲	۳-۱۴-۵- طرح‌های زیر مجموعه‌های
۱۴۳	۳-۱۴-۶- الگوهای خطی شرطی
۱۴۴	۳-۱۴-۷- سایر معیارهای طرح
۱۴۵	تمرین

فصل چهارم

۱۴۹	برآورد پارامترهای چند پاسخی
۱۵۰	۴-۱- الگوی چند پاسخی
۱۵۳	۴-۱-۱- معیار دترمینانی
۱۵۴	۴-۱-۲- استنباط در برآوردهای چند پاسخی
۱۵۵	۴-۱-۳- ملاحظه‌های ابعادی در برآورد چند پاسخی
۱۵۷	۴-۲- یک روش گوس - نیوتن تعمیم یافته
۱۵۷	۴-۲-۱- شیب و هسیان دترمینان
۱۵۹	۴-۲-۲- یک هسیان تقریبی
۱۶۰	۴-۲-۳- محاسبات مربوط به هر تکرار

۱۶۱	۴-۲-۴- یک معیار همگرایی چند پاسخی
۱۶۱	۳-۴- ملاحظات عملی
۱۶۲	۱-۳-۴- محاسبه مقادیر آغازین
۱۶۳	۱-۱-۳-۴- برآوردهای آغازین الگوهای چند پاسخی توسط دستگاه معادلات دیفرانسیل
۱۶۵	۲-۳-۴- ارزیابی برازش
۱۷۱	۳-۳-۴- وابستگی میان پاسخها
۱۷۴	۴-۳-۴- ترکیبات خطی پاسخها
۱۷۹	۵-۳-۴- مقایسه الگوها
۱۸۰	۴-۴- داده‌های مفقود
۱۸۴	تمرین

فصل پنجم

۱۸۷	الگوهای تعریف شده توسط دستگاه معادلات دیفرانسیل
۱۸۷	۱-۵- الگوهای حجره‌ای و دستگاه نموداری
۱۹۱	۲-۵- برآورد پارامترها در الگوهای حجره‌ای
۱۹۲	۱-۲-۵- حل دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی
۱۹۴	۱-۱-۲-۵- زمان مرده
۱۹۷	۲-۱-۲-۵- نقل و انتقال تزریق
۱۹۷	۲-۲-۵- مشتقات تابع انتظار
۱۹۹	۳-۵- ملاحظات عملی
۱۹۹	۱-۳-۵- تبدیلات پارامتر
۲۰۰	۲-۳-۵- شناسایی
۲۰۱	۳-۳-۵- مقادیر آغازین
۲۰۱	۴-۵- مثال عملی - لیپو پروتئین
۲۰۲	۱-۴-۵- تحلیل‌های اولیه
۲۰۳	۲-۴-۵- یک حجره‌ای
۲۰۳	۳-۴-۵- دو حجره‌ای
۲۰۴	۴-۴-۵- سه حجره‌ای

۲۰۷	۵-۴-۵ سه حجره‌ای با پارامترهای مشترک
۲۰۸	۵-۴-۶ نتیجه‌گیری
۲۰۸	۵-۵-۵ روغن کشتی - (یک مثال عملی)
۲۰۸	۵-۵-۱ تحلیل اولیه
۲۱۰	۵-۵-۲ مقادیر آغازین برای داده‌های $k = 673$
۲۱۱	۵-۵-۳ برازش داده‌های دماهای مجزا
۲۱۳	۵-۵-۴ برآوردهای آغازین برای پارامترهای فرایندی
۲۱۴	۵-۵-۵ برازش مجموعه کامل داده‌ها
۲۱۵	۵-۵-۶ نتیجه‌ها
۲۱۷	تمرین

فصل هشتم

خلاصه نموداری نواحی استنباط غیر خطی

۲۱۹	۶-۱-۱ نواحی درست نمایی
۲۱۹	۶-۱-۱-۱ نواحی درست نمایی پارامترهای توأم
۲۲۳	۶-۱-۲ رسم t نیمرخ، اثرهای نیمرخ و طرح‌های زوج نیمرخ
۲۲۶	۶-۱-۲-۱-۱ اثرهای نیمرخ
۲۲۹	۶-۱-۲-۱-۲ طرح‌های زوج نیمرخ
۲۳۵	۶-۱-۳ توضیحات
۲۳۶	۶-۲-۱ نواحی بی‌زی
۲۳۶	۶-۲-۱-۱ انتخاب تابع پیشین بی‌زی پارامترها
۲۴۰	۶-۲-۲ نواحی توأم HPD
۲۴۴	۶-۳ ناحیه‌های اطمینان دقیق نظریه نمونه‌گیری
۲۵۰	۶-۴ مقایسه درست نمایی، بی‌زی و شیوه‌های نظریه نمونه‌گیری
۲۵۲	تمرین

فصل ۷

اندازه‌های انحنای غیرخطی بودن

۲۵۶	۷-۱- بردارهای سرعت و شتاب
۲۵۸	۷-۱-۱- شتاب‌های قائم و مماس
۲۶۳	۷-۱-۲- شتاب در یک جهت دلخواه
۲۶۴	۷-۲- انحناهای نسبی
۲۶۸	۷-۲-۱- تفسیر جمله‌های موجود در آرایه‌های انحناها
۲۶۸	۷-۲-۱-۱- انحناهای ذاتی
۲۶۹	۷-۲-۱-۲- تأثیرات پارامتر در انحناها
۲۷۳	۷-۲-۲- عامل بندی دوباره
۲۷۸	۷-۳- انحناهای RMS
۲۷۸	۷-۳-۱- محاسبه انحناهای RMS
۲۸۰	۷-۳-۲- کاربرد انحناهای RMS
۲۸۱	۷-۴- ارزیابی مستقیم اثرات غیر خطی ذاتی
۲۸۹	تمرین

۲۹۱	پیوست یک
۲۹۱	داده‌های به کار رفته در مثالها
۲۹۱	۱-۱- PCB
۲۹۲	۲-۱- رامفورد
۲۹۲	۳-۱- پروماین
۲۹۳	۴-۱- BOD
۲۹۴	۵-۱- هم ترکیبی
۲۹۵	۶-۱- a - پینن
۲۹۶	۷-۱- سولفوسیگرازول
۲۹۷	۸-۱- روغن ماشین
۲۹۸	۹-۱- کلراید
۲۹۹	۱۰-۱- اتیل آکریل
۳۰۰	۱۱-۱- ساکارین
۳۰۱	۱۲-۱- نیتريت مصرفی

۳۰۲ ۱۳-۴۱ : <i>S-PMMA</i>
۳۰۳ ۱۴-۴۱ : تتراسایکلین
۳۰۴ ۱۵-۴۱ : روغن معدنی
۳۰۶ ۱۶-۴۱ : لیوپروتئین
۳۰۷ پیوست ۲
۳۰۷ تجزیه <i>QR</i> به کمک تبدیل هوس مولدر
۳۱۱ پیوست ۳
۳۱۱ شبه برنامه گام‌های محاسباتی برای محاسبه الگوریتم‌ها
۳۱۱ ۱-۴۳ : کمترین مربعات غیر خطی
۳۱۱ شبه برنامه
۳۱۲ ۱-۱-۴۳ : اجرا در <i>S</i>
۳۱۴ ۲-۱-۴۳ : اجرا در <i>GAUSS</i>
۳۱۷ ۱-۲-۴۳ : اجرا <i>SAS/IML</i>
۳۲۰ ۲-۴۳ : خلاصه‌های خطی و باقی‌مانده‌های استیودنتائز
۳۲۱ ۳-۴۳ : برآورد چند پاسخی
۳۲۲ تذکرات
۳۲۳ ۴-۴۳ : دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی
۳۲۵ ۵-۴۳ : محاسبات نیم‌رخ
۳۲۵ ۱-۵-۴۳ : تولید t و اثرهای نیم‌رخ
۳۲۶ ۲-۵-۴۳ : رسم‌های زوج نیم‌رخ
۳۲۸ پیوست ۴
۳۲۸ مجموعه داده‌های به کاررفته در مسائل
۳۲۸ ۱-۴۴ : مجموعه دوم داده‌های <i>BOD</i>
۳۲۹ ۲-۴۴ : نیترو دیپن
۳۲۹ ۳-۴۴ : مجموعه دوم داده‌های ساکارین

نه	فهرست مطالب
۴-۴۴	جذب تدریجی..... ۳۲۹
۵-۴۴	برگها..... ۳۳۱
۶-۴۴	مجموعه دوم داده‌های a -پینن..... ۳۳۲
۷-۴۴	گزارش تجزیه زغال..... ۳۳۲
۸-۴۴	هالوپریدول..... ۳۳۶
۵	پیوست ۵..... ۳۳۷
	بررسی نما ماتریسی‌ها و پیچشی‌ها..... ۳۳۷
۱-۴۵	قطری کردن A ۳۳۸
۲-۴۵	حالت قطری نشدنی A ۳۴۰
۳-۴۵	مقادیر ویژه موهومی..... ۳۴۱
۶	پیوست ۶..... ۳۴۵
	درون یابی منحنی‌های میزان زوج نیمرخ..... ۳۴۵
۷	پیوست ۷..... ۳۵۱
	الگوهای به کار رفته در مجموعه داده‌ها..... ۳۵۱
	مراجع انگلیسی..... ۳۵۷
	کتاب‌شناسی..... ۳۶۵
	فهرست موضوعی..... ۳۷۷
	واژه نامه فارسی..... ۳۸۱

پیش‌گفتار مؤلفان

«مطالعه، انسان را کامل، همایش وی را آماده و نگارش موجب دقت او می‌شود»

فرانسیس بیکن

در این کتاب تلاش شده است تا ارائه‌ای متعادل از «نظریه» و «کاربرد» را در رگرسیون غیرخطی نشان دهیم. فرض کرده‌ایم؛ خوانندگان محترم اطلاعات لازم درباره رگرسیون خطی در سطح کتاب دراپرواسمیت (۱۹۸۱) یا مونتگری و پک (۱۹۸۲) دارند. باین وجود، به منظور فراهم کردن زمینه قبلی و استحکام نکات آن، خلاصه‌ای از کمترین مربعات خطی همراه با بسطی از هندسه مورد نیاز جهت درک کمترین مربعات خطی و غیرخطی در فصل اول ارائه شده است. از دید علمی، کمترین مربعات خطی به کمک روشهای جدید محاسباتی و نمایش نموداری موارد مفید، برای واری فرضهای موجود در رگرسیون خطی به منظور پیرایش و توسعه الگوهای برازشی، مورد بحث قرار گرفته است. در فصل دوم، چگونگی پیدایش الگوهای غیرخطی ارائه می‌شود. همچنین نشان داده شده است که چگونه روشهای رگرسیون خطی به شیوه تکرار، برای برآورد پارامتر به کار می‌رود. همچنین نشان داده‌ایم که چگونه الگوهای خطی می‌تواند برای ایجاد استنباط تقریبی در مورد پارامترهای توابع الگوهای رگرسیون غیرخطی با تأکید هندسی به کار می‌رود. صورت عملی برآورد غیرخطی در فصل سوم به‌طور مفصل بحث شده است. این فصل نکات برجسته‌ای را مانند: انتخاب مقادیر آغازین، تبدیل پارامترها، روشهای مشتق - آزاد، رسیدگی به باقی‌مانده‌های وابسته و داده‌های تجمعی و مقایسه الگوها، شامل می‌شود.

در فصل چهارم، الگوهای ویژه‌ای برای رسیدگی به داده‌های چند پاسخی کشف و ارائه شده است. فصل پنجم، فن آوری ویژه‌ای را برای الگوهای حجری که در آنها تابع پاسخ اختصاص به حل مجموعه‌ای از معادله‌های دیفرانسیل خطی دارد، ارائه شده است.

در فصل ششم، الگوهای تعمیم یافته‌ای برای ارائه استنباط نتایج تجزیه و تحلیل غیرخطی با کاربرد اثرهای نیم‌رخ احتمالی و ترسیمهای نیم‌رخ مورد بحث قرار گرفته است. در انتهای فصل هفتم، مواد لازم و اندازه گیری میزان انحراف از غیرخطی بودن شرایط یک الگوی مربوط به داده‌های واقعی را نشان داده‌ایم. این فصل برای درک بهتر و آگاهی از اهمیت هندسی کمترین مربعات خطی و غیرخطی بسیار مفید است.

نمایش‌های وسیع ساختارهای هندسی را برای سهولت درک به کار برده‌ایم. همچنین، مثالهای دنباله‌داری را چنان به کار گرفته‌ایم، که خوانندگان بتوانند، گسترش ایده‌های واقع در گامهای طرح‌ریزی شده موجود در متن را دنبال کنند.

تمام داده‌های به کار رفته در این کتاب واقعی هستند. یعنی، داده‌ها از آزمایشهای فیزیک ژنی، شیمیایی و زیست‌شناسی گرفته شده است. ما خود را مدیون مؤلفان پژوهشگران و ناشرانی می‌دانیم که اجازه کاربرد آمارهایشان را به ما داده‌اند. به‌ویژه لازم است از دان دیتز، ریک، الیورت، استیوها و ریلیاک، نیکولینس، دیوپرسن، راب استیراتیلی، مارگ ترلور واریک زایگل تشکر کنیم. از تذکرات مفید همکارانی در دانشگاه‌های دال هومی و کوین، به‌ویژه دانشگاه ویسکانزین، که این کتاب در آنجا تدریس شده است و سایر عزیزان قدردانی می‌کنیم. ما مدیون دیوید هامیلتون برای تولید و جایابی بحث‌ها هستیم. از همکاری گانسوگ کانک و کرانیک، مری لینداستروم و دنیس ولف، کسانی که در چاپخانه زحمت کشیده‌اند، متشکریم.

این کتاب با به کارگیری زبان متنی - troff، در رایانه تحقیقاتی آماری دانشگاه ویسکانزین - مدیسون، شکل گرفته است. نمودارها به کمک زبان S از دید آماری و ترسیمی تولید شده‌اند. ترسیمها و متن، هر دو در Lintronic-L300، با به کارگیری زبان Postscript، ایجاد شده است. از کار خوب بی‌شاب و دانشکده‌اش در وایلی و از چاپ بیل کاسدورف قدردانی می‌شود. تحقیق قابل ملاحظه‌ای در توسعه موارد داخل این کتاب به کار رفته است. ما از مؤسسه علوم طبیعی و تحقیقاتی مهندسی کانادا و از پشتیبانی مؤسسه علوم طبیعی ایالات متحده قدردانی می‌نماییم. در انتها، از همسرانمان، به‌خاطر عشق و دلگرم کردن ما در انجام این تألیف، تشکر می‌نماییم.

ژانویه ۱۹۸۸

دوگلاس - ام - بیتز

دونالد - جی - واتز

پیش‌گفتار مترجمان

نویسندگان کتابهای علمی و درسی، هر یک شیوه خاصی را در ارائه مطالب خود دارند. تعدادی به جنبه نظری و برخی دیگر به دیدگاه کاربردی آن ارزش بیشتری می‌دهند. نویسندگان کتاب رگرسیون غیرخطی حاضر، یعنی آقایان داگلاس. ام. بیتز و دونالد. ج. واتز، به هر دو جنبه اهمیت داده و نوشتاری نظری - کاربردی را به شیوه مطلوبی و به سبک کتاب درسی به رشته تحریر درآورده‌اند. ابتدا، بنیان نظری هر قسمت را به همراه استدلالهای ضروری، لازم و مفید و از دیدگاههای مختلف با انشائی روان و به حدّ اختصار مورد ارزشیابی قرار داده، سپس، به بررسی و معرفی نقاط قوت و ضعف روشها پرداخته‌اند. ارائه چند مثال کاربردی با داده‌های واقعی، زیبایی خاصی به درک بهتر نقاط قوت و ضعف داده است. برای فهم بهتر، از دیدگاه هندسی نیز به الگوها، روشها و مثالها نظر افکنده و با کاربرد نمودارهای هندسی مناسب و گویا، بهترین روش را برای درک بیشتر به خوانندگان کتاب ارائه کرده‌اند.

رگرسیون ابزار بسیار مفیدی برای بررسی رابطه و همبستگی بین دو یا چند پدیده، ترمیم و گسترش طول دوره آماری یک پدیده به کمک سایر پدیده‌هاست. به علت قابلیت‌های خوب کاربردی این ابزار، امروزه رگرسیون وسیله‌ای مفید و کارساز برای رشته‌های مختلف علوم، مانند آمار، اقتصاد، منابع آب، هواشناسی، علوم تربیتی، داروسازی، فیزیک، شیمی و بیمه... است. این ابزار در مقطع کارشناسی در رشته‌های: آمار، اقتصاد، منابع آب، علوم تربیتی و... جزو واحدهای درسی الزامی این رشته‌هاست. سرفصلهای درسی رگرسیون عبارت‌اند از: رگرسیون خطی (دو و چند متغیره)، رگرسیون غیرخطی قابل تبدیل به خطی و رگرسیون غیرخطی، کتابهای موجود بیشتر به مبحث رگرسیون خطی پرداخته و این قسمت را به خوبی شکافته و تحلیل نموده‌اند. رگرسیون غیرخطی قابل تبدیل به خطی و غیرخطی به صورت مختصر تر مد نظر قرار گرفته است، زیرا خود بحثی جداگانه از رگرسیون خطی هستند. در کتاب حاضر هر سه مبحث رگرسیون خطی (به اجمال)، رگرسیون غیرخطی

قابل تبدیل به خطی و غیرخطی به صورت مبسوطی مورد بحث و بررسی قرار گرفته‌اند. به علت شیوه خوب این کتاب در ارائه مطالب نظری - کاربردی، آن را ابزار مفیدی برای درک، کاربرد و توسعه بهتر رگرسیون خطی و غیرخطی درآورده است، به همین دلیل می‌تواند کمک بسیار خوبی برای واحد درسی رگرسیون در سطح کارشناسی به‌شمار آید.

در مقطع کارشناسی ارشد و دکترا، نیاز بیشتری به مطالب این کتاب احساس می‌شود، زیرا بیشتر رشته‌های علوم در این مقطع مانند: آمار، بیمه، اقتصاد، منابع آب، هواشناسی و... چه به صورت واحد درسی و چه از دید تحقیقاتی به مطالب این کتاب نیازمنداند. امید است با ترجمه آن، که اولین گام در ارائه رگرسیون غیرخطی به زبان پارسی است، سهم بسیار ناچیزی در توسعه این ابزار مفید به دست آید. چون تاکنون کتابی در زمینه رگرسیون غیرخطی به زبان پارسی به طور مستقل منتشر نشده است. بنابراین، در ترجمه با کمبودهای زیادی روبرو بوده‌ایم و قبل از هر چیز پوزش خواسته و امیدواریم که با سعه صدر به این ترجمه نظر افکنده شود. برای معادل فارسی بعضی از واژه‌ها به کتابهای مختلفی مراجعه و یا با صاحب‌نظران مشورت شده است و بهترین واژه فارسی انتخاب شده است. امید است مورد قبول استفاده کنندگان قرار گیرد.

چاپ این اثر مدیون همکاری و زحمات عزیزان زیر است :

آقای مهندس امین در معاونت پژوهشی دانشگاه فردوسی مشهد، آقایان مهندس تهرانی، کدکنی و فنائی در چاپخانه دانشگاه فردوسی مشهد و همچنین خانم نازنین کریمیان شیرازی در حروفچینی کریمیان. از همه آنها صمیمانه تشکر می‌کنیم و برای همه توفیق الهی آرزو داریم.

حجت رضایی پزند

ابوالقاسم بزرگ‌نیا

فصل اول

مروری بر رگرسیون خطی

با مروری بر رگرسیون خطی مطلب را آغاز می‌کنیم، زیرا، اساس رگرسیون غیرخطی بر مبنای درک رگرسیون خطی استوار است، برای آگاهی بیشتر در رگرسیون خطی، برای نمونه، می‌توان به مراجعی چون در اپرواسمیت (۱۹۸۱)، مونت‌گومری و پک (۱۹۸۲) و سیر (۱۹۷۷) رجوع نمود. بحث مفصل در مورد شناخت رگرسیون در مرجعهایی چون بلسلی، کوه و ولش (۱۹۸۰)، کوک و وایزبرگ (۱۹۸۲) و از دیدگاه بیزی، درباکس ویتاوا (۱۹۷۳)، ارائه گردیده است.

دو مطلب اساسی که به آن تأکید داریم، عبارت‌اند از: روشهای جدید عددی و هندسه کمترین مربعات خطی. همان‌گونه که خواهید دید، توجه به روشهای محاسباتی؛ از یک سو، سبب افزایش درک رگرسیون خطی است؛ از سوی دیگر، درک هندسی، بینش روشهای کمترین مربعات خطی و تجزیه واریانس را فراهم می‌کند، در نتیجه به رگرسیون غیرخطی نیز منتقل می‌شود.

۱-۱- الگوی رگرسیون خطی

رگرسیون خطی، برآورد و نتایج استنباط پارامترهای $\beta = [\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p]^T$ را در الگوی زیر

فراهم می‌کند:

$$Y_n = \beta_1 x_{n1} + \beta_2 x_{n2} + \dots + \beta_p x_{np} + Z_n \\ = (x_{n1}, \dots, x_{np})\beta + Z_n$$

(۱-۱)

در این الگو، Z_n متغیر تصادفی، Y_n نمایش دهنده پاسخ در حالت n ام با $n = 1, 2, \dots, N$ است. و از دو قسمت قطعی و تصادفی (یا خطا) تشکیل می‌شود. مؤلفه قطعی یعنی β ($\beta_{np}, \dots, \beta_{n1}$)، بستگی به پارامتر β و متغیرهای مستقل (یا پیش‌گو) x_{np}, \dots, x_{n1} ، $p = 1, 2, \dots, P$ دارد. مؤلفه تصادفی یا خطا، اخلاقی است که انحراف پاسخ را در آن حالت بیان می‌کند. بالانویس T نشان دهنده ترانهاد ماتریس است. این الگو برای حالت N متغیری به صورت ماتریس زیر نوشته می‌شود:

$$Y = X\beta + Z \quad (2-1)$$

در این جا، Y بردار متغیرهای تصادفی بوده و نمایش دهنده داده‌های مورد انتظار متغیر وابسته است. X ماتریس $N \times P$ مربوط به متغیرهای مستقل و Z بردار متغیرهای تصادفی نشان دهنده مؤلفه اختلال (خطا) است.

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \dots & x_{Np} \end{bmatrix}$$

(حروف ایتالیک سیاه را برای بردارهای متغیرهای تصادفی به کار می‌بریم.)
قسمت قطعی الگو یعنی $X\beta$ که تابعی از پارامترها و متغیرهای مستقل است - خود الگویی ریاضی یا الگویی تابعی را برای پاسخها ارائه می‌کند. همچنین، میانگین غیر صفر برای Z_n می‌تواند در الگوی تابعی مشارکت کند، ولی همواره فرض زیر را در نظر می‌گیریم:

$$E[Z] = 0 \quad (3-1)$$

هم‌ارز فرض بالا، عبارت: $E[Y] = X\beta$ است.

پس از این، $X\beta$ را "تابع انتظار" برای الگوی رگرسیونی، و ماتریس X را ماتریس متغیرهای مستقل یا مشاهدات می‌نامیم. بنابراین جمله (n, p) ام، عبارت است از: مشاهده سطر n ام تابع انتظار نسبت به پارامتر P (یا به عبارت دیگر، مشاهده n ام متغیر مستقل P ام).

توجه شود که در الگوی خطی، مشاهدات نسبت به یک پارامتر، مستقل از سایر پارامترهاست. اگر فرض کنیم Z از توزیع نرمال با ویژگی‌های زیر پیروی کند (I ماتریس واحد $N \times N$)،

$$\text{Var}(Z) = E(ZZ^T) = \sigma^2 I \quad (4-1)$$

آن‌گاه تابع چگالی توأم Y به شرط β و پراش σ^2 ، عبارت است از:

$$P(y|\beta, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-N/2} \exp \left[-(y-X\beta)^T (y-X\beta) / 2\sigma^2 \right]$$

$$= (2\pi\sigma^2)^{-N/2} \exp \left[-\|y-X\beta\|^2 / 2\sigma^2 \right] \quad (۵-۱)$$

علامت "||..." نشان دهنده طول بردار است. با در نظر گرفتن ماتریس مشاهدات X و بردار داده‌های مشاهدات Y ، امیدواریم که استنباطی درباره σ^2 و P پارامتر β انجام دهیم.

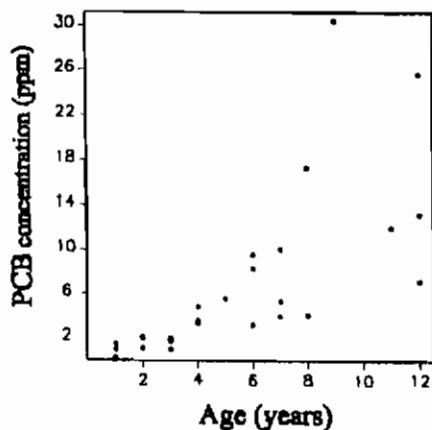
مثال ۱: PCB

به عنوان مثال ساده‌ای از رگرسیون خطی، غلظت پلی‌کلرید بی‌فنیل (PCB) را در ماهی‌های قزل‌آلای دریاچه‌کایوگا برحسب تابعی از سن آنها در نظر می‌گیریم (باچ و دیگران، ۱۹۷۲). مجموعه داده‌ها در پیوست شماره یک، بخش ۱-A۱ ارائه شده است. ترسیم غلظت PCB در مقابل سن بر اساس شکل (۱-۱)، نشان دهنده وجود رابطه‌ای منحنی بین غلظت PCB و سن است، افزون بر آن، بر اثر ازدیاد غلظت، واریانس غلظت نیز زیاد می‌شود. با توجه به اینکه فرض (۱-۴) نیازمند به پایاب بودن واریانس انحرافات است، بنابراین، تبدیلی از غلظت را برای پایدار کردن واریانس جستجو می‌کنیم (بخش ۱-۳-۲) را ببینید). ترسیم غلظت PCB در مقیاس لگاریتمی بر اساس نمودار ۱-۲a، نشان دهنده پایایی واریانس و وجود رابطه‌ای نزدیک به خط است. بنابراین یک تابع انتظار خطی به صورت $\ln(PCB) = \beta_1 + \beta_2 age$ را می‌توان فراهم نمود. در این جا " \ln " نشان دهنده لگاریتم طبیعی است. با تبدیل متغیر مستقل (باکس و تیدول، ۱۹۶۲) می‌توان برازش خطی بهتری را مانند نمودار (۱-۲a) انجام داد. به علت ذکر شده، ریشه سوم سن را به کار برده‌ایم. پس از تبدیل، تابع انتظار برازشی ساده‌ای مطابق زیر به دست می‌آید:

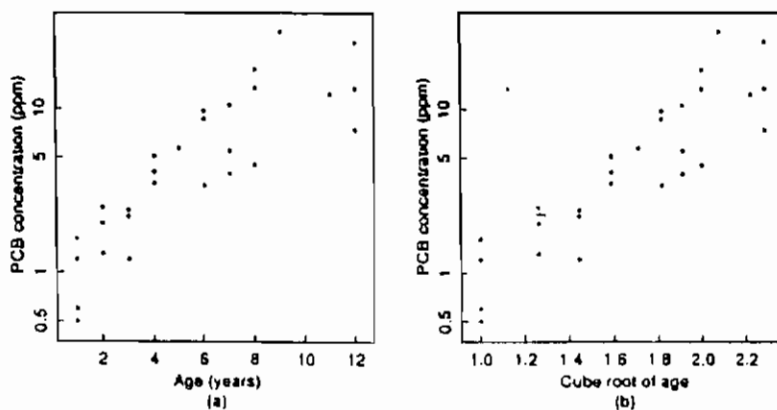
$$\ln(PCB) = \beta_1 + \beta_2 \sqrt[3]{age}$$

تذکر: روش‌های ارائه شده در فصل دوم را نیز می‌توان به کار گرفت، تا الگوهایی مطابق زیر که پارامترهای خطی شرطی β و پارامترهای تبدیلی α را برآورد می‌کند، برازش داد.

$$f(x, \beta, \alpha) = \beta_0 + \beta_1 x_1^{\alpha_1} + \beta_2 x_2^{\alpha_2} + \dots + \beta_m x_m^{\alpha_m}$$



نمودار ۱-۱- ترسیم غلظت PCB در مقابل سن ماهی‌های قزل‌آلای دریاچه کاپوگا.



نمودار ۱-۲- ترسیم غلظت PCB در مقابل سن ماهی‌های قزل‌آلای. غلظت در مبای لگاریتمی و بر حسب سن (قسمت a) و با بر حسب

ریشه سوم سن (قسمت b) رسم شده است.

۱-۱-۱- برآوردهای حداقل مربعات

تابع درست‌نمایی، یا به اختصار درست‌نمایی $l(\beta, \sigma|y)$ برای β و σ از دید ظاهری معادل ت.ج توأم (۵-۱) است. با این تفاوت که $l(\beta, \sigma|y)$ به عنوان تابعی از پارامترهای شرطی شده توسط مشاهده‌ها قلمداد می‌شود، نه به عنوان تابعی از پاسخهای شرطی شده بر روی مقادیر پارامترها.

با حذف مقدار $(2\pi)^{N/2}$ ، داریم:

$$l(\beta, \sigma | y) \propto \sigma^{-N} \exp \left[\frac{-\|y - X\beta\|^2}{2\sigma^2} \right] \quad (6-1)$$

هنگامی درست‌نمایی نسبت به β بیشینه می‌شود، که مجموع مربعات باقی‌مانده کمینه شود.

$$\begin{aligned} S(\beta) &= \|y - X\beta\|^2 \\ &= \sum_{n=1}^N \left[y_n - \left(\sum_{p=1}^P x_{np} \beta_p \right) \right]^2 \end{aligned} \quad (7-1)$$

در این جا، برآورد حداکثر درست‌نمایی مقدار $\hat{\beta}$ که β را کمینه می‌کند، $S(\beta)$ می‌نامیم. این $\hat{\beta}$ که آن را برآورد حداقل مربعات می‌نامند، به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y \quad (8-1)$$

برآورد حداقل مربعات را می‌توان توسط نظریه نمونه‌گیری نیز به دست آورد، زیرا، برآوردگر حداقل مربعات، دارای کمترین واریانس برآوردگر نااریب برای β است. همچنین می‌توان از شیوه‌های بیزی با چگالی پیشین آگاهی نابخش بر روی β و σ استفاده کرد. در شیوه‌های بیزی $\hat{\beta}$ نمای چگالی پسین کناری β است.

هر سه روش به کار رفته در این استنباط شامل درست‌نمایی، نمونه‌گیری و شیوه‌های بیزی، برآورد نقطه‌ای یکسانی را برای β ایجاد می‌کنند. همان‌گونه که به اجمال خواهید دید، آنها ناحیه قبول یکسانی رانیز برای مقادیر پارامتر تولید می‌کنند. در آغاز، مهم است که بدانیم: برآوردهای کمترین مربعات هنگامی برقراراند که، الگوی (۲-۱) و فرض‌های انجام شده بر مؤلفه‌های تصادفی (۳-۱) و (۳-۴) برقرار باشند. به عبارت دیگر، در کاربرد برآوردهای کمترین مربعات باید فرض‌های زیر برقرار باشند:

(۱) تابع انتظار درست است.

(۲) پاسخ مساوی مجموع تابع انتظار و خطاست.

(۳) خطا مستقل از تابع انتظار است.

(۴) هر خطا دارای توزیع نرمال است.

(۵) میانگین خطاها صفر است.

(۶) خطاها دارای واریانس مساوی‌اند.

(۷) خطاها به طور مستقل توزیع شده‌اند.
اگر این فرضیات برقرار بوده و به کمک ترسیم، مشابه بخش (۱-۳-۲) واریسی شوند، آنگاه می‌توانیم استنباط بیشتری در الگوی رگرسیونی انجام دهیم.
با نگاهی مشروح بر هر یک از سه روش استنباط آماری، می‌توانیم خواصی از روش کمترین مربعات را مشخص کنیم.

۱-۱-۲- نتایج استنباط نظریه نمونه‌گیری

برآوردگر کمترین مربعات دارای چند خاصیت به شرح زیر است که می‌توان آنها را در سبیر (۱۹۷۷) یافت.

(۱) برآورد کمترین مربعات $\hat{\beta}$ به صورت نرمال توزیع شده است. زیرا برآوردگر، تابعی خطی از Y است و Y نیز خود تابعی خطی از Z است. چون Z نرمال فرض شده، بنابراین $\hat{\beta}$ نیز نرمال است.

(۲) $E[\hat{\beta}] = \beta$ ، یعنی برآوردگر کمترین مربعات نااریب است.

(۳) $Var[\hat{\beta}] = \sigma^2 (X^T X)^{-1}$ ، یعنی ماتریس کوواریانس برآوردگر کمترین مربعات، به واریانس خطاها و ماتریس مشاهدات X بستگی دارد.

(۴) ناحیه اطمینان توأم $1-\alpha$ برای β بیضوی زیر است:

$$(\beta - \hat{\beta})^T X^T X (\beta - \hat{\beta}) \leq P s^2 F(P, N-P, \alpha) \quad (9-1)$$

در اینجا: $s^2 = \frac{S(\hat{\beta})}{N-P}$ میانگین مربع خطا یا برآورد واریانس با $N-P$ درجه آزادی است.

$F(P, N-P; \alpha)$ ، چندک بالای α برای توزیع فیشر (F) با درجات آزادی P و $N-L$ است.

(۵) فاصله اطمینان حاشیه‌ای $1-\alpha$ برای پارامتر β_p عبارت است از:

$$\hat{\beta}_p \pm se(\hat{\beta}_p) t(N-P, \alpha/2) \quad (10-1)$$

در این جا، $t(N-P; \frac{\alpha}{2})$ ، چندک بالای $\frac{\alpha}{2}$ برای توزیع t استیودنت با $N-P$ درجه آزادی است. خطای استاندارد برآوردگر پارامتر، عبارت است از:

$$se(\hat{\beta}_p) = s \sqrt{|(X^T X)^{-1}|_{pp}} \quad (11-1)$$

عامل $\{(X^T X)^{-1}\}_{pp}$ برابر مؤلفه P ام قطر اصلی ماتریس $(X^T X)^{-1}$ است.

(۶) فاصله اطمینان $1-\alpha$ برای پاسخ مورد انتظار در x_0 برابر است با:

$$\mathbf{x}_0^T \hat{\beta} \pm s \sqrt{\mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0} \quad t(N-P, \alpha/2) \quad (12-1)$$

(۷) نوار اطمینان $1-\alpha$ برای تابع انتظار در هر نقطه \mathbf{x} عبارت است از:

$$\mathbf{x}^T \hat{\beta} \pm s \sqrt{\mathbf{x}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}} \quad \sqrt{PF(P, N-P, \alpha)} \quad (13-1)$$

بسطهای (۱۲-۱) و (۱۳-۱)، متفاوت اند، زیرا، (۱۲-۱) فاصله مربوط به یک نقطه ساده خاص را در نظر می‌گیرد. ولی در (۱۳-۱) نوازی که توسط فاصله‌های همه مقادیر \mathbf{X} ایجاد می‌شود، مورد نظر است.

۱-۳- نتایج استنباط درست‌نمایی

تابع درست‌نمایی $l(\beta, \sigma | y)$ معادله (۶-۱)، فقط در جمله $\|y - \mathbf{X}\beta\|$ به β بستگی دارد، بنابراین، منحنی‌های تراز درست‌نمایش عبارت‌اند از:

$$\|y - \mathbf{X}\beta\|^2 = c \quad (14-1)$$

در این جا، c مقدار ثابتی است. یک ناحیه درست‌نمایی توسط منحنی‌های تراز زیر کراندار می‌شود.

$$c = S(\hat{\beta}) \left[1 + \frac{P}{N-P} F(P, N-P, \alpha) \right]$$

این ناحیه، هم‌ارز ناحیه اطمینان توأم $1-\alpha$ ، در روش نظریه نمونه‌گیری است. هر چند تفسیر یک ناحیه درست‌نمایی در مقایسه با ناحیه اطمینان، به‌طور کامل متفاوت است.

۱-۴- نتایج استنباط بیزی

همان‌گونه که در باکس و تیاو (۱۹۷۳)، نشان داده شده است. تابع چگالی پسین‌کناری بیزی برای β ، یک چگالی پیشین ناآگاهی بخش برای β و σ را به صورت زیر فرض می‌کند.

$$P(\beta, \sigma) \propto \sigma^{-1} \quad (15-1)$$

برابر

$$P(\beta | y) \propto \left\{ 1 + \frac{(\beta - \hat{\beta})^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\beta - \hat{\beta})}{\nu s^2} \right\}^{-(\nu+P)/2} \quad (16-1)$$

که به صورت چگالی T -استیودنت P متغیره با پارامتر موقعیت $\hat{\beta}$ ، ماتریس مقیاس $S^2(X^T X)^{-1}$ و تعداد درجه آزادی $\nu = N - P$ است. در نتیجه چگالی پسین کناری برای یک پارامتر تنهای β_p ، یک چگالی یک متغیره T -استیودنت با پارامترهای موقعیت $\hat{\beta}_p$ و مقیاس $S^2\{(X^T X)^{-1}\}_{pp}$ و درجه آزادی $N - P$ است. چگالی پسین کناری برای میانگین \bar{y} در x_0 به صورت چگالی یک متغیره T -استیودنت با پارامترهای موقعیت $x_0^T \hat{\beta}$ و مقیاس $x_0^T S^2(X^T X)^{-1} x_0$ و درجه آزادی $N - P$ است.

یک ناحیه چگالی پسین اعلی (HPD) شامل $1 - \alpha$ به صورت ناحیه R در فضای پارامتر تعریف می شود به گونه ای که $P_{\{ \beta \in R \}} = 1 - \alpha$ و $\beta_1 \in R$ و $\beta_2 \notin R$ و $P(\beta_1 | y) \geq P(\beta_2 | y)$ (با کس ویتانو، ۱۹۷۳). برای الگوهای خطی با ناآگاهی بخش پیشین، یک ناحیه HPD توسط بیضیگون تعریف شده در (۹-۱) ارائه می شود. به طور مشابه، ناحیه های HPD کناری برای β_p و $X_0^T \beta$ از نظر عددی معادل ناحیه های نظریه نمونه گیری است. (۱-۱۰، ۱-۱۲ و ۱-۱۳).

۱-۱-۵- تذکرها

هرچند که نظرات سه شیوه به استنباط آماری تفاوت قابل ملاحظه ای دارند، ولی آنها به یک استنباط اساسی معادل راهنمایی می کنند. به ویژه چون حدود اطمینان توأم درست نمایی و ناحیه های HPD بیزی مساوی اند، لذا هر دو را به عنوان نواحی استنباط در نظر می گیریم. بعلاوه، هنگامی که به خطای استاندارد یا همبستگی مراجعه می کنیم، جمله بیزی «خطای استاندارد β_p » و هنگامی که به نظریه نمونه گیری یا روش های درست نمایی مراجعه می کنیم، جمله «خطای استاندارد برآورد β_p » را بیان می کنیم.

برای حداقل مربعات خطی، یکی را به کار می بریم. چون برای حداقل مربعات غیرخطی شیوه درست نمایی ساده ترین و مستقیم ترین تفسیر را دارد، لذا بر آن تأکید داریم.

مثال ۲: PCB

داده های PCB را برای محاسبه برآورد پارامترها و نواحی استنباط حاشیه ای و توأم به کار می بریم. در این شرایط خطی، می توان نواحی را با کاربرد $\hat{\beta}$ ، S^2 و $X^T X$ و $\nu = N - P$ خلاصه کرد. برای داده های $\ln(PCB)$ با $\nu = 26$ درجه آزادی، به عنوان متغیر مستقل، داریم: $\hat{\beta} = (-2/391, 2/300)^T$ ، $S^2 = 0/246$ با

$$X^T X = \begin{bmatrix} 28/000 & 46/941 \\ 46/941 & 83/38 \end{bmatrix}$$

$$(X^T X)^{-1} = \begin{bmatrix} 0/6374 & -0/3589 \\ -0/3589 & 0/2141 \end{bmatrix} \quad \text{و همچنین:}$$

بنابراین فاصله اطمینان توأم ۹۵٪ عبارت است از:

$$28/00(\beta_1 + 2/391)^2 + 93/88(\beta_1 + 2/391)(\beta_2 - 2/300) + 83/73(\beta_2 - 2/300)^2 \\ = 2(0/246) \times 3/37 = 1/66$$

فاصله استنباط حاشیه‌ای ۹۵٪ برای پارامتر β_1 عبارت است از:

$$-2/391 \pm (0/496) \sqrt{0/6374(2/056)}$$

$$-3/21 \leq \hat{\beta}_1 \leq -1/58 \quad \text{یا:}$$

فاصله استنباط حاشیه‌ای ۹۵٪ برای پارامتر β_2 عبارت است از:

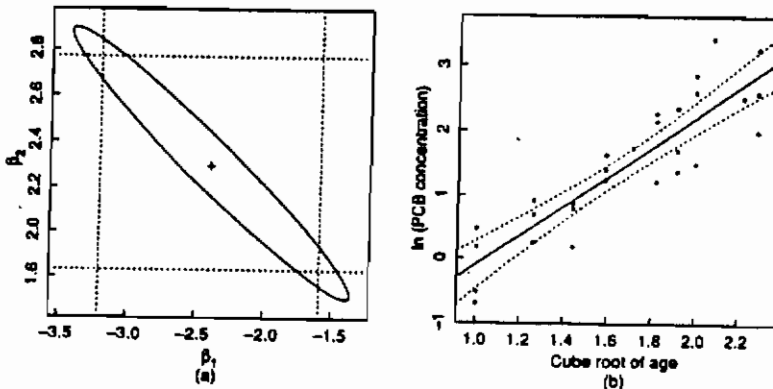
$$-2/300 \pm (0/496) \sqrt{0/2141(2/056)}$$

$$1/83 \leq \beta_2 \leq 2/77 \quad \text{یا:}$$

نوار استنباط ۹۵٪ برای مقادیر $\ln(PCB)$ در هر $\sqrt[3]{age} = x$ عبارت است از:

$$-2/391 + 2/300 x \pm (0/496) \sqrt{0/637 - 0/718x + 0/214x^2} \sqrt{2(3/37)}$$

این نواحی در نمودار (۱-۳) رسم شده‌اند.



نمودار ۳-۱. ناحیه اطمینان برای الگوی $\ln(P(B)) = \beta_1 + \beta_2 \sqrt[3]{age}$ قسمت a نشان دهنده برآوردهای کمترین مربعه (+)، ناحیه استنباط ۹۵٪ پارامتر توأم (خط پر) و فاصله استنباط ۹۵٪ حاشیه‌ای خط - نقطه چین‌ها). قسمت b، نشان دهنده پاسخ برازشی (خط پر) و نوار استنباط ۹۵٪ (خط - نقطه چین) است.

تا هنگامی که امکان ارائه بسط رسمی برآورد گروه‌های کمترین مربعه - و خلاصه مقادیر

رگرسیون در صورت ماتریسی $X^T X$ و $(X^T X)^{-1}$ وجود دارد، کاربرد این ماتریس‌ها به منظور محاسبه برآوردها توصیه نمی‌شود. روش محاسبه مناسبتری در بخش (۱-۲-۲) معرفی شده است. سرانجام، فرصتهایی که ما را به استفاده از کمترین مربعات، راهنمایی می‌کنند، باید در هنگام کاربرد الگوی رگرسیونی امتحان شوند. بحث بیشتر در فرضها و محدودیت آنها در بخش (۱-۳) آمده است.

۱-۲-۲. هندسه کمترین مربعات خطی

الگوی (۱-۲) و فرضیات (۱-۳) و (۱-۴) راهنمایی است برای کاربرد برآورد حداقل مربعات (۱-۸). برای کمینه کردن مجموع مربعات باقی مانده‌ها بر اساس (۱-۷)، می‌توان $S(\beta)$ را به عنوان مربع فاصله بردار داده‌ها y از بردار پاسخ مورد نظر $X\beta$ در نظر گرفت. این کار موضوع رگرسیون خطی را به هندسه اقلیدسی و جبر خطی ربط می‌دهد. فرض نرمال بودن خطا که در شرایط (۱-۳) و (۱-۴) صدق می‌کند، نشان می‌دهد که مقیاس اندازه‌گیری فاصله بین y و $X\beta$ همان فاصله اقلیدسی بین بردارها است. با این دیدگاه فضای پاسخ اقلیدسی N بعدی به صورت آماری قابل درک است. این اتصال بین هندسه و آمار، با نمایش توزیع نرمال فرضهای (۱-۳) و (۱-۴) به شکل نرمال کروی بیشتر است. زیرا منحنی‌های تراز احتمالهای ثابت، به شکل کره هستند.

توجه شود، هنگامی که از شکل خطی تابع انتظار $X\beta$ سخن می‌گوییم، آن را تابعی از پارامتر β در نظر می‌گیریم. وقتی که برآوردهای پارامتر را محاسبه می‌کنیم، فقط چگونگی وابستگی پاسخ به پارامترها را در نظر داریم، نه چگونگی وابستگی به متغیرها را. در مثال PCB ، پاسخ را بر $vage^3$ با کاربرد کمترین مربعات خطی برازش دادیم، زیرا پارامتر β به صورت خطی وارد الگو شده است.

۱-۲-۱. رویه انتظار

فرایند محاسبه $S(\beta)$ شامل دوگام است:

۱- به کارگیری پارامتر P بعدی بردار β و ماتریس $(N \times P)$ مشاهدات X به منظور به دست آوردن بردار پاسخ مورد انتظار N بعدی $\eta(\beta) = X\beta$.

۲- محاسبه مربع فاصله $\eta(\beta)$ از پاسخ‌های مشاهده‌ای y ، یعنی، $\|y - \eta(\beta)\|^2$

بردارهای پاسخ مورد انتظار $\eta(\beta)$ یک رویه انتظار P بعدی در فضای N بعدی پاسخ ایجاد می‌کند. این رویه یک زیرفضای خطی از فضای پاسخ است. هنگام کار با الگوی خطی، آن را «صفحه انتظار» می‌نامیم.

مثال ۳: PCB

برای بررسی هندسه رویه انتظار، فقط سه داده $\ln(PCB)$ را در مقابل $\sqrt{\text{age}}$ در نظر می‌گیریم.

$\sqrt{\text{age}}$	۱/۲۶	۱/۸۲	۲/۲۲
$\ln(PCB)$	۰/۹۲	۲/۱۵	۲/۵۲

در این صورت ماتریس X عبارت است از:

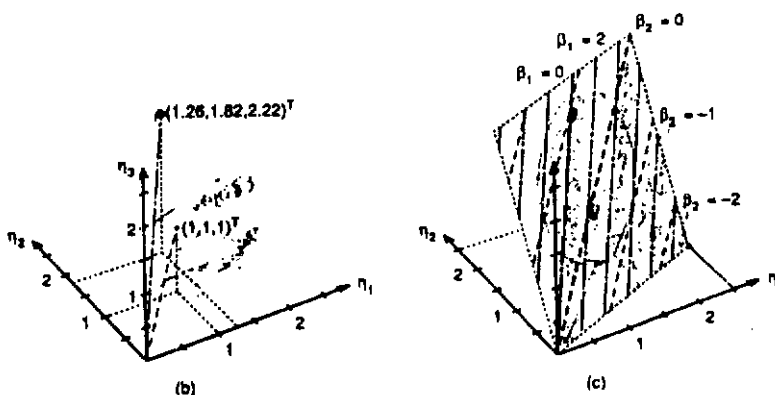
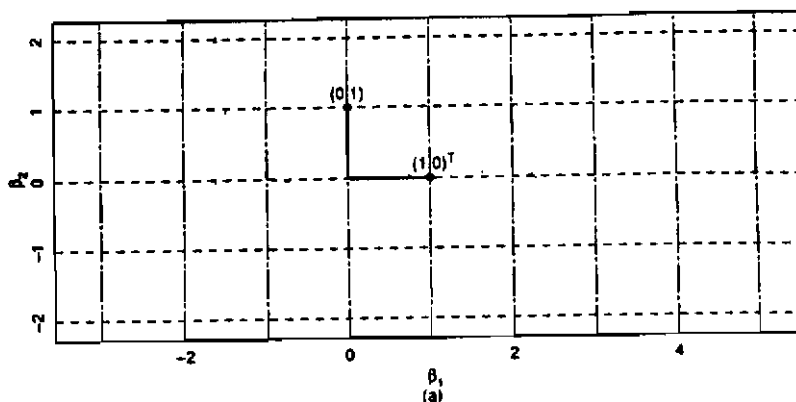
$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1/26 \\ 1 & 1/82 \\ 1 & 2/22 \end{bmatrix}$$

ماتریس بالا دارای دو بردار ستونی $x_1 = (1, 1, 1)^T$ و $x_2 = (1/26, 1/82, 2/22)^T$ است. این دو بردار در فضای سه بعدی پاسخ، در شکل ۱-۴b و نسبت به نقاط $\beta = (1, 0)^T$ و $\beta = (0, 1)^T$ در صفحه پارامتر، در نمودار ۱-۴a، نشان داده شده است. تابع انتظار $\eta(\beta) = X\beta$ ، یک صفحه دو بعدی انتظار را در فضای سه بعدی پاسخ بنا می‌کند. این موضوع در نمودار (۱-۴c) جایی که خط‌های پارامتر نسبت به خط‌های ۵، ...، ۳- β_1 و ۲، ...، ۲- β_2 نشان داده شده، ارائه گردیده است (۱-۴a). یک خط پارامتر با پارامتری تشکیل شده است و به گونه‌ای تغییر می‌کند که خط‌ها متناظر با ۵، ...، ۳- β_2 است (خط‌های نقطه - تیره) و خط‌های β_2 نامیده می‌شوند.

توجه شود که خط‌های پارامتر در صفحه پارامتر، مستقیم، موازی و هم فضا هستند. و تصویر آنها در صفحه انتظار نیز خط‌هایی راست، موازی و هم فضا است. به علت کوتاهتر بودن بردار x_1 از x_2 ($\|x_2\| = \sqrt{9/83}$ ، $\|x_1\| = \sqrt{3}$)، فاصله بین خط‌هایی با β_1 ثابت در صفحه انتظار از فاصله میان خط‌هایی با β_2 ثابت، کمتر است. علاوه بر این بردارهای x_1 و x_2 بر هم عمود نیستند و زاویه بین آنها به شکل زیر به دست می‌آید.

$$\begin{aligned} \cos \omega &= \frac{x_1^T x_2}{\|x_1\| \|x_2\|} \\ &= \frac{5/30}{\sqrt{(3)(9/83)}} = 0/98 \end{aligned}$$

بنابراین، خطهای پارامتر در صفحه انتظار بر هم عمود نیستند، چون در صفحه پارامتر قرار دارند.



نمودار ۱-۴. زویه انتظار برای مثال سه حالتی PCB. قسمت a نشان دهنده صفحه پارامتر با خطهای پارامتر (خط - فاصله) و خطهای پارامتر β_2 (خط - نقطه) قسمت b. نشان دهنده بردار x_1 (خط - فاصله) و x_2 (خط نقطه - فاصله)، در فضای پارامتر است. نقاط انتهایی بردارهای به ترتیب متناظر با $\beta = (1, 0)^T$ و $\beta = (0, 1)^T$ است. قسمت c نشان دهنده بخشی از صفحه انتظار (سایه دار) در فضای پاسخ با خطهای پارامتر β_1 (خط - فاصله) و خطهای پارامتر β_2 (خط نقطه - فاصله) است.

به عنوان نتیجه‌ای از عدم تساوی طول و عمود بودن بردارها، مربع واحد در صفحه پارامتر به صورت متوازی الاضلاعی در صفحه انتظار تصویر می‌شود. مساحت متوازی الاضلاع عبارت است از:

$$\begin{aligned}
 \|x_1\| \|x_2\| \sin \omega &= \|x_1\| \|x_2\| \sqrt{1 - \cos^2 \omega} \\
 &= \sqrt{(x_1^T x_1)(x_2^T x_2) - (x_1^T x_2)^2} \\
 &= \sqrt{|X^T X|}
 \end{aligned} \quad (17-1)$$

بنابراین، دترمینان ژاکوبی تبدیل از صفحه پارامتر به صفحه انتظار، برابر مقدار ثابت $|X^T X|^{1/2}$ است. برعکس، نسبت مساحت در صفحه پارامتر به مساحت واقع در صفحه انتظار، برابر $|X^T X|^{-1/2}$ است. تصویر خطی ساده‌ای که در مسأله بالا بیان شده، برای همه الگوهای رگرسیونی صادق است. یعنی برای الگوهای خطی، خطهای راست موازی و هم فضای موجود در فضای پارامتر، به صورت خطی راست موازی و هم فضا، روی صفحه انتظار و در فضای پاسخ تصویر می‌شوند. در نتیجه مستطیل‌های واقع در یک صفحه، به صورت متوازی السطوح در صفحه دیگر و دایره‌ها یا کره‌ها یک صفحه، به شکل بیضی یا بیضی گون در صفحه دیگر تصویر می‌شود. افزون بر اینها، دترمینان ژاکوبی $|X^T X|^{1/2}$ برای الگوهای خطی مقدار ثابتی است. بنابراین نواحی با اندازه‌های ثابت از یک صفحه، به نواحی با اندازه‌های ثابت در صفحه دیگر تصویر می‌شود. در مورد این خصوصیت که کمترین مربعات خطی را ساده‌تر می‌کند. در بخش (۱-۲-۳) بحث خواهد شد.

۱-۲-۲- محاسبه برآوردهای کمترین مربعات

نمایش هندسی کمترین مربعات خطی اجازه می‌دهد که محاسبه برآوردهای پارامتر $\hat{\beta}$ را به شکل ساده‌ای پیکربندی کنیم. چون رویه انتظار خطی است، کافی است، نزدیکترین نقاط رویه به نقطه y را که این نقطه را روی صفحه انتظار تصویر می‌کند، حساب کنیم. این کار $\hat{\eta}$ را ارائه می‌دهد، سپس $\hat{\beta}$ که مقدار β متناظر با $\hat{\eta}$ است، محاسبه می‌شود.

یک دیدگاه برای بیان این تصویر، این است که بعد از تصویر، بردار باقی‌مانده $y - \hat{\eta}$ متعامد یا عمود بر صفحه انتظار خواهد بود. همچنین، بردار باقی‌مانده باید نسبت به همه ستونهای ماتریس X متعامد باشد، در نتیجه داریم.

$$X^T(y - X\hat{\beta}) = 0$$

حال می‌توان ادعا کرد که برآورد کمترین مربعات $\hat{\beta}$ در شرایط معادلات نرمال صادق است.

$$X^T X \hat{\beta} = X^T y \quad (18-1)$$

بنابر (۱۸-۱) برآورد کمترین مربعات به طور معمول به صورت $\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y$ نوشته می‌شود، هر چند روش دیگری برای بسط این برآورد وجود دارد. تثبیت شده‌ترین راه محاسبه آن، شامل

تجزیه X به حاصل ضرب یک ماتریس متعامد و ماتریسی است که به سادگی وارون پذیر باشد. دو نوع از این تجزیه‌ها، عبارت‌اند از: تجزیه QR و تجزیه مقدار ویژه (دونگارا و دیگران ۱۹۷۹، فصل‌های ۱۱، ۹). تجزیه QR را به صورت $X = QR$ به کار می‌بریم. در این جا، Q ماتریس $N \times N$ و R ماتریس $N \times P$ بوده و به گونه‌ای ساخته می‌شوند که Q متعامد (یعنی: $QQ^T = QQ^T = I$) و R بالا مثلثی $P \times P$ به شکل زیر باشد:

$$R = \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

در این جا، R_1 ماتریس بالا مثلثی $P \times P$ و $Q = [Q_1 | Q_2]$ است، به طوری که، Q_1 شامل اولین P ستون و Q_2 شامل $N-P$ ستون باقی مانده Q است، داریم:

$$X = QR = Q_1 R_1 \quad (۱۹-۱)$$

همان گونه که در پیوست شماره دو نشان داده شده است، تشکیل تجزیه‌ای از QR ساده است. از دیدگاه هندسی، ستونهای Q یک پایه متعامدیکه یا متعامد برای فضای پاسخ است، به طوری که ستونهای اولیه P صفحه انتظار را تولید می‌کنند. تصویر کردن بر صفحه انتظار، در صورت کار کردن، دستگاه مختصات Q ، بسیار ساده است. برای مثال بردار پاسخ را به شکل زیر تبدیل می‌کند:

$$w = Q^T y \quad (۲۰-۱)$$

با مؤلفه‌های

$$w_1 = Q_1^T y \quad (۲۱-۱)$$

و:

$$w_2 = Q_2^T y \quad (۲۲-۱)$$

تصویر w روی صفحه انتظار به شکل ساده

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

در مختصات Q است و در مختصات مرجع به صورت زیر است:

$$\hat{\eta} = Q \begin{bmatrix} w_1 \\ 0 \end{bmatrix} = Q_1 w_1 \quad (۲۳-۱)$$

مثال ۴: PCB

همان گونه که در پیوست دو نشان داده شده است، تجزیه QR (۱۹-۱)، برای ماتریس

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1/26 \\ 1 & 1/82 \\ 1 & 2/22 \end{bmatrix}$$

در مثال سه موردی PCB، عبارت است از:

$$\begin{bmatrix} 0/5774 & -0/7409 & 0/3432 \\ 0/5774 & 0/0732 & -0/8132 \\ 0/5774 & 0/6677 & 0/4700 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/7321 & 3/0600 \\ 0 & 0/6820 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

در نتیجه داریم: (رابطه ۱-۲۰)

$$w = \begin{bmatrix} 3/23 \\ 1/16 \\ -0/24 \end{bmatrix}$$

در نمودار ۱-۵۵، صفحه انتظار و بردار مشاهدات را در دستگاه مختصات مرجع نشان داده‌ایم. همچنین بردارهای q_1 ، q_2 ، q_3 که ستونهای Q هستند را نیز نمایش داده‌ایم. دیده می‌شود که q_1 ، q_2 ، q_3 در صفحه انتظار قرار دارند و q_3 بر آن عمود است. در نمودار ۱-۵۵، نشان داده‌ایم که در دستگاه مختصات تبدیل یافته، بردار مشاهدات و صفحه انتظار به صورت افقی درمی‌آیند. متوجه باشید که تصویر w بر روی صفحه انتظار ساده است. چون آخرین درایه w را با صفر جانشین می‌کند. برای محاسبه برآورد کمترین مربعات باید مقدار $\hat{\beta}$ متناظر با $\hat{\eta}$ را بیابیم. داشتیم:

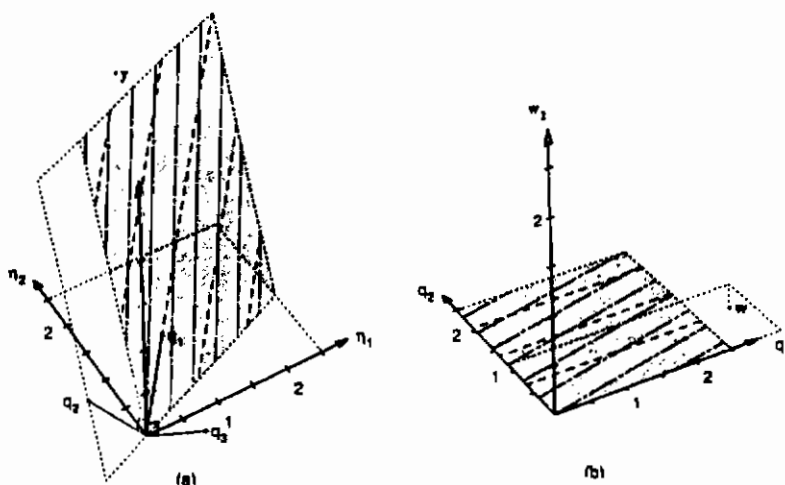
$$\hat{\eta} = X\hat{\beta}$$

باید به کارگیری (۱-۲۳) و (۱-۱۹) داریم:

$$R_1 \hat{\beta} = w_1$$

(۱-۲۴)

این مهم با جایگذاری پسر برای $\hat{\beta}$ قابل حل است (استوارت، ۱۹۷۳).



نمودار ۵-۱- رویه انتظار برای مثال PCB سه حالتی. قسمت a نشان دهنده بخشی از صفحه انتظار در فضای پاسخ باخظهای پارامتر β_1 (خط - فاصله) و β_2 (خط - فاصله - نقطه) به همراه بردار پاسخ y است. همچنین بردارهای یک متعامد q_1, q_2 در صفحه انتظار و q_3 عمود بر صفحه نشان داده شده است. قسمت نشان دهنده بردار پاسخ w و بخشی از صفحه انتظار (سایه دار) در مختصات دوران یافته توسط Q است.

مثال ۵: PCB

برای مجموعه کامل داده‌های $\ln(PCB)$ و \sqrt{age} داریم:

$$R_1 = \begin{bmatrix} 5/29150 & 8/87105 \\ 0 & 2/16134 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\beta} = (-2/391, 2/300)^T \text{ و } w_1 = (7/7570, 4/9721)^T \text{ در نتیجه:}$$

۱-۲-۳- نواحی استنباط پارامتر

همان گونه که برآورد کمترین مربعه تفسیرهای هندسی آگاهی بخشی را داراست؛ همچنین شامل نواحی استنباط (۹-۱)، (۱۰-۱)، (۱۴-۱) و آنهایی که از (۱۶-۱) به دست می آیند نیز هست. بنابراین چنین تفسیرهایی برای درک رگرسیون خطی مفید بوده و اساس درک رگرسیون غیر خطی نیز هستند (چون در شیوه بیزی تفسیرهای هندسی کاربرد کمتری دارند، بنابراین فقط در مورد نظریه نمونه گیری و درست نمایی بحث خواهیم کرد).

اساسی ترین تفاوت موجود بین روش درست نمایی و تفسیر هندسی نظریه نمونه گیری، این است

که، روش درست نمایی متمرکز در نقطه λ بوده و طول بردار باقی مانده در $\eta(\beta)$ با کواترهاترین بردار باقی مانده مقایسه می‌شود. در صورتی که، نظریه نمونه‌گیری متمرکز در مقادیر ممکن $\eta(\beta)$ و زاویه‌ای است که بردار باقی مانده‌ها می‌تواند با صفحه انتظار بسازد.

۱-۳-۲-۱- هندسه نتایج نظریه نمونه‌گیری

برای توسعه مبنای هندسی نتایج رگرسیون خطی حاصل از نظریه نمونه‌گیری، از تبدیل به دستگاه مختصات Q استفاده می‌کنیم. الگوی مربوط به متغیر تصادفی $W=Q^T Y$ ، عبارت است از:

$$W=R\beta+Q^T Z$$

$$U=W-R\beta$$

$$(۲۵-۱)$$

به گونه‌ای که: $U=Q^T Z$.

بخش نرمال کروی Z متأثر از تبدیل متعامد نیست. زیرا U نیز دارای بخش نرمال کروی است. بنابراین، مطلب قابل توسعه به مبنای هندسی نیز هست. چون منحنی‌های تراز احتمالات کروی نیز با دوران یا انعکاس صلب تغییر نخواهد کرد (به علت خاصیت تبدیل متعامد). بنابراین می‌توان آن را به صورت تحلیلی نیز بررسی نمود، زیرا $Q^T Q=I$ و دترمینان Q مساوی ± 1 است و برای هر N بردار x داریم: $\|Qx\| = \|x\|$. حال چگالی توأم متغیر تصادفی $Z=(Z_1, \dots, Z_N)^T$ عبارت است از:

$$p_z(z) = (2\pi\sigma^2)^{-N/2} \exp\left\{\frac{-z^T z}{2\sigma^2}\right\}$$

پس از تبدیل، چگالی توأم $U=Q^T Z$ به شرح زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} p_u(u) &= (2\pi\sigma^2)^{-N/2} |Q| \exp\left\{\frac{-u^T Q^T Q u}{2\sigma^2}\right\} \\ &= (2\pi\sigma^2)^{-N/2} \exp\left\{\frac{-u^T u}{2\sigma^2}\right\} \end{aligned}$$

با توجه به (۲۵-۱) شکل R ما را به افراز کردن U به دو مؤلفه راهنمایی می‌کند.

$$U = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_r \end{bmatrix}$$

در این جا U_1 شامل اولین P درآیه U و U_r شامل $N-P$ درآیه باقی مانده است. هر یک از مؤلفه‌های بالا دارای توازیع نرمال کروی در بعد فراهم شده هستند. افزون بر این، استقلال عناصر بردار خطای مرجع Z به استقلال عناصر U نیز منتقل می‌شود. بنابراین، U_1 ، U_r نیز مستقل‌اند.

بعد v_i مولفه‌های U_i ، که به نام درجه آزادی مشهور هستند، به ترتیب $v_1 = P$ ، $v_P = N - P$ است. مجموع مربعات مختصات، یک بردار نرمال کروی v بعدی، دارای توزیع χ^2_v با v درجه آزادی است، بنابراین:

$$\|U_1\|^2 \sim \sigma^2 \chi^2_P$$

$$\|U_P\|^2 \sim \sigma^2 \chi^2_{N-P}$$

در این جا علامت « \sim » به معنی «پیروی از توزیع» است. با توجه به استقلال U_P ، U_1 داریم:

$$\frac{\|U_1\|^2/P}{\|U_P\|^2/(N-P)} \sim F(P, N-P; \alpha) \quad (26-1)$$

زیرا نسبت دو متغیر تصادفی مستقل χ^2 دارای توزیع F است.

توزیع (26-1) یک توزیع مرجعی را برای نسبت توان دوم مؤلفه‌های طولی یا به طور مشابه برای زاویه‌ای که بردار خطا با صفحه افق می‌سازد، ارائه می‌دهد. ممکن است (25-1) و (26-1) را به منظور آزمون فرض این که، β مساوی مقادیر خاصی به نام β^0 ، که توسط باقی‌مانده بردار $u^0 = Q^T y - R\beta^0$ محاسبه می‌شود، و همچنین مقایسه طول مؤلفه‌های u_1^0 و u_P^0 را براساس (26-1) به کار بندیم. زیرا یک مقدار بزرگ $\|u_1^0\|$ در مقایسه با $\|u_P^0\|$ بیان می‌کند که، احتمال تولید شدن y توسط الگوی (26-1) با $\beta = \beta^0$ زیاد نیست. بنابراین u^0 دارای یک مؤلفه بزرگ در صفحه Q_1 نیست، و باید توجه نمود که:

$$\frac{\|u_1^0\|^2}{N-P} = \frac{S(\hat{\beta})}{N-P} = s^2 \quad (27-1)$$

$$\|u_1^0\|^2 = \|R_1 \beta^0 - w_1\|^2 \quad \text{و:}$$

بنابراین، نسبت (26-1) به صورت زیر در می‌آید:

$$\frac{\|R_1 \beta^0 - w_1\|^2}{P s^2} \quad (28-1)$$

مثال ۶: PCB

تفکیک باقی‌مانده u را برای آزمون فرض صفر $(\beta = (-2/0, 2/0)^T)$ در مقابل فرض

$H_A: \beta \neq (-2/0, 2/0)^T$ ، برای کلیه داده‌های PCB نمودار (۶-۱)، در نظر می‌گیریم. با این وجود که در مثال مزبور، w بردار دوران یافته داده‌ها و همچنین رویه انتظار در فضای ۲۸ بعدی است، می‌توان فاصله‌های حاصل را به صورت فضای سه بعدی تولید شده توسط رویه انتظار (بردارهای q_1, q_2) و بردار باقی مانده، مجسم نمود. اگر نقطه $\beta^0 = (-2/0, 2/0)^T$ مناسب باشد. آن گاه طولهای مقیاس شده مؤلفه‌های u_1, u_2 قابل محاسبه‌اند.

صورت کسر رابطه (۱-۲۸)، به این شرح است:

$$\left\| \begin{bmatrix} 5/29150 & 8/87105 \\ 2/16134 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -2/0 \\ 2/0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 7/7570 \\ 4/9721 \end{bmatrix} \right\|^2 = 0/882$$

در نتیجه، نسبت بالا برابر است با: $1/79 = 0/882 / (2 \times 0/246)$ ، که در ناحیه قبول پخش F با ۲ و ۲۶ درجه آزادی ($F = 0/19$) قرار می‌گیرد. بنابراین، احتمال به دست آوردن نسبتی به بزرگی $1/79$ ، برابر ۱۹٪ بوده که سبب قبول فرض صفر می‌شود.

یک ناحیه اطمینان مشترک $1-\alpha$ ، برای پارامتر β ، شامل همه مقادیری است که فرض آزمون شده در سطح α رد نمی‌شود. بنابراین، مقدار β^0 در داخل ناحیه اطمینان $1-\alpha$ قرار می‌گیرد، به شرطی که رابطه زیر برقرار باشد:

$$\frac{\|u_1^0\|^2 / P}{\|u_2^0\|^2 / (N-P)} \leq F(P, N-P, \alpha)$$

چون s^2 به β^0 بستگی ندارد، نقاط داخل ناحیه اطمینان، قرصی را در صفحه انتظار که توسط رابطه زیر تعریف می‌شود، تشکیل می‌دهند.

$$\|u_1\|^2 \leq P s^2 F(P, N-P, \alpha)$$

به سخن دیگر، با توجه به رابطه‌های (۱-۲۴) و (۱-۲۷)، داریم:

$$\|u_1\|^2 = \|R_1(\beta - \hat{\beta})\|^2$$

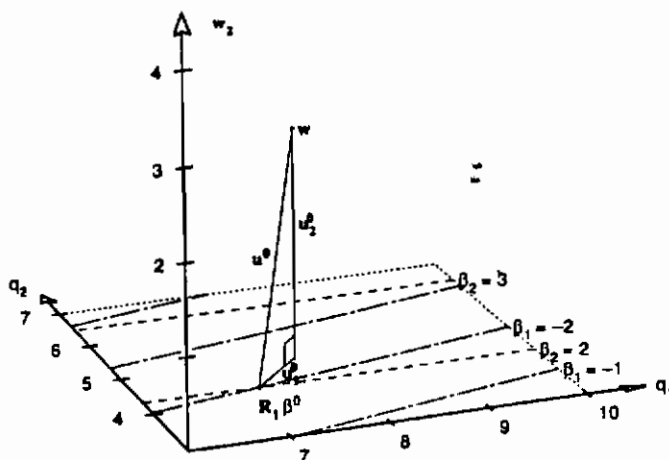
بنابراین، نقطه‌ای واقع در محدوده ناحیه اطمینان در فضای پارامتر در شرط زیر صدق می‌کند:

$$R_1(\beta - \hat{\beta}) = \sqrt{P s^2 F(P, N-P, \alpha)} \mathbf{d}$$

به طوری که $\|\mathbf{d}\| = 1$ و ناحیه اطمینان به شرح زیر است:

$$|\beta = \hat{\beta} + \sqrt{P_s^2 F(P; N - P; \alpha)} R_1^{-1} d \mid |d| = 1) \quad (29-1)$$

بنابراین، ناحیه مقادیر مناسب پارامتر قرصی به مرکز $R_1 \hat{\beta}$ در صفحه انتظار و یک بیضوی به مرکز $\hat{\beta}$ در فضای پارامتر است.



نمودار ۱-۹ تفسیری هندسی از آزمون $H_0: \beta(-2/0, 2/0)^T$ برای مجموعه کامل داده‌های PCB. دیده می‌شود که تصاویر بردار انتظار W و قسمتی از صفحه انتظار در فضای سه بعدی که توسط بردارهای مماس q_1 و q_2 و مؤلفه متعامد بردار پاسخ W_p ایجاد شده تصویر شده است. برای آزمون نقطه β^0 بردار باقی مانده U^0 به دو مؤلفه‌های مماسی U_1^0 و عمودی U_p^0 تجزیه شده است.

مثال ۷: PCB

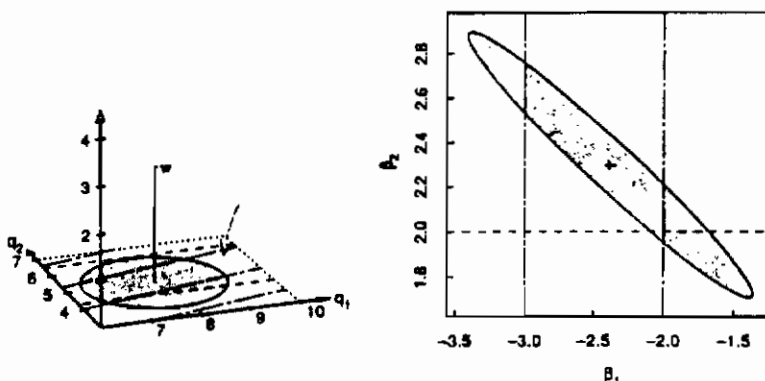
برای داده‌های $\ln(PCB)$ در مقابل $\sqrt{\text{age}}$ ، داریم: $\hat{\beta} = (-2/391, 2/30)^T$ ، $s^2 = 0/246$ و ۲۶ درجه آزادی. بنابراین قرص اطمینان ۹۵٪ در روی رویه تبدیل شده انتظار، عبارت است از:

$$R_1 \beta = \begin{bmatrix} 7/7570 \\ 4/9721 \end{bmatrix} + 1/288 \begin{bmatrix} \cos \omega \\ \sin \omega \end{bmatrix}$$

به گونه‌ای که، $0 \leq \omega \leq 2\pi$. قرص در شکل ۱-۷ در صفحه انتظار و بیضوی متناظرش، یعنی:

$$\beta = \begin{bmatrix} -2/391 \\ 2/30 \end{bmatrix} + 1/288 \begin{bmatrix} 0/18898 & -0/77566 \\ 0/46268 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \omega \\ \sin \omega \end{bmatrix}$$

در صفحه پارامتر و در نمودار ۱-۷۷ نشان داده شده‌اند.



نمودار ۱-۷۷- قرص ناحیه اطمینان ۹۵٪ و ناحیه اطمینان پارامتر برای داده‌های PCB قسمت a نشان دهنده بردار انتظار W و یک قسمت از تصویر صفحه انتظار در فضای سه بعدی تولید شد، توسط بردارهای مماس q_1 و q_2 و مؤلفه متعامد بردار پاسخ W_p است. قرص ناحیه اطمینان ۹۵٪ (سایه‌دار) در صفحه انتظار (قسمت a)، به صورت ناحیه اطمینان بیضوی (سایه‌دار) در صفحه پارامتر (قسمت b) تصویر شده است.

۱-۲-۳-۲- فاصله‌های اطمینان حاشیه‌ای

به منظور ایجاد یک فاصله اطمینان حاشیه‌ای برای تک پارامتری مانند β_1 ، باید آزمونی به شکل $\beta_1 = \beta_1^0 : H_0$ در مقابل $\beta_1 \neq \beta_1^0 : H_A$ بنا نمود. به طوری که اگر هر β_1^0 در فاصله اطمینان $1-\alpha$ قرار بگیرد. آن گاه فرض H_0 در سطح α رد نشود. برای ایجاد شرایط آزمون فرض، هر بردار پارامتر را با $\beta_1 = \beta_1^0$ و به نام $(\beta_1^0, \dots, \sigma^T)^T$ انتخاب و سپس بردار باقی مانده انتقال یافته u را محاسبه و آن را به سه مؤلفه تجزیه می‌کنیم. اولین مؤلفه، u_1 با بعد $P-1$ و موازی با ابر صفحه تعریف شده توسط $\beta_1 = \beta_1^0$ است. دومین مؤلفه، u_2 با بعد یک و واقع در صفحه انتظار، عمود بر ابر صفحه β_1^0 است. سرانجام سومین مؤلفه، u_3 به طول $(N-P)S^2$ و عمود بر صفحه انتظار است. مؤلفه u_2 برای هر پارامتر β ثابت و برابر $\beta_1 = \beta_1^0$ است: اگر فرض کنیم $\beta_1 = \beta_1^0$ ، آن گاه نسبت‌های تنظیم شده، متناظر با متغیرهای تصادفی U_1, U_2, U_3 دارای پخش F ، مطابق زیراند.

$$\frac{U_1^2/\lambda}{\|U_2\|^2/(N-P)} \sim F(\lambda, N-P)$$

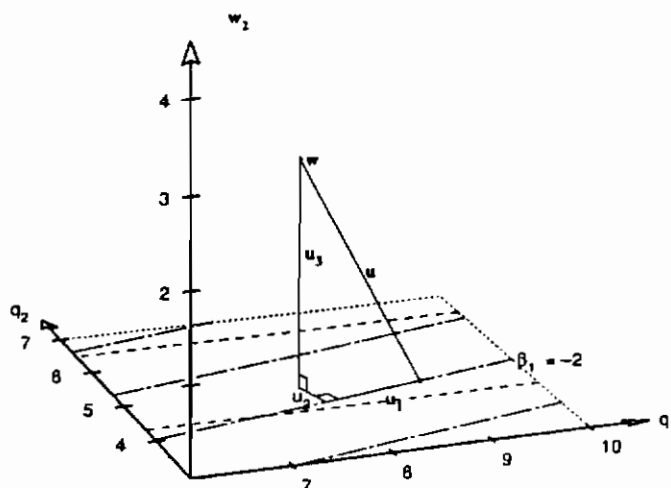
$$(u_2^0)^2 > s^2 F(\lambda, N-P; \alpha)$$

بنابراین، H_0 را در سطح α رد می‌کنیم، اگر:

مثال ۸: PCB

برای آزمون فرض صفر، $H_0: \beta_1 = -2/0$ در مقابل $H_A: \beta_1 \neq -2/0$ برای داده‌های کامل PCB بردار باقی‌مانده تبدیل یافته را در $\beta^0 = (-2, 2/2)^T$ به سه مؤلفه مطابق نمودار (۸-۱) تجزیه کرده و نسبت زیر را محاسبه می‌کنیم. مقدار احتمال متناظر حاصل از جدول F برابر ۰/۳۳ است و در نتیجه فرض صفر رد نمی‌شود.

$$\frac{(u_1^*)^2}{s^2} = \frac{0/240}{0/246} = 0/97$$



نمودار ۸-۱ تفسیری هندسی از آزمون $H_0: \beta_1 = -2/0$ برای داده‌های کامل PCB. در نمودار می‌توان بردار انتظار w و قسمتی از تصویر صفحه انتظار را که در فضای سه بعدی تولید شده توسط بردارهای مماس q_1 و q_2 و مؤلفه عمودی بردار انتظار w_3 به وجود آمده، مشاهده نمود. برای نمایش یک نقطه واقع بر خط $\beta_1 = -2$ بردار باقی‌مانده u به سه مؤلفه مماس به مشخصات u_1^* در امتداد خط عمود u_3^* بر خط و مؤلفه متعامد u_3^* تجزیه شده است.

می‌توان فاصله اطمینان حاشیه‌ای $1-\alpha$ را برای β_1 به گونه‌ای ایجاد کرد که شامل همه مقادیر صادق در رابطه زیر باشد.

$$(u_1^*)^2 \leq s^2 F(1, N-P; \alpha)$$

یا به طور هم ارز:

$$|u_1^*| \leq s t(N-P; \alpha/2)$$

(۳۰-۱)

چون $|u_1^*|$ فاصله نقطه $R_1 \hat{\beta}$ تا خط متناظر با $\beta_1 = \beta_1^*$ در روی صفحه تبدیل یافته است، بنابراین

فاصله اطمینان شامل همه شامل همه مقادیر β_1 در حالتی که خط پارامتر متناظر، قرص را قطع کند نیز هست. در این حالت داریم:

$$\{\mathbf{R}_1 \hat{\boldsymbol{\beta}} + s \, t(N-P; \alpha/2) \mathbf{d} \mid \|\mathbf{d}\| = 1\} \quad (31-1)$$

به جای محاسبه مقدار $|\mathbf{u}_2|$ برای هر β_1 ، قرص (31-1) را انتخاب کرده و مقادیر کمینه و بیشینه β_1 را به ازاء نقاط فرض محاسبه می‌کنیم. اگر \mathbf{r}^1 را سطر اول \mathbf{R}^{-1} بگیریم، مقادیر β_1 متناظر با نقاط قرص واقع بر صفحه انتظار به شرح زیراند.

$$\mathbf{r}^1 (\mathbf{R}_1 \hat{\boldsymbol{\beta}} + s \, t(N-P; \alpha/2) \mathbf{d}) = \hat{\beta}_1 + s \, t(N-P; \alpha/2) \mathbf{r}^1 \mathbf{d}$$

کمینه و بیشینه حاصل از بردار در جهت \mathbf{r}^1 عبارت‌اند از: $\|\mathbf{r}^1\| \mathbf{d} = \pm \mathbf{r}^{1T} / \|\mathbf{r}^1\|$ که فاصله اطمینان زیر را ارائه می‌کند.

$$\hat{\beta}_1 \pm s \, \|\mathbf{r}^1\| \, t(N-P; \alpha/2)$$

در حالت کلی، یک فاصله اطمینان حاشیه‌ای برای پارامتر β_p عبارت است از:

$$\hat{\beta}_p \pm s \, \|\mathbf{r}^p\| \, t(N-P; \alpha/2) \quad (32-1)$$

به گونه‌ای که \mathbf{r}^p سطر p ام \mathbf{R}^{-1} است. مقدار تعریف شده زیر به نام خطای استاندارد پارامتر p ام معروف است.

$$se(\hat{\beta}_p) = s \, \|\mathbf{r}^p\| \quad (33-1)$$

چون:

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = (\mathbf{R}_1^T \mathbf{R}_1)^{-1} = \mathbf{R}_1^{-1} \mathbf{R}_1^{-T}$$

و $\|\mathbf{r}^p\|^2 = \{(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}\}_{pp}$. بنابراین خطای استاندارد را می‌توان مطابق (33-1) نوشت.

خلاصه‌ای مناسب از تغییرپذیری پارامترهای برآورد شده با بسط زیر امکان‌پذیر است:

$$\mathbf{R}_1^{-1} = \text{diag}(\|\mathbf{r}^1\|, \|\mathbf{r}^2\|, \dots, \|\mathbf{r}^p\|) \mathbf{L} \quad (34-1)$$

که طول سطرهای \mathbf{L} برابر واحد است. ماتریس قطری خطای استاندارد و ماتریس همبستگی زیر، مقدار همبستگی‌های میان برآوردهای پارامتر را فراهم می‌کنند.

$$\mathbf{C} = \mathbf{L} \mathbf{L}^T \quad (35-1)$$

مثال ۹: PCB

برای $\ln(PCB)$ داریم: $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (-2/391, 2/300)^T$ و $s^2 = 0/246$ با ۲۶ درجه آزادی و

$$R_1^{-1} = \begin{bmatrix} 5/29150 & 8/8105 \\ 0 & 2/16134 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 0/18898 & -0/77566 \\ 0 & 0/46268 \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} 0/798 & 0 \\ 0 & 0/463 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0/237 & -0/972 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

که خطای استاندارد برابر $0/396 = 0/246 \sqrt{0/798} = 0/230$ و β_1 را برای $0/463 \sqrt{0/246} = 0/396$ را برای β_2 می‌دهد.

همچنین: $C = \begin{bmatrix} 1 & -0/972 \\ -0/972 & 1 \end{bmatrix}$. بنابراین همبستگی بین β_1 و β_2 برابر $-0/97$ است. فاصله اطمینان ۹۵٪ برای پارامترها عبارتند از: $(0/396) \pm 2/391$ و $(0/230) \pm 2/300$ ، که در نمودار ۱-۳۳ ترسیم شده‌اند.

فاصله اطمینان حاشیه‌ای برای پاسخ مورد انتظار در نقطه طرح x_0 را می‌توان با در نظر گرفتن محل تقاطع ابرصفحه‌ای که توسط ثابت $x_0^T \beta$ شکل می‌گیرد با قرصی مطابق رابطه (۳۱-۱) به وجود آورد. توسط بحثی مشابه به دست آوردن رابطه (۳۲-۱)، خطای استاندارد برای پاسخ مورد انتظار در x_0 بصورت $\|x_0^T R_1^{-1}\| s$ است. بنابراین فاصله اطمینان، عبارت است از:

$$x_0^T \hat{\beta} \pm s \|x_0^T R_1^{-1}\| \quad t(N-P; \alpha/2) \quad (36-1)$$

همچنین نوار اطمینان برای تابع پاسخ، عبارت است از:

$$x^T \hat{\beta} \pm s \|x^T R_1^{-1}\| \sqrt{PF(P, N-P; \alpha)} \quad (37-1)$$

مثال ۱۰: PCB

رسم تابع انتظار برازشی با نوار اطمینان ۹۵٪ برای مثال PCB در نمودار ۱-۳۳، نشان داده شده است.

آنسلی (۱۹۸۵) مشتقات دیگر نظریه نمونه‌گیری در رگرسیون خطی را با کاربرد تجزیه QR ارائه داده است و همان‌طور که دیدیم بسیار به روش هندسی نزدیک است.

۳-۳-۲-۱- هندسه فضاچه حداقل در دست نمایی

تابع درست نمایی شامل مقادیر قابل قبول (احتمالی) η نسبت به y است. بنابراین تفسیر هندسی آن ساده است. اگر η هر مقدار فضای N بعدی پاسخ را قبول کند، آن گاه خمهای درست نمایی (احتمالی) به صورت کره‌ای به مرکز y هستند. مقادیری از η به شکل: $\eta = X\beta$ صفحه P بعدی انتظار را تولید می‌کنند. بنابراین، مقطع این صفحه با کره درست نمایی قرص هائی ایجاد می‌کنند. به طور تحلیلی، تابع درست نمایی (۶-۱) مطابق زیر به η بستگی دارد.

$$\begin{aligned} \| \eta - y \|^2 &= \| Q^T(\eta - y) \|^2 \\ &= \| Q_1^T(\eta - y) \|^2 + \| Q_2^T(\eta - y) \|^2 \\ &= \| w(\beta) - w_1 \|^2 + \| w_2 \|^2 \end{aligned} \quad (38-1)$$

به طوری که، $w(\beta) = Q_1^T \eta$ و $Q_2^T \eta = 0$. یک مقدار ثابت مجموع مربعات کل، قرصی به شکل زیر را در صفحه انتظار مشخص می‌کند.

$$\| w(\beta) - w_1 \|^2 = c$$

با انتخاب

$$c = P s^2 F(P, N-P; \alpha)$$

قرصی متناظر با ناحیه اطمینان $1-\alpha$ تولید می‌شود. بنابر مجموع مربعات کل خم‌ها به صورت زیراند:

$$S(\beta) = S(\hat{\beta}) \left\{ 1 + \frac{P}{N-P} F(P, N-P; \alpha) \right\} \quad (39-1)$$

و همان طوری که گفته شده و در نمودار (۷-۱) نیز ارائه شده، این فرض در فضای پارامتر به یک بیضی‌گون تبدیل می‌شود.

۳-۱- فرضیات و ارزیابی الگو

فرضیات آماری که ما را قادر به کاربرد روش کمترین مربعات می‌کنند، شامل چند جنبه متفاوت در الگوی رگرسیونی است. بنابراین اگر فرضیات آماری برای الگو و داده‌ها مناسب نباشند، نتایج تحلیلی برقرار نخواهد بود.

چون ما نمی‌توانیم از قبل تضمین کنیم که فرضیات متفاوت برقرارند یا خیر؟ بنابراین، ناچاریم به روشی تکراری اقدام نماییم. برای نمونه، به باکس هاتروها نتر (۱۹۷۸) می‌توان رجوع کرد. ابتدا

الگویی احتمالی قابل قبول را برای داده‌ها بنا نموده، سپس توسط آن داده‌ها را تجزیه و تحلیل می‌کنیم. معیارهای شناخت، مانند رسم باقی مانده‌ها برای فرضیات را به کار می‌بندیم. اگر شناخت منجر به رد فرضیات در مؤلفه قطعی و یا احتمالی الگو شود باید الگو یا تحلیل‌ها را پیرایش نمود و دوباره محاسبات را انجام داد.

باید دانست که طرح آزمایش و روش جمع آوری داده‌ها در احتمال برقراری فرضیات در یک آزمایش خاص مؤثراند. به ویژه تصادفی کردن می‌تواند در صحت برقراری فرضیات مؤثر واقع شود. تکرار وسیله بسیار خوبی برای بررسی برقراری فرضیات ویژه است.

۱-۳-۱- فرضیات و مفاهیم آن

فرضیات مندرج در بخش (۱-۱-۱) به شرح زیر است :

(۱) درست بودن تابع انتظار. اطمینان در برقراری این فرض هدف اصلی همه علوم است. ما مایل به بنا کردن الگویی هستیم که پدیده‌های طبیعی را پیش‌بینی کند. حلقه تکراری که اغلب در تابع انتظار گرفتار آن هستیم، جزو خواص ریاضی آن است. اقدام ما به گونه‌ای است که تابع انتظار را درست در نظر می‌گیریم. ولی باید برای پیرایش آن بنابر خواسته داده‌ها و تحلیل‌ها، اقدام نمود. تقریباً در همه الگوهای رگرسیون خطی و برخی از الگوهای غیر خطی، از درست بودن الگو آگاه نیستیم. ولی محتمل‌ترین آنها را توسط امتحان شرایط موجود، یعنی: بررسی چشمی داده‌های ترسیم شده، همبستگی متقابل و از این قبیل را انتخاب می‌کنیم. با پیشرفت تحلیل الگو، تابع انتظار و فرضیات مربوط به جمله خطا را پیرایش نموده، تا جواب واقعی‌تری به دست آید. الگوها، فقط به عنوان یک الگو مورد نظراند و باید دانست که برخی از آنها مناسبتر یا جامعتر از بقیه‌اند. چون فرض (۱) در نوع خود قوی است. بنابراین، دلالت بر وجود شرکت همه متغیرهای مستقل، به شکل مطلوب در تابع انتظار و عدم حضور متغیرهای غیر مهم را در آن دارد. روش مفیدی در بازرسی کفایت تابع الگو، وجود تکرار در آزمایش است. همچنین، انتخاب درست متغیرهای مستقل مهم است. افزون بر آن، باید شرایط آزمایش را به گونه‌ای تصادفی نماییم که، علیت را به دست آوریم نه فقط همبستگی را محاسبه کنیم. (باکس ۱۹۶۰).

(۲) پاسخ، مجموع تابع انتظار و خطاست. این فرض از جنبه نظری دارای اهمیت است. زیرا، به تابع چگالی متغیر تصادفی Y اجازه می‌دهد تا پاسخ‌ها به سادگی از روی تابع چگالی متغیر Z یعنی: خطاها، محاسبه می‌شوند. داریم :

$$P_y(y|\beta, \sigma^2) = P_z(y - X\beta|\sigma^2)$$

در عمل، این فرض با فرض پایا بودن واریانس بسیار مرتبط است. ممکن است حالتی در نظر گرفته شود که خطاها دارای واریانسی پایا باشند. ولی با ورود پیچیده تر به الگو، می توان دریافت که چنین نیست. زیرا در برخی از پدیده ها، با بالا رفتن سطح اختلالات (یا علائم) سطح اغتشاش نیز افزایش پیدا می کند. جمع ناپذیری خطاها را می توان پس از رسم شناخت. در هر دو حالت تأثیر عملی یکسان است. چه کمترین مربعات وزن دار به کار رود، یا تبدیلی در پاسخ بر اساس مثال *PCBI* اعمال شود.

۳) خطاها مستقل از تابع انتظاراند. این فرض، به فرض (۲) بسیار نزدیک است. چون هر دو بستگی به خاصیت جمعی الگو دارند. یکی از کاربردهای این فرض، بازرسی یا اندازه گیری دقیق متغیرهای مستقل است. همچنین، برعکس مفهوم موجود در فرض (۱)، مبتنی بر این که، همه متغیرهای مهم در الگو شرکت دارند، این فرض دلالت بر این دارد که، نبود هر متغیر مهمی در الگو، به طور اصولی به پاسخ مربوط نیست. یک روش توسعه احتمال این است که رده بندی آزمایش را تصادفی نمائیم. این کار توسط فیشر (۱۹۳۵) نیز انجام گرفته است. در این حالت، اگر یک متغیر مهم حذف شود، اثر آن ممکن است به عنوان خطا باقی بماند (ولذا، برآورد پارامتر اریب می شود). این به طور مطمئن، نه فقط در اندازه گیری مقادیر متغیر، بلکه در انتخاب متغیر مستقل نیز مؤثر است.

۴) هر خطا دارای توزیع نرمال است. فرض نرمال بودن خطا بسیار مهم است. چون شکل توزیع نمونه ای متغیر تصادفی تعریف شده برای پاسخ را دیکته می کند. در نتیجه، تابع احتمالی پارامترها را مشخص می کند. این فرض ما را به معیارهای کمترین مربع ها که از نظر ریاضی هموار و بسیار قوی است، هدایت می کند. به عنوان مثال، در یک الگوی خطی داده شده، امکان تحلیل ریاضی برای برآوردگرهای پارامترها و نشان دادن (نظریه گوس، سیر، ۱۹۷۷) این که برآورد کمترین مربعات چه از نظر انفرادی و چه از نظر ترکیب خطی - به واسطه دارا بودن کمترین متوسط مربع خطای هر برآوردگر خطی، بهترین روش است - وجود دارد. فرض نرمال می تواند با توسل به قضیه حد مرکزی صادق باشد (قضیه بیانگر این است که، اگر نتیجه هر خطایی نسبت به بقیه خطاها نافذتر نباشد، آن گاه به صورت نرمال توزیع خواهد شد). چون اغلب آزمایشات شامل تعدادی عملکرد به منظور بنا کردن و اندازه گیری نتایج است، از این رو حداقل می توان از دید تجربی فرض نمود که، خطاها به صورت نرمال توزیع شده اند. باردیگر، فرض نرمال، در صورتی که رتبه بندی آزمایشات تصادفی شده باشد، می تواند مفید و مورد استفاده قرار گیرد. فرض نرمال را می توان با بازرسی باقی مانده ها بررسی کرد.

(۵) میانگین هر خطا برابر صفر است. این فرض در آغاز ساده کننده عملیات است. چون مقدار پارامترهای مجهول را تا حد مناسبی کاهش می دهد. هر میانگین غیر صفر مشترک بین همه مشاهدات را می توان با ارائه یک جمله ثابت در تابع انتظار، پیرایش نمود. بنابراین، فرض مزبور در رگرسیون خطی دارای اهمیت زیادی نیست، هر چند در رگرسیون غیر خطی می تواند مهم باشد، زیرا در برخی از توابع انتظار غیرخطی، جمله ثابت وجود ندارد. اصلی ترین نتیجه این فرض این است که، اریبی دستگاهی در خطا - که ممکن است به علت اثر متغیری غیر مکنون ایجاد شود - وجود ندارد، زیرا دوباره مقادیر تصادفی شده را می بینیم.

(۶) واریانس خطاها مساوی است. جنبه عملی این فرض نسبت به جنبه نظری آن بسیار مهمتر است. هر چند راه حلی برای مسأله برآورد کمترین مربعات در حالت نامساوی بودن واریانس وجود دارد (دراپر و اسمیت، ۱۹۸۱) کمترین مربعات وزن دار را در نظر گرفته اند) به طوری که باید در عمل چگونگی تغییرات واریانس را توصیف کرد. این مهم ممکن است فقط به کمک فرضیات بیشتری، یا به وسیله کاربرد اطلاعات حاصل از تکرار و مشارکت آنها در تحلیل کمترین مربعاتی تعمیم یافته و یا توسط تبدیل داده ها، انجام پذیرد. در هنگام پایایی واریانس، تابع درست نمایی به طور ویژه ای ساده است. زیرا، پارامترهای می توانند مستقل از پارامتر مزاحم σ^2 برآورد شوند. پیام اساسی فرض (۶) این است که: بی اعتباری داده ها مساوی است. بنابراین معیارهای ساده کمترین مربعات قابل کاربرد است. گاهی می توان مناسب بودن این فرض را پس از برآزش به کمک ترسیم باقی مانده ها در مقابل مقادیر برازشی، بررسی کرد. در حقیقت می توان میانگین و واریانسی تکرارها را برای محاسبه یک تبدیل مناسب واریانس - پایایی به کاربرد. بخش (۱-۳-۲) را ببینید. تبدیل کردن به واریانس پایا، اغلب اثرات اضافی در هدایت رفتار خطاها به سمت نرمال دارد. این، به علت مستقل بودن واریانس پایا از میانگین (و مطالب دیگر مربوط به آن) است. این ویژگی استقلال، اساس چگالی نرمال است.

(۷) خطاها به طور مستقل پخش شده اند. آخرین فرض این است که، خطاها در آزمایشهای مختلف از یکدیگر مستقل اند. این مطلب فرض را بسیار ساده می کند. زیرا، تابع چگالی توأم بردار Y ، برابر با حاصل ضرب چگالی های فردی متغیرهای تصادفی Y_1, Y_2, \dots, Y_N و $N=1$ و 2 است. مقصود فرض مزبور این است که، خطاهای واقع در آزمایشهای مختلف به طور اصولی به هم مربوط نیستند. بنابراین می تواند برای تصادفی کردن مفید باشد. خطاهای وابسته می تواند با روش کمترین مربعات تعمیمی، تحلیل شوند. ولی در حالتی که واریانس پایا وجود ندارد، باید توسط اطلاعاتی که از داده ها به دست می آید و یا فرضیات اضافی که در طبیعت استقلال وجود دارد، انجام پذیرد.

۱-۳-۲- ارزیابی الگو

در این بخش روش‌های ساده‌ای به منظور تحقیق در برقراری فرضیات، به ویژه در ترسیم باقی مانده‌ها ارائه خواهیم کرد. بحث‌های بیشتر در شناخت رگرسیونی الگوهای خطی در ها کینگ (۱۹۸۳) و در کتاب‌های بلسلی، کوه و ولش (۱۹۸۰) کوک و وایزبرگ (۱۹۸۲) و در اپرواسمیت (۱۹۸۱) وجود دارد، در فصل سوم ارزیابی الگو، برای الگوهای غیر خطی بحث خواهد شد.

۱-۳-۱- رسم باقی مانده‌ها

یک روش ساده و مؤثر برای بازرسی کفایت الگو، رسم باقی مانده‌های استاندارد (اسینو دنتایز) $\hat{z}_n / s \sqrt{1 - h_{nn}}$ در مقابل متغیرهای مستقل و سایر متغیرهای به طور نسبی مهم «پنهانی» موجود است (باکس، ۱۹۶۰، جونیور، ۱۹۸۱). جمله h_{nn} عبارت است از: n امین جمله قطری ماتریس $H = X(X^T X)^{-1} X^T = Q_1 Q_1^T$ ؛ باقی مانده حالت n ام یعنی $\hat{z}_n = y_n - \hat{y}_n$ است.

رابطه‌ای بین باقی مانده‌ها و هر متغیری که در نظر گرفته نشده ولی دارای اثر است همراه با نشانه‌ای در وجود رفتار اصولی باقی مانده به شکل خطی، یا منحنی، نسبت به آن متغیر است. بیان کلمه «پنهانی» شامل زمان یا شماره رده آزمایش است. اگر رسم باقی مانده‌ها در مقابل زمان نشان دهنده رفتار مشکوکی مانند، گردش‌های باقی مانده‌ها با یک علامت باشد، آن گاه فرض استقلال خطاها برقرار نیست.

ترسیم باقی مانده‌ها در مقابل \hat{y}_n ‌های برازشی نیز مفید است؛ زیرا چنین ترسیمی می‌تواند داده‌های پرت را آشکار، یا به طور کلی، بی کفایتی تابع انتظار را مشخص کند. همچنین این ترسیم در آشکار کردن پایانی واریانس نقش سودمندی را بازی می‌کند. مهمترین شکل پایا نبودن واریانس، افزایش تغییرپذیری پاسخ یا هنگامی که سطح پاسخ تغییر کند، است. این رفتار در داده‌های مرجع PCB تذکر داده شده است. اگر الگویی رگرسیونی به چنین داده‌هایی برازش داده شود، آن گاه رسم باقی مانده‌های استاندارد شکلی شبیه مثلث به وجود می‌آورند.

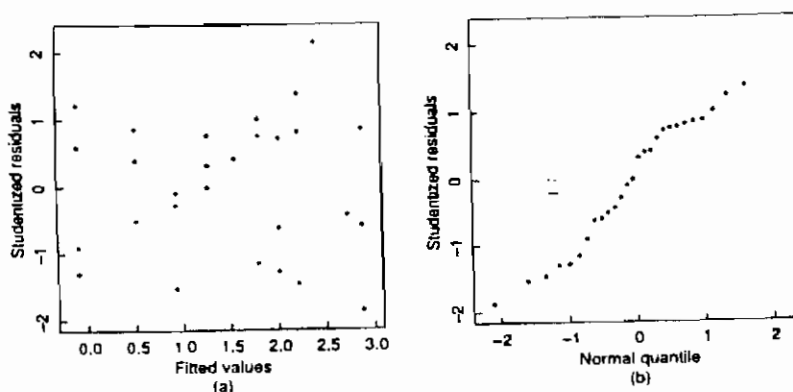
هنگامی که رسم باقی مانده‌ها، یا خود داده‌ها نشان از پایا نبودن واریانس بدهند، باید روش برآورد پیرایش شود. تغییرات ممکن، به صورت تبدیل داده‌ها مطابق داده‌های PCB و یا به کارگیری کمترین مربعات وزن دار است.

یک رسم چندک - چندک (چمبرز و دیگران، ۱۹۸۳) باقی مانده‌های استاندارد در مقابل یک توزیع نرمال روی کاغذ احتمالی نرمال بازرسی مستقیمی از فرض نرمال بودن را ارائه می‌دهد. اگر

تابع انتظار صحیح و فرض نرمال بودن برقرار باشد، آنگاه ترسیم باقی مانده‌ها در کاغذ نرمال نزدیک به خط مستقیم در خواهد آمد. انحراف از خط مستقیم، نشان دهنده غیر نرمال بودن فرض است. همچنین بنابر دانیل و وود (۱۹۸۰) تغییرات قابل ملاحظه‌ای در این رسم به دور از انتظار نیست. افزون بر آن، ترسیم در کاغذ نرمال برای آشکار کردن داده‌های پرت نیز مفید است.

مثال ۱۱: PCB

رسم باقی مانده‌ها در نمودار (۹-۱) در برازش $\ln(PCB)$ بر \sqrt{age} ارائه شده است. چون مقادیر برازشی یک تابع خطی از متغیر مستقل \sqrt{age} است بنابراین مشکل باقی مانده‌های استاندارد رسم شده در مقابل $\hat{\mu}$ ، درست مانند رسم در برابر \sqrt{age} است. به همین دلیل حالت اخیر را نشان داده‌ایم. رسم در مقابل $\hat{\mu}$ و رسم چندک - چندک، روش مناسبی است، زیرا هر دو رسم داده‌های پرت را نشان می‌دهند.



نمودار ۹-۱- رسم باقیمانده‌های استاندارد شده داده‌های PCB در مقابل داده‌های برازشی (a) و در مقابل چندک‌های نرمال (b)

۲-۳-۲-۱- پایا کردن واریانس

آزمایش تکرارپذیر، اجازه‌آزمون‌های بیشتری را بر اساس فرضیات داراست. به عنوان مثال، حتی قبل از در نظر گرفتن یک تابع انتظار، امکان بازرسی پایایی واریانس وجود دارد. این عمل توسط به کارگیری یک تجزیه واریانس برای به دست آوردن میانگین واریانس هر مجموعه از تکرارهای، سپس رسم واریانس و انحراف معیارها در مقابل میانگین‌ها انجام پذیر است. اگر این ترسیم رابطه‌ای اصولی نشان دهد، آنگاه باید یک روش واریانس پایایی را برای تبدیل واریانس پایا

به کار برد.

یکی از روشها، این است که: دامنه‌ای از تبدیلات توانی را به شکل زیر به کار ببریم (باکس و کاکس، ۱۹۶۴).

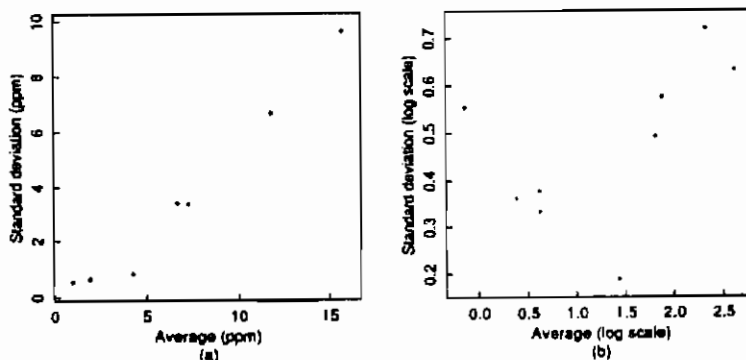
$$y^{(\lambda)} = \begin{cases} \frac{y^{(\lambda)} - 1}{\lambda} & \lambda \neq 0 \\ \ln y & \lambda = 0 \end{cases}$$

واریانس $y^{(\lambda)}$ را برای $\dots, \pm 1, \pm 0.5, 0, \lambda$ محاسبه و در مقابل میانگین‌ها رسم می‌کنیم. سپس مقادیری از λ را انتخاب می‌کنیم که واریانس در پایدارترین حالت به نظر می‌رسد. به عبارت دیگر برای یک متغیر تصادفی Y ، اگر بین انحراف معیار و میانگین μ رابطه‌ای توانی مشابه $\sigma \propto \mu^\alpha$ وجود داشته باشد، آن‌گاه می‌توان نشان داد که واریانس متغیر تصادفی تبدیل یافته $Y^{1-\alpha}$ به طور تقریب پایاست. (باکس، هانتروهانتر ۱۹۷۸، درایرواسمیت، ۱۹۸۱ و مونگومری و پک، ۱۹۸۲).

تبدیل واریانس پایایی اغلب دارای سودهای جانبی است. زیرا توزیعها را چنان می‌سازد که نزدیک به نرمال باشند. این مطلب در بخش (۳-۱-۱) بحث شده است. به طور دیگر، می‌توان اطلاعات تکراری را برای کمک به انتخاب نوع وزن کمترین مربعاتی وزن دار به کار برد.

مثال ۱۲: PCB

رسم انحراف معیار در مقابل میانگین‌ها برای داده‌های اصلی PCB ، در شکل ۱۰-۱a، نشان داده شده است. دیده می‌شود که رابطه خطی خوبی بین s و \bar{y} وجود دارد. بنابراین، روش واریانس پایایی ما را به تبدیل لگاریتمی هدایت می‌کند. در شکل ۱۰-۱b، انحراف معیار را در مقابل میانگین‌های $\ln(PCB)$ رسم کرده‌ایم. این رسم رابطه‌ای اصولی را نشان نمی‌دهد. بنابراین، اثر تبدیل لگاریتمی در پایایی واریانس اثبات می‌شود.



نمودار ۱۰-۱- رسم انحراف معیارهای تکراری در مقابل میانگین‌های تکراری برای داده‌های PCB در قسمت a و برای $\ln(PCB)$ در قسمت b

۳-۲-۳-۱- نابرازشی

هنگامی که در مجموعه داده‌ها تکرار وجود دارد، می‌توان آزمونی برای نابرازشی تابع انتظار انجام داد. چنین تحلیلی، مبتنی بر تجزیه واریانس است که مجموع مربعات باقی‌مانده‌های $S(\hat{\beta})$ با $N-P$ درجه آزادی را تجزیه می‌کند به مجموع مربعات تکرارهای S_r (مساوی مجموع کل مربعات انحرافات مقادیر تکرار گرد میانگینشان) با v_r درجه آزادی و مجموع مربع‌های نابرازشی $S_1 = S(\hat{\beta}) - S_r$ با $v_1 = N - P - v_r$ درجه آزادی. سپس، مقایسه نسبت میانگین مربعات نابرازشی تقسیم بر میانگین مربعات تکرار با مقدار F جدول مربوط انجام می‌گیرد. در حقیقت $\frac{S_1 / v_1}{S_r / v_r}$ را با $F(v_1, v_r, \alpha)$ مقایسه نموده‌ایم. تا مشخص شود که آیا نابرازشی در سطح α وجود دارد یا خیر؟ بیان هندسی این تحلیل، این است که زیر فضای تکرار به طور معمول عمود بر زیر فضای شامل میانگین‌ها و تابع انتظار است.

اگر نابرازشی تشخیص داده نشد. آن‌گاه تجزیه واریانس نابرازشی وظیفه خود را به انجام رسانیده و برآورد σ^2 باید بر مبنای میانگین مربعات باقی‌مانده‌ها باشد. در این صورت، مجموع مربعات تکرارهای و نابرازشی باید بار دیگر ترکیب شوند، تا برآوردی با درجه آزادی بزرگتر انجام پذیرد و بتوان معتربترین پارامتر و ناحیه اطمینان بهتری را برای مقادیر انتظار به دست آورد. اگر نابرازشی پیدا شود. تحلیل‌گر باید علت آن را جستجو و به دنبال پیرایش تابع انتظار نیز باشد. بحث بیشتر در برازش یک الگو و تصحیح و مقایسه الگوها، در بخش‌های (۷-۳) و (۱۰-۳) ارائه شده است.

مثال ۱۳: PCB

تحلیل نابرازشی برای داده‌های $\ln(PCB)$ در مقابل $\sqrt{\text{age}}$ در جدول (۱-۱) ارائه شده است. چون مقدار احتمال نشان دهنده نابرازشی نیست، ما مجموع مربعات نابرازشی و تکرار و درجات آزادی را ادغام نموده و به عنوان برآورد σ^2 در نظر گرفته‌ایم. میانگین مربعات باقی‌مانده‌ها 0.246 با 26 درجه آزادی است. اگر نابرازشی وجود داشت می‌بایست الگو را پیرایش کنیم. در این حالت نمی‌توانستیم به سادگی میانگین مربعات تکرار را به جای برآورد واریانس به کار ببریم.

Source	Degrees of Freedom	Sum of Squares	Mean Square	F Ratio	p Value
Lack of fit	9	1.923	0.214	0.812	0.61
Replication	17	4.475	0.263		
Residuals	26	6.398	0.246		

جدول ۱-۱- تحلیل نابرازشی الگوی برازش داده شده بر داده‌های PCB.

تمرین

۱-۱- یک برنامه رایانه‌ای به زبان دلخواه خود به منظور تشکیل تجزیه QR یک ماتریس با کاربرد تبدیل هوس هولدر بنویسید.

۲-۱- شکلی رسم کنید که نشان دهنده تبدیل هوس هولدر یک بردار $y = (y_1, y)^T$ نسبت به محور x ها باشد. هر دو شکل بردار u متناظر با معادله‌های $(1-A_2)$ و $(2-A_2)$ را به کار برید. راهنمایی دایره‌ای به شعاع $\|y\|$ رسم کنید.

۳-۱- تجزیه QR ماتریس x مثال PCB_3 را بنویسید.

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1/26 \\ 1 & 1/82 \\ 1 & 2/22 \end{bmatrix}$$

با کاربرد u بر اساس معادله $(2-A_2)$ نتیجه را با پیوست شماره دو مقایسه کنید.

۴-۱- الف) تجزیه QR را برای ماتریس زیر انجام دهید و ماتریس Q_1 را به دست آورید. این ماتریس در مثال α -پینه ۶ بخش $(4-3-4)$ به کار رفته است.

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

ب) در صورتی که $y = (50/4, 32/9, 6, 1/5, 9/3)^T$ باشد، $Q^T y$ را بدون حل ضمنی Q_2 محاسبه کنید.

۵-۱- الف) الگوی $\ln(PCB) = \beta_1 + \beta_2 age$ را بر داده‌های PCB برازش داده و تحلیل نابرازشی را انجام دهید. در مورد کفایت نکردن الگو چه می‌توان گفت؟

ب) باقی مانده‌ها را در مقابل سن رسم کنید و کفایت الگو را ارزیابی کنید. اکنون در مورد کفایت الگو چه می‌توان گفت؟

پ) الگوی $\ln(PCB) = \beta_1 + \beta_2 age + \beta_3 age^2$ را بر داده‌های PCB برازش داده و تحلیل نابرازشی را انجام دهید. در مورد کفایت الگو چه می‌توان گفت؟

ت) یک تحلیل مجموع مربعات اضافی برای محاسبه این که اضافه کردن جمله درجه دوم مفید است، تشکیل دهید.

ث) تفاوت جواب‌ها را در (الف)، (ب)، (ت) تشریح کنید.

فصل دوم

رگرسیون غیر خطی: برآورد تکراری و تقریبهای خطی

«گرچه ممکن است تضاد به نظر می آید. ولی در هر حال، تمامی علوم دقیق تحت تأثیر برداشت‌های تقریبی اند.»

برتراند راسل

می‌دانیم اگر پارامترهای یک الگوی رگرسیونی، خطی باشند، آن گاه رگرسیون خطی یک روش قوی خواهد بود. در موارد زیادی دیده می‌شود که، پژوهشگران متغیر وابسته‌ای را با بسطی ریاضی به متغیرهای مستقل مربوط می‌کنند و اغلب این الگوها در پارامترها غیر خطی‌اند. در چنین مواردی باید روش رگرسیون خطی گسترش یابد و این خود پیچیدگی قابل ملاحظه‌ای را ایجاد می‌کند.

۲-۱- الگوی رگرسیون غیر خطی

یک الگوی رگرسیون غیر خطی را می‌توان به صورت رابطه زیر نوشت:

$$Y_n = f(x_n; \theta) + Z_n \quad (2-1)$$

در این جا f تابع انتظار و Z_n برداری شامل متغیرهای رگرسیونی یا مستقل برای حالت n ام است. این الگو، دارای شکل مشابهی با (۱-۱) است، با این تفاوت که، پاسخ مورد انتظار تابعی غیر خطی از پارامتر است.

بنابراین، برای الگوهای غیر خطی، باید حداقل یکی از مشتقات تابع انتظار، نسبت به پارامترها، به یکی از پارامترها بستگی داشته باشد. برای تأکید بر تفاوت بین الگوهای خطی و غیرخطی، θ را به عنوان پارامترهای غیر خطی به کار می‌بریم. همانند قبل، P را نیز برای تعداد پارامترها در نظر می‌گیریم. هنگام تحلیل کردن مجموعه مخصوصی از داده‌ها، بردار x_n با $n = 1, 2, \dots, N$ را به عنوان ثابت و متمرکز شده در وابستگی پاسخ‌های مورد انتظار بر θ در نظر می‌گیریم. N -بردار $\eta(\theta)$ را با n عنصر، به شکل رابطه‌ای مانند:

$$\eta_n(\theta) = f(x_n, \theta) \quad n = 1, \dots, N$$

ایجاد می‌کنیم و الگوی غیر خطی را به صورت رابطه زیر، در نظر می‌گیریم.

$$Y = \eta(\theta) + Z \quad (2-2)$$

این جا فرض می‌شود که Z دارای توزیع نرمال، کروی، مشابه الگوهای خطی است، یعنی:

$$E[Z] = 0$$

$$\text{Var}(Z) = E[ZZ^T] = \sigma^2 I$$

مثال: رانفورد (۱)

کانت رانفورد اهل با واریا، یکی از پژوهشگران قدیمی در علم فیزیک حرارت بوده است. او در سال ۱۷۹۸، آزمایشی به منظور ایجاد گرما، توسط سایش گلوله‌های آهنی موجود در یک شبکه با مته‌ای کند، ترتیب داد. هنگامی که درجه حرارت گلوله‌ها به 130° فارنهایت رسید، آزمایش را متوقف و درجه حرارت‌های نزولی مردشدن را در زمانهای مختلف ثبت کرد. او در طول آزمایش درجه حرارت پیرامون گلوله‌ها (بشکه) را در 60° فارنهایت ثابت نگهداشت. در نتیجه (طبق قانون سرد شدن نیوتن که مبتنی بر رابطه $\frac{df}{dt} = -\theta(f - T_0)$ است، T_0 درجه حرارت محیط است)، درجه حرارت در زمان t ، مطابق رابطه زیر خواهد بود:

$$f(t, \theta) = 60 + 70e^{-\theta t}$$

چون $\frac{\partial f}{\partial \theta} = -70te^{-\theta t}$ به عامل θ بستگی دارد، این الگو غیر خطی است. داده‌های رانفورد، در پیوست یک، بخش A-۱-۱، ارائه شده است.

مثال: پرومایسین (۱)

الگوی میشلیز-متن، برای آنزیم جنبشی که بستگی به سرعت اولیه واکنش آنزیم و غلظت ماده x دارد، مطابق رابطه زیر قابل نوشتن است:

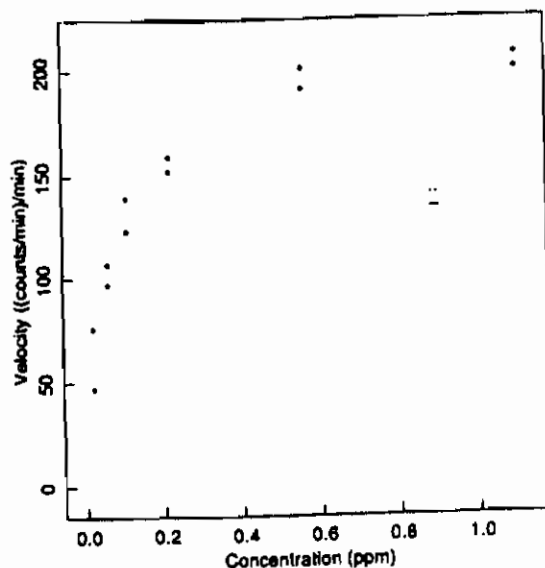
$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 x}{\theta_2 + x} \quad (3-2)$$

در پیوست یک، بخش A-۱-۳، داده‌های ترلور (۱۹۷۴) مبتنی بر تغییرات اولیه واکنش را بر اساس الگوی میشلیز - منتن درج نموده‌ایم. داده‌ها برای یک آنزیم در رفتار با پروماین در نمودار (۱-۲) ترسیم شده است.

با مشتق‌گیری از F نسبت به θ_1 و θ_2 روابط زیر به دست می‌آید:

$$\frac{\partial f}{\partial \theta_1} = \frac{x}{\theta_2 + x} \quad \text{و} \quad \frac{\partial f}{\partial \theta_2} = \frac{-\theta_1 x}{(\theta_2 + x)^2} \quad (۲-۴)$$

چون هر دو مشتق حداقل شامل یک پارامتراند، بنابراین الگو به عنوان غیر خطی تلقی می‌شود.



نمودار ۱-۲- رسم سرعت واکنش نسبت به غلظت ماده، برای داده‌های پروماین

۱-۱-۲ الگوهای خطی شدن

الگوی میشلیز - منتن (۲-۳) را می‌توان با در نظر گرفتن وارون سرعت، به عنوان تابعی از وارون غلظت و به شرح زیر به الگویی خطی تبدیل کرد:

$$\begin{aligned} \frac{1}{f} &= \frac{1}{\theta_1} + \frac{\theta_2}{\theta_1} \frac{1}{x} \\ &= \beta_1 + \beta_2 u \end{aligned} \quad (۵-۲)$$

چنین الگویی را خطی شدنی می‌نامیم. گروهی از مؤلفان جمله "به طور طبیعی خطی" را به کار برده‌اند، ولی ما این کلمه را برای خاصیت ویژه هندسی الگوهای غیر خطی، چنان که در فصل هفتم خواهد آمد، در نظر گرفته‌ایم. همان گونه که در فصل سوم خواهید دید. الگوهای خطی شدنی کاربردهایی در رگرسیون غیر خطی خواهند داشت. زیرا، به کمک آنها می‌توان مقادیر آغازین پارامترها را به سادگی پیدا کرد.

در یک این مطلب مهم است که تبدیلی در داده‌ها، تبدیلی در جمله خطا نیز هست. بنابراین، در فرضیات مربوط به آن نیز مؤثر است. برای مثال تابع الگوی (۲-۲) را با جمله خطای نرمال کروی، در شرایط آزمایش در نظر بگیرید. آنگاه این فرضیات در مورد داده‌های تبدیل شده صادق نخواهد بود. در این صورت یا باید رگرسیون غیر خطی را در داده‌های اصلی به کار بست. یا کمترین مربعات وزن‌دار را در داده‌های تبدیل شده وارد نمود. گاهی تبدیل یک مجموعه از داده‌ها، پایایی واریانس را تولید می‌کند. افزون بر آن، یک تابع انتظار خطی نیز تولید می‌شود. در نتیجه، می‌توان رگرسیون خطی را در داده‌های تبدیل شده به کار برد.

مثال: پرومیسین ۲

چون تکرار در مجموعه داده‌های پرومیسین وجود دارد. از این رو به سادگی می‌توان از نمودار (۱-۲) دریافت که، واریانس داده‌های اصلی، پایاست. بنابراین، باید رگرسیون غیر خطی را برای برآورد پارامتر به کار برد. نمودار ۲-۲، مربوط به وارون داده‌ها، یک رابطه خطی ساده را نشان می‌دهد، ولی پایانبودن واریانس را نیز می‌توان دریافت.

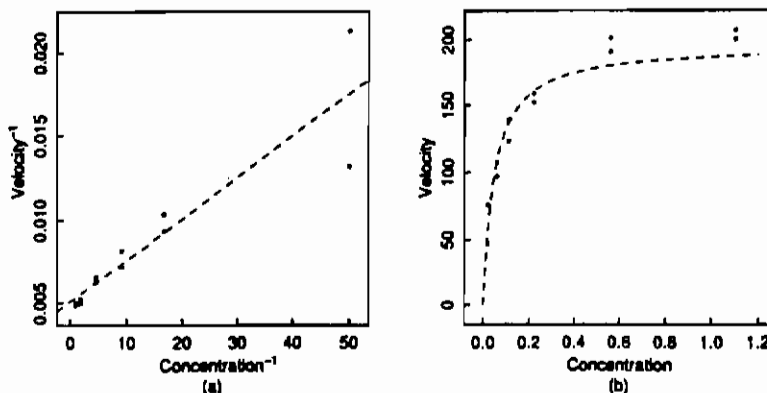
اگر رگرسیون خطی را برای برازش الگو (۲-۵)، بر این داده‌ها به کار ببریم، برآورد زیر را خواهیم داشت:

$$\hat{\beta} = (0.005107, 0.0002472)^T$$

که این هم ارز است با:

$$\hat{\theta} = (195/8, 0.04841)^T$$

منحنی برازش داده شده بر داده‌ها با مقیاس اصلی، در نمودار ۲-۲ نمایش داده شده است. دیده می‌شود که پیش بینی مجانبی چقدر کوچک است. زیرا واریانس تکرارها، توسط تبدیل، تغییر شکل داده است. حالات غلظت کم (غلظت زیاد در حالت وارون) بر محاسبه پارامترها حاکم است. منحنی بر داده‌هایی با غلظت زیاد، برازش خوبی ندارد.



نمودار ۲-۲. رسم وارون سرعت، در مقابل وارون غلظت ماده، آزمایش پرومابسن، قسمت a رگرسیون خطی (خط - فاصله) قسمت b منحنی برازشی (خط) بر داده‌های اصلی است.

این مثال دو نکته مهم را نشان می‌دهد. اولی تأکیدی بر مقدار تکرارهاست. زیرا بدون این تکرارها قادر به کشف واریانس پایا در داده‌های اصلی، یا واریانس ناپایا، در داده‌های تبدیل یافته نیستیم. اما در مورد دوم درست است که تبدیل می‌تواند رفتار خطی ساده‌ای تولید کند، ولی در جمله‌های خطا نیز مؤثر است.

۲-۱-۲- پارامترهای خطی شرطی

الگوی میشلینر - منتن مثالی است از الگویی که یک پارامتر خطی شرطی مانند θ_1 در آن وجود دارد. این الگوی خطی شرطی است، زیرا، مشتق تابع انتظار، نسبت به θ_1 شامل θ_1 نیست. بنابراین می‌توانیم، θ_1 را به صورت شرطی شده بر θ_2 و به کمک رگرسیون خطی سرعت بر $\frac{x}{(\theta_2 + x)}$ ، برآورد کنیم. الگوهایی که دارای پارامترهای خطی شرطی هستند. خواص مفیدی دارند و در رگرسیون غیرخطی به کار می‌روند.

۲-۱-۳- هندسه رویه انتظار

فرض توزیع نرمال، کروی برای جمله خطای Z ، ما را به کاربرد هندسه اقلیدسی N بعدی فضای پاسخ، راهنمایی می‌کند. زیرا، دوباره مایل به برآورد کمترین مربعات $\hat{\theta}$ مربوط به پارامتر هستیم. N - بردار $\eta(\theta)$ یک رویه P بعدی را تعریف می‌کند که آن را رویه انتظار در فضای پاسخ نامند.

برآورد کمترین مربعات متناظر با نقطه‌ای واقع بر رویه انتظار، عبارت است از:

$$\hat{\eta} = \eta(\hat{\theta})$$

که نزدیکترین نقطه به y است. به بیان دیگر، $\hat{\theta}$ مجموع مربعات باقی مانده‌ها را کمینه می‌کند.

$$S(\theta) = \|y - \eta(\theta)\|^2$$

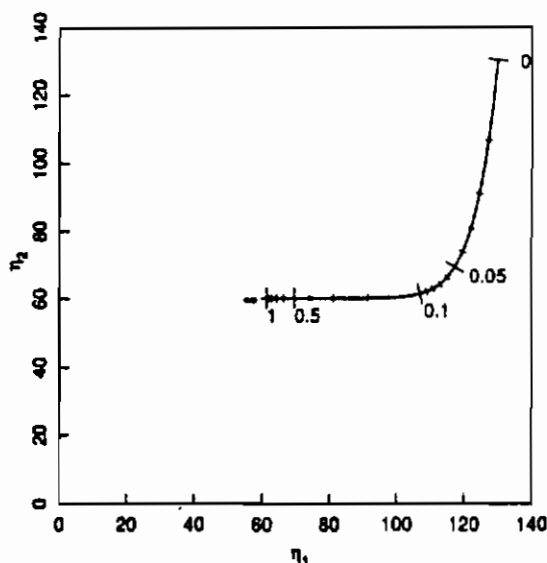
مثال: رامفورد ۲

برای بررسی هندسی الگوهای غیرخطی، دو حالت $t=4$ و $t=41$ داده‌های رامفورد را در نظر می‌گیریم. با فرض قانون سرد شدن نیوتن که در این داده‌ها صادق است، پاسخ‌های مورد انتظار به شرح زیر خواهد بود:

$$\eta(\theta) = \begin{bmatrix} 60 + 70e^{-4\theta} \\ 60 + 70e^{-41\theta} \end{bmatrix} \quad \theta \geq 0.$$

با جایگذاری مقادیر به جای θ در این معادله و رسم نقاط در یک فضای دو بعدی پاسخ، رویه یک بعدی انتظار (منحنی) نشان داده شده در نمودار (۲-۳) به دست می‌آید.

باید آگاه بود که، رویه انتظار به شکل منحنی با گسترش محدود است و این خود، در تضاد با الگوی خطی است. زیرا در الگوهای خطی، رویه انتظار با گسترش نامحدود است. همچنین باید افزود که، نقاطی با فضای مساوی در روی خط پارامتر (θ) به نقاطی با فضاهای نامساوی بر رویه انتظار، تصویر می‌شوند.



نمودار ۲-۳. رسم رویه انتظار - (خط ممند) در فضای پاسخ، برای دو حالت داده‌های رامفورد، نقاط متناظر با مقادیر

$\theta = 1, \infty, \dots, 1/2, 1/3, \dots, 1/10, 1/11, \dots, 1/100, 1/101, \dots, \theta$ مشخص شده‌اند.

مثال: پرومیسین ۳

یک مثال دیگر، در نظر گرفتن سه حالت: $x = 0/22$, $x = 0/56$, $x = 1/10$ در مثال پرومیسین ۱ است. با فرض صحیح بودن تابع انتظار (۳-۲)، پاسخ مورد انتظار برای مقادیر ماده به شرح زیر است:

$$\eta(\theta) = \begin{bmatrix} \frac{\theta_1(1.10)}{\theta_2 + 1.10} \\ \frac{\theta_1(0.56)}{\theta_2 + 0.56} \\ \frac{\theta_1(0.22)}{\theta_2 + 0.22} \end{bmatrix} \quad \theta_1, \theta_2 \geq 0$$

اکنون می‌توان رویه انتظار را با جاگذاری مقادیر θ در این معادله رسم نمود. یک قسمت از رویه انتظار دو بعدی برای این مقادیر x ، در نمودار (۴-۲) نشان داده شده است. این بار برخلاف الگوی خطی، این رویه انتظار، یک صفحه نامحدود نیست. به طور کلی، خطهای مستقیم در صفحه پارامتر به صورت خط مستقیم در صفحه انتظار تصویر نمی‌شوند. همچنین می‌توان دریافت که، مربعهای واحد در صفحه پارامتر به صورت شکلی نامنظم در رویه انتظار تصویر شده‌اند و مساحت آنان نیز متغیر است، در نتیجه دترمینان ژاکوبی، ثابت نبوده و این مطلب به صورت تحلیلی نیز قابل رویت است. زیرا مشتق (۴-۲) به θ بستگی دارد. برای این الگو، خطهای راستی در رویه انتظار، در شکل (۴-۲) متناظر با خطهای پارامتر θ_1 وجود دارد و خطها (مربوط به θ_2 ثابت نگه داشته) بازگو کننده این حقیقت است که θ_1 به صورت خطی شرطی است.

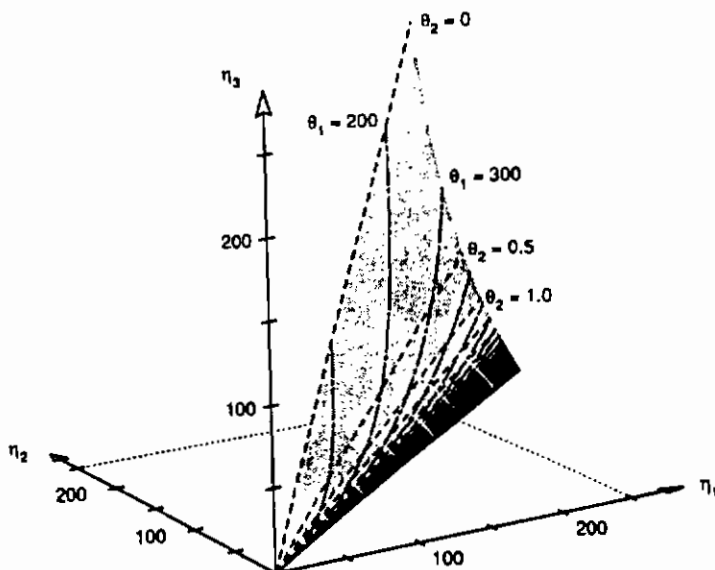
با درکی که از این مثالها به دست می‌آید، می‌توان موارد زیر را به طور کلی صادق دانست.

(۱) رویه انتظار $\eta(\theta)$ یک رویه خمیده P بعدی در فضای N بعدی پاسخ است.

(۲) خطهای پارامتر در فضای پارامتر، به صورت منحنی بر رویه خمیده انتظار تصویر شوند.

(۳) دترمینال ژاکوبی که بیانگر بزرگی مربع واحد موجود در θ در هنگام تصویر $\eta(\theta)$ است، ثابت نیست.

این جنبه مهم و جالب رویه انتظار را در آینده کشف می‌کنیم. ولی در آغاز، چگونگی به دست آوردن برآوردهای کمترین مربعات $\hat{\theta}$ ، برای پارامتر θ را مورد بحث قرار می‌دهیم. برآورد کمترین مربعات غیرخطی، از دیدگاه مجموع مربعات خم‌ها، در بخش (۴-۲) ارائه شده است.



نمودار ۴-۲. رویه انتظار برای مثال سه حالتی پرومابین. قسمتی از رویه انتظار (سایه زده) در فضای انتظار با خطهای پارامتر θ_1 (خط - فاصله) و خطهای پارامتر θ_2 (خط نقطه) نمایش داده شده است.

۲-۲- تعیین برآوردهای کمترین مربعا

مسئله یافتن برآوردهای کمترین مربعا با داشتن بردار داده‌های y ، تابع انتظار $f(x_{in}, \theta)$ و مجموعه بردارهای طرح x_{in} ، $n = 1, \dots, N$ ، از دید هندسی بسیار ساده است. گامهای محاسباتی به قرار زیراند:

(۱) یافتن نقطه $\hat{\eta}$ در رویه انتظار، که به طور کامل به y نزدیک باشد.

(۲) محاسبه بردار پارامتر $\hat{\theta}$ ، که متناظر با نقطه $\hat{\eta}$ است.

برای یک الگوی خطی، گام (۱) سراسر است. زیرا، رویه انتظار یک صفحه با گسترش نامحدود است. از این رو می‌توان، بسطی ضمنی، برای نقطه‌ای واقع در این صفحه و بسیار نزدیک به y را به صورت زیر نوشت:

$$\hat{\eta} = Q_1 Q_1^T y$$

برای الگوی خطی، گام (۲) نیز سراسر است. زیرا، صفحه P بعدی پارامتر به صورت خطی و وارون‌پذیر، بر صفحه انتظار تصویر می‌شود. اگر موقعیت خود را در یک صفحه مشخص کنیم، به راحتی می‌توان نقطه متناظر با آن را در صفحه دیگر به دست آورد. بنابراین، داریم:

$$\hat{\beta} = R_1^{-1} Q_1^T \hat{\eta}$$

در حالت غیر خطی، انجام دو گام بالا مشکل است. زیرا، در گام اول، رویه انتظار خمیده و اغلب گسترشی محدود دارد (یا حداقل گوشه دار است). بنابراین حتی پیدا کردن $\hat{\eta}$ نیز مشکل است. در گام دوم، نقاط را فقط می توان در یک جهت (از صفحه پارامتر به رویه انتظار) تصویر کرد. به عبارت دیگر، حتی اگر $\hat{\eta}$ نیز معلوم باشد، بسیار مشکل است که مختصات $\hat{\theta}$ صفحه پارامتر را نسبت به آن نقطه، مشخص می کنیم. برای حل این مشکل، روشهای تکراری را برای تعیین کمترین مربعه به کار می بریم.

۲-۱-۲ روش گوس-نیوتن

یک راه دسترسی پیشنهاد شده توسط گوس، کاربرد یک تقریب خطی از تابع انتظار است، تا به طور تکراری، حدس اولیه θ^0 برای θ را توسعه داده و این عمل را باید تا رسیدن به عدم تغییر ادامه داد. از این رو بسط تابع انتظار $f(x_p, \theta)$ را تا مرتبه اول دنباله تیلور پیرامون θ^0 به شکل زیر می نویسیم:

$$f(x_p, \theta) \approx f(x_p, \theta^0) + v_{n1}(\theta_1 - \theta_1^0) + v_{n2}(\theta_2 - \theta_2^0) + \dots + v_{np}(\theta_p - \theta_p^0)$$

$$v_{np} = \left. \frac{\partial f(x_p, \theta)}{\partial \theta_p} \right|_{\theta^0} \quad p = 1, 2, \dots, p$$

با تلفیق N حالت، می توان نوشت.

$$\eta(\theta) \approx \eta(\theta^0) + V^0(\theta - \theta^0) \quad (۶-۲)$$

در این جا، V^0 ماتریسی با ابعاد $N \times p$ بوده و درایه های آن مشتق بردارهای $\{v_{np}\}$ است. این عمل مشابه تقریب کردن باقی مانده های $z(\theta) = y - \eta(\theta)$ توسط رابطه زیر است:

$$z(\theta) \approx y - [\eta(\theta^0) + V^0 \delta] = z^0 - V^0 \delta \quad (۷-۲)$$

در این جا از دو رابطه $z^0 = y - \eta(\theta^0)$ و $\delta = \theta - \theta^0$ استفاده نموده ایم. اکنون، نمونگوسی δ^0 را برای کمینه کردن تقریب مجموع مربعات باقیمانده $\|z^0 - V^0 \delta\|^2$ به شرح زیر

محاسبه می کنیم.

$$V^0 = QR = Q_1 R_1 \quad [\text{بنابر: (۱-۱۹)}]$$

$$w_1 = Q_1^T z^0 \quad [\text{بنابر: (۱-۲۱)}]$$

$$\hat{\eta}^1 = Q_1 w_1 \quad [\text{بنابر: (۱-۲۳)}]$$

$$R_1 \delta^0 = w_1 \quad [\text{بنابر: (۱-۲۴)}]$$

اکنون باید نقطه $\hat{\eta}^1 = \eta(\theta^1) = \eta(\theta^0 + \delta^0)$ نسبت به $\eta(\theta^0)$ ، به y نزدیکتر باشد. حال مقدار جدید پارامتر $\theta^1 = \theta^0 + \delta^0$ را به دست می آوریم و تکرار دیگری را با محاسبه باقی مانده های جدید $z^1 = y - \eta(\theta^1)$ به همراه نمون و ماتریس مشتق جدید V^1 ، ترتیب می دهیم. این فرآیند تا رسیدن به همگرایی تکرار می شود. به عبارت

دیگر، باید نمو به اندازه‌ای کوچک شود که تغییر قابل ملاحظه‌ای در عناصر بردار پارامتر ایجاد نشود.

مثال : پرومیسین ۴

برای روشن شدن محاسبات انجام شده، داده‌های مثال پرومیسین ۱ را با برآورد آغازین $\theta^0 = (2.05, 0.08)^T$ در نظر می‌گیریم. داده‌ها به همراه مقادیر برازشی، باقی مانده‌ها و مشتقات محاسبه شده θ^0 در جدول (۱-۲) ارائه شده است.

با گردآوری این مشتقات در ماتریس مشتق V^0 ، تجزیه QR را انجام می‌دهیم و توسط آن $w_1 = Q^T z^0$ را تولید نموده، سپس $R_1 \delta^0 = w_1$ را برای حل δ^0 به کار می‌بریم. در این حالت $\delta^0 = (8/0.3, -0.017)^T$ و مجموع مربعات در $\theta^1 = \theta^0 + \delta^0$ برابر $S(\theta^1) = 120.6$ می‌شود که خیلی کوچکتر از $S(\theta^0) = 315.5$ است. اکنون، $\theta^1 = (2.13/3.0/0.63)^T$ را در نظر گرفته و تکرار دیگری را انجام می‌دهیم.

جدول ۱-۲. باقی مانده‌ها و مشتقات برای داده‌های پرومیسین در $\theta = (2.05, 0.08)^T$

n	x_n	y_n	η_n^0	z_n^0	v_{n1}^0	v_{n2}^0
1	0.02	76	41.00	35.00	0.2000	-410.00
2	0.02	47	41.00	6.00	0.2000	-410.00
3	0.06	97	87.86	9.14	0.4286	-627.55
4	0.06	107	87.86	19.14	0.4286	-627.55
5	0.11	123	118.68	4.32	0.5789	-624.65
6	0.11	139	118.68	20.32	0.5789	-624.65
7	0.22	159	150.33	8.67	0.7333	-501.11
8	0.22	152	150.33	1.67	0.7333	-501.11
9	0.56	191	179.38	11.62	0.8750	-280.27
10	0.56	201	179.38	21.62	0.8750	-280.27
11	1.10	207	191.10	15.90	0.9322	-161.95
12	1.10	200	191.10	8.90	0.9322	-161.95

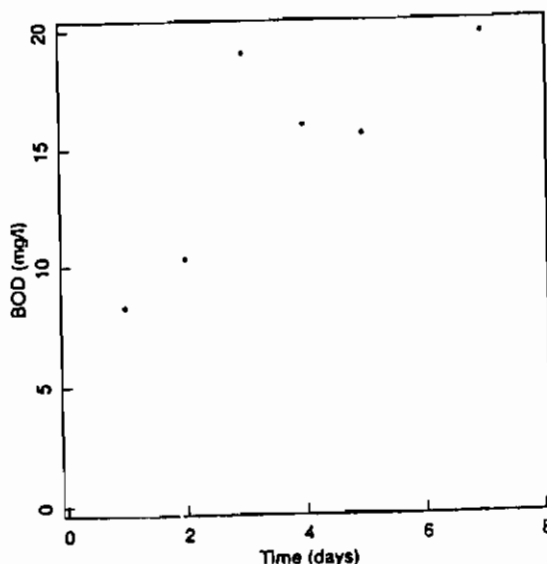
مثال ۱ : BOD

به عنوان دومین مثال، داده‌های نیاز اکسیژن بیوشیمی (BOD) از مارسک (۱۹۶۷) را که در پیوست یک، بخش (۸-۴) ارائه شده، در نظر می‌گیریم. داده‌ها در شکل (۵-۲)، رسم شده‌اند. الگوی زیر برای این داده‌ها در نظر گرفته می‌شود.

$$f(x, \theta) = \theta_1 (1 - e^{-\theta_2 x}) \quad (8-2)$$

با کاربرد برآورد آغازین $\theta^0 = (2.0, 0.24)^T$ و محاسبه $S(\theta^0) = 128/2$ ، نمو برای

$T(52/61,0/13) = \theta^1$ با $S(\theta^1) = 145/2$ ، تولید می‌شود. در این حالت، مجموع مربعات افزایشی است و باید نمودار بر اساس بحث مطرح شده در زیر پیرایش نمود.



نمودار ۲-۱. رسم BOD در مقابل زمان.

۲-۱-۲-۱- عامل مرحله‌ای

همان گونه که در مثال قبل دیدیم نمو گوس - نیوتن می‌تواند افزایشی را در مجموع مربعات ایجاد کند. این هنگامی امکان پذیر است که نمو مورد نظر در ورای ناحیه برقراری تقریب خطی، گسترش یابد. حتی در این شرایط، تقریب خطی، یک تقریب نزدیک به رویه واقعی، برای ناحیه‌ای کوچک و کافی حول $\eta(\theta^0)$ است. چون یک گام کوچک در جهت δ^0 ، کاهش را در مجموع مربعات ایجاد می‌کند، بنابراین، عامل مرحله‌ای λ را معرفی نموده و $\theta^1 = \theta^0 + \lambda \delta^0$ را محاسبه می‌کنیم. عامل به گونه‌ای انتخاب می‌شود که رابطه زیر برقرار باشد:

$$S(\theta^1) < S(\theta^0) \quad (9-2)$$

یک روش عمومی برای انتخاب λ ، شروع با $\lambda = 1$ است، سپس آن را نصف می‌کنیم، تا (۹-۲) برقرار شود. این پیرایش بر الگوریتم گوس - نیوتن در باکس (۱۹۶۰) و هارتلی (۱۹۶۱) بیان شده است.

مثال ۲: BOD

برای داده‌ها و برآورد آغازین مثال $BOD1$ ، مقدار $\lambda = 0.5$ ، مجموعه مربعاتی کاهش یافته $94/2$ را در $\theta = (16/8, 0.38)^T$ ارائه می‌دهد.

شبه برنامه (گام‌های محاسباتی) الگوریتم گوس-نیوتن برای کمترین مربعات خطی، در پیوست شماره ۳، بخش (۳-۱۴) همراه با اجرا در نرم‌افزارهای SAS/IML^{TM} ، $S, GAUSS^{TM}$ ، ارائه شده است.

۲-۲-۲- هندسه کمترین مربعات غیر خطی

روش تکرار گوس-نیوتن به طور هندسی شامل موارد زیر است:

(۱) تقریب $\eta(\theta)$ وسیله دنباله تیلور در $\eta^0 = \eta(\theta^0)$ بسط داده می‌شود.

(۲) ساختن بردار باقی مانده $z^0 = y - \eta^0$

(۳) تصویر باقی مانده z^0 بر صفحه مماسی، برای به دست آوردن $\hat{\eta}^1$

(۴) نگاشت $\hat{\eta}^1$ ، در دستگاه مختصات خطی برای تولید δ^0

(۵) حرکت به طرف $\eta(\theta^0 + \lambda \delta^0)$

در واقع اولین گام، شامل دو تقریب جدای زیر است:

(۱) فرض هم صفحه بودن - که در آن رویه انتظار $\eta(\theta)$ در نزدیک $\eta(\theta^0)$ را توسط صفحه مماسی در $\eta(\theta^0)$ تقریب می‌کنیم.

(۲) فرض یکنواختی مختصات، که در آن یک دستگاه مختصات خطی $V(\theta - \theta^0)$ را به صفحه مماسی تقریب نسبت می‌دهیم.

تفسیر هندسی گام‌ها و فرضهای مزبور را در مثال‌های زیر، ارائه خواهیم کرد:

مثال ۳: رانفورد

برای مجموعه داده‌های دو حالتی رانفورد، مثال رانفورد ۲، قسمتی از رویه انتظار و y را در نمودار (۶-۲) رسم کرده‌ایم. رویه انتظار یک خط خمیده است و نقاط متناظر بسا $0.2, \dots, 0.1, 0.0$ به صورت نامرتب، جای داده شده‌اند.

برای برآورد آغازین $\theta^0 = 0.5$ یک تکرار گوس-نیوتن، شامل تقریب خطی زیر است:

$$\eta(\theta) \approx \eta^0 + \nu \delta$$

در این جا، $\delta = (\theta - 0.5)$ و η^0 بردار انتظار در $\theta = 0.5$ ، به قرار زیر است:

$$\eta^0 = \begin{bmatrix} 60 + 70e^{-4\theta} \\ 60 + 70e^{-41\theta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 117/31 \\ 69/0.1 \end{bmatrix}$$

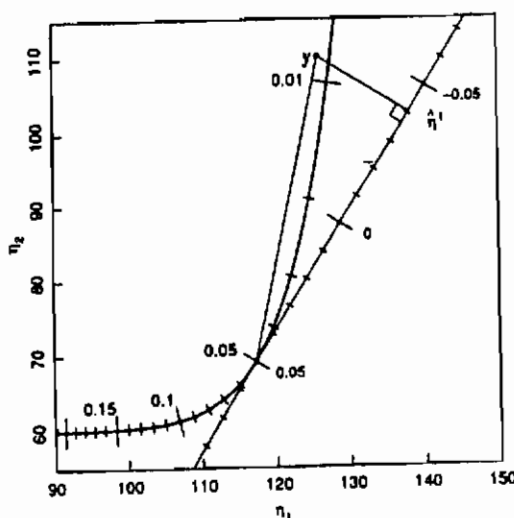
همچنین v ، بردار مشتق در $\theta = 0/05$ است.

$$v = \begin{bmatrix} 70(4)e^{-4\theta} \\ 70(41)e^{-41\theta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -229/25 \\ -369/47 \end{bmatrix}$$

تقریب دنباله تیلور، شامل صفحه مماسی و دستگاه مختصات خطی در نمودار (۶-۲) به صورت خط - پر نشان داده شده است، این عمل رویه خمیده انتظار را با مختصات پارامتر غیر خطی، توسط یک رویه خطی در دستگاه مختصات یکنواخت واقع در آن، جانشین می کند. سپس کمترین مربعات خطی را برای به دست آوردن نقطه $\hat{\eta}^1$ واقع در روی خط مماس - که نزدیکترین به y است - به کار می بریم. آنگاه، مؤ پارامتر بارز δ° ، متناظر با $\hat{\eta}^1$ را محاسبه می کنیم، در آخر $\theta^1 = \theta^\circ + \delta^\circ$ را از آن به دست می آوریم. برای این مثال داریم.

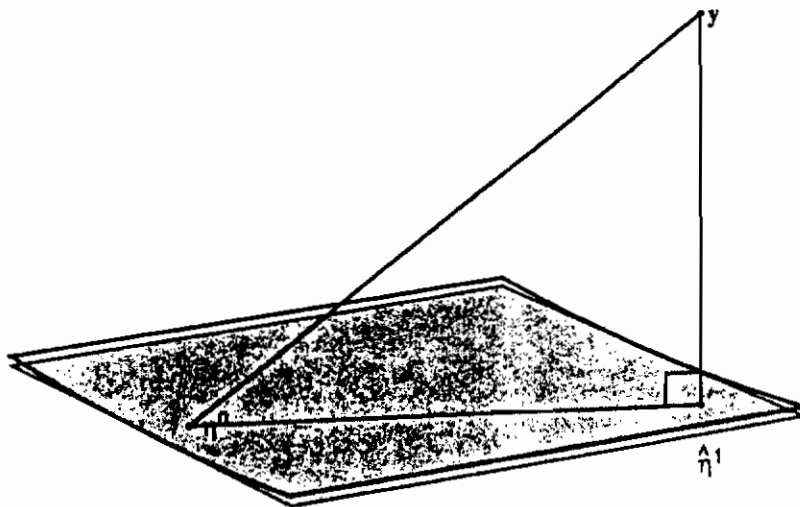
$$z^\circ = \begin{bmatrix} 126 \\ 110 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 117/31 \\ 69/0.1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8/69 \\ 40/99 \end{bmatrix}$$

$$\theta^1 = 0/05 - 0/091 = -0/041 \text{ و } \delta^\circ = -0/091, \hat{\eta}^1 = (138/1, 102/5)^T \text{ بنابراین:}$$



نمودار ۶-۲ یک تفسیر هندسی محاسبه نمودار گوس - نیوتن، با کاربرد داده های دو حالتی رانفورد، یک قسمت از رویه انتظار (خط ممتد درشت) به طور مشترک در فضای انتظار و پاسخ مشاهده ای y ، نشان داده شده است. همچنین تصویر y ، مربوط به $\eta(0/05)$ ، بر روی صفحه مماسی در $\eta(0/05)$ (خط - ممتد) نیز مشخص است. علامت های درشت، نشان دهنده جهت درست در رویه انتظار و جهت تقریب خطی روی صفحه مماسی است.

روشن است که، نمو تقریب خطی بسیار بزرگ است. زیرا، $\theta^1 = -0.041$ است. همچنین می‌توان از نقاط واقع بر رویه انتظار دریافت که $\hat{\theta}^1$ نزدیک به 0.1 است. از این رو باید قبل از اقدام به عمل، یک عامل مرحله‌ای را برای کاهش نمو، به کاربرد.



نمودار ۷-۲. یک تفسیر هندسی از محاسبه نمو گوس - نیوتن یا به کارگیری مجموعه کامل داده‌های پروماینسین. تصویر قسمتی از رویه انتظار به نوبت زیر فضای تولید شده توسط صفحه مماسی در η^0 (سایه زده) و بردار باقی مانده $\eta^0 - \gamma$ نشان داده شده‌اند. ناحیه واقع در رویه انتظار توسط خطهای درشت، مرزبندی شده‌اند. همچنین تصویر $\hat{\eta}^1$ ، بردار باقی مانده صفحه مماسی، نشان داده شده است.

مثال : پروماینسین ۵

برای یک مثال دو پارامتری، داده‌ها و مقدار آغازین مثال پروماینسین ۴ را در نظر می‌گیریم. چون فضای پاسخ ۱۲ بعدی است، نمی‌توان آن را به طور مستقیم به تصویر کشید. ولی می‌توان سیمای برجسته آن را در فضای سه بعدی تولید شده توسط صفحه مماسی و بردار باقی مانده، معرفی کرد. این عمل را در نمودار (۷-۲)، جایی که، قسمتی از رویه خمیده انتظار، بردار باقی مانده و صفحه مماسی تقریب نشان داده شده، انجام داده‌ایم. دیده می‌شود که رویه انتظار فقط کمی خمیده است، بنابراین توسط صفحه مماسی به خوبی تقریب می‌شود.

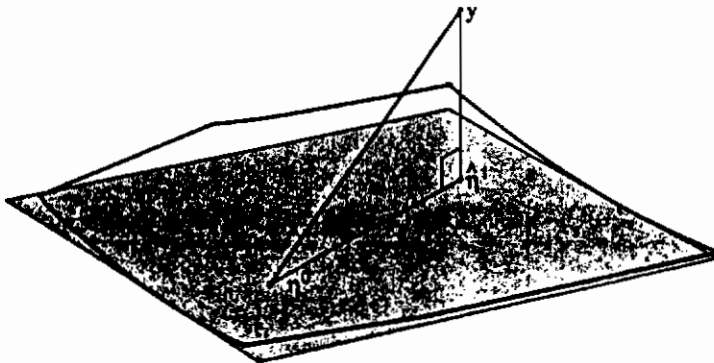
در نمودار (۷-۲)، منحنی‌های پارامتر را برای $200, 210, 220, 230$ و θ_1

$\theta_2 = 0/06, 0/07, \dots, 0/1$ تصویر شده بر روی صفحه انتظار، نشان داده ایم، در نمودار (۲-۸b)، خطهای تقریب خطی متناظر بر صفحه مماسی نیز نشان داده شده است. می توان دید، که خطهای تقریب خطی پیوند خیلی خوبی را با منحنی های پارامتر واقعی دارند. همچنین نشان داده شده که نقاط η^0 و $\hat{\eta}^1$ در صفحه های مماس واقع اند. در نمودار ۲-۸a، تصویر منحنی $(\theta^0 + \lambda \delta^0)$ برای $0 \leq \lambda \leq 1$ را نیز نمایش داده ایم. نقاط متناظر، $0/5, 0/25, \dots, \lambda = 1$ (با نماد η^1) مشخص شده است.

به علت یکنواختی و مسطح بودن مختصات، هر دو فرض برقرارند و نقاط $\hat{\eta}^1$ و η^1 به هم نزدیک بوده و نسبت به η^0 نیز به نقطه λ نزدیکتراند. در این حالت، یک گام کامل ($\lambda = 1$) باید انتخاب شود. تا بتوان مجموع مربعات را کاهش داد. این امر در نمودار مثال پرومیسین ۴، نشان داده شده است.

مثال ۳: BOD

به عنوان یک مثال دو پارامتری دیگر، داده ها و مقادیر آغازین مثال *BOD1* را در نظر گرفته ایم. نمودار (۲-۹)، قسمتی از رویه خمیده انتظار، بردار باقی مانده و صفحه مماسی تقریب در فضای تولید شده توسط صفحه مماسی و بردار باقی مانده را نشان داده است. می توان دید که، رویه انتظار خمیدگی ملایمی دارد. با این وجود، هنوز به ظاهر توسط صفحه مماسی به خوبی تقریب می شوند. در این مثال، لبه رویه متناهی، به صورت خط زاویه دار و در امتداد رأس لبه رویه، نمایش داده شده است.

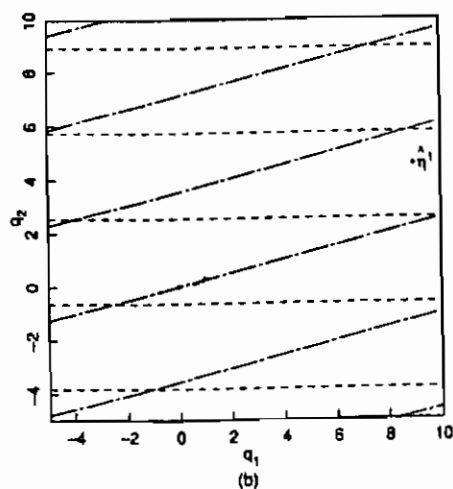
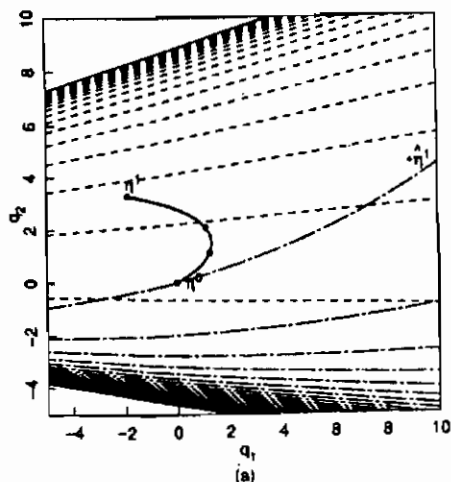


نمودار ۲-۹- تفسیری هندسی از محاسبهٔ نم‌گوس - نیوتن، با کاربرد داده‌های BOD. تصویر بخشی از رویهٔ انتظار به توی زیرفضای تولید شده توسط صفحهٔ مماسی در η^0 (سایه‌دار) و بردار باقی‌مانده $y - \eta^0$. ناحیهٔ روی رویهٔ انتظار توسط خط‌های ضخیم مشخص شده است. همچنین تصویر $\hat{\eta}^1$ مربوط به بردار باقی‌مانده بر روی صفحهٔ مماسی نشان داده شده است.

در نمودار ۲-۱۰ منحنی‌های پارامتر $\theta_1 = 20, 30, \dots$ و $\theta_2 = 0, 20, 40, \dots$ تصویر شده بر صفحهٔ مماسی را نشان داده‌ایم. در نمودار ۲-۱۱، خط‌های متناظر تقریب خطی روی صفحهٔ مماسی نشان داده شده است. در این حالت همیشه خط‌های تقریب خطی با منحنی‌های پارامتر واقعی، جور نیستند. همچنین، نشان داده شده که، نقاط η^0 و $\hat{\eta}^1$ روی صفحه‌های مماسی‌اند. در نمودار ۲-۱۰، تصویر منحنی $(\theta^0 + \lambda \delta^0)$ برای $0 \leq \lambda \leq 1$ نیز نشان داده شده است. نقاط متناظر با $\lambda = 0, 25, 50$ و $\lambda = 1$ (با نماد η^1) مشخص شده‌اند.

به علت برقرار نبودن فرض مختصات یکخواخت و دور بودن از θ^0 ، نقاط $\hat{\eta}^1$ و η^1 به طور وسیعی متمایزاند. در حقیقت η^1 از $\hat{\eta}^1$ نسبت به η^0 دورتر است. در این حالت مقدار کاهش دهندهٔ $\lambda = 0, 5$ موفقیت‌آمیز است، که در مثال BOD2 نشان داده شده است.

به اختصار و به روش هندسی، اطلاعات موضعی را برای ایجاد یک صفحهٔ مماسی با دستگاه مختصات خطی که توسط بردارهای مشتق دیگه شده، به کار می‌بریم. بردار باقی‌مانده را بر روی آن صفحهٔ مماسی تصویر کرده، سپس مختصات صفحهٔ مماسی را به صفحهٔ پارامتر، به کمک نگاشتی خطی، تصویر می‌کنیم.



نمودار ۱۰-۲-۱ تفسیری هندسی از محاسبهٔ نمودار گوس-نیوتن، با کاربرد داده‌های BOD (ادامه). نقاط η^0 و $\hat{\eta}^1$ ، به طور مشترک با منحنی‌های پارامتر، در قسمت a و خط‌های پارامتر تقریب خطی، در قسمت b، نشان داده شده‌اند. همچنین در قسمت a تصویر نقطه η^1 نقطه $(\theta^0 + \delta^0)$ را نشان داده‌ایم. منحنی (خط فاصله ضخیم) اتصال دهنده η^0 به η^1 تصویر $\eta(\theta^0 + \lambda \delta^0)$ برای $(1 \leq \lambda \leq 0)$ است. نقاط متناظر با $\lambda = 0/25$ ، $0/5$ مشخص شده‌اند.

۲-۲-۳- همگرایی

پیشتر، خاطر نشان کردیم که، روش تکرار گوس-نیوتن تا هنگامی ادامه دارد که، مقادیر θ در تکرارهای موفقیت‌آمیز، پایدار شود. این عمل توسط اندازه‌گیری هر نمودار پارامتر نسبت به مقدار قبلی آن قابل اندازه‌گیری

است، که خود پایه‌ای برای یکی از معیارهای مشترک اظهار شده برای همگنی است (بارد، ۱۹۷۴ و دراپر و اسمیت، ۱۹۸۱ و جنریچ و سامپسون، ۱۹۶۸ و کندی و ژنتل ۱۹۸۰ و رالستون و جنریچ و ۱۹۷۸). معیار دیگری برای همگنی را می‌توان کوچک بودن تغییرات نسبی تکرارهای موفقیت‌آمیز در نظر گرفت. این معیار به صورت سؤال گونه در *SAS* (*SASINST. INC. 1985*) ارائه شده است. به کارگیری هر دو معیار توسط هیمبل بلو (۱۹۷۲) خاطر نشان شده است. زیرا، پذیرش توسط یکی مستلزم به قبول دیگری نیست، هر چند پذیرش توسط هر دو معیار تعهدی برای همگرایی نمی‌باشد. این موضوع در بیتر و واتر (۱۹۸۱) بحث شده است. کندی و ژنتل (۱۹۸۰) معیاری شبه گام به گام و به خوبی معیار تغییرات نسبی در مجموع مربعات و اندازه شیب ارائه داده است. چمبرز (۱۹۷۷) چند معیار دیگر را که شامل اندازه شیب، اندازه گام نیوتن - رافسون و این حقیقت که، بردار باقی‌مانده باید عمود بر بردارهای مشتق باشد ارائه کرده، ولی مقیاسی پیشنهاد ننموده است.

انتقاد اصلی بر این معیارها این است که آنها فقدان پیشرفت را بیشتر از همگرایی نشان می‌دهند. البته در اغلب اوقات، فقدان پیشرفت به علت ورود یک حداقلی رخ می‌دهد. ولی شرایطی می‌تواند به گونه‌ای ایجاد شود که نمو پاراستر و مجموع مربعات معیارهای همگرایی، نشان دهنده فقدان پیشرفت بوده، ولی هنوز حداقلی ایجاد نشده باشد.

با بررسی هندسی کمترین مربعات خطی، می‌توان روش بهتری را برای محاسبه همگرایی به دست آورد. (بیتس و واتر، ۱۹۸۱). می‌دانیم، نقطه بحرانی در جایی به وقوع می‌پیوندد که بردار باقی‌مانده $y - \eta(\theta)$ عمود بر رویه انتظار باشد، در نتیجه عمود بر صفحه مماسی و بر رویه انتظار در $\eta(\theta)$ است. از این رو می‌توان، عمود بودن بردار باقی‌مانده بر صفحه مماسی را به عنوان معیار همگرایی برگزید.

در عمل، به علت گردکردنهای عددی نمی‌توان عمود بودن کامل را به دست آورد و نمی‌خواهیم، کوششمان را در محاسبه تغییر کوچکی در بردار پارامتر - تا هنگامی که سعی در رسیدن به عمود بودن کامل داریم - از دست بدهیم. بنابراین نیاز به برقراری یک سطح نوسان - که بتوان توسط آن (به اندازه کافی عمود بودن) بردار باقی‌مانده را اظهار نمود - داریم. یک راه انجام چنین عملی، در نظر گرفتن تغییر پذیری آماری در برآوردهای کمترین مربعات است.

اگر فرض کنیم که صفحه مماسی، تقریب خوبی را برای رویه انتظار نزدیک θ فراهم کند، چون یک ناحیه درست نمایی برای θ ، به طور سرانگشتی، متناظر با قرصی واقع در صفحه مماسی، با شعاعی متناسب با $\sqrt{S(\hat{\theta})}$ است. آن گاه، تناظر نسبی مقادیر پارامترهای جاری، از برآوردهای دقیق کمترین مربعات، به کمک محاسبه نسبت طول مؤلفه بردار باقی‌مانده در صفحه مماسی تا $\sqrt{S(\hat{\theta})}$ به دست می‌آید. تا هنگامی که این

نسبت کوچک است، بی اعتباری عمودی برآوردهای کمترین مربعات نسبت به بی اعتباری آماری پارامترها، ناچیز است.

متأسفانه، این معیار، شامل بردار نامعلوم کمترین مربعاتی $\hat{\theta}$ است. بنابراین، معیار را با جانشینی برآوردهای جاری $\hat{\theta}$ ، برای $\hat{\theta}$ و اندازه گیری طول مؤلفه های صفحه مماسی مقیاس شده بردار باقی مانده نسبت به طول مؤلفه نرمال مقیاس شده بردار باقی مانده در $\hat{\theta}$ پیرایش می کنیم. این کار ما را به یک معیار همگرایی متناظر نسبی و به صورت زیر هدایت می کند:

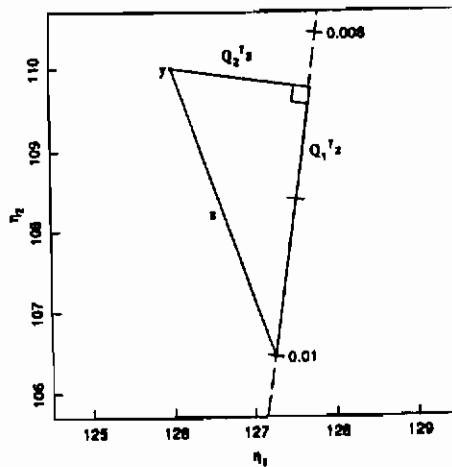
$$\frac{I Q_1^T (y - \eta(\hat{\theta}')) I / \sqrt{P}}{I Q_2^T (y - \eta(\hat{\theta}')) I / \sqrt{N-P}} \quad (10-2)$$

در این جا Q_1 و Q_2 به ترتیب عبارتند از: P ستون اولیه و $N-P$ ستون بعدی ماتریس Q حاصل از تجزیه QR ماتریس V . معیار بستگی دارد به کتانژانت زاویه ای که بردار باقی مانده با صفحه مماسی می سازد، به گونه ای که یک تناظر نسبی متناظر با زاویه ای نزدیک ۹۰ درجه باشد.

برای اعلام همگرایی، ما نیاز به تناظر نسبی کوچکتر از ۰/۰۰۱ داریم. به این علت که، هر بازه ای اثری اساسی بر بردار پارامترهای جاری - با شعاع کوچکتر از ۰/۱٪ قرص ناحیه اطمینان مربوط به نقاط کمترین مربعات - ندارد.

مثال: رانفودرم

ناحیه همگرایی و اثرات آن را در مثال رانفودر ۲، در نظر می گیریم. مایل به آزمون مقدار پارامتر $\theta = ۰/۰۱$ - که به عنوان یک نقطه همگرایی در نظر گرفته شده است - می باشیم. نمودار (۱۱-۲) نشان دهنده قسمتی از رویه انتظار، نقطه مشاهده ای لا و صفحه مماسی در $\eta(۰/۰۱)$ است. همچنین، مؤلفه بردار باقی مانده واقع در صفحه مماسی $Q_1^T z$ و مؤلفه عمود بر صفحه مماسی $Q_2^T z$ را نشان داده ایم. مؤلفه صفحه مماسی، نسبت به مؤلفه عمودی بزرگتر و دارای تناظر نسبی ۱/۹۲ است. از این رو می توان گفت: که، بردار باقی مانده در $\theta = ۰/۰۱$ ، برای قبول مقدار $\theta = ۰/۰۱$ به عنوان مقدار همگرایی به اندازه کافی عمود نیست.

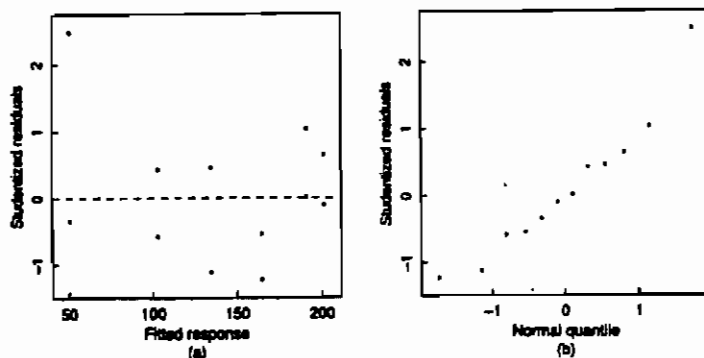


نمودار ۱۱-۲. تفسیری هندسی از تنافر نسبی، با کاربرد داده‌های دو حالتی را نفورد. قسمتی از رویه انتظار (خط - فاصله) در فضای انتظار، به همراه بردار باقیمانده Z و تصویرش بر صفحه مماس $(Q_1^T Z)$ و عمود بر صفحه مماس $(Q_2^T Z)$ ، نشان داده شده است.

همگرایی، با فرض کفایت الگو، دلالت بر بهترین برآورد به دست آمده از پارامترها را دارد. قبل از مشخص کردن دقت برآوردها با کاربرد فاصله‌ها یا ناحیه‌های استنباط، باید باقی مانده‌ها را برای یافتن نشانه‌هایی از عدم کفایت الگو، بازرسی کرد. یک بحث کامل عملی در قبول رگرسیون غیرخطی در فصل سوم ارائه شده است. اما، در تکمیل تحلیل داده‌های پرومیسین و BOD به طور ساده باقی مانده‌ها را در مقابل مقادیر برازش داده شده رسم نموده‌ایم و رسم احتمالی را قبل از ادامه به کار برده‌ایم.

مثال: پرومیسین ۶

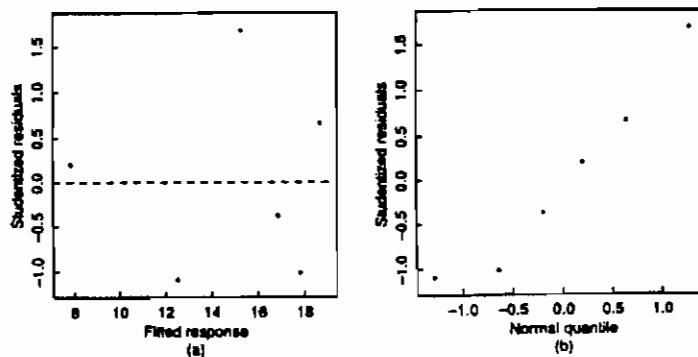
همگرایی، برای داده‌های پرومیسین در $\hat{\theta} = (212/7, 0/0641)^T$ با $s^2 = 119/5$ و درجه آزادی داده شده است. باقی مانده‌های استاندارد منتج از برازش کمترین مربعات، در نمودار (۱۲-۲) در مقابل مقادیر برازش داده شده، در قسمت a و رسم احتمالی همزمان در قسمت b ، مشخص شده‌اند. هر چند یک باقی مانده نسبتاً بزرگ وجود دارد، ولی با این حال، برازش، کافی به نظر می‌رسد، از این رو مبادرت به توسعه ناحیه‌های استنباط پارامترها کرده‌ایم.



نمودار ۱۲-۲. باقی مانده‌های استاندارد، برای داده‌های پرومابسین، رسم شده در مقابل مقادیر برازش داده شده در قسمت a و در مقابل چندکهای نرمال در قسمت b .

مثال: BOD4

همگرایی برای داده‌های BOD در $\hat{\theta} = (19/143, 0/5311)^T$ با $s^2 = 6/498$ و با ۴ درجه آزادی بیان شده است. باقی مانده‌های استاندارد منتج از برازش کمترین مربعات در نمودار (۱۳-۲) در مقابل مقادیر برازش داده شده در قسمت a و در کاغذ احتمالی در قسمت b نشان داده شده است. چون رفتار باقی مانده‌ها خوب است، از این رو، مبادرت به توسعه ناحیه‌های استنباط پارامتر کرده‌ایم.



نمودار ۱۳-۲. باقی مانده‌های استاندارد برای داده‌های BOD رسم شده در مقابل مقادیر برازش داده شده در قسمت a و در مقابل چندکهای نرمال، در قسمت b .

۲-۳- کاربرد تقریب خطی در استنباط رگرسیون غیر خطی

در الگوریتم گوس - نیوتن برای محاسبه $\hat{\theta}$ در هر تکرار ماتریس مشتق V ارزیابی و برای محاسبه نمو و معیار همگرایی به کار می‌رود. سپس به طور طبیعی، برای تقریب خطی به کار خواهد رفت، تا استنباطی برای الگوهای غیر خطی به همراه ماتریس مشتق محاسبه شده در برآوردهای پارامتر کمترین مربعه باشد. این عمل درست نمایی تقریبی - فاصله اطمینان تقریبی و یانواخی تقریب یزی را که بر مبنای رابطه زیر بنا شد - نتیجه می‌دهد.

$$\eta(\theta) = \eta(\hat{\theta}) + \hat{V}(\theta - \hat{\theta}) \quad (11-2)$$

۳-۲-۱ ناحیه استنباط تقریبی برای پارامترها

با بازگشت به حالت خطی، ناحیه استنباط $I-\alpha$ پارامتر، به شرح زیر است: (فاصله اطمینان ۱-۹).

$$(\beta - \hat{\beta})^T X^T X (\beta - \hat{\beta}) \leq P s^2 F(P, N-P, \alpha) \quad (12-2)$$

ناحیه مزبور به روش هندسی نیز قابل دسترسی است. زیرا، رویه انتظار یک صفحه است و بردار باقی مانده عمود بر این صفحه است. در نتیجه، ناحیه مقادیر قابل قبول روی صفحه انتظار، یک قرص است. در صورت انتخاب قرص از میان تصویر خطی نقاط وابسته در صفحه انتظار به نقاط واقع در صفحه پارامتر، این قرص در صفحه پارامتر به شکل بیضوی تصویر می‌شود.

ناحیه‌های استنباط تقریبی برای الگوهای غیر خطی به روشی مشابه با معادله (۱۲-۲) به شرح زیر نیز تعریف می‌شود:

$$(\theta - \hat{\theta})^T \hat{V}^T \hat{V} (\theta - \hat{\theta}) \leq P s^2 F(P, N-P, \alpha) \quad (13-2)$$

یا به صورت هم ارز:

$$(\theta - \hat{\theta})^T \hat{R}_1^T \hat{R}_1 (\theta - \hat{\theta}) \leq P s^2 F(P, N-P, \alpha) \quad (14-2)$$

در این جا، ماتریس مشتق $\hat{V} = \hat{Q}_1 \hat{R}_1$ محاسبه شده است. مرز این ناحیه استنباط (۲۸-۴)، همان [فاصله اطمینان (۲۸-۲)] است.

$$(\theta - \hat{\theta}) = \sqrt{P s^2 F(P, N-P, \alpha)} \hat{R}_1^{-1} d \quad |d| = 1 \quad (15-2)$$

همچنین خطای استاندارد تقریبی برای θ_p ، عبارت است از: s مرتبه طول سطر p ام ماتریس \hat{R}_1^{-1} (فاصله اطمینان ۱-۳۳). همبستگی‌ها و خطاهای استاندارد تقریبی برای پارامترها، به مادگی از تجزیه \hat{R}_1^{-1} به ماتریس

قطری رابطه (۳۴-۱) - که طولهای سطرهای \hat{R}^{-1} را می‌دهد - و ماتریسی با طول سطری واحد، که در بخش (۳-۲-۱) توصیف شده، قابل محاسبه است.

ماتریس همبستگی تقریبی پارامتر، مانند (۳۵-۱) محاسبه شده است.

مثال: پروماین

همگرایی برای داده‌های پروماین، در $\hat{\theta} = (212/7, 0/641)^T$ با $s^2 = 119/5$ و 10 درجه آزادی داده شده، داریم:

$$\hat{R}_1 = \begin{bmatrix} -2/4441 & 1568/7 \\ & 1320/3 \end{bmatrix}$$

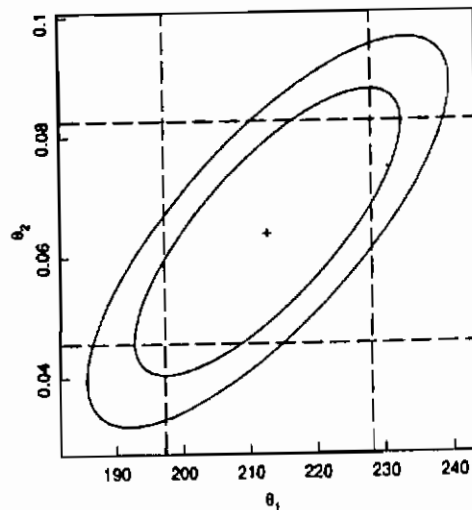
ناحیه‌های توأم استنباط تقریبی ۹۵٪ و ۹۹٪ از رابطه (۱۵-۲) با $d = (Cos\omega, Sin\omega)^T$ به دست آمده و در شکل (۱۴-۲) رسم شده‌اند. برای محاسبه فاصله‌های استنباط حاشیه‌ای تقریبی، تجزیه زیر را انجام می‌دهیم.

$$\begin{aligned} \hat{R}_1^{-1} &= \begin{bmatrix} -0/4092 & 0/4861 \\ & 0/0007574 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0/6354 & \\ & 0/0007574 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -0/6439 & 0/7651 \\ & 1/0000 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

بنابراین، خطاهای استاندارد تقریبی عبارت اند از: $6/95$ و $8/28 \times 10^{-3}$. همبستگی تقریبی بین θ_1 و θ_2 برابر با $0/77$ است. یک ناحیه استنباط حاشیه‌ای تقریبی ۹۵٪ برای θ_2 به عنوان مثال، مشابه زیر است:

$$0/0641 \pm \sqrt{119/5} (0/0007574)^{1/2} (10; 0/025) = 0/0641 \pm 0/0185$$

فاصله‌های استنباط حاشیه‌ای ۹۵٪ برای هر دو پارامتر، به صورت خط فاصله‌ها، در نمودار (۱۴-۲) نشان داده شده است.



نمودار ۲-۱۴. ناحیه‌های استنباط تقریبی پارامتر برای داده‌های پرومپسین. در نمودار برآوردهای کمترین مربعات (+)، ناحیه‌های استنباط ۹۵ و ۹۹ درصدی توأم - پارامتر (خطوط پر) و فاصله استنباط ۹۵٪ حاشیه‌ای (خط - فاصله‌ها) نشان داده شده است.

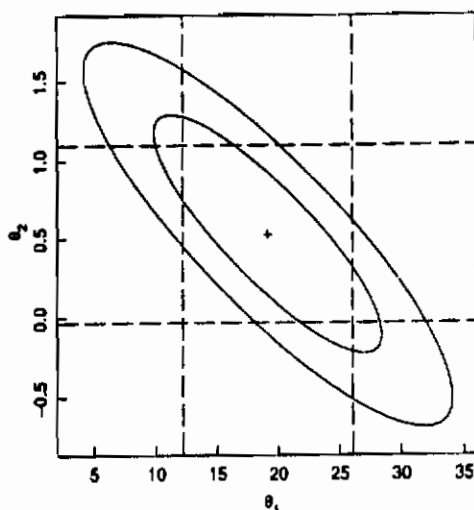
مثال : BOD۵

همگرایی، برای داده‌های BOD در $\hat{\theta} = (19/143, 0/5311)^T$ با: $s^2 = 6/498$ درجه آزادی داده شده است. داریم:

$$\hat{R}_1 = \begin{bmatrix} -1/9556 & -20/4986 \\ -12/5523 & \end{bmatrix}$$

در این جا، خطاهای استاندارد تقریبی $2/5$ و $0/203$ را ارائه می‌دهند.

ناحیه‌ای استنباط توأم تقریبی در نمودار (۲-۱۵) به همراه فاصله‌های حاشیه‌ای تقریبی ۹۵٪ رسم شده است. باید دانست که ناحیه‌ها، شامل مقادیر منفی برای θ_2 است که از نظر فیزیکی بی‌معنی است. همبستگی تقریبی میان θ_1 و θ_2 برابر $0/85$ - است.



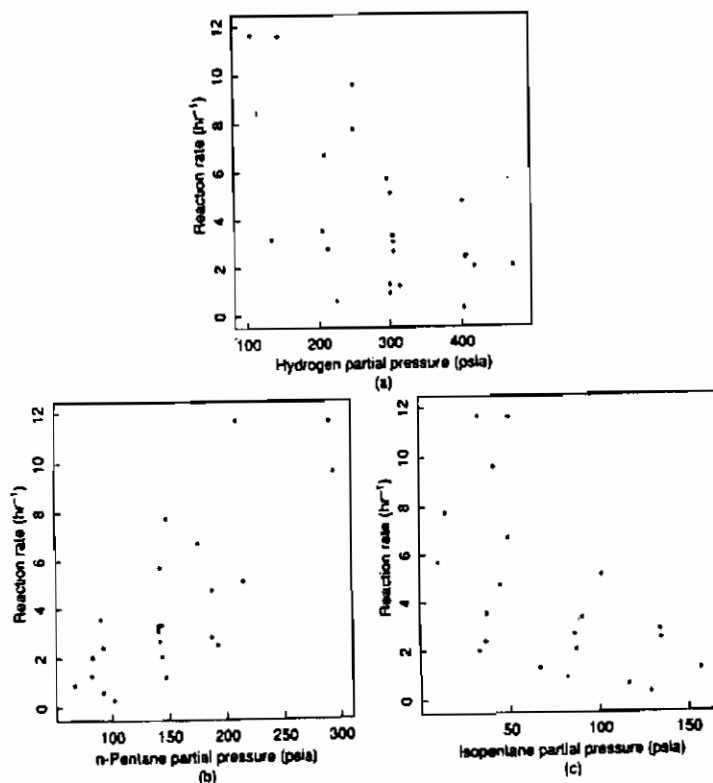
نمودار ۱۵-۲: ناحیه‌های استنباط تقریبی پارامتر برای داده‌های *BOD*. در نمودار برآوردهای کمترین مربعات (+) نواحی استنباط توأم ۹۹ و ۹۵ درصدی پارامتر (خطوط پر) و فاصله استنباط ۹۵ درصدی حاشیه‌ای خط - فاصله‌ها نشان داده شده است.

هنگامی که بیش از دو پارامتر وجود دارد، رسم ناحیه استنباط توأم تقریبی ممکن نیست. در این جا معمول است که شرایط استنباطی را با تقسیم فاصله‌های استنباط حاشیه‌ای، تقریبی و ماتریس همبستگی پارامتر و انجام رسم دو به دو ناحیه‌های استنباط، خلاصه نمود. روش دقیقتر برای خلاصه کردن شرایط استنباط، در فصل ششم، ارائه شده است.

مثال : هم ترکیبی ۱

داده‌های مربوط به سرعت واکنش هم ترکیبی پنتان نرمال، در تبدیل به ایزوپنتان در مجاورت کاتالیزور در مقابل فشارهای جزئی هیدروژن، پنتان نرمال و ایزوپنتان که در کار (۱۹۶۰) ارائه شده و در پیوست یک بخش (۵-۱۸) معرفی شده و در نمودار (۱۶-۲) رسم شده‌اند. تابع الگوی مناسب برای این داده‌ها، به شکل زیر است:

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 \theta_3 (x_2 - x_3 / 1.632)}{1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_3}$$

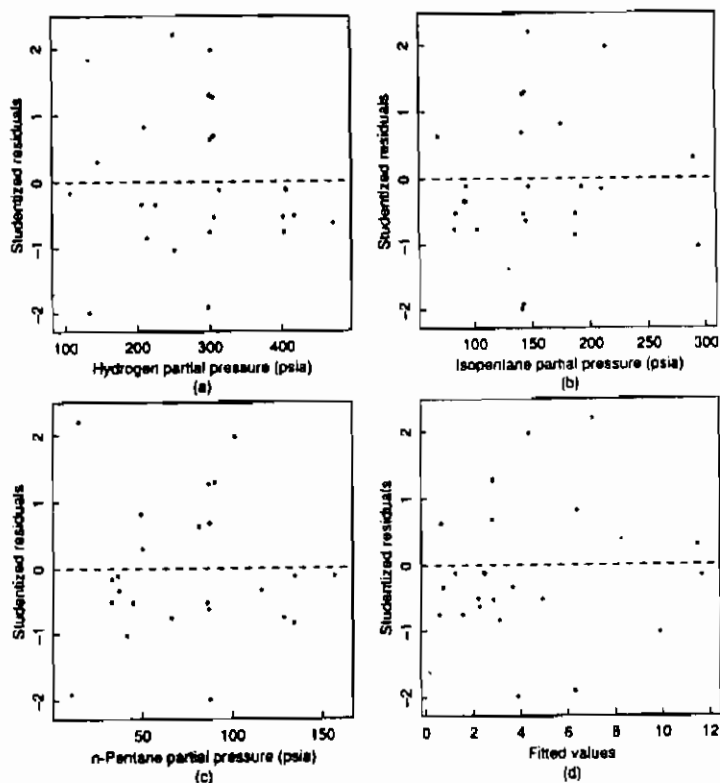


نمودار ۲-۱۶- ترسیم سرعت واکنش هم ترکیبی پنتان نرمال، در تبدیل به ایزوپنتان، در مقابل فشارهای جزئی هیدروژن در قسمت a، پنتان نرمال در قسمت b و ایزوپنتان در قسمت c.

برآورد پارامترها و خلاصه آماره‌ها، در جدول (۲-۲) و رسم باقی مانده‌ها، در مقابل فشارهای جزئی و مقادیر برازش داده شده، در نمودار (۲-۱۷) آمده است. رسم‌ها بیانگر رفتار خوب باقی مانده‌ها است. خلاصه آماره‌ها، بیانگر پتانسیل مشکلات است، چون تعدادی از همبستگی‌ها خیلی بالا هستند و چون بعضی از خطاهای استاندارد، فاصله اطمینان ۹۵٪ درصدی ایجاد می‌کنند که شامل مقادیر منفی است در صورتی که پارامترها باید مثبت باشند تا از نظر فیزیکی معنی‌دار شوند. رسم‌های زوج پارامتری نواحی استنباط غیر خطی ۹۵٪ در نمودار (۲-۱۸) نشان داده شده است. گسترش به ناحیه‌های منفی پارامتر، آشکار است.

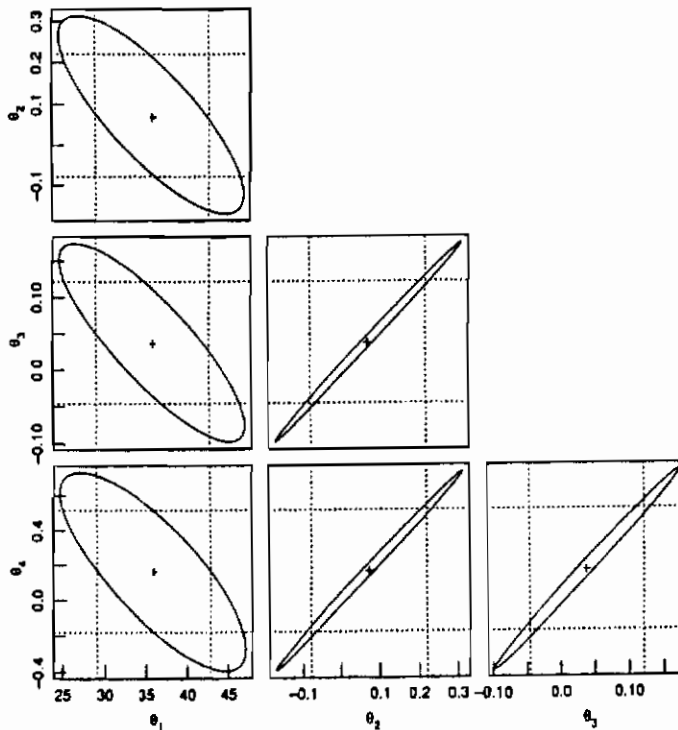
جدول ۲-۲. خلاصه پارامتر برای داده‌های هم ترکیبی

Parameter	Estimate	Standard Error	Approximate Correlation Matrix			
θ_1	35.92	8.21	1.000			
θ_2	0.0708	0.1783	-0.805	1.000		
θ_3	0.0377	0.0998	-0.840	0.998	1.000	
θ_4	0.167	0.415	-0.790	0.998	0.995	1.000



نمودار ۱۷-۲. باقی مانده‌های استاندارد، برای داده‌های هم ترکیبی، رسم شده در مقابل فشارهای جزئی هیدروژن در قسمت

a، ایزوپنتان در قسمت b، پنتان نرمال در قسمت c و در مقابل مقادیر براش داده شده در قسمت d.



نمودار ۲-۳-۱۸-۲. نمودار زوجی ناحیه استنباط تقریبی ۹۵٪ پارامتر، برای داده‌های هم‌توکی. برای هر جفت پارامتر، برآورد کمترین مربعات (+) ناحیه استنباط تقریبی ۹۵٪ پارامتر (خط - پر) و فاصله استنباط ۹۵٪ حاشیه‌ای (نقطه چین‌ها) نشان داده شده‌اند.

۲-۳-۲- نوار استنباط تقریبی برای پاسخ مورد انتظار

فاصله‌های استنباط تقریب خطی و نوارهای مربوط به پاسخ مورد انتظار در رگرسیون غیر خطی، مشابه معادلاتی که در رگرسیون خطی به کار بردیم، قابل تولید است (۱-۱) و (۱-۱۲). در آن معادلات، به سادگی مقدار برآورد $\hat{\beta}^T x_0$ را به وسیله $f(x_0, \hat{\theta})$ ماتریس X به وسیله \hat{V} و بردار مشاهدات x_0 رابطه وسیله

$$v_0 = \left. \frac{\partial f(x_0, \theta)}{\partial \theta^T} \right|_{\hat{\theta}}$$

جانشین کرده‌ایم.

در این صورت فاصله استنباط تقریب $1-\alpha$ عبارت است از:

$$f(x_0, \hat{\theta}) \pm s \sqrt{v_0^T \hat{R}_1^{-1} v_0} \quad I(N-P, \alpha/2) \quad (\text{رابطه ۱-۳۶})$$

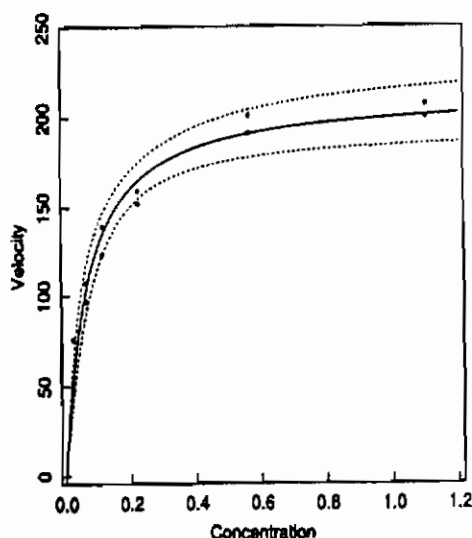
همچنین، نوار استنباط تقریبی عبارت است از:

$$f(x, \hat{\theta}) \pm s \sqrt{v^T \hat{R}_1^{-1} v} \sqrt{P F(P, N-P, \alpha)} \quad (\text{رابطه ۱-۳۷})$$

مثال : پروماین

برای داده‌های پروماین، پاسخ برآورد شده در $x=0/4$ برابر: $183/3$ و بردار مشتق $v = (0/8618, -394/9)^T$ است، و با کاربرد \hat{R}_1^{-1} ، از مثال پروماین ۶ داریم:

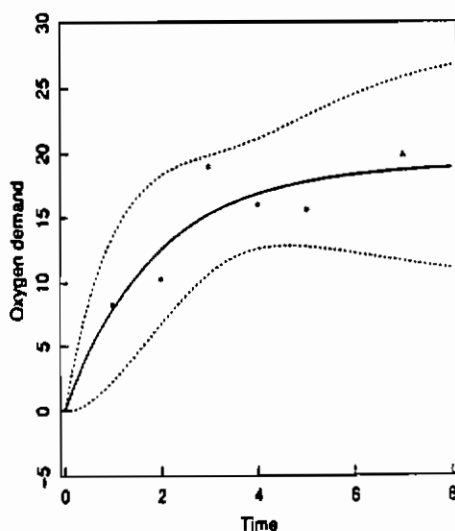
$v^T \hat{R}_1^{-1} v = (-0/3526, 0/1198)$ نوار استنباط در $x=0/4$ برابر: $(171/6 \text{ و } 195)$ می‌شود. ترسیمی از نوار استنباط تقریبی ۹۵٪ در نمودار (۱۹-۲) ارائه شده است. نوار به تدریج پهن می‌شود. از پهنای صفر در $x=0$ شروع و هنگامی که $x \rightarrow \infty$ میل می‌کند به یک پهنای ثابتی می‌رسد.



نمودار ۱۹-۲: نوار استنباط تقریبی ۹۵٪ برای داده‌های پروماین. تابع انتظار برازش داده شده به صورت خط ممند و نوار استنباط ۹۵٪ به صورت دو نقطه چین، نشان داده شده است.

مثال ۶: BOD

تابع پاسخ برآورد شده برای داده‌های BOD و نوار استنباط تقریبی ۹۵٪ در نمودار (۲-۲۰) رسم شده است. عرض نوار از پهنای صفر در $x=0$ ، کمی باریک در محدوده $x=4$ و سپس پهنای ثابت که به تدریج هنگامی که $x \rightarrow \infty$ میل می‌کند، حاصل می‌شود.



نمودار ۲-۲۰: نوار استنباط تقریبی ۹۵٪ برای داده‌های BOD تابع انتظار برازشی به صورت خط متد و نوار استنباط ۹۵٪ به صورت دو منحنی نقطه چین، نشان داده شده است.

رفتار نوار استنباط الگوهای غیر خطی به طور کامل با الگوی خطی متفاوت است. در مثالهای ارائه شده، به علت ساختار توابعی که از مرکز می‌گذرند، عرض نوار در آنجا به صفر کاهش پیدا می‌کند. همچنین به علت گرایش تابع الگو به مجانب‌های افقی، نوار استنباط نیز میل به مجانبی بودن دارد. این خواص با موارد نوارهای اطمینان در الگوهای خطی متفاوت است که به عنوان نمونه در نمودار (۳-۱) ارائه شده‌اند. در آن جا دیده می‌شود که نوارها در میانه داده‌ها باریکترین حالت و به طور نامحدود نیز پهن می‌شوند.

۴-۲- کمترین مربعات غیر خطی از طریق مجموع مربعات

در الگوهای خطی و غیر خطی مجموع مربعات به صورت منحنی ظاهر می‌شود، که خود به علت فرضیات نرمال بودن، استقلال و پایایی واریانس در خطاهاست. از این رو طبیعی است که رگرسیون خطی و غیرخطی را از دیدگاه مجموع مربعات برای کمک به درک بیشتر این دو بررسی کنیم. به ویژه دیدگاه درست نمایی همبستگی شدیدی با منحنی‌های تراز مجموع مربعات دارد، زیرا، تابع درست‌نمایی به طور مستقیم متناسب با تابع مربعات $S(\theta)$ است.

یکی از خواص مهم الگوهای خطی این است، که تابع مجموع مربعات $S(\beta)$ از درجه دوم باشد. به همین علت منحنی‌های تراز مربوط به مجموع مربعات ثابت، رویه‌ها یا خمهای منظم خوش رفتاری چون بیضی و بیضوی هستند. بنابراین تابع لگاریتم درست‌نمایی می‌تواند به طور کامل توسط کمترین مقدار تابع مجموع مربعات $S(\hat{\beta})$ ، موقعیت حداقل تابع مجموع مربعات $\hat{\beta}$ ، و مشتق دوم (هسیان) تابع مجموع مربعات $\frac{\partial^2 S(\beta)}{\partial \beta \partial \beta^T} = X^T X$ خلاصه شود. به عبارت دیگر، همه این مقادیر با تحلیل عددی قابل دسترسی است. برای الگوهای غیر خطی - به علت عدم خوش رفتاری و منظم بودن تابع مجموع مربعات - خلاصه کردن تابع لگاریتم درست‌نمایی مشکل است.

۴-۲-۱- تقریب خطی

تقریبهای خطی تابع انتظار در محاسبه نمونه‌ها - تا به دست آوردن برآوردهای کمترین مربعات - و محاسبه نواحی استنباط - به منظور رسیدن به همگرایی - به کار برده می‌شوند. تقریب خطی $\eta(\theta)$ که بر مبنای θ^0 [رابطه ۶-۲]، پایه ریزی شده است. یک تقریب خطی برای بردار باقی مانده $z(\theta)$ ، [رابطه ۷-۲]، تولید می‌کند. در نتیجه یک تقریب درجه دوم $S(\theta)$ برای تابع مجموع مربعات $S(\theta)$ ، به دست می‌دهد، زیرا:

$$\begin{aligned} S(\theta) &= \|y - \eta(\theta)\|^2 \\ &= z(\theta)^T z(\theta) \approx \bar{S}(\theta) \\ &= [z^0 - v^0(\theta - \theta^0)]^T [z^0 - v^0(\theta - \theta^0)] \\ &= z^{0T} z^0 - 2z^{0T} v^0(\theta - \theta^0) + (\theta - \theta^0)^T v^{0T} v^0(\theta - \theta^0) \\ &= S(\theta^0) - 2[y - \eta(\theta^0)]^T v^0(\theta - \theta^0) + (\theta - \theta^0)^T v^{0T} v^0(\theta - \theta^0) \end{aligned} \quad (۱۶-۲)$$

موقعیت حداقل $S(\theta)$ برابر است با:

$$\theta^1 = \theta^0 + (v^{0T} v^0)^{-1} v^{0T} z^0$$

که همان نمونه گوس - نیوتن است.

یادآوری می‌شود که تقریب درجه دوم (۱۶-۲)، یعنی تقریب درجه دوم دنباله تیلور در $S(\theta)$ ، مبتنی بر θ^0 نیست. هسیان موجود در تقریب دنباله‌های تیلور شامل جمله‌ای بیانگر مشتقات نسبی مرتبه دوم تابع الگو، نسبت به پارامتر می‌باشد. (بخش ۳-۵-۱) را ببینید.

خطهای تراز تابع تقریب مجموع مربعات (۱۶-۲) بیضوی‌هایی به مرکز θ^1 و به صورت زیر است:

$$(\theta - \theta^1)^T V^0 T V^0 (\theta - \theta^1) = c$$

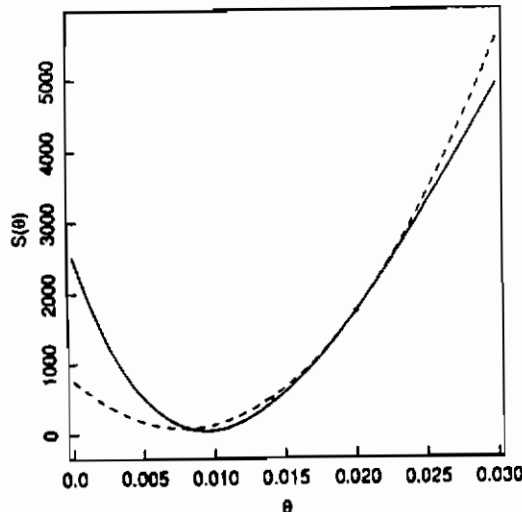
در حالت خاص خط تراز تقریبی مانند زیر است:

$$(\theta - \theta^1)^T V^0 T V^0 (\theta - \theta^1) = z^0 T V^0 (V^0 T V^0)^{-1} V^0 T z^0$$

که این خط از θ^0 می‌گذرد، اگر این خط تراز نزدیک به خط تراز واقعی مجموع مربعات گذرنده از θ^0 باشد، آن‌گاه می‌توان قبول کرد که θ^1 به مقدار بهینه θ نزدیک است.

مثال : رانفورد ۵

در نمودار (۲۱-۲) تابع مجموع مربعات $S(\theta)$ برای داده‌های رانفورد به شکل خط ممتد رسم شده است. همچنین، در نمودار تقریب درجه دوم $\tilde{S}(\theta)$ - که از تقریب دنباله‌های خطی تیلور بر تابع انتظار در $\theta^0 = 0.02$ به دست آمده - به صورت خط - فاصله رسم شده است.

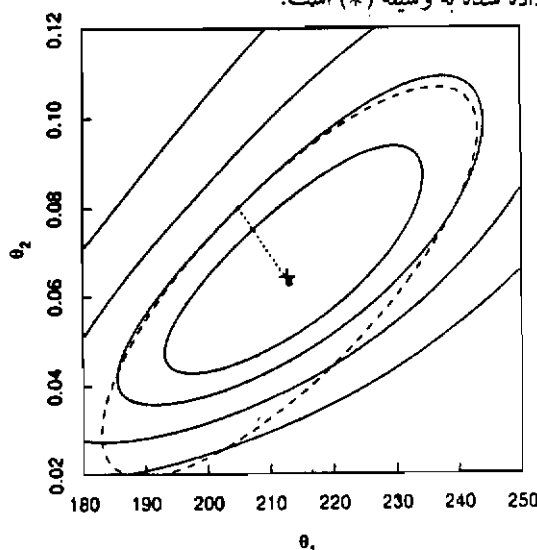


نمودار ۲۱-۲. تابع مجموع مربعات برای داده‌های رانفورد. منحنی واقعی مجموع مربعات به صورت خط ممتد و سهمی حاصل از تقریب خطی در $\theta^0 = 0.02$ به صورت خط فاصله نشان داده شده است.

امتحان دقیقی از $S(\theta)$ نشان می‌دهد که یک سهمی نیست. ولی متقارن بوده و صعودی تیزتر در چپ نقطه کمینه، نسبت به راست آن دارد. نزدیکی $S(\theta)$ به سهمی نشان دهنده درجه پایین اهمیت غیرخطی بودن الگو در این مجموعه داده‌ها است. کمینه این سهمی تقریبی در نقطه $0/008$ قرار دارد. از این رو نمو گوس - نیوتن عبارت است از: $0/012 - 0/02 = 0/008$

مثال : پروماین ۹

در نمودار (۲۲-۲) خطهای تراز مجموع مربعات $S(\theta)$ را برای داده‌های پروماین به شکل خطهای ممتد و موقعیت کمینه را به صورت (+) نشان داده‌ایم. همچنین، خط فاصله نشان دهنده بیضوی حاصل از تقریب خطی تابع انتظار در $\theta^0 = (205, 0/08)^T$ است. تقریب سهمی مانند دارای انحنای مقدار مشترک با رویه حقیقی مجموع مربعات در θ^0 است. بنابراین، موقعیت کمینه سهمی مانند با علامت (*) نشان داده شده، که به عنوان کمینه رویه واقعی مجموع مربعات تلقی می‌شود. از این رو نمو گوسی، برداری است که ابتدای آن θ^0 و انتهایش نقطه نشان داده شده به وسیله (*) است.



نمودار ۲۲-۲. خطهای تراز مجموع مربعات داده‌های پروماین. خطهای تراز واقعی مجموع مربعات با خطهای ممتد و خط تراز بیضوی تقریب حاصل از تقریب خطی در $\theta^0 = (205, 0/08)$ ، به شکل خط - فاصله نشان داده شده است. موقعیت کمینه مجموع مربعات (+) و مرکز بیضی (*) نیز نشان داده شده‌اند. خط چین، نمو گوس - نیوتن است.

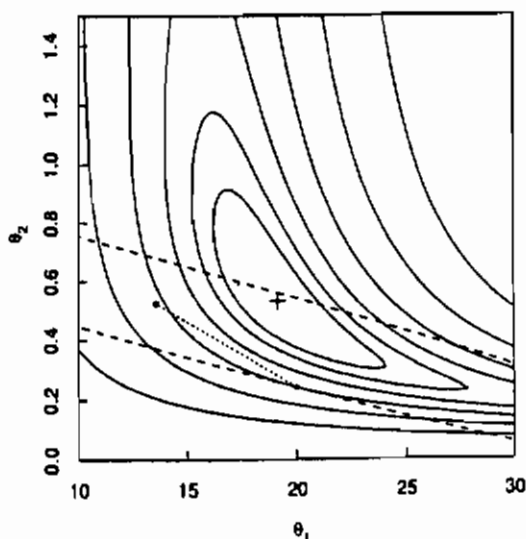
چون الگوی ترکیب مجموعه داده‌ها به شکل بدی غیر خطی نیست، در نتیجه خطهای تراز مجموع مربعات

به طور کامل بیضوی است و نقطه کمینه سهمی مانند تقریبی، نزدیک کمینه رویه واقعی مجموع مربعات قرار دارد.

مثال ۲: BOD

در نمودار (۲-۲۳) خطهای تراز مجموع مربعات $S(\theta)$ را برای داده‌های BOD به صورت خطهای ممتد رسم کرده و موقعیت نقطه کمینه را با علامت (+) نشان داده‌ایم. همچنین، قسمی از بیضی حاصل از تقریب خطی تابع انتظار در $\theta^0 = (20, 0.24)^T$ ، نیز به صورت خط فاصله نشان داده شده و مرکز این بیضی به وسیله (*) مشخص شده است.

در این مثال، بیضی یک تقریب ضعیف برای منحنی تراز واقعی است. مرکز بیضی نزدیک به نقطه کمینه واقعی رویه مجموع مربعات نیست از اینرو مقدار واقعی مجموع مربعات بزرگتر از مقدار آن در θ^0 است.



نمودار ۲-۲۳. منحنی‌ها تراز مجموع مربعات داده‌های BOD. منحنی‌های واقعی مجموع مربعات به صورت خطهای ممتد و قسمی از منحنی تراز تقریب بیضی حاصل از تقریب خطی در $\theta^0 = (20, 0.24)^T$ ، به صورت خط - فاصله نشان داده شده است. موقعیت کمینه مجموع مربعات (+) و مرکز بیضی (*) نیز نشان داده شده است. خط چین، نمودار گوس، نیوتن است.

۲-۴-۲- پیشی گرفتن

آخرین تکرار، از موقعیت به ظاهر کمینه رویه مجموع مربعات حاصل، به دست آمده است.

زیرا، $S(\theta^1)$ کمتر از $S(\theta^0)$ است. در مثال‌ها رانفورد و پرومیسین به علت ملایم بودن رفتار غیر خطی، مجموع مربعات θ^1 کمتر از مقدار آن در θ^0 است. در نتیجه می‌توان از تکرار θ^1 پیشی گرفت. چون در مثال BOD ، مجموع مربعات در θ^1 بزرگتر از مقدار آن در θ^0 است، بنابراین، از کمینه تجاوز کرده‌ایم. با همکاری عامل مرحله‌ای، به شرطی که فقط کسری از نمو را به کار بریم، می‌توانیم نقطه‌ای با مجموع مربعات کوچکتر را پیدا کنیم [این مطلب در بخش (۲-۱) شرح داده شده است].

۲-۵- کاربرد تقریب خطی

در این فصل تقریب خطی را به دو شکل و به شرح زیر به کار بسته‌ایم:

(۱) به دست آوردن نمو گوس - نیوتن.

(۲) به دست آوردن نواحی استنباط تقریب خطی.

در حالت (۱) تقریب خطی مفید است، زیرا می‌توان نمو تولید شده را با مقایسه $S(\theta^0 + \delta^0)$ و $S(\theta^0)$ ، بررسی کرد. اگر مجموع مربعات زیاد شود، نمو را با عامل مرحله‌ای پیرایش می‌کنیم. بنابراین، عمل تقریب در هر تکرار به هنگام می‌شود.

در حالت (۲) تقریب خطی، نواحی استنباط را که به راحتی قابل محاسبه است، فراهم می‌کند و آن را برای هر تعداد پارامتری ارائه می‌دهد. هر چند نواحی فقط بر یک تقریب (در $\hat{\theta}$) پایه ریزی شده‌اند و ما نمی‌توانیم به سادگی کفایت آنها را بررسی کنیم.

برای گسترش این که کفایت نواحی تقریب نمایش دهنده نواحی مقادیر معقول پارامتر است، می‌توان از محاسبه کفایت تقریب خطی تابع انتظار کمک گرفت. در بخش دوم قسمت (۲-۲) مشاهده شد که تقریب خطی دارای دو مؤلفه جداس است. فرض مسطح بودن بیانگر این است که رویه انتظار توسط صفحه مماسی تقریب می‌شود و فرض یکنواخت بودن مختصات نیز بیان می‌کند که دستگاه مختصات پارامتر واقعی، توسط دستگاهی یکنواخت تقریب می‌شود. هر دوی این جنبه‌ها در کفایت تقریب استنباط مؤثراند. در فصل ششم بحث مفصلی در این زمینه انجام گرفته است. در آن جا روش‌های درست نمائی نیمرخی را برای محاسبه و نمایش نواحی استنباط دقیقتری، ارائه کرده‌ایم. همچنین در فصل هفتم، روشهایی را برای اندازه‌گیری غیر خطی بودن، بیان کرده‌ایم.

شایان توجه است بدانیم که نواحی تقریب خطی، می‌توانند بسیار گمراه‌کننده باشند.

تمرین :

۱-۲. زیر برنامه رایانه‌ای، برای تشکیل کمترین مربعات، به روش گوس - نیوتن بنویسید.

تابع را انتخاب کرده، مشتقات آن را نسبت به پارامترها حساب نموده و مقادیر اولیه را به عنوان ورودی زیر برنامه بپذیرد. در صورت لزوم شبه برنامه پیوست سه بخش (۱-۳-۴) را به عنوان راهنما به کار برید.

۲-۲. یک زیر برنامه کمترین مربعات غیر خطی را برای برازش الگویی به شکل $\beta_1 + \beta_2(\text{age})^\alpha$ بردارهای $\ln(PCB)$ به کار برید. از مقادیر اولیه $\alpha = 0.33$ و $\beta_1 = 0.2$ و $\beta_2 = 0.4$ استفاده نمائید. (برآوردهای کمترین مربعات β_1 و β_2 برای $\alpha = 0.33$ از مثال ۲-۳-۲).

۳-۲. الف) رویه انتظار الگوی رانفورد را رسم کنید، ماتریس طرح $X = (7028)^T$ را به کار ببرید. نقاط متناظر با مقادیر $\theta = 0, 0.1, \dots, 0.9, 1, 2, \dots, \infty$ ، واقع بر رویه انتظار را مشخص کنید. این رویه انتظار را با رویه‌ای که بر مبنای $X = (4041)^T$ در نمودار (۳-۲) رسم شده است، مقایسه نمایید. کدام طرح طبیعت غیر خطی کمتری دارد؟ کدام طرح تأثیرات غیر خطی کمتری از پارامتر را داراست؟

ب) رویه انتظار برای الگوی رانفورد را با کاربرد ماتریس طرح $X = (1204)^T$ رسم کنید. نقاط متناظر با مقادیر $\theta = 0, 0.1, \dots, 0.9, 1, 2, \dots, \infty$ ، واقع بر رویه انتظار را مشخص نمایید. این رویه انتظار را با رویه‌ای که بر مبنای $X = (4041)^T$ در نمودار (۳-۲) رسم شده است، مقایسه کنید. کدام طرح طبیعت غیر خطی کمتری دارد؟ کدام طرح تأثیرات غیر خطی کمتری از پارامتر را دارد؟

ج) چه نوع طرحی، غیر خطی بودن ذاتی صفر را در هر جایی دارد؟ چرا؟

د) آیا طرح بند (ج) تأثیر غیر خطی صفر را بر پارامتر دارد؟ چرا؟

۴-۲. الف) رویه انتظار را برای الگوی خطی $\ln(PCB) = \beta \ln(\text{age})$ ، برای سنهای ۱۰، ۵، رسم کنید. نقاط متناظر با ۳ و ۲ و ۱ و ۰ $\beta =$ واقع بر رویه را، مشخص نمایید.

ب) این رویه انتظار و خواصش را، با رویه الگوی غیر خطی رانفورد - نشان داده شده در نمودار (۳-۲) - مقایسه کنید.

ج) این رویه انتظار و خواصش را با رویه الگوی غیر خطی رانفورد - رسم شده در مثال (۳-۲)، مقایسه کنید.

۵-۲. الف) بردار انتظار، بردار باقی مانده، مجموع مربعات $S(\theta^0)$ و ماتریسهای مشتق V° برای داده‌های الگوی پیوست شماره چهار، بخش (۱-۴-۴) را با مقادیر اولیه $\theta^0 = (2/20, 0/26)^T$ را تولید کنید.

ب) نمو δ^0 و $S(\theta^1)$ را به کمک $\theta^1 = \theta^0 + \lambda \delta^0$ ، برای $\lambda = 0.25$ و 0.5 حساب کنید. آیا عامل مرحله ایی کمتر از یک در این جا لازم است؟

۶-۲ الف) به کمک این حقیقت که برای الگوی مسأله (۵-۲)، θ_1 خطی شرطی است. منحنی‌های تراز دقیق مجموع مربعات را برای داده‌های پیوست شماره چهار، بخش (۱-۴-۴)، رسم کنید. (به این صورت که برای هر مقدار خاص θ_2 ، امکان به کارگیری کمترین مربعات به منظور به دست آوردن برآورد شرطی $\bar{\theta}_1$ و محاسبه مقادیری از θ_1 ، که مجموع مربعات خاصی را تولید می‌کند، وجود دارد. با اختصاص مجموع مربعات متناظر با مقادیر منحنی تراز امکان ایجاد، مختصات دقیق نقاط واقع بر منحنی تراز وجود دارد.) به فرض، θ_2 از $0/12$ تا $0/3$ تغییر کند. با گام‌های $0/01$ و کاربرد مقادیر منحنی‌های تراز متناظر با سطوح اطمینان ۵۰ و ۷۵ و ۹۵ درصد، موقعیت کمینه را در روی شکل مشخص کنید.

ب) این منحنی تراز را با منحنی‌های نمودار (۲۳-۲) مقایسه کنید. کدام مجموعه داده‌ها، بیشترین اجازه را در غیر خطی بودن می‌دهد؟

ج) چون داده‌ها از یک نوع آزمایش و با الگویی مشابه گرفته شده‌اند، این تفاوت، چگونه قابل ارائه است؟

۷-۲ نقاط متناظر با θ^0 و δ^0 مسأله (۵-۲) را روی منحنی تراز مسأله (۶-۲) رسم نمایید. نقاط متناظر یا مقادیر $0/75$ و $0/50$ و $0/25$ λ مربوط به بردار θ^0 را مشخص کنید. آیا به عامل مرحله‌ای کمتر از یک نیاز است؟

۸-۲ الف) با کاربرد داده‌های الگو و مقادیر شروع مسأله (۵-۲) در یک زیر برنامه برآورد غیر خطی، برآوردهای کمترین مربعات پارامتر را به دست آورید.

ب) ناحیه‌های استنباط توأم و حاشیه‌ای تقریب خطی مسأله (۶-۲) را محاسبه و رسم نمایید.

ج) آیا ناحیه‌های استنباط تقریب خطی در این مرحله دقیق است؟

فصل سوم

ملاحظات عملی در رگرسیون غیر خطی

با استدلال و اطمینان می‌توانم ادعا کنم که ارزش تجربه بیشتر از نظریه است.

آریکو و سپوئس

روشهایی برآورد غیر خطی نیز مانند همه روشهای تحلیلی مستلزم ملاحظات عملی است. در این فصل، روشهایی را که به طور مؤثر در موفقیت یک رگرسیون غیر خطی نقش دارند، مورد بحث قرار می‌دهیم. رهوس مطالب عبارت‌اند از: شناخت الگو، تحلیل‌های اولیه، محاسبه مقادیر آغازین، تبدیل پارامترها و متغیرها، چهره‌های دیگر تکرارها، همگرایی، ارزیابی برازش و پیرایش الگوها، باقی‌مانده‌های وابسته، داده‌های تجمعی، مقایسه الگوها و پارامترها به عنوان تابعی از سایر متغیرها و ارائه نتایج است.

یک مثال عملی - که تعدادی از روشهای معرفی شده این فصل در آن به کار برده شده است - در بخش (۳-۱۳) ارائه خواهد شد. مسأله کاربردی طرح آزمایشها برای الگوهای غیر خطی در بخش پایانی مورد بحث قرار گرفته است.

۳-۱- شناخت الگو

یکی از قدمهای مهم هر تحلیل غیر خطی، شناخت الگو است، که «مشخص کردن تابع انتظار» و «مشخصه‌های خطا» را شامل است.

۳-۱-۱- تابع انتظار

ملاحظات عقلی، فیزیکی، بیولوژیکی، شیمیایی و یا هر نظریه دیگر، ما را به یک الگوی مکانیکی برای تابع انتظار راهنمایی می‌کند. آن گاه وظیفه تحلیلگران، پیدا کردن ساده‌ترین شکل الگو و برآورد پارامترها است به طوری که با در نظر گرفتن فرضیات مربوط به خطاها، الگو برازش کافی بر داده‌ها داشته باشد. باید دانست که لزومی ندارد تابع انتظار به طور یقین به صورت تابعی ضمنی از پارامترها و متغیرهای نظارتی باشد. در فصل پنجم، رده‌ای از الگوها به نام، الگوهای سازگار - که در آنها، پاسخ مورد انتظار به صورت جواب مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیل خطی است - مورد بحث قرار خواهد گرفت. روشهای ویژه‌ای در آن بخش گسترش داده شده که می‌توان از حل ضمنی تابع انتظار - که بر حسب پارامترها و متغیرهای مستقل ارائه شده‌اند - خودداری کرد.

در سایر شرایط ممکن است تابع انتظار، جواب یک دسته معادله‌های دیفرانسیل غیرخطی یا یک معادله انتگرالی بدون حل تحلیلی باشد. بنابراین باید مقدار تابع انتظار برای هر مقدار داده شده پارامتر - که توسط یک برنامه کمترین مربعات غیر خطی منظم اجرا می‌شود - به شیوه عددی محاسبه شود. در چنین شرایطی، مشتقات عددی پارامتر، یا روش بهینه سازی مشتق - آزاد، که اغلب برای برآورد کمترین مربعات به کار می‌رود، قابل استفاده است. با این وجود، همان گونه که در کاراکونتیوس و استوارت (۱۹۸۵)، بحث شده است، هنگامی که یک تابع انتظار از حل مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیل معمولی حاصل می‌شود، مشتقات پارامتر تابع انتظار می‌تواند از توابع حساسیت دستگاه معادلات دیفرانسیل به دست آید. این توابع به طور همزمان و به شکل عددی، به عنوان جواب معادلات دیفرانسیل قابل محاسبه‌اند.

مثال : الف - پینن ۱

تجزیه آلفا - پینن، توسط فوگیت و هاوکینز (۱۹۴۷ و ۱۹۴۵) مطرح شده است. آنان، غلظت پنج واکنش را به وسیله تابعی از زمان و به عنوان دنباله‌هایی از درجه حرارت و واکنش، گزارش کرده‌اند. در پیوست شماره یک، بخش ۶-۴۱، داده‌های اجرا شده در ۱۸۹/۵ درجه سانتی گراد ارائه شده است. داده‌های مزبور را در فصل‌های چهارم و پنجم مورد بررسی قرار داده و الگویی که توسط مجموعه‌ای از

معادلات دیفرانسیل مشخص شده است، بر آنها برازش داده ایم. بر اساس بحث فصل پنجم، پارامترهای چنین الگویی به سادگی قابل برآورد هستند. زیرا، آنها به سادگی شناخته می شوند و پاسخ ها و مشتقات نسبت به پارامتر به آسانی قابل ارزیابی است. همچنین، همان گونه که در فصل پنجم نشان داده شده، الگوی دیفرانسیل خطی نمی تواند برازش خوبی بر داده های آلفا-پنین داشته باشد.

استوارت و سورنسن، (۱۹۸۱) داده های کامل فوگیت و هاوکینز (۱۹۴۷ و ۱۹۴۵)، را تحلیل کرده و الگویی شامل مجموعه معادله دیفرانسیل غیر خطی زیر را در نظر گرفته اند.

$$\frac{df_1}{dt} = -(\theta_1 + \theta_2)f_1 - 2\theta_3f_1^2$$

$$\frac{df_2}{dt} = -\theta_4f_2 + \theta_5f_4$$

$$\frac{df_3}{dt} = \theta_1f_1$$

$$\frac{df_4}{dt} = \theta_2f_1 + \theta_4f_2 - \theta_5f_4 - 2\theta_6f_4^2 + 2\theta_7f_3$$

$$\frac{df_5}{dt} = \theta_8f_1^2 + \theta_6f_4^2 - \theta_7f_3$$

در این جا f_i ، $i=1, \dots, 5$ نشان دهنده پاسخ نظری در زمان t است.

راه حل تحلیلی برای این مجموعه معادلات دیفرانسیل وجود ندارد. بنابراین باید روش های عددی را به کار بست. برای مقادیر داده شده $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_8)^T$ با به کارگیری زیر برنامه تابع اولیه گیری رانگ-کوتا، معادلات دیفرانسیل به طور عددی قابل حل هستند. برآورد عددی پاسخ ها، $f(t)$ و پاسخ های مشاهده شده $y(t)$ در طول آزمایش می توانند برای محاسبه باقی مانده های ناشی از معیار برآورد مورد نظر به کار روند.

در فصل چهارم انتخاب معیار برآورد برای پاسخ های چند گانه داده ها، مورد بحث قرار گرفته است. روش به دست آوردن مستقات توابع پاسخ در زمان مشاهده، با عنوان «توابع حساسیت» در کار کوسیوس و استوارت (۱۹۸۵) به قرار زیر اند:

$$\frac{\partial f_i(t)}{\partial \theta_p} \quad i=1, \dots, 5 \quad p=1, \dots, P$$

در نتیجه ماتریس مشتق V از توابع حساسیت قابل محاسبه است. در شرایطی دیگر، ممکن است یک روش مکانیکی توسط پژوهشگر ترجیح داده نشود. در این حالت باید آماردان معادله ای را ارائه دهد؛ یک راه رسیدن به این معادله تحقیق در تألیفات انجام شده و این که آیا الگویی در نظر گرفته شده است یا خیر؟ اگر جواب منفی باشد، باید آماردان و پژوهشگر مهارت های خود را به کار بسته و الگوی مکانیکی مناسبی را ارائه دهد. اگر چنین عملی هم امکان پذیر نشد، باید آماردان الگویی که رفتاری شبیه رفتار داده ها دارد، عرضه کند.

اگر داده‌ها به طور یکنواخت به مجانبی میل کنند شاید یک الگوی نمایی صعودی میشلیز - متن ، یا الگوی لوجستیک مناسب باشد. اگر داده‌ها به نقطه اوجی برسند و سپس به سمت صفر نزول کنند، شاید یک الگوی دو نمایی میشلیز - متن با جمله درجه دوم در مخرج یا تابع گاما مناسب باشد.

سرانجام، اگر چند مجموعه داده‌ها در دسترس باشند. امکان کاربرد روش خود - الگویی لاتون، سیلوستر و ماگیو (۱۹۷۲) وجود دارد. این روش در الگوپذیری منحنی‌های تنفس‌سنجی بکار رفته است. این الگو مقدار هوای خارج شده از شش‌ها را بصورت تابعی از زمان، برای تعدادی موضوع و الگو - در ایجاد سطح سرم فوسفوکیناس وابسته به بیمارانی که از نقص جدار قلبشان رنج می‌برند - را ارائه می‌کند (آمستردانگ و دیگران، ۱۹۷۹).

۳-۱-۲- جمله خطا

کلیه برنامه‌های برآورد غیر خطی بر فرضیات ویژه‌ای در مورد جمله خطا بنا شده است. به طور معمول خطاها، جمعی با توزیع نرمال، دارای میانگین صفر و واریانس پایا و مستقل در میان موردها (بخش ۱-۳) را ببینید) فرض می‌شوند. بررسی فرضیات در جمله خطا به طور نسبی ساده و خیلی حساس است. به شرط آن که داده‌ها در قسمتی یا تمام نقاط طرح تکرار شده باشند.

همچنین، تصادفی کردن انجام آزمایش نیز سودمند است. زیرا، تعدادی از آزمایشات غیر خطی شامل اندازه‌گیریهای پی در پی از پاسخ هستند. از این رو ممکن است تصادفی کردن امکان‌پذیر نباشد.

در مرحله ابتدایی، معمولاً فقط فرض پایایی واریانس قابل بررسی است. در صورت وجود تکرار، می‌توان به راحتی داده‌ها را رسم کرد و تمایل صعودی یا نزولی بودن نظام دار داده‌ها را نسبت به هر یک از متغیرهای مستقل ملاحظه کرد. همچنین می‌توان برنامه تجزیه واریانس را برای به دست آوردن میانگین‌ها، واریانس‌ها و انحراف معیارهای برآورد شده برای پاسخ‌های تکراری به دست آورد، سپس رسم واریانس‌ها، یا انحراف معیارها در مقابل میانگین‌ها و ملاحظه دوباره، برای یافتن همبستگی نظام داری مطابق بحث بخش ۱-۳) به کار بست. اگر هیچ کدام مشخص نکردند، آن‌گاه امکان دارد به طور تجربی فرض شود که، پراش پایا بوده و سپس اقدام به تحلیل نمود. اگر همبستگی وجود داشته باشد، آن‌گاه اغلب یک تبدیل ساده‌توانی مانند ریشه دوم، لگاریتم و یا وارون، واریانس را پایانه می‌دارد. حتی بدون تکرارها، پاره‌ای از ملاحظات چشمی و به کمک رسم، پایایی واریانس قابل دست‌یابی است. ولی این روش به خوبی تکرارها - هنگامی که قابل دسترسی اند - نیست.

یادآوری می‌شود که تبدیل داده‌ها، شامل تبدیل در تابع انتظار نیز هست. از این رو اگر یک تابع انتظار خوش تعریف، برای پاسخ وجود داشته و باید داده‌ها را برای ایجاد واریانس پایا تبدیل نمود، آن‌گاه، باید

تبدیل یکسانی بر تابع انتظار نیز اعمال شود تا اساس همبستگی تغییر نکند. [به عنوان مثال، بخش (۹-۳) را ببینید.] این مطلب به طور کامل در کارول و راپرت (۱۹۸۴) ارائه شده است. در این مرجع، تبدیل باکس - کاکس [بخش (۲-۳-۱) را ببینید.] بر پاسخ‌های مشاهده‌ای و پاسخ‌های مورد انتظار انجام پذیرفته است. مقدار λ برای هر دو مورد یکسان انتخاب و مقدار بهینه λ توسط حداکثر درست نهایی محاسبه شده است. همچنین می‌توان، کمترین مربعاتی وزن‌دار را (دراپرواسمیت ۱۹۸۱) در صورتی که تصمیم معقولی در چگونگی تغییر واریانس نسبت به پاسخ وجود داشته باشد، به کار بست.

بعد از برازش الگو، ترتیب دادن بازرسی‌های بیشتری در فرضیات خطا، توسط آزمایش باقی‌مانده‌ها - که در بخش‌های (۳-۱) و (۷-۳) و (۸-۳) ارائه شده‌اند - امکان‌پذیر است. همچنین امکان بررسی کفایت الگو و مقایسه الگوهای مشابه، مطابق بحث بخش (۱۰-۳) وجود دارد.

۳-۲- تجزیه و تحلیل‌های مقدماتی

برای انتخاب تابع انتظار مناسب (یا مجموعه‌ای از توابع انتظار ممکن) و تبدیلی در داده‌ها (در صورت لزوم بر تابع انتظار)، نیازمند به تهیه برنامه رایانه‌ای است که شکلهای مختلفی از تابع انتظار را بررسی کند، یا حتی نیازمند به مشتقات عددی، یا روشهای مشتق - آزاد، هستیم. این مشتقات باید نسبت به پارامترها باشند. به طور طبیعی، تابع انتظار و مشتقات، باید درست تعریف شوند و درست کدگذاری شوند. ولی همان گونه که بیشتر تحلیل گران خطی از آزمایشات می‌دانند، تعداد زیادی خطا در این مرحله رخ می‌دهد. یکی از راههای اطمینان بخش برای درک این که آیا تابع درست تعریف شده و به طور صحیح کدگذاری شده است. یا خیر، به کارگیری برنامه‌های جداگانه، یا حتی یک ماشین حساب، برای ارزیابی تابع، در یک یا دو نقطه جدا از هم طرح و مقایسه آنان با مقادیر حاصل از زیر برنامه برآورد و غیر خطی است. روش مشابهی را نیز می‌توان برای مشتقات به کاربرد. شایان ذکر است که شیوه بهتر، مقایسه مقدار تحلیلی مشتق با مقدار حاصل از زیر برنامه مشتق‌گیری عددی به روش تفاضلات متناهی است (بخش ۳-۵-۳ را ببینید). این مقایسه‌ها بر مبنای خطای نسبی موجود میان مشتقات محاسبه شده به دو روش است. هرگاه v_{np} مشتق تحلیلی برای حالت β و پارامتر P و \bar{v}_{np} تقریب تفاضلهای متناهی باشد، آن گاه خطای نسبی، برابر است با:

$$\frac{|v_{np} - \bar{v}_{np}|}{|v_{np}|} \quad \text{if } v_{np} \neq 0$$

$$|v_{np} - \bar{v}_{np}| \quad \text{if } v_{np} = 0$$

تحقیق در کوچک بودن خطای نسبی، نه تنها واریسی مشتقات است، بلکه به طور غیر مستقیم واریسی تابع

انتظار نیز هست. زیرا، اختلاف بین مشتقات عددی و تحلیلی، مربوط به تعریف نادرست، یا کدگذاری نادرست تابع انتظار یا هر دوی آنهاست.

هنگام کدگذاری تابع، به ویژه در هنگام به دست آوردن و کدگذاری مشتقها، پیشنهاد می شود که متغیرهای اضطراری و قاعده زنجیری را برای مشتق، همانند مثال زیر به کار بست. این کمک ها خطاهای جبری را - که در هنگام تبدیل تابع به شکل ساده ترش پیدا می شود - از بین می برد.

مثال : هم ترکیبی ۲

برای داده های هم ترکیبی، از مثال هم ترکیبی ۱، تابع زیر در نظر گرفته می شود:

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 \theta_3 (x_2 - x_3 / 1.632)}{1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_3}$$

در برنامه رایانه ای تابع و مشتقات آن، فرض کنید متغیرهای x_1, x_2, x_3 به شکل $X(1), X(2), X(3)$ و پارامترهای به شکل $THETA(1), THETA(2), THETA(3), THETA(4)$ مشخص شده باشند. حال می توانیم تابع را به سادگی و به دقت توسط معرفی متغیرهای ظاهری بنویسیم.

$$\begin{aligned} \text{NUMX} &= X(2) - X(3) / 1.632 \\ \text{DENOM} &= 1.0 + \text{THETA}(2) * X(1) + \text{THETA}(3) * X(2) \\ &\quad + \text{THETA}(4) * X(3) \\ \text{RATIO} &= \text{NUMX} / \text{DENOM} \end{aligned}$$

بنابراین تابع به شکل زیر تبدیل می شود:

$$F = \text{THETA}(1) * \text{THETA}(3) * \text{RATIO}$$

اکنون متغیر ظاهری زیر را معرفی می کنیم:

$$FD = - F / \text{DENOM}$$

در نتیجه مشتق به شکل زیر در می آید $\left(\frac{\partial f}{\partial \theta_1} \right)$ را به شکل F_1 ... نشان داده ایم.)

$$\begin{aligned} F1 &= \text{THETA}(3) * \text{RATIO} \\ F2 &= FD * X(1) \\ F3 &= \text{THETA}(1) * \text{RATIO} + FD * X(2) \\ F4 &= FD * X(3) \end{aligned}$$

معمولاً بررسی درستی انتقال داده ها به رایانه بسیار مهم است. بنابراین، باید مطمئن شد که آیا مقادیر عددی پاسخ و متغیرهای مستقل به طور صحیح وارد رایانه شده اند یا خیر؟ شاید مؤثرترین راه بازرسی، رسم پاسخ در مقابل هر متغیر مستقل است. در این صورت می توان مطمئن شد که رفتار پاسخ نسبت به هر متغیر مستقل مطابق واقع هست یا خیر؟

۳-۳-۳- مقادیر آغازین

یکی از بهترین چیزها که ما را در تحلیل موفقیت آمیز غیر خطی مطمئن می‌سازد، به دست آوردن مقادیر آغازین خوب برای پارامتر به منظور افزایش سرعت همگرایی است.

چند اصل ساده ولی مفید برای محاسبه مقادیر آغازین، عبارت اند از:

- (۱) تفسیر رفتار تابع انتظار برحسب پارامتر به شیوه تحلیلی یا نموداری.
- (۲) تفسیر رفتار مشتقات تابع انتظار برحسب پارامترها، به شیوه تحلیلی یا نموداری.
- (۳) تبدیل تحلیلی یا نموداری تابع انتظار، برای به دست آوردن رفتاری ساده و خطی‌تر.
- (۴) کاهش ابعاد، توسط جاگذاری مقادیر برخی از پارامترها یا محاسبه تابع بازاء مقادیر طرحی خاص.
- (۵) کاربرد خطی بودن شرطی.

هریک از شیوه‌های بالا را به نوبت مورد بحث قرار می‌دهیم و آنها را با مثال ویژه‌ای بررسی خواهیم کرد (برای اطلاع بیشتر در به دست آوردن مقادیر آغازین، را تگوسکی (۱۹۸۳) را ببینید).

۳-۳-۱- تفسیر رفتار تابع انتظار

یکی از فواید رگرسیون غیر خطی این است که، پارامترها در تابع انتظار، اغلب برای دانشمندان یا پژوهشگران روشن و با معنی است. این ویژگی می‌تواند به صورت نموداری، فیزیکی، بیولوژیکی یا شکلهای دیگری خود نمایی کند، که برای تفسیر مقادیر آغازین بسیار مفید است. ممکن است برآورد آغازین تعدادی از پارامترها از آزمایش مربوط قابل دست یابی باشد. همچنین، رسم یک تابع انتظار غیر خطی با کاربرد مقادیر متفاوت برای پارامترها، یک تمرین بسیار سودمند است. زیرا، با انجام این عمل با تابع و چگونگی تأثیر پارامتر در رفتارش آشنا می‌شویم.

گاهی مقادیر آغازین از طریق بررسی رفتار در نزدیک مبدأ یا مقادیر طرح خاصی قابل دست یابی است. برای مثال، اگر فرض کنید: $x = \theta$ ، مقدار آغازین $\theta_1 + \theta_2$ برای الگوی $f(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 e^{-\theta_3 x}$ به دست می‌آید و اگر $x \rightarrow \infty$ میل کند، مقدار مجانبی θ_1 (به فرض $\theta_3 > 0$) به دست می‌آید.

مثال: پروماینسین ۹

در تابع انتظار میشلیز - منتن، $f = \theta_1 x / (\theta_2 + x)$ ، پارامتر θ_1 سرعت مجانبی واکنش آنزیم است. بنابراین می‌تواند توسط بزرگترین مقدار داده‌ها، (v_{\max}) یا توسط بررسی چشمی نمودار، برآورد شود. از نظر نموداری نشان دهنده مقدار مجانبی f در حالت $x \rightarrow \infty$ است. همچنین، θ_2 نشان دهنده نیمه غلظت است. یعنی: مقدار x

هنگامی که پس از رسیدن به سرعت به نصف مقادیر نهایی غلظتش، حاصل می‌شود. برای داده‌های پرومیسین، $y_{\max} = 2.7$ ، مقدار آغازین خوبی برای θ_1 است. از رسم داده‌ها (شکل ۱-۲) یا به طور ساده‌تر از قرائت آنها می‌توان دید، که سرعت مشاهده‌ای در غلظتی در حدود $0.6/0$ به $\frac{1}{4}y_{\max}$ می‌رسد. بنابراین مقدار مزبور می‌تواند به عنوان مقداری آغازین برای θ_2 به کار رود.

۳-۳-۲- تفسیر مشتقات تابع انتظار

گاهی در مقادیر طرح خاصی، نرخ تغییرات تابع، می‌تواند برای به دست آوردن برآورد آغازین به کار رود، برای مثال، مشتق نسبت به x در الگوی میشلیز - منتن در $x=0$ برابر با θ_1/θ_2 است. بنابراین با برآورد نرخ در $x=0$ ، از نسبت تفاضلهای مقادیر y پیرایشی، بر تفاضلهای مقادیر x پیرایشی و تقسیم این نسبت بر y_{\max} ، می‌توان مقدار آغازینی برای θ_2 به دست آورد. برای داده‌های پرومیسین $\theta_2 = 2.7 / (0.6 / 0.25) = 0.68/0$ ، پیدا می‌شود.

به طور مشابه مشتق در مقادیر خاصی از x ، از قبیل نقاط حدی یا عطف قابل کاربرد است. به عنوان مثال، برای الگوهای دو نمایی زیر،

$$f = \theta_1 e^{-\theta_2 x} + \theta_3 e^{-\theta_4 x}$$

با فرض $\theta_2 > \theta_4$ ، رفتارهای تابع برای مقادیر بزرگ x ، شبیه الگوی نمایی ماده $\theta_3 e^{-\theta_4 x}$ و برای مقادیر کوچک x شبیه الگوی $\theta_1 e^{-\theta_2 x} + \theta_3$ است. بنابراین نرخ تغییر در x های کوچک، به عنوان برآوردی از θ_2 و برای مقادیر بزرگ x ، برآوردی از θ_4 در نظر گرفته می‌شود.

۳-۳-۳- تبدیل تابع انتظار

تبدیل‌های تابع انتظار، بیشتر برای به دست آوردن مقادیر آغازین قابل کاربرد است. برای مثال در الگوی میشلیز - منتن، که مخرج آن خطی یا درجه دوم است، به سادگی با وارون نمودن تابع، الگوی خطی حاصل می‌شود. می‌توان، کمترین مربعات خطی را بر داده‌های وارون شده اعمال کرد و به این ترتیب پارامترهای خطی الگوی جدید را برآورد نمود تا بتوانیم آنها را در محاسبه مقادیر آغازین θ به کار ببندیم. الگوی مثال هم ترکیبی به صورت زیر است:

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 \theta_3 (x_2 - x_3 / 1.632)}{1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_3}$$

این الگو را می‌توان به شرح زیر به خطی تبدیل کرد:

$$\frac{x_2 - x_3 / 1.632}{f(x, \theta)} = \frac{1}{\theta_1 \theta_3} + \frac{\theta_2}{\theta_1 \theta_3} x_1 + \frac{1}{\theta_1} x_2 + \frac{\theta_4}{\theta_1 \theta_3} x_3$$

این الگوی رگرسیون خطی (با جمله ثابت) از $y = (x_2 - x_3 / 1.632) / \theta_1$ روی x_1, x_2, x_3 است و می‌تواند مقادیر آغازی زیر را داشته باشد:

$$\theta_1^0 = \frac{1}{\hat{\beta}_2} \quad \theta_2^0 = \frac{\hat{\beta}_1}{\hat{\beta}_0} \quad \theta_3^0 = \frac{\hat{\beta}_2}{\hat{\beta}_0} \quad \theta_4^0 = \frac{\hat{\beta}_3}{\hat{\beta}_0}$$

برای الگوی $f(x, \theta) = \exp[-\theta_1 x_1] \exp(-\theta_2 x_2)$ که در یک مثال شیمیایی به کار رفته (بارد، ۱۹۷۴ صفحه ۱۲۴) با دوبار لگاریتم‌گیری سروکار داریم. در نتیجه:

$$\ln \ln f = \ln x_1 + \ln(-\theta_1) - \frac{\theta_2}{x_2}$$

حال می‌توان کمترین مربعات خطی را برای دست‌یابی به مقادیر آغازین به کار برد.

تبدیل به شیوه نموداری نیز بسیار مؤثر است. اغلب، رسم f در مقابل x ، در کاغذ نیمه لگاریتمی، یا در کاغذ معمولی، طبیعت واقعی داده‌ها را نشان می‌دهد. از این روش شخص را قادر به دیدن قسمت غالب الگو می‌کند و به این ترتیب می‌توان تغییر آن را اندازه‌گیری و مشارکتش را با پارامتر مخصوصی به دست آورد. برای مثال، الگوی دو نمایی

$$f(x, \theta) = \theta_1 e^{-\theta_2 x} + \theta_3 e^{-\theta_4 x}$$

با فرض $\theta_2 > \theta_4$ ، برای مقادیر بزرگ x به طور تقریب به شکل: $\ln f = \ln \theta_3 - \theta_4 x$ است. اگر شکل جدید را روی کاغذ نیمه لگاریتمی رسم کنید یک خط خواهد بود. بنابراین به وسیله چشم می‌توان خطی رسم کرد و مقادیر θ_3 و θ_4 را به دست آورد.

حال این مقادیر را می‌توان برای محاسبه مقادیر $\theta_3 e^{-\theta_4 x}$ ، به ازاء تمام مقادیر x به کار برد. در نتیجه، باقی مانده‌های $\bar{y} = y - \theta_3 e^{-\theta_4 x}$ قابل محاسبه‌اند. رسم \bar{y} در مقابل x در روی کاغذ نیمه لگاریتمی، ما را قادر به برآورد θ_1 و θ_2 می‌کند. این فرآیند که به روش خللی معروف است، هنگامی قابل استفاده است که تابع انتظار از مجموع چند جمله نمایی تشکیل شده باشد.

مقال : سولفی سوکسازول

برای نمایش روش خللی، داده‌های سولفی سوکسازول، که در کاپلان و دیگران تعریف شده (۱۹۷۲)، پیوست ۱ (بخش ۷-۴-۱) را ببینید) در نظر می‌گیریم. در این آزمایش سولفی سوکسازول در یک موضع وریدی بکاربرده شده است، نمونه‌های خون در زمان‌های مشخص برداشت گردیده و غلظت سولفی سوکسازول در

پلازما اندازه‌گیری شده است. این داده‌ها در نمودار (۱-۳) ترسیم شده‌اند.

رسم غلظت سولفی سوکسازول در مقابل x روی کاغذ لگاریتمی (در نمودار ۳-۲a) برای مقادیر بزرگ

x ، نشان‌دهنده زوال یک‌نواخت بصورت خطی است. آنرا می‌توان بصورت الگوی زیر نوشت:

$$f(x, \theta) = \theta_1 e^{-\theta_2 x} + \theta_3 e^{-\theta_4 x}$$

در این جا همه پارامترها مناسب‌اند. برازش یک خط بر (لگاریتم) ۶ داده آخری، عرض از مبدأ $5/0.5$ و

شیب $0.153 = \theta_4$ و $\theta_3 = e^{5.05} = 156$ آغازین مقادیر آغازین در نتیجه، مقادیر آغازین θ_3 و θ_4 هستند. با

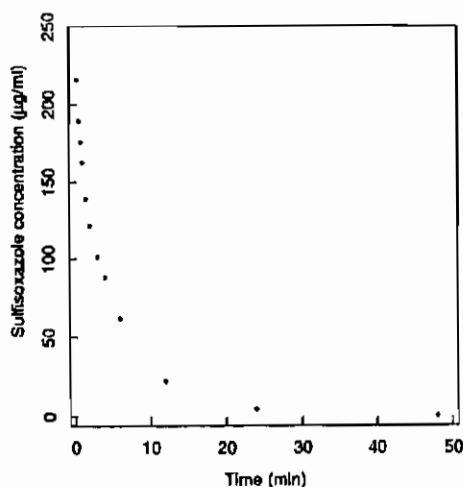
محاسبه باقی مانده‌ها، داریم:

$$\bar{y}_n = y_n - 156 e^{-0.153 x_n}$$

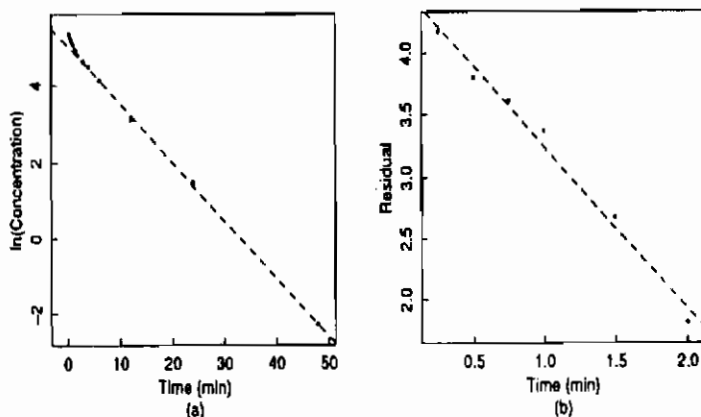
اکنون با رسم $m\bar{y}$ در مقابل مقادیر ۶ داده اولیه در شکل ۳-۲b، دوباره رفتاری خطی مشاهده می‌شود. با

برازش خطی راست بر این (لگاریتم) باقی مانده‌ها، عرض از مبدأ $4/55$ و شیب $1/31$ - به دست می‌آید.

بنابراین مقادیر آغازین $95 = e^{4.55} = \theta_1$ و $\theta_2 = 1.31$ هستند.



نمودار ۱-۳- رسم غلظت سولفی سوکسازول موجود در پلازما در مقابل زمان.



نمودار ۳-۲. منحنی خلائی یا کاربرد داده‌های سولفی سوکسازول. در قسمت a که در مقیاس لگاریتمی است. خط مستقیمی بر ۶ داده آخری برازش داده شده است (خط - فاصله) در قسمت b در مقیاس لگاریتمی. باقی مانده‌ها را برای ۶ نقطه اولیه داده‌های به دست آمده از خط راست قسمت d، نشان داده‌ایم. خط - فاصله، برازش خطی بر این (لگاریتم) داده‌ها است.

۳-۳-۴- کاهش ابعاد

خلالی کردن مثالی از روش عمومی کاهش ابعاد برای به دست آوردن مقادیر آغازین است. در این شیوه، برآورد پارامتر به صورت پی در پی انجام می‌گیرد. هر پارامتر برآورد شده، برآورد پارامتر بعدی را ساده‌تر می‌کند. در مثالی دیگر از کاهش ابعاد، الگوی $f = \theta_1 + \theta_2 e^{-\theta_3 x}$ را هنگامی که θ_3 مثبت است در نظر بگیرید، حال مقدار حدی پاسخ - در صورتی که $x \rightarrow \infty$ حل کند - برابر θ_1 و مقدار آن در $x = 0$ ، برابر $\theta_1 + \theta_2$ است. بسته به صعودی یا نزولی بودن داده‌ها، می‌توان y_{\max} یا y_{\min} را برای به دست آوردن مقدار آغازین θ_1 ، به کار برد. سپس، تفاضل $\theta_1 - y(0)$ را برای به دست آوردن θ_2 به کار بست. ما رگرسیون خطی (بدون جمله ثابت) از $\ln[(y - \theta_1) / \theta_2] / (1/x)$ را بر x برای به دست آوردن θ_3 ، به کار برده‌ایم.

گاهی می‌توان بعد الگو را کاهش داد و به طور غیر مستقیم، تعداد پارامترها نیز کاهش پیدا می‌کنند. برای مثال، در الگوی $f(x, \theta) = \exp[-\theta_1 x_1 \exp(-\theta_2/x_2)]$ ، اگر مقدار خیلی بزرگی از x وجود داشته باشد، آن‌گاه، الگو به طور تقریب معادل $f(x, \theta_1) = e^{-\theta_1 x_1}$ است. بنابراین به سادگی برآورد آغازین θ_1 از طریق لگاریتم گرفتن از پاسخ‌ها و در مقادیر بزرگ x ، حاصل می‌شود. به طور مشابه در الگوی $f(x, \theta) = \theta_1 \theta_2 x_1 / (1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2)$ ، اگر x کوچک باشد الگو قابل تبدیل به الگوی میشلیز - متن است. در این حالت می‌توان به سادگی مقادیر آغازین را به دست آورد.

۳-۳-۵- خطی بودن شرطی

در برخی از الگوها، تعدادی از پارامترها به طور شرطی خطی اند (بخش (۱-۲) را ببینید). از این رو، می توان رگرسیون خطی را برای برآورد مقادیر آغازین پارامترهای الگویی غیر خطی به کار برد. برای این منظور می توان، الگوریتم خاصی که خطی بودن شرطی را اجرا می کند و در بخش (۳-۵) ارائه شده است، به کار برد. در این الگوریتم، فقط برآوردهای آغازین غیر خطی مورد نیاز است. به عنوان مثالی از خطی بودن شرطی، می توان الگو یا تابع زیر را در نظر گرفت:

$$f(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 e^{-\theta_3 x}$$

در این جا، θ_1 و θ_2 ، هر دو به طور شرطی خطی اند. بنابراین، امکان به کارگیری کمترین مربعات خطی برای برآورد θ_1^0 و θ_2^0 و سپس برآورد θ_3^0 وجود دارد. در بخش (۳-۵) مثالی مفصلی شامل پارامترهای خطی شرطی ارائه شده است.

۳-۴- تبدیلیهای پارامتر

بنابه فصل های ۶ و ۷، تبدیل پارامترها در الگوی رگرسیونی خطی، می تواند تقریب خطی بهتری را به وجود آورد. این عمل اثر سودمندی در بهبود نواحی استنباط تقریبی و سرعت بخشیدن به همگرایی مقادیر کمترین مربعات دارد. همچنین تبدیلیهای پارامتر برای پافشاری در قیدهای مربوط به مقادیر پارامتر به کار می رود. توجه شود که تبدیل پارامترها، خیلی متفاوت از تبدیل پاسخ ها است. تبدیل پاسخ، فضای پاسخ را تغییر می دهد و رویه جدید انتظاری به وجود می آورد. از این رو بر خطاها و برقراری فرضیات مربوط به آنها اثر می گذارد. بر عکس، تبدیل در پارامترها، تنها نقاط واقع در فضای پارامتر و موجود در رویه انتظار را مشخص می کند. در نتیجه، آنها در فرضیات مربوط به مولفه های قطعی و تصادفی الگویی اثرند. همچنین اثری بر برقراری تقریب خطی و استنباط مبتنی بر آن ندارند.

کاربرد تبدیلیهای خطی برای توسعه برقراری تقریب خطی، در فصل هفتم بحث شده است. در این جا توجه ما به تبدیلیها، تأکید در محدود کردن پارامترها و توسعه همگرایی است.

۳-۴-۱- پارامترهای مقید

در بیشتر الگوهای غیر خطی پارامترها محدود به ناحیه هایی است که به طور معقولی ساخته شده اند. برای مثال، در الگوهای میشلیز - منتن یا در مثال هم ترکیبی، همه پارامترها باید مثبت بوده و در الگوهای نمائی پارامترهای واقع در نما اغلب باید مثبت باشند.

در بیشتر مواقع، امکان چشم پوشی کردن از محدودیت - در هنگام برازش الگو و امتحان ساده همگرایی برآوردهای پارامتر - برای ملاحظه این که، آیا در شرایط مقید صدق می کنند یاخیر؟ وجود دارد. اگر الگو بر داده ها برازش خوبی داشته باشد، باید برآورد پارامترها در محدوده معنی داری قرار بگیرند. هر چند گاهی بی خطر نیست، که در خلال تکرارها به برآورد پارامترها اجازه ورود به نواحی ممنوعه داده شود. زیرا، ممکن است مقادیر پارامترها نوسانات زیادی داشته باشند و یا مرزیز شوند. در چنین شرایطی باید در کل، محدودیت را به فرآیند برآورد نسبت داد.

روشهای عمومی بهینه کردن توابعی که پارامترهایشان مقیداند، به برنامه ریزی غیر خطی معروف است، که خارج از اهداف کتاب حاضر است. برای مثال و به طور مشروح به جیل، مری و رایت (۱۹۸۱)، یا بارد (۱۹۷۴) مراجعه کنید. خوشبختانه، قیدهایی که در الگوهای رگرسیون غیر خطی پیدا می شود، اغلب به اندازه ای ساده اند که می توان تبدیل پارامتر را انجام داد. برای مثال، اگر باید θ_p مثبت باشد، آن گاه با تبدیل $\phi_p = \ln \theta_p$ در طول تکرارها، مقدار $\theta_p = e^{\phi_p}$ مثبت باقی خواهد ماند.

یک قید فاصله ای روی پارامتر به شکل $a \leq \theta \leq b$ می تواند توسط تبدیل لجستیکی به صورت زیر اجرا شود:

$$\theta = a + \frac{b-a}{1+e^{-\phi}}$$

درحالی که، یک قید مرتب روی پارامترهای $\theta_1, \dots, \theta_k$ و به شکل $a \leq \theta_j \leq \theta_{j+1} \leq \dots \leq \theta_k \leq b$

می تواند توسط تبدیلی که در جوپ (۱۹۷۸) ارائه شده انجام گیرد.

قید مرتب می تواند برای دسترسی به اطمینان در وجود یک بهینه در الگویی با پارامترهای تعویض پذیر به کار رود. الگوی دو نمایی زیر مثالی از این نوع است:

$$f(x, \theta) = \theta_1 e^{-\theta_2 x} + \theta_3 e^{-\theta_4 x} \quad 0 \leq \theta_2, \theta_4$$

در این جا، زوج پارامتر (θ_1, θ_2) و (θ_3, θ_4) ، تعویض پذیراند. به عبارت دیگر، عوض کردن زوج (θ_1, θ_2) با زوج (θ_3, θ_4) مقادیر پاسخ های مورد انتظار را تغییر نمی دهد. پارامترهای تعویض پذیر می توانند خالق مسائل بهینه سازی دشواری باشند. زیرا، تقریب خطی نمی تواند در مورد چنین تقارنی به کار رود. در این مثال، با در نظر گرفتن $0 \leq \theta_2 \leq \theta_4$ ، تعویض پذیری را حذف کرده آن را توسط تبدیل زیر اجرا می کنیم.

$$\theta_2 = e^{\phi_2}$$

$$\theta_4 = e^{\phi_2}(1 + e^{\phi_4})$$

چون θ_1 و θ_2 پارامترهای خطی شرطی اند، لذا، مقدار بهینه آنها به طور یگانه و در صورت مجزا بودن θ_2 و

θ_4 قابل محاسبه است. بنابراین فقط نیاز به مرتب نگه داشتن θ_2 و θ_4 داریم، تا تعویض پذیری حذف شود.

۳-۴-۲- تسهیل در همگرایی

تبدیل‌های پارامتری می‌توانند همگرایی را آسان کنند. زیرا آنها پارامترها را از به مخاطره افتادن در نواحی ممنوعه حفظ می‌کنند. همچنین، تبدیل‌ها می‌توانند همگرایی را به وسیله افزودن بر یکخواختی رفتار خطی‌های پارامتر در رویه انتظار توسعه دهند، به طوری که، نمودار گوس دقیقتر شود. همچنین، تبدیل‌های توأم پارامتر - متغیر، می‌تواند برای توسعه شرایط برآورد به وسیله شرایط موجود در ماتریس مشتق V به کار رود. بیشتر این کار توسط مرکزی کردن یا مقیاس کردن داده‌ها انجام می‌گیرد. برای مثال، الگوی ساده دارای مشتقات زیر

$$f(x, \theta) = \theta_1 e^{-\theta_2 x} \text{ است:}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \theta_1} = e^{-\theta_2 x}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \theta_2} = -x \theta_1 e^{-\theta_2 x}$$

در هنگامی که کلیه مقادیر x مثبت اند بردارهای مشتق، تمایل به هم خطی شدن دارند. با بازنویسی دوباره الگو به شکل زیر:

$$f(x, \theta) = \theta_1 e^{-\theta_2(x-x_0+x_0)}$$

پاراسترهای جدید به شرح زیر معرفی می‌شوند:

$$\phi_1 = \theta_1 e^{-\theta_2 x_0}$$

$$\phi_2 = \theta_2$$

بنابراین داریم: $f(x, \phi) = \phi_1 e^{-\phi_2(x-x_0)}$. حال مشتقات نسبت به ϕ به طور تقریب متعامد خواهند بود. از این رو یک انتخاب مفید، $\bar{x} = x_0$ است.

مقیاس کردن متغیرها و پارامترها نیز می‌تواند شرطی بودن را تعمیم دهند. این عمل با وادار ساختن ماتریس مشتقات به داشتن بردارهای ستونی با طول تقریبی واحد، امکان‌پذیر است.

تبدیل‌های دیگر، بسته به محتویات مسأله، می‌توانند مفید واقع شوند. برای مثال، در شیمی سینتیک، اغلب می‌توان الگو را چنان بازنویسی کرد که عکس دمای مطلق به جای خود دمای T به کار رود. به این ترکیب و مرکزی کردن، می‌تواند جمله‌ای مانند $\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}$ را به دست آورد.

تأثیر تبدیلات پارامتری بر اثرات غیر خطی پارامتر و کفایت نواحی استنباط تقریبی خطی، در فصل هفتم بحث شده است.

۳-۵-۵- شیوه‌های تکراری دیگر

الگوریتم تکراری گوس - نیوتن، برای کمترین مربعات غیر خطی توصیف شده در بخش (۲-۲-۱)، یکی از روش‌های ساده و مفید برای یافتن $\hat{\theta}$ است. در این روش چند پیرایش مقدماتی، به عنوان روش‌های جانشینی خوب و برای نیل به غیر شرطی بودن ماتریس مشتق V و اجتناب از کدگذاری و تعیین کردن مشتقات، در نظر گرفته شده است.

۳-۵-۱- روش نیوتن - رافسون

روش گوس - نیوتن در برآورد پارامترهای غیر خطی، به عنوان حالت خاصی از روش عمومی تری به نام روش نیوتن - رافسون (بارد ۱۹۷۴) تلقی می‌شود. در این روش یک تقریب درجه دوم موضعی را برای تابع مورد نظر به کار می‌برند. در نزدیک θ^0 تقریب زیر را داریم:

$$S(\theta) \approx S(\theta^0) + \omega^T(\theta - \theta^0) + (\theta - \theta^0)^T \frac{\Omega}{2} (\theta - \theta^0)$$

در این جا $\omega = \frac{\partial S}{\partial \theta}$ گرادیان $S(\theta)$ در θ^0 است و هسیان $S(\theta)$ تعیین شده در θ^0 به قرار زیر است:

$$\Omega = \frac{\partial^2 S}{\partial \theta \partial \theta^T}$$

تابع مجموع مربعات تقریبی در صورتی دارای یک نقطه ایستاست، که گرادیان آن صفر باشد. بنابراین، می‌توان نوشت:

$$\omega + \Omega(\theta - \theta^0) = 0$$

این نقطه ایستا به شرطی صفر خواهد بود که Ω معین مثبت باشد (کلیه مقادیر ویژه مثبت باشند). در صورت معین مثبت بودن Ω در روش نیوتن - رافسون، داریم.

$$\delta^0 = -\Omega^{-1}\omega$$

$$S(\theta) = (y - \eta)^T (y - \eta)$$

برای تابع

$$\omega = -2V^T(y - \eta)$$

شیب

$$\Omega = 2V^T V - 2 \frac{\partial V^T}{\partial \theta} (y - \eta)$$

و هسیان

در این جا V ماتریس مشتق است. بنابراین، نمو گوس - نیوتن برابر با نمو نیوتن - رافسون است، به شرطی که جمله دوم مشتق $\frac{\partial V^T}{\partial \theta}$ مساوی صفر قرار دهیم.

دنيس، گي و ولش (۱۹۸۱) زیر برنامه‌ای از کمترین مربعات غیر خطی که تقریب شبه - نیوتن را به جمله دوم (دنيس و شانابل ۱۹۸۳) هسیان توسعه می‌دهد - توصیف کرده‌اند. این عمل، الگوریتم گوس - نیوتن، را گسترش داده و آن را به الگوریتم نیوتن - رافسون، نزدیکتر می‌کند و این در نزدیکتر کردن هسیان تقریبی، به

هسیان واقعی، نسبت به جمله ساده $V^T V$ ، که در الگوریتم گوس - نیوتن به کار می‌رود، مفید واقع می‌شود. چون لازم است که جمله $V^T V$ ، معین مثبت یا لااقل نیمه معین مثبت باشد، بنابراین، مقادیر ویژه $V^T V$ مربع مقادیر منفرد V هستند. اگر جمله دیگری برای تشکیل تقریب هسیان اضافه کنیم، آن گاه ممکن است معین مثبت بودن از بین برود. در این حالت، باید - الگوریتم نیوتن - رافسون را تعدیل نمود تا خاصیت معین مثبت بودن در هسیان را نگه دارد.

۳-۵-۲- تعدیل لونبرگ - مارکوارت

حالتی که می‌تواند سبب رفتار غلط تکرارهای گوس - نیوتن شود نا ویژه بودن ماتریس مشتق V (که از هم خطی بودن ستون‌ها ایجاد می‌شود) است. هنگامی که V خیلی نزدیک به ویژه باشد، δ می‌تواند بسیار بزرگ باشد و سبب قرار گرفتن پارامترها به نواحی غیر لازم فضای پارامتر شود. یک راه حل برای مسأله نزدیک - به ویژه بودن، این است که، محاسبات نمو را به کمک یک روش عددی پایدار انجام دهیم. علت توصیه ما در کاربرد تجزیه QR به جای معادلات نرمال همین موضوع است. همچنین به کارگیری دقت مضاعف یا در صورت امکان، دقت حسابی تعمیم داده شده در محاسبات و به کارگیری تبدیلهای متغیر - پارامتر (بحث شده در بخش ۳-۴) را توصیه می‌کنیم. روش عمومی دیگری برای روبرو شدن با نزدیک - به ویژه، پیرایش نمودن نمو گوس - نیوتن و به صورت زیر است. این روش در لونبرگ (۱۹۴۴) ارائه شده است:

$$\delta(k) = (V^T V + kI)^{-1} V^T (y - \eta) \quad (۱-۳)$$

مارکوارت (۱۹۶۳) این روش را به صورت زیر در نظر گرفته است.

$$\delta(k) = (V^T V + kD)^{-1} V^T (y - \eta) \quad (۲-۳)$$

در این جا، k عاملی شرطی است و D ماتریسی قطری بوده که درایه‌های آن همان درایه‌های روی قطر اصلی ماتریس $V^T V$ است. این روش، مقایسه لونبرگ - مارکوارت نامیده می‌شود، زیرا جهت $\delta(k)$ ، متوسطی از جهت نمو گوس - نیوتن ($k \rightarrow 0$) و جهت تندترین کاهش $\|V^T(y - \eta)\|$ است.

توجه شود که توصیه لونبرگ، قطر $V^T V$ را توسط عاملی جمعی بزرگتر می‌کند. در حالی که توصیه مارکوارت، قطر را توسط عامل ضربی $(I + k)$ بزرگتر می‌سازد. روش مارکوارت، نمو را تولید می‌کند که با تبدیلات مقیاسی پارامترها، تغییر نمی‌کند. بنابراین، اگر مقیاس یک مؤلفه بردار پارامتر دو برابر شود و همچنین نمو محاسبه شده و مؤلفه متناظر نمو نصف شوند، آن گاه نتیجه، مانند محاسبه نمو در مقیاس اصلی است. در روش لونبرگ مطلب مزبور صادق نیست. باکس و کاناسو (۱۹۸۴)، نشان دادند که اگر یکی از آنها تغییری در نمو با تبدیلات خطی فضای پارامتر ایجاد نکند، آن گاه، نمو نتیجه شده، نمو گوس - نیوتن با عامل

مرحله‌ای است.

مقایسه لونیبرگ - مارکوارت، مشکل تراز انجام دادن الگوریتم گوس - نیوتن است. زیرا باید برای ساختن هر دو عامل شرطی k و مرحله‌ای k تصمیم‌گیری کرد. هر چند که انجام آن در بعضی از برنامه‌های کمترین مربعات غیر خطی وجود دارد، با این وجود، نمودار بر حسب وارون یک ماتریس افزوده V^{TV} ، معرفی می‌کنند. محاسبه واقعی برای نمو، توسط تجزیه QR مربوط به V و به روز کردن توسط یک ماتریس قطری با کاربرد دوران داده شده، میسر است (دو نگارا و دیگران، ۱۹۷۹ فصل ۱۰؛ گالاب، و پیرا ۱۹۷۳) زیرا نمودار لونیبرگ، (۱-۳)، حل کمترین مربعاتی دستگاهی با ماتریس مشتق به قرار زیر نیاز دارد.

$$\begin{bmatrix} V \\ \sqrt{k} I \end{bmatrix}$$

بردار پاسخ به صورت زیر خواهد بود:

$$\begin{bmatrix} y - \eta \\ 0 \end{bmatrix}$$

بنابراین با توجه به نمودار مارکوارت (۲-۳)، ماتریس مشتق به شکل زیر تغییر می‌کند.

$$\begin{bmatrix} V \\ \sqrt{k} D^{1/2} \end{bmatrix}$$

۳-۵-۳- مشتقات عددی

فرض کرده‌ایم که اجزاء الگوریتمهایی که تعریف نموده‌ایم، مشتقات را نسبت به پارامترها به صورت تحلیلی به کار می‌برند. محاسبه این مشتقات و برنامه نویسی آنها اغلب بسیار خسته‌کننده، و مرحله خطا آمیزی در تحلیل غیر خطی است.

به عنوان یک دستور العمل کلی، مشتق‌گیری تحلیلی را به علت دقت آن توصیه می‌کنیم. هر چند راحت‌تر است که مشتقات را به روشهای عددی و به کمک تفاضلات متناهی محاسبه کنیم. چنین راحتی بدون ضرر نیست. زیرا مشتقات عددی می‌توانند کم دقت باشند و زمان لازم برای رسیدن به همگرایی را نیز افزایش دهند. افزون بر آن، اگر مشتق دوم نیز برای بررسی اثر غیر خطی بودن لازم باشد، محاسبه عددی آن از روی مشتق اول می‌تواند بسیاری دقت باشد. مشکلات دیگری که همراه با مشتقات عددی است، عبارتند از: انتخاب اندازه گام برای محاسبه تفاضلهای محدود و شاید به کار بردن تفاضلهای مرکزی یا پیشرو است. در تفاضلهای پیشرو، برای پارامتر P ، ارزیابی الگو را با کاربرد مقادیر جاری همه پارامتر، بجز P امین آنها، با نمو $\theta_p(1+\epsilon)$ ، انجام می‌دهیم. تقسیم تفاضلهای، میان مقادیر تابع، توسط مقادیر کسری $\epsilon\theta_p$ مشتق تقریبی را ارائه می‌دهد. این عمل نیاز

ارائه می‌دهد. این عمل نیاز به $1+p$ بار بردار پاسخ مورد انتظار در هر مرحله تکرار دارد. کاربرد تفاضلهای مرکزی نیازمند به تابع الگو در $\theta_p(1 \pm \varepsilon)$ و در مقدار مرکزی دارد. بنابراین تعداد کل ارزیابی $(1+2p)$ بار می‌شود. دنیس و شانابل (۱۹۸۳) توصیه کرده‌اند که ε را مساوی جذر دقت نسبی رایانه در نظر بگیریم (به عبارت دیگر، جذر کوچکترین عددی که به ۱ در نقطه شناورهای رایانه اضافه شود و عدد بزرگتر از یک تولید کند).

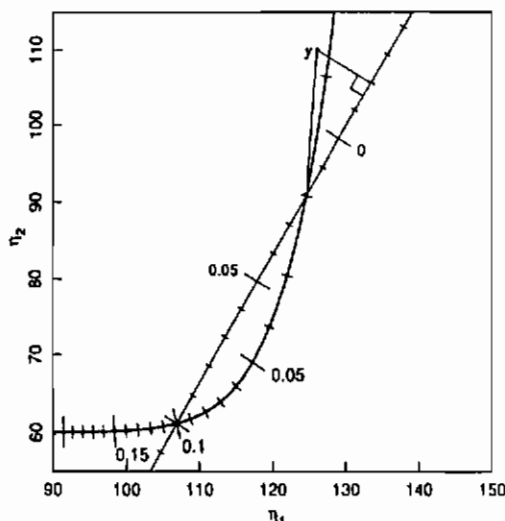
۳-۵-۴- روشهای مشتق - آزاد

روشهای مشتق - آزادی وجود دارد که تقریبهای عددی را در مشتق به کار نمی‌گیرند. رالستون و جنریچ (۱۹۷۸) چنین زیر برنامه‌ای را به نام DUD (بدون استفاده از مشتق) معرفی کرده‌اند. این برنامه بر مبنای استفاده از تقریب یک صفحه قاطع بنا شده، نه بر تقریب یک صفحه مماسی.

در کار با DUD ، ابتدا باید مقدار آغازین θ^0 را انتخاب کنیم. سپس برنامه به طور خودکار مجموعه از بردارهای P پارامتری را، با تغییر مکان هر پارامتر به اندازه ۱۰٪ انجام می‌دهد. آن گاه این بردارهای پارامتر، برای محاسبه بردارهای انتظار η_1, η_2, \dots ، به کار می‌روند. این بردارها، صفحه قاطعی را ارائه می‌دهند که سبب اتصال رویه انتظار در $P+1$ نقطه است. یک مجموعه از مختصات خطی در صفحه قاطع تولید می‌شوند، تصویر Y بر روی صفحه قاطع ایجاد شده و به توی صفحه پارامتر نگاشته می‌شود. این اطلاعات برای محاسبه بردار جدید θ ، به نام θ' به کار می‌رود. به گونه‌ای که $\eta(\theta')$ به Y ، از هر بردار پارامتر دیگری نزدیکتر است. پارامتر بردار θ متناظر با η ، که دورترین آنها نسبت به Y است. توسط θ' جانشین می‌شود و این فرآیند تا به دست آمدن همگرایی ادامه پیدا می‌کند.

مثال : رانفورد ۶

با کاربرد مثال دو مشاهده‌ای مشابه مثال رانفورد ۲، می‌توان DUD را به صورت مؤثری نشان داد. برای تسهیلات عددی و در نظر گرفتن مقیاس بهتری برای نمودار، ما دو مقدار آغازین مورد نیاز $(P+1) = 2$ را به جای کاربرد ۱۰٪ تغییر مکان، در نظر گرفته‌ایم. این دو مقدار آغازین انتخابی، $\theta^1 = 0.2$ و $\theta^2 = 0.1$ است. نمودار (۳-۳) نشان دهنده رویه انتظار $\eta(\theta)$ ، همراه با خط قاطع l ، گذرنده از نقاط $\eta(\theta^1)$ و $\eta(\theta^2)$ است. اکنون، یک پارامتر با مقیاس خطی α روی θ به صورت $\theta = \theta^1 + T\alpha$ معرفی می‌کنیم، به گونه‌ای که $T = (\theta^2 - \theta^1)$ و $\alpha = 0$ در θ^1 و $\alpha = 1$ در θ^2 است. همچنین، یک مقیاس خطی را بر l به صورت $I(\alpha) = \eta(\theta^1) + H\alpha$ تحمیل می‌کنیم. در این رابطه، $H = \eta(\theta^2) - \eta(\theta^1)$ است. دستگاه مختصات خطی نیز در نمودار (۳-۳)، نشان داده شده است.



نمودار ۳-۳. تفسیر هندسی از محاسبهٔ نمون DUD با کاربرد داده‌های دو حالتی رانفورد. قسمتی از رویهٔ انتظار (خط پررنگ) در فضای انتظار به همراه پاسخ مشاهده‌ای I نشان داده شده است. همچنین، تصویر $y-\eta(0.2)$ ، بر روی صفحهٔ فاطع متصل‌کننده، $\eta(0.2)$ و $\eta(0.1)$ ، (خط ممتد) مشخص شده‌اند. علامت گذاری‌ها، نشان دهندهٔ جهت صحیح روی رویهٔ انتظار و جهتهای تقریب خطی روی صفحهٔ فاطع است.

برای این مثال: $T = \theta^2 - \theta^1 = 0.8$ و $\theta = \theta^1 + T\alpha$ بنابراین: $\alpha = \frac{\theta - \theta^1}{T}$.

$$H = \begin{bmatrix} 60 + 70e^{-4(0.1)} \\ 60 + 70e^{-4(0.1)} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 60 + 70e^{-4(0.2)} \\ 60 + 70e^{-4(0.2)} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 106/92 \\ 61/16 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 124/62 \\ 90/83 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -17/70 \\ -29/67 \end{bmatrix}$$

$$l = \eta(\theta^1) + H\alpha$$

$$= \begin{bmatrix} 124/62 \\ 90/83 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -17/70 \\ -29/67 \end{bmatrix} \alpha$$

حال برای تصویر کردن بردار باقی ماندهٔ $I - \eta(0)$ بر روی l ، به منظور به دست آوردن $\hat{\alpha}$ ، از کمترین مربعه‌های خطی استفاده می‌کنیم.

$$y-l(0) = \begin{bmatrix} 126 \\ 110 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 124/62 \\ 90/83 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/38 \\ 19/17 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\alpha} = (H^T H)^{-1} H^T [y-l(0)]$$

در این مثال $\alpha = -0/49$ به دست می آید. از این رو مقدار جدید θ عبارت است از:

$$\begin{aligned} \theta_{\text{new}} &= 0/02 + T(-0/49) \\ &= 0/02 + 0/08(-0/49) \\ &= -0/019 \end{aligned}$$

ارزشیابی مجموع مربعات در این نقطه نشان می دهد که این نقطه جدید، نسبت به دو نقطه آغازین، از y دورتر است، بنابراین عامل مرحله ای λ را برای تحقیق در سرتاسر بردار نمو و برای محاسبه نقطه ای بهتر، معرفی می کنیم. تلفیق به شکل زیر است:

$$\theta_{\text{trial}} = \theta_{\text{new}} \lambda + \theta_{\text{old}} (1-\lambda)$$

در این مثال داریم:

$$\theta_{\text{trial}} = (-0/019) \lambda + 0/02 (1-\lambda)$$

بر این اساس، حداقل در $\lambda = 0/5$ با: $\theta_{\text{trial}} = 0/0005$ ، اتفاق می افتد. آنگاه نقطه $\theta^2 = 0/10$ ، توسط $\theta^3 = 0/0005$ ، جانشین می شود و فرآیند با کاربرد (θ^1, θ^3) تکرار می شود.

در حالت کلی P پارامتری، در تکرار i ام، مقادیر $\eta(\theta)$ در $\theta_1^i, \theta_2^i, \dots, \theta_{p+1}^i$ ، برای محاسبه صفحه قاطع، به عنوان صفحه ای P بعدی، که از میان $\eta(\theta_p^i)$ ، $P+1$ ، \dots ، 1 می گذرد، به کار می رود. برای راحتی، فرض می کنیم که θ_{p+1}^i ، متناظر با نزدیکترین نقطه به y است. سپس، ماتریس T_{pp} را با مساوی قراردادن ستون i ام آن، با $\theta_p^i - \theta_{p+1}^i$ و ماتریس H_{NP} را با مساوی قراردادن ستون P ام با $\eta(\theta_p^i) - \eta(\theta_{p+1}^i)$ محاسبه می کنیم. بنابراین، روابط زیر برقرارند.

$$\hat{\alpha} = (H^T H)^{-1} H^T [y - \eta(\theta_{p+1}^i)]$$

$$\theta_{\text{new}} = \theta_{p+1}^i + T \hat{\alpha}$$

$$\theta_{\text{trial}} = \theta_{\text{new}} \lambda + \theta_{p+1}^i (1-\lambda)$$

یادآوری می نمایم که، رالستون و جنریج (۱۹۷۸)، عامل مرحله ای منفی را با انتخاب λ از مقادیر دنباله \dots و $\frac{1}{16}$ و $\frac{1}{8}$ و $\frac{1}{4}$ و $\frac{1}{2}$ و 1 نیز جایز شمرده اند. در همگرایی ماتریس کوواریانس پارامتر تقریب خطی، عبارت است از: $s^2 T (H^T H)^{-1} T^T$. در این جا s^2 برآورد معمولی واریانس است. توجه شود که ممکن است،

ماتریس T ، در هنگام رسیدن به همگرایی، به وضع باشد. بنابراین امکان دارد، خطاهای استاندارد و همبستگی‌های تقریب خطی بی‌اعتبار باشند.

۵-۵-۳- حذف پارامترهای خطی شرطی

یکی از راههای ساده‌تر کردن مسائل رگرسیون غیر خطی، حذف پارامترهای خطی شرطی است. همان گونه که در بخش‌های (۱-۲) و (۵-۳-۳) نشان داده شد، مقادیر بهینه پارامترهای خطی شرطی، برای مقادیر ثابت پارامترهای غیر خطی، قابل محاسبه توسط کمترین مربعات خطی است. اگر بردار پارامتر θ را به پارامترهای خطی شرطی β از بعد P_1 و پارامترهای غیرخطی ϕ از بعد P_2 ، با شرط $P = P_1 + P_2$ افزایش کنیم، آن گاه پاسخ‌های مورد انتظار به شرح زیر قابل نوشتن است:

$$\eta(\beta, \phi) = A(\phi)\beta$$

در این جا، ماتریس A با ابعاد $N \times P_1$ ، فقط به پارامترهای غیرخطی بستگی دارد. برای هر مقدار ϕ ، برآورد شرطی β ، به صورت زیر است:

$$\hat{\beta}(\phi) = A^+(\phi)y$$

در این جا $A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$ ، شبه وارون ماتریس A است. پاسخ مورد انتظار ایجاد شده، عبارت است

از:

$$\hat{\eta}(\phi) = A(\phi)A^+(\phi)y$$

گلاب و پریا (۱۹۷۳)، یک الگوریتم گوس - نیوتن را که فقط به پارامترهای غیرخطی بستگی دارد را برای کمینه کردن تابع مجموع مربعات کاهش یافته زیر پیکربندی کرده‌اند:

$$S_2(\phi) = \|y - A(\phi)\hat{\beta}(\phi)\|^2$$

به‌ویژه، آنها مشتق $A^+(\phi)$ را نسبت به ϕ ارائه داده‌اند، که این خود کلید اجزاء الگوریتم است. بسط این مشتق در فصل چهارم داده شده است. جایی که، الگوریتم گوس - نیوتن را برای برآورد پارامتر چند پاسخی معرفی کرده‌ایم.

یکی از مشکلات همراه با به‌کارگیری تصویر روی پارامترهای خطی شرطی، آن است که، باید اطلاعاتی در مورد سایر پارامترها موجود باشد. پژوهشگر، باید مشخص کند که، کدام پارامترها، به خوبی تعیین مشتقات اعضای A نسبت به ϕ خطی شرطی است. این کار در بیشتر موارد مشکلتر از چشم پوشی از خطی شرطی است. چند مشکل ساختاری وجود دارد. مثلاً رگرسیون اسپیلان با جهت‌گرهای قابل تغییر. این مطلب در چاپ (۱۹۷۸) توصیف شده است. در این حالت، تقسیم بندی بین خطی شرطی و پارامترهای غیر خطی از

ویژگیهای طبیعت مسأله است. به همین دلیل، کاربرد روش گلاب - پیرا سودمند است. این روشها به طور مشروح در کافمن (۱۹۷۵) و بیتس و لینداستورم (۱۹۸۶) بحث شده است.

۳-۶- به دست آوردن همگرایی

گاهی به دست آوردن همگرایی مشکل است. اگر دچار شکست شدید، گامهای زیر را انجام دهید.

- آیا تابع انتظار به درستی توصیف شده است؟
- آیا تابع انتظار به درستی برنامه نویسی شده‌اند؟
- آیا مشتقات به درستی محاسبه شده‌اند؟
- آیا مشتقات به درستی برنامه نویسی شده‌اند؟
- آیا داده‌ها به درستی وارد دستگاه شده‌اند؟
- آیا همه مشاهدات معقول‌اند؟
- آیا متغیر پاسخ به درستی مشخص شده است؟
- آیا مقادیر آغازین، مقادیر درستی هستند؟
- آیا مقادیر آغازین، متناظر با پارامتر مربوطه‌اند؟

اگر پاسخ به همه پرسشهای مزبور آری باشد، باید منتظر جواب صحیح برنامه بهینه کردن بود. بیشتر برنامه‌های خوب قادر به ایجاد خروجی مفصلی از هر تکرار، برای کمک به یافتن نادرستی‌ها هستند. واریسی شود که، آیا مجموع مربعات اولیه $S(\theta^0)$ کوچکتر از مجموع مربعات پاسخ‌ها است یا خیر؟ اگر چنین نباشد، آن گاه تابع برازش داده شده مناسب نیست و رد می‌شود. ممکن است با وجود واریسی‌ها، تابع انتظار نادرستی یا داده نادرستی یا مقادیر آغازین نادرستی داشته‌اید. حتی ممکن است شما یک متغیر θ را به جای پاسخ y به کار برده باشید.

به مقادیر پارامتر نگاه کنید، آیا مقادیر آغازین دارای اندازه، یا علامت درست‌اند؟ آیا به پارامترهای مربوط به درستی نسبت داده شده‌اند؟

سپس، نمو پارامترها را ملاحظه کنید. به صورت سرانگشتی بررسی کنید که آیا همه آنها اندازه‌های مساوی نسبت به پارامترهای دارند؟ آیا هنگام اضافه شدن نمو به بردار پارامتر، بردار پارامتر را در ناحیه بدی از فضای پارامتر می‌نشانند؟ برای مثال، آیا هر پارامتری که باید مثبت باشد، منفی شده است؟ آیا پاره‌ای از پارامترها، به طور نامعقولی بزرگ یا کوچک شده‌اند؟ اگر در توابع مشتق خطایی وجود داشت، سعی شود تا مشتقات عددی چند نقطه مشخص به منظور واریسی تحلیلی مشتق، به کار برده شود. آیا کاربرد مقادیر آغازین دیگری،

مفید است؟ آیا تبدیلی در پارامترها می‌تواند مفید واقع شود.

گاهی همگرایی حاصل نمی‌شود. زیرا الگو دارای تعداد بسیار زیادی پارامتر است. به مقادیر پارامترها نگاه کنید، تا بفهمید که آیا پاره‌ای از آنها از مقادیر حدی الگوهای ساده‌تر قابل دسترسی اند؟ همچنین، ترکیب نمونه‌های پارامتر را ملاحظه کنید. برای مثال، آیا دو تا از آنها به طرف هم حرکت می‌کنند؟ در این صورت هم خطی بودن و پارامترهای زیادی را بررسی می‌نمائید. اگر گمان وجود پارامترهای زیادی می‌رود، سعی در ساده کردن تابع انتظار نمائید. حتی به طور موقت، می‌تواند الگوی ساده‌تری که تولید برآورد پارامترهای بهتری را می‌کند انتخاب نمود. به طوری که در پایان کار، الگوی کامل، قابل برازش باشد.

بررسی کنید که آیا داده‌های کافی در همه نواحی فضای طرح وجود دارد، به طوری که برآورد پارامترها به درستی قابل دسترسی باشد. برای مثال، هنگام برازش الگویی از نوع انتقالی - که در آن رفتاری خطی در نیمه چپ نقاط و رفتار خطی دیگری در نیمه راست نقاط (باکون و واتس ۱۹۷۱ هینکلی ۱۹۶۹ واتس و باکون، ۱۹۷۴) وجود دارد - بیشتر حالتی ایجاد می‌شود، که تعداد زیادی از داده‌ها، رفتار جداگانه برای نقاط اتصالی دو نیمه بیان می‌کنند. به طور که خیلی از این نقاط در نزدیکی اتصال نیستند. در این شرایط، پارامتری که تیزی انتقال را تفسیر می‌کند، به طور ضعیف برآورد خواهد شد و بنابراین، ممکن است همگرایی کند شود.

هنگام کار با الگوی فراگیر - که داده‌های چندین آزمایش را ترکیب می‌کند - اغلب مناسب است که بر هر مجموعه‌ای از داده‌ها، یک الگوی ساده محدود را برازش دهیم. سپس، این الگو به کمک مشارکت پارامترها و مجموعه‌ای از داده‌های بیشتر توسعه داده شود. مثالی از این نوع در زایگل (۱۹۸۵) موجود است. برعکس، مجموعه بزرگی از داده‌ها، که دارای نواحی عمل جدای معقولی اند، می‌توانند در چند زیر مجموعه کوچک بر این اساس دسته بندی شوند که، یک الگوی کاهش یافته بتواند بر هر یک از زیر مجموعه‌ها برازش داده شود و نتایج برای مقادیر آغازین الگوی اصلی به کار رود. در زیر مثالی از این نوع ارائه شده است.

مثال : روغن ماشین ۱

به منظور بررسی فرآیند انتخاب مقادیر آغازین و رسیدن به همگرایی برای یک تابع الگوی غیرخطی پیچیده، داده‌های وسیع‌وزنه جنبشی یک روغن ماشین را به عنوان تابعی از حرارت (x_1) و فشار (x_2) در نظر می‌گیریم. داده‌ها در لینسن (۱۹۷۵) داده شده و در پیوست یک بخش (۸-۱۴) ارائه شده و در نمودار (۳-۴)

رسم شده‌اند. تابع الگو به شکل زیر است:

$$f(x, 0) = \frac{\theta_1}{\theta_2 + x_1} + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_2^2 + \theta_5 x_2^3 + (\theta_6 + \theta_7 x_2^2) x_2 \exp\left[\frac{-x_1}{\theta_8 + \theta_9 x_2^2}\right] \quad (3-3)$$

در شروع، دیده می‌شود که ۶ مورد از ۹ پارامتر، به طور شرطی خطی است و این بسیار مفید است. همچنین، برای توسعه شرطی بودن - که در بخش (۳-۴-۱) بحث شد - داده فشار x_2 را با تقسیم بر هزار مقیاس بندی می‌کنیم و برای راحتی $w_2 = \frac{x_2}{100}$ در نظر می‌گیریم.

برای به دست آوردن مقدار آغازین داده‌ها را برای $w_2 = 0.001$ به کار می‌بندیم و فرض می‌کنیم که برای این مقدار پایین فشار مقیاس بندی شده، الگو فقط تابعی از x_1 باشد. با وارون کردن و کاربرد کمترین مربعات خطی مطابق بخش (۳-۳-۳)، نتایج $\theta_1 = 983$ و $\theta_2 = 192$ به دست می‌آیند.

حال خطی شرطی را در الگو مورد بهره برداری قرار می‌دهیم. بنابراین می‌توان با کاربرد کمترین مربعات، مقادیر آغازین پارامترهای باقی مانده را که به طور معقولی برای θ_8 و θ_9 برآورد شده، به دست آورد. اکنون، توجه خود را به برآورد این دو معطوف می‌کنیم. می‌توانیم شرایط را با فرض این که w_2 کوچک است ساده‌تر کنیم. زیرا، تابع الگو به طور اساسی در w_2 خطی است. بنابراین:

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1}{\theta_2 + x_1} + \theta_3 w_2 + \theta_6 w_2 e^{-x_1/\theta_8}$$

به عبارت دیگر، می‌توان از جمله‌های شامل θ_4 و θ_5 و θ_7 و θ_9 چشم پوشی کرد. با بررسی نمودار رسم شده، دیده می‌شود که داده‌ها برای هر درجه حرارت، به ازاء $w_2 < 2$ یک خط راست است. به همین دلیل آن را انتخاب می‌کنیم. همچنین برای مقدار ثابتی از x_1 جمله راهنما و جمله نمایی ثابت اند، و می‌توان الگو را به شکل زیر نوشت:

$$y' = \theta_3 w_2 + \theta_6 w_2 g \\ = w_2 \beta$$

که:

$$y' = y - \frac{983}{192 + x_1} \\ g = e^{-x_1/\theta_8}$$

و:

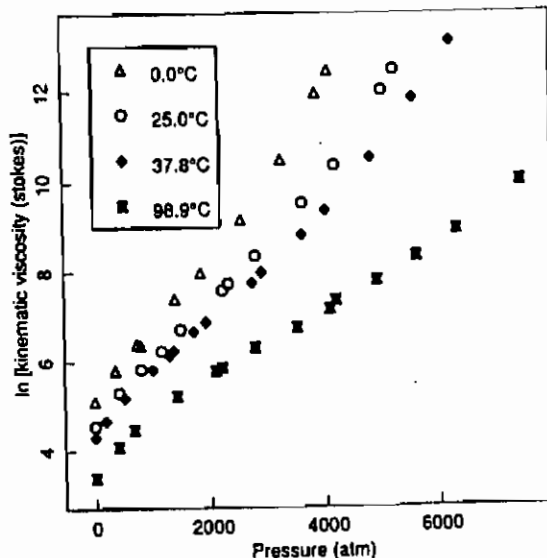
$$\beta = \theta_3 + \theta_6 g$$

رگرسیون y' بر w_2 به ازاء چهار درجه حرارت ۹۸/۹، ۳۷/۸، ۲۵/۵ و ۱/۵۷، مقادیر β را به ترتیب ۱/۴۹، ۱/۳۹، ۱/۳۷ و ۱/۳۵ به دست می‌دهند. حال مقادیر β و رابطه $g = e^{-x_1/\theta_8}$ را برای برآوردهای θ_3 و θ_6 به کار می‌بریم. با این ملاحظه که اگر $x_1 = 0$ ، آن گاه $g = 1$ (بنابراین $\beta = \theta_3 + \theta_6$) و اگر $x_1 \rightarrow \infty$ ، آنگاه $\beta = \theta_3$. اکنون مجموع دو پارامتر برآورده شده، ۱/۵۷ است (مقدار β در $x_1 = 0$) با فرض این که مجانب پایینی، به طور تقریب در بالاترین درجه حرارت رخ می‌دهد، $\theta_3 = 1/35$ را انتخاب می‌کنیم. این عدد کمی از ۱/۳۷

کوچکتر است (مقدار β_1 در $x_1 = 98/9$). حال مقدار θ_6 برابر $0/22 - 1/35 = 1/57$ برآورد می‌شود. سرانجام چون $g = \theta_3 + \theta_6$ است، در نتیجه، $g = \frac{\beta - \theta_3}{\theta_6}$. عبارت $\ln \left[\frac{\beta - 1/35}{0/22} \right]$ را بر x_1 برگشت می‌دهیم تا $\theta_8 = 35/5$ به دست آید.

با کاربرد این مقادیر برای θ_2 و θ_8 ، رگرسیون غیر خطی را روی داده‌ها، به ازاء مقادیر کوچک w_2 انجام می‌دهیم و مقادیر بهتر $\theta_2 = 20/2$ و $\theta_8 = 35/9$ را به دست می‌آوریم. حال این برآوردها را برای θ_2 و θ_8 ، به ازای همه مقادیر w_2 و برآورد سایر پارامترها، با $\theta_9 = 0$ به کار می‌بریم. مقادیر جدید عبارت اند از: $\theta_2 = 20/9$ و $\theta_8 = 47/55$ ، سرانجام این مقادیر را به همراه مقدار آغازین $\theta_9 = 0$ ، برای همگرایی الگوی کامل به کار می‌بندیم. مقدار نهایی برآورد به شرح زیر است:

$\hat{\theta} = (1053, 206/1, 1/464, -0/259, 0/0224, 0/398, 0/09354, 56/97, -0/463)^T$
در این حالت مجموع مربعات باقی مانده $0/08996$ می‌شود.



نمودار ۳-۴- رسم لگاریتم ویسکوزیته سینماتیک روغن در مقابل فشار برای چهار پارامتر مختلف.

۳-۷- ارزیابی برازش و پیرایش الگو

در هر تحلیل غیر خطی، برازش الگو بر داده‌ها و مناسب بودن فرضیات مربوط به خطاها لازم است. برای انجام این کار مشابه رگرسیون خطی مبادرت به بررسی حساسیت مقادیر پارامتر، مقایسه مجموع مربعات، مجموع مربعات اضافی و رسم باقی مانده‌ها می‌نماییم. اگر بی‌کفایتی در الگو وجود داشته باشد و اگر و تنها اگر

فرضیات مناسب به نظر نرسند، آن گاه باید الگو پیرایش شود و تحلیل تا دسترسی به نتیجه رضایت بخش ادامه یابد.

در برآورد غیر خطی، امکان همگرا کردن مقادیر پارامتر، که در ظاهر و یا شاید مضمون به نادرستی اند، وجود دارد. زیرا، می توانیم به یک کمینه موضعی همگرا کنیم. و یا به خاطر بعضی از رفتارهای ناهنجار رویه انتظار، متوقف شویم. هر الگوی برازشی را باید با انجام ملاحظات دقیقی از برآورد پارامترها و این که، آیا آنها به طور علمی با معنی هستند را شروع کنیم.

اگر پارامترها با معنی نباشند باید بررسی کرد که، آیا مقادیر آغازین درست هستند یا خیر؟ همچنین واریس برنامه، که آیا نمودار جریان درست است و یا تکرارها بیش از نیاز نیستند؟ در این صورت می توان به همگرایی دقیقی رسید. یک روش این است که روند اطلاعات تکرارها را تقسیم کنیم تا قادر به دسترسی آهسته به همگرایی باشیم. برخی از برنامه ها قابلیت ثابت نگه داشتن چند پارامتر و تغییر بقیه را دارند، تا ضعف همگرایی مشخص شود.

ضروری است که کاربر، برنامه مورد استفاده را به طور کامل بشناسد و از شیوه ویژه نویسنده سپاسگزار باشد. دقت در خرید، به خوبی سایر خریدهای انسان نیز در خرید نرم افزارهای برآورد غیر خطی صادق است. اگر برنامه به آهستگی به یک نقطه معقول همگرایی میل کند، ولی پارامترها نامعقول باشند، تابع انتظار و برنامه رایانه آن، مشتقات و برنامه مربوط مقادیر آغازین و داده ها را باید مطابق بخش (۳-۶) واریس کرد. آیا مقدار پاسخ به خوبی مشخص شده است؟ آیا باقی مانده ها رفتار خوبی دارند؟

اگر این واریس رضایت بخش ولی بردار پارامتر رضایت بخش نباشد، بردار آغازین دیگری را امتحان کنید. اگر به نقطه مشابهی همگرا شد، ممکن است داده ها، سعی در بیان نامناسب بودن تابع انتظار دارند. در این مرحله ممکن است با مراجعه به یک دانشکده و بحث با پژوهشگران، کارساز باشد. در این بحث ها، اغلب امکان دارد قادر به کشف خطای اتفاق افتاده ساده ای شوید.

هنگامی که همگرایی به مقادیر معقول رسید، خطای استاندارد تقریبی پارامتر و نسبت t تقریبی (که بر اساس تقسیم بر آورد پارامتر بر خطای استاندارد تقریبی حساب می شود) را واریس کنید. اگر نسبت t معنی دار نبود، پارامتر حذف شده از تابع انتظار را در نظر بگیرید و دوباره الگو را برازش دهید. این مطلب به طور کامل در بخش (۳-۱۰) بحث شده است.

به طور کلی هر چه الگویی ساده تر باشد، آن الگو بهتر است.

همچنین ماتریس همبستگی تقریبی پارامتر را واریس کنید. آیا هر پارامتر دارای همبستگی افراطی بالایی است؟ چون همبستگی بالا، نشان دهنده وجود پارامترهای اضافی (که برای مجموعه داده ها خیلی پیچیده است)

در الگو است.

به طور دقیق، چگونگی همبستگی «بالا» به طریقی بستگی به نوع داده و الگوی مورد نظر دارد. یک قاعده کلی این است که «یک همبستگی با قدر مطلق بیش از ۰/۹۹ باید دوباره مورد بررسی قرار گیرد.» سعی کنید تابع انتظار را به روش معنی دار و محسوسی ساده تر کنید، یا متغیرها و پارامترها را تبدیل نمایید تا هم خطی بودن کاهش یابد (بخش ۳-۴ را ببینید). برای بحث بیشتر در ساده تر کردن الگو به بخش (۳-۸) مراجعه کنید.

در تغییرپذیری برآوردهای پارامتر و وابستگی های غیر خطی میان برآوردهای پارامتر، می توان از روش فصل ششم استفاده کرد.

هنگامی که یک تابع انتظار ساده و کافی پیدا شد، رسم مقادیر برازش داده شده به همراه پاسخ مشاهده ای راهی عالی برای برازش است. رسم باقی مانده ها در مقابل مقادیر برازشی و واریس متغیرها نیز کمک خوبی برای ارزیابی برازش است. همچنین، باقی مانده ها باید در مقابل سایرین نیز رسم شود. به ویژه و در صورت امکان در مقابل عامل های پنهانی به منظور کمک به حذف عدم کفایت الگو (برای بحث مفصلتر، در دراپرو اسمیت (۱۹۸۱)، جونیر (۱۹۸۱) یا کوک و وایزبرگ (۱۹۸۳) را ببینید. باید توجهی عملی به این کرد که، آیا باقی مانده ها به صورت یکنواخت پخش شده اند یا خیر؟ چون هر رفتار غیر نظام یافته ای، نشان دهنده واریانس ناپایاست؟ اگر واریانس ناپایا وجود داشته باشد، داده ها را تبدیل کنید تا واریانس پایا شود و تبدیل تابع الگو را تا رسیدن به هدف پیگیری نمایید. در صورت امکان روش ارائه شده در کارول و راپرت (۱۹۸۴) را به کار برید تا تبدیل پارامتر بهینه شود و یا این که از روش کمترین مربعات وزن دار استفاده نمایید.

رفتار غیر تصادفی باقی مانده ها (در هنگام رسمشان، در مقابل متغیری مستقل، یا سایر متغیرها مشاهده می شود) کوشش در ارائه بی کفایتی تابع انتظار دارند. در چنین حالتی، سعی نمایید الگو را به راهی محسوس و معنی دار گسترش دهید تا رفتار غیر تصادفی حذف شود. برای مثال، پارامترهای نمو را برای محاسبه تفاوت بین موضوعها یا روزها بین گروهها و موضوعها یا روزها، مطابق بحث بخش (۳-۱۰) اضافه نمایید. هنگامی که با حاصل جمع های نهایی سروکار دارید، شاید اضافه کردن یک جمله ثابت ها را به حذف یک مجانب غیر صفر سوق دهد.

رسم باقی مانده ها در روی کاغذ احتمالی ما را قادر به تحقیق در درستی فرض نرمال بودن خطاها می سازد. اگر غیر نرمال به نظر برسند، بررسی کنید که، آیا این موضوع ناشی از چند نقطه پرت است یا مربوط به بی کفایتی تابع انتظاری است؟ برای نقاط مشهود پرت، واریس کنید که آیا به درستی گزارش و به درستی وارد رایانه شده اند یا خیر؟ اگر آنها به درستی گزارش شده باشند، در مورد حذف آنها در آزمایش انجام شده بحث

و بازنگری کنید. شاید دلیل غیر آماری خوبی برای حذف آن وجود داشته باشد. یک نمونه آلوده مثال خوبی است. اگر چنین ویرایشی را در نظر بگیرید برای نمایش آزمایش اطلاعاتی شامل، اثر داده‌های پرت احتمالی از قبیل برآورد پارامترها، انحراف معیارها، مقایر برازش داده شده، و میانگین توان دوم باقی مانده‌ها با داده‌های مظنون یا بدون آنها، مفید است.

اگر غیر نرمال بودن باقی مانده‌ها روشن باشد، تبدیل داده‌ها، و الگو را در نظر بگیرید (کارول و راپرت ۱۹۸۴) یا معیار کمترین مربعات را به یک معیار برآورد تنومند تغییر دهید (هابر ۱۹۸۱). توجه شود که کاربرد معیاری غیر از کمترین مربعات نیاز به نرم‌افزار مخصوص دارد. ارزشیابی کفایت تابع انتظار در صورت وجود تکرار، ساده‌تر است. زیرا، امکان واریسی برای تبدیل به واریانس پایا (قبل از برازش الگو) وجود دارد. همچنین تکرارها به ما اجازه آزمون عدم برازش الگورا با مقایسه نسبت میانگین مربع عدم برازش بر میانگین مربع تکرار، به کمک چندک توزیع F ارائه می‌کند. این بحث در بخش‌های (۱-۳-۲) و (۳-۱۲) نیز انجام گرفته است.

۳-۸- باقی مانده‌های وابسته

در هنگامی که زمان یا فاصله را به عنوان عاملی در تحلیل رگرسیونی وارد می‌کنید از روی احتیاط فرضیات استقلال خطاها را بررسی نمایید. کشف همبستگی خطاها با مشاهده سری زمانی باقی مانده‌های رسم شده بر حسب زمان (یا رتبه آزمایش) یا از برازش تأخیری باقی مانده‌های حالت n ام در مقابل باقی مانده‌های حالت $(n-1)$ ام، امکان‌پذیر است. تمایل به مثبت یا منفی ماندن باقی مانده‌ها در دوره‌های سری زمانی رسم شده یا پراکندگی غیر تصادفی باقی مانده‌ها هنگام رسم در برازش تأخیری، می‌تواند مستقل نبودن یا همبستگی خطاها را نشان دهد.

مثال : کلراید ۱

اسردنی (۱۹۷۰)، داده‌های یون کلراید را که به داخل دیواره‌های سلولهای خونی وارد شده، تحلیل کرده‌است. داده‌های اخذ شده از پایان نامه ایشان در پیوست یک بخش (۱۴-۹) ارائه شده و در نمودار (۳-۵) رسم شده‌است. مشاهده «نشان دهنده غلظت کلراید» (به درصد) در زمان x_n به دقت است.

تابع الگویی که از نظریه انتقال یونی گرفته شده به شکل زیر است:

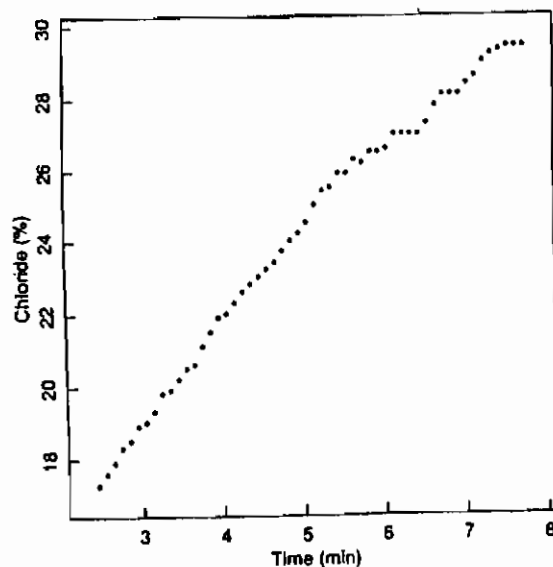
$$f(x_n; \theta) = \theta_1 + (1 - \theta_2)e^{-\theta_3 x_n}$$

در این الگو، θ_1 نشان دهنده درصد نهایی غلظت کلراید، θ_3 یک ثابت نرخ و θ_2 جایگزین غلظت ناشناخته

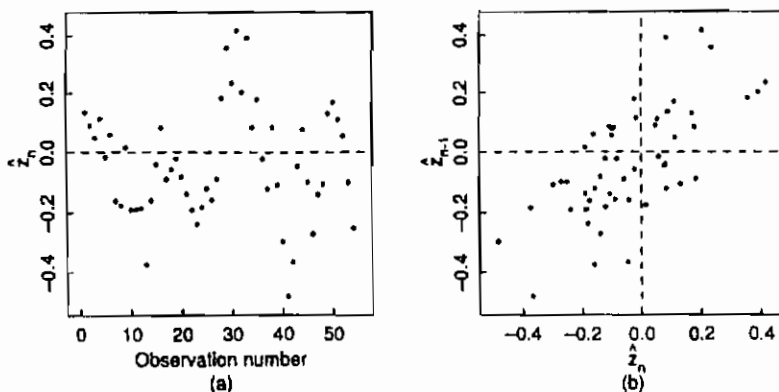
اولیه و نهایی از کلرین و زمان واکنش نامعلوم اولیه است. به طور معمول فرض می‌شود، خطاها دارای میانگین صفر واریانس پایا و مستقل‌اند.

یک برآورد آغازین برای θ_1 با درون یابی داده‌ها در زمانی بزرگ برابر $\theta_1 = 35$ است. y_n را بر θ_1 تقسیم می‌کنیم و الگو را با لگاریتم گرفتن و دوباره مرتب کردن خطی می‌کنیم. این عمل اجازه برآورد پارامترهای باقی‌مانده را توسط رگرسیون خطی می‌دهد. در نتیجه، داریم $\theta^0 = (35, 0 / 91, 0 / 22)^T$. همگرایی در $\hat{\theta} = (39 / 0, 9 / 828, 0 / 159)^T$ به دست می‌آید. مجموع مربعات باقی‌مانده‌ها $1/88$ است.

یک سری زمانی از باقی‌مانده‌ها که در نمودار ۶a-۳ رسم شده، تغییرات دوره‌ای را در باقی‌مانده‌ها نشان می‌دهد. همچنین رسم تأخیری داده شده در نمودار (۶b-۳)، بیانگر همبستگی مثبت است. در نتیجه از عدم استقلال خطاها یا وجود کمبودهای در تابع انتظار، آگاه می‌شویم.



نمودار ۶a-۳: برازش تراکم کلراید در مقابل زمان برای داده‌های کلراید تبدیل داده شده.



نمودار ۲-رسم باقی مانده‌ها در برازش داده‌های کلرید به روش کمترین مربعات غیر خطی. باقی مانده‌های به صورت یک سری زمانی در قسمت a و به عنوان رسم با تأخیر در قسمت b هستند.

هنگامی که خطاها مستقل نباشند، باید الگوی مشاهدات را برای تعیین وابستگی تغییر داد. الگوهای مرسوم همبستگی یا خود همبستگی از خطاها عبارت اند از: میانگین متحرک یا الگوهای خود برگشت از متغیر رتبه‌بندی شده است (باکس و جنگیز ۱۹۷۶). برای مثال، یک فرآیند میانگین متحرک مرتبه یک به صورت:

$$Z_n = \varepsilon_n - \omega_1 \varepsilon_{n-1}$$

فرایند خود برگشت مرتبه یک به صورت:

$$Z_n = \varepsilon_n - \phi_1 Z_{n-1}$$

در این جا، ε_n ($n=1, 2, \dots, N$) خطاهای تصادفی مستقل با میانگین صفر و واریانس پایا اند (اغتشاش خالص).

در شرایط رگرسیون، هنگامی که داده‌ها به صورت مساوی در زمان جای داه شده باشند، تعیین الگوی مناسبی برای کشف همبستگی خطاها توسط محاسبه و رسم باقی مانده‌های تابع خود همبستگی در مقابل تأخیر k ، به صورت ساده زیر است:

$$r_k = \sum_{n=k+1}^N \frac{\hat{z}_n \hat{z}_{n-k}}{Ns^2} \quad k=1, 2, \dots$$

در تعریف r_k ، برآورد واریانس s^2 بوده و باقی مانده‌ها دارای میانگین صفر فرض می‌شوند. تابع خود همبستگی معمولاً تا $K \cong \frac{N}{5}$ محاسبه می‌شود. اگر تابع خود همبستگی باقی مانده‌ها در داخل فاصله $\pm 2\sqrt{N}$ و بعد از دو یا سه تأخیر پایا شد، آن گاه الگو، به عنوان یک فرآیند میانگین متحرک از مرتبه یک یا دو تلقی می‌شود. چنانچه تابع خود همبستگی باقی مانده‌ها میل به صفر شدن تدریجی داشته باشد، فرایند ممکن است به

عنوان فرآیند خود برگشت تلقی شود. در این حالت نیاز به محاسبه توابع خود همبستگی است. (باکس و جنکینز ۱۹۷۶). در شرایط رگرسیونی که زمان تنها عامل و یا مهمترین عامل نیست، فرآیندهای خود برگشت مرتبه یک کافی است.

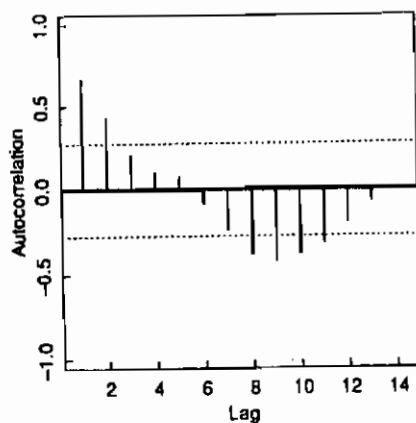
مثال : کلراید ۲

تابع خود همبستگی باقی مانده‌ها برای داده‌های کلراید محاسبه شده و در نمودار (۷-۳) رسم شده است. برآوردهای همبستگی تمایل شدید به صفر شدن دارند و در فاصله $\pm 2\sqrt{N}$ (دو خط چین موازی و افقی) قرار می‌گیرند. بر مبنای این ترسیم، برای بیان همبستگی باقی مانده‌ها فرایند خود برگشت مرتبه یک، مورد قبول واقع می‌شود. حال، الگو قابل برازش به شکل $Y_n = f(x_n, \theta) + Z_n$ است. که در آن $Z_n = \varepsilon_n + \phi Z_{n-1}$ است. برای برآورد پارامترهای θ و ϕ ، مسأله را به یک مسأله کمترین مربعات غیر خطی ساده با کاستن ϕ برابر Y_{n-1} از روی Y_n به شکل زیر تبدیل می‌کنیم.

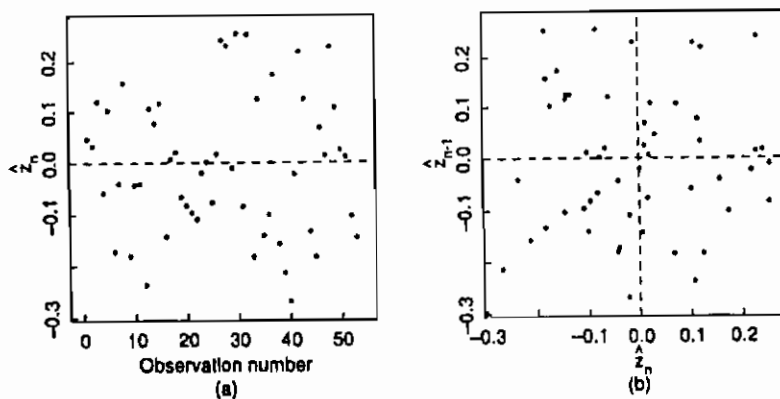
$$Y_n - \phi Y_{n-1} = f(x_n, \theta) - \phi f(x_{n-1}, \theta) + Z_n - \phi Z_{n-1}$$

$$Y_n = \phi Y_{n-1} + f(x_n, \theta) - \phi f(x_{n-1}, \theta) + \varepsilon_n \quad \text{یا}$$

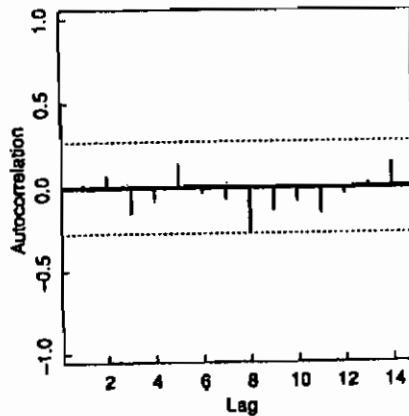
مقادیر آغازین برای θ از $\hat{\theta}$ رابطه بالا به دست می‌آید و مقدار آغازین برای ϕ از روی برآورد همبستگی با تأخیر یک ($r_1 = 0.67$) به دست می‌آید. همگرایی به کمک $(\theta^T, \phi) = (37/58, 0.849, 0.178, 0.69)$ و با مجموع مربعات باقی مانده 0.98 پیدا می‌شود. باقی مانده‌های ε این برازش خوش رفتارند. باقی مانده‌ها در نمودار (۸-۳) و تابع خود همبستگی در نمودار (۹-۳)، که به طور یکنواخت کوچک‌اند، نشان داده شده است.



نمودار ۷-۳. تابع خود همبستگی باقی مانده‌های حاصل از روش کمترین مربعات غیر خطی برازشی بر داده‌های کلراید. خط‌های مسند شامل بازه‌ای است که به طور تقریب ۹۵٪ همبستگی قابل قبول در آن قرار می‌گیرد. به شرط آن که همبستگی‌های واقعی صفر باشند.



نمودار ۸-۳. رسم باقی مانده‌های \hat{Z} حاصل از برازش کمترین مربعات غیر خطی بر داده‌های کلراید با $\phi = 0.69$. باقی مانده‌ها به عنوان یک سری زمانی در قسمت a و رسم تأخیری در قسمت b هستند.



نمودار ۹-۳- تابع خود همبستگی باقی مانده‌های حاصل از برازش کمترین مربعات غیر خطی بر داده‌های کلراید با $\phi = 0.69$. خط نقطه‌ها شامل باره تقریبی ۹۵٪ همبستگی‌های قابل قبول است، به شرط آن که همبستگی واقعی صفر باشد.

به طور کلی، مانند مثال قبل، هدف اصلی محاسبه همبستگی، کاهش واریانس باقی مانده‌ها و کاهش همبستگی بین باقی مانده‌ها است. زیرا برآورد پارامترهای الگو، یعنی $\hat{\theta}$ ، خیلی تغییر نمی‌کند. هرچند که پارامترهای الگو بهتر برآورده می‌شوند. زیرا آنها دارای خطای استاندارد کوچکتری بوده و روش کمترین مربعات به درستی عمل می‌کند. بنابراین، فرضیات برقرارند. برای کاربرد پیچیده‌تر این روش به واتر و باکون (۱۹۷۴) مراجعه شود.

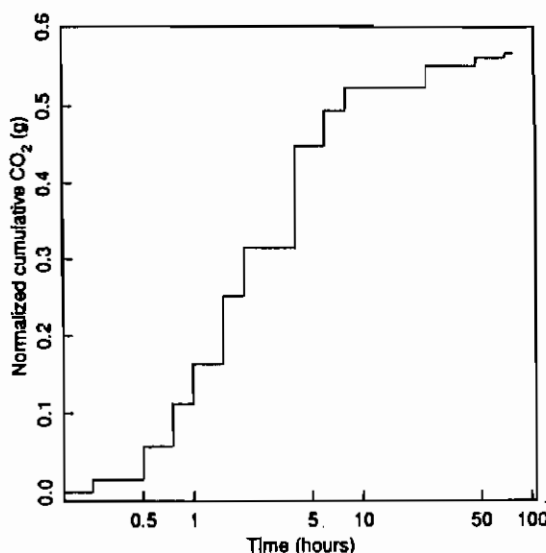
۹-۳- داده‌های تجمعی

در برخی از آزمایشات، اندازه‌گیری غلظت‌های لحظه‌ای غیر ممکن است. در این حالت پاسخ‌های تجمعی اندازه‌گیری می‌شوند.

مثال : اتیل آکریلیت ۱

آزمایشی مبتنی بر مطالعه سوخت و ساز اتیل آکریلیت انجام گرفته است. در این راستا قرصی که توسط اتیل آکریلیت پرتوافشانی شده به خرگوش‌ها خورانده شده است. برای اندازه‌گیری گاز معده هر خرگوش، لوله‌ای در داخل شکم گذاشته و آن را در قفسی جداگانه و پنهان قرار داده‌اند، به طوری که هوای خارج شده از لوله بتواند داخل ظرفی ذخیره شود. این ظرف در زمانی مناسب قابل تعویض است. در این آزمایش اندازه‌گیری CO_2 تجمعی خارج شده در دوره‌های زمانی میسر است. تحلیل اولیه داده‌ها نشان می‌دهد که اگر

پاسخ هر حیوان نرمال شود و این عمل توسط تقسیم غذای واقعی رسیده به هر خرگوش انجام گیرد، می تواند داده ها را به گونه ای ترکیب کند که یک الگوی انفرادی ساده بر داده های همه خرگوش ها برازش داشته باشد. افزون بر آن، تغییرپذیری در داده های نرمال شده به گونه ای است که نیاز به لگاریتم گرفتن از داده ها نیست تا بتوان واریانس پایا را در امتداد نقاط زمانی ایجاد کرد. نقاط آغازین و طول بازه های تجمعی و میانگین برای ۹ خرگوش، که توسط غذای واقعی نرمال شده اند در پیوست شماره یک بخش (۱۴-۱۰) (واتر دوتیری و استیراتلی ۱۹۸۶) و CO_2 تجمعی در نمودار (۳-۱۰) رسم شده است.



نمودار ۳-۱۰- رسم مقدار CO_2 بازدم در مقابل نقطه انتهای بازه جمع آوری داده های اتیل آکرولبت.

دو روش برای تحلیل چنین داده هایی در رنویک (۱۹۸۲) ارائه شده است. در روش اول، به خللی کردن داده های تقریباً تجمعی که از تقسیم مقادیر تجمعی توسط فاصله های زمانی تجمعی به دست آمده می پردازد. روش دوم، تجمعی کل را به زمان های نامتناهی برون یابی می کند، سپس تفاضل (تجمعی کل - برون یابی) را خللی می کند. این روش را روش «افزودن - کاستن» نامند.

ما هیچ یک از این دو روش را توصیه نمی کنیم. به ویژه روش افزودن - کاستن را بی ارزش می دانیم. زیرا، این روش نسبت به تغییرات مقدار برون یابی بسیار حساس است. به عنوان مثال می توان نشان داد که درصد کوچکی تغییر در مقدار برون یابی (حتی کمتر از ۲٪) می تواند سبب تغییر ۱۰۰٪ در نرخ ثابت شود. افزون بر آن، هر دو روش بر مبنای خللی کردن بنا شده اند، که خود بحث سنگینی را ایجاد می کند. به جای روشهای

هر دو روش بر مبنای خنثی کردن بنا شده‌اند، که خود بحث سنگینی را ایجاب می‌کند. به جای روشهای مزبور، ما روش تحلیل مستقیم داده‌های تجمعی را با تابع اولیه گیری از پاسخ به شرح زیر توصیه می‌کنیم. همچنین غیر از زیانهای سایر روش‌ها، روش مورد بحث این برتری را دارد که، می‌تواند برآوردهای را به صورت خطای استاندارد تقریبی پارامتر و همبستگی‌ها اندازه گیری می‌کند.

۳-۹-۱- برآورد پارامترها به روش انتگرال گیری مستقیم

فرض کنیم، $f(t, \theta)$ پاسخ نظری به محرک ورودی در زمان t باشد. در این حالت خروجی تجمعی در فاصله زمانی t_{n-1} تا t_n به قرار زیر قابل محاسبه است:

$$F_n = \int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t, \theta) dt$$

حال مقدار عددی تابع اولیه F_n و زوج داده‌های تجمعی مشاهده‌ای (y_n, t_n) را برای برآورد پارامترها به کار می‌بریم. الگو را چنان بازنویسی می‌کنیم که شروع بازه عامل $x_{1n} = t_{n-1}$ و طول بازه عامل $x_{2n} = t_n - t_{n-1}$ باشد. بنابراین $F(x_n, \theta)$ الگوی مربوط به مقدار تجمعی در بازه $x_n = (x_{1n}, x_{2n})^T$ است.

برای محاسبه یک شکل تجربی برای $f(t, \theta)$ ، نرخ‌های تقریبی y_n/x_{2n} را در مقابل $x_{1n} + x_{2n}/2$ و در کاغذ نیمه لگاریتمی ترسیم و خنثی کردن را برای به دست آوردن برآوردهای آغازین پارامترها به کار می‌بریم. برآورد نهایی از کاربرد کمترین مربعات غیر خطی حاصل می‌شود. توجه شود که اگر واریانس پایا نباشد، ممکن است، مجبور به تبدیل داده‌ها و تابع باشیم.

مثال: اتیل آلکربلیت ۲

داده‌های CO_2 داده شده در جدول (۱-۳) به همراه مقادیر استخراج شده (نقطه وسط بازه $x_{1n} + x_{2n}/2$ و نرخ تقریبی y_n/x_{2n}) در نمودار (۱۱-۳) رسم شده است. در شکل دیده می‌شود که الگویی مناسب برای داده‌ها، شامل سه جمله نمایی است (دو تا برای اندازه گیری اوج و سوی برای اندازه گیری تغییر در شیب نزولی بعد از اوج). به علت صفر بودن تشعشع قبل از تزریق، غلظت در $t=0$ برابر صفر است. یک الگوی مناسب برای تجمع در زمان بصورت زیر است:

$$f(t, \theta) = -(\theta_4 + \theta_5)e^{-\theta_1 t} + \theta_4 e^{-\theta_2 t} + \theta_5 e^{-\theta_3 t}$$

یک الگوی مناسب برای داده‌های تجمعی در گردآمدهای از بازه‌ها، که با t_{n-1} شروع می‌شود. به صورت زیر خواهد بود:

$$F_n = -\frac{\theta_4 + \theta_5}{\theta_1} (e^{-\theta_1/n-1} - e^{-\theta_1/n})$$

$$+ \frac{\theta_4}{\theta_2} (e^{-\theta_2/n-1} - e^{-\theta_2/n}) + \frac{\theta_5}{\theta_3} (e^{-\theta_3/n-1} - e^{-\theta_3/n})$$

$$F(x, \theta) = -\frac{\theta_4 + \theta_5}{\theta_1} e^{-\theta_1 x_1} (1 - e^{-\theta_1 x_2})$$

$$+ \frac{\theta_4}{\theta_2} e^{-\theta_2 x_1} (1 - e^{-\theta_2 x_2}) + \frac{\theta_5}{\theta_3} e^{-\theta_3 x_1} (1 - e^{-\theta_3 x_2})$$

یا

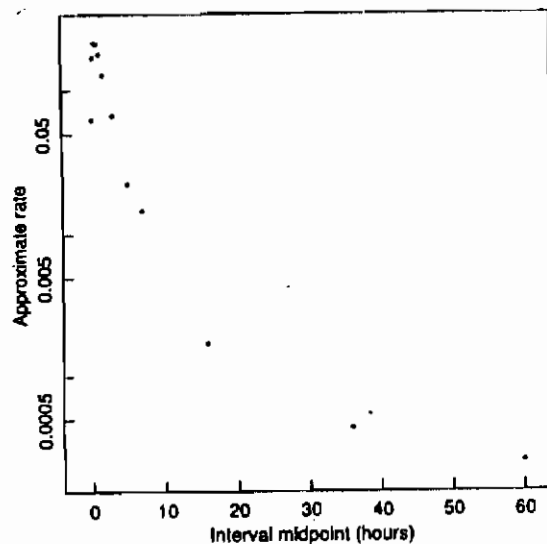
به علت پایا نبودن واریانس، لگاریتم F بر لگاریتم داده‌ها برازش داده شده است. نتیجه این تحلیل به همراه برآوردها در جدول (۲-۳) ارائه شده است.

در تحلیل لگاریتم داده‌ها برای نرخ‌های مجزا، توجه ما به رفتار باقی مانده‌ها معطوف شده است. سه الگوی ثابت سه نرخ بر داده‌ها به خوبی برازش دارد.

جدول ۱-۳- دسته بندی بازه‌ها و متوسط CO_2 بازدم نرمال شده برای داده‌های اتیل آکریلیت، به همراه مقادیر استخراج شده، نقاط میانی

بازه و نرخ تقریبی

Collection Interval (hr)		Derived Quantities		
Start x_1	Length x_2	CO_2 (g)	Interval Midpoint	Approx. Rate
0.0	0.25	0.01563	0.125	0.0625
0.25	0.25	0.04190	0.375	0.1676
0.5	0.25	0.05328	0.625	0.2131
0.75	0.25	0.05226	0.875	0.2090
1.0	0.5	0.08850	1.25	0.1770
1.5	0.5	0.06340	1.75	0.1268
2.0	2.0	0.13419	3.0	0.0671
4.0	2.0	0.04502	5.0	0.0225
6.0	2.0	0.02942	7.0	0.0147
8.0	16.0	0.02716	16.0	0.0017
24.0	24.0	0.01037	36.0	0.0004
48.0	24.0	0.00602	60.0	0.0003



نمودار ۱۱-۳. نرخ تقریبی بازدم CO_2 در مقابل مجموعه نقاط وسط بازه برای داده‌های اتیل آکریلیت.

جدول ۲-۳. خلاصه پارامتر برای الگوی ۳-نمایی برازش بر داده‌های اتیل آکریلیت.

Parameter	Start	Nonlinear Least Squares	
		Estimate	Approx. Std. Err.
θ_1	4.461	3.025	0.752
θ_2	0.571	0.481	0.038
θ_3	0.0434	0.0258	0.0096
θ_4	0.355	0.310	0.049
θ_5	0.0034	0.0011	0.0005

مثال: ساکارین ۱

در مثال دیگری از رفتار داده‌های تجمعی، داده‌های ساکارین در رنویک (۱۹۸۲) را تحلیل کرده‌ایم. در این آزمایش، پاسخ اندازه‌گیری شده، مقدار ساکارین تجمعی در ادرار خرگوش، بعد از خوردن یک قرص ساکارین است. داده‌ها در پیوست یک، بخش (۱۱-۱۴) و رسم آنها در نمودار (۱۲-۳) ارائه شده است. تابع فقط دو نرخ ثابت را شامل بوده و تابع پاسخ به صورت زیر است؟

$$f(t, \theta) = \theta_3 e^{-\theta_1 t} + \theta_4 e^{-\theta_2 t}$$

$$F(x, \theta) = \frac{\theta_3}{\theta_1} e^{-\theta_1 x_1} (1 - e^{-\theta_1 x_2}) + \frac{\theta_4}{\theta_2} e^{-\theta_2 x_1} (1 - e^{-\theta_2 x_2}) \quad \text{بنابراین}$$

مشابه مثال اتیل آکرلیت، تابع اولیه یک الگو بر لگاریتم داده‌های تجمعی به منظور پایا ساختن واریانس برازش داده شده است.

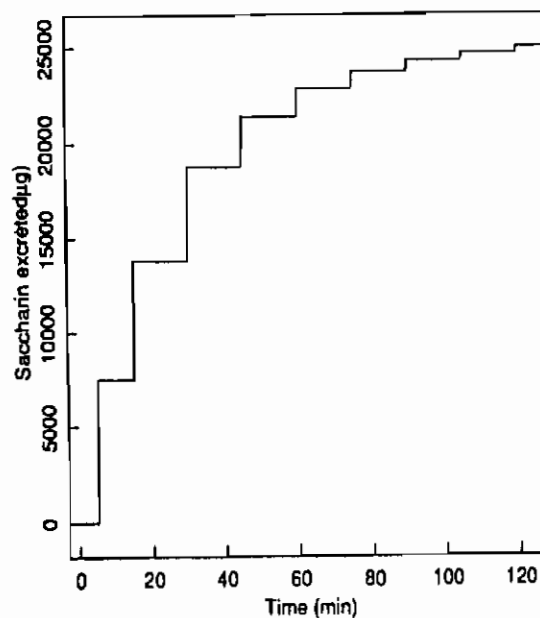
روش منحنی خللی و افزودن - کاستن حاصل از رنویک (۱۹۸۲)، در ستون دو و سه جدول (۳-۳) و نتایج کاربرد روش مستقیم تابع اولیه، در ستون شماره چهار ارائه شده است. توجه شود که تفاوت قابل ملاحظه‌ای بین نتایج حاصل از خللی کردن و آنهایی که از کمترین مربعات، غیر خطی به دست آمده وجود دارد. همچنین توجه شود که روشهای خللی کردن و افزودن کاستن خطای استاندارد پارامتر را ارائه نمی‌دهند. دو باقی مانده خیلی بزرگ از برازش کمترین مربعات غیر خطی در $x_1=105$, $x_1=5$ حاصل شده است. یک تحلیل دیگر با ترکیب مشاهدات در $x_1=105$, $x_1=90$, $x_1=15$, $x_1=5$ در نمودار (۴-۳) ارائه داده شده است. باقی مانده‌های حاصل از این برازش رفتار بسیار خوبی دارند و واریانس باقی مانده از ۰/۰۱۵۸ به ۰/۰۰۷۱ کاهش یافته است. برآوردهای پارامترها (خطاهای استاندارد در داخل پرانتز است) برابراند با:

$$\theta_4 = 472(70), \theta_3 = 150.6(233), \theta_2 = 0.30(0.002), \theta_1 = 0.154(0.035)$$

است.

جدول ۳-۳ خلاصه پارامترها برای داده‌های ساکارین، مقایسه برآوردهای حاصل از کاربرد روش افزودن - کاستن روش نرخی و روش کمترین مربعات غیر خطی برای برازش بر تابع پاسخ تابع اولیه گیری شده ارائه شده است.

Parameter	Peeling ^a	Sigma-Minus ^a	Estimate by Nonlinear Least Squares	
			Value	Approx. Std. Err.
θ_1	0.0710	0.0833	0.122	0.031
θ_2	0.0234	0.0255	0.0279	0.003
θ_3	830	932	1345	249
θ_4	270	314	402	98



نمودار ۳-۱۲. رسم مقدار تجمعی در مقابل مجموعه نقاط انتهایی بازها برای داده‌های ساکارین.

جدول ۳-۴. دسته‌بندی بازها و مقادیر گرفته شده از داده‌های اصلی و ترکیبی ساکارین.

Original			Combined		
Collection Interval (hr)		Saccharin (μg)	Collection Interval (hr)		Saccharin (μg)
Start x_1	Length x_2		Start x_1	Length x_2	
0	5	7518	0	5	7518
5	10	6275	5	25	11264
15	15	4989			
30	15	2580	30	15	2580
45	15	1485	45	15	1485
60	15	861	60	15	861
75	15	561	75	15	561
90	15	363	90	30	663
105	15	300			

۳-۱۰-۱- مقایسه الگوها

در برخی شرایط، امکان کاربرد چند تابع برای یک الگو وجود دارد. برای مثال، در برازش الگوی دونمایی زیر:

$$f(x, \theta) = \theta_1 e^{-\theta_2 x} + \theta_3 e^{-\theta_4 x}$$

اگر فقط θ_4 صفر شود، آن گاه الگو به شکل زیر کاهش می‌یابد:

$$f(x, \theta) = \theta_1 e^{-\theta_2 x} + \theta_3$$

همچنین اگر θ_3 صفر شود، الگویی بالا به شکل زیر کاهش می‌یابد:

$$f(x, \theta) = \theta_1 e^{-\theta_2 x}$$

در این الگوهای تو در تو، مایل به یافتن ساده‌ترین الگو هستیم که برازشی کافی بر داده‌ها داشته باشد. در شرایط دیگر، ممکن است بخواهیم الگوهای نا تو در تویی را مقایسه کنیم. برای مثال، دو الگو به شرح زیر را در نظر می‌گیریم:

$$f(x, \theta) = \theta_1 (1 - e^{-\theta_2 x})$$

الگوی شماره ۱:

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 x}{\theta_2 + x}$$

الگوی شماره ۲:

هر دو الگو با شرط $x=0$ در $f=0$ آغاز شد. و در $x \rightarrow \infty$ به θ_1 میل می‌کنند. در این شرایط، ممکن است یکی از آنها برازش بهتری بر داده‌ها داشته باشد و ما مایل به تشخیص آن هستیم.

۳-۱۰-۱- الگوهای تو در تو

برای تصمیم‌گیری در این که ساده‌ترین الگو تو در توی خوش برازش بر مجموعه داده‌ها کدام یک است، مشابه حالت خطی رفتار نموده و آزمون نسبت درست نمایی (در اپرو اسمیت ۱۹۸۱) را به کار می‌بریم. در حرکت از الگوی جزئی به الگوی کامل، فرض نرمال کروی ما را به ارزیابی مجموع مربعات اضافی راهنمایی می‌کند.

فرض کنید S بیانگر مجموع مربعات، v درجه آزادی، P تعداد پارامترها با زیرنویس‌های f و P برای الگوهای کامل و جزئی و e زیرنویس برای اضافی باشد. محاسبات را می‌توان بر اساس جدول (۳-۵) خلاصه نمود. برای تکمیل، نسبت S_e^2 / S_f^2 را با $F(v_e, v_f, \alpha)$ مقایسه می‌کنیم و الگوی جزئی را با این شرط قبول می‌کنیم که: نسبت میانگین مربع محاسبه شده از مقدار نظیر جدول کمتر باشد.

به عبارت دیگر، جملات اضافی را نگه می‌داریم و الگوی کامل را به کار می‌بریم. نمایش کاربرد تحلیل مجموع مربعات اضافی در مثال پروماسین ۱۰ به شرح زیر و در بخش (۳-۱۱) ارائه شده است.

جدول ۳-۵

Source	Sum of Squares	Degrees of Freedom	Mean Square	F Ratio
Extra parameters	$S_e = S_p - S_f$	$v_e = P_f - P_p$	$s_e^2 = S_e / v_e$	s_e^2 / s_f^2
Full model	S_f	$v_f = N - P_f$	$s_f^2 = S_f / v_f$	
Partial model	S_p	$N - P_p$		

توجه شود که در کمترین مربعات خطی، تحلیل مجموع مربعات اضافی دقیق است. زیرا، بردار داده‌های y ، بر زیر فضای خطی فضای پاسخ به منظور محاسبه S_p ، S_e تصویر شده است. از دید ریاضی، الگوی جزئی صفحه انتظار، یک زیر فضای خطی از الگوی کامل صفحه انتظار است. آن‌گاه، بردارهای باقی مانده می‌توانند به مؤلفه‌های متعامد تجزیه شوند. همچنین، با استفاده از این حقیقت، که بردار باقی مانده الگوی کامل دارای مجذور طول است و از متغیر تصادفی χ^2 با $N - P$ درجه آزادی پیروی می‌کند، می‌توان نتیجه گرفت، که مجذور طول‌های مؤلفه‌ها نیز به صورت متغیر تصادفی χ^2 پخش شده‌اند. درجه آزادی آنها نیز معادل ابعاد زیر فضاهای خطی است.

در الگوهای غیر خطی که مورد قبول ما واقع می‌شوند. تحلیل فقط یک تقریب است. زیرا، نسبت میانگین مربعات محاسبه شده، به طور دقیق دارای توزیع F نیست. هر چند توزیع نسبت میانگین مربعات، فقط از خواص ذاتی غیر خطی و نه اثر غیر خطی پارامتر متأثر می‌شود و همچنان که در فصل هفتم نشان داده خواهد شد، معمولاً غیر خطی بودن ذاتی کوچک است. هنگامی که الگوی جزئی کافی نباشد، اثر غیر خطی بودن ذاتی می‌تواند در تحلیل بزرگ شود. ولی، به هر حال الگوی جزئی رد می‌شود. این به هنگامی است که مقادیر برازش داده شده خیلی نزدیک به هم باشند و در نتیجه، نوع پخش بحرانی است. در این حالات، معمولاً غیر خطی بودن ذاتی دارای اثر کوچکی است. زیرا، پاسخ‌های مورد انتظار مقایسه شده در روی رویه انتظار، خیلی نزدیک به هم هستند.

۳-۱۰-۲- پارامترهای نموی و متغیرهای نشانگر

پارهای از الگوهای تو در تو را می‌توان بر اساس پارامترهای نموی، عامل بندی کرد. یک پارامتر نموی را برای تغییر در یک پارامتر میان بلوک‌های حالات را به حساب می‌آوریم و با یک متغیر نشانگر مشارکت می‌دهیم. یکی از فواید کاربرد پارامترهای نموی این است که، می‌توان ارزیابی اولیه‌ای از نیازهای الگوی کامل

به طور مستقیم از خروجی رگرسیون (بدون محاسبات اضافی) به عمل آورد. کاربرد پارامتری‌های نموی را با یک مثال روشن می‌کنیم.

مثال : پرومیسین ۱۰

در آزمایش پرومیسین، دو دسته از آزمایش اجرا شده‌اند. در یکی آنزیم تیمار پرومیسین (جدول ۱۴-۳) و در دیگری آنزیم مشابهی بدون پرومیسین به کار رفته است. فرض بر این است که پرومیسین در پارامتر سرعت حداکثر مؤثر خواهد بود. ولی، بر پارامتر نیمه - سرعت مؤثر نیست. هر دو گروه داده‌ها در نمودار (۱۳-۳) رسم شده است.

تحلیل مجموع مربعات اضافی را برای بررسی عدم تغییر پارامتر θ_2 به کار می‌بریم. در این جا نیاز به برازش یک الگوی جزئی است. الگوی کامل شامل مجموعه‌ای کاملاً متفاوت از پارامترها برای داده‌های تیمار و غیر تیمار است.

اگر الگوی جزئی شامل پارامترهای متفاوت θ_1 ، ولی پارامترهای مساوی θ_2 باشد، برای ترکیب کردن الگوی کامل و جزئی متغیر نشانگر زیر را معرفی می‌کنیم.

$$x_2 = \begin{cases} 0 & \text{غیر تیمار} \\ 1 & \text{تیمار} \end{cases}$$

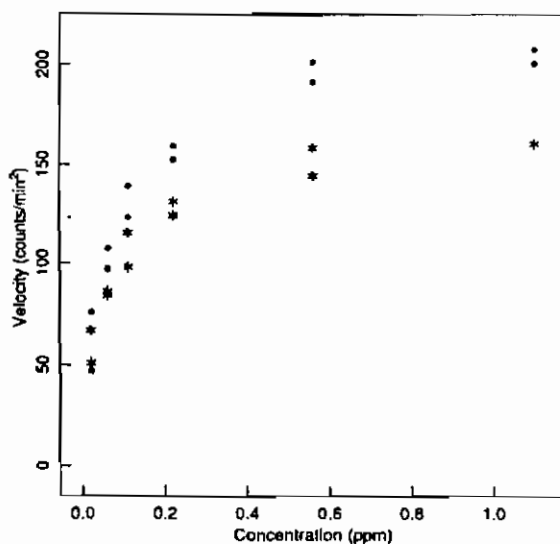
فرض می‌کنیم x_1 غلظت فرعی است. الگوی ترکیبی به صورت زیر ارائه می‌شود.

$$f(x, \theta) = \frac{(\theta_1 + \phi_1 x_2) x_1}{(\theta_2 + \phi_2 x_2) + x_1} \quad (۴-۳)$$

در این جا θ_1 حداکثر سرعت برای آنزیم غیر تیمار، ϕ_1 سرعت حداکثر نموی مربوط به تیمار، θ_2 نقطه نیمه - سرعت (مشترک محتمل) و ϕ_2 تغییر در نیمه - سرعت مربوط به تیمار اند. فرض کنیم ϕ_1 غیر صفر بوده و مایل به دانستن غیر صفر بودن ϕ_2 هستیم. الگوی (۴-۳) را برازش داده و نتایج آن در جدول (۶-۳) ارائه شده است. با توجه به نسبت کوچک t ، پارامتر ϕ_2 می‌تواند صفر باشد. لذا، الگوی جزئی (۴-۳) را با $\phi_2 = 0$ برازش می‌دهیم. نتایج این برازش در جدول (۷-۳) و تحلیل مجموع مربعات اضافی و در جدول (۸-۳) ارائه شده است. در این آزمایش خوش - طرح که دارای تکرار است، امکان تحلیل عدم برازش الگوی جزئی وجود دارد. این تحلیل در جدول (۹-۳) آمده است خلاصه محاسبات مزبور به‌مراه رسم باقیمانده‌ها (مشخص نشده‌اند)، بیان گر این است که، یک الگو، شامل پارامتر مشترک نیمه - سرعت و یک سرعت مجانبی بالاتر، برای داده‌های تیمار کافی است.

جدول ۳-۶. خلاصه پارامتری برای الگوی ۴ پارامتری میشلیز - منتن برازش داده شد بر داده‌های ترکیبی پرومپسین.

Parameter	Estimate	Approx. Std. Err.	t Ratio	Correlation Matrix			
θ_1	160.3	6.90	23.2	1.00			
θ_2	0.0477	0.00828	5.8	0.77	1.00		
ϕ_1	52.4	9.55	5.5	-0.72	-0.56	1.00	
ϕ_2	0.0164	0.0114	1.4	-0.56	-0.72	0.77	1.00



نمودار ۳-۱۳. رسم داده‌های سرعت آنزیم در مقابل غلظت فرعی، داده‌های مربوط به آنزیم تیمار (غیر تیمار) با پرومپسین به صورت (*)

نشان داده شده است.

جدول ۳-۷. خلاصه محاسبات پارامتری برای الگوی ۳ پارامتری میشلیز - منتن برازش داده شده بر داده‌های ترکیبی پرومپسین.

Parameter	Estimate	Approx. Std. Err.	t Ratio	Correlation Matrix		
θ_1	166.6	5.81	28.7	1.00		
θ_2	0.058	0.00591	9.8	0.61	1.00	
ϕ_1	42.0	6.27	6.7	-0.54	0.06	1.00

جدول ۸-۳. تحلیل مجموع مربعات اضافی برای الگوی ۳ و ۴ پارامتری میشلیز - متن برازش داده شده بر داده های ترکیبی پرومایسین.

Source	Sum of Squares	Degrees of Freedom	Mean Square	F Ratio	p Value
Extra	186	1	186.	1.7	0.21
4-parameter	2055	19	108.2		
3-parameter	2241	20			

جدول ۹-۳. تحلیل نابرازشی الگوی ۳ پارامتری میشلیز - متن برازش داده شده بر مجموعه کامل داده های پرومایسین.

Source	Sum of Squares	Degrees of Freedom	Mean Square	F Ratio	p Value
Lack of fit	1144	9	127.3	1.3	0.35
Replication	1097	11	99.7		
Residuals	2241	20			

در این مثال نسبت t برای پارامتری نموی، اجازه استنباط دلخواهی را برای در نظر گرفتن تغییر از یک بلوک به بلوک دیگری می دهد. همچنین توصیه کردیم، که تحلیل مجموع مربعات اضافی را بیشتر به کار بگیریم. زیرا، تحت تأثیر غیر خطی بودن اثرات پارامتر نیست (فصل هفتم را ببینید).

بنابراین آزمون t در حالت غیر خطی، دقیق تر است. ما نسبت t را فقط به این منظور به کار بردیم که ممکن است پارامتر نموی صفر باشد و بیشتر مورد توجه قرار گیرد. به عبارت دیگر، تصمیم قطعی بر این که پارامتر بر مبنای تحلیل مجموع مربعات قرار گیرد یا بر مبنای تحلیل نیمرخی t (فصل ششم را ببینید).

به طور خلاصه پارامترهای نموی روش مستقیم و ساده ای را برای محاسبه این که امکان تغییر در پارامترها در میان بلوک رخ دهد را در نظر می گیرد. پارامترهای نموی به روشنی می توانند در کاربرد مجموع کمترین مربعات نیز به منظور محاسبه تغییر در پارامترهای میان بلوکی به کار روند. پس از آن، آزمون t دقیق خواهد بود. حتی برای کمترین مربعات خطی، توصیه کردیم که الگوی کاهش داده شده را برازش دهید و تحلیل مجموع مربعات اضافی را برای مهیا کردن تصمیم نهایی که شامل حذف یا در نظر گرفتن پارامتر است، به کار برید. زیرا، این کار برای اجتناب از چند خطی بودن و ازدیاد واریانس است. همچنین پارامترهای نموی می توانند در هنگام وجود بیش از دو بلوک، توسط معرفی متغیر نشانگر اضافی یا در صورت امکان، با بازنویسی پارامتر به صورت تابعی از متغیرهای دیگر مطابق بخش (۳-۱۱) به کار رود.

۳-۱۰-۳ الگوهای ناتو در تو.

اولین کوششهای پژوهشگر هنگامی است که، تصمیم بگیرد کدام الگوی تو در تو بهتر است. به عبارت دیگر، علت‌های معنی داری در برتر شناختن یک الگو به نسبت سایر موارد وجود داشته باشد. البته باید بیشترین وزن را به دلایل پژوهشگر داد. زیرا، اولین کمک در تحلیل داده‌ها، تفسیر یا به حساب آوردن رفتار خود داده‌ها است، نه این که به راحتی بهترین برازش را به دست آوریم.

اگر پژوهشگر نتوانست دلایل متقاعدکننده‌ای برای انتخاب یک الگو از میان بقیه ارائه کند، آن گاه، تحلیل آماری مورد استفاده قرار می‌گیرد و به احتمال زیاد، مهمترین آنها تحلیل باقی مانده هاست. به طور کلی، باید الگویی با کمترین مجموع مربعات باقی مانده‌ها و بهترین باقی مانده‌ها به ظاهر تصادفی را انتخاب کرد. باید باقی مانده‌ها در مقابل مقادیر پیش‌بینی شده رسم شوند، متغیرها و ترتیب زمانی سایر باقی مانده‌ها (به احتمال زیاد پنهانی‌ها) واریسی شوند، بخش (۳-۷) را ببینید.

۳-۱۱-۳ پارامترهای تابعی از سایر متغیرها

در پاره‌ای از شرایط، پارامترهای یک الگوی مکانیکی وابسته به سایر متغیرهاست. برای مثال در مطالعات حرکت شیمیایی، ممکن است داده‌هایی از چند آزمایش با شرایط عمل متغیر در اختیار باشند. همچنین حدس زده شود، که ثابت‌های نرخ بستگی به راههای اصولی و منظم شرایط عمل دارند. در نتیجه مایل به برازش الگویی باشیم که پارامترهای حرکتی θ - که بستگی به چند متغیر فرایند به نام w و چند پارامتر فرایند $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_p)^T$ دارد - را در برگیرد. بر این اساس داریم: $\theta = \theta(w, \phi)$ در این صورت تابع انتظار به شکل $f(x; \theta) = f(x; \theta(w, \phi))$ خواهد بود.

برای برآورد پارامترهای چنین الگوی توسعه یافته‌ای، باید تابع را بر حسب متغیرهای عادی x ، متغیرهای فرایندی w و پارامتر فرایند ϕ بسط دهیم. مشتقات را نسبت به ϕ حساب کرده، سپس یک الگوریتم گوس - نیوتن را برای همگرایی به $\hat{\phi}$ به کار ببریم. این عملیات به خوبی کار است. هر چند که از قبل بنا را بر همین عمل گذاشتیم و اکنون نیز دنبال می‌کنیم.

(۱) در هر سطح w ، پارامترهای حرکتی θ را در الگوی عادی برآورد می‌کنیم.

(۲) پارامترهای برآورد شده $\hat{\theta}_p$ را در مقابل w رسم می‌کنیم تا یک شکل معقولی از رابطه بین $\hat{\theta}_p$ و w به دست آید. سپس، برآوردهای آغازین را برای پارامترهای فرایند ϕ به دست می‌آوریم.

(۳) قانون زنجیری مشتق را برای محاسبه مشتقات نسبت به ϕ به کار می‌بریم تا وجود مشتق نسبت به θ را به شرح زیر کشف کنیم.

$$\frac{\partial \eta_n}{\partial \phi_l} = \sum_{p=1}^P \frac{\partial \eta_n}{\partial \theta_p} \frac{\partial \theta_p}{\partial \phi_l}$$

در این رابطه $l=1, \dots, L$ بوده که L تعداد نهایی پارامترهای فرایند است. کاربرد از این روش در بخش (۵-۵) ارائه خواهد شد.

مثال : پرومیسین ۱۱

فرض کنید در تحقیقات پرومیسین (مثال پرومیسین ۱۰) چهار سطح تیمار از پرومیسین، به جای فقط دو تا وجود دارد (تیمارها و غیر تیمارها). حال، می‌توانیم با مشارکت سه متغیر نشانگر، تغییر در پارامترها را نسبت به تیمارهای متفاوت بررسی کنیم. اگر تیمارهای پرومیسین شامل داروهای متفاوت باشند امکان نوشتن آن به صورت زیر وجود دارد:

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1(w)x}{\theta_2(w) + x}$$

در این جا یک شکل محتمل از θ_1 و θ_2 به شرح زیر است:

$$\theta_1 = \phi_{10} + \phi_{11}w$$

$$\theta_2 = \phi_{20} + \phi_{21}w$$

در این مثال، x متغیر (عادی) است. غلظت فرعی و متغیر فرایند w ، همان غلظت پرومیسین است. حال، فرض کنید، که در غلظت پرومیسین w_1 ، برآوردهای $\hat{\theta}_{11}$ و $\hat{\theta}_{21}$ و در غلظت w_2 برآوردهای $\hat{\theta}_{12}$ و $\hat{\theta}_{22}$ را به دست آورده‌ایم. همچنین ترسیم $\hat{\theta}_2$ در مقابل w به طور کلی منحنی صافی را نشان می‌دهد. این عملیات بیانگر ثابت بودن θ_2 است. حال، می‌توان $\hat{\theta}_2 = \phi_{20}$ گرفت. افزون بر آن فرض کنیم که ترسیم $\hat{\theta}_1$ در مقابل w ، نشان‌دهنده رابطه‌ای به شکل خط راستی و به صورت $\hat{\theta}_1 = \hat{\phi}_{10} + \hat{\phi}_{11}w$ باشد. اکنون می‌توانیم رگرسیون $\hat{\theta}_1$ را روی w ، به منظور به دست آوردن برآوردهای آغازین $\hat{\phi}_{10}$ و $\hat{\phi}_{11}$ انجام دهیم. می‌توان الگویی که بر داده‌های ترکیبی برازش داده شده به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned} f(x, w, \phi) &= \frac{\theta_1(w)x}{\theta_2(w) + x} \\ &= \frac{(\phi_{10} + \phi_{11}w)x}{\phi_{20} + x} \end{aligned}$$

۱۲-۳-۱۲-۳ ارائه نتایج

همانند همه تحلیل‌های آماری، نتایج حاصل از تحلیل رگرسیون غیر خطی باید روشن و مختصر باشد. این بیشتر با در نظر گرفتن احتیاجات و تصورات استفاده کنندگان به انجام می‌رسد. گزارش باید اغلب شامل خلاصه‌ای از یافته‌های اصلی و بحث‌ها باشد. خلاصه باید نمادی ریاضی از الگوی نهایی، برآورد

پارامترها و خطاهای استانداردشان، تفسیر الگو و پارامترها موجود در مسئله اصلی را داشته باشد. در بدنه اصلی گزارش، مفید است که مسئله اصلی و در صورت امکان، هدف از شکل عمومی ملاحظات الگوی مکانیکی ارائه شود. داده‌ها ترسیم شوند. بحث‌های اولیه ارائه شوند. به ویژه اگر عملیات شامل تبدیلات داده‌ها یا تابع انتظار باشد، اغلب فهرستی از داده‌ها ارائه شود (شاید به صورت پیوست). ولی باید ترسیم‌ها به منظور ارتباطات مؤثر ارائه شوند. الگوی اولیه به همراه شرح مختصری از گامهای محاسباتی برای کاهش یا گسترش الگو ارائه می‌شود. اگر نیازی بود پیوستی شامل شرح مفصل تحلیل نیز عرضه شود. الگوی نهائی باید به همراه برآورد پارامترها، تابع انتظار برازشی و نوار تقریبی اطمینان برای تابع انتظار نیز آورده شود. رسم دوگانه ناحیه استنباط پارامتر و نمودار نیم‌رخ باید بر اساس توصیف فصل ششم انجام گیرد. تفسیر تابع انتظار و مقادیر پارامتر نسبت به مسئله اصلی از اهمیت زیادی برخوردار است. به خصوص هر یافته جدید که برای متغیرهای اضافی در الگو یا عدم احتیاجی از هر متغیر یا پارامتر، مورد نیاز است، ارائه شوند. سرانجام، باید بحث‌ها و توصیه‌ها را ارائه نمود. به ویژه درباره آینده احتمالی آزمایشات یا توسعه تحقیق سخن به میان آورد.

برای نوشتن بهتر، اهرنبرگ (۱۹۸۱ و ۱۹۸۲) و واتر (۱۹۸۱) را ببینید. آماده سازی و ارائه نموداری موارد در تافت (۱۹۸۳)، کلوند (۱۹۸۴، ۱۹۸۵) و چمبرز و دیگران (۱۹۸۳) وجود دارد.

۱۳-۳- مصرف نیتريت: یک مثال عملی

برای بررسی روش ارائه شده در این فصل، تحلیلی از کاربرد نیتريت در بوته‌های گیاه لوبیا را به صورت تابعی از شدت نور (الویت پیرسن ۱۹۸۶) ارائه می‌دهیم. بخشهایی از برگهای اولیه بوته لوبیا از ۳ تا ۶ روزه را به ۸ سطح از شدت نور ($\mu\text{E}/\text{m}^2\text{s}$) تقسیم بندی کرده‌ایم، سپس نیتريت مورد استفاده (nmol/g hr) را اندازه گیری نموده‌ایم. آزمایش در روزهای متفاوت تکرار شده و داده‌های نتیجه در پیوست شماره یک، بخش (۱۲-۱۸) فهرست شده‌اند.

آزمایشات دارای چنان رفتار نظری نبود که گویای رفتار خاصی باشند. ولی، پژوهشگران فکر می‌کردند که استفاده نیتريت در شدت نور صفر، برابر صفر بوده و در صورت افزایش شدت نور، به طور مجانبی زیاد می‌شود.

۳-۱۳-۱- تحلیل مقدماتی

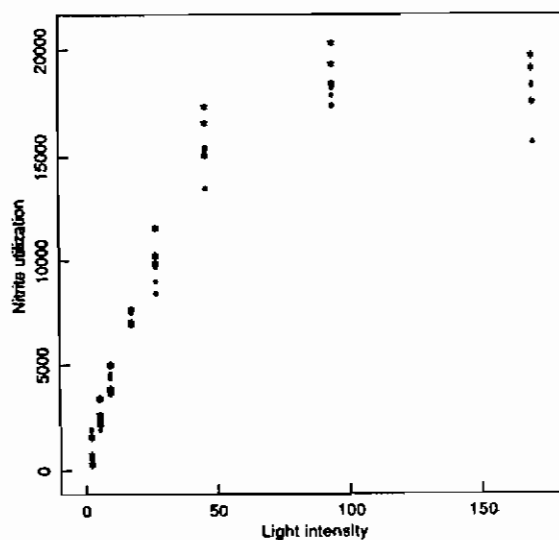
با توجه به رسم داده‌ها (شکل ۳-۱۴)، دیده می‌شود که تفاوتی بین مصرف نیتريت در دو روز وجود دارد. به خصوص در شدت‌های بالای نور. همچنین، در شدت‌های بالای نور افتی در پاسخها وجود دارد. علاوه بر آن دیده می‌شود، که حتی در دامنه تغییرات پاسخ از ۲۰۰ تا ۲۰۰۰۰ (nmol/ghr)، واریانس به طور مؤثری پایاست. از این رو، نیازی به تبدیل پایایی واریانس نیست. برای تحقیق در پایانی ظاهری واریانس، تحلیل دوطرفه واریانس را با کاربرد متغیرهای نشانگر، برای روزها و شدت‌های نور انجام داده‌ایم، نتایج در جدول (۳-۱۰) و (۳-۱۱)، ارائه شده‌اند. برای هدفمان اطلاعات بسیار مفیدی از تحلیل واریانس دو طرفه، شامل پاسخ مجموع مربعات و میانگین مربعات که برای آزمون عدم برازش مفیداند، ارائه شده است. هر چند باید توجه نمود، که عدم معنی دار بودن تقابل ضرب شدت و روز بیان کننده این است، که بعضی از پارامترهای الگو، ممکن است برای دو روز، مساوی باشند. از سوی دیگر، اثر معنی دار روز قبل به تقویت اختلاف مشاهدات بین ارتفاع حداکثر در دو روز می‌پردازند. ترسیم انحراف معیارهای حاصل شده، در مقابل میانگین‌های به دست آمده، در نمودار (۳-۱۵)، اظهارات قبلی ما را در پایا بودن واریانس تأیید می‌کند. از این رو، اقدام به برازش الگو می‌کنیم. توجه شود که تحلیل واریانس به کار رفته در این جا به عنوان یک ابزار غربالی تلقی می‌شود. قصد اصلی، تحلیل نهائی این داده‌ها نیست، زیرا الگوی جمعی فرض شده در تحلیل واریانس، هنوز مناسب نیست.

جدول ۳-۱۰- تحلیل واریانس دو طرفه برای داده‌های مصرف نیتريت.

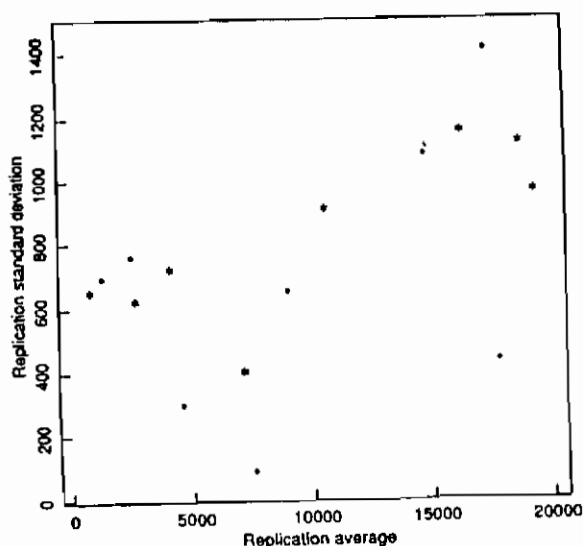
Source	Sum of Squares (10 ⁶)	Degrees of Freedom	Mean Square (10 ⁶)	F Ratio	p Value
Days	4.23	1	4.23	6.1	0.02
Intensity	2040	7	291.5	420.	0.00
Days × intensity	10.07	7	1.44	2.1	0.08
Replication	22.21	32	0.694		

جدول ۱۱-۳- نتایج متوسط و انحراف معیارهای داده‌های مصرف نیتريت.

Intensity	Day 1		Day 2	
	Average	Standard Deviation	Average	Standard Deviation
2.2	826	652	1327	694
5.5	2702	623	2541	758
9.6	4136	719	4619	296
17.5	7175	401	7554	86
27.0	10567	908	9019	650
46.0	16302	1154	14753	1082
94.0	19296	963	17786	430
170.0	18719	1117	17374	1408



نمودار ۱۴-۳- رسم مصرف نیتريت توسط بوته لوبیا در مقابل شدت نور برای یک روز (#) و دو روز (●).



نمودار ۱۵-۳. رسم انحراف استانداردهای پاسخ داده شده در مقابل جواب‌های متوسط داده‌های مصرف نیتريت روز اول به صورت * و روز دوم به صورت • نشان داده شده است.

۳-۱۳-۲- انتخاب الگو

با توجه به این که پژوهشگران الگویی را در ذهن ندارند، لازم است که الگویی را بر مبنای رفتار داده‌ها انتخاب کرد. الگوهای مشیلز-متن به شکل:

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 x}{\theta_2 + x}$$

و الگوی نمایی ساده‌افزایشی مطابق زیر را انتخاب می‌کنیم.

$$f(x, \theta) = \theta_1 (1 - e^{-\theta_2 x})$$

علت انتخاب این دو این است که نظر پژوهشگران را در مورد مصرف نیتريت تأمین می‌کنند، زیرا، در شدت صفر نور، مساوی صفر و در صورت افزایش شدت نور، به طور مجانبی زیاد می‌شوند. برای ساده‌تر کردن توصیف، شرح مفصل الگوی مشیلز-متن را ارائه کرده‌ایم و فقط خلاصه‌ای از الگوی نمایی افزایش را ذکر نموده‌ایم.

چون ۲۴ مشاهده از هر روز این آزمایش خوش - طرح وجود دارد، معقول است که برای هر روز یک الگوی جداگانه برازش دهیم. می‌خواهیم مقادیر مساوی پارامترهای یا لااقل برخی از آنها برای هر دو روز برقرار شوند. از این رو اقدام به برازش یک الگو بر روز اول و همراه با پارامترهای نموی بر روز دوم برازش

می‌دهیم. بنابراین تابع به صورت زیر خواهد بود:

$$f(x, \theta) = \frac{(\theta_1 + \phi_1 x_2) x_1}{(\theta_2 + \phi_2 x_2) + x_1}$$

در این جا x_1 شدت نور و x_2 یک متغیر نشانگر است که در بخش (۳-۱۰) ارائه شد.

$$x_2 = \begin{cases} 0 & \text{روز ۱} \\ 1 & \text{روز ۲} \end{cases}$$

۳-۱۳-۳- مقادیر آغازین

چون مقدار حداکثر روز اول، حدود ۲۰۰۰۰ و روز دوم، حدود ۱۸۰۰۰ است، بنابراین $\theta_1^0 = 25000$ و $\theta_2^0 = 30000$ را انتخاب می‌کنیم. پاسخ در شدت نوری در حدود ۳۴ به حدود ۱۲۵۰۰ برای روز اول و ۲۵ برای روز دوم می‌رسد، که مقادیر $\phi_2^0 = 34$ و $\phi_1^0 = 1$ را ارائه می‌دهد.

۳-۱۳-۴- ارزیابی برازش

همگرایی در مقادیری که در جدول (۳-۱۲) درج شده به عمل آمده است. از روی نسبت‌های t ، دیده می‌شود که هر دو پارامتر نموی می‌توانند صفر برآورد شوند. بنابراین امکان برازش یک الگوی مشترک وجود دارد. علاوه بر آن آزمون عدم برازش را در این الگو مطابق جدول (۳-۱۳) انجام داده‌ایم. دیده می‌شود، که این الگوی چهار پارامتری کافی نیست. (بحث مشابهی برای الگوی نمایی افزایش نیز وجود دارد، در این حالت نسبت عدم برازش $3/2$ ، متناظر با مقدار احتمال صفر است).

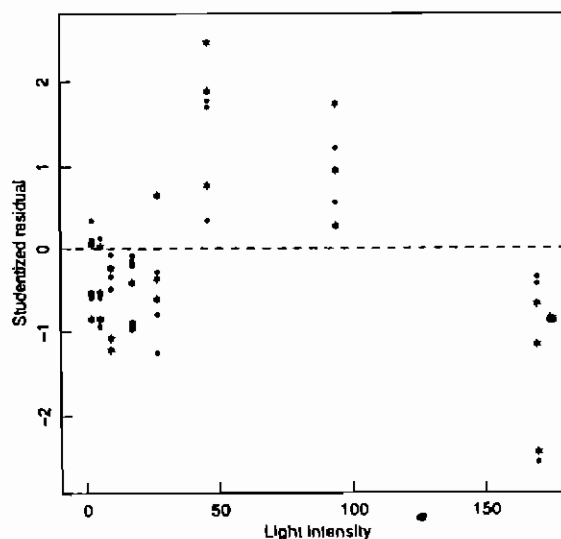
رسم باقی مانده‌ها در مقابل شدت نور، که در نمودار (۳-۱۶) آمده است. رفتار غیر تصادفی با باقی مانده‌های منفی کوچک، شدت‌های بزرگ و مقادیر مثبت در وسط را آشکار می‌کند. الگو باید پیرایش شود تا مصرف نیتريت بر اثر ازدیاد شدت نور نسبت به سطحی که محقق در نظر دارد، کاهش یابد.

جدول ۳-۱۲- خلاصه پارامتری برای الگوی ۴ پارامتری میشلیز - متن برازشی بر داده‌های مصرف نیتريت.

Parameter	Estimate	Standard Error	t Ratio	Correlation Matrix		
θ_1	24 743	1241	19.9	1.00		
θ_2	35.27	4.66	7.6	0.88	1.00	
ϕ_1	-2329	1720	-1.4	-0.72	-0.64	1.00
ϕ_2	-2.174	6.63	-0.3	-0.62	-0.70	0.88
						1.00

جدول ۱۳-۳. تحلیل عدم برازش برای الگوی ۴ پارامتری میشلیز - متن برازشی بر داده‌های مصرف نیتريت.

Source	Sum of Squares (10 ⁶)	Degrees of Freedom	Mean Square (10 ⁶)	F Ratio	p Value
Lack of fit	64.30	12	5.36	7.72	0.00
Replications	22.21	32	0.694		
Residuals	86.51	44			



نمودار ۱۶-۳. باقی مانده‌های استودنتایز برای الگوی ۴ پارامتری میشلیز - متن رسم شده در مقابل شدت نور روز اول داده با* و روز دوم با

● نمایش داده شده‌اند.

۳-۱۳-۵. پیرایش الگو

برای تغییر تابع انتظار میشلیز - متن به صورتی که به نقطه اوجی برسد و سپس تنزل کند، یک جمله درجه دوم به مخرج اضافه نموده تا الگوی درجه دروم میشلیز - متن تولید شود.

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 x}{\theta_2 + x + \theta_3 x^2}$$

این الگو با پارامترهای نمو و متغیر نشانگر برای روزهای مختلف به شکل زیر در می‌آید.

$$f(x, \theta) = \frac{(\theta_1 + \phi_1 x_2) x_1}{(\theta_2 + \phi_2 x_2) + x_1 + (\theta_3 + \phi_3 x_2) x_1^2}$$

در الگوی نمائی افزایشی به جای عدد ۱ عبارت $e^{-\theta_3 x}$ را جانشینی می‌کنیم تا الگوی تفاضلی نمائی به صورت: $f = \theta_1 (e^{-\theta_3 x} - e^{-\theta_2 x})$ ایجاد شود. این الگو به اضافه پارامترهای نمو و یک متغیر نشانگر را نیز بر داده‌ها برازش داده‌ایم.

مقادیر آغازین برای پارامترها با وارون کردن تابع و داده‌ها و کاربرد کمترین مربعات خطی برای الگوی درجه دوم میشلیز - منتن به دست آمده است. با کاربرد وارون، داده‌های روز دوم: $\theta = (1.07411, 234.0 / 0.24)^T$ به دست می‌آید. ولی برای داده‌های روز اول مقادیر منفی عاید می‌شود. همچنین مقادیر آغازین روز دوم را با کمی آشفتگی به منظور به دست آوردن مقادیر آغازین الگوی ۶ پارامتری با $\theta^0 = (11.0000, 234.0 / 0.24)^T$ و $\phi^0 = (-1.0000, 23.0 / 0.2)^T$ به کار برده‌ایم. (برای الگوی تفاضلی نمایی حدس می‌زنیم که ممکن است دو نرخ ثابت به نسبت $\frac{1}{5}$ باشند. با به کارگیری برآورد θ_2 ، داریم: $\theta_3 = 0 / 0.06$. حال θ_1 را توسط رابطه زیر برای چند مقدار x محاسبه می‌کنیم.

$$\theta_1 = \frac{y}{e^{-0.006x} - e^{-0.03x}}$$

این رابطه برای داده‌های روز اول $\theta_1^0 = 37000$ و برای روز دوم مقدار $\theta_1^0 = 35000$ را ارائه می‌کند، که از آن $\phi_1^0 = -2000$ به دست آوردیم.

۶-۱۳-۶- ارزیابی برازش

در جدول (۱۴-۳) محاسبات مربوط به همگرایی سریع برآورد پارامترهای الگوی درجه دوم میشلیز - منتن ارائه شده است. همه پارامترها دارای نسبت t تقریبی بی‌اعتباری‌اند. در نتیجه، پارامترها می‌توانند صفر شوند. بنابراین، یک الگوی ساده کفایت می‌کند.

همبستگی‌های تقریبی بسیار بالای پارامتر نیز ما را به وجود پارامترهای اضافی در الگو راهنمایی می‌کند. مجموع مربعات باقی مانده‌ها $(1.0 \times 10^6 / 0.2 \times 32 / 42)$ درجه آزادی) حدود $\frac{1}{3}$ مقادیر الگوی قبلی است. (بحث مشابهی برای الگوی تفاضلی ۶ پارامتری وجود دارد). باقی مانده‌های این الگو در مقابل شدت نور در نمودار (۱۷-۳) رسم شده‌اند. این نمودار، خوش رفتاری و مناسب بودن الگو را نشان می‌دهد.

۳-۱۳-۷- مختصرتر کردن الگو

برای محاسبه این که، چه سهولتی می‌توان در الگوی درجه دوم میشلیز - منتن ایجاد کرد، مقادیر ϕ_2 و ϕ_3 را صفر انتخاب و ϕ_1 را برای محاسبه تفاوت بین روزها باقی می‌گذاریم. برای محاسبه مقادیر آغازین، به سادگی

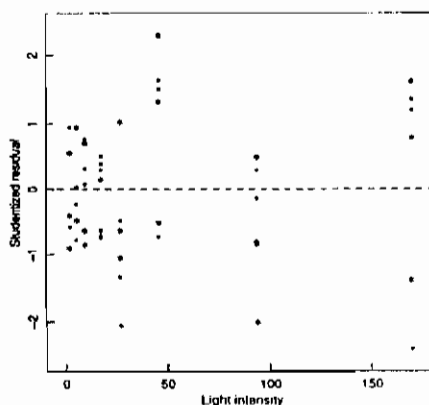
می‌توان مقادیر همگرا شده مربوط به الگوی ۶ پارامتری را به کار برد.

۳-۱۳-۸- ارزیابی برازش

نتایج حاصل از الگوی درجه دوم ۴ پارامتری در جدول (۳-۱۵) ارائه شده است. تحلیل مجموع مربعات اضافی برای ۴ پارامتر در مقابل الگوی درجه دوم ۶ پارامتری، در جدول (۳-۱۶) آمده است، که نزولی را در برازش با حذف ϕ_2 ، ϕ_3 نشان نمی‌دهد. ترسیم باقی مانده‌ها در مقابل شدت نور مطابق جدول (۳-۱۸) دلالت بر کفایت الگو دارد. افزون بر آن، یک تحلیل عدم برازش نیز در جدول (۳-۱۷) ارائه شده که نشان دهنده کفایت الگو است.

Parameter	Estimate	Standard Error	t Ratio	Correlation Matrix			
θ_1	89 846	37 583	2.4	1.00			
θ_2	186.7	90.1	2.1	1.00	1.00		
θ_3	0.01626	0.00922	1.8	1.00	0.99	1.00	
ϕ_1	-38 956	40 020	-1.0	-0.94	-0.94	-0.94	1.00
ϕ_2	-83.23	96.8	-0.9	-0.93	-0.93	-0.92	1.00
ϕ_3	-0.00846	0.0993	-0.9	-0.93	-0.92	-0.93	1.00

جدول ۳-۱۴- خلاصه پارامتری الگوی درجه دوم ۶ پارامتری میشلیز-متن برازشی بر داده‌های مصرف نیتريت.



نمودار ۳-۱۷- رسم باقی مانده‌های استیوید نتایز برای الگوی درجه دوم ۶ پارامتری میشلیز-متن در مقابل شدت نور، روز اول با * و روز دوم

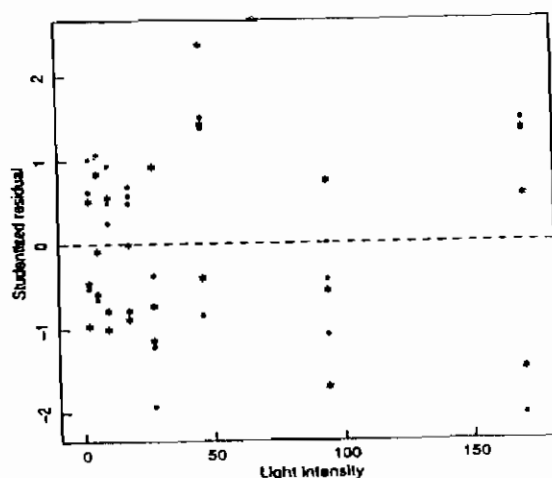
را با ● نشان داده شده است.

Parameter	Estimate	Standard Error	t Ratio	Correlation Matrix			
θ_1	70.096	16.443	4.3	1.00			
θ_2	139.4	39.3	3.6	1.00	1.00		
θ_3	0.01144	0.00404	2.8	0.99	0.99	1.00	
ϕ_1	-5381	1915	-2.8	-0.69	-0.66	-0.66	1.00

جدول ۱۵-۳. خلاصه پارامتری الگوی درجه دوم ۴ پارامتری میشلیز - متتن برازشی بر داده‌های مصرف نیتريت.

Source	Sum of Squares (10^6)	Degrees of Freedom	Mean Square (10^6)	F Ratio	p Value
Extra	0.82	2	0.41	0.54	0.59
6-parameter	32.02	42	0.762		
4-parameter	32.84	44	0.746		

جدول ۱۶-۳. تحلیل مجموع مربعات اضافی برای الگوهای برازشی ۴ و ۶ پارامتری درجه دوم میشلیز - متتن بر داده‌های مصرف نیتريت.



نمودار ۱۸-۳. رسم باقی مانده‌های استیوود نتایج برای الگوی درجه دوم ۴ پارامتری میشلیز-متتن در مقابل شدت نور. روز اول با * و روز دوم

با ● مشخص شده است.

Source	Sum of Squares (10 ⁶)	Degrees of Freedom	Mean Square (10 ⁶)	F Ratio	p Value
Lack of fit	10.63	12	0.886	1.28	0.28
Replications	22.21	32	0.694		
Residuals	32.84	44	0.746		

جدول ۱۷-۳- تحلیل عدم برازش الگوی درجه دوم ۴ پارامتری میشلیز- متن برازش داده شده بر داده‌های مصرف نیتريت.

توجه شود که پارامتر ϕ_1 اکنون با نسبت t تقریبی معادل $2/8$ ، آشکارا به طور معنی داری مخالف با صفر است، که خود تأییدی بر ظن اخیر ما دال بر تفاوت بین روزها است. این پارامترها به طور معنی داری در الگوی ۶ پارامتری مخالف صفر نیستند، که تأکید بیشتری در وجود پارامتر اضافی در الگوی ۶ پارامتری است. بنابراین، خطای استاندارد تقریبی پارامتر به طور ماهرانه‌ای بزرگ است و موجب عدم معنی دار بودن نسبت t می‌شود.

ماتریس همبستگی تقریبی پارامتر برای الگوی درجه دوم ۴ پارامتری میشلیز- متن در جدول (۳-۱۵) نشان داده شده و نشان می‌دهد که، چند تا از همبستگی‌ها خیلی بزرگ اند. مطلب مزبور در رگرسیون غیر خطی موضوعی غیر عادی نیست و توسط ترکیب شکل تابع انتظار و طرح تولید شده است. به عنوان مثال، برای الگوی میشلیز- متن، چگونگی طرح مشکلی ایجاد نمی‌کند، و غیر ممکن است که همبستگی صفر را بین پارامترها به دست آورد. زیرا، امکان ندارد که مشتقات رابه زور متعامد کرد. برای دیدن این مطلب، توجه می‌کنیم که در سطر اول، ماتریس مشتق v_1 دارای اعضای $x/(2 + x)$ است و سطر دوم V_2 دارای اعضای $x^2/(2 + x)^2 - \theta_1 x/(2 + x)$ است. همه عناصر v_1 مثبت و همه عناصر v_2 منفی هستند. از این رو، اغلب، دو بردار v_1 و v_2 به طور همسو، گرایش به یک نقطه در فضای پاسخ دارند و در نتیجه، مایل به هم خطی اند. به عنوان بررسی نهایی در الگو، می‌توان الگوی سه پارامتری میشلیز- متن را برازش داد و آن را با الگوی درجه دوم ۴ پارامتری میشلیز- متن با کاربرد تحلیل مجموع مربعات اضافی مقایسه کرد تا ضرورت اساسی تری از θ_3 را دریافت. این عمل انجام نگرفته است. زیرا باقی مانده‌های مربوط به الگوی مرجع ۳ پارامتری میشلیز- متن رفتار بسیار بدی دارند.

$$f = \frac{(\theta_1 + \phi_1 x_2) x_1}{\theta_2 + x_1}$$

همچنین نتایج و بحث برای الگوی تفاضلی نمائی انجام گرفته است، به طوری که، الگوی ۴ پارامتری با پارامترهای نمائی و عامل مقیاس مشترک، به اضافه یک پارامتر نموی برای روز دوم برازش کافی داشته است.

خلاصه اطلاعات برازش در جدول (۳-۱۸) و مقایسه با الگوی ۶ پارامتری، در جدول (۳-۱۹) و تحلیل عدم برازش در جدول (۳-۲۰) ارائه شده است. در این حالت نسبت عدم برازش ۱/۴۶ می‌شود، که هنوز معنی دار نیست. ولی، اندکی بزرگتر از الگوی درجه دوم میشلیز - متن است).

Parameter	Estimate	Standard Error	t Ratio	Correlation Matrix		
θ_1	35 115	8940	3.9	1.00		
θ_2	0.01845	0.00317	5.8	-0.99	1.00	
θ_3	0.00325	0.00120	2.7	0.99	-0.97	1.00
ϕ_1	-2686	1006	-2.7	-0.71	0.67	-0.68 1.00

جدول ۳-۱۸- خلاصه پارامتری الگوی تفاضلی ۴ پارامتری نمایی برازش بر داده‌های مصرف نیتريت.

Source	Sum of Squares (10^6)	Degrees of Freedom	Mean Square (10^6)	F Ratio	p Value
Extra	0.37	2	0.19	0.23	0.80
6-parameter	33.97	42	0.809		
4-parameter	34.34	44	0.780		

جدول ۳-۱۹- تحلیل مجموع مربعات اضافی برای داده‌های ۶ پارامتری در مقابل الگوی تفاضلی ۴ پارامتری نمایی برازشی بر داده‌های

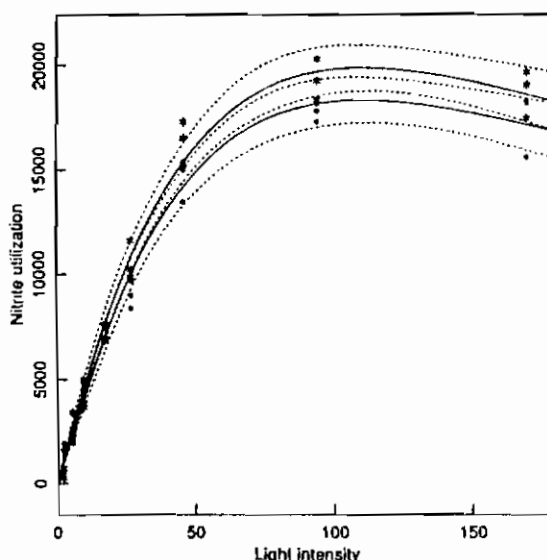
مصرف نیتريت.

Source	Sum of Squares (10^6)	Degrees of Freedom	Mean Square (10^6)	F Ratio	p Value
Lack of fit	12.13	12	1.011	1.46	0.19
Replications	22.21	32	0.694		
Residuals	34.34	44	0.780		

جدول ۳-۲۰- تحلیل عدم برازش برای الگوی تفاضلی ۴ پارامتری نمایی برازشی بر داده‌های نیتريت.

۳-۱۳-۹- مقایسه الگوها

برای مقایسه الگوهای تودرتو، متغیرهای نمو و اصل مجموع مربعات اضافی را به کار برده ایم. ولی، آنها را برای مقایسه دو الگوی درجه دوم میشلیز - منتن و تفاضلی نمائی به کار نگرفته ایم. اولین کوشش، سؤال از پژوهشگران بود که شاید الگویی را در زمینه های علمی ترجیح دهند. با این حالت پژوهشگران الگویی را پیشنهاد نکردند، بنابراین، آنها را با نتایج هر دو الگو آشنا کردیم. به خاطر نسبت عدم برازش و کوچکی مجموع مربعات باقی مانده تمایل بیشتری به الگوی میشلیز - منتن احساس می شود. در نمودار (۳-۱۹)، داده های مصرف نیتريت به همراه منحنی برازشی و نوار اطمینان تقریبی ۹۵٪ برای الگوی درجه دوم ۴ پارامتری میشلیز - منتن را ارائه داده ایم.



نمودار ۳-۱۹- رسم مصرف نیتريت در مقابل شدت کم به همراه منحنی های برازشی (خطوط ممتد) و نوار استنباط تقریبی ۹۵٪ (نقطه گذاری). داده های برای روز اول * و روز با ● نشان داده شده است.

۳-۱۳-۱۰- گزارش نتایج

یک گزارش مختصر برای پروفیسور مالیوت و پیرسن تهیه شد، که در متن بخش (۳-۱۲) آورده ایم. اصلی ترین یافته الگوی مناسب مورد نظر این بود که به یک نقطه اوجی می رسد تا به یک مجانب. حتی در چنین سطح پائینی از نواز مورد قبول واقع نگردید. به عنوان قسمتی از گزارش، ما آزمایشهای دیگری را برای

انجام توصیه کردیم. بخصوص در شدتهای بالای نور تا قادر باشیم نیاز الگو را برای رسیدن به یک اوج، نسبت به میل مجانبی بفهمیم و کمکی باشد به تفاوت بین دو الگوی رقیب. همچنین اظهار شد که آزمایشات آتی، شامل سطحی پایینتر و در شدتهای پایین نوری باشد تا کوششمان به نتیجه برسد.

۳-۱۴- طرح آزمایشها

تاکنون بیشتر تلاش خود را صرف تحلیل داده‌ها نموده‌ایم تا طرح آزمایشها برای تولید داده‌های خوب. هر چند معتقدیم که طرح آزمایش برای پیشرفت علمی حیاتی است. دلیل اهمیت فردی طرح آزمایش این است، که اطلاعات موجود در داده‌ها در هنگام انجام آزمایش تثبیت شده‌اند و هیچ مقدار از تحلیل حساسیت داده‌ها نمی‌توانند اطلاعات نشان داده نشده در داده‌ها را کشف کنند.

یکی از علل تأکید مادر تحلیل نسبت به طرح این است که به طور معمول با داده‌هایی سروکار داریم، که حاصل از طرحی نه چندان خوب آغازین است. دلیل دیگر این است، هنگامی که یک طرح خوب بسیار گران قیمت باشد، چگونگی تحلیل داده‌ها را باید بدانیم. این عمل قدردانی از یک طرح خوب آزمایشی خواهد بود.

۳-۱۴-۱- ملاحظات کلی

آزمایش، اساس مطالعات علمی است. ما آن را به عنوان کاهش دهنده عدم اطلاع قلمداد میکنیم. در هر مرحله تحقیق، در جهت داشتن داده‌ها گام برمی‌داریم و قادر به تشریح بخشی از آن‌ها هستیم. همچنان که آزمایش پیش می‌رود، قادر به حساب آوردن یا تشریح بیشتری از داده‌هایم. برای مثال فرض کنیم. یک مهندس شیمی مایل به دانستن چگونگی یک تولید خاص است. در ابتدا او اطلاعات اولیه کمی دربارهٔ عامل‌ها و واکنش شیمیایی دارد. ولی با گذشت مراحل آزمایش و در شرایط مختلف، او بیشتر قادر خواهد شد که در هر گام عامل‌های مهم و چگونگی اثرشان را بر پاسخ پیدا نماید. در آغاز او ممکن است به طور تجربی طرح‌های غربالی را برای جدا کردن عامل‌هایی که بیشترین اثر را در پاسخ دارند - با کاربرد طرح‌های عاملی یا طرح‌های عاملی کسری - مورد استفاده قرار می‌دهد (باکس، هانتز و هانتز ۱۹۷۸). اگر او مایل به بهینه کردن پاره‌ای از مشخصه‌ها باشد، آن گاه ممکن است اقدام به طرح رویهٔ پاسخ بنماید. (باکس، هانتز و هانتز ۱۹۷۸ و باکس و دراپر ۱۹۷۸)، شاید بعد از آن خواسته باشد که آهنگ تولید یا درک بیشتر ساختار موجود در تولید را پیدا کند و بخواهد شیوهٔ عملش را از یک الگوی تجربی به یک الگوی مکانیکی (اغلب غیر خطی) تغییر دهد. این چهرهٔ طرح آزمایشی است که در این بخش به آن می‌پردازیم.

در آغاز فرض می‌کنیم که آزمایش‌کننده شکل خوش - تعریفی از تابع انتظار، وابستگی عاملها به پاسخ، هدف آزمایش و اطلاعات لازم و کافی را برای موارد زیر در نظر گرفته است.

(۱) برآورد پارامتر موردنظر در الگو با صحت (یعنی اریبی کم) و دقت (یعنی واریانس کوچک) انجام شده است.

(۲) تحقیق در فرضیات مربوط به تابع انتظار و الگوی خطا انجام پذیرفته است.

در هنگام برآورد بهتر است، ابتدا در شرایط خطی بودن بحث کرد. به همین منظور در بخش زیر مروری مختصر از طرح آزمایشها برای توابع انتظار خطی را ارائه می‌دهیم. (برای بحث مفصل‌تر باکس، هانت و هانتز (۱۹۷۸) دیونس (۱۹۵۶) و کوچران و کاکس (۱۹۵۷) را ببینید. همچنین، به ملاحظات کلی در طرح آزمایشات به باکس و دراپر (۱۹۵۹) کوچران (۱۹۷۳) و استینبرگ و هانتز (۱۹۸۴) مراجعه شود. هامیلتون و واتر (۱۹۸۵) با استفاده از مشتق دوم بحثی در طراحی‌ها دارند و هندسه طرح آزمایشها، در سیلوی و تیرینگتن (۱۹۷۳) وجود دارد).

قبل از در نظر گرفتن روشهای مشروحتر طرح آزمایشها، چند پیشنهاد که برای اطمینان به حصول اهداف عمومی (۱) و (۲) مفیداند ارائه می‌کنیم.

در ارتباط با در نظر گرفتن برآوردهای دقیق و صحیح از پارامترها، این یادآوری مفید است، که یک طرح آزمایشها، شامل انتخاب مقادیری از عاملها برای تعدادی از حالات آزمایشات (یا انجام) انتخابی است. لذا، باید اهمیت داد که تعداد حالات به قدر کافی زیاد باشد تا رسیدن به هدف مخصوص آزمایش اطمینان بخش شود. برای مثال اگر یک تابع انتظار شامل ۵ پارامتر باشد، باید حداقل ۵ تا شرط جدا از هم آزمایش وجود داشته باشد. همچنین اهمیت دارد که تعداد آزمایش انجام شونده در یک زمان را محدود کرد. به عبارت دیگر باید یک طرح بزرگ آزمایشها را بنا نمود و سپس، برده وار اقدام به تکمیل طرح نمود. باید توجه لازم در آموخته‌های هر مرحله آزمایش شود و این اطلاعات در ساختن طرح گام بعدی به کار رود. تعداد آزمایشهایی که در هر بلوک قابل اجراست، به تعداد عاملها و نوع انجام طرح آزمایش بستگی دارد. به طور معمول بلوک‌هایی به اندازه‌های ۱۰ تا ۲۰ کارسازتراند.

انتخاب محلها جاگذاری عامل باید به گونه‌ای باشد، که در دامنه‌ای مفید و مناسب از عاملها قرار گیرند. به عبارت دیگر، باید عاملها نزدیک به مقادیر حساسی باشند تا به ما اجازه برآورد پارامترها را در آینده بدهند. سطح هر عامل باید به اندازه کافی وسیع باشد به طوری که اثر هر عامل در هنگام تغییرپذیری ذاتی پاسخ آشکار شود.

در هنگام بررسی فرضیات مربوط به تابع انتظار، اهمیت دارد که تکرارها را برای قادر ساختن به آزمون

عدم برازش یا عدم کفایت تابع انتظار، در نظر بگیریم. باید در صورت امکان، تصادفی کردن ترتیب آزمایشها، به منظور اطمینان در مناسب بودن تابع انتظار را نیز در نظر گرفت. (اگر عملگرها عامل‌های مظنون نیستند، تصادفی کردن سبب ظهور اثراتشان در هنگام افزایش تغییرپذیری نسبت به برآوردهای ناصحیح پارامتر دارد و در بخش ۱-۳ بحث شده است).

در هنگام بررسی فرضیات مربوط به الگوی خطا، انجام تکرارهای مجدد مهم اند. مطابق بحث (۱-۳)، تکرارها، ما را قادر به آزمون پایایی واریانس و محاسبه تبدیل پایایی در صورت فرض پایا نبودن می‌کنند. تصادفی کردن نیز قصد دارد که اطمینان بدهد همه فرضیات در نظر گرفته شده برای خطاها مناسب اند. این مطلب در بخش (۱-۳) بحث شده است. در بخش‌های بعد مجدداً اهمیت و قدرت تصادفی کردن را خواهید دید. به طور خلاصه، تحلیل آماری در نظر گرفته شده برای کفایت استخراج و اطلاعات موجود در مجموعه داده‌ها، در طرح آزمایشهای آماری در دو گام انجام می‌گیرد. اولین گام، اطمینان یافتن از وجود اطلاعات مهم و لازم در مجموعه داده‌هاست. دومین گام، استخراج و نمایش این اطلاعات به شیوه‌ای ساده است.

۳-۱۴-۲- معیار دترمینانی

الگوی (۱-۱) به صورت: $Y = X\beta + Z$ را با فرضیات معمول (۱-۲) و (۱-۳) مربوط به خطاهای Z را در نظر می‌گیریم.

$$E[Z] = 0$$

$$Var[Z] = \sigma^2 I$$

برای یک الگوی رگرسیون خطی، یک ستون از ماتریس مشاهدات X ، فقط بستگی به انتخاب متغیرهای طرح K دارد. جایی که متغیرهای طرح چنین مشخه‌هایی را به هنگام انجام آزمایش به حساب می‌آورند. به عبارت دیگر، در چه فشاری، در چه حرارتی و تا آخر، یک درایه منفرد و ماتریس مشاهدات از مقادیر متغیرهای طرح محاسبه می‌شود. برای هر انتخاب متغیرهای طرح تولیدکننده ماتریس مشاهدات X ، پارامتر β دارای یک ناحیه استنباط مشترکی است، که حجم آن متناسب با $|X^T X|^{-1/2}$ است. بنابراین، یک انتخاب منطقی معیار طرح، این است که، نقاط طرحی را چنان انتخاب کنیم، که حجم ناحیه استنباط مشترک حداقل شود (والد ۱۹۴۳).

چون توان $1/2$ - غیر منطقی است، والد، حداقل کردن دترمینان $D = |X^T X|$ را پیشنهاد کرده است و طرحهایی که در این معیار صدق می‌کنند، طرح بهینه D نامیده می‌شوند و این معیار بنام معیار دترمینانی شناخته می‌شود.

از دید هندسی، معیار دترمینانی بر این دلالت که ستون X را چنان انتخاب کرده‌ایم، که هر بردار تا حد ممکن، طویل بوده (یا $\|X_p\|^2$ تا حد ممکن بزرگ باشد. $p=1,2,\dots,p$) و کوشش در انجام متعامد کردن بردارها شود ($X_p^T X_q = 0, p \neq q$). مطلب اول، قرار داشتن صفحه انتظار را در فضای پاسخ بیمه می‌کند و این که خطهای پارامتر به طور گسترده‌ای در صفحه انتظار جا داده شده‌اند. در نتیجه خطاها، آنهایی که واریانسشان خارج از دسترس است اثر کوچکی خواهند داشت. بنابراین، یک ناحیه مشترکی با حجم کم در فضایی پارامتر تولید می‌کنند. مطلب دوم ما را مطمئن می‌سازد که برآوردهای پارامتر، که شریک با عاملهاست، همبسته نخواهند بود. یعنی تغییر در پاسخ به طور صحیحی مشارکت با تغییرات در عامل سببی مناسب را می‌کند و نه نسبت به سایر عاملها.

دو خاصیت بلندی طول و متعامد بودن بردارهای مشاهدات، اطمینان می‌دهد، که یک قرص واقع در روی صفحه انتظار در یک بیضوی کوچک در جهت استاندارد، در روی صفحه پارامتر تصویر می‌شود. معیار ترمینالی توسط باکس و لوکاس (۱۹۵۹) در توابع انتظار غیر خطی به کار برده شده است. آنها به جای کاربرد ماتریس X ماتریس مشتق V^0 را که در چند برآورد پارامتر آغازین θ^0 استفاده شده، به کار برده‌اند. به عبارت دیگر طرح غیر خطی معیار بهینه D تعدیل به حداکثر می‌شود.

$$D = |V^{0T} V^0| \quad (5-3)$$

طرح یک آزمایش بستگی به مرحله‌ای دارد که محقق در آن کار می‌کند. این هنگامی است که فقط شکل الگو دانسته شود، نه مقادیر پارامتر، این مطلب در آنزیم جنبشی، یا نیاز اکسیژن بیوشیمی مطالعه شد. محقق مواجه با انتخاب مقادیر عاملها برای تولید برآوردهای خوبی از پارامتر است. این مرحله را «طرح‌های آغازین» گویند. ممکن است محقق در پژوهشهای بعدی، طرح یک آزمایش را در جهت ازدیاد دقت برآوردهای تعدادی یا همه پارامترها در نظر بگیرد. و از داده‌های که از مراحل قبل به دست آمده بهره‌برداری کند. این چنین طرحی به نام طرح‌های دنباله‌ای خوانده می‌شود. بالاخره هنگامی که نظر خاصی در یک زیر مجموعه از پارامترها وجود دارد طرح‌های زیر مجموعه‌ای نامیده می‌شود.

۳-۱۴-۳- طرح‌های آغازین

باکس و لوکاس (۱۹۵۰) طرح‌های آغازینی را مشتمل بر P نقطه برای یک الگوی P پارامتری در نظر گرفته، سپس معیار (۵-۳) را برای حداکثر کردن $|V^0|$ ساده نمودند.

از نظر هندسی، معیار دترمینانی اطمینان می‌دهد، که رویه انتظار به گونه‌ای است، که نواحی بزرگ در صفحه مماسی در $\eta(\theta^0)$ به نواحی کوچک در فضای پارامتر تصویر می‌شوند. در حالتی که بیش از P پارامتر

انتخاب شود. طرح بهینه - D به طور معمول از تکرارهای P نقطه مجزا نتیجه می شود (باکس ۱۹۶۸). این نقاط طرح، آنهایی هستند که می توانند به عنوان بهینه - D در حالت $N=P$ انتخاب شوند. از این رو طرح های آغازینی را که فقط شامل P اجرا هستند، در نظر می گیریم.

مثال: پروماینسین ۱۲

برای بررسی انتخاب یک طرح آغازین، حالتی از آنزیم جنبشی را در نظر می گیریم، که از الگوی میشلیز - متن پیروی می کند. x_{\max} را به عنوان حداکثر غلظت فرعی مجاز و برآوردهای آغازین پارامترهای θ^0 داده شده را در نظر می گیریم.

مشتق تابع انتظار نسبت به برآوردهای آغازین θ^0 به صورت زیر است:

$$\frac{x}{\theta_2^0 + x} \quad \frac{-\theta_1^0 x}{(\theta_2^0 + x)^2}$$

و همچنین درترمینان بهینه شده عبارت است از:

$$|V^0| = \begin{vmatrix} \frac{x_1}{\theta_2^0 + x_1} & \frac{-\theta_1^0 x_1}{(\theta_2^0 + x_1)^2} \\ \frac{x_2}{\theta_2^0 + x_2} & \frac{-\theta_1^0 x_2}{(\theta_2^0 + x_2)^2} \end{vmatrix}$$

$$= \frac{\theta_1^0 x_1 x_2 |x_1 - x_2|}{(\theta_2^0 + x_1)^2 (\theta_2^0 + x_2)^2}$$

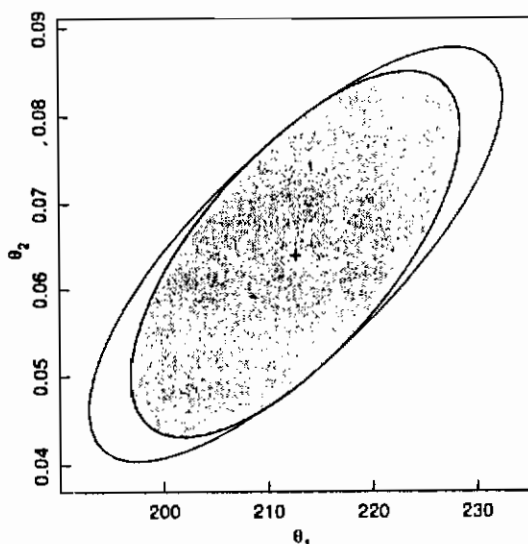
شناسه این درترمینان هنگامی حداکثر می شود که

$$x_2 = \frac{\theta_2^0}{1 + 2(\theta_2^0 / x_{\max})} \approx \theta_2^0 \quad \text{و} \quad x_1 = x_{\max}$$

سپس، معیار درترمینانی، نقاط طرح را جایابی می نماید. این عمل به خوبی خم کردن مجانب θ_1 به طرف پایین با تشکیل یک آزمایش در غلظت حداکثر انجام می گیرد. برای خم کردن نیمه تمرکز به پایین از تشکیل سایر آزمایشها در نزدیک نیمه تمرکز فرضی استفاده می کند.

مقایسه طرح بهینه - D با طرح رقیق سازی انجام شده توسط ترلور (۱۹۷۴) آموزنده است. این طرح از $x_{\max} = 1/1$ و ۵ رقیق سازی با تقریب یک - نیمه با دو بار تکرار استفاده می کند. که در مجموع ۱۲ بار اجرا را نیاز دارد. با همان تعداد اجرا، طرح بهینه - D شامل ۶ تکرار در x_{\max} و ۶ تکرار در $x_2 = \theta_2^0 / [1 + 2(\theta_2^0 / x_{\max})]$ است. ما $\theta_2^0 = 0/1$ را به عنوان یک برآورد معقول آغازین در نظر می گیریم. در نتیجه طرح برابر $x_1 = 1/1$ و $x_2 = 0/0.85$ به دست می آید. در نمودار (۳-۲۰)، ناحیه اطمینان ۹۵٪

تقریبی خطی برای طرح رقیق سازی و داده‌ها، به همراه ناحیه اطمینان تقریبی طرح بهینه D - در حالی که فرض می‌شود هر دو طرح برآورد یکسانی از پارامتر و واریانس باقی‌مانده‌ها را می‌دهند - ارائه شده است. دیده می‌شود، که طرح بهینه D -، در حقیقت ناحیه اطمینان مشترک و بازه اطمینان کوچکتری را ارائه می‌کند. افزون بر آن همبستگی بین پارامتر نیز کوچکتر است. هر چند قصد از دقت کاربرد طرح بهینه D -، برقراری تعادل در مقابل از دست دادن هر اطلاعاتی در مورد عدم برازش است.



نمودار ۳-۲- مقایسه ناحیه‌های استنباط تقریبی ۹۵٪ برای دو طرح داده‌های پرومابیسین. ناحیه بزرگتر از طرح رقیق سازی و ناحیه سایه دار از طرح بهینه D به دست آمده است.

توجه شود که طرح، بستگی به پارامتر خطی شرطی θ_1 ندارد، در حالت کلی این موضوع برای پارامترهای شرطی خطی درست است و در بخش (۳-۱۴-۶) نشان داده شده است.

معیار دترمینانی، یک پایه عینی برای محاسبه P نقطه طرح، برای الگوهای P پارامتری را در نظر می‌گیرد. ولی، هدف طرح نباید به صورت کورکورانه به کار رود. معیار بر این پایه بنا شد، که تابع انتظار شناخته شده است. و فقط P نقطه طرح را برای برآورد P پارامتر در نظر می‌گیرد. تکرار در این P نقطه طرح مفید اند، زیرا، آنها اطلاعات پایا بودن واریانس را در نظر می‌گیرند، ولی نمی‌توانند اطلاعاتی در مورد عدم برازش را در نظر داشته باشند. احتمالاً، مفید خواهد بود که آزمایش دیگری در سایر نقاط طرح به منظور مشخص شدن عدم برازش ترتیب داده شود. برای روشن شدن این ملاحظه، هدف طرح رقیق سازی به طور برجسته‌ای

حساسی است. به ویژه که سطح بالایی از تشکل را در مثال بیان شده نشان می‌دهد.

۳-۱۴-۴- طرحهای دنباله‌ای

گاهی باید تعدادی از آزمایشها را که در قبل انجام گرفته واریسی کرد و معلوم کرد آیا وسایل خواص تابعی را دارند یا الگویی احتمالی را غربال می‌کنند. این مورد در باکس و هانتز (۱۹۶۵) تشریح شده است. در شرایطی دیگر، شاید امکان تشکیل و تحلیل تسریع نتیجه حاصل از یک آزمایش منفرد وجود داشته باشد. در این شرایط، حتی امکان برآوردهای بهتر پارامتر، در صورت طرح آزمایشهای دنباله‌ای وجود دارد. یعنی، یک اجرای آزمایشی طرح شده، داده‌ها جمع آوری و تحلیل می‌شوند و طرحی برای اجرای بعدی - توسط حداکثر کردن $|V_1^T V_1|$ نسبت به متغیرهای طرح X_{N+1} - به دست می‌آید، در این صورت:

$$V_1 = \begin{bmatrix} V_1 \\ V_{N+1} \end{bmatrix}$$

در این جا V_{N+1} بردار گرادیان $\partial f / \partial \theta^T$ به دست آمده در برآوردهای کمترین مربعات از N اجرای انجام شده قبلی است.

مثال : هم ترکیبی ۳

برای روشن کردن طرح دنباله‌ای، داده‌ها و الگوی مثال هم ترکیبی را در نظر می‌گیریم. همبستگی بین پارامترها بسیار بالاست. ناحیه‌های اطمینان تقریبی خطی شامل مقادیر منفی برای ثابت‌های تعادلی است. بنابراین، مایل به طرح آزمایشاتی برای به دست آوردن دقت بیشتر در برآوردهای پارامتر هستیم. نقاط طرح به وسیله مقادیر فشار جزئی هیدروژن (x_1) ، فشار جزئی پنتان نرمال، (x_2) و فشار جزئی ایزوپنتان (x_3) محاسبه می‌شوند. در اجراهای قبلی این مقادیر بین ۱۰۰ تا ۴۰۰ برای x_1 ، ۷۵ تا ۳۵۰ برای x_2 و ۳۰ تا ۱۵۰ برای x_3 متغیر بوده‌اند. از این رو محدودیت‌های مزبور را برای تعریف یک ناحیه معقول که بتوان در آن اجراهای بیشتری کرد به کار می‌بریم. با ارزیابی معیار طرحی دنباله‌ای بهینه - D در نقاط طرح مرکزی و در نقاط طرح دنباله‌ای در گوشه‌های ناحیه شروع می‌کنیم مقادیر موجود در جدول (۳-۲۱) حاصل این ارزیابی است. ترکیبی که معیار بهینه - D را بهینه می‌کند. عبارت است از مقدار پایینی $100(x_1)$ ، بالایی $350(x_2)$ و پایینی $30(x_3)$. از امتحان مقادیر نزدیک، نتیجه می‌شود، که گوشه یک بهینه موضعی است، بنابراین یک شبکه درست تحقیقی از نواحی طرح، هیچ بهینه‌ای را در داخل ایجاد نمی‌کند. ما این گوشه را به عنوان نقطه طرح برای اجرای جدید انتخاب می‌کنیم.

جدول ۲-۱۳-۲ معیار طرح دنباله‌ای بهینه D برای داده‌های الگوی هم ترکیبی ارزشیابی شده در گوشه‌های ناحیه طرح.

Factor			Criterion D 10^6
x_1	x_2	x_3	
100	100	30	4.63
400	100	30	1.95
100	350	30	9.44
400	350	30	3.99
100	100	150	1.82
400	100	150	1.82
100	350	150	3.98
400	350	150	2.42

۳-۱۴-۵- طرح‌های زیر مجموعه ای

هنگامی که فقط یک زیرمجموعه از پارامترهای θ مورد نظر است، معیار طرح بر اساس اظهارات باکس (۱۹۷) و هیل و هاتر (۱۹۷۴) پیرایش می‌شود. فرض می‌کنیم که پارامترها به گونه‌ای مرتب شده‌اند که P_1 پارامتر اولیه همان پارامترهای اغتشاش و P_2 پارامتر بعدی پارامترهای مورد نظر باشند. بردار θ^T را به صورت $(\theta_1^T | \theta_2^T)$ و ماتریس V^0 را به صورت $[V_1^0 | V_2^0]$ افراز می‌کنیم. حال ماتریس کوواریانس مربوط به P_2 پارامتر متناسب با $D_{2,2}$ بوده و به صورت زیر است:

$$D = (V^{0T} V^0)^{-1}$$

$$= \begin{bmatrix} V_1^{0T} V_1^0 & V_1^{0T} V_2^0 \\ V_2^{0T} V_1^0 & V_2^{0T} V_2^0 \end{bmatrix}^{-1}$$

$$= \begin{bmatrix} D_{1,1} & D_{1,2} \\ D_{1,2}^T & D_{2,2} \end{bmatrix}$$

بنابراین معیار بهینه D به حداقل کردن $D_s = |D_{2,2}|$ تغییر می‌یابد و این معادل حداکثر کردن عبارت زیر

$$\frac{|V^{0T} V^0|}{|V_1^{0T} V_1^0|} \quad \text{است:}$$

مثال : هم ترکیبی ۴

برای روشن کردن طرح زیر مجموعه‌ای، یک الگو مجموعه داده‌ها و ناحیه طرح مثال هم ترکیبی ۳ را در نظر می‌گیریم و شرایطی را که در آن مایل به توسعه برآورده‌های θ_2 ، θ_3 و θ_4 هستیم، اعمال می‌کنیم. ارزشیابی D_s در گوشه‌هایی در یک ناحیه، نتایج جدول (۲-۱۳-۲) را می‌دهد که بحث مشابهی و نقاط طرح هم

سانی را مطابق مثال هم ترکیبی ۳ ایجاد می‌کند.

Factor			Criterion D_5 10^6
x_1	x_2	x_3	
100	100	30	8.77
400	100	30	3.90
100	350	30	13.11
400	350	30	7.08
100	100	150	3.69
400	100	150	3.68
100	350	150	7.39
400	350	150	4.70

جدول ۲۲-۳. معیار طرح زیر مجموعه بهینه - D دنباله‌ای برای الگوی هم ترکیبی ارزشیابی شده در گوشه‌های ناحیه طرح.

۳-۱۴-۶. الگوهای خطی شرطی

مشخص کردن برآوردهای آغازین پارامتر θ قبل از حاصل شدن یک طرح آزمایشی، عملی ناشیانه است. چون، سرانجام و مقصود آزمایش، محاسبه برآوردهای پارامتر است. در مثال پرومیسین ۱۲ و هم ترکیبی ۳، دیدیم که طرح بهینه - D توسط مقدار پارامتر خطی شرطی تأثیرپذیر نبود. برای بیشتر الگوهای همراه با پارامترهای خطی شرطی، موقعیت نقاط طرح بهینه D ، به پارامترهای خطی شرطی بستگی ندارند (هیل ۱۹۸۰ و خودی ۱۹۸۴). بنابراین مسائل طرح ساده‌تر است.

ساده‌ترین نوع الگوی خطی شرطی که می‌توان در نظر گرفت، الگویی است که فقط یک پارامتر خطی شرطی دارد و تابع آن را می‌تواند به شکل زیر نوشت:

$$f(x, \theta) = \theta_1 g(x, \theta_{-1})$$

در این جا g تابع و $\theta_{-1} = (\theta_2, \dots, \theta_p)^T$ است. این الگو شامل الگوهای میشلیز - متن، BOD و هم ترکیبی است. گرادیان تابع الگو به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{\partial f}{\partial \theta^T} = \left[g(x, \theta_{-1}), \frac{\partial g}{\partial \theta_{-1}^T} \right] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \theta_1 I \end{bmatrix} \quad (۶-۳)$$

این الگو بستگی θ_1 را در وابستگی به x منفک می‌کند. با کاربرد (۶-۳) ماتریس مشتق V به شکل زیر نوشته می‌شود.

$$V = H(x, \theta_{-1}) B(\theta_1) \quad (۷-۳)$$

$$B(\theta_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \theta_1 I \end{bmatrix}$$

در این جا $B(\theta_1)$ یک ماتریس $p \times p$ است. بنابراین معیار بهینه D عبارت است از:

$$\begin{aligned} |V^T V| &= |B^T H^T H B| \\ &= |B|^2 |H^T H| \end{aligned}$$

دوباره همبستگی θ_1 جدا از X است. بنابراین طرح بستگی به θ_1 ندارد. تابع بالا به طور عموم برای الگوی خطی شرطی به شکل زیر ارائه می شود:

$$f(x, \theta) = \theta_1 g_1(x, \theta_{-1}) + \dots + \theta_L g_L(x, \theta_{-L})$$

در این جا $\theta_{-L} = (\theta_{L+1}, \dots, \theta_p)^T$ است. طرح بهینه D بستگی به پارامترهای خطی شرطی $(\theta_1, \dots, \theta_L)^T$ نخواهد داشت، به شرط آن که V به شکل (۷-۳) عامل بندی شده و B را مربع بکند. شرطی که ماتریس B مربع باشد، حالتی روشن در هیل (۱۹۸۰) یا مورد تأکید در خوری (۱۹۸۴) نبوده است. آنها نشان داده اند که معمولاً پارامترهای خطی شرطی در طرحهای زیر مجموعه ای اثر گذارند. علت چنین واقعه ای این است که در طرحهای دنباله ای، معیار طرح شامل نسبت دترمینانی مؤلفه های V است. لذا، حتی در صورت مربع بودن B ، عامل بندی ساده بالا رخ نمی دهد. خوری (۱۹۸۴) شرایطی را ارائه داده است که با وجود آن، پارامترهای خطی شرطی اثری در طرح ها برای زیر مجموعه های پارامترها نمی گذارند.

در شرایط مشترک جایی که هر مؤلفه θ_{-L} فقط وارد یکی از توابع g_i و $i=1, \dots, L$ می شود. مشتقات می توانند طبق (۷-۳) عامل بندی شوند. برای مثال طرح های بهینه D برای مجموع الگوهای نمایی به پارامترهای خطی شرطی بستگی ندارند.

$$f(x, \theta) = \theta_1 e^{-\theta_2 x} + \theta_3 e^{-\theta_4 x} + \dots + \theta_{p-1} e^{-\theta_p x}$$

۳-۱۴-۷- سایر معیارهای طرح

برآورد دقیق پارامتر، تنها هدف به کارگیری طرح آزمایشات نیست. الگوهای در نظر گرفته شده برای ساختن طرح ها به منظور تمایز بین توابع الگوی ممکن (باکس و هیل ۱۹۷۴) و برای برقراری تعادل، هدف تبعیض الگو و برآورد دقیق پارامتر است (هیل هانترو و ویشن ۱۹۶۸). مقالات مروری (استینرگ و هانترو ۱۹۸۴)، تعدادی از این معیارها را توصیف می کند. همچنین تعدادی از مرجعها را برای معیارهای طرح آزمایشات مختلف برای پاسخ یگانه و الگوهای غیر خطی چند منظوره در فهرست ارائه داده ایم.

تمرین‌ها:

۳-۱- با به کارگیری داده‌های پیوست شماره بخش (۴A-۲)، الگوی لجستیک را برازش دهید.

$$f(x, \theta) = \theta_1 + \frac{\theta_2}{1 + e^{-\theta_4(x - \theta_3)}}$$

(۱) داده‌ها را در مقابل (غلظت NIF) $x = \log_{10}$ رسم کنید. توجه شود که شما تصمیمی دربارهٔ چگونگی تلفیق داده‌های غلظت صفر گرفته‌اید. امکان دارد بخواهید که غلظت‌های حقیقی را نیز تلفیق کنید.

(۲) تفسیری نموداری از پارامترهای واقع در الگو ارائه دهید و با کاربرد رسم، مقادیر آغازین را برای هر یک از مجموعه داده‌ها به دست آورید.

(۳) با به کارگیری مقادیر آغازین در یک زیر برنامه کمترین مربعات غیر خطی، برآوردهای کمترین مربعات را برای پارامترها و برای هر مجموعه داده‌ها پیدا نمایید.

(۴) با به کارگیری پارامترهای نموی و متغیرهای نشانگر، کل مجموعه داده‌ها را برازش دهید.

(۵) با مشترک قرار دادن تعدادی از پارامترها در کل مجموعه داده‌ها، الگو را ساده کنید.

(۶) گزارش کوتاهی در مورد این تحلیل و یافته‌های خود بنویسید.

۳-۲- با به کارگیری داده‌های پیوست یک، بخش (۴A-۱۴)، یک الگوی مناسب مجموع نمایی را حساب کنید.

(۱) داده‌ها را در کاغذ نیمه لگاریتمی رسم نموده و با استفاده از آن تعداد جملات نمایی برازش بر داده‌ها را پیدا نمایید.

(۲) با به کارگیری منحنی ختالی برآوردهای آغازین را برای پارامترهای محاسبه کنید.

(۳) با استفاده از برآوردهای آغازین بند ۲، الگوی فرضی بند ۱ را برازش دهید.

۳-۳- (۱) با استفاده از رسم مسأله (۲-۶) تندترین کاهش از نقطه θ^0 را در روی منحنی به طور خلاصه تشریح کنید. راهنمایی: جهت تندترین کاهش عمود بر منحنی‌هاست.

(۲) آیا جهت نمو گوس - نیوتن نزدیک به جهت نخستین تندترین کاهش است.

(۳) با به کارگیری عامل شرطی $k=4$ نمو لونبرگ را محاسبه و رسم نمایید.

(۴) با به کارگیری عامل شرطی $K=4$ نمو مارکوارد را محاسبه و رسم نمایید.

(۵) در جهت‌های نسبی بردارهای نموی گوس - نیوتن، لونبرگ و مارکوارد بحث کنید.

۳-۴- با به کارگیری داده‌های پیوست شماره چهار بخش (۴A-۳)، یک الگوی مناسب را به دست آورید و پارامترها را برآورد کنید.

(۱) غلظت را در مقابل زمان، در روی کاغذ نیمه لگاریتمی رسم کنید و با به کارگیری رسم، تعداد جملات نمائی لازم به منظور برازش بر داده‌ها را به دست آورید.

(۲) با به کارگیری رسم و روش منحنی ختالی مقادیر آغازین پارامترها را به دست آورید.

(۳) با به کارگیری یک زیربرنامه، برآورد غیر خطی پارامترها را به دست آورید.

۳-۵. با به کارگیری یک زیربرنامه غیر خطی و داده‌ها و الگوی پیوست چهار، بخش (۴-۴A)، پارامترها را برآورد کنید. به تعداد تکرارهای مورد نیاز و سایر مشکلات موجود در هر مرحله کار توجه فرمائید.

(۱) هر وسیله‌ای را که فکر می‌کنید برای به دست آوردن مقادیر آغازین مربوط به پارامترهای الگو مناسب است به کار ببندید.

(۲) مقادیر آغازین محاسبه شده را در یک زیر برنامه برآورد غیر خطی برای برآورد پارامترها به کار برید. اگر به همگرایی رسیدید. ماتریس همبستگی تقریبی پارامتر را امتحان کنید. و در شرطی بودن الگو بحث کنید.

(۳) با مرکزیت قرار دادن عامل $\frac{1}{x_2}$ الگو را دوباره عامل بندی کنید و مقادیر آغازین معادل با قسمت یک را برای برآورد پارامترها به کار برید. اگر به همگرایی رسیدید، ماتریس همبستگی تقریبی پارامتر را امتحان کنید و در شرطی بودن الگو بحث کنید. عامل بندی دوباره چه اثری در تعداد تکرارها برای رسیدن همگرایی دارد.

(۴) با به کارگیری $\theta_1 = e^{\theta_1}$ ، $\theta_2 = e^{\theta_2}$ و مقادیر آغازین معادل با بند (۱)، الگوی بند (۱) را عامل بندی کنید و پارامترها را برآورد نمایید. اگر به همگرایی رسیدید، ماتریس همبستگی تقریبی پارامتر را امتحان کنید و در شرطی بودن الگو بحث فرمائید. این عامل بندی دوباره چه اثری در تعداد تکرارها جهت رسیدن همگرایی دارد.

(۵) الگوی بند (۲) را با به کارگیری عامل بندی مشابه بند (۳)، دوباره عامل بندی کنید و مقادیر آغازین مساوی بند (۱) را برای برآورد پارامترها به کار برید. اگر به همگرایی رسیدید ماتریس همبستگی تقریبی پارامتر را امتحان کنید و در شرطی بودن الگو بحث نمایید. عامل بندی دوباره چه اثری در تعداد تکرارها برای حصول به همگرایی دارد؟

۳-۶. با به کارگیری یک زیر برنامه برآورد غیر خطی و داده‌ها و الگوی پیوست شماره چهار بخش (۴-۵)، پارامترها را برآورد کنید. به تعداد تکرارهای مورد نیاز و سایر مشکلات موجود در هر مرحله کار توجه شود.

(۱) هر وسیله را که فکر می‌کنید برای به دست آوردن مقادیر آغازین مربوط به پارامتری الگو مناسب است به کار ببندید.

(۲) مقادیر آغازین محاسبه شده را در یک زیر برنامه برآورد غیر خطی برای برآورد پارامترها به کار برید. اگر به همگرایی رسیدید، ماتریس همبستگی تقریبی پارامتر را امتحان کنید و در شرطی بودن الگو بحث

نماید.

(۳) با به کارگیری $e^{-\phi_3(x-\phi_2)} = \theta_2 e^{-\theta_3 x}$ ، الگوی قسمت الف را عامل بندی کنید اگر به همگرایی رسیدید. ماتریس همبستگی تقریبی پارامتر را امتحان نموده و در شرطی بودن الگو بحث کنید. این عامل بندی چه اثری در تعداد تکرارها برای رسیدن به همگرایی دارد؟

۳-۷-۱) نشان دهید که طرح آغازین نظری بهینه - D برای الگوی لجستیک مسئله (۳-۱) شامل $x = (-\infty, \theta_3 - 1/0.44/\theta_4, \theta_3 + 1/0.44/\theta_4, +\infty)^T$ است.

(۲) نقاط طرح انتخابی را توسط رسم تابع لجستیک در مقابل x و رسم موقعیت نقاط طرح بر روی محور x ، به صورت نموداری تفسیر نمایید.

(۳) مشتقات نسبت به پارامترها را در مقابل x رسم نموده و این رسم‌ها را برای تفسیر انتخاب نقاط طرح به کار ببرید.

فصل چهارم

برآورد پارامترهای چند پاسخی

«بهتر، یک دشمن خوب است.»

ولتر

در بعضی از آزمایشات، امکان اندازه‌گیری بیش از یک پاسخ برای هر حالت وجود دارد. در تحلیل چنین آزمایشهایی، می‌توان اطلاعات حاصل از همه پاسخ‌های اندازه‌گیری شده را برای دقت بیشتر در برآورد پارامترها، یعنی الگوهای واقع‌گرایانه‌تر، ترکیب نمود. اطلاعات باید به گونه‌ای ترکیب شوند که فرضهای معقولی در رفتار جمله‌های اخلاص در اندازه‌گیری را منعکس نمایند.

توسط باکس و دراپر (۱۹۶۵) یک معیار برآورد پارامتر به صورت دترمینان برای داده‌های چند پاسخی ارائه شده است. فرضیاتی که این دو محقق در نظر گرفته‌اند این است که، جمله‌های اخلاص در حالات مختلف ناهمبسته‌اند. ولی برای پاسخ‌های متفاوت در حالتی یکسان، دارای ماتریس کوواریانس ثابت ولی نامعلومی اند. در این فصل این معیار مورد بحث قرار می‌گیرد. همچنین، روش تعمیم یافته‌ای از گوس-نیوتن را برای بهینه کردن آن معرفی می‌نمایم. علاوه بر این، معیار همگرایی این روش نیز توصیف خواهد شد و در صورت وجود نقاط منفرد در داده‌ها یا ماتریس باقی‌مانده‌ها، اصلاحات لازم مورد بحث قرار خواهد گرفت.

۴-۱- الگوی چند پاسخی

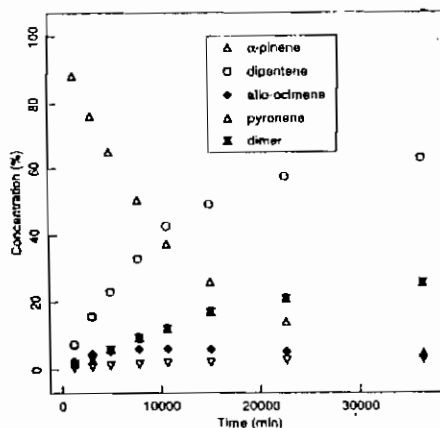
فرض کنید در هر N مرتبه اجرای آزمایش، M پاسخ اندازه گیری شده باشد. همچنین، برای M پاسخ، الگوها در نهایت به P پارامتر θ بستگی داشته باشند. می توان نوشت:

$$Y_{nm} = f_m(x_n, \theta) + Z_{nm} \quad n=1, \dots, N \quad m=1, \dots, M \quad (۴-۱)$$

در این رابطه Y_{nm} متغیر تصادفی همراه با مقدار اندازه گیری شده پاسخ m ام برای حالت n ام و f_m تابع الگو برای پاسخ m ام است. این تابع بستگی دارد به تعدادی یا همه جایگذاری های آزمایشی x_n و تعدادی یا همه پارامترهای θ . مؤلفه Z_{nm} جمله خطاست.

مثال: آلفا - پینن ۲

باکس و همکاران (۱۹۷۳)، یک تحلیل چند پاسخی را برای تعدادی از داده های آلفا- پینن که از قبل توسط فوگویت و هاوکینز (۱۹۷۴) تحلیل شده گزارش نموده اند. در این آزمایش، مقداری از سقر برای به دست آوردن یک فرآورده فرعی حرارت داده می شود، دو مجموعه اندازه گیری در $۱۸۹/۵$ و $۲۰۴/۵$ درجه سانتی گراد انجام پذیرفته است. در هر آزمایش غلظت نسبی آلفا - پینن و سه فرآورده فرعی در هر ۸ ساعت اندازه گیری شده است. غلظت نسبی فرآورده چهارم از غلظت سایرین حساب شده است. در این مثال $M=5$ پاسخ و $N=8$ حالت وجود دارد. داده های گرفته شده از حرارت $۱۸۹/۵$ درجه سانتی گراد در پیوست ۱، بخش (۱۸-۶) ارائه و در نمودار (۴-۱) رسم شده است.



نمودار ۴-۱- رسم غلظت های آلفا - پینن و فرآورده های فرعی آن در مقابل زمان در حرارت $۱۸۹/۵$ درجه سانتی گراد.

مثال: اس - پما - ۱

رفتار ضرایب عایق مختلطی از پلیمری می‌تواند به منظور شناخت ساختمان مولکولی پلیمر به کار رود. به طور فیزیکی قرصی از پلیمر در میان دو الکترود فلزی از یک پیل عایق که یک بازو، از چهار بازوی پل الکتریکی است قرار داده می‌شود. پل توسط یک ولتاژ نوسانی با بسامد (f به هرتز) که می‌تواند در یک محدوده وسیعی تغییر کند (۵ تا ۵۰۰۰۰۰ هرتز) تغذیه می‌شود. تعادل پل با کاربرد ظرفیت و ضریب هدایت استاندارد به وقوع می‌پیوندد. ثابت نارسانای مختلط، با تغییر از استاندارد نسبی به ثابت پل نارسانا محاسبه می‌شود. اندازه‌گیری‌ها، توسط پیرایش مرتب ظرفیت (حقیقی) و بازوهای هدایت (مجازی) پل، هنگامی که در یک بسامد و حرارت خاص تحریک می‌شود، بنا شده است.

ثابت نارسانای مختلط به صورت $\epsilon^* = \epsilon' - i\epsilon''$ نوشته می‌شود که ϵ' مؤلفه حقیقی، ϵ'' مؤلفه مجازی و $i = \sqrt{-1}$ است. هاوریلایک و نگامی (۱۹۶۷) داده‌های ترمیمی نارسانای ۲۱ پلی مر را تحلیل نموده و الگوی کلی زیر را پیشنهاد کرده‌اند.

$$\epsilon^* = \epsilon_{\infty} + \frac{\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}}{\left[1 + (i2\pi f/f_0)^a\right]^b}$$

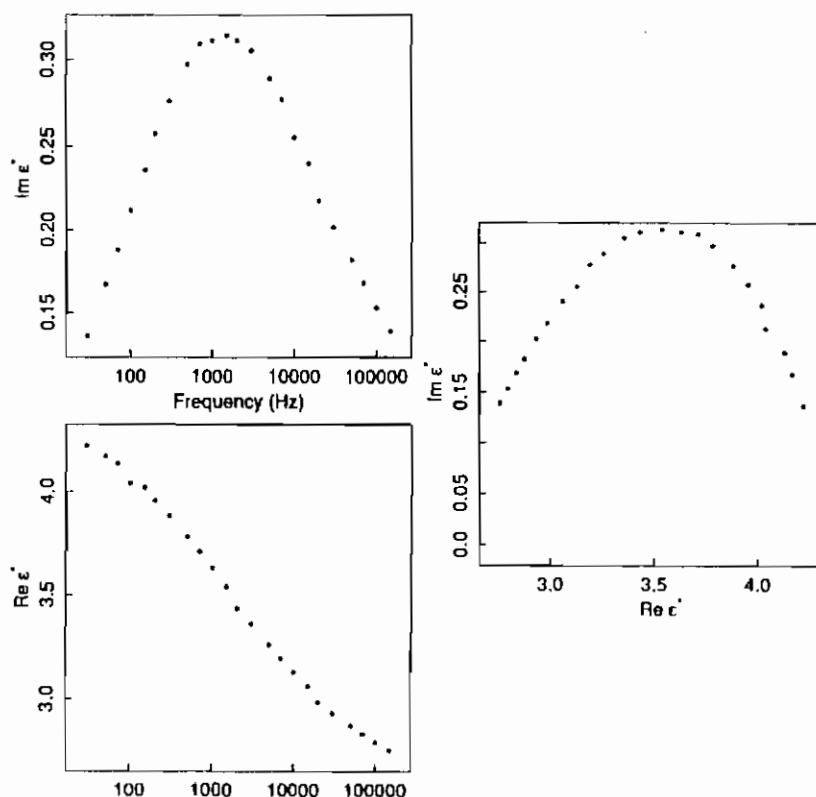
نمودار ۲-۴، a و b مؤلفه مجازی ϵ'' و حقیقی ϵ' را در مقابل بسامد مربوط به پلی سیندیو تاکتیک (متیل مت آکریل) ($S-PMMA$) را در حرارت ۸۶/۷ فارنهایت نشان می‌دهد. بنابر توصیه کول (۱۹۴۱) در نمودار ۲-۴، c ، این مؤلفه‌ها را در صفحه موهومی رسم کرده‌ایم. در این مثال $M=2$ پاسخ، $N=23$ حالت و $P=5$ پارامتر وجود دارد. داده‌ها در پیوست شماره بخش ۱۴-۱۳ داده شده است.

همان گونه که در برآورد پارامتر تک پاسخی، در فصل قبل بحث شد، در تحلیل داده‌های آزمایشی فرض بر این است که N متغیر طرح آزمایشات تثبیت شده \mathbf{y}_n با $n=1, \dots, N$ معلوم فرض می‌شود. بنابراین می‌توانیم ماتریس $N \times M$ مشاهدات Y با درایه (n, m) ام، \mathbf{y}_{nm} و ماتریس $N \times M$ پاسخ مورد انتظار $H(\theta)$ با درایه (n, m) ام و $f_m(x_n, \theta)$ را تشکیل دهیم. به کمک Y و $H(\theta)$ ماتریس باقی مانده‌ها به شرح زیر است.

$$Z(\theta) = Y - H(\theta) \quad (2-4)$$

برآورده‌های پارامتر $\hat{\theta}$ توسط مقادیری از θ به دست می‌آید. این برآورد بر مبنای بهینه کردن تعدادی معیار بر روی $Z(\theta)$ و به روشی مشابه برآوردهای حداقل مربعات در کمینه کردن $\|Z(\theta)\|^2$ ، مانند حالت تک پاسخی استوار است. این معیار بستگی به فرضهای مربوط به خطا خواهد داشت. برای مثال، اگر فرضهای سختی بنا کنیم که Z_{nm} مستقل با واریانس یکسان σ^2 و توزیع نرمال باشد، آنگاه کمترین مربعات برقرار است و $\hat{\theta}$ را با کمینه کردن مجموع مربعات باقی مانده‌های همه $N \times M$ پاسخ حساب می‌کنیم. به بیان دیگر معیار

برآورد باید اثر $Z^T Z$ یعنی $IR(Z^T Z)$ را کمینه کند.



نمودار ۲-۴. رسم مولفه‌های حقیقی و مجازی ثابت نارسانای ۴ (بدون بعد) در مقابل بسامد (در مقیاس لگاریتمی) و در صفحهٔ موهومی برای داده‌های نارسانای اس - پما.

فرضهای راهنما به معیار اثر، ممکن است واقع گرایانه نباشد. فرض پایایی واریانس در اندازه‌گیری‌های مختلف واقع در یک پاسخ، می‌تواند معقول باشد، ولی نه این که واریانس پاسخ‌های متفاوت مساوی باشند. وانگهی ممکن است فرض استقلال خطاها در اندازه‌گیری‌های متفاوت در مرحلهٔ انجام یک آزمایش برقرار نباشد. برای مثال، در آزمایشات شیمیایی جایی که غلظت‌های تعدادی از گونه‌های مختلف شیمیایی از یک نمونه اندازه‌گیری می‌شوند، اگر فقط غلظت نسبی قابل محاسبه باشد، ممکن است اندازه‌گیری‌های متفاوت از یک نمونه همبسته باشند. همچنین در محاسبات نارسانا، خطاهای واقع در بسامدهای تنظیم شده می‌تواند در هر دو مؤلفه، خطا ایجاد کنند.

با توجه به باکس و دراپر (۱۹۶۵)، الگوی به کار برده شده برای توصیف جمله خطای نرمال با مشخصات زیر است.

$$E[Z_{nm}] = 0$$

$$E[Z_{nm}Z_{ri}] = \begin{cases} |\Sigma|_{ni} & n=r \\ 0 & n \neq r \end{cases}$$

که Σ یک ماتریس ثابت کوواریانس $M \times N$ است. یعنی فرض کرده‌ایم که اندازه‌گیری‌های ناشی از آزمایشهای متفاوت مستقل اند. ولی، اندازه‌گیری‌های حاصل از یک آزمایش، وابسته‌اند. تابع چگالی احتمال N مشاهده شرطی شده بر روی همه پارامترهای نامعلوم به شرح زیر است.

$$\begin{aligned} p(\mathbf{Y} | \mathbf{0}, \Sigma) &\propto |\Sigma|^{-N/2} \exp \left[-\frac{\text{tr}[(\mathbf{Y} - \mathbf{H}) \Sigma^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{H})^T]}{2} \right] \\ &= |\Sigma^{-1}|^{N/2} \exp \left[-\frac{\text{tr}(\mathbf{Z} \Sigma^{-1} \mathbf{Z}^T)}{2} \right] \end{aligned} \quad (3-4)$$

در این رابطه نماد $|\Sigma|$ نشان دهنده دترمینان Σ است.

۴-۱-۱- معیار دترمینانی

تحت فرض‌های بالا، یک معیار برآورد را می‌توان با استفاده از بحثی در درست‌نمایی یا بیزی به دست آورده تابع درست‌نمایی برای پارامترهای θ و Σ^{-1} به شرح زیر است:

$$L(\theta, \Sigma^{-1}) = k + \frac{N}{2} \ln |\Sigma^{-1}| - \frac{n(\mathbf{Z} \Sigma^{-1} \mathbf{Z}^T)}{2} \quad (4-4)$$

در این رابطه k ، ثابت کم‌اهمیتی است. برای بیشینه کردن تابع درست‌نمایی، جمله آخر را به صورت $\text{tr}(\mathbf{Z}^T \mathbf{Z} \Sigma^{-1})$ نوشته و مشتق کل عبارت را نسبت به عناصر σ^{mi} در Σ^{-1} محاسبه می‌کنیم. در نتیجه داریم (بارد، ۱۹۷۴ ص ۲۹۶).

$$\frac{\partial \ln |\Sigma^{-1}|}{\partial \sigma^{mi}} = \{\Sigma\}_{mi} \quad (5-4)$$

همچنین می‌توان نوشت:

$$\frac{\partial L(\theta, \Sigma^{-1})}{\partial \sigma^{mi}} = \frac{N}{2} \{\Sigma\}_{mi} - \frac{1}{2} \{\mathbf{Z}^T \mathbf{Z}\}_{mi}$$

با صفر قرار دادن مشتق برآوردهای شرطی زیر به دست می‌آیند:

$$\{\hat{\Sigma}(\theta)\}_{mi} = \frac{\{Z^T Z\}_{mi}}{N}$$

$$\hat{\Sigma}(\theta) = \frac{Z^T Z}{N}$$

با جاگذاری در (۴-۴)، تابع درست نمایی شرطی زیر حاصل می‌شود:

$$L(\theta, \hat{\Sigma}(\theta)) = k' - \frac{N}{2} \ln |Z^T Z| \quad (۶-۴)$$

برآوردهای حداکثر درست نمایی باکمینه کردن $|Z^T Z|$ نسبت به θ به دست می‌آیند. بحثی بیزی توسط باکس و دراپر (۱۹۶۵) به منظور به دست آوردن چگالی پسین حاشیه‌ای برای θ با انتگرالگیری واریانس و کوواریانس‌های نامعلوم - پس از مشارکت یک پیشین آگاهی بخش - به صورت زیر به کار برده شده است.

$$p(\Sigma, \theta) \propto |\Sigma|^{-(M+1)/2}$$

تابع پسین حاشیه‌ای عبارت است از:

$$p(\theta|Y) \propto |Z^T Z|^{-N/2} \quad (۷-۴)$$

چون با کمینه کردن دترمینان، چگالی پسین بیشینه می‌شود، بنابراین روشهای درست نمایی و بیزی معیار یکسانی را ارائه می‌دهند.

بنا به اظهار موجود در باکس و ویتا (۱۹۷۳) رابطه‌های (۶-۴) و (۷-۴) نتیجه‌های عمومی قابل توجهی هستند. بنابراین آنها بستگی به این که تابع‌های انتظار خطی یا غیر خطی باشند، ندارند. شاید پارامترها و یا شاید متغیرهای طرح در بیش از یک پاسخ مشترک باشند. به علاوه، تغییری در مقیاس هر پاسخ، اثری در برآوردها ندارد و ترکیب خطی پاسخ‌ها، به جای پاسخ‌های اصلی قابل کاربرد است.

به طور هندسی، $|Z^T Z|$ بستگی به توان دوم حجم متوازی السطوح M بعدی تولید شده توسط بردارهای باقی مانده $m=1, \dots, M, Z_m$ در فضای حالت N بعدی دارد. کمینه کردن دترمینان، متناظر با کمینه کردن حجم ایجاد شده توسط بردارهای باقی مانده است.

۴-۱-۲- استنباط در برآوردهای چند پاسخی

برای به دست آوردن استنباط‌های در پارامترهای برآورد چند پاسخی، گزاره نمای بیز را به کار می‌بریم و فرض می‌کنیم $|Z^T Z|$ می‌تواند به طور کامل توسط یک سری تیلور درجه دوم نزدیک $\hat{\theta}$ ، برای ارائه یک تابع چگالی پسین حاشیه‌ای به کار رود. از (۷-۴) داریم.

$$p(\theta|Y) \propto \left[1 + (\theta - \hat{\theta})^T \frac{\Omega}{2|\hat{Z}^T \hat{Z}|} (\theta - \hat{\theta}) \right]^{-N/2} \quad (۸-۴)$$

در این جا Ω ، هسیان درمیان محاسبه شده در $\hat{\theta}$ است. این تقریب دارای شکل چگالی t - استودنت P متغیره با پارامتر موقعیت $\hat{\theta}$ ، درجه آزادی $N-P$ و عامل مقیاسی مطابق زیر :

$$s^2 = |\hat{\mathbf{Z}}^T \hat{\mathbf{Z}}| / (N-P) \quad (۹-۴)$$

و ماتریس واریانس $2s^2 \Omega^{-1}$ (باکس و تیاو ۱۹۷۳) است، یک ناحیه تقریبی $1-\alpha$ HPD برای پارامتر به شرح زیر است:

$$(\hat{\theta} - \hat{\theta})^T \frac{\Omega}{2} (\hat{\theta} - \hat{\theta}) \leq Ps^2 F(P, N-P; \alpha) \quad (۱۰-۴)$$

به طوری که مربع حجم موجود در فضای پارامتر مربوط به ناحیه توأم، متناسب با درمیان هسیان است. چون $|\mathbf{Z}^T \mathbf{Z}|$ را تقریب کرده ایم. تقریبهای (۸-۴) و (۱۰-۴) ممکن است ضعیف باشند. در نتیجه نیاز به تحقیقات اضافی است تا کفایت این تقریبها - حتی اگر الگو خطی باشد - ارزیابی شوند. نواحی دقیقتر HPD را می توان به یکی از دو شکل زیر نوشت (باکس و تیاو):

$$\frac{(|\mathbf{Z}^T \mathbf{Z}| - |\hat{\mathbf{Z}}^T \hat{\mathbf{Z}}|) / P}{s^2} < F(P, N-P; \alpha) \quad (۱۱-۴)$$

یا

$$\ln[p(\hat{\theta} | \mathbf{Y})] - \ln[p(\theta | \mathbf{Y})] < \frac{1}{2} \chi^2(P; \alpha) \quad (۱۲-۴)$$

در این جا $\chi^2(P; \alpha)$ صدک α توزیع کی دو با P درجه آزادی است. چنین نواحی می تواند به صورت عددی محاسبه و به شکل منحنی رسم شوند. بنابراین تحمل مربوط به زیان ذاتی موجود در اطمینان دقیق و نواحی درست نمایی برای الگوی تک پاسخی، مطابق بحث فصل ششم نیز وجود دارد. با این وجود الگوهای فصل ششم (t نیمرخی و نمودارهای اثر نیمرخی) قابل کاربرد برای مسائل چند پاسخی هستند.

یک بازه $1-\alpha$ HPD تقریبی برای پارامتر θ_p به صورت زیر است :

$$\hat{\theta}_p \pm t(N-P, \alpha/2) s \sqrt{2(\Omega^{-1})_{pp}} \quad (۱۳-۴)$$

و یک نوار تقریبی $1-\alpha$ HPD برای تابع انتظار m ام $f_m(\mathbf{x}; \theta)$ برابر است با:

$$f_m(\mathbf{x}; \hat{\theta}) \pm s \sqrt{2 \mathbf{v}_m^T \Omega^{-1} \mathbf{v}_m} \sqrt{P F(P, N-P; \alpha)}$$

که \mathbf{v}_m شیب f_m نسبت به θ محاسبه شده در $\hat{\theta}$ و \mathbf{x} است.

۴-۱-۳- ملاحظه های ابعادی در برآورد چند پاسخی

معیار درمیان دو قید مهم را بر تعداد مشاهده های N ، تعداد پاسخهای M و تعداد پارامترهای P اعمال می کند.

قید اول، M نمی‌تواند از N بیشتر شود. چون در غیر این صورت دترمینان صفر می‌شود. برای دیدن این مطلب، توجه شود که رتبه $N \times M$ ماتریس Z نمی‌تواند از حداقل (N, M) بیشتر شود و هنگامی که $N < M$ باشد، رتبه $M \times M$ ماتریس $Z^T Z$ کمتر از M است و در نتیجه دترمینان مساوی صفر است. راه دیگر مشاهده این موضوع رجوع به تفسیر هندسی است که $|Z^T Z|$ مربع حجم را ارائه می‌دهد، و این خود در فضای حالت n بعدی توسط بردارهای باقی مانده (ستون‌های Z) محصور شده‌است.

اگر بعد حالت N ، حداقل مساوی با بعد پاسخ M نباشد، آن‌گاه حجم صفر است. برای مثال حجم یک مکعب صفر است.

قید دوم این است که، به طور عموم P ، باید از N کوچکتر باشد. زیرا در غیر این صورت معیار می‌تواند صفر را توسط برازش دقیق هر پاسخ ایجاد کند و یا حتی با برازش دقیق ترکیبی خطی از پاسخ‌ها این عمل به وقوع می‌پیوندد. یعنی اگر یک M - بردار v وجود داشته باشد به طوری که برای چند θ ، $Z(\theta)v = 0$ باشد، آن‌گاه دترمینان در آن مقداری از θ ، صرف نظر از خوبی برازش پاسخ‌های باقی مانده صفر خواهد شد.

دلایل راهنما به قید $N > P$ پیرایش‌هایی را برای کاربرد $N-P$ با درجه آزادی باقی مانده‌های پیشنهاد شده در بالا ایجاد می‌کند. دیده می‌شود که با NM مقدار داده باید $NM-P$ درجه آزادی برای باقی مانده‌ها، مطابق اظهار بارد (۱۹۷۴) وجود داشته باشد. اما در حقیقت در نزدیکی بهینه، مقدار دترمینان توسط ترکیبات خطی پاسخ‌های متناظر با کوچکترین مقدار منفرد Z واری می‌شود، که این بردار دارای بعد N است. بنابراین، بردار متناظر با این مقدار منفرد، دارای $N-P$ درجه آزادی است.

به طور خلاصه، تعداد حالت‌های N ، باید از حداکثر M و P - برای اطمینان در موفقیت تحلیل - بیشتر شود.

یکی از فواید بزرگ کاربرد داده‌های چند پاسخی، افزایش دقت برآوردهای پارامتر، نسبت به روش داده‌های تک پاسخی است. هر چند که ما نمی‌توانیم این افزایش دقت را به درجه آزادی مخرج به هنگام کاربرد چند پاسخی اضافه کنیم. افزایش دقت، به علت ترکیب انواع اطلاعات متفاوت مربوط به پاسخ‌های است.

یکی از مشکلات به کارگیری داده‌های چند پاسخی آن است که همه آنها به مسائل بهینه کردن غیر خطی تبدیل می‌شوند. یعنی حتی اگر تابع انتظار در پارامترها خطی باشد، باید روشهای تکراری برای برآوردهایی که معیار دترمینانی را کمینه می‌کنند، به کار گرفته شوند. مسأله به دست آوردن بهترین برآوردها نیز مشکل‌تر از حالت تک پاسخی غیر خطی است. چون نیازی نیست که هسیان معین مثبت باشد. بحث بیشتر در این بهینه کردن‌های دترمینانی، در بخش (۴-۲-۳) ارائه شده است.

یکی دیگر از مشکلات همراه با برآورد چند پاسخی، این است که، نواحی استنباط برای پارامترهای مبتنی بر (۴-۱۰) یا (۴-۱۳) صرفاً تقریبی هستند، حتی، در هنگامی که همه توابع انتظار در پارامترها خطی اند. دقت این تقریب‌ها سؤال برانگیز است. به بیان دیگر، نواحی استنباط حاصل از برآورد چند پاسخی به طور معمول از نواحی مربوط به تک پاسخی بسیار کوچکتر است. بنابراین، در حقیقت ممکن است نواحی تقریبی چند پاسخی بهتر از نواحی تک پاسخی تقریبی در الگوهای غیر خطی باشد.

به جای این مشکلات، برآورد چند پاسخی یک ابزار ارزشمندی است و باید به هنگام فراهم بودن داده‌های چند پاسخی به کار گرفته شود. کاهش اندازه نواحی استنباط پارامتر به همراه قابلیت بالا العاده تفکیک بین الگوهای رقیب، ارزش بالایی در کوشش‌های جنبی را در خواست می‌کند.

۴-۲- یک روش گوس-نیوتن تعمیم یافته

یکی از فواید حداقل مربعها به عنوان یک معیار آن است که، روش‌های ویژه‌ای را می‌تواند برای استخراج خواص معیار و در نظر گرفتن الگوریتم بهینه سازی به کار برد. در این بخش یک روش گوس-نیوتن را برای کمینه کردن معیار دترمینانی تعریف می‌کنیم.

برای محاسبه دترمینان، از بیتز و واتر (۱۹۸۷) استفاده کرده‌ایم. یک تجزیه QR از $Z(\theta)$ را در نظر می‌گیریم:

$$Z(\theta) = QR = Q_1 R_1$$

بنابراین چون:

$$\begin{aligned} |Z(\theta)^T Z(\theta)| &= |R_1^T R_1| \\ &= |R_1|^2 \\ &= \prod_{m=1}^M |R_1|_{mm}^2 \end{aligned}$$

پس روش ساده‌ای برای محاسبه معیار دترمینانی برای هر θ داریم.

۴-۲-۱- شیب و هسیان دترمینان

تجزیه $Z(\theta)$ به صورت $Q_1 R_1$ برای محاسبه شیب و هسیان معیار دترمینانی نیز مفید است. برای ساده کردن نمادگراریها، بستگی به θ را حذف و زیرنویسی در داخل پرانتز برای نشان دادن مشتق مطابق زیر اضافه می‌کنیم:

$$\frac{\partial Z}{\partial \theta_p} = Z_{(p)}$$

با کاربرد نتیجه (۱-۳۴) مربوط به فلدورو (۱۹۷۲)، داریم:

$$\frac{\partial |Z^T Z|}{\partial \theta_p} = |Z^T Z| \operatorname{tr} \left[(Z^T Z)^{-1} \frac{\partial (Z^T Z)}{\partial \theta_p} \right] \quad (۱۴-۴)$$

$$\frac{\partial (Z^T Z)}{\partial \theta_p} = Z^T Z_{(p)} + Z_{(p)}^T Z \quad (۱۵-۴)$$

در نتیجه شیب $\omega = \partial |Z^T Z| / \partial \theta^T$ دارای مؤلفه‌های زیر است:

$$\begin{aligned} \{\omega\}_p &= 2 |Z^T Z| \operatorname{tr} \{ (Z^T Z)^{-1} Z^T Z_{(p)} \} \\ &= 2 |Z^T Z| \operatorname{tr} [R_1^{-1} R_1^{-T} R_1^T Q^T Z_{(p)}] \\ &= 2 |Z^T Z| \operatorname{tr} [R_1^{-1} Q^T Z_{(p)}] \\ &= 2 |Z^T Z| \operatorname{tr} [Z^+ Z_{(p)}] \end{aligned} \quad (۱۶-۴)$$

که در آن $Z^+ = R_1^{-1} Q_1^T$ شبه وارون Z است.

برای به دست آوردن مشتق دوم یا جمله‌های هسیان می‌نویسم:

$$g = \ln |Z^T Z|$$

به طوری که:

$$|Z^T Z| = e^g \quad (۱۷-۴)$$

$$g_{(p)} = 2 \operatorname{tr} [Z^+ Z_{(p)}] \quad (۱۸-۴)$$

و سپس بسط مشتق شبه وارون (گالوب و پیرا ۱۹۷۳) را به کار می‌بریم تا رابطه زیر را به دست آوریم.

$$g_{(pq)} = 2 \{ -\operatorname{tr} [Z^+ Z_{(p)} Z^+ Z_{(q)}] + \operatorname{tr} [Z^+ (Z^+)^T Z_{(p)}^T (1 - Z Z^+) Z_{(q)}] + \operatorname{tr} [Z^+ Z_{(pq)}] \} \quad (۱۹-۴)$$

در نتیجه به کمک (۱۷-۴)، یک جمله مشتق دوم برای $|Z^T Z|$ عبارت است از:

$$\frac{\partial^2 |Z^T Z|}{\partial \theta_p \partial \theta_q} = |Z^T Z| [g_{(p)} g_{(q)} + g_{(pq)}] \quad (۲۰-۴)$$

بسط جانشینی برای شیب و هسیان $|Z^T Z|$ با گسترش (۱۶-۴)، به شکل زیر حاصل می‌شود.

$$\{\omega\}_p = |Z^T Z| \operatorname{tr} \{ (Z^T Z)^{-1} (Z^T Z_{(p)} + Z_{(p)}^T Z) \} = |Z^T Z| \operatorname{tr} [U_p] \quad (۲۱-۴)$$

که در آن $U_p = (Z^T Z)^{-1} (Z^T Z_{(p)} + Z_{(p)}^T Z)$ با مشتق‌گیری از (۲۱-۴) نسبت به θ_q داریم:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 |Z^T Z|}{\partial \theta_q \partial \theta_p} &= \{\omega\}_q \text{tr}[U_p] + |Z^T Z| \{-\text{tr}[U_q U_p] + \text{tr}[(Z^T Z)^{-1}(Z_{(q)}^T Z_{(p)} + Z_{(p)}^T Z_{(q)})] \\
 &\quad + \text{tr}[(Z^T Z)^{-1}(Z^T Z_{(pq)} + Z_{(pq)}^T Z)]\} \\
 &= |Z^T Z| \{\text{tr}[U_q] \text{tr}[U_p] - \text{tr}[U_q U_p] + \text{tr}[(Z^T Z)^{-1}(Z_{(q)}^T Z_{(p)} + Z_{(p)}^T Z_{(q)})] \\
 &\quad + \text{tr}[(Z^T Z)^{-1}(Z^T Z_{(pq)} + Z_{(pq)}^T Z)]\}
 \end{aligned} \quad (۲۲-۴)$$

۴-۲-۲- یک هسیان تقریبی

آخرین جمله بسط $g_{(pq)}$ نیاز به مشتق دوم توابع الگو دارد. ترجیح می‌دهیم از محاسبه مشتق دوم پرهیز کنیم. به ویژه هنگامی که ماتریس هسیان برای محاسبه اولیه یک نمو به کار می‌رود. بنابراین فرض مشابهی مطابق روش گوس - نیوتن برای کمترین مربعات غیر خطی می‌سازیم. یعنی فرض می‌کنیم توابع الگو به صورت موضعی توسط توابع خطی تقریب شوند و $Z_{(pq)}$ صفر شود. در نتیجه ماتریس هسیان تقریب توسط مؤلفه‌های زیر محاسبه می‌شود.

$$\begin{aligned}
 \{\Omega\}_{pq} &= 4 |Z^T Z| \text{tr}[Z^+ Z_{(p)}] \text{tr}[Z^+ Z_{(q)}] \\
 &\quad + 2 |Z^T Z| \{-\text{tr}[Z^+ Z_{(p)} Z^+ Z_{(q)}] + \text{tr}[Z^+ (Z^+)^T Z_{(p)}^T (I - ZZ^+) Z_{(q)}]\}
 \end{aligned} \quad (۲۳-۴)$$

با جایگذاری موارد بالا در Ω و استفاده از بردار شیب ω نمو $\delta = -\Omega^{-1} \omega$ را در روش تکراری نیوتن - رافسون می‌سازیم تا $|Z^T Z|$ بهینه شود. چون فقط مشتق اول توابع الگو به کار می‌رود، بنابراین روشی تعمیم یافته گوس - نیوتن برای کمترین مربعات غیر خطی می‌شود.

تجدید آرایش جمله‌های (۴-۱۶) و (۴-۱۹) می‌تواند سهولتی در محاسبه ω و Ω ایجاد نماید (بیتر و واتر ۱۹۸۴). به ویژه می‌توانیم از رابطه $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$ برای تغییر (۴-۱۶) به حالت زیر استفاده کنیم.

$$\begin{aligned}
 \{\omega\}_p &= 2 |Z^T Z| \text{tr}[Q_1^T Z_{(p)} R_1^{-1}] \\
 &= 2 |Z^T Z| \sum_{m=1}^M g_{p,mm}
 \end{aligned}$$

که در آن $g_{p,mm}$ درایه (m, m) ام ماتریس $N \times M$ زیر است.

$$G_p = Q^T Z_{(p)} R_1^{-1} \quad (۲۴-۴)$$

مطلب بالا به طور اساسی نمی‌تواند محاسبه شیب را تغییر دهد، ولی اکنون (۴-۲۳) قابل بازنویسی برای محاسبه $\{\Omega\}_{pq}$ است:

$$\begin{aligned}
 (\Omega)_{pq} &= 4 |Z^T Z| \sum_{m=1}^M g_{p,mm} \sum_{m=1}^M g_{q,mm} \\
 &\quad + 2 |Z^T Z| \{-\text{tr}[Q_1^T Z_{(p)} R_1^{-1} Q_1^T Z_{(q)} R_1^{-1}] \\
 &\quad + \text{tr}[R_1^{-1} Q_1^T Q_1 R_1^{-T} Z_{(p)}^T Q_2 Q_2^T Z_{(q)}]\} \\
 &= 4 |Z^T Z| \sum_{m=1}^M g_{p,mm} \sum_{m=1}^M g_{q,mm} \\
 &\quad + 2 |Z^T Z| \left[-\sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^M g_{p,mi} g_{q,im} + \text{tr}[(Q_2^T Z_{(p)} R_1^{-1})^T (Q_2^T Z_{(q)} R_1^{-1})] \right] \\
 &= 4 |Z^T Z| \sum_{m=1}^M g_{p,mm} \sum_{m=1}^M g_{q,mm} \\
 &\quad + 2 |Z^T Z| \left[-\sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^M g_{p,mi} g_{q,im} + \sum_{m=M+1}^N \sum_{i=1}^M g_{p,mi} g_{q,mi} \right]
 \end{aligned} \tag{۲۵-۴}$$

معادله (۲۵-۴) ارزیابی کاراکتری از Ω را ارائه می‌دهد، زیرا تجزیه QR حاصل از Z ، یک بار انجام شده و ماتریس‌های G_p با $P = 1, \dots, P$ تشکیل شده‌اند. حال کافی است فقط مقدار کمی ضرب داخلی انجام شود. مطابق بحث پیوست شماره ۲، هر چند Q^T به صورت عاملی در (۲۴-۴) ظاهر می‌شود و ماتریس Q به صورت منحنی تشکیل نمی‌شود، در عوض، حاصل ضربی از قبیل $Q^T Z_{(p)}$ با کاربرد تبدیلات هوس-هولدر $Z_{(p)}$ انجام‌پذیر است.

۳-۲-۴- محاسبات مربوط به هر تکرار

در هر تکرار، مقدار جاری بردار پارامتر θ^0 برای محاسبه $|Z^T Z|$ شیب ω و هسیان تقریب Ω به کار می‌رود. اگر Ω معین مثبت باشد، نمو، از حل معادله زیر برای δ^0 به دست می‌آید.

$$\Omega \delta^0 = -\omega \tag{۲۶-۴}$$

$$\theta^1 = \theta^0 + \lambda \delta^0$$

با جاگذاری داریم:

دراین جا λ یک عامل اندازه مرحله‌ای انتخابی و به گونه‌ای است که نامساوی $|Z(\theta^1)^T Z(\theta^1)| < |Z(\theta^0)^T Z(\theta^0)|$ برقرار باشد. حل (۲۶-۴) بیشترین کارایی را با کاربرد تجزیه چولسکی Ω مطابق زیر به همراه خواهد داشت (دو نگارا و همکاران ۱۹۷۹ فصل ۸).

$$\Omega = C^T C \tag{۲۷-۴}$$

که در آن C ماتریس بالا مثلثی $P \times P$ است.

بر خلاف روش گوس - نیوتن در حداقل مربعات غیر خطی، روش تعمیمی گوس - نیوتن در داده‌های چند پاسخی، نیاز به معین مثبت بودن Ω نیست. یکی از حالاتی که مقادیر ویژه منفی در هسیان رخ می‌دهد، هنگامی است که چند حداقل، در معیار دترمینانی وجود دارد. مانند مثال عملی بخش (۵-۵). هنگامی که Ω معین مثبت نباشد، تقریب درجه دوم در $|Z^T Z|$ حداقل ندارد و C قابل محاسبه نیست. مطابق بخش (۵-۳) معین مثبت بودن را در هسیان می‌توان توسط ازدیاد قطر و پیرایش نمو ایجاد نمود تا جواب معادله زیر باشد.

$$(\Omega + kI)\delta^0 = -\omega$$

در این جا k را آن قدر بزرگ می‌گیریم تا $\Omega + kI$ معین مثبت شود. چنین k یی توسط مقادیر ویژه Ω قابل محاسبه است. این کار با جاگذاری k به جای دو برابر بزرگترین مقدار ویژه منفی، یا به کارگیری تجزیه چولسکی تعدیلی امکان‌پذیر است (دانیس و شانابل ۱۹۸۳).

۴-۲-۴- یک معیار همگرایی چند پاسخی

برای تصمیم در وجود همگرایی یک بردار مخصوص θ^0 ، دلایل بخش ۴-۲-۲ را به کار می‌بریم. و اندازه نمو را در آن نقطه با تغییرپذیری آماری در برآوردهای مقایسه می‌کنیم. تغییرپذیری آماری در داخل نواحی بیضوی (۴-۱۰) در نظر گرفته می‌شود. همچنین یک تبدیل خطی از پارامترها را برای ساختن نواحی کروی در نظر می‌گیریم. با چنین تبدیلی اندازه نمو برای θ^0 به صورت ساده $\|C\delta\|$ است، که C عامل چولسکی (۴-۴۷) است. ناحیه، قرصی با شعاعی متناسب با $\sqrt{PF(P, N - P, \alpha)}$ است. حال معیار هم‌گرایی به شکل زیر (بیتر و واتر ۱۹۸۷) خواهد بود.

$$\frac{\|C\delta\|^2/P}{2s^2} < \epsilon^2$$

که در آن ϵ سطح نوسان و s^2 عامل مقیاس (۴-۹) است. کوچکی معیار نشان دهنده این است که نمو مورد نظر نسبت به تغییرپذیری آماری قابل چشم پوشی است. بنا به دلایل گفته شده در بخش (۴-۲-۲)، مقدار ϵ می‌تواند برابر 0.001 در نظر گرفته شود.

شبه برنامه برآورد پارامتر چند پاسخی در پیوست شماره ۳ بخش (۳-۲A) ارائه شده است.

۴-۳- ملاحظات عملی

مشابه برآورد تک پاسخی، باید ملاحظات انتخاب الگو و به دست آوردن برآوردهای آغازین برای پارامترها انجام گیرد. پس از حصول همگرایی، باید باقی مانده‌های کلیه پاسخ‌ها، توسط رسم (مطابق فصل سوم) امتحان شوند.

چون الگوهای چند پاسخی دارای ملاحظات عملی دیگری نیز هستند. در مورد آنها در زیر بحث خواهیم کرد.

۴-۳-۱- محاسبه مقادیر آغازین

روش محاسبه مقادیر آغازین الگوهای تک پاسخی که در فصل سوم بحث شد نیز در این جا قابل کاربرد است. به شرط این که روشهای را برای هر پاسخ به کار ببریم. و سپس، برآوردها را ترکیب نموده تا مقادیر آغازین برای کل بردار پارامتر به دست آید. در این جا تحلیل های نموداری که در مثال زیر شرح داده شده، می تواند مفید واقع شود.

مثال ۲- اس - پما

برآوردهای آغازین پارامترهای تابع انتظار مناسب نارسای مختلط را می تواند از روی نمودار آنها، بنابر هاوریلک و نگامی (۱۹۶۷) به دست آورد. این نمودار نشان می دهد که مؤلفه های حقیقی و مجازی می توانند به صورت زیر نوشته شوند:

$$\varepsilon' = \varepsilon_{\infty} + (\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty})R^{-\beta} \cos \beta\phi$$

$$\varepsilon'' = (\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty})R^{-\beta} \sin \beta\phi$$

$$R^2 = \left[1 + (2\pi f/f_0)^{\alpha} \cos(\pi\alpha/2) \right]^2 + \left[(2\pi f/f_0)^{\alpha} \sin(\pi\alpha/2) \right]^2 \quad \text{که در آن:}$$

$$\phi = \arctan \left[\frac{(2\pi f/f_0)^{\alpha} \sin(\pi\alpha/2)}{1 + (2\pi f/f_0)^{\alpha} \cos(\pi\alpha/2)} \right] \quad \text{و}$$

پارامترهای ε_0 و ε_{∞} حدود بالا و پایین بسامد حاصل از برخورد مکان هندسی با محور اعداد حقیقی در هنگام رسم تابع در صفحه موهومی است. علاوه بر آن، زاویه حد مکان هندسی بسامد بالا با محور حقیقی، برابر با $\psi_L = \pi\alpha\beta/2$ است. و نیم ساز زاویه ψ_L حاصل از $(0$ و $\varepsilon_{\infty})$ مکان هندسی را در بسامد \bar{f} چنان قطع می کند که $2\pi\bar{f}/f_0 = 1$. عاقبت «توسط رابطه زیر به Ψ_L مربوط می شود:

$$\Psi_L = -\pi\alpha \frac{\ln \left[\frac{\bar{R}}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty}} \right]}{\ln [2 + 2 \cos (\pi\alpha/2)]}$$

در این جا \bar{R} طول پاره خط فاصل $(0$ و $\varepsilon_{\infty})$ و (\bar{f}) است.

برای به دست آوردن مقادیر آغازین داده های اس - پما، داده ها را در صفحه موهومی مطابق نمودار (۴-۲۷) رسم کرده ایم. ولی در این جا مقیاس موهومی و حقیقی را مساوی در نظر گرفته به گونه ای که زاویه ها

و فواصل صحیح باشند. قسمت سمت راست منحنی نسبت به محور حقیقی را برون یابی نموده، تا مقدار آغازین $\varepsilon_0^\circ = 4.40$ حاصل شود. قسمت سمت چپ نسبت به محور حقیقی را نیز برای به دست آوردن مقدار آغازین $\varepsilon_\infty^\circ = 2.36$ برون یابی کرده ایم. سپس اندازه زاویه مربوط به خط برون یابی سمت چپ، نسبت به محور x ها را به دست آورده، تا زاویه حد $\Psi_L = 19^\circ$ حاصل شود. نیمساز این زاویه، داده ها را در بین نقاط متناظر با ۲۰۰ تا ۳۰۰ هر تر قطع می کند، بنابراین: $(\ln f)^\circ = \ln[2\pi(250)] = 7.36$ طول \bar{R} برابر $1/6$ اندازه گیری شده و با استفاده از آن و مقدار زاویه حدی $\alpha^\circ = 0.53$ و در نتیجه $\beta^\circ = 0.45$ به دست می آید.

۴-۱-۳-۴. برآوردهای آغازین الگوهای چند پاسخی توسط دستگاه معادلات دیفرانسیل

برای الگوهای چند پاسخی تعریف شده به شکل دستگاه معادلات دیفرانسیل مانند مثال آلفا - پنین ۱ یا ۲، می توان رابطه ای بین نرخ ها و پاسخ، برای توسعه روشی به منظور محاسبه مقادیر آغازین استخراج نمود (بیتز و واتز، ۱۹۸۵، واره ۱۹۸۲). هدف کلی به دست آوردن برآوردهایی برای نرخهاست. سپس، حل معادلات خطی یا غیر خطی ساده تر، به جای حل معادلات دیفرانسیل، توسط تابع اولیه گیری عددی است. در واره (۱۹۸۲) منحنی درجه سومی بر داده ها برازش داده شده و نرخ ها توسط مشتق گیری از منحنی برازشی، به دست آمده است. یک روش خام تر، به کارگیری تفاضلهای ساده برای به دست آوردن برآوردهای نرخ است، که در مثال اتیل آکریلیت ۲ به کار رفت و در زیر برای داده های چند پاسخی نیز به کار می رود.

مثال : آلفا- پنین ۳

یک الگوی سینتیگ خطی در باکس، و همکاران (۱۹۷۳) برای داده های آلفا - پنین و به شکل زیر ارائه

شده است:

$$\frac{d\gamma_1}{dt} = -(\theta_1 + \theta_2)\gamma_1$$

$$\frac{d\gamma_2}{dt} = \theta_1\gamma_1$$

$$\frac{d\gamma_3}{dt} = \theta_2\gamma_1 - (\theta_3 + \theta_4)\gamma_3 + \theta_5\gamma_5$$

$$\frac{d\gamma_4}{dt} = \theta_3\gamma_3$$

$$\frac{d\gamma_5}{dt} = \theta_4\gamma_3 - \theta_5\gamma_5$$

حل ضمنی معادلات دیفرانسیل خطی بالا، در باکس و همکاران (۱۹۷۳) ارائه شده که بسطهایی طولانی

و پیچیده را در نظر گرفته‌اند. یک شکل جانشینی، معادله ماتریسی زیر است.

$$\begin{bmatrix} \dot{\gamma}_1 \\ \dot{\gamma}_2 \\ \dot{\gamma}_3 \\ \dot{\gamma}_4 \\ \dot{\gamma}_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\theta_1 - \theta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_2 & 0 & -\theta_3 - \theta_4 & 0 & \theta_5 \\ 0 & 0 & \theta_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \theta_4 & 0 & -\theta_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \\ \gamma_4 \\ \gamma_5 \end{bmatrix}$$

یا $\dot{\gamma} = A\gamma$ است.

در این جا، A ماتریس انتقال دستگاه بوده و علامت نقطه، نشانگر مشتق نسبت به زمان است. بحث بیشتر از الگوهای معادلات دیفرانسیل خطی، در فصل پنجم ارائه شده است. برای به دست آوردن مقادیر اولیه، معادله ماتریسی را به شکل زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$\begin{bmatrix} \dot{\gamma}_1 \\ \dot{\gamma}_2 \\ \dot{\gamma}_3 \\ \dot{\gamma}_4 \\ \dot{\gamma}_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\theta_1 \gamma_1 - \theta_2 \gamma_1 \\ \theta_1 \gamma_1 \\ \theta_2 \gamma_1 - \theta_3 \gamma_3 - \theta_4 \gamma_3 + \theta_5 \gamma_5 \\ \theta_3 \gamma_3 \\ \theta_4 \gamma_3 - \theta_5 \gamma_5 \end{bmatrix} = X(t)\theta$$

که در آن

$$X(t) = \begin{bmatrix} -\gamma_1 & -\gamma_1 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & -\gamma_3 & -\gamma_3 & \gamma_5 \\ 0 & 0 & \gamma_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma_3 & -\gamma_5 \end{bmatrix}$$

در هر زمان t ، اگر برآوردهایی از نرخها و غلظتها را داشته باشیم. قادر به برآورد θ توسط رگرسیون خطی $\dot{\gamma}$ بر X خواهیم بود. با گردآوری نرخهای برآورد شده هر زمان در یک بردار، بردار پاسخ برای رگرسیون خطی به دست می‌آید. همچنین ماتریس‌های $X(t)$ را برای هر زمان با کاربرد غلظت‌های متوسط حساب می‌کنیم و با دسته کردن آنها ماتریس X شکل می‌گیرد.

برای مثال $10^{-3} \times (1/43, 0/33, 1/87, 5/93, -9/47)^T$ ، نرخ‌های برآورد شده در $t=1230$ است.

و غلظت‌های متوسط در ماتریس زیر ارائه شده‌اند:

$$\begin{bmatrix} -94.2 & -94.2 & 0 & 0 & 0 \\ 94.2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 94.2 & -1.15 & -1.15 & 0.88 \\ 0 & 0 & 1.15 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.15 & -0.88 \end{bmatrix}$$

در آخر، بردارهای مربوط به هر زمان را دسته می‌کنیم تا یک بردار ساده به دست آید و ماتریس‌ها را دسته نموده تا یک ماتریس به دست آید. آن گاه یک رگرسیون خطی ساده بدون جمله عرض از مبدأ را تشکیل می‌دهیم. تا برآوردهای آغازین به دست آیند. این برآوردهای آغازین به شکل زیر هستند.

$$\theta^0 = (5.84, 2.65, 1.63, 27.77, 4.61)^T \times 10^{-5}$$

چون پارامترها، ثابت‌های نرخ اند به اجبار باید مثبت باشند. در نتیجه الگویی با پارامترهای $\phi_p = \ln \theta_p$ برازش می‌دهیم. (بخش ۳-۴-۱ را ببینید.)

هنگامی که تعدادی از پاسخ‌ها اندازه‌گیری نشده باشند، هنوز می‌توان نرخ‌های تقریبی حاصل از سایر اطلاعات را به کار برد. برای مثال یک وزن تعادلی را جانشین می‌کنیم. در فراهم کردن مقادیر آغازین، روش نرخ تقریبی، اطلاعات مفیدی در شرایط برآورد را به دست می‌دهد و حتی هنوز هم برای برآورد پارامتر قابل کاربرد است (واراه، ۱۹۸۲). همچنین، وقتی که پارامترها برآورد شدند، می‌توان مطمئن شد که فرضیات پیچیده مربوط به توزیع جمله اغتشاش معقول است.

۴-۳-۲- ارزیابی برازش

مشابه هر تحلیلی آماری، ارزیابی برازش بسیار مهم است. در کل، بهترین نوع ارزیابی رسم باقی مانده‌های همه پاسخ‌ها در مقابل متغیرهای طرح، در برابر یکدیگر و در برابر پاسخ‌های برازشی، به اضافه ترسیم همزمان داده‌ها و پاسخ‌های برازشی است. این نمودارها از این جهت مهم اند که می‌توانند مشخص کنند، آیا برنامه به یک بهینه نادرست در داده‌ها یا باقی مانده‌ها میل می‌کند یا خیر؟

مثال: اس - پما ۳

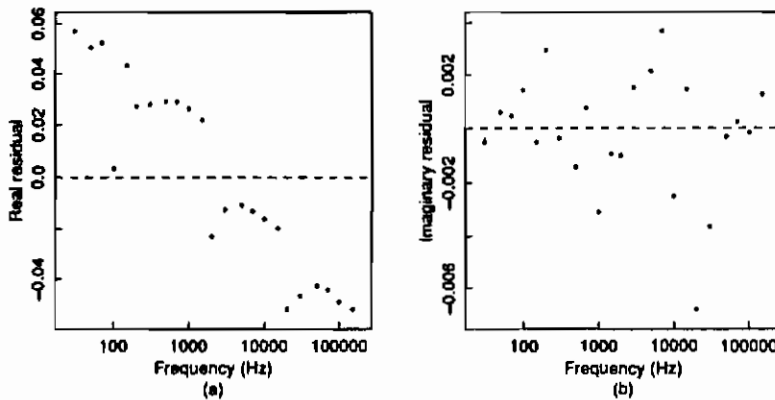
همگرایی حاصل از داده‌های اس - پما در جدول (۴-۱) ارائه شده است. باقی مانده‌های مولفه‌های حقیقی و مجازی، در مقابل بسامد در نمودار (۴-۳) رسم شده است. باقی مانده‌های مجازی رفتار به طور کامل خوبی

دارند، ولی باقی مانده‌ها تجمع نموده‌اند. یک روند قوی با بسامد را نشان می‌دهند. مطابق بحث هاوریلایک و واتر (۱۹۸۷) این رفتار می‌تواند به این صورت بیان شود که بسامدها در یک آزمایش گردآوری شده‌اند. هنگامی که بسامد یک نوسانگر دارای دامنه بسیار بزرگی باشد (در این مثال از ۳۰ تا ۱۵۰۰۰۰ هرتز) آن را توسط دو صفحه مدرج در نظر می‌گیرند. اولین صفحه مدرج به نام واحد است که دامنه‌ای از ۲ تا ۲۰ دارد و روی صفحه ده تایی است که بسامد حاصل از آن در ۱۰ ضرب می‌شود. به عنوان مثال برای بسامد ۱۵۰ هرتز، متصدی باید صفحه واحد را روی ۳ و ده تایی را روی ۱۵ و صفحه ده تایی را روی ۱۰ قرار دهد. برای بسامد ۳۰۰۰۰ هرتز، متصدی باید صفحه واحد را روی ۳ و ده تایی را روی ۱۰۰۰۰ قرار دهد. در این آزمایش ظرفیت پلیمر به اندازه کافی بزرگ است، که بر بسامد نوسانگر اثر بگذارد. به طوری که بسامد واقعی انتقالی، عدد نشان داده شده روی صفحات نیست. در بسامدهای بالا، مقادیر برازشی به اندازه کافی بزرگ اند و در بسامدهای پایین، مقادیر برازشی به اندازه کافی کوچک‌اند. بنابراین بسامدهای نشان داده شده، زیر مقدار واقعی است، به طوری که اختلاف (واقعی - نشان داده شده) با ازدیاد هر ده تایی اضافه می‌شود.

Parameter	Estimate	Approx. Std. Error	Approximate Correlation Matrix			
ϵ_0	4.320	0.011	1.00			
ϵ_{∞}	2.522	0.018	0.75	1.00		
$\ln f_0$	7.956	0.084	0.46	0.74	1.00	
α	0.531	0.010	-0.57	-0.71	-0.93	1.00
β	0.554	0.030	0.53	0.84	0.95	-0.95 1.00

جدول ۱-۴. خلاصه پارامترهای داده‌های اس - پما.

یک تصحیح کننده ده تایی چنان ساخته شده تا بسامدها را به گونه‌ای نشان دهد که در هنگام ازدیاد ده تایی، بسامد در $K \times 10$ ضرب شود. به فرض این که اولین ده تایی درست باشد، دومین ده تایی دارای بسامد واقعی به شکل K ضرب در مقادیر نشان داده شده است. سومین ده تایی K^2 برابر مقادیر نشان داده شده است و تا آخر. به جای مشارکت عامل دهمی K به عنوان پارامتری در الگو، ترجیح می‌دهیم که مقداری برای K انتخاب کنیم تا بسامد نشان داده شده تعدیل شود. الگو را برازش می‌دهیم. و باقی مانده‌ها را امتحان می‌کنیم و آن مقداری از K را انتخاب می‌نماییم که بهترین رفتار باقی مانده‌ها را ارائه دهد. برای این مجموعه داده‌ها، $K = 1/25$ پیدا شده است.



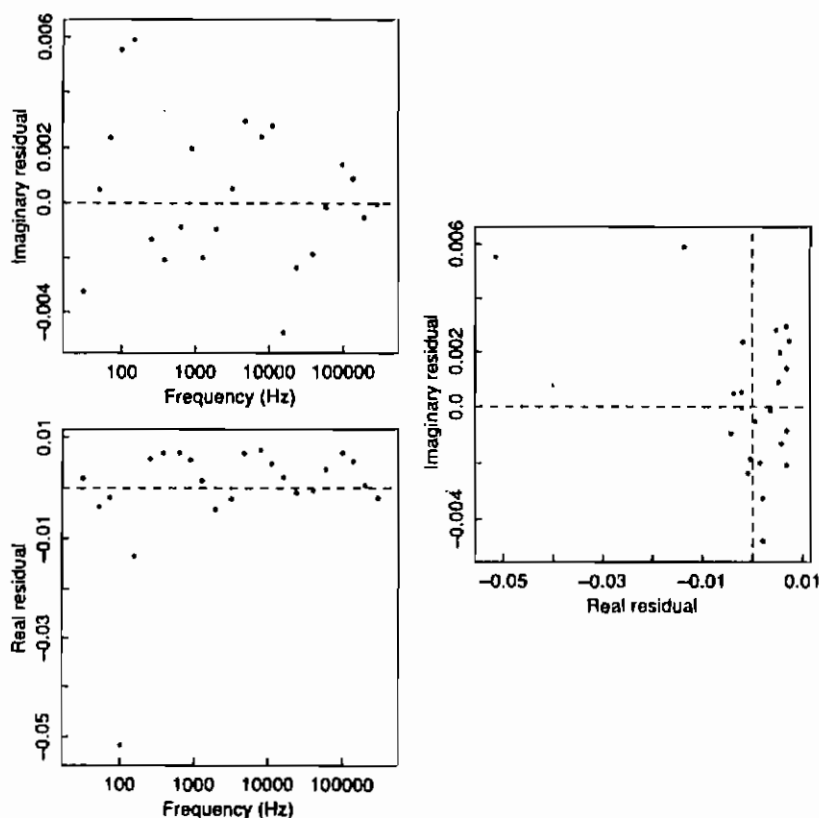
نمودار ۳-۴. باقی مانده‌های برازشی اولیه بر داده‌ها اس - پما.

همگرایی حاصل از داده‌های تصحیح - ده تایی، در جدول (۴-۲) ارائه شده است. تغییر اصلی کاهش در دترمینان برآورد واریانس باقی مانده‌های حقیقی، توسط عاملی در حدود ۱۰ است.

Parameter	Estimate	Approx. Std.Error	Approximate Correlation Matrix					
ϵ_0	4.400	0.007	1.00					
ϵ_{-}	2.447	0.013	0.58	1.00				
$\ln f_0$	8.228	0.091	0.68	0.84	1.00			
α	0.486	0.008	-0.86	-0.68	-0.91	1.00		
β	0.571	0.026	0.76	0.85	0.99	-0.95	1.00	

جدول ۴-۲. خلاصه پارامتری برای داده‌های اس - پمای تصحیح - ده تایی.

باقی مانده مؤلفه‌های حقیقی و مجازی در مقابل بسامد در نمودار (۴-۴) رسم شده‌اند. دیده می‌شود که باقی مانده‌های مجازی رفتار خیلی خوبی با دو یا سه نقطه شاید پرت دارند. باقی مانده‌های حقیقی اکنون دارای رفتار بهتری بوده و بدون روند هستند. هر چند یک نقطه مشخص پرت و یک نقطه شاید پرت دیگر وجود دارد. با رسم باقی مانده‌های مجازی در مقابل باقی مانده‌های حقیقی، به روشنی دو نقطه پرت آشکار می‌شوند. چون باقی مانده‌ها در هر دو مؤلفه حقیقی و مجازی نامناسب اند. این دو را حذف کرده‌ایم. اگر فقط یک باقی مانده بدبود، با مشاهدات به گونه‌ای رفتار می‌کردیم که داده پرت مفقود محسوب شود و مطابق بخش (۴-۴) عمل می‌کردیم.

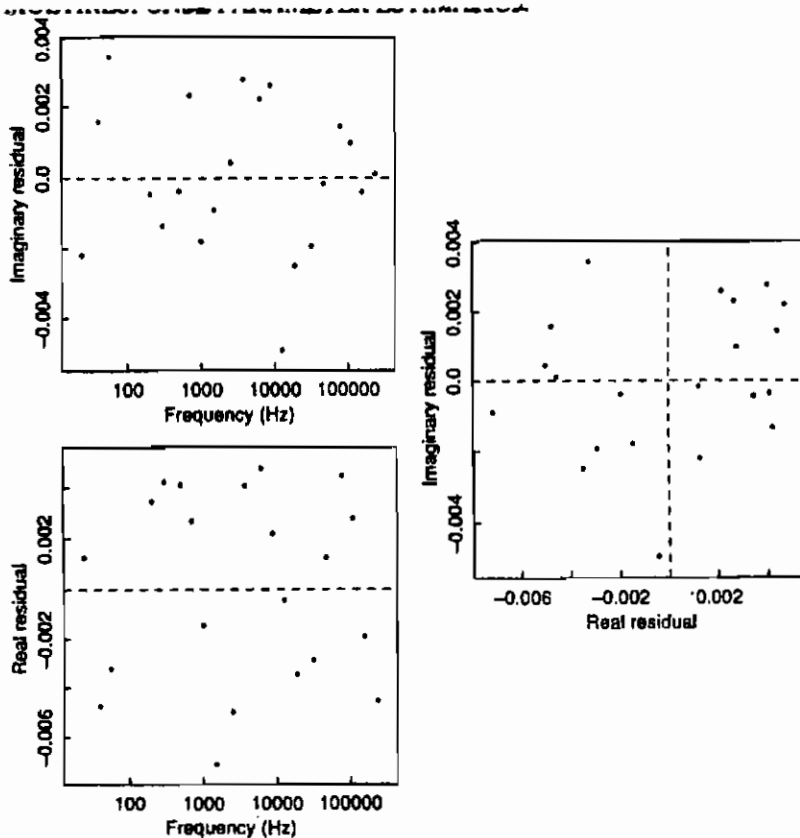


نمودار ۴-۴. باقی مانده‌های برازشی و داده‌های تصحیح - ده تایی اس - پما.

تحلیل تصحیح ده تایی و ویرایش مجموعه داده، نتایجی مطابق جدول (۴-۳) ارائه می‌دهد. حذف دو حالت غیر معمول، پارامتر و واریانس‌های متغیر را کاهش می‌دهد. ولی در برآوردهای پارامتر اثر چندانی ندارد. باقی مانده‌های این برازش رفتار خیلی خوبی دارند که در شکل (۴-۵) قابل مشاهده است. همچنین داده‌ها را توسط برآورد کردن K تحلیل می‌کنیم تا توسط K یی که از طریق جستجو به دست آید، مقدار بهینه $\hat{K} = 1/24$ می‌شود. برآوردهای دیگر پارامتر و خطاهای استاندارد تقریبی به مقدار کم تغییر کرده است.

جدول ۳-۴. خلاصه پارامتری برای تصحیح - د، تابی و داده‌های ویرایشی اس - پما.

Parameter	Estimate	Approx. Std.Error	Approximate Correlation Matrix				
ϵ_0	4.398	0.006	1.00				
ϵ_{∞}	2.451	0.010	0.53	1.00			
$\ln f_0$	8.245	0.074	0.63	0.91	1.00		
α	0.487	0.007	-0.86	-0.75	-0.90	1.00	
β	0.571	0.021	0.74	0.91	0.98	-0.95	1.00



نمودار 5A. باقی مانده‌های حاصل از برازش تصحیح - دهمی و داده‌های اس - پمای ویرایشی

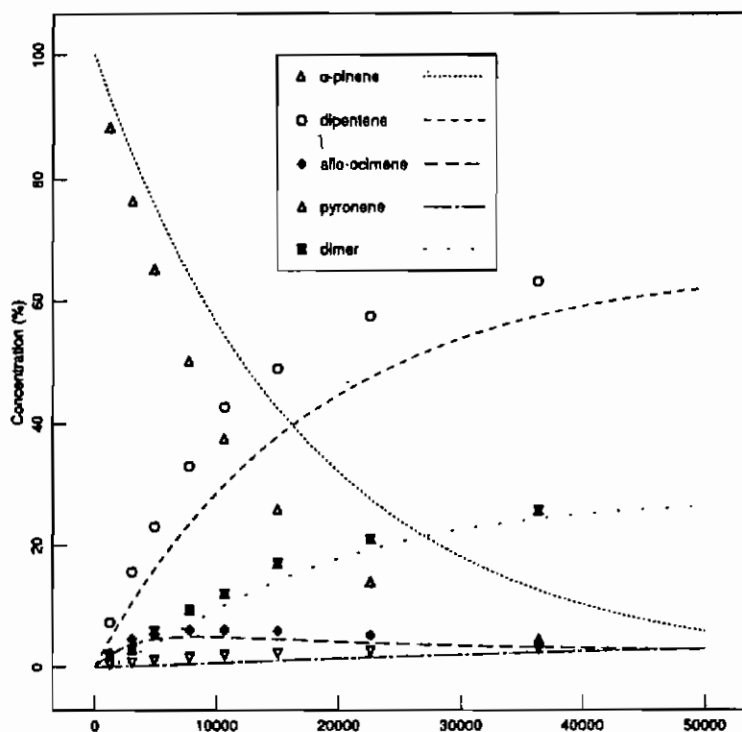
مثال : آلفا - پنین ۴

مقادیر آغازین مثال آلفا- پنین ۲ همراه با فن شرح داده شده در فصل پنجم به کار برده شده تا تابع انتظار،

مشتقات و همگرایی برای ۵ مجموعه از داده‌های پاسخ به دست آید. نتایج در جدول (۴-۴) ارائه شده است. در نمودار (۶-۴)، رسم داده‌ها و پاسخ‌های برازشی را نشان داده‌ایم. منحنی‌های برازشی با داده‌ها همراهی خیلی خوب ندارند و پیشنهاد می‌کنند که همگرایی بهینه‌ای ساختگی به وقوع پیوسته است. همان گونه که در بخش آینده خواهد آمد، علت وقوع آن وجود همبستگی بین داده‌ها است.

Parameter		θ (10^{-5})	Logarithm Scale				
From	To		ϕ	Std.Error	Correlation		
1	2	3.74	-10.19	0.085	1.00		
1	3	1.95	-10.85	0.073	0.84	1.00	
3	4	1.65	-11.01	0.104	-0.20	-0.41	1.00
3	5	27.01	-8.217	0.128	0.00	-0.00	0.85 1.00
5	3	2.61	-10.55	0.195	0.68	0.78	-0.01 0.40 1.00

جدول ۴-۴- خلاصه پارامتری داده‌های آلفا-پینن با پنج پاسخ.



نمودار ۶-۴- مقادیر مشاهده‌ای و منحنی‌های پیش‌بینی کننده حاصل از برازش پنج پاسخی بر داده‌های آلفا-پینن

۴-۳-۳ وابستگی میان پاسخ‌ها

همگرایی به یک بهینه ساختگی که مربوط به وابستگی در داده‌های پاسخ است، مسأله مهمی است، که به راحتی می‌تواند در برآورد چند پاسخی آشکار شود. ولی در حالت تک پاسخی، این امکان وجود ندارد. برای مثال وابستگی داده‌ها می‌تواند به علت ساخته شدن پاسخ در هنگام تعادل‌های وزنی بوده یا به علت عدم اندازه‌گیری یک یا چند پاسخ باشد، به گونه‌ای که آنها را از طریق اندازه‌گیری پاسخ‌های دیگر به دست آورده باشیم. اگر وابستگی در داده‌ها یا در پاسخ‌های مورد انتظار به وقوع پیوست، باید روش برآورد به گونه‌ای پیرایش شود که از همگرایی به بهینه ساختگی اجتناب شود (باکس و همکاران ۱۹۷۳ و مک لین و همکاران ۱۹۷۹).

باکس و همکاران (۱۹۷۳)، برای کشف وابستگی در داده‌های چند پاسخی تحلیل مقادیر ویژه را در ضرب داخلی ماتریس داده‌های مرکزی $(Y-\bar{Y})(Y-\bar{Y})^T$ به کار برده‌اند. که \bar{Y} ماتریس متوسط‌های پاسخ حاصل از جاگذاری هر ستون Y توسط معدل آن است. آنگاه آنها مقادیر ویژه را با یک برآوردی از مجموع مربعات گردشده $\frac{(N-1)u^2}{12}$ مقایسه نموده‌اند. u واحدی است که داده‌ها به آن گرد شده‌اند. هر مقدار ویژه که دارای اندازه مساوی با مجموع مربعات گرد شده باشد، به عنوان مشارکت در وابستگی خطی در داده‌ها فرض می‌شود.

این شیوه، قادر به آشکار کردن نقاط منفرد مربوط به شرایطی است که سبب می‌شود یک ترکیب خطی از پاسخ‌های حاصل از کلیه حالات، ثابت بمانند (برای مثال یک تعادل وزنی). ولی بنا به توضیح مک لین و همکاران (۱۹۷۹)، تحلیل، ماتریس داده‌های مرکزی می‌تواند نقاط منفرد را در ماتریس باقی مانده‌ها کشف نکند. بنابراین هنوز باید در همگرایی داده‌های "ناقص" تلاش کرد. همچنین این مولفان خاطر نشان کرده‌اند، که وابستگی خطی در شرایط خاص میان داده‌ها، نیاز به ایجاد نقاط منفرد در ماتریس باقی مانده $Z(\theta)$ ندارد. بنابراین بر چیدن نقاط منفرد حذف شده به هنگام تحلیل ماتریس داده‌های مرکزی، می‌تواند در دقت برآورد‌های پارامتر تأثیر نگذارد. ولی لازم است هم در ماتریس داده‌های مرکزی و هم در ماتریس باقی مانده به دنبال نقاط منفرد بگردیم.

برای مثالی که ممکن است نقاط منفرد در Z وجود داشته، ولی در $(Y-\bar{Y})$ وجود نداشته باشد، از مک لین و همکاران (۱۹۷۹) کمک می‌گیریم. یک واکنش شیمیایی را که در آن دو پاسخ اندازه‌گیری می‌شود را در نظر می‌گیریم. دو پاسخ به گونه‌ای نرمال شده‌اند که مقدار نمایی حالت n برابر γ_n^* یعنی غلظت ابتدایی اولین واکنش شیمیایی شود. تا وقتی که غلظت‌های آغازین همگی مساوی نشوند ماتریس $(Y-\bar{Y})$ منفرد نخواهد بود. اگر واکنش از رابطه سینتیک مرتبه اول از معادله $f_{n1} = \gamma_n^* e^{-\theta t_n}$ و $f_{n2} = \gamma_n^* (1 - e^{-\theta t_n})$ پیروی کند، آنگاه

ماتریس باقی مانده Z با سطر n ام به صورت زیر خواهد بود

$$(z_{n1}, z_{n2}) = (y_{n1} - f_{n1} \text{ و } y_{n2} - f_{n2})$$

شامل وابستگی خطی $z_{n1} + z_{n2} = 0$ در ازاء همه مقادیر n خواهد بود. ماتریس باقی مانده منفرد است، بنابراین سعی در برآورد پارامتر θ ، توسط به کاربرد معیار برآورد چند پاسخی بیهوده است.

مثالی که می تواند در $(Y - \bar{Y})$ نقاط منفرد وجود داشته باشد ولی در Z موجود نباشد به شرح زیر است: فرض کنیم در مثال بالا دو پاسخ از بخش های مساحت کروماتوگراف گرفته شده باشد، در این صورت مقدار اندازه گیری شده برای y_{n1} برابر است با:

$$y_{n1} = a_1 + b_1 \left[\frac{\text{area}_{n1}}{\text{area}_{n1} + \text{area}_{n2}} \right]$$

و برای y_{n2} برابر است با:

$$y_{n2} = a_2 + b_2 \left[\frac{\text{area}_{n2}}{\text{area}_{n1} + \text{area}_{n2}} \right]$$

در این جا a_1, b_1, a_2, b_2 ثابت هایی برای جابجایی کردن هستند. حال یک وابستگی خطی در داده ها به شکل $b_2 y_{n1} + b_1 y_{n2}$ ، که به ازاء هر n مقدار ثابتی است، وجود دارد، در نتیجه، $(Y - \bar{Y})$ منفرد خواهد بود. هر چند در حالتی مانند:

$$y_n^0 [b_1 + (b_2 - b_1)e^{-\theta t_n}] = a_2 b_1 + a_1 b_2 + b_1 b_2$$

ماتریس باقی مانده منفرد نیست، زیرا وابستگی خطی در داده ها وجود دارد.

نقاط منفرد واقع در $(Y - \bar{Y})$ و در Z ، قابل کشف توسط تشکیل تجزیه مقادیر ویژه و بردار ویژه در حاصل ضرب داخلی است. این روش در باکس و همکاران (۱۹۷۳) پیشنهاد شده است. ولی ترجیح می دهیم که واحدهای گرد شده را در ستون Y قرار دهیم که به تقریب مساوی اند.

مقادیر منفرد تجزیه های $(Y - \bar{Y})$ و Z را در نظر بگیریم (دو نگاران و همکاران ۱۹۷۹) فصل (۱) بنا به شرح موجود در این مرجع، مقادیر منفرد مربوط به واحد گرد شده، نشان دهنده نقطه منفرد است و تحلیل گر باید فوری در پی وابستگی های موجود در داده ها باشد.

یک تجزیه مقدار منفرد ماتریس داده های مرکزی و ماتریس باقی مانده، مقادیر پارامتر آغازین را طلب می کند. باید در ابتدای تحلیل برای پرهیز از محاسبات غیر ضروری - که توسط یک مجموعه داده های ناقص ایجاد می شود و شامل وابستگی خطی است - به کار رود. اگر مقادیر کوچک منفرد به دست آید، باید بردارهای منفرد متناظر امتحان شوند تا مشخص شود که چه چیزی سبب وابستگی است. اگر وابستگی قابل بیان

باشد (یعنی، یک تعادلی وزنی یا پاسخی که از سایر پاسخ‌های اندازه‌گیری شده به دست آمده) و پاسخ‌های تجاوز کرده مشخص شوند، باید آنها را حذف و تحلیل چند پاسخی را بر داده‌های کاهش‌ی اعمال نمود. اگر وابستگی قابل بیان نباشد، آن گاه تحلیل چند پاسخی باید پیرایش شود تا به عنوان وابستگی تعریف شده در بخش (۴-۳-۴) به حساب آید. ماتریس باقی مانده در مقادیر پارامتر همگرا شده نیز باید برای مقادیر منفرد تحلیل شود، به طوری که وابستگی احتمالی در باقی مانده‌ها کشف شود. تذکرات بیشتر در کشف و حذف وابستگی‌های خطی در مک لین و همکاران (۱۹۷۹) ارائه شده است.

مثال : اس - پما ۴

برای داده‌های تصحیح - ده تایی و اس - پمای ویرایشی، مقادیر منفرد ماتریس داده‌های مرکزی، عبارت‌اند از: $۰/۲۷۸$ و $۰/۱۶۱$. چون واحدهای گرده شده در داده‌ها هر دو $۰/۰۰۱$ هستند، هیچ‌کدام از این دو مقدار منفرد به اندازه کافی کوچک نیستند تا وابستگی خطی آشکار شود. مقادیر ماتریس باقی مانده در مقادیر همگرایی شده عبارت‌اند از: $۰/۰۰۹$ و $۰/۰۱۷$. هر دو به علت کوچکی نمی‌توانند مسبب رابطه‌ای باشند.

مثال : آلفا پینن ۵

ماتریس داده‌های مرکزی برای داده‌های آلفا - پنین دارای تجزیه مقدار منفرد زیر است، که آشکارا نشان دهنده همبستگی‌هایی میان داده‌ها است. زیرا دو مقدار منفرد کوچک با اندازه‌های مساوی و به عنوان واحد گرده شده در داده‌ها وجود دارد. ($۰/۱$ ، پیوست یک، بخش ۱A-۶ را ببینید).

Singular value	0.04	0.13	1 10	5.08	98.30
	-0.17	0.48	-0.30	0.06	-0.81
	-0.21	0.49	-0.61	-0.22	0.54
Singular vectors	-0.16	0.43	0.64	-0.61	0.01
	0.93	0.36	-0.01	0.00	0.02
	-0.19	0.46	0.36	0.76	0.23

ماتریس باقی مانده در برآوردهای آغازین دارای تجزیه مقدار منفرد زیر بوده که نشان دهنده دو همبستگی است.

Singular value	0.06	0.14	0.46	1.63	42.70
	0.34	-0.30	-0.28	0.26	0.81
	0.39	-0.26	-0.39	0.55	-0.57
Singular vectors	0.60	-0.27	0.75	-0.08	-0.07
	-0.50	-0.86	0.08	-0.05	-0.06
	0.36	-0.20	-0.45	-0.79	-0.12

بنا به تذکر باکس و همکاران (۱۹۷۳)، که با دقت مقاله منتشره از سوی فوگویت و هاوکینز (۱۹۴۷) را مطالعه کرده‌اند، دریافتند که در واقع پاسخ y_4 اندازه‌گیری نشده است. آن را ۳٪ مقدار تبدیل شده y_1 در نظر گرفته‌اند. یعنی، $y_4 = 0.03(100 - y_1)$. اولین بردار منفرد ماتریس داده‌های مرکزی، این وابستگی را منعکس نموده و در نتیجه نباید داده y_4 را که از طریق محاسبه به دست آمده، در برآورد به کار برد. دومین بردار منفرد به تقریب شامل درایه‌های مساوی است، که نشان دهنده یک وابستگی تعادلی وزنی است. یعنی، مجموع داده‌ها باید ۱۰۰٪ شود، علت رخ دادن این موضوع این است که دستگاه بی‌درواست و می‌توان به سادگی دید که مجموع همه ستون‌های ماتریس A برابر صفر است. بردارهای منفرد ماتریس باقی‌مانده، این وابستگی‌ها را منعکس نمی‌کنند. زیرا، تا هنگامی که تجزیه مقدار منفرد Z، وجود وابستگی‌ها را پیشنهاد می‌کند، نمی‌تواند بطور طبیعی آنها را معلوم نماید.

به علت وجود دو مقدار منفرد کوچک، دو وابستگی خطی در داده‌ها پیشنهاد می‌شود و فقط سه پاسخ باید در برآورد پارامترها باقی بماند.

هنگامی که وابستگی خطی معلوم شد، باید مسأله انتخاب زیر مجموعه‌ای از پاسخ‌ها تهیه شود. یک راه، نگاه داشتن آن پاسخ‌هایی است که محقق فکر می‌کند بهترین قابلیت را دارند.

چون انتخاب پاسخ به این روش میسر نیست، بنابراین از باکس و همکاران (۱۹۷۳) پیروی نموده و ترکیبی خطی از پاسخ‌ها را به کار می‌بریم. در هر شرایطی مفید است که روشی را برای برآورد پارامترها در هنگام ظهور وابستگی‌ها در نظر بگیریم. به همین منظور در زیر روش را برای برآورد پارامترها در هنگام وجود وابستگی‌های خطی شرح می‌دهیم.

۴-۳-۴- ترکیبات خطی پاسخ‌ها

فرض کنیم d وابستگی خطی وجود داشته باشد و داده‌ها فاقد مقدار مفقود شده باشند. در رفتار با ترکیبات خطی، یک ماتریس باقی‌مانده کاهشی ZB، از مرتبه $(M-d) \times N$ را به این شرح تولید می‌کنیم: d بردار وابسته خطی را در یک ماتریس وابسته D با مرتبه $M \times d$ جای می‌دهیم. یک تجزیه QR در D به وجود می‌آوریم و فرض می‌کنیم ماتریس دوران B شامل $M-d$ ستون از Q بوده به طوری که بر بردارهای وابسته عمود باشد.

مثال : آلفا - پنن ۶

برای داده‌های آلفا- پنن تصمیم می‌گیریم که پاسخ چهارم را در برآورد به کار نبریم، زیرا یک رابطه تعادلی وزنی در داده‌ها برقرار است. حال ماتریس وابستگی عبارت است از:

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

یک تجزیه QR ماتریس B را که شامل سه ستون آخر Q است تولید می‌کند. بار دیگر بنا به بحث پیوست شماره ۲، Q نیز برای تولید B لازم است. Q به صورت ضمنی تشکیل نشده، بنابراین یک حاصلی به شکل $Z_{(p)}B$ توسط کاربرد تبدیل هوس هرولدر بر $Z_{(p)}^T$ تشکیل می‌شود، که $M-d$ سطر آخر باقی مانده $(Z_{(p)}B)^T$ را ارائه می‌دهد. سپس، نتایج را ترانواده می‌کنیم.

برای کمینه کردن $|(ZB)^T(ZB)|$ ، روش گوس - نیوتن تعمیم یافته بخش (۴-۲) را به کار می‌بریم. که نیازمند به $(ZB)_{(p)}$ هستیم. چون B مستقل از θ است، به راحتی داریم:

$$(ZB)_{(p)} = Z_{(p)}B$$

در نتیجه جمله‌های دترمینان شیب و هسیان تقریبی برای مجموعه داده‌های کاهش یافته، توسط به کارگیری Z و $Z_{(p)}$ با $P=1, \dots, p$ قابل محاسبه است.

مثال : آلفا - پنن ۷

با به کارگیری مقادیر آغازین مثال آلفا - پنن ۴ و سه پاسخ (دوران یافته) نتیجه‌های مندرج در جدول (۴-۵) حاصل می‌شود.

جدول ۴-۵. خلاصه پارامتری داده‌های آلفا - پنن با به کارگیری سه پاسخ دوران یافته.

Parameter		θ (10^{-5})	Logarithm Scale			
From	To		ϕ	Std.Error	Correlation	
1	2	5.94	-9.731	0.021	1.00	
1	3	2.86	-10.47	0.042	-0.20 1.00	
3	4	0.453	-12.31	3.92	-0.37 0.91 1.00	
3	5	31.12	-8.072	0.124	-0.22 0.51 0.45 1.00	
5	3	5.79	-9.757	0.21	0.10 0.16 0.16 0.78 1.00	

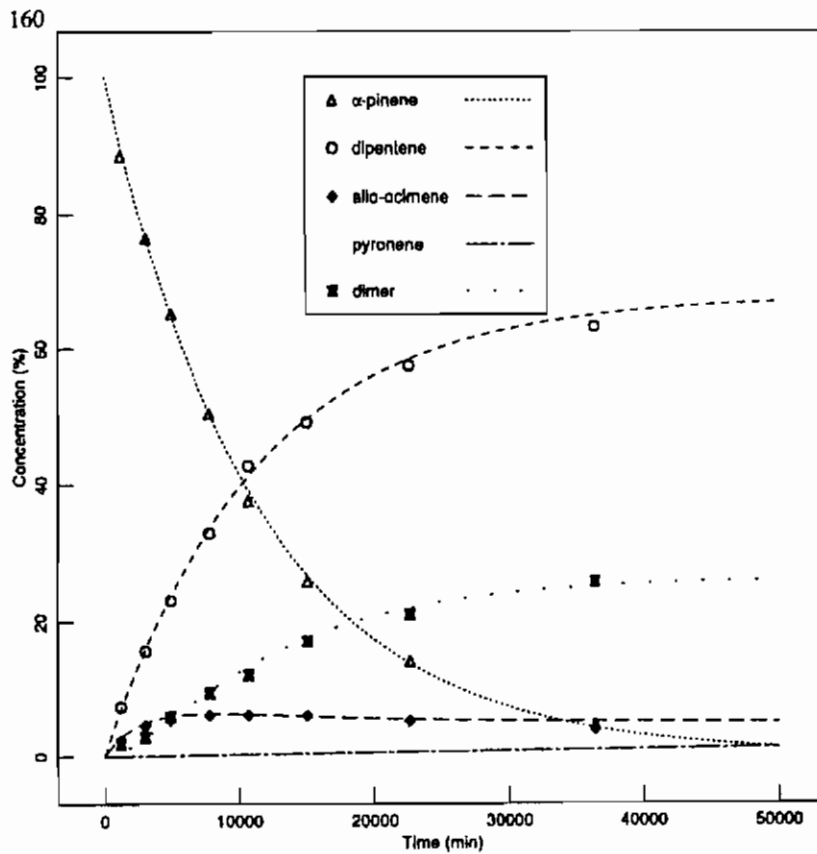
در ترسیم روی هم داده‌ها و برازش منحنی‌ها مطابق نمودار (۷-۴)، مناسب بودن برازش الگو را نشان نمی‌دهد. هر چند که باقی‌مانده‌های نشان داده شده در نمودار (۸-۴) رفتار خوبی ندارند. زیرا یک باقی‌مانده بزرگ منفی برای پاسخ ۳ و یک روند و یک باقی‌مانده بزرگ مثبت برای پاسخ ۲ وجود دارد. همچنین باقی‌مانده‌های منفی برتری دارند. علاوه بر آن حدود اطمینان تقریبی در ϕ_3 خیلی پهن است، که نشان دهنده برآورد بد آن بوده و θ_3 می‌تواند صفر باشد. به طور موقت از باقی‌مانده‌های معیوب صرف نظر نموده و سعی در یافتن الگویی ساده‌تر می‌کنیم.

می‌توان ترکیب‌های خطی پاسخ‌ها را برای واریسی سازگاری اطلاعات به کمک تحلیل زیرمجموعه‌هایی از پاسخ‌ها به کار برد. این مطلب در باکس و دراپر (۱۹۶۵) بیان شده است. برای این کار B را ماتریس به دست آمده از یک ماتریس واحد (با حذف ستون‌های متناظر با پاسخ‌هایی است که مورد استفاده قرار نمی‌گیرند) در نظر بگیریم.

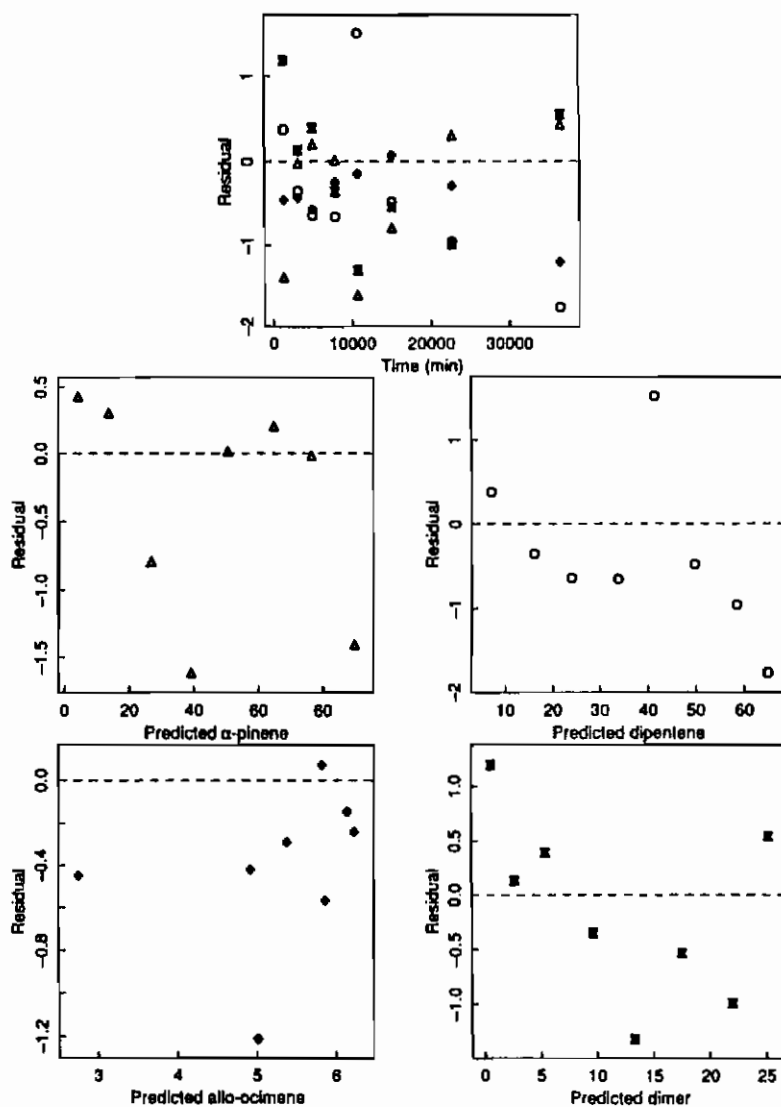
مثال : آلفا - پینن ۸

فرض کنید می‌خواهیم فقط با به کارگیری پاسخ‌های y_1, y_2, y_5 پارامترها را برآورد کنیم. برای این کار از ماتریس دوران زیر استفاده می‌شود.

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$



نمودار ۴-۷. مقادیر مشاهده‌ای و منحنی‌های پیش‌بینی حاصل از برازش سه پاسخ دوران یافته بر داده‌های آلفا - پینن.



نمودار ۸-۴- باقی مانده‌های حاصل از سه پاسخ دوران یافته در برابرش بر داده‌های آلفا-پینن، رسم شده در مقابل زمان و پاسخ‌های پیش‌بینی کننده.

۴-۳-۵- مقایسه الگوها

می‌توان الگوهای تودرتو را با کاربرد یک تحلیل درمیان اضافی مقایسه نمود. برای این کار مشابه روشی که الگوهای تو در تو تک پاسخی را با به کارگیری تحلیلی مجموع مربعات اضافی مقایسه کردیم، انجام‌پذیر است (بخش ۳-۱۰). یعنی نسبت تغییر در درمیان، تقسیم بر تغییر در درجه آزادی را با درمیان مقیاس شده برای الگوی کامل، مانند (۴-۱۱)، مقایسه می‌کنیم.

مثال : آلفا - پینن ۹

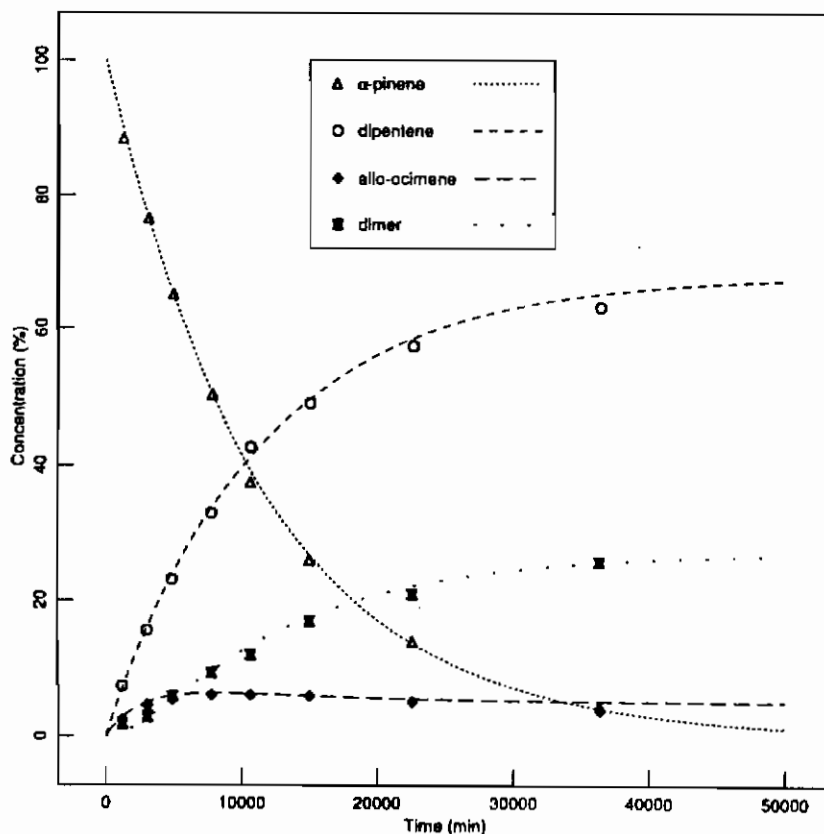
الگوی واکنش آلفا - پینن شامل یک مسیر از گونه ۳ به گونه ۴ است. ولی، همچنان که در مثال آلفا - پینن ۶ دیده می‌شود، لگاریتم نرخ ثابت وابسته به آن مسیر دارای خطای معیار بزرگی است. این نشان می‌دهد که می‌توان این مسیر را حذف کرد. با برازش این داده‌ها بدون این مسیر و حفظ هنوز سه پاسخ (دوران یافته)، نتایج جدول (۴-۶) به دست می‌آید. با ترکیب کردن این نتایج و نتایج مربوط به جدول (۴-۵)، می‌توانیم تحلیلی درمیانی اضافی، مطابق جدول (۴-۷) انجام داد. بنابراین تحلیل، مسیر اضافی مورد نیاز نیست. منحنی‌های پاسخی پیش‌بینی‌کننده در نمودار (۴-۹) رسم شده‌اند. باقی مانده‌های این الگو، تقریباً همانند برازش قبلی است. بنابراین می‌توانیم با مفقود تلقی نمودن مشاهداتی که دارای باقی مانده‌های بزرگی هستند، داده‌ها را دوباره تحلیل کنیم.

Parameter	θ	Logarithm Scale			
		ϕ	Std. Error	Correlation	
From To	(10^{-5})				
1 2	5.94	-9.73	0.018	1.00	
1 3	2.82	-11.28	0.016	0.44	1.00
3 5	30.75	-8.09	0.093	-0.07	0.26 1.00
5 3	5.72	-9.77	0.182	0.16	0.05 0.81 1.00

جدول ۶-۴- خلاصه پارامتری برای داده‌های آلفا - پینن، به کاربرد سه پاسخ دوران یافته و حذف تولید بیرون.

Source	Determinant	Degrees of Freedom	Mean Det.	F Ratio	p Value
Extra	0.60	1	0.60	0.06	0.822
Full model	28.39	3	9.46		
partial model	28.99	4			

جدول ۷-۴- تحلیل درمیانی اضافی الگوی چهار پارامتری در مقابل الگوی پنج پارامتری برای داده‌های آلفا - پینن



نمودار ۹-۴. مقادیر مشاهده‌ای و منحنی‌های پیش‌بینی‌کننده، که توسط برازش سه پاسخ دوران یافته بر داده‌های آلفا - پینن (با حذف محصول پیرونین) انجام شده است.

۴-۴-۴ داده‌های مفقود

داده‌های مفقود یکی از منابع ایجاد مشکلات در آمار است. در تحلیل رگرسیون خطی یا غیر خطی تک پاسخی، اگر مقدار متغیر پیش‌بینی‌کننده یا خود پاسخ مفقود باشد، باقی‌مانده‌ها قابل محاسبه نیستند و تنها راه، حذف آن مورد است. ولی در برآورد چند پاسخی امکان داشتن همه متغیرهای پیش‌بینی‌کننده ثبت شده و تعدادی از پاسخ‌های ثبت شده یا همه آنها وجود دارد. در چنین شرایطی، هنوز امکان کاربرد مقادیر پاسخ ثبت شده، حتی اگر داده‌های در این مورد ناقص باشند، نیز وجود دارد.

استوارت و سورنس (۱۹۸۱) یک تحلیلی بیزی را برای داده‌های چند پاسخی، با مقادیر مفقود و بر مبنای

چگالی پسین، برای θ و Σ شرطی شده بر داده‌های ثبت شده، ارائه داده‌اند. تعداد نهایی پارامترهایی که برآورد می‌شوند. برابر: $P+M(M+1)/2$ است. برآوردهای نقطه‌ای برای θ و Σ توسط کمینه کردن منفی لگاریتم چگالی پسین زیر قابل دستیابی است:

$$S(\theta, \Sigma) = (M+1) \ln |\Sigma| + \sum_{n=1}^N \ln |\Sigma_n| + \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^M \sigma_n^{mi} \{Y_{nm} - f_{nm}(\theta)\} \{Y_{ni} - f_{ni}(\theta)\}$$

در این جا Σ_n از روی Σ با جانشینی زیر به دست می‌آید:

$$\delta_{mi} = \begin{cases} 1 & m=i \\ 0 & m \neq i \end{cases}$$

و این هنگامی است که داده برای حالت (n, m) یا (n, i) مفقود باشد. جمله σ_n^{mi} درایه (m, i) ام از Σ_n^{-1} است.

تحلیل بالا پیچیده بوده و نیاز به الگوریتم کمینه کردنی سفسطه‌آمیز، واریسی دقیق بر روی داده‌ها و پیگیری الگو دارد تا از یک مسأله مبهم اجتناب شود. همچنین نیاز به اطمینان در مثبت بودن همه پراش‌ها و معین مثبت بودن ماتریس برآورد Σ و Σ_n دارد.

روش دیگری توسط باکس، دراپروهاتر (۱۹۷۰) پیشنهاد شده که با پاسخ‌های مفقودی مانند پارامترها رفتار می‌شود (به نام V^*) و معیار دترمینانی به ترتیب بر روی θ و V^* بهینه می‌شود. بنا به اظهار (بارد، ۱۹۷۴ و استوارت و سورنس ۱۹۸۱) این روش هنگامی که تعداد زیادی مفقود وجود داشته باشد امکان‌پذیر نیست. زیرا تعداد نهایی پارامترهای الگو و پاسخ‌های مفقود می‌توانند از تعداد حالات بیشتر شوند.

هنگامی که تعداد نهایی پارامترها قابل قبول باشد. روشی دو مرحله‌ای را به این شرح پیشنهاد می‌کنیم. که در آن پارامترهای الگو و باقی مانده‌های متناظر با مقادیر مفقود، به طور متناوب برآورد شوند. باقی مانده‌های مفقود را بجای پاسخ‌های مفقود به کار می‌بریم. زیرا صفر، برآورد آغازین خوبی برای باقی مانده مفقود است، همچنین باقی مانده‌های مفقود میل به عدم همبستگی با پارامترهای الگو را دارند. در مرحله اول، باقی مانده‌های مفقود را تثبیت می‌کنیم. و پارامترهای الگو را با کاربرد یک الگوریتم گوس - نیوتنی، برآورد می‌نمائیم. الگوریتم باید تعدیل شود، زیرا بعد از محاسبه هر تابع، درایه‌های واقع در $Z(\theta)$ متناظر با داده مفقود، باید توسط مقدار جاریشان جانشین شوند. همچنین درایه‌های متناظر در $Z(p)$ باید توسط صفر، جانشین شوند. چون آن باقی مانده‌ها به پارامترهای الگو بستگی ندارند.

در مرحله دوم، θ را تثبیت می‌کنیم و دترمینان را نسبت به باقی مانده‌های مفقود، کمینه می‌کنیم. روش تعمیمی گوس - نیوتن می‌تواند در این جا نیز به کار رود، چون مشتق‌ها نسبت به باقی مانده‌های مفقودی در همه جا صفر است، بجز برای محل باقی مانده مفقود.

مثال : اس - پما ۵

بنابر مثال اس - پما ۳، دال بر این که باقی مانده‌های مربوط به ۱۰۰ و ۱۵۰ هرگز غیر عادی اند، حالات مربوط را حذف می‌نماییم. حال، روش دو مرحله‌ای را به منظور برازش بر داده‌های چند پاسخی یا مشاهدات مفقود - با در نظر گرفتن y_{real} به عنوان مفقود و y_{imag} به عنوان قابل قبول - اعمال می‌کنیم.

برآوردهای آغازین $\theta = (4/40, 2/45, 8/25, 0/49, 0/57)^T$ شروع می‌کنیم. و باقی مانده‌های $\{Z\}_{4,1}$ و $\{Z\}_{5,1}$ را صفر می‌گیریم. همگرایی در پارامترها $\theta = (4/41, 2/45, 8/24, 0/48, 0/57)^T$ را با دترمینان $4/50 \times 10^{-8}$ ارائه می‌دهد. حال θ را ثابت نگهداشته و دترمینان را نسبت به $\{Z\}_{4,1}$ و $\{Z\}_{5,1}$ بهینه می‌کنیم. این عمل برآوردهای $0/00248$ و $0/00270$ و دترمینان $4/373 \times 10^{-8}$ را ارائه می‌دهد.

با ثابت نگه داشتن این باقی مانده‌ها و بهینه کردن نسبت به این روش، تغییر کوچکی در θ به وجود می‌آورد (یعنی lnf_0 از $8/237$ به $8/252$ تغییر می‌کند). بهینه دوباره باقی مانده‌ها، برآوردهای $0/00252$ و $0/00277$ و دترمینان $4/371 \times 10^{-8}$ را می‌دهد. در مرحله بعدی مقادیر پارامترها تغییر نمی‌کنند. پس همگرایی حاصل شده است.

مثال : آلفا - پنین ۱۰

مطابق بحث مثالهای آلفا - پنین ۷ و ۹، باقی مانده‌ها نسبت به مقادیر برازشی در پاسخ‌های ۴ و ۲ روندی را نشان می‌دهند و پخش‌های ناساوی باقی مانده‌ها از نظر علامت، وجود دارد. همچنین امکان وجود دو نقطه پرت $\hat{z}_{5,2}$ و $\hat{z}_{8,3}$ نیز هست. به منظور مشاهده این که آیا روند به سبب این دو نقطه پرت است یا خیر؟ داده‌ها را توسط به کارگیری الگویی ۴ - پارامتری و تلقی مشاهدات متناظر، به عنوان صفر، تحلیل دوباره می‌کنیم. خلاصه‌ای از نتایج در جدول (۸-۴) درج شده است. اثر اصلی، تغییر $ln \theta_4$ توسط $0/317$ است، که با یک عامل ضرب $1/37$ برای θ_4 متناظر است. باقی مانده‌ها که نشان داده نشده‌اند، بسیار شبیه حالتی است که مجموعه کامل داده‌ها برازش داده شوند، که در نمودار (۸-۴) رسم شده‌اند. در نتیجه، عدم توازن در علامت‌ها وجود ندارد و روند به سبب دو باقیمانده که به عنوان نقطه پرت تلقی شده‌اند، نیست. بنابراین رفتار غیر

تصادفی باقی مانده‌ها را تحت نشان دادن یک عدم کفایت اساسی در شکل‌گیری الگو، تفسیر می‌کنیم. یافته‌های بالا بر اساس استوارت و سورنس (۱۹۸۱) است - که تحلیلی از داده‌های کامل را انجام داده‌اند - و توسط فورگویت و هاوکنیز (۱۹۴۵ و ۱۹۴۷) گزارش شده است. الگوی پیشنهادی توسط استوارت و سورنس (۱۹۸۱) شامل مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیل غیر خطی است، که در مثال آلفا - پین ۱، در فصل سوم معرفی شده است.

Quantity	Data Set			
	Complete		Incomplete	
	Estimate	Std. Err.	Estimate	Std. Err.
$\ln \theta_1$	-9.729	0.018	-9.740	0.013
$\ln \theta_2$	-10.478	0.016	-10.475	0.019
$\ln \theta_3$	-8.087	0.093	-8.229	0.105
$\ln \theta_4$	-9.769	0.183	-10.086	0.265
$\hat{z}_{5,2}$	1.528		-0.562	0.138
$\hat{z}_{8,3}$	-1.214		-1.804	0.381
Determinant	28.99		24.44	

جدول ۸-۴. خلاصه اثرهای دو مشاهده مفقود شده در داده‌های آلفا - پین.

تمرین :

۱-۴- برنامه‌ای رایانه‌ای به زبان دلخواه خود برای محاسبه دترمینان، شیب دترمینان و همیان تقریبی دترمینان در یک زیر روال برآورد چند پاسخی بنویسید. اگر نیازی بود، روش ذکر شده در پیوست سه، بخش (۳-۳۸) را برای راهنمایی به کار بگیرید.

۲-۴- داده‌ها را برای پاسخ‌های ۲۱ و ۲۰ در مجموعه داده‌های آلفا - پین، پیوست شماره چهار، بخش (۶-۴۸) برای برازش الگوی چند پاسخی زیر به کار ببرید:

$$\gamma(t) = \left[\begin{array}{c} e^{-(\theta_1 + \theta_2)t} \\ \frac{\theta_1}{\theta_1 + \theta_2} \left[1 - e^{-(\theta_1 + \theta_2)t} \right] \end{array} \right]$$

غلظت آغازین آلفا - پین (پاسخ ۱) را ۱۰۰٪ و پاسخ ۲ را ۵٪ بگیرید.

۱) روش نرخ تقریبی بخش (۴-۳-۱) را برای به دست آوردن برآوردهای آغازین پارامترها به کار ببرید.
۲) یک زیرروال برآورد غیر خطی را برای حصول برآورد پارامتر به کار بگیرید. مقدار مفقود پاسخ ۱ را در زمان ۱۶۰۲۰ برابر صفر بگیرید تا برآوردهای پارامتر حاصل شود.

۳) روش بخش (۴-۴) را برای برآورد پارامتر و مقدار مفقود به کار ببرید.

۳-۴- یک تجزیه مقدار منفرد از ماتریس داده‌های مرکزی مربوط به داده‌های پیوست شماره ۴ بخش (۷-۴۸) تشکیل دهید تا معلوم شود که آیا، وابستگی‌های خطی در داده‌ها وجود دارد یا خیر؟

۴-۴- برای داده‌ها و الگوی مسأله (۲-۴) برآوردهای پارامتر و خلاصه آماری حاصل از قسمت ب به شرح زیر است:

مقیاس لگاریتی					
ماتریس همبستگی	خطای استاندارد	$\ln \theta$	برآورد	پارامتر	
۱/۰۰	۰/۰۰۸۵	-۸/۴۱۷	۰/۰۰۰۲۲۱	θ_1	
۱/۰۰	۰/۰۰۵۹	-۸/۸۸۱	۰/۰۰۰۱۳۹	θ_2	

۱) نواحی استنباط ۹۵٪ توام و حاشیه‌ای پارامترها را به کمک معادلات (۹-۴) و (۱۲-۴)، به دست آورید.

(۲) شبکه‌ای از مقادیر $\ln \theta_1$ از $8/46$ تا $8/38$ - رادر گامهای 0.05 و $\ln \theta_2$ از $8/94$ تا $8/85$ - رادر گام‌های 0.02 به کار ببرید. سپس، دترمینان را در هر نقطه حساب کنید. نقاط مشترک با مقدار مساوی منحنی‌ها را مقید می‌کند.

(۳) ناحیهٔ استنباط 95% توأم بند (۱) را روی منحنی‌های بند (۲) رسم نمایید. آیا ناحیهٔ تقریب خطی در این حالت دقیق است؟

۴-۵. داده‌ها و الگوی پیوست شماره چهار، بخش (۷-۴۴) را برای برازش الگوی چند پاسخی به کار ببرید. الگو را به شکل ساده‌ای به کمک پارامترهایی که می‌توانند صفر شوند، کاهش دهید. تحلیل شما در مسأله (۳-۴) باید شما را متقاعد کند که، یک وابستگی در داده‌ها موجود بوده است. در حقیقت مؤلفه آبی ϕ_6 توسط یک معادلهٔ تعادلی وزنی ایجاد شده و در نتیجه این پاسخ نباید در برازش به کار رود. به همین علت، راحت‌تر است که پارامترهای θ_6 و β_6 را از معادلات تشکیل پارامتری برآورد کنید.

فصل پنجم

الگوهای تعریف شده توسط دستگاه معادلات دیفرانسیل

«گیتی مانند یک صندوقی پر از اسرار است. ولی، اسرار در صندوق قفل قرار دارند».

پیتر داورنیر

یکی از رده‌های مهم الگوهای غیر خطی، آنهایی هستند، که پاسخها توسط دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی تعریف می‌شوند. این الگوها در شیمی سینماتیک (فرامنت و بیشاف، ۱۹۷۹) و داروسازی (گودفری، ۱۹۸۳) - که به نام الگوهای حجره‌ای معروف اند - به کار می‌روند. به علت کاربرد آنها در زمینه‌های متفاوت، بررسی روشهای مختلف آنها ارزشمند است. در این فصل، الگوهای کارایی را برای برآورد پارامترهای الگوهای حجره‌ای و برای توسعه و آزمون الگوهای رقیب ارائه می‌کنیم. روشهای برخورد با دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی در بارد (۱۹۷۴) و کاراکوتسیوس و استوارت (۱۹۸۵) مورد بحث قرار گرفته است.

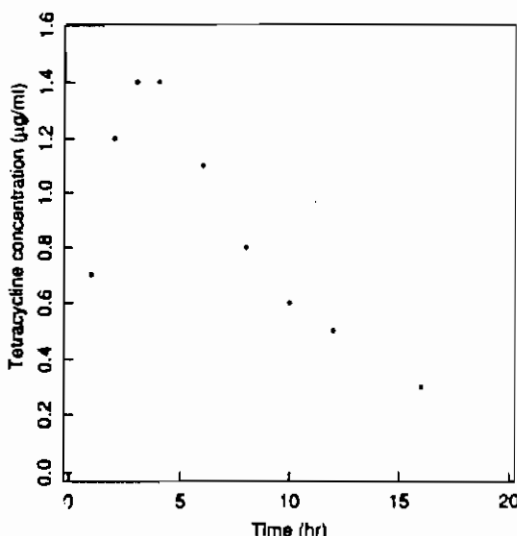
۵-۱- الگوهای حجره‌ای و دستگاه نموداری

یکی از کاربردهای معمول الگوهای حجره‌ای در داروسازی است. جایی که، تعویض مواد در دستگاه بیولوژی مطالعه می‌شود. دستگاه به چندین حجره تفکیک شده و فرض می‌شود که نرخهای جریان در میان

حجره‌ها از سینماتیک مرتبه یک است. بنابراین، نرخ انتقال به یک حجره دریافت یا طشت متناسب با غلظت در حجره تأمین یا منبع است. ضریب انتقال را که نسبت به زمان ثابت فرض می‌شود، «نرخهای ثابت» نامند.

مثال : تتراسیکلین ۱

یک مثال برای الگو حجره‌ای، داده‌های غلظت تتراسیکلین هیدروکلراید در سرم را در نظر می‌گیریم. یک مقدار از تتراسیکلین از طریق دهان به شخص مورد مطالعه خورانده و غلظت تتراسیکلین کلراید در سرم در هر ۱۶ ساعت اندازه‌گیری می‌شود. (واگنر، ۱۹۶۷). داده‌ها در پیوست شماره ۱، فصل (۱۴-۱۱) و در نمودار (۱-۵) ارائه شده‌اند.



نمودار ۱-۵- رسم غلظت تتراسیکلین در مقابل زمان

دستگاه بیولوژی را می‌توان به حجره روده - که در آن بررسی شیمیائی انجام می‌شود - حجره خون - که مواد شیمیایی را از روده دریافت می‌کند - و یک مسیر حذفی، تقسیم‌بندی کرد.

با فرض سینماتیک مرتبه یک، غلظت $(\gamma_1(t), \gamma_2(t))^T$ تتراسیکلین هیدروکلراید در دو حجره را می‌توان به کمک دو معادله دیفرانسیل زیر توجیه کرد.

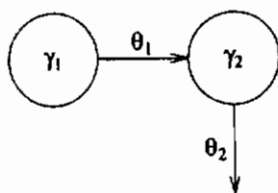
$$\frac{d\gamma_1(t)}{dt} = \dot{\gamma}_1 = -\theta_1 \gamma_1(t)$$

$$\frac{d\gamma_2(t)}{dt} = \dot{\gamma}_2 = \theta_1 \gamma_1(t) - \theta_2 \gamma_2(t)$$

(۱-۵)

نقطه بالانویس، نشانگر مشتق نسبت به زمان است.

دستگاه رامی توان به صورت تصویری به عنوان نمودار یک حجره یا دستگاه مطابق نمودار (۲-۵) نشان داد.



نمودار ۲-۵. یک نمودار دستگاهی با حجره‌ای برای الگوی ترانسیکلین.

واکنشهای شیمیایی را می‌توان توسط دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی مرتبه اول توصیف نمود. در این حالت، قطعات شیمیایی واکنش، تشکیل حجره‌ها را می‌دهند. قطعات اصلی نقش مادر و قطعات تولید شده نقش دختر را بازی می‌کنند.

مثال: روغن کشتی ۱

یک مثال شیمیایی، در نظر گرفتن تجزیه روغن کشتی توصیف شده توسط زایگل و گورمن (۱۹۸۰) است. روغن سنگ شامل مواد عالی است که در ساختمان سنگ قرار دارد. برای بیرون آوردن روغن از سنگ، از گرمادهی استفاده می‌شود، که به آن تجزیه بر اثر حرارت گویند.

همچنین محصولات فرعی غیر قابل اندازه‌گیری مانند حلال و گازهای سبک نیز تولید می‌شود. زایگل و گورمن، داده‌های به دست آمده توسط هوپارد و رابینسون (۱۹۵۰) را برای برآورد نرخهای ثابت در چندالگوی مختلف به کار برده‌اند. این داده‌ها در پیوست شماره ۱ بخش (۱۵-۴۱) ارائه شده‌اند.

الگوی نمایی انتخاب شده توسط زایگل و گورمن از داده‌های ۴۰۰ درجه‌ای استفاده کرده است. این عمل با کاربرد روشهای برآورد چند پاسخی مطابق دستگاه نموداری (۳-۵) انجام شده و متناسب با دستگاه

$$\frac{d\gamma_1}{dt} = -(\theta_1 + \theta_4)\gamma_1 \quad \text{دیفرانسیل خطی زیر است:}$$

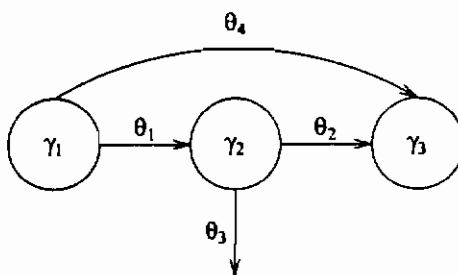
$$\frac{d\gamma_2}{dt} = \theta_1\gamma_1 - (\theta_2 + \theta_3)\gamma_2 \quad (2-5)$$

$$\frac{d\gamma_3}{dt} = \theta_4\gamma_1 + \theta_2\gamma_2$$

در روابط بالا، γ_1 مبین کروژن، γ_2 قیر معدنی و γ_3 روغن است.

الگو نشانگر این است که کروژن به قیر معدنی با نرخ ثابت θ_1 و روغن با نرخ ثابت θ_4 تجزیه می‌شود.

همچنین قیر معدنی با نرخ ثابت θ_2 به روغن و با نرخ ثابت θ_3 به سایر فرآورده‌های فرعی غیر قابل اندازه‌گیری تجزیه می‌شود.



نمودار ۳-۵- دستگاه نموداری برای انگوی تجزیه روغن سنگ.

در الگوهای کلی k حجه‌ای، غلظت در زمان t را به صورت $\gamma(t) = (\gamma_1(t), \dots, \gamma_k(t))^T$ می‌نویسیم، فرض می‌کنیم سینماتیک مرتبه یک با نرخهای ثابت θ_1 تا θ_p برقرار باشد. غلظت‌ها از دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی زیر پیروی می‌کنند:

$$\frac{d\gamma}{dt} = \dot{\gamma}(t) = A\gamma(t) + \tau(t) \quad (3-5)$$

در این رابطه A ماتریس تبدیل دستگاه $k \times k$ ، شامل نرخهای ثابت و $\tau(t)$ یک تابع برداری و نشانگر ورودی به دستگاه است.

ممکن است ورودی‌های پیچیده‌تری نیز به کار رود (بیتو، ولف و واتر، ۱۹۸۵). در این کتاب ما فقط ۲ تابع ورودی را در نظر خواهیم گرفت. ولی یک ریزش مداوم مواد یا ورودی مرحله‌ای به دستگاه است، که در آن یک بردار ثابت است.

$$\tau(t) = \begin{cases} 1 & t \geq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$

دومی یک تزریق یکجا یا لحظه‌ای است. در نتیجه می‌توان آن را به عنوان ورودی ضربه‌ای یا تابع دلتای دیراک در نظر گرفت. بهتر است آنرا بعنوان برداری با شرایط اولیه $\gamma(0) = \gamma_0$ در نظر بگیریم.

مثال ۲: تتراسیکلین

در مثال تتراسیکلین، ورودی یک باره به معده وارد می‌شود. ماتریس تبدیل A را می‌توان بسادگی با بازرسی کردن معادلات دیفرانسیل (۱-۵) یا دستگاه نموداری (نمودار ۳-۵) بشرح زیر به دست آورد:

$$A = \begin{bmatrix} -\theta_1 & 0 \\ \theta_1 & -\theta_2 \end{bmatrix}$$

غلظت اولیه تترا سیکلین هیدروکلراید موجود در معده نامعلوم است. ولی غلظت موجود در سرم، صفر فرض می‌شود. بنابراین پارامتر سومی مانند θ_3 را وارد می‌کنیم. داریم، $\gamma_0 = (\theta_3, 0)^T$

مثال : روغن کنشی ۲

برای الگوی (۲-۵) که توسط زایگل و گورمن پیشنهاد شده (۱۹۸۰) ماتریس A به شرح زیر است:

$$A = \begin{bmatrix} -\theta_1 - \theta_4 & 0 & 0 \\ \theta_1 & -\theta_2 - \theta_4 & 0 \\ \theta_4 & \theta_2 & 0 \end{bmatrix}$$

اعداد حاصل از اندازه‌گیری برای روغن و قیر به صورت درصدی از مقدار اولیه کروژن هستند. بنابراین $\gamma_0 = (100, 0, 0)^T$ را انتخاب می‌کنیم. زایگل و گورمن (۱۹۸۰) دریافتند که باید برای زمان مرده مجهول قبل از شروع واکنش، یک پارامتر، پنجمی انتخاب نمود.

۲-۵- برآورد پارامترها در الگوهای حجره‌ای

چند روش برای برآورد پارامترهای الگوهای حجره‌ای قابل استفاده است. معروفترین آنها، به دست آوردن جواب تحلیلی دستگاه معادلات دیفرانسیل و سپس کاربرد تابع انتظار متناظر با حجره است، که داده‌های آن توسط یک برنامه برآورد غیر خطی استاندارد قابل دست‌یابی باشد. روش دوم، کاربرد یک برنامه برآورد غیر خطی استاندارد است، با این شرط که، تابع توسط حل معادلات و به روش انتگرال عددی محاسبه می‌شود. روش سوم (اندرسن ۱۹۸۳) توصیه کرده است که پاسخهای γ_1 تا γ_4 عموماً به نرخهای ثابت دستگاه θ بستگی دارند و می‌توان مجموعه‌ای از الگوهای نمایی را برازش داد و برآوردها را برای نرخهای ثابت سایر پارامترها به دست آورد. روش چهارم و برتر، روش نما ماتریسی است که توسط جنریج و برایت (۱۹۷۶) پیشنهاد شده است. توسط محاسبه مقادیر برای تابع الگوی $\gamma(t)$ و مشتقات آن، جوابها در دستگاه معادلات تولید شده و مستقیماً مقادیر θ و t و $\gamma(t)$ به دست می‌آید.

روش نما ماتریسی نسبت به روش تحلیلی برتری دارد، زیرا، این روش از مشکلات و گاهی از کار بسیار سخت و غیر ممکن به دست آوردن بسطهای پیچیده برای تابع الگو و مشتقات آن، دوری می‌کند. به علاوه، امکان به دست آوردن مشتق نسبت به پارامترها به روش مشابهی با تابع الگو وجود دارد. این روش نسبت به روش انتگرالگیری عددی نیز برتری دارد. زیرا، سریعتر و دقیقتر است. بالاخره نسبت به روش مجموعه‌نمایی نیز برتری دارد چون از حل برای نرخهای ثابت بر حسب نما و ضرایب وزن دوری می‌کند. همچنین به علت تعداد صحیح پارامترها مستقیماً در الگو شرکت می‌نماید.

اگر در روش نما ماتریسی، فقط یک حجره مشاهده شود، تابع انتظار $f(t, \theta)$ به سادگی همان عنصر بردار $\gamma(t)$ را فراهم می‌کند. لذا بنا بر بحث بخش (۴-۳-۴) تابع و مشتق آن از حل عمومی، توسط ضرب ماتریس پاسخ مورد انتظار H و مشتق ماتریس پاسخ مورد انتظار نسبت به پارامترها در یک بردار $K \times I$ که تمام اعضای آن صفراند. - بجز یک عدد I در سطر مورد نظر - به دست می‌آید. برای مثال، در داده‌های تتراسیکلین، غلظت تتراسیکلین کلراید موجود در سرم اندازه‌گیری می‌شود. بنابراین $\gamma_2 = \eta$. این پاسخ برای برآورد θ_1 و θ_2 به کار می‌رود و ماتریس پاسخ مورد انتظار توسط بردار $(0, 1)^T$ ضرب می‌شود. در مثال روغن کشی، غلظت روغن و قیر در دسترس است. در نتیجه ماتریس انتظار چند پاسخی $H = (\gamma_2, \gamma_3)$ را می‌توان برای برآورد دستگاه پارامتر با کاربرد روشهای بحث شده در فصل چهارم به کار گرفت. در این حالت پاسخهای مورد انتظار و مشتقات آنها نسبت به پارامترها باید توسط یک ماتریس دوران 2×2 مانند B ضرب شوند. ماتریس B شامل یک سطر صفر است، که در بالای یک ماتریس همانی 2×2 قرار دارد.

۵-۲-۱- حل دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی

جواب عمومی برای دستگاه (۳-۵) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\gamma(t) = e^{At} \gamma_0 + e^{At} * \mathbf{1}(t) \quad (۴-۵)$$

که نما ماتریسی e^{At} نشان دهنده همگرایی سری توانی و علامت (*) نشانگر پیچش زیر است:

$$e^{At} = I + \frac{At}{1!} + \frac{(At)^2}{2!} + \dots \quad (۵-۵)$$

$$e^{At} * \mathbf{1}(t) = \int_0^t e^{A(t-u)} \mathbf{1}(u) du \quad (۶-۵)$$

تابع بردار به روش مؤلفه‌ای انتگرال‌گیری می‌شود.

فرض کنید A قطری شدنی باشد، به گونه‌ای که یک ماتریس نامنفرد از بردارهای ویژه به نام U ، یک ماتریس قطری از مقادیر ویژه به نام $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$ با شرایط زیر وجود داشته باشد.

$$A = U \Lambda U^{-1}$$

حال

$$e^{At} = U e^{\Lambda t} U^{-1}$$

خواهد بود، که در آن :

$$e^{\Lambda t} = \text{diag}(e^{\lambda_1 t}, \dots, e^{\lambda_k t})$$

روش عمومی محاسباتی برای انتگرال پیچش در پیوست شماره ۵ و شبه برنامه آن در پیوست شماره ۳

ارائه شده است.

برای توسعه حل نمایی ماتریسی، حالت خاصی را در نظر می‌گیریم که A قطری شدنی و ورودی یکباره است. لذا، دستگاه (۳-۵) به صورت زیر قابل نوشتن است:

$$\begin{aligned}\dot{\gamma} &= A\gamma \quad t > 0 \\ \gamma(0) &= \gamma_0\end{aligned}\quad (۷-۵)$$

در نتیجه (۷-۵) به صورت زیر است:

$$\begin{aligned}\dot{\gamma} &= A\gamma \\ &= U\Lambda U^{-1}\gamma\end{aligned}$$

با ضرب هر دو طرف معادله در U^{-1} و با فرض $\xi = U^{-1}\gamma$ داریم:

$$\begin{aligned}\dot{\xi} &= \Lambda\xi\end{aligned}$$

که حاصل مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیل مرتبه یک مستقل است. یعنی:

$$\dot{\xi}_k = \lambda_k \xi_k \quad k=1,2,\dots,K$$

حل این دستگاه به صورت زیر است:

$$\begin{aligned}\xi_k(t) &= e^{\lambda_k t} \xi_k(0) \\ \xi_k(0) &= \text{عنصر } k\text{ام، ماتریس } U^{-1}\gamma_0 \text{ است. با توجه به } \gamma = U\xi \text{ داریم:} \\ \gamma(t) &= Ue^{\Lambda t}U^{-1}\gamma_0 = e^{\Lambda t}\gamma_0\end{aligned}\quad (۸-۵)$$

بنابراین برای یک ورودی ضربه‌ای یا یکباره، انتگرال پیچش (۶-۵) به رابطه (۸-۵) تبدیل می‌شود.

مثال : تراسیکلین ۳

برای مثال تراسیکلین داریم: $\gamma_0 = (\theta_3, 0)^T$ و

$$A = \begin{bmatrix} -\theta_1 & 0 \\ \theta_1 & -\theta_2 \end{bmatrix}\quad (۹-۵)$$

برای این دستگاه ساده، می‌توان مقادیر و بردارهای ویژه ماتریس تبدیل (۹-۵) را محاسبه و آنها را برای به

دست آوردن بسط تحلیلی پیچیده برای پاسخ به کاربرد، داریم:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} -\theta_1 & 0 \\ \theta_1 & -\theta_2 \end{bmatrix} \quad \text{و} \quad U = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \theta_1 & -\theta_2 - \theta_1 \end{bmatrix}$$

$$U^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{\theta_2 - \theta_1} & -\frac{1}{\theta_1} \end{bmatrix} \quad \text{بنابراین}$$

با توجه با (۸-۵) پاسخها به صورت زیراند:

$$\gamma = \begin{bmatrix} \theta_3 e^{-\theta_1 t} \\ \frac{\theta_3 \theta_1 (e^{-\theta_1 t} - e^{-\theta_2 t})}{\theta_2 - \theta_1} \end{bmatrix}$$

۵-۱-۲-۱-۱-۲-۵ زمان مرده

برای داده‌های روغن کشتی، بیان شد که دستگاه بلافاصله به ورودی پاسخ نمی‌دهد. لذا، باید یک زمان مرده t_0 در الگو وارد شود. رابطه (۳-۵) را به صورت زیر تعدیل می‌کنیم.

$$\gamma(\tau) = A\gamma(\tau) + 1(\tau)$$

$$\gamma(0) = \gamma_0 \quad (۱۰-۵)$$

که $\tau = (t - t_0)$ است. t_0 می‌تواند معلوم یا نامعلوم باشد.

$$\tau = \begin{cases} t - t_0 & t > t_0 \\ 0 & t \leq t_0 \end{cases}$$

جواب عمومی به صورت زیر است:

$$\gamma(\tau) = \begin{cases} \gamma_0 & \tau \leq 0 \\ e^{\lambda \tau} \gamma_0 + e^{\lambda \tau} * 1(\tau) & \tau > 0 \end{cases} \quad (۱۱-۵)$$

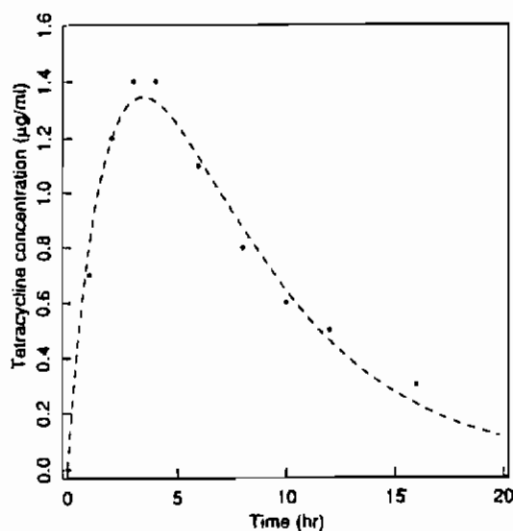
مثال : تتراسیکلین ۴

داده‌های تتراسیکلین نشان دهنده وجود زمان مرده در دستگاه نیز هست. الگوی (۱-۵) را برازش می‌دهیم. برآوردهای پارامترها در جدول (۱-۵) ارائه شده است. رسم داده‌ها و برازشی پاسخ در مقابل زمان در نمودار (۴-۵) نشان دهنده برازش ضعیفی است. بنابراین منحنی برازشی بسیار خمیده است.

با دخالت دادن زمان مرده به عنوان پارامتر چهارم، برآورد پارامتر مطابق جدول (۲-۵) و منحنی برازشی در نمودار (۵-۵) به دست می‌آید. این برازش بهتر است. به ویژه برای مقادیر کوچک زمانی. یک تحلیل مجموع مربعات اضافی در جدول (۳-۵) ارائه شده است، که نشان دهنده احتیاج به زمان مرده در الگو است.

Parameter	Value	Logarithm Scale		
		$\ln \theta$	Std. Error	Correlation Matrix
θ_1	0.1830	-1.698	0.244	1.00
θ_2	0.4345	-0.8335	0.272	-0.96 1.00
$\gamma_1(0)$	5.996	1.791	0.318	-0.98 0.99 1.00

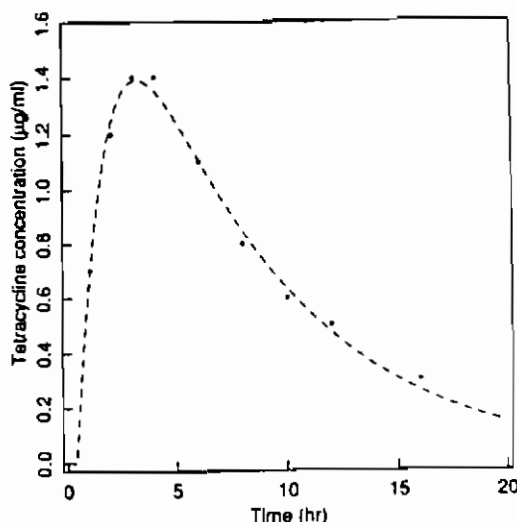
جدول ۵-۱- خلاصه پارامتری برای الگوی تراسیکلین بدون زمان مرده.



نمودار ۵-۴- رسم داده‌های تراسیکلین و پاسخ برازشی برای الگوی بدون زمان مرده.

Parameter	Value	Logarithm Scale			
		$\ln \theta$	Std. Error	Correlation Matrix	
θ_1	0.1488	-1.905	0.097	1.00	
θ_2	0.7158	-0.3343	0.176	-0.86	1.00
$\gamma_1(0)$	10.10	2.312	0.198	-0.92	0.99 1.00
t_0	0.4123		0.095	-0.54	0.81 0.77 1.00

جدول ۵-۲- خلاصه پارامتری برای الگوی تراسیکلین با زمان مرده.



شکل ۵-۵: رسم داده‌های تتراسیکلین و برازش منحنی پاسخ برای الگوی هم‌اثر با زمان مرده

Source	Sum of Squares	Degrees of Freedom	Mean Square	F Ratio	p Value
Extra	0.02560	1	0.02560	12.736	0.016
4-parameter	0.01005	5	0.00201		
3-parameter	0.03565	6			

جدول ۳-۵: تحلیل مجموع مربعات اضافی برای زمان مرده، در الگوی تتراسیکلین

۵-۲-۱-۲-۵. نقل و انتقال تزریق

در تزریق دائم، گاهی یک زمان بحرانی دیگری مانند t_f ، دال بر توقف تزریق وجود دارد. در مطالعات داروسازی دوره $0 \leq t \leq t_f$ را مرحله انجام تزریق و دوره $t > t_f$ را مرحله توقف تزریق می‌گویند. اگر اندازه‌گیری‌هایی که در مرحله توقف تزریق شده باشد، الگو مربوط به زمان توقف را $\gamma_{off}(t)$ می‌نامند و با کاربرد الگوی «انجام تزریق» در t_f مشابه یک بردار شرایط آغازین در یک دستگاه جدید با $t=0$ ، ارزیابی می‌شود. بنابراین با فرض صفر بودن شرایط آغازین برای مرحله انجام تزریق داریم:

$$\gamma_{on}(t) = e^{\lambda t} * v(t) \quad t \leq t_f$$

و برای مرحله «توقف» ترزریق» داریم:

$$\gamma_{\text{off}}(t) = e^{A(t-t_f)} \gamma_{\text{on}}(t_f) \quad t > t_f$$

۵-۲-۲- مشتقات تابع انتظار

برای برآورد پارامترها توسط روش گوس-نیوتن، باید مشتق‌ها را نسبت به پارامتر به دست آوریم. با توجه به اظهار جنریج و برایت (۱۹۷۶)، مزیت بزرگ دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی این است که، مشتق آنها به شیوه خود تابع الگو به دست می‌آید. آنها با مشتق‌گیری مستقیم از جواب عمومی (۵-۱)، جمله‌گرایان را به دست آورده‌اند. ولی در پیتز و واتر (۱۹۸۵)، درون تغییر مشتق نسبت به زمان و پارامتر را کشف کرده و می‌توان مجموعه دیگری از دستگاه معادلات خطی که مستقیماً قابل حل اند را به دست آورد.

بنابر فصل چهارم یک زیرنویس را داخل پرانتز برای نشان دادن مشتق نسبت به پارامتر می‌نویسیم برای مثال داریم:

$$\frac{\partial \gamma(\tau)}{\partial \theta_p} = \gamma_{(p)} \quad p=1,2,\dots,P$$

اگر فقط τ به θ_p بستگی داشته باشد، مشتق $\gamma(\tau)$ نسبت به θ_p را می‌توان مستقیماً از (۵-۱۰) با کاربرد قاعده زنجیری به دست آورده. داریم:

$$\gamma_{(p)}(\tau) = \tau_{(p)} [A\gamma(\tau) + \mathbf{1}] \quad (۵-۱۲)$$

اگر A و γ_0 یا $\mathbf{1}$ ولی نه τ به θ_p وابسته باشند. مشتق $\gamma_0(\tau)$ با مشتق‌گیری (۵-۱۰) نسبت به θ_p به شرح زیر به دست می‌آید.

$$\dot{\gamma}_{(p)}(\tau) = A\gamma_{(p)}(\tau) + A_{(p)}\gamma(\tau) + \mathbf{1}_{(p)}$$

این یک دستگاه خطی جدیدی از معادلات دیفرانسیل با تابع $A_{(p)}\gamma(\tau) + \mathbf{1}_{(p)}$ است. حل آن به شرح زیر است.

$$\begin{aligned} \gamma_{(p)}(\tau) &= e^{A\tau} \gamma_{(p)}(0) + e^{A\tau} * [A_{(p)}\gamma(\tau) + \mathbf{1}_{(p)}] \\ &= e^{A\tau} \gamma_{(p)}(0) + e^{A\tau} * \mathbf{1}_{(p)} + e^{A\tau} * A_{(p)} e^{A\tau} \gamma_0 + e^{A\tau} * A_{(p)} e^{A\tau} \mathbf{1} \end{aligned} \quad (۵-۱۳)$$

برای به دست آوردن بسطی عمومی برای θ_p که τ ، A ، γ_0 و $\mathbf{1}$ قابل محاسبه باشند، روابط (۵-۱۳) و (۵-۱۲) را ترکیب نموده و به صورت زیر می‌نویسیم.

$$\gamma_{(p)}(\tau) = e^{A\tau} \gamma_{(p)}(0) + e^{A\tau} * [A_{(p)}\gamma(\tau) + \mathbf{1}_{(p)}] + \mathbf{1}_{(p)} [A\gamma(\tau) + \mathbf{1}] \quad (۵-۱۴)$$

این رابطه برای هر دو حالت ورودی لحظه‌ای و مرحله‌ای صادق است.

به سادگی می‌توان $A_{(p)}$ و $\gamma_{(p)}(0) = \partial \gamma_0 / \partial \theta_p$ و $\mathbf{1}_{(p)}$ و $\tau_{(p)}$ را به دست آورد. زیرا معمولاً اعضای مشتق

اعداد ۱-، ۱+ یا صفراند.

توجه شود که روشن قابل تعمیم به مشتق مراتب بالاتر نیز هست. به ویژه مشتق نسبت به θ_p و θ_q به شرح زیر است:

$$\gamma_{(pq)}(\tau) = e^{A\tau} * (A_{(p)}\gamma_{(q)}(\tau)) + e^{A\tau} * (A_{(q)}\gamma_{(p)}(\tau)) \quad (۱۵-۵)$$

در نتیجه اعضای $A_{(pq)}$ ، $\gamma_{(pq)}(0)$ ، $\tau_{(pq)}$ و $\tau_{(pq)}$ همگی صفرند.

مثال: تتراسیکلین

برای داده‌های تتراسیکلین با زمان تأخیر، داریم: $\tau = (t - \theta_4)_+$ و $\gamma_0 = (\theta_3, 0)^T$ بنابراین:

$$A = \begin{bmatrix} -\theta_1 & 0 \\ \theta_1 & -\theta_2 \end{bmatrix}$$

$$A_{(1)} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad A_{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad A_{(3)} = A_{(4)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\gamma_{(1)}(0) = \gamma_{(2)}(0) = \gamma_{(4)}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \gamma_{(3)}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\tau_{(1)} = \tau_{(2)} = \tau_{(3)} = 0, \quad \tau_{(4)} = \begin{cases} -1 & \tau \geq 0 \\ 0 & \tau < 0 \end{cases}$$

و تمام مشتقات دوم این کمیت‌ها صفراند.

تابع $p = 1, \dots, P$ ، $\gamma_{(p)}(\tau)$ را توابع حساسیت دستگاه (کاراکوتویس و استوارت، ۱۹۸۵) می‌نامند و به کمک (۱۴-۵) و نتایج پیوست شماره ۵ به ازاء هر τ و θ قابل محاسبه است. شبه برنامه‌ای برای برازش الگوهای حجره‌ای در پیوست شماره ۳ ارائه شده است.

۵-۳- ملاحظات عملی

در این بخش چند ملاحظه عملی را که به برازش الگوهای حجره بستگی دارد، بیان می‌کنیم.

۵-۳-۱- تبدیلات پارامتر

یک خاصیت الگوهای حجره‌ای این است، که باید نرخهای ثابت، غلظت‌های اولیه و نرخهای تریق مثبت باشند. بنابر بحث بخش (۴-۳)، یک راه مؤثر برای مطمئن شدن در مثبت بودن مقادیر، کاربرد لگاریتم

پارامترها در الگوهاست. همچنین این عمل به سادگی، امکان فراهم کردن فاصله‌های استنباط تقریبی را برای بعضی از کمیت‌های مشتق فراهم می‌کند.

برای مثال، نیمه عمر $t_{1/2}$ ، که شامل نرخ ثابت θ است، برابر است با $t_{1/2} \approx 0.693/\theta$ در نتیجه،
 $\ln t_{1/2} = \ln \ln 2 - \ln \theta \approx -0.367 - \ln \theta$ داریم.

و پهنای فاصله استنباط تقریب خطی برای $t_{1/2}$ مساوی پهنای فاصله برای $\ln \theta$ است.

یکی دیگر از کمیت‌های مورد علاقه در داروسازی مطالعه حجم توزیع در یک حجره است. با تزریق یکباره، دارویی به نام D در حجره نخستین معلوم است. ولی غلظت γ_0 باید برآورد شود. رابطه مورد استفاده $\gamma_0 = \frac{D}{V_i}$ است که V_i حجم توزیع برای حجره تزریق است. مجدداً لگاریتم γ_0 و V_i به صورت خطی با هم مرتبط‌اند. $\ln V_i = \ln D - \ln \gamma_0$ و فاصله‌های اطمینان تقریب خطی روی لگاریتم‌ها دارای همان پهنای هستند.

سومین کمیت مورد علاقه داروسازان، مساحت زیر منحنی (AUC) است. برای بعضی از الگوهای حجره‌ای ساده، این خواسته معادل غلظت نخستین در حجره تزریق به نام $\gamma_1(0)$ است، که بر نرخ حذف θ_1 تقسیم می‌شود. به عبارت معادل $AUC = \frac{\gamma_1(0)}{\theta_1}$ دوباره $\ln AUC$ رابطه خطی با $\ln \gamma_1(0)$ و $\ln \theta_1$ دارد، لذا، فاصله‌های اطمینان تقریب خطی برای $\ln AUC$ قابل محاسبه است.

در شیمی سینتیک، گاهی داده‌ها تحت شرایط مختلف آزمایش جمع‌آوری می‌شوند و تحلیل‌گر مایل به ترکیب آنها به منظور برازش الگویی کلی است. این مطلب در بخش (۳-۱۱) و (۵-۵) بحث شد. در این حالات، اغلب فرض می‌شود که نرخهای ثابت بستگی به دمای مطلق T براساس رابطه آرنیوس ($\theta \propto e^{-k/T}$)، ضرب در فشار P_i دارد. که بصورت نما ظاهر می‌شود، برای این الگوها، لگاریتم نرخ ثابت تابعی خطی از $\frac{1}{T}$ و $\ln p_i$ است، که یک اساس دیگری را در کاربرد لگاریتم فراهم می‌کند.

یکی از خواص ظاهری کاربرد لگاریتم این است که، نمی‌توان بازه‌های استنباط تقریب خطی را برای نشان دادن این که یک پارامتر می‌تواند صفر باشد به کار برد. زیرا، آنها هیچ‌گاه شامل نقاط متناظر با صفر نیستند. هرچند که می‌توان پارامتر مربوط به لگاریتمی که به سمت یک عدد بزرگ منفی میل کند را صفر در نظر گرفت. در نتیجه، با کاربرد روش نما ماتریسی به راحتی می‌توان مسیر یا جمله مربوط را در الگوی حجره‌ای حذف، سپس الگوی باقی‌مانده را با الگوی اصلی توسط تحلیل مجموع مربعات اضافی مقایسه نمود. علاوه بر این، بنابر بحث (۱۰-۳)، آزمون مجموع مربعات اضافی نسبت به آزمون t تقریبی برای رگرسیون غیر خطی مناسبتر است.

۵-۳-۲- شناسایی

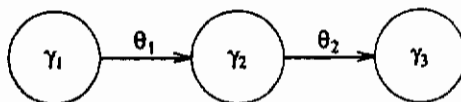
یک مشکل موجود در برآزش الگوهای حجره‌ای در حالت یک پاسخی، بوجود آمدن پارامترهای قابل تعویض است. چون مجموعه‌های جدائی از پارامترها می‌توانند پاسخهای یکسانی را پیش‌بینی کنند، لذا، می‌تواند مشکلاتی را در برآورد به وجود آورند. این مطلب در بخش (۳-۴-۱) تذکر داده شد. پارامترهای چنین الگویی را شناخت پذیر موضعی می‌نامند، که در مقابل شناخت پذیر کلی (منحصربه‌فرد) است (گودفری، ۱۹۸۳). برای مثال در دستگاه شکل (۵-۶) با $\gamma_0 = (1, 0, 0)^T$ منحنی $\gamma_3(t)$ مشابهی برای دو زوج (a, b) و (b, a) به دست می‌آید. بنابراین، هنگامی که فقط حجره سوم اندازه‌گیری شود، پارامترهای θ_1 و θ_2 قابل تعویض اند. یک مشکل بسیار بد، الگوهای شناخت ناپذیر است، که در آنها مجموعه‌های پیوسته‌ای از پارامترها، پیش‌بینی‌های یکسانی را ایجاد می‌کنند. برای مثال، دستگاه شکل (۵-۷) تولید منحنی $\gamma_1(t)$ یکسانی را برای مجموعه پارامترهایی با شرایط زیر می‌کند:

$$\theta_1 + \theta_2 = a$$

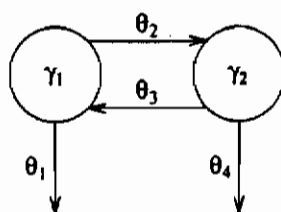
$$\theta_3 + \theta_4 = b$$

$$\theta_1\theta_3 + \theta_1\theta_4 + \theta_2\theta_4 = c$$

چون زیرفضاهای پیوسته از فضای پارامتر، پیش‌بینی‌های یکسانی را ارائه می‌کنند. لذا، در این دستگاه به شرط مشاهده فقط γ_1 ، برآورد یکتایی از پارامتر وجود ندارد. هر چند اگر θ_1 یا θ_4 صفر باشند، دستگاه شناخت پذیر است.



نمودار ۵-۶- دستگاهی که فقط با مشاهده γ_3 قابل تعویض است.



نمودار ۵-۷- دستگاهی که با مشاهده فقط γ_1 شناخت ناپذیر است.

یک راه آسان برای بازرسی شناخت موضعی یک الگوی حجره‌ای با فقط یک پاسخ مشاهده‌ای، این است که مجموعه‌ای از زمانهای طرح را ثابت نگه داشت و ماتریس مشتقات پارامتر را در تعدادی از مقادیر مختلف پارامتر، تولید کرد. اگر همه ماتریسها محاسبه منفرد باشند، الگو را می‌توان شناخت ناپذیر در نظر گرفت. توجه شود که باید چندین مقادیر پارامتر را به کاربرد، زیرا یک ماتریس مشتق خاص می‌تواند محاسبه نسبت به انتخاب مقادیر به پارامتر، منفرد باشد.

پیچیدگی الگوهای حجره‌ای در حالت مشاهده فقط یک حجره، حرکت‌هایی را در آزمایشات چند پاسخی ایجاد کرده است. اطلاعات اضافی نه تنها برآوردهای بهتری از پارامتر را فراهم می‌کند، بلکه اجازه توصیف بهتر میان الگوهای رقیب را می‌دهد.

۵-۳-۳- مقادیر آغازین

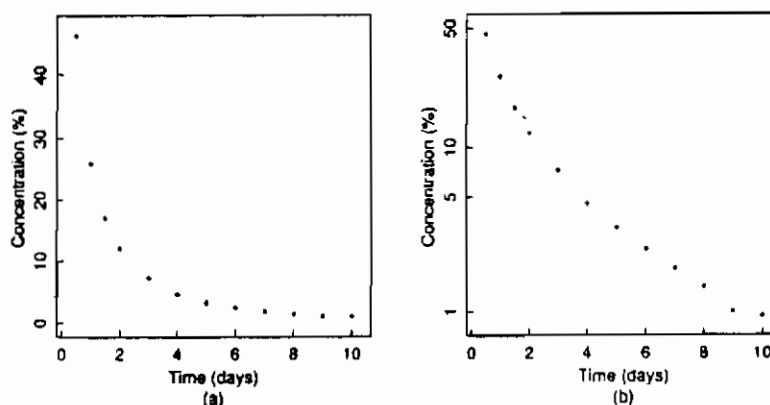
بدست آوردن مقادیر آغازین برای الگوهای حجره‌ای در حالت یک پاسخی می‌تواند مشکل باشد. خلاصی کردن (بخش ۳-۳ را ببینید) می‌تواند مفید واقع شود. ولی یک روش جانشینی، استفاده کردن از یک الگوی ساده است به گونه‌ای که یک الگوی یک - حجره‌ای را به کاربرده و سپس آن را توسعه داد. ترسیم داده‌های می‌تواند برای برآورد اولیه غلظت و ثابت نرخ تکی مفید باشد. رسم باقی مانده‌ها نیز می‌تواند چگونگی گسترش الگو را آشکار سازد. برآوردهای پارامتری در الگوی یک - حجره‌ای می‌تواند برای برآورد ثابت نرخ در الگوی جدید به کار رود. الگو برحسب نیاز گسترش می‌یابد. به تدریج حجره‌ها و مسیرها اضافه شده و با کاربرد برآوردهای پارامتری از الگوی جاری، برآوردهای آغازین برای الگوی بعدی فراهم می‌شود.

۵-۴- مثال عملی - لیپوروتین

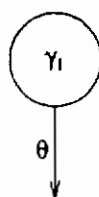
خصوصیت خوبی که الگوهای حجره را می‌توان با کاربرد روش نما ماتریسی برازش داده تحلیلگر را قادر می‌سازد که الگوهای مختلفی را روی یک مجموعه داده‌ها امتحان کند. لذا، می‌تواند در توسعه الگوهای بسیار مؤثر، مفید باشد. برای نمایش این فرآیند، داده‌های لیپوروتین جدول (۱-۲۳) از اندرسن (۱۹۸۳) که در پیوست شماره ۱، بخش (۱۶-۴۱) دوباره تولید شده، را در نظر گرفته‌ایم. پاسخ تکی، درصد غلظت ردیاب در سرم یک بابون است که یک تزریق یکجا در زمان صفر به آن خورانده شده است. فرض می‌کنیم غلظت اولیه در حجره ۱ برابر ۱۰۰٪ و در سایر حجره‌ها صفر باشد.

۵-۴-۱- تحلیل‌های اولیه

داده‌ها در شکل (۵-۸) رسم شده‌اند. دیده می‌شود که غلظت بر حسب زمان کاهش می‌یابد و نشانگر کم شدن از سرم حجره است. در یک رسم نیمه لگاریتمی از غلظت در مقابل زمان، حداقل وجود دو حجره مشخص می‌شود. ولی برای توسعه الگو، الگوی حذفی یک - حجره‌ای را برازش می‌دهیم، که در نمودار (۵-۹) نشان داده شده است.



نمودار ۵-۸- رسم غلظت لیپوپروتئینی در مقابل زمان در مقیاس خطی (a) و در مقیاس نیمه لگاریتمی (b).



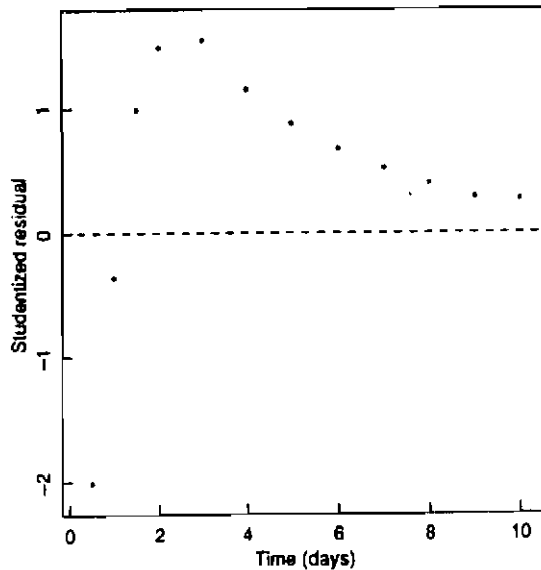
نمودار ۵-۹- الگوی حذفی یک - حجره‌ای

۵-۴-۲- یک حجره‌ای

با توجه به نمودار دیده می‌شود که غلظت به مدت نیم روز به ۴۶٪ می‌رسد، بنابراین مقدار آغازین برای نرخ ثابت به صورت $\frac{-\ln 0.46}{0.5} \approx 1.55$ است. که همگرا به $\theta = 1.31$ با مجموع مربعات باقی‌مانده ۱۳۳ با ۱۱ درجه آزادی است.

۵-۴-۳- دو حجره‌ای

در نمودار (۱۰-۵) رسم باقی مانده‌ها در مقابل زمان، یک الگوی قابل توجهی را نشان می‌دهد. به این ترتیب که، الگو در ابتدا غلظت را برآورد نقصانی، سپس برآورد اضافی می‌کند.



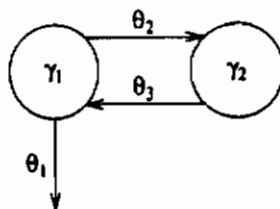
نمودار ۱۰-۵- باقیمانده‌های حاصل از الگوی یک - پارامتری برازشی بر داده‌های لیپروپروتئینی.

این الگو سازگار با حضور حجره‌ای دیگر با دستگاه نموداری، مانند (نمودار (۱۱-۵) است.

باقی مانده ۱/۲۶ و درجه آزادی ۹، ارائه می‌کند.

احتمالاً با θ_2 و θ_3 مساوی به سادگی می‌توان ابتدا الگوی دو پارامتری را برازش داد و سپس برآوردها را به عنوان مقادیر آغازین برای الگوی سه پارامتری به کار برد.

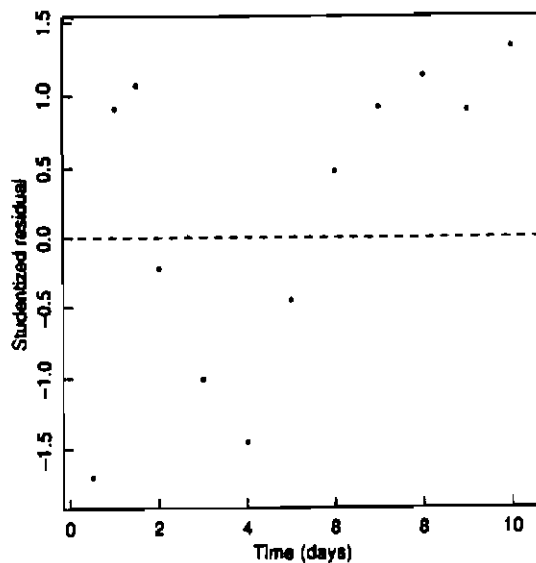
برای به دست آوردن برآوردهای آغازین در الگوی دو پارامتری، $\theta_1 + \theta_2 = 1/31$ را از الگوی برازش یک - حجره‌ای در نظر بگیرید و $\theta^0 = (1/0, 0/3)^T$ را آزمایش کنید. همگرایی در $\hat{\theta} = (0/992, 0/663)^T$ با مجموع مربعات اضافی ۲/۶۵ با ۱۰ درجه آزادی حاصل می‌شود. با فرض مخالف بودن θ_2 و θ_3 برآوردهای آغازین $\theta^0 = (0/99, 0/67, 0/65)^T$ را بکار برده، که $\hat{\theta} = (1/022, 0/662, 0/820)^T$ را با مجموع مربعات اضافی ۱/۲۶ با ۹ درجه آزادی نتیجه می‌دهد.



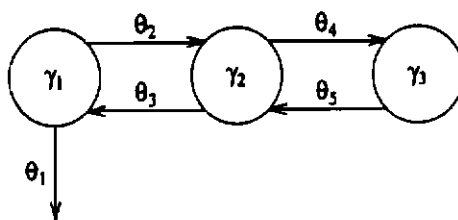
نمودار ۱۱-۵- یک الگوی باز ۲-حجری

۵-۴-۴- سه حجری

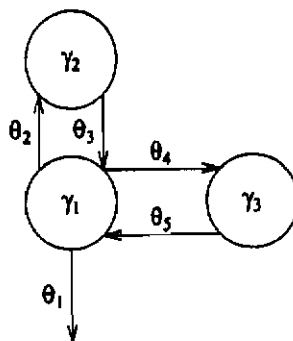
باقی مانده‌های الگوی سه حجری در نمودار (۱۲-۵) رسم شده است. هنوز نشان دهنده این است که باید الگو توسعه یابد. می‌توان آن را به چند طریق گسترش داد. اگر آزمایشگر نامطمئن باشد که چگونه باید غلظت‌ها را نرمال کرد تا $\gamma_1(0) \approx 100$ را تولید کند، می‌توان پارامتری را برای نمایش مقدار آغازین معرفی کرد یا یک زمان تأخیر را در الگو وارد ساخت یا (بیشترین حالتی که در این نوع به نظر می‌رسد) می‌توان پارامتر دیگری را معرفی کرد. حتی در زمانی که پارامتر سومی را معرفی می‌کنیم، باید تصمیم درچگونگی انجام آن را اتخاذ نماییم. ساده‌ترین بسطها، دستگاه زنجیره‌ای (حجره‌ها مشابه زنجیر بهم وصل شده‌اند) و مادری (هرحجره دختر فقط با حجره مادر در ارتباط است) است. یک دستگاه زنجیره‌ای در نمودار (۱۳-۵) و مادری در نمودار (۱۴-۵) نشان داده شده است.



نمودار ۱۲-۵. باقی مانده‌های حاصل از یک الگوی دو حجره‌ای، برازشی بر داده‌های لپو پروتئین.



نمودار ۱۳-۵. یک الگوی زنجیره‌ای سه حجره‌ای.

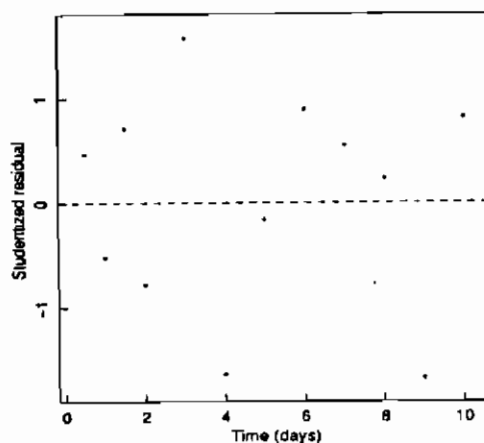


نمودار ۱۴-۵. یک الگوی مادری سه حجره‌ای

برای برازش این دستگاه‌ها، باید ۵، ۴ یا ۳ پارامتر را با فرض مساوی بودن سایر پارامترها به کار برد. ما الگوی پنج پارامتری را انتخاب می‌کنیم.

برای الگوی مادری، دو پارامتر را با مقادیر کوچکتر و جدا از برآوردهای پارامتری جاری - برای برآوردهای آغازین - اضافه می‌کنیم. داریم: $\theta^0 = (1/100, 0/66, 0/82, 0/5, 0/2)^T$ که به $\hat{\theta} = (0/990, 0/762, 1/015, 0/240, 0/352)^T$ با مجموع مربعات اضافی ۰/۰۶۳ و ۷ درجه آزادی همگراست.

با کاربرد مقادیر آغازین یکسانی، الگوی مساوی مادری به $\hat{\theta} = (0/990, 0/532, 1/340, 0/231, 1/267)^T$ با مجموع مربعات اضافی مشابهی همگراست. باقی‌مانده‌ها (در هر دو الگو) و رفتار خوب آنها در نمودار (۱۵-۵) نشان داده شده است.



نمودار ۱۵-۵. باقی‌مانده‌های الگوی حجره‌ای برآزش بر داده‌های لپرونتین.

این که باقی‌مانده‌ها و مجموع مربعات هر دو الگو یکسانند، اتفاقی نیست. چون اگر در حجره ۱ فقط یک اندازه‌گیری داشته باشیم، این دو هم ارزاند. لذا برای این مجموعه داده، الگو شناخت‌پذیر نیست. با در نظر گرفتن ϕ برای الگوی زنجیره‌ای و θ برای الگوی مادری، هم ارزی به صورت زیر است.

$$\phi_1 = \theta_1$$

$$\phi_2 = \theta_2 + \theta_4$$

$$\phi_3 + \phi_4 + \phi_5 = \theta_3 + \theta_5$$

$$\phi_3 \phi_5 = \theta_3 \theta_5$$

$$\phi_2 \phi_4 + \phi_2 \phi_5 = \theta_2 \theta_5 + \theta_3 \theta_4$$

۵-۴-۵- سه حجره‌ای با پارامترهای مشترک

مجموع مربعات اضافی ناشی از تعمیم الگو از دو به سه پارامتر به طور بالایی معنی دارد است (یک نسبت مجموع مربعات اضافی ۹۷ با $F(۲ و ۷)$ توزیع فیشر قابل مقایسه است).

حال به کمک مساوی قرار دادن بعضی از پارامترها الگو را ساده تر می‌کنیم. با مقادیری از الگوی پنج پارامتری برازشی با کاربرد زوج نرخهای ثابت با کمترین اختلاف نسبت به خطای استاندارد اختلاف، شروع می‌کنیم. به طوری که برای هر دو الگو θ_4 و θ_5 را مساوی قرار می‌دهیم. برای الگوی زنجیره‌ای به $\hat{\theta} = (۰/۹۶۷, ۰/۷۷۸, ۰/۹۴۸, ۰/۲۲۴)^T$ با مجموع مربعات اضافی ۰/۰۶۲ همگرا می‌شویم. در الگوی مادری به $\hat{\theta} = (۰/۹۷۸, ۰/۵۵۸, ۱/۲۷, ۰/۲۱۳)^T$ با مجموع مربعات اضافی ۰/۰۵۰ همگرا می‌شویم. برآوردهای پارامتر و خطاهای استاندارد تقریبی قویاً نشان می‌دهد که هیچ کدام از سایر پارامترها مساوی نیستند. بنابراین نمی‌توان الگو را بیش از این کاهش داد.

ترسیمات نرمال و باقی مانده‌ها در مقابل زمان و پاسخ برازشی (نشان داده نشده است) عدم کفایت الگوهای چهار پارامتری را نشان نمی‌دهد. بحث به کارگیری این الگو باید بر اساس تحلیل مجموع مربعات اضافی و هدف آزمایشگر در انتخاب الگوی بهتر انجام پذیرد. تحلیل‌های مجموع مربعات اضافی برای الگوهای تودرتو در جدول (۴-۵) ارائه شده است.

Source	Sum of Squares (10^{-6})	Degrees of Freedom	Mean Square (10^{-7})	F Ratio	p Value
Extra	1.857	1	18.57	3.0	0.13
Model 3	4.339	7	6.20		
Model 1	6.196	8		1.1	0.33
Extra	0.682	1	6.82		
Model 3	4.339	7	6.20		
Model 2	5.021	8			

جدول ۴-۵- تحلیل مجموع مربعات اضافی برای الگوهای حجره‌ای برازشی بر داده‌های لیپوپروئینی برای الگوی چهار پارامتری. یک الگوی سه حجره‌ای زنجیره‌ای (الگوی ۱) و الگوی (۳) حجره‌ای مادری (الگوی ۲) است. هر دو با دو نرخ ثابت معادلند. الگوی ۳ الگوی پنج پارامتری ۳ حجره‌ای است.

۵-۴-۶- نتیجه‌گیری

نتیجه این تحلیل این است که داده‌ها می‌توانند توسط برازش الگویی سه حجره‌ای زنجیره‌ای یا مادری

پیکربندی می‌شوند. برای پنج ثابت نرخ، دو الگو یکسانند. برای چهار ثابت نرخ، الگوی مادری کمی بهتر به نظر می‌رسد. این که ثابت‌های نرخ از نظر فیزیکی حساس‌اند باید توسط آزمایشگر بر مبنای نظریه یا نتایج آزمایشی دیگری بررسی شود.

۵-۵-۵- روغن کشی - (یک مثال عملی)

به عنوانی مثالی از برآورد پارامترهای چند پاسخی و به کارگیری الگوهای حجره‌ای، به داده‌های روغن کشی که توسط هوپارد و رایینسون (۱۹۵۰) به دست آمده، مراجعه می‌کنیم. این مثال عملی نشان دهنده به کارگیری فرایند پارامترها در پارامترهای الگوی سینتیک است (بخش ۳-۱۱ را ببینید).

۵-۵-۱- تحلیل اولیه

در نمودار (۱۶-۵) دو پاسخ اندازه‌گیری شده روغن و قیر معدنی را در مقابل زمان برای ۶ درجه حرارت رسم کرده‌ایم. چیزی که از این ترسیم قابل توجه می‌باشد این است که، تجزیه کروژن با افزایش دما سرعت بیشتری را به خود می‌گیرد. در دمای 673 K ، بخشی مهمی از قیر بعد از صد دقیقه وجود دارد. ولی در 773 ، فقط بخش کوچکی بعد از صد دقیقه باقی می‌ماند. این قویاً نشان می‌دهد که ثابت‌های نرخ به دما بستگی دارند. یک صورت عمومی از ثابت نرخ وابسته به دمای رابطه آرنیوس به شرح زیر است:

$$k_i(T) = k_{i,0} e^{-E_i/RT} \quad (16-5)$$

که در آن $k_i(T)$ نرخ ثابت در دمای T ، $k_{i,0}$ پیش ضرب جمله نمایی، E_i مبین انرژی فعال برای واکنش، R ثابت جهانی گاز، برابر $1.987 \text{ cal/g} \cdot \text{mole} \cdot \text{K}$ و T دما به کلوین است.

معمولاً، برآوردهایی با همبستگی بالا رخ می‌دهد. زیرا، دامنه دماهای مشاهده‌ای نسبت به معدل دما کوچک است. برای کاهش همبستگی، دما را توسط مقدار میانه T_0 مرکزی می‌کنیم، که در بخش (۳-۴-۲) بحث شده است.

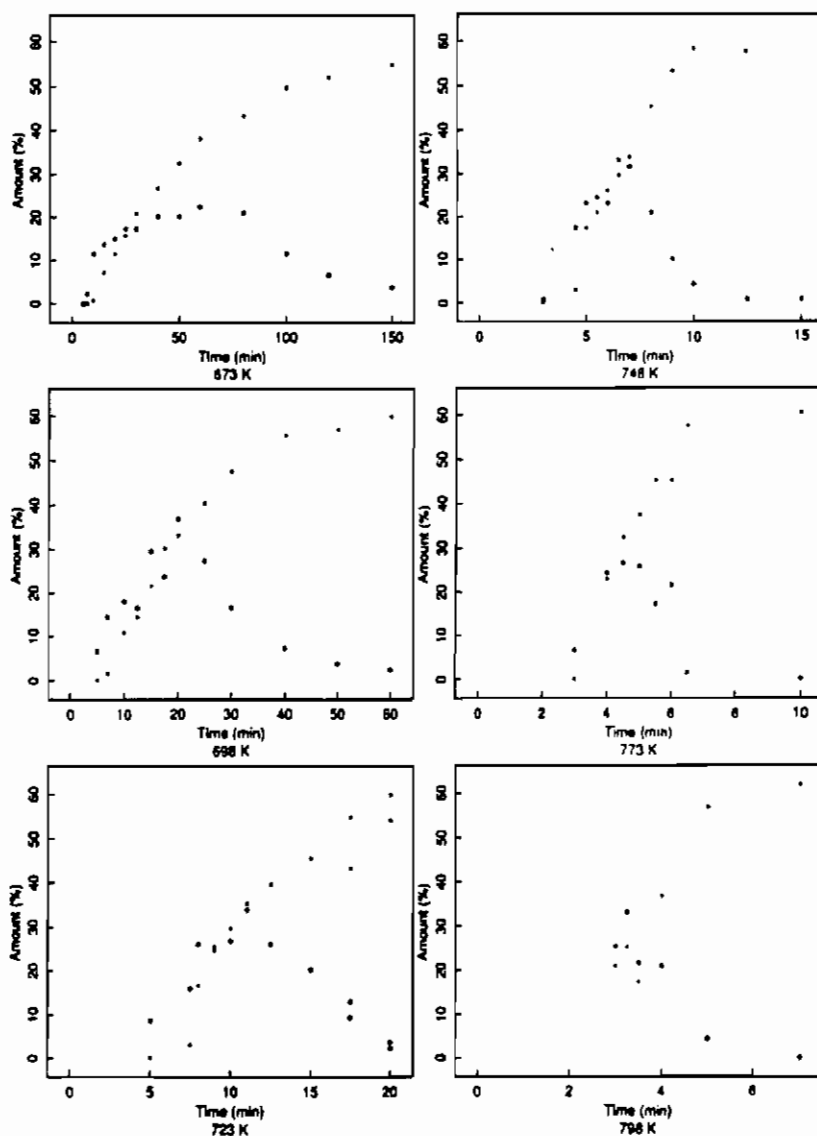
(۱۶-۵) را به صورت زیر می‌نویسیم.

$$k_i(T) = k_i(T_0) \exp \left[-\frac{E_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right]$$

$$\ln k_i(T) = \ln k_i(T_0) - \frac{E_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \quad \text{بنابراین داریم:} \quad (17-5)$$

$$= \phi_i - \frac{E_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right)$$

لذا، لگاریتم ثابت نرخ، وابستگی خطی به معکوس دما دارد.



نمودار ۵-۱۶. رسم روغن (●) و غیر معدنی (#) در مقابل زمان برای ۶ مادر برای داده‌های روغن کشی پیرولیز.

۵-۵-۲- مقادیر آغازین برای داده‌های 673 K

برای محاسبه مقادیر اولیه برای پارامترهای فرآیندها، ابتدا الگوی سینماتیک را بر داده در هر دمای مجزا برازش می‌دهیم. به عبارت دیگر باید برآوردهای آغازین را برای پارامترهای سینماتیک بدست آوریم. این عمل با تعدیل روش نرخ تقریبی توصیف شده در بخش (۴-۳-۱) انجام پذیراست.

برای این مجموعه داده‌ها، فقط در هر زمان روغن و قیر اندازه‌گیری شده است. درصد کروژن اندازه‌گیری نشده، لذا نمی‌توان آن را از تعادل جرمی استنباط کرد. زیرا محصولات فرعی دیگری مانند: زغال و گاز نیز اندازه‌گیری نشده‌اند. هر چند می‌دانیم که در زمان صفر درصد کروژن ۱۰۰٪ و سهم سایرین ۵٪ است، با جاگذاری این مقادیر در الگو داریم:

$$\frac{d\gamma_1}{dt} = -(\theta_1 + \theta_4)\gamma_1$$

$$\frac{d\gamma_2}{dt} = \theta_1\gamma_1 - (\theta_2 + \theta_3)\gamma_2$$

$$\frac{d\gamma_3}{dt} = \theta_4\gamma_1 + \theta_2\gamma_2$$

که در زمان صفر نتایج زیر به دست می‌آید:

$$\frac{d\gamma_2(0)}{dt} = \theta_1\gamma_1(0)$$

$$= 100\theta_1$$

و

$$\frac{d\gamma_3(0)}{dt} = 100\theta_4$$

و می‌توان نرخهای تقریبی را از مقادیر جدید γ_2 و γ_3 برای برآوردهای آغازین θ_1^0 و θ_4^0 به دست آورد. با توجه به موارد اخیر، درصد کروژن به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\gamma_1(t) = 100 e^{-(\theta_1^0 + \theta_4^0)t}$$

با کاربرد روش نرخ تقریبی بخش (۴-۳-۱) می‌توان مقادیر آغازین θ_2^0 و θ_3^0 را به دست آورد.

رسم داده‌های 673 K در نمودار (۵-۱۶)، وجود زمان مرده را در واکنش آشکار می‌کند. این مطلب در زایگل و گورمن (۱۹۸۰) توصیف شده است. حال ابتدا دو مشاهده غیر صفر از γ_2 و γ_3 را برای محاسبه θ_1^0 و θ_4^0 به صورت زیر به کار می‌بریم:

$$\begin{aligned}\theta_1^0 &= \frac{1}{\gamma_1(0)} \left. \frac{d\gamma_2}{dt} \right|_0 \\ &= \frac{1}{100} \frac{11.5 - 2.2}{3} \\ &= 0.031\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\theta_4^0 &= \frac{1}{100} \frac{7.2 - 0.7}{5} \\ &= 0.013\end{aligned}$$

و

یک برآورد آغازین برای زمان مرده از روی شکل (۵-۱۶)، عدد $t_p^* = 6$ دقیقه به دست می‌آید. با کاربرد این مقادیر در روش نرخ تقریبی، برآوردهای آغازین $\theta_2^0 = 0.0131$ و $\theta_3^0 = 0.0286$ حاصل می‌شود.

۵-۵-۳- برازش داده‌های دماهای مجزا

الگوریتم تعمیم یافته گوس - نیوتن، همگرا به برآوردهای پارامتر نشان داده شده در جدول (۵-۵) با مقدار دترمینانی ۴۲۸ است.

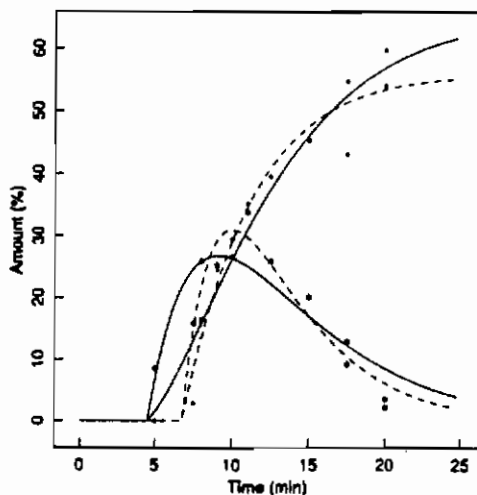
مقادیر همگرایی داده‌های $673K$ را می‌توان برای برآوردهای آغازین داده‌های $698K$ - بجز زمان مرده، که توسط جدول (۵-۶) پنج دقیقه برآورد شد - به کار برد. همگرایی به دست آمده در جدول (۵-۶) ارائه شده است. در برآوردهای آغازین برای پارامترهای سینماتیک سایر دماها، فرض می‌کنیم رابطه آرنیوس برقرار بوده و الگوهای خطی را بر لگاریتمهای ثابتهای نرخ به عنوان تابعی از عکس دما، برازش می‌دهیم. با برون‌یابی، این برازش‌های خطی را در به دست آوردن برآوردهای آغازین پارامترهای سینماتیک در دماهای بعدی به کار می‌بریم. چون با افزایش دما، زمان مرده کاهش می‌یابد، لذا، t_0 را برحسب معکوس دما رگرسیون داده و با درون‌یابی برآوردهای آغازین را به دست می‌آوریم.

Parameter	Value	Logarithm Scale						
		ln θ	Std. Error	Correlation Matrix				
θ_1	0.0172	-4.064	0.1219	1.00				
θ_2	0.00891	-4.721	0.2524	0.85	1.00			
θ_3	0.0200	-3.912	0.1117	0.30	0.64	1.00		
θ_4	0.0105	-4.557	0.0645	-0.71	-0.89	-0.36	1.00	
t_0	7.772		0.5263	-0.07	-0.34	-0.09	0.64	1.00

Parameter	Value	Logarithm Scale						
		$\ln \theta$	Std. Error	Correlation Matrix				
θ_1	0.0784	-2.546	0.1648	1.00				
θ_2	0.0473	-3.051	0.2270	0.46	1.00			
θ_3	0.0510	-2.975	0.1560	0.02	0.75	1.00		
θ_4	0.0249	-3.694	0.2290	-0.48	-0.91	-0.47	1.00	
t_0	6.247		0.5065	-0.09	-0.53	-0.17	0.76	1.00

جدول ۶-۵- خلاصه پارامتری داده‌های روغن کشی در ۶۹۸K

باید در هنگام برازش داده‌های ۷۲۳K دقت نمود. زیرا دو بهینه برای معیار دترمینانی مطابق جدول (۷-۵) وجود دارد. رسم داده‌ها و دو مجموعه از منحنی‌های برازشی در نمودار (۱۷-۵) آشکار کننده یک معاوضه است. غلظت روغن با زمان مرده ۶/۸ دقیقه بهترین برازش را دارد. بهینه با زمانهای مرده بزرگتر دارای دترمینان کوچکتری است. ولی به کمک رسم و ملاحظات داده‌های سایر دماها، پیش بینی به کمک زمانهای مرده کوچکتر بهتر است.



نمودار ۱۷-۵- رسم مقادیر روغن (●) و قیر (*) در مقابل زمان برای دماها برای داده‌های روغن کشی در ۷۲۳K منحنی‌های برازشی برای زمان مرده ۴/۵ دقیقه‌ای به صورت خط ممند و منحنی‌های برازشی برای زمان مرده ۶/۸ دقیقه‌ای به صورت خط فاصله نشان داده شده است.

برازشهای جدایی بر داده‌های باقی مانده دما انجام گرفته که در جدول (۵-۸) ثبت شده است.

Parameter	Optimum 1	Optimum 2
θ_1	0.2637	0.1596
θ_2	0.08496	0.1512
θ_3	0.1587	0.1020
θ_4	0.1248	0.02706
t_0	6.775	4.526
Determinant	28 309	53 422

جدول ۷-۵. خلاصه پارامتری داده‌های روغن کشی در ۷۲۳K دو بهینه را نشان می‌دهد.

Temperature (K)	$\ln \theta_1$	$\ln \theta_2$	$\ln \theta_3$	$\ln \theta_4$	t_0	T_{inv}
673	-4.064	-4.720	-3.912	-4.557	7.771	-0.0517
698	-2.546	-3.051	-2.975	-3.694	6.247	-0.0249
723	-1.835	-1.889	-2.283	-3.610	4.526	0.0000
748	-0.801	-1.252	-1.264	-2.082	4.082	0.0233
773	-0.447	-0.853	-0.803	-1.623	2.938	0.0450
798	0.287	-0.120	-0.297	-0.998	2.849	0.0654
Intercept:	-1.907	-2.335	-2.221	-3.056	5.146	
Slope:	35.73	37.27	31.37	31.09	-43.14	

جدول ۸-۵. خلاصه پارامتری برای داده‌های روغن کشی در تمام دماها به همراه متغیر معکوس دما و پارامترهای حاصل از یک رگرسیون خطی هر پارامتر سینماتیک در مقیاس معکوس دما.

۵-۵-۴. برآوردهای آغازین برای پارامترهای فرایندی

برای به دست آوردن برآوردهای آغازین برای پارامترهای فرایندی در رابطه آرینیوس، متغیر دمای معکوس با مقیاس منفی را به شرح زیر تعریف می‌کنیم (نسبت به دمای میانه ۷۲۳K مرکزی شده و دارای ضریب ۱۰۰۰ است تا تبدیل واحدها به $Kcal/g \cdot mole$ صورت گیرد).

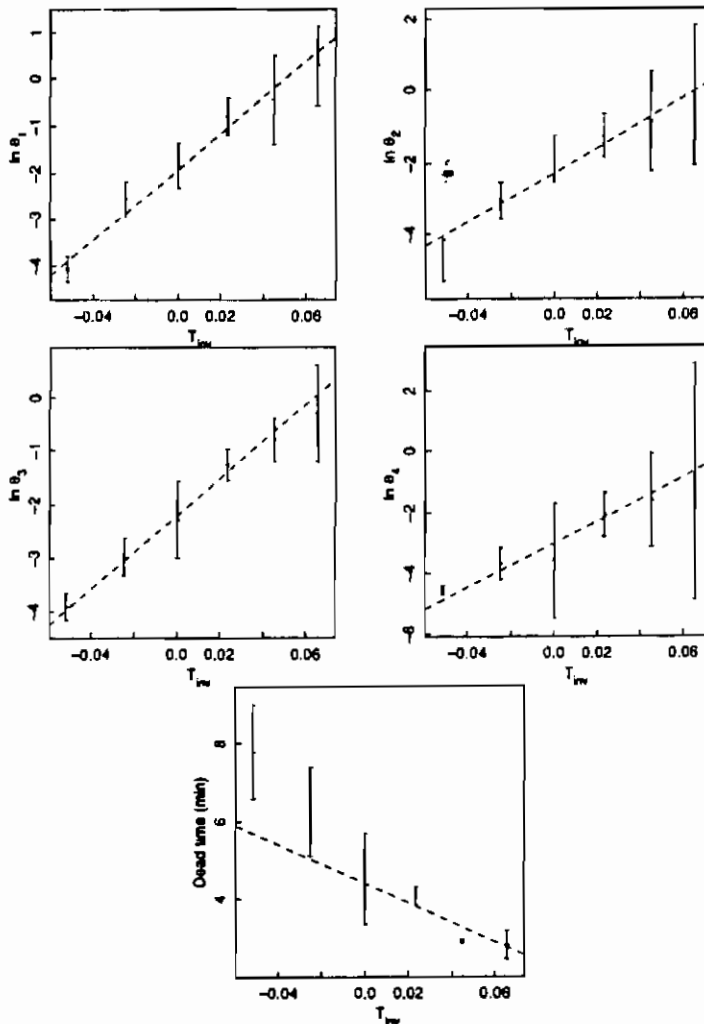
$$T_{inv} = \frac{-1000}{1/9887} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{723} \right]$$

علامت منفی برای این به کار رفته که با افزایش T ، نیز افزایش T_{inv} یابد.

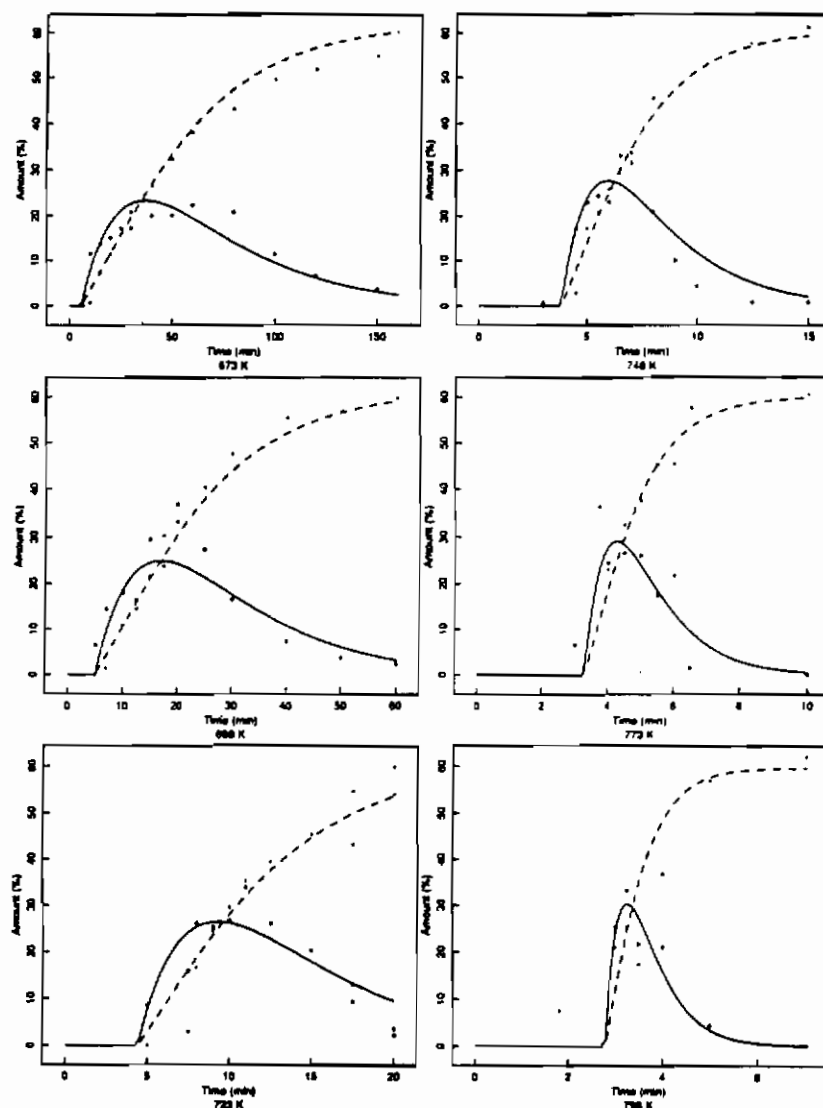
شیبها و عرض از مبدأ خطهای رگرسیون هر پارامتر سینماتیک بر حسب T_{inv} در جدول (۸-۵) به عنوان

۵-۵-۶- نتیجه‌ها

ما الگوی فرایند را بر داده‌های چند پاسخی بر دامنه از دماها برازش دادیم. پارامترهای برازشی مقادیر علت‌مندی دارند و فرضهای مربوط به جملات خطا، مهیا به نظر نمی‌رسند. چون الگوی سینتیک کمبودهای دارد. لذا، باید کوششمان را در جانشین کردن الگوی بهتری متمرکز نماییم. یک تغییر واضح در الگو، تفاوت زمانهای مرده بین روغن و قیر است که به صورت $t_0^{oil} > t_0^{bitum}$ است.



نمودار ۱۸۵- ترسیم برآوردهای پارامتر سینماتیک و الگوی برازشی آربنیوس بر داده‌های روغن کشی. برآورد پارامتر سینماتیک و بازه استنباط ۹۵٪ تقریبی آنها به صورت خط ممتد نشان داده شده است. الگوی آربنیوس به صورت خط فاصله است.



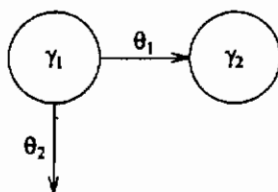
نمودار ۱۹-۵- رسم روغن (●) و قیر (*) در مقابل زمان برای ۶ دما برای داده‌های روغن کشی پیرولیز به همراه منحنی‌های برازشی، منحنی برازشی برای روغن با خط فاصله و برای قیر با خط پر نشان داده شده است.

تمرین

۱-۵ الف) برنامه‌ای رایانه‌ای به زبان دلخواه برای حل دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی بنویسید. از زیر برنامه پیوست شماره ۳ فصل (۴-۳-۴) استفاده کنید. فرض کنید ماتریس تبدیل A قطری شدنی است.

ب) زیر برنامه را برای محاسبه مشتقات توابع انتظار نسبت به پارامترهای در دو حالت ورودی لحظه‌ای و مرحله‌ای توسعه دهید.

۲-۵ الف) نشان دهید که ماتریس دستگاه A برای واکنش شیمیایی با دستگاه نموداری زیر دارای مقادیر ویژه: $(0, -(\theta_1 + \theta_2))^T$ و بردارهای ویژه زیر است:



$$U = \begin{bmatrix} \theta_1 + \theta_2 & 0 \\ -\theta_1 & 1 \end{bmatrix} \quad U^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta_1 + \theta_2} & 0 \\ \frac{\theta_1}{\theta_1 + \theta_2} & 1 \end{bmatrix}$$

ب) به کمک نتایج بند الف) نشان دهید که پاسخ در زمان t به یک غلظت اولیه ۱۰۰٪ در پاسخ ۱ و غلظت ۰٪ در پاسخ ۲ مطابق زیر است:

$$\gamma(t) = \begin{bmatrix} e^{-(\theta_1 + \theta_2)t} \\ \frac{\theta_1}{\theta_1 + \theta_2} (1 - e^{-(\theta_1 + \theta_2)t}) \end{bmatrix}$$

۳-۵ با کاربرد داده‌های پیوست ۴ بخش (۴-۴-۸) یک الگوی حججه‌ای را برازش دهید.

۴-۵ الف) به کمک نتایج مثال تراسیکلین ۵ مشتقات تابع الگو را نسبت به پارامترها به دست آورید.

ب) تحقیق کنید که مشتقات بند الف) مساوی مشتق‌گیری از حل‌های ضمنی تابعهای ارائه شده در مثال تراسیکلین ۳ است.

۵-۵ یک معیار برآورد پارامتر چند پاسخی برای برازش الگوی مثال α -پنین ۲ به داده‌های α -پنین در دمای ۲۰۴/۵ درجه داده شده در پیوست شماره ۴ بخش (۴-۴-۶) مطابق زیر پیدا کنید.

الف) روش بخش (۴-۳) را برای یافتن مقادیر آغازین به کار ببرید.

ب) یک تحلیل دترمینانی اضافی را برای تصمیم‌گیری، در ضرورت وجود مسیر از آلو-اسمین به پیرونین به کار ببرید.

فصل ششم

خلاصه نموداری نواحی استنباط غیر خطی

«چه می‌توانیم بدانیم یا چه می‌توانیم درک کنیم، درحالی‌که خطا پنجره‌های مغز را مسدود کرده‌اند».

سریاز دیویس

تاکنون فرض کرده‌ایم که تقریبهای خطی خلاصه‌های کافی از نتیجه‌های استنباطی تحلیل خطی را فراهم می‌نمایند. متأسفانه در برخی از تحلیل‌های غیر خطی، آنها به طور اسفناکی غیر کافی هستند. در این فصل، روش‌های نموداری را برای خلاصه کردن نتیجه‌های استنباط تحلیل غیر خطی را گسترش می‌دهیم. در فصل هفتم روش‌هایی برای تشخیص دقت غیر خطی بودن در شرایط یک برآورد را ارائه خواهیم داد.

۶-۱-۱ نواحی درست نمایی

۶-۱-۱-۱ نواحی درست نمایی پارامترهای توأم

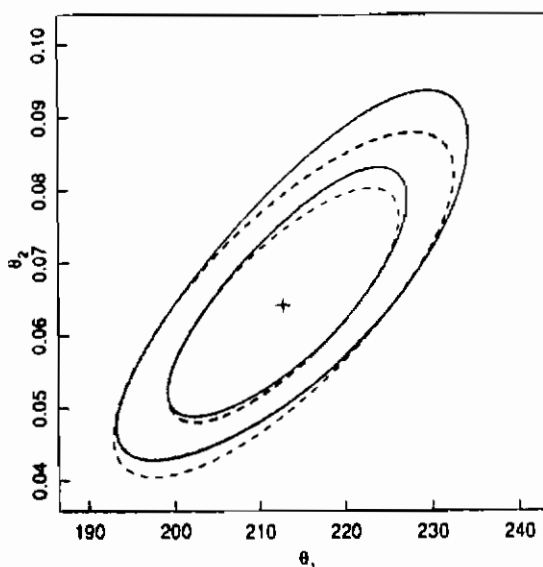
فرض نرمال کروی برای خطای Z در الگوی (۲-۲) نشان می‌دهد، که استنباط آماری حاصل از دیدگاه درست نمایی به خوبی با هندسه روی انتظار فضای پاسخ عجین است. برای الگوهای خطی و غیرخطی، با فرض نرمال کروی، یک منحنی تراز درست نمایی شامل همه مقادیر θ است، که در آن $\eta(\theta)$ فاصله ثابتی از y است. یعنی همه θ هایی که $S(\theta)$ برای آنها مقدار ثابتی است. برای تشکیل یک سطح اطمینان برای یک

منحنی تراز مشابه، الگوی خطی (۳۹-۱) ناحیه درست نمای اسمی توأم $1-\alpha$ را برای همه مقادیر θ به شرح زیر فرض می‌کنیم.

$$S(\theta) \leq S(\hat{\theta}) \left[1 + \frac{P}{N-P} F(P, N-P, \alpha) \right] \quad (1-6)$$

مشابه الگوی خطی، ناحیه بالا، اشتراک رویه انتظار با کره‌ای به مرکز γ است. با این تفاوت که، رویه مسطح نیست و روش ساده‌ای برای تصویر کردن نقاط فضای پارامتر روی رویه انتظار وجود ندارد. حتی، اگر بتوانیم این نقاط را در اشتراک بالا به دست آوریم.

در حالت $P=2$ ، می‌توانیم یک منحنی تراز درست نمایی را در θ به روش‌های منحنی‌های تراز استاندارد محاسبه کنیم. یعنی: با ارزیابی $S(\theta)$ در شبکه‌ای از مقادیر θ و تقریب کردن منحنی تراز به کمک پاره خط.



نمودار ۱-۶- منحنی‌های تراز درست نمایی اسمی ۸۰ و ۹۵ درصدی برای پارامترهای پرومیسین. خط فاصله بیضی‌های تقریب خطی هستند و برآورد کمترین مربعات با + نشان داده شده است.

مثال : پرومیسین ۱۳

نمودار (۱-۶)، منحنی‌های درست نمایی اسمی ۸۰ و ۹۵ درصدی را برای پارامترهای پرومیسین نشان می‌دهد. منحنی‌ها به تقریب بیضوی و هم مرکزاند و برآورد کمترین مربعات $\hat{\theta}$ به خوبی با ناحیه، هم مرکز

شده است. بیضی‌های تقریب خطی به صورت خط - فاصله نشان داده شده‌اند. که مبین نواحی تقریب کاملاً خوبی است.

مثال ۲: BOD

نمودار ۲-۶، منحنی‌های درست نمائی اسمی ۸۰ و ۹۵ درصدی را برای پارامترهای BOD به همراه بیضی‌های تقریب خطی نشان می‌دهد. این منحنی‌ها به طور کلی بیضوی نیستند. در حقیقت بیشتر شبیه هذلولی‌اند که در جهت مثبت θ_2 بطرف ∞ کشیده شده‌اند. بیضی‌های تقریب خطی به طور کامل ناکافی‌اند. علت ایجاد منحنی‌های هذلولی مانند با نگرش به داده‌ها و رفتار تابع الگو $f = \theta_1(1 - e^{-\theta_2 x})$ ، قابل توجه است. بنابه نمودار (۳-۶)، که شامل رسم داده‌ها و تابع الگوی برآوردی است. دیده می‌شود که، داده‌ها خیلی پراکنده بوده و در نتیجه برازش الگو خوب انجام نمی‌گیرد.

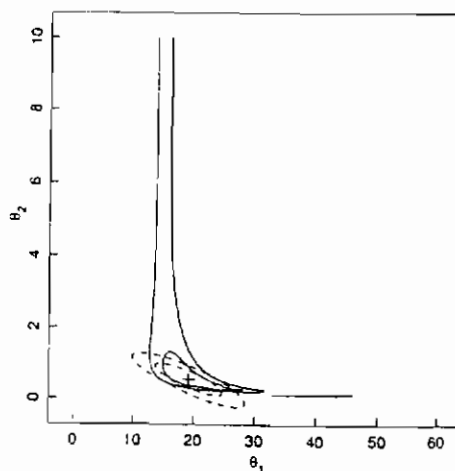
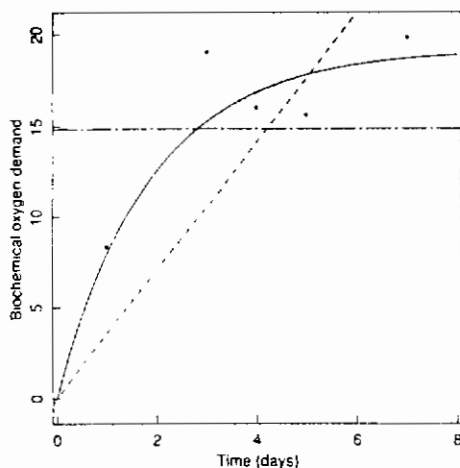
با تحلیل الگوی تابع در حالت $\theta_2 \rightarrow \infty$ ، الگو به $f = \theta_1$ کاهش پیدا می‌کند و نسبت به تغییرات θ_2 غیر حساس می‌شود. برای مقادیر بزرگ θ_2 برآورد حاشیه‌ای θ_1 ، برابر \bar{y} است. با قراردادن $(\bar{y}, \infty) = \theta$ (که متناظر با برازش خط افقی بر داده‌ها مطابق نمودار (۳-۶) است.) مجموع مربعات $107/2$ را تولید می‌کند. چون داده‌ها خیلی مغشوش‌اند، این برازش به طور معنی داری بدتر از بهترین برازش الگوی خطی نیست و دارای نسبت F زیر با سطح احتمال ۹۴٪ است، بنابراین منحنی‌های درست نمائی در سطح اسمی بزرگتر از بازه ۹۴٪ خواهند بود.

$$\frac{[S(\bar{y}, \infty)^T - S(\hat{\theta})] / P}{S(\hat{\theta}) / (N-P)} = \frac{(107/21 - 25/99)}{25/99/4} = 6/25$$

در حالت $\theta_2 \rightarrow 0$ ، تابع الگو به حالت زیر تبدیل می‌شود. که نشان دهنده خط گذرنده از مبدأ با شیب $3/52$ مطابق نمودار (۳-۶) است.

$$f(x, \theta) = \theta_1 \theta_2 x$$

چون مجموع مربعات باقی مانده برای این خط راست $135/52$ و متناظر با نسبت F برابر $8/45$ و سطح احتمال ۹۶٪ است، بنابراین منحنی درست نمائی در سمت راست هر سطح اسمی بیشتر از ۹۶٪ باز خواهد بود. در این مثال، پراکندگی زیاد در داده‌ها و شکل تابع الگو، با همدیگر منحنی‌های تراز هذلولی‌مانندی ایجاد نموده‌اند که برای سطح اطمینان، به قدر کافی بزرگ و باز خواهد بود. نتیجه این که، نواحی درست نمائی به کمک نواحی تقریب به خوبی تقریب نمی‌شوند.



نمودار ۲-۶- برآورد منحنی‌های پاسخ برای داده‌های BOD .
خط پر محسوس‌ترین مربعات پاسخ، خط فاصله منحنی حد
 $\theta_2 \rightarrow 0$ و خط نقطه $\theta_2 \rightarrow \infty$ است.

سمودار ۲-۶- منحنی‌های تراز درست نمائی اسمی ۸۱ و ۹۵
درصدی برای پارامترهای BOD . خط فاصله بیضی‌های
تقرب خطی اند و برآورد کمترین مربعات با + نشان داده شده است.

برای این که مانند نمودار (۲-۶) منحنی‌های تراز مناسب باشند، نیاز به کوشش‌های متعددی است. یک شبکه اولیه‌ای از مقادیر درست نمایی بنا نموده و تحقیق می‌کنیم که آیا منحنی از شبکه می‌گذرد یا خیر. در این صورت حدود را عوض نموده و دوباره شبکه را می‌سازیم. روش را تا حصول نمودار مورد قبول ادامه می‌دهیم. منحنی‌های نمودار (۲-۶) نقص دیگری از روش‌های منحنی‌های استاندارد را مشخص می‌کند. منحنی ۹۵٪ اسمی، دو قطعه جدا را ظاهر می‌سازد، که شامل بدنه اصلی و یک ناحیه باریک مرکزی نزدیک به $\theta = (40, 0)^T$ است. در حقیقت، این منحنی باید خم پیوسته‌ای باشد و دو قطعه، یک محصول مصنوعی از برنامه رایانه‌ای است.

این بحث بر مبنای الگوهای دو پارامتری بنا شده است. ولی، الگوهای غیر خطی با پارامترهای بیشتر نیز رخ می‌دهند، متأسفانه، روش منحنی استاندارد به آسانی قابل تعمیم به بیش از $P=2$ نیست. یک روش برای الگوهای چند پارامتری این است که در سبب نمائی را در شبکه P بعدی ارزیابی کنیم. این عمل می‌تواند گران تمام شود. چون هزینه محاسبات انجام شده و مقدار ذخیره مورد درخواست برای شبکه، بر حسب P به طور نمایی زیاد می‌شود. همچنین، محقق باید نوارهای شبکه را قبل از ارزیابی منحنی‌های میزان انتخاب کند و

ممکن است این نوارها، تمام منحنی‌ها را نپوشانند یا چنان پهن باشند، که جواب‌های حاصل در ناحیه مورد نظر ضعیف باشند. در این حالت، محقق باید یک مجموعه جدیدی از نوارها را حدس بزند و منحنی‌ها را دوباره ارزیابی کند. باید هزینه این فرایند را نیز اضافه کرد. حتی هنگامی که شبکه ارزیابی شد، تقریب منحنی‌ها و ظاهر کردن این تقریب در بعضی از ابعاد مشکل است.

یک روش برای اجتناب از شبکه‌های چند بعدی این است که مجموع توان دوم توابع در یک سری از شبکه‌های دو بعدی متناظر با هر زوج پارامتر را ارزیابی کرد. این عمل نیاز به یک شبکه برای $(\theta_1 \text{ و } \theta_2)$ و یک شبکه برای $(\theta_1 \text{ و } \theta_3)$ و تا آخر دارد که در کل، $\frac{P(P-1)}{2}$ شبکه به وجود می‌آید. منحنی‌های میزان در شبکه‌های دو بعدی به سادگی قابل محاسبه و نمایش اند. محقق می‌تواند از این منحنی‌ها بینش خود را در مورد شکل چند بعدی از ناحیه درست نمایی افزایش دهد. هر چند روشن نیست که درست نمایی یا مجموع مربعات بتواند هر نقطه این شبکه‌های دو بعدی را ارزیابی کنند. دو انتخاب برای ارزیابی تابع درست نمایی شرطی وجود دارد. به این طریق که یک جفت پارامتر را متغیر بگیریم، در حالی که سایر پارامترها در برآورد کمترین مربعات ثابت نگه داشته شوند یا یک نیمرخ تابع درست نمایی دو بعدی را به کمک کمترین مجموع مربعات، در روی همه مختصات هر نقطه شبکه ارزیابی کنیم.

هر دو شیوه مضراتی دارند. به بیان دیگر، تابع درست نمایی شرطی، همواره یک دیدگاه وسیعی از منحنی‌های میزان درست نمایی را ارائه نمی‌کند. زیرا، فقط مقاطع انتخابی از منحنی‌های میزان را نشان می‌دهد و رفتار کلی منحنی‌ها می‌تواند به طور کامل با رفتار مقطعی آنها متفاوت باشد. به بیان دیگر، ارزیابی نیمرخ درست نمایی نیازمند به حل یک مسأله کمترین مربعات غیر خطی $(P-2)$ بعدی برای هر نقطه واقع در $\frac{P(P-1)}{2}$ شبکه است. که می‌تواند از نظر محاسباتی گران قیمت باشد. برای تخفیف این مشکلات، قصد داریم که رسم‌های نیمرخ و طرح‌های زوج نیمرخ را مطابق بحث بخش بعد عمل کنیم.

۶-۱-۲- رسم ۴ نیمرخ، اثرهای نیمرخ و طرح‌های زوج نیمرخ

برای گسترش بازه‌های درست نمایی حاشیه‌ای برای پارامترهای الگوی غیر خطی با نسبت دادن یک الگوی خطی به تابع مجموع مربعات شروع می‌کنیم. برای یک الگوی خطی، یک بازه حاشیه‌ای $1-\alpha$ برای β_p برحسب پارامترهای استاندارد شده قابل نوشتن است.

$$\frac{\beta_p - \hat{\beta}_p}{\text{se}(\hat{\beta}_p)} = \delta(\beta_p)$$

$$-t(N-P; \alpha/2) \leq \delta(\beta_p) \leq t(N-P; \alpha/2)$$

در نتیجه :

همچنین پارامترهای استاندارد شده مطابق زیر نیز قابل نوشتن است.

$$\frac{\beta_p - \hat{\beta}_p}{se(\hat{\beta}_p)} = \text{sign}(\beta_p - \hat{\beta}_p) \sqrt{\bar{S}(\beta_p) - S(\hat{\beta})} / s \quad (2-6)$$

که:

$$\bar{S}(\beta_p) = \min_{\beta_{-p}} S((\beta_p, \beta_{-p}^T)^T) = S((\beta_p, \bar{\beta}_{-p}^T)^T) \quad (3-6)$$

نیمرخ، تابع مجموع مربعا بوده و $\bar{\beta}_{-p} = (\bar{\beta}_1, \dots, \bar{\beta}_{p-1}, \bar{\beta}_{p+1}, \dots, \bar{\beta}_p)^T$ برآورد کمترین مربعات β_{-p} شرطی شده بر β_p است. علامت $(\beta_p, \bar{\beta}_{-p}^T)^T$ نشانگر برداری با مؤلفه‌های $(\beta_1, \bar{\beta}_{p-1}, \beta_p, \bar{\beta}_{p+1}, \dots, \bar{\beta}_p)$ است. (مشتق (۲-۶)، مطابق مسأله (۲-۶)). برای یک الگوی غیرخطی، تابع t نیمرخ $\tau(\theta_p)$ را مطابق زیر با همان تذکرها تعریف می‌کنیم.

$$\tau(\theta_p) = \text{sign}(\theta_p - \hat{\theta}_p) \sqrt{\bar{S}(\theta_p) - S(\hat{\theta})} / s \quad (4-6)$$

مشابه الگوی خطی، یک بازه درست نمایی $1-\alpha$ ، اسمی را برای θ_p تعریف می‌کنیم، به طوری که، مجموعه θ_p ها مطابق زیر باشند:

$$-t(N-P; \alpha/2) \leq \tau(\theta_p) \leq t(N-P; \alpha/2)$$

تابع t نیمرخ مشابه آماره χ^2 است که توسط بلیس و جیمز به کار رفته است. (۱۹۶۶).

نمودار تابع t نیمرخ، بازه‌های درست نمایی دقیقی را برای پارامترهای مجزا فراهم می‌کند. علاوه بر این، چگونگی شرایط برآورد غیر خطی را آشکار می‌سازد. برای مشاهده این مطلب، فرض کنید الگو خطی است. بنابراین باید رسم $\tau(\theta_p)$ در مقابل θ_p خطی باشد. به ویژه همان گونه که از (۲-۶) دیده می‌شود، نمودار $\tau(\theta_p)$ در مقابل پارامترهای استاندارد شده $(\theta_p - \hat{\theta}_p)se(\hat{\theta}_p) = \delta(\theta_p)$ ، باید خطی راست گذرنده از مبدأ با شیب واحد باشد. برای یک الگوی غیر خطی، باید نمودار $\tau(\theta_p)$ در مقابل $\delta(\theta_p)$ یک منحنی باشد، میزان خمیدگی، اطلاعاتی در مورد غیرخطی بودن الگو ارائه می‌کند.

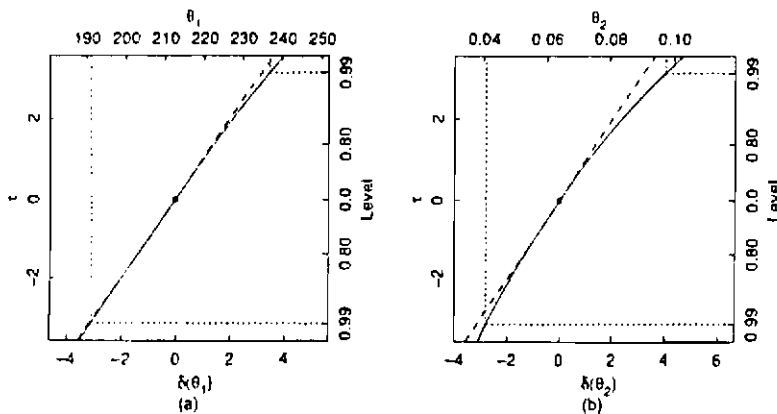
مثال: پرومایسین ۱۴

برای ایجاد رسم t نیمرخ برای θ_1 از داده‌های پرومایسین، فرض کنید $\dots, 0/4, 0/2, \theta_1 = 0$ بوده. و در ازای هر مقدار θ_2 همگرا شود. این عمل سری‌های از مقادیر $\theta_1, \bar{\theta}_2(\theta_1), \tau(\theta_1)$ را ارائه می‌دهد. با تکرار

فرآیند به سمت چپ برآورد، داده‌های مورد لزوم را برای رسم $\tau(\theta_1)$ در مقابل θ_1 مطابق نمودار (۴-۶) فراهم می‌کند.

در این نمایش، خطی مستقیم با شیب واحد را دخالت داده‌ایم (خط فاصله)، متناظر با حالت خطی و محورهای مقیاس بندی شده بر حسب δ و سطح اطمینان اسمی، قرائت بازه‌های درست نمائی را آسان می‌سازد. بازه درست نمائی ۹۹٪ اسمی برای θ_1 عبارت است. $[۱۹۱/۷, ۲۳۶/۷]$ ، که توسط بازه متقارن تقریب خطی $[۱۹۰/۷, ۲۳۴/۷]$ ، به خوبی تقریب می‌شود. رسم t نیمرخی فقط کمی انحنا دارد، که بیانگر غیر خطی بودن حقیقی است.

رسم t نیمرخی برای θ_2 در نمودار (۴b-۶) نشان داده شده است. دیده می‌شود، که بازه‌های درست نمائی، کمی چوله به راست هستند. بازه درست نمائی ۹۹٪ اسمی برای θ_2 عبارت است از: $[۰/۰۴۰۸, ۰/۰۹۷۲]$ ، که به خوبی توسط بازه تقریب خطی $[۰/۰۳۷۹, ۰/۰۹۳]$ تقریب شده است. غیر خطی بودن θ_2 کمی، بدتر از حالت θ_1 است ولی هنوز به اندازه کافی کوچک است.

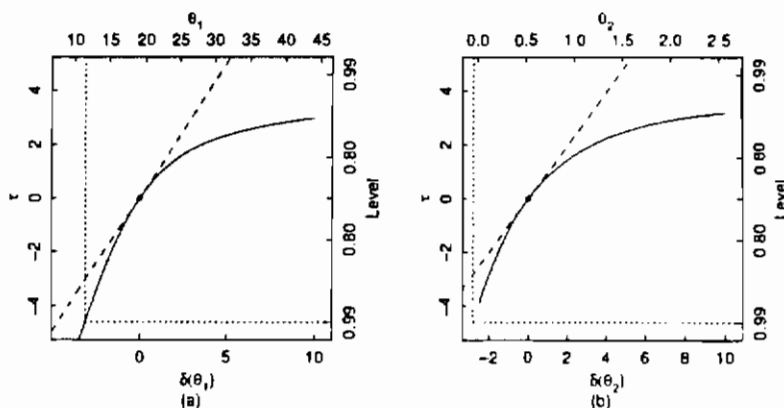


نمودار ۴-۶. رسم t نیمرخی برای θ_1 (قسمت a) و θ_2 برای داده‌های پرومابیس منحنی بر t نیمرخی و (خط - فاصله) خط تقریب است. خط نقطه‌ها نشان دهنه بازه درست نمائی حاشیه‌ای ۹۹٪ ساخته شده است.

مقال : BOD

رسم‌های t نیمرخی پارامترهای BOD، در نمودارهای (۵-۶)، d و b داده شده است. نمودارها انحنای بدی دارند و تمایل به مجانبی بودن و غیر خطی بودن شدیدی را نشان می‌دهند. بازه‌های درست نمایی چوله هستند و در سطوح بالاتر از ۹۸٪ به سمت راست نزدیک می‌شوند این مشاهدات بر اساس رسم‌های

منحنی‌های تراز نمودار (۶-۲) ساخته شده است. بازه‌های درست نمایی ۹۵٪ اسمی برای θ_1 و θ_2 به ترتیب عبارتند از: $[۱۴/۰۵, ۳۷/۷۷]$ و $[۰/۱۳۲, ۱/۷۷]$ ، که تفاوت چشمگیری با بازه‌های تقریب خطی $[۱۲/۲, ۲۶/۱]$ و $[۰/۰۳۳, ۱/۰۹۵]$ دارند.



نمودار ۵-۲-۱-۵. نمودار نیمرخ برای θ_1 (قسمت a) و θ_2 (قسمت b) برای داده‌های BOD. منحنی پر ا نیمرخ و خط-فاصله تقریب خطی است. خط نقطه‌ها نشان دهند، بازه درست نمایی حاشیه‌ای ۹۹ درصدی ساخته شده است، به گونه‌ای که در هر دو حالت به $+\infty$ گسترش داده شده و برای θ_2 در سمت چپ تعریف نشده است.

۶-۲-۱-۱-۱-۱ اثرهای نیمرخ

یکی از نمودارهای مفید دیگر «اثرهای نیمرخ» درست نمایی است، که بوسیله نمودار مؤلفه‌های پیشینه شرطی $\bar{\theta}_p$ به صورت تابعی از θ_p صورت می‌گیرد. برای مثال بعد از ارزیابی نیمرخ درست نمایی برای θ_1 می‌توانیم $\bar{\theta}_2, \bar{\theta}_3, \dots, \bar{\theta}_p$ را در مقابل $\bar{\theta}_1$ رسم، سپس نیمرخ درست نمایی را برای θ_2 ارزیابی نموده و $\bar{\theta}_1, \bar{\theta}_2, \bar{\theta}_3, \bar{\theta}_4, \dots$ را در مقابل $\bar{\theta}_2$ رسم کنیم. همین عمل را برای پاراستری $\bar{\theta}_3$ تا $\bar{\theta}_p$ انجام می‌دهیم، کمینه‌های شرطی را برای سایر پارامترها محاسبه نموده و اثرهای نیمرخ را رسم می‌کنیم. عاقبت نمودارهای $\bar{\theta}_q$ را در مقابل $\bar{\theta}_p$ و $\bar{\theta}_p$ را در مقابل $\bar{\theta}_q$ ، ترکیب می‌کنیم تا اثرهای نیمرخ زوجی تولید شوند. مانند گذشته به کارگیری پارامترهای استاندارد شده محاسبات را راحت‌تر می‌کند.

نمودار اثرهای نیمرخ، اطلاعات مفیدی را مبنی بر چگونگی تداخل پارامترها ارائه می‌کند. برای یک الگوی خطی با پارامترهای استاندارد، اثرهای نیمرخ در نمودار $\delta(\theta_q)$ در مقابل $\delta(\theta_p)$ ، شامل خطهای راست گذرنده از مبدأ است. شیب‌های آنها برای اثر $\delta(\theta_p)$ و $\delta(\theta_q)$ بر روی $\delta(\theta_p)$ و $\delta(\theta_q)$ به ترتیب: $\{C\}$

و $\frac{I}{\{C\}_{pq}}$ است. در این جا C ماتریس همبستگی پارامتر است. اگر همبستگی میان پارامترها صفر باشد، زاویه بین اثرهای نیمرخی ۹۰ است.

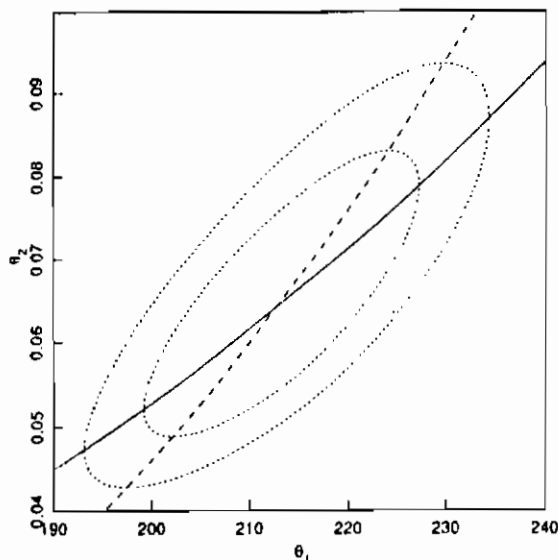
در الگوهای غیر خطی، اثرهای نیمرخی منحنی هستند. انحنای خطها اطلاعاتی را در چگونگی تأثیر متقابل پارامتری و شکل تصویر منحنی‌های درست نمایی بر روی صفحه (θ_p, θ_q) مهیا می‌سازد. اگر منحنی‌های میزان دراز و باریک باشند، اثرهای نیمرخی خیلی به هم نزدیک خواهند شد و اگر منحنی‌ها ضخیم باشند، اثرهای نیمرخی میل به عمود بودن دارند، اگر منحنی‌ها شبیه بیضی باشند، اثرهای نیمرخی مستقیم خواهند بود.

مثال : پرومایسین ۱۵

اثرهای نیمرخی داده‌های پرومایسین در نمودار (۶-۶) رسم شده است. تأکید فوق‌العاده‌ای در منحنی‌های تراز درست نمایی حاصل از نمودار (۱-۶) انجام گرفته است.

می‌توان دید، که اثرهای نیمرخی فقط منحنی‌های صافی هستند. زیرا همدیگر را با زاویهٔ تندی قطع نمی‌کنند، منحنی‌های تراز، بیضوی‌های به نسبت گرد هستند. به علت خطی بودن خوب اثرهای نیمرخی، نواحی تقریب خطی، تقریب‌های خوبی را در نواحی درست نمایی توأم ارائه می‌کنند. با بازرسی منحنی‌های تراز واقعی، مشخص می‌شود که حالت بالا مطلوب است.

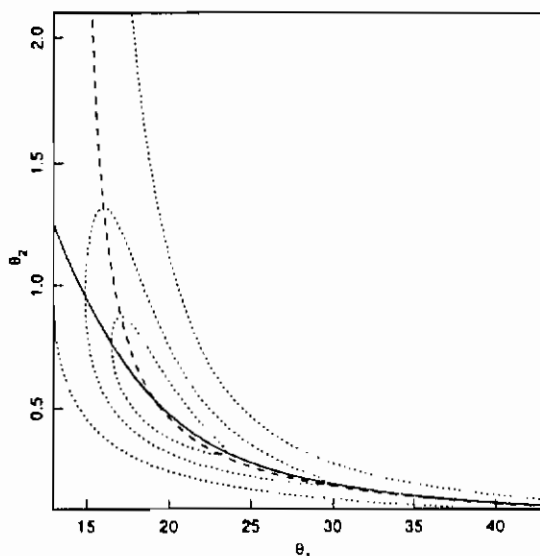
این حالت به صورت نموداری مشخص می‌کند که اثرهای نیمرخی درست نمایی، همان نمودار مقادیر درست نمایی شرطی هستند.



نمودار ۶-۶: اثرهای نیمرخه درست نمائی برای پارامترهای پرومابین، θ_2 روی θ_1 (منحنی پر) و $\bar{\theta}_1$ روی θ_2 (خط فاصله). منحنی‌های تراز درست نمائی ۸۰ و ۹۵ درصد اسمی (نقطه‌ای) نیز اضافه شده تا نشان دهد که خطهای پر، منحنی‌های تراز را درجایی قطع می‌کنند که موازی محور قائم‌اند و خط فاصله‌ها منحنی‌های تراز را درجایی قطع می‌کنند که موازی محور افقی‌اند.

مثال ۹: BOD

اثرهای نیمرخه برای پارامترهای BOD، در نمودار (۶-۷) با تأکید بر منحنی‌های درست نمائی رسم شده است. دیده می‌شود که اثرهای نیمرخه انحنا ی‌دی دارند. یکدیگر را در زاویه تندی قطع کرده، و در دامنه وسیعی بر هم منطبق‌اند. شکل نشان می‌دهد که منحنی‌های تراز طولانی شده، باریک و به طور مشخص غیر بیضوی هستند. روشن است که مجموعه داده‌های الگو به طور آشکاری غیرخطی‌اند. بنابراین نواحی استنباط تقریب خطی رضایتبخش نیستند، که در مثال ۷ BOD ذکر شد.



نمودار ۷-۶. اثرهای نیمرخی درست نمایی برای پارامترهای BOD ، $\bar{\theta}_2$ روی θ_1 با خط پر و $\bar{\theta}_1$ روی θ_2 با خط فاصله منحنی‌های تراز نسبی ۵۰ و ۸۰ و ۹۰ درصد (نقطه چین) نیز اضافه شده تا نشان داده شود که اثرهای نیمرخی منحنی‌ها را در مناسبات افقی یا عمودی نسبت به منحنی‌ها، قطع می‌کنند.

۲-۲-۱-۶- طرحهای زوج نیمرخی

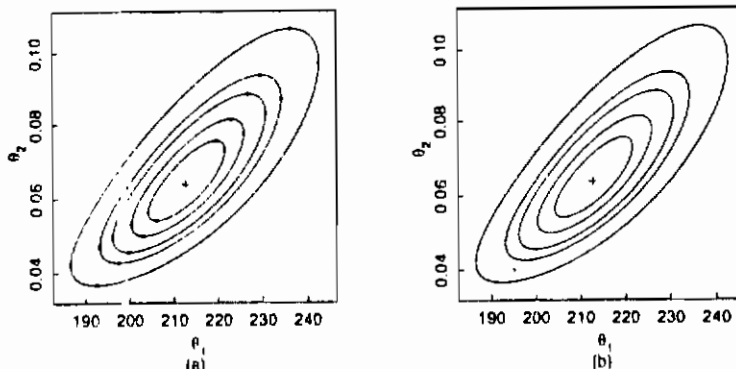
بنابه اظهارات قبلی، معمولاً، محاسبه و نمودار منحنی‌های درست نمایی برای الگوهای چند پارامتری امکان‌پذیر نیست. هر چند مجموع مربعات نیمرخی و اثرهای نیمرخی را برای خلق تقریبهای بسیار دقیق تصاویر دو بعدی نواحی درست نمایی به کار می‌بریم، تانکته محسوسی را در گسترش ناحیه و وابستگی خطی برآورد پارامترها را بر یکدیگر به دست آوریم. برای محاسبه تصاویر منحنی‌های ۹۵٪ در صفحه (θ_1, θ_2) برای مثال می‌توان مجموع مربعات نیمرخی را برای پیدا کردن محلی که منحنی‌های اثر $\bar{\theta}_2$ بر روی θ_1 را قطع می‌کند، به کار برد. این عمل دو نقطه بر روی منحنی را مشخص می‌کند. به علاوه می‌دانیم باید محاسبات بر منحنی در این نقاط، در راستای قائم باشند، چون آنها نوارهای منحنی‌ها را در امتداد θ_1 نشان می‌دهند. همچنین از مجموع مربعات نیمرخی θ_2 و اثر $\bar{\theta}_2$ بر θ_1 می‌توان بیش از دو نقطه را در روی منحنی‌ها محاسبه نموده و می‌دانیم که منحنی‌ها در این نقاط، مماس افقی دارند.

با به کارگیری همه اطلاعات بالا، یعنی: نمودارهای t نیمرخی، نقاط واقع بر منحنی‌ها، جهت محاسبات بر منحنی در این نقاط و این حقیقت که منحنی توسط مقادیر پارامتر در این نقاط محدود شده است، می‌توان یک

درون‌یابی بسیار دقیقی از منحنی‌ها، با به کارگیری روش‌های توصیف شده در پیوست شماره ۶ انجام داد. ما این منحنی‌های درون‌یابی شده را، «طرح‌های زوج نیم‌رخ» می‌نامیم.

مثال: پرومابیسین ۱۶

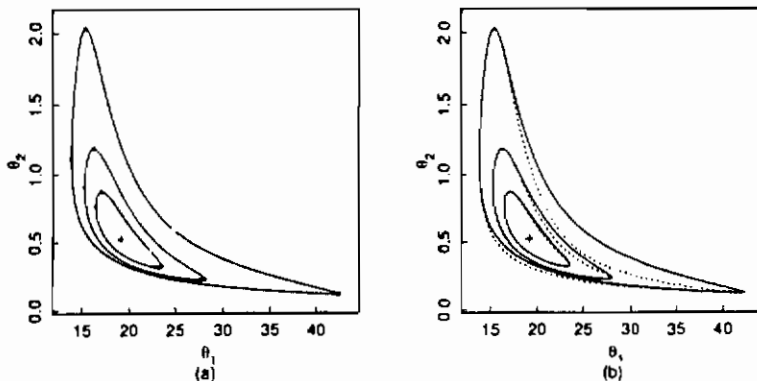
مختصات واقع بر اثرها، متناظر با سطوح اطمینان اسمی ۵۰، ۸۰، ۹۵، ۹۹ درصدی برای پارامترهای پرومابیسین، در نمودار (۸a-۶) به همراه طرح‌های منحنی‌های تراز مبتنی بر همین نقاط، رسم شده است. طرح‌ها و منحنی‌های تراز صریح، در نمودار (۸b-۶) ترسیم شده‌اند. دیده می‌شود که طرح‌ها در همه سطوح بسیار دقیق‌اند. که با بیضوی‌های تقریب واقع در نمودار (۱-۶) مغایرت دارد و به طور قابل ملاحظه‌ای از منحنی‌های تراز واقعی دور‌اند.



نمودار ۸-۶- منحنی‌های تراز ۵۰، ۸۰، ۹۵، ۹۹ درصدی درون‌یابی شده برای پارامترهای پرومابیسین در قسمت a منحنی‌های تراز درون‌یابی شده به همراه نقاطی که برای ساختن آنها در اثرهای نیم‌رخ به کار رفته‌اند، نمایش داده شده است. در قسمت b، منحنی‌های تراز پوشیده شده توسط منحنی‌های صریح (خط نقطه‌ها) نشان داده شده است. در این مقیاس، منحنی‌های تراز صریح قابل تشخیص از منحنی‌های تراز درون‌یابی شده نیستند.

مثال: BOD ۱۰

مختصات متناظر با سطوح اطمینان اسمی ۵۰، ۸۰، ۹۰ درصدی پارامترهای BOD، در نمودار، (۹a-۶) به همراه منحنی‌های درون‌یابی شده رسم شده‌اند. مقایسه منحنی‌های طرح با منحنی‌های واقعی مطابق نمودار (۹b-۶) گویای این است، که حتی با این رفتار بد منحنی‌ها، مشخصه‌ها کفایت کاملی را در ناحیه توأم دارند.



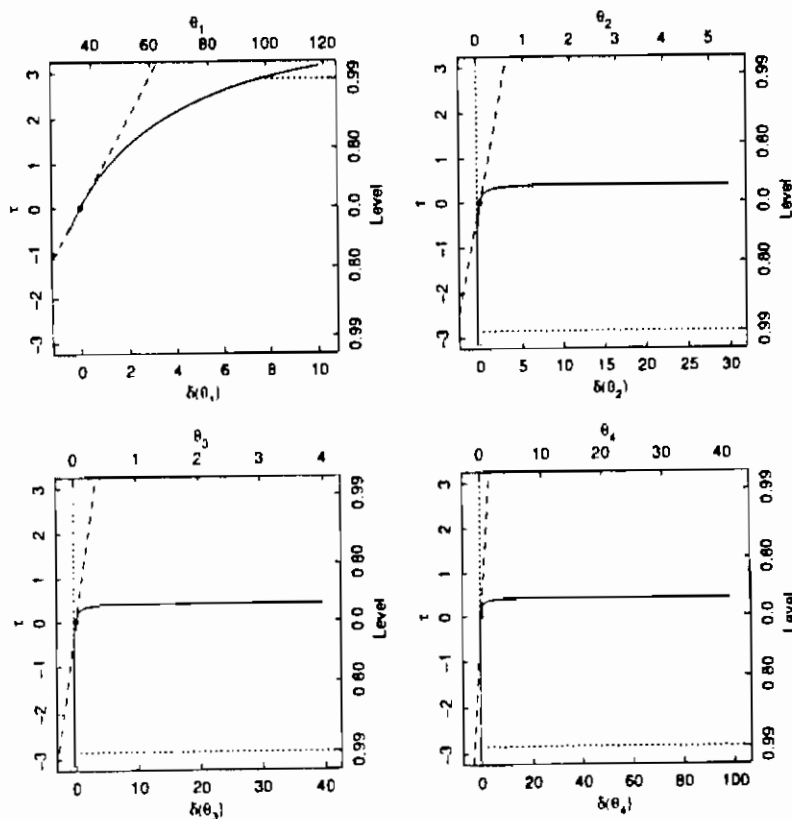
نمودار ۹-۹. منحنی‌های تراز ۵۰، ۸۰، ۹۰ درصدی درون یابی شده برای پارامترهای BOD. در قسمت a منحنی‌های تراز درون یابی شده به همراه نقاطی که برای ساختن آنها در اثرهای نیمرخی به کار رفته‌اند. نمایش داده شده است. در قسمت b منحنی‌های تراز پوشیده شده توسط منحنی‌های تراز صریح (خط نقطه‌ها) نشان داده شده است.

هنگامی که بیش از دو پارامتر وجود دارد، روش مشابهی برای تولید طرح‌ها به کار می‌رود. برای مثال، با سه پارامتر، برای هر مجموعه از مقادیر θ_1 به $\bar{\theta}_1 = (\bar{\theta}_2(\theta_1), \bar{\theta}_3(\theta_1))^T$ گرایش داریم، تا $S(\theta_1)$ تولید شود. این اطلاعات برای محاسبه $\tau(\theta_1)$ ، مختصات اثرهای نیمرخی $\bar{\theta}_2(\theta_1)$ و $\bar{\theta}_3(\theta_1)$ و مختصات تعدادی نقطه بر روی منحنی‌های درست نمائی توأم (θ_1, θ_2) و (θ_1, θ_3) ، به کار می‌روند.

سپس مجموعه‌ای از مقادیر θ_2 را انتخاب می‌کنیم و به $\bar{\theta}_2 = (\bar{\theta}_1(\theta_2), \bar{\theta}_3(\theta_2))^T$ گرایش نموده، که تولید $\tau(\theta_2)$ ، مختصات اثرهای نیمرخی $\bar{\theta}_1(\theta_2)$ و $\bar{\theta}_3(\theta_2)$ و مختصات تعدادی نقطه بر روی منحنی‌های درست نمائی توأم (θ_1, θ_2) و (θ_2, θ_3) ، میسر می‌شود. سپس، دامنه‌ای از مقادیر θ_3 ، را انتخاب نموده و به $\bar{\theta}_3 = (\bar{\theta}_1(\theta_3), \bar{\theta}_2(\theta_3))^T$ همگرا شده و باعث تولید $\tau(\theta_3)$ ، مختصات اثرهای نیمرخی $\bar{\theta}_1(\theta_3)$ و $\bar{\theta}_2(\theta_3)$ و مختصات تعدادی نقطه بر روی منحنی‌های درست نمائی توأم (θ_1, θ_3) و (θ_2, θ_3) می‌شود. آن‌گاه منحنی‌های درون‌یابی شده را برای هر زوج پارامتر رسم می‌کنیم. اگر اثرهای نیمرخی تقریباً خطی و مجزا در مبدأ و مختصات τ باشند، منحنی‌ها به خوبی بیضوی هستند و طرح‌ها خیلی دقیق خواهند بود. اگر اثرها در مبدأ مختصات انحناء داشته باشند و تمایل به انطباق در مختصات τ از یک دامنه مناسب داشته باشند، آن‌گاه منحنی‌های به طور روشنی در مبدأ مختصات غیر بیضوی بوده و ممکن است طرح‌ها دقیق نباشند.

مثال : هم ترکیبی ۵

نمودار ۱ نیمرخی برای داده‌های هم ترکیبی در نمودار (۱۰-۶) نشان داده شده است. می‌توان دید که پارامترها به طور ضعیفی محاسبه شده‌اند. محدوده وسیعی، برای بازه‌های درست نمائی برای ثابت‌های تعادلی و حتی برای سطوح اسمی ۵۰٪ وجود ندارد. فقط اطلاعات موثر در مورد این پارامترها مثبت بودن آنهاست. اثرهای نیمرخی برای تعدادی از پارامترها در نمودار (۱۱-۶) رسم شده است. که ما را قادر به دیدن علت محاسبه ضعیف ثابت‌های تعادلی می‌کند.



نمودار ۱۰-۶. نمودار ۱ نیمرخی برای پارامترهای هم ترکیبی، منحنی درشت ۱ نیمرخی و خط فاصله تقریب خطی است. خط نقطه‌ها نشان دهنده بازه اطمینان ۹۹٪ ساخته شده است. به طوری که در سه حالت به ∞ گسترش دارد و درست چپ θ_1 تعریف نشده است.

اثرهای نیمرخی θ_1 در مقابل θ_3 در نمودار (۱۱-۶) نشان داده شده که شبیه یک جفت منحنی تیز هذلولی مانند به نظر می‌رسند. این مطلب با توجه به این که θ_1 فقط با θ_3 در تشکیل محصول ظاهر می‌شود قابل بررسی

بوده و به ازاء مقادیری که $\theta_1\theta_3$ ثابت است، مجموع مربعات باقی مانده مشابهی را تولید می‌کند و در نتیجه اثرها هذلولی مانند هستند.

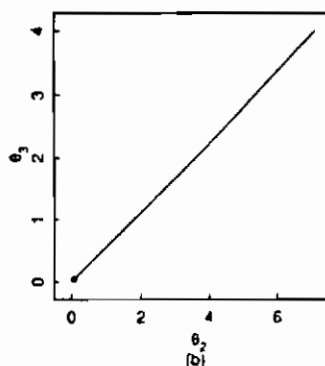
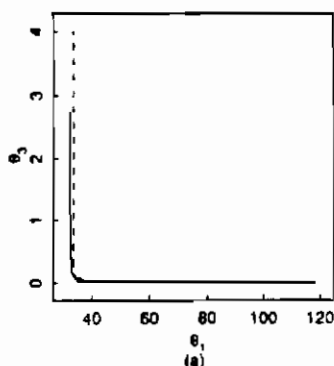
اثرهای ثابت تعادلی θ_3 در مقابل θ_2 در نمودار (۱b-۶) نشان داده شده و (مقادیر θ_4 در مقابل θ_3 نشان داده نشده است) شامل دو خط منطبق گذرنده از مبدأ است. این به ما اجازه می‌دهد که علت عدم وجود حد بالایی در بازه‌های درست نمائی را برای ثبات‌های تعادلی ببینیم. هنگامی که مخرج کسر عبارت

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1\theta_3(x_2 - x_3/1.632)}{1 + \theta_2x_1 + \theta_3x_2 + \theta_4x_3}$$

بسیار بزرگ باشد، می‌توان از عدد یک چشم پوشی کرد و تابع زیر را در نظر گرفت:

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1\theta_3(x_2 - x_3/1.632)}{\theta_2x_1 + \theta_3x_2 + \theta_4x_3}$$

و با هم مقیاس کردن θ_2 ، θ_3 ، θ_4 با عامل یکسانی، بدون تغییر دادن θ_1 ، سبب تولدی پیش بینی‌ها و مجموع مربعات باقی مانده‌های یکسانی می‌شود.



نمودار ۶-۱-۱ نمودار نیم‌مرخی برای θ_1 در مقابل θ_3 (قسمت a) و θ_2 در مقابل θ_3 (قسمت b) در الگوی داده‌های هم ترکیبی اثرهای $\bar{\theta}_3$ روی θ_2 و $\bar{\theta}_2$ روی θ_3 بر هم منطبق اند.

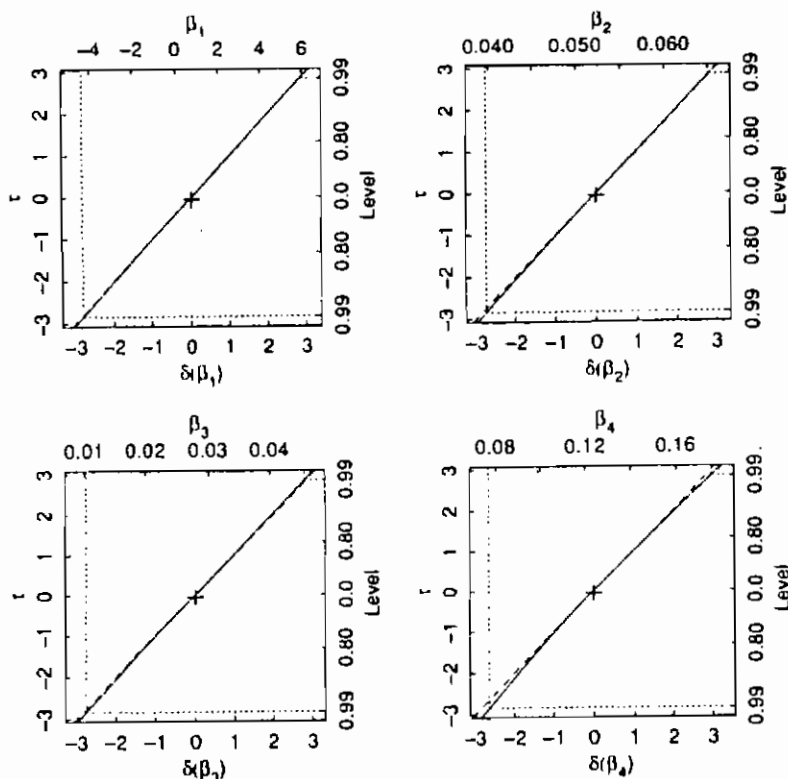
برای رسم طرح‌های زوج نیم‌مرخی، به علت رفتار بسیار بد نمودارهای θ_1 ، نیم‌مرخی و اثرهای نیم‌مرخی مشکلی وجود ندارد. این رفتار نشانگر این است که، تاکنون اطلاعات کمی حاصل شده است و باید آزمایشهای اضافی انجام گیرد. به طوری که برآوردهای با معنایی برای پارامترها با نواحی استنباط معقول حاصل شود.

باکس و هیل (۱۹۷۹) تحلیل متفاوتی از این داده‌ها را با تغییر الگو بشرح زیر با عامل بندی دوباره، ارائه

داده‌اند:

$$f(x, \beta) = \frac{x_2 - x_3 / 1.632}{\beta_1 + \beta_2 x_1 + \beta_3 x_2 + \beta_4 x_3} \quad (5-6)$$

(این شکل از عامل بندی دوباره توسط راتکوسکی ۱۹۸۵ نیز با به کاربرد الگوهای شامل نسبت چند جمله ای نیز توصیه شده است). برآورد β عبارت است از: $\hat{\beta} = (0/739, 0/0523, 0/0278)$ رسم t نیمرخی نشان داده شده در نمودار (۱۲-۶)، رفتار بهتری نسبت به پارامترهای مربوط به θ دارد و به تقریب ناحیه های درست نمایی نسبتاً مقارنی ایجاد می کند. اثرهای نیمرخی (نشان داده نشده است) نیز مستقیم اند و طرحهای زوج نیمرخی به طور قابل ملاحظه ای بیضوی هستند. بنابراین نواحی تقریب خطی به طور منفرد یا توأم و نتایج برای پارامترهای β بسیار دقیق هستند. توجه شود که بازه درست نمایی β_1 حتی برای سطح اطمینان میانی نیز دارای مقادیر منفی اند. زیرا مثبت بودن این پارامترها از نظر فیزیکی بی معنی است. بنابر این هنوز گوسزد می کنیم که داده ها مقادیر محدودی دارند.



نمودار ۱۲-۶- نمودار t نیمرخی برای پارامترهای تبدیل شده در الگوی داده های هم ترکیبی. خطهای پر منحنی های t نیمرخی و خط فاصله ها تقریب خطی است. خط نقطه ها نمایش دهنده بازده های درست نمایی حاشیه ای ۹۹٪ ساخته شده است.

۶-۱-۳- توضیحات

به کارگیری نمودار ϵ نیمرخ، اثرهای نیمرخ و طرح زوج نیمرخ برای خلاصه کردن نتایج استنباط تحلیل خطی تذکرات زیادی را در بر دارد. محاسبات مربوط به ϵ نیمرخ و اثرهای نیمرخ بسیار کافی است، زیرا از برآوردهای کمترین مربعات محاسبات قبلی شروع کرده‌ایم. مسأله اغلب از بعد کاهش یافته $P-1$ است. همچنین در هر مقدار پارامتر مورد نظر، به طور هم زمان مقدار ϵ نیمرخ و مقادیر همگرا شده θ_p تولید شده‌اند، در نتیجه بیشترین نیازهای داده‌ها را برای طرح زوج نیمرخ فراهم می‌کند.

توابع نیمرخ نیز برای مشخص کردن بازه‌ها و نوارهای درست نمایی دقیق تابع انتظار به کار رفته‌اند. برای همه این محاسبات، فقط تعدیل کوچکی در نرم‌افزار رگرسیون غیر خطی استاندارد لازم است. شبه برنامه برای تولید نمودار ϵ نیمرخ و اثرهای نیمرخ در پیوست شماره ۳ ارائه شده است.

همچنین شیوه مزبور اطلاعات جامع مهمی را در مورد شرایط برآورد فراهم می‌کند. به علاوه برای فراهم کردن بازه‌های درست نمایی دقیق هر پارامتر، نموداری ϵ نیمرخ چگونگی غیر خطی بودن هر پارامتر را آشکار می‌سازد. این عمل می‌تواند راهنمایی باشد برای محقق به منظور عامل بندی دوباره غیر خطی برای داده‌های جدید با تابع الگوی مشابه. چنین عامل بندی دوباره می‌تواند برای فراهم کردن تقریب خطی دقیق حاشیه‌ای و نواحی پارامتر توأم به کار رود. در نتیجه موجب رفع نیاز نمودار می‌شود. علاوه بر آن عامل بندی مجدد می‌تواند برای سرعت بخشیدن به همگرایی به کار رود. (برای مثال توصیه ما به کارگیری عامل بندی مجدد راتکوسکی (۱۹۸۵) در هنگام برآورد است، زیرا سبب ساده‌تر شدن محاسبات مقادیر شروع پارامترها و تسریع همگرایی است. هر چند توصیه می‌کنیم که برآوردها و بازه‌های درست نمایی بر حسب پارامترهای مرجع گزارش شوند. این عمل از نظر فیزیکی برای شیمی‌دانها و مهندسين شیمی با معنی است. اگر عامل بندی مجدد بتواند مشخص کند که کدام خطی‌تر بوده و اطمینان در همگرایی وجود دارد و برای تحقق پر معنی است، آنگاه باید به کار رود).

توجه شود که برای عامل بندی دوباره، متغیرها که در آنها، ϕ_p تابعی از θ_p است، نمودار ϵ نیمرخ (و اثرهای نیمرخ مشارکت کرده) ϕ_p می‌تواند به طور مستقیم از نمودار ϵ نیمرخ (و اثرهای نیمرخ مشارکت کرده) θ_p به دست آید و نیازی به عامل بندی دوباره تابع الگو یا برآورد دوباره پارامترها نیست. در حقیقت نتیجه‌ای از عدم تغییر تابع درست نمایی است.

تابع ϵ نیمرخ می‌تواند برای محاسبه بازه‌های درست نمایی تابع انتظار در هر نقطه x_0 به کار رود. این عمل توسط عامل بندی دوباره تابع الگو به گونه‌ای که پارامتر جدیدی بنام ϕ_1 که پاسخ در x_0 می‌باشد، امکان‌پذیر است. پارامترهای باقی‌مانده می‌توانند به صورت $\theta_p = \phi_p$ ، $p = 2, \dots, P$ ، انتخاب شوند و به سادگی مشتقات

تابع انتظار نسبت به پارامترهای جدید به کمک قاعده زنجیری قابل محاسبه‌اند. برای محاسبه یک بازه درست نمائی برای پاسخ در نقطه‌ای خاص، مقادیر ϕ_1 را چنان پیدا می‌کنیم که $t(N-P, \alpha/2) = \pm t(\phi_1)$ شود و برای محاسبه نواری درست نمائی برای تابع پاسخ برازشی در هر نقطه x ، مقادیر ϕ_1 را چنان پیدا می‌کنیم که $t(\phi_1) = \pm F(P, N-P, \alpha)$ شود.

اثرهای نيمرخی و طرح‌های نيمرخی اطلاعات مهمی در رفتار دو گانه پارامترها را فراهم می‌کنند، که می‌تواند برای تحقیق در عامل بندی دوباره مؤثر نیز به کار رود. شاید مجموعه نمودارها اهمیت بیشتری در فراهم کردن بینش ما در شرایط آزمایش داشته باشد. به طوری که گامهایی برای طرح آزمایشات به منظور تولید داده‌های بهتر برداشته شود. برای مثال، در داده‌های BOD ، آزمایشهای آتی باید شامل تکرارهای بیشتری در هر نمونه‌گیری برای کاهش پراکندگی داده‌ها باشند. و بعضی از مشاهده‌ها باید در حدود ۳۶ ساعت (به جای ۲۴ یا ۴۸ ساعت) انجام پذیرند تا اطلاعات حیاتی در مورد ثابت نرخ θ فراهم شود. همچنین برای داده‌های هم‌ترکیبی باید اطلاعات آگاه‌بخش بیشتری در مورد پارامتر معکوس شده به دست آید. روش‌های طرح غیرخطی با کاربرد معیار طرح زیر مجموعه‌ای (بخش ۱۴-۳) می‌تواند در اینجا غیر مفید واقع شود.

۲-۶-۲- نواحی ییزی

استنباط الگوهای غیر خطی به کمک شیوه ییزی مشکلات مشابهی مانند روش درست نمائی دارد. همچنین مشکل اضافی انتخاب تابع پیشین برای پارامترها نیز وجود دارد.

۲-۶-۱- انتخاب تابع پیشین ییزی پارامترها

در تحلیل ییزی الگوهای رگرسیون خطی بیان شده در بخش (۱-۴)، معمولاً تابع پیشین زیر به کار می‌رود.

$$p(\beta, \sigma) \propto \sigma^{-1}$$

این تابع متناظر با یک چگالی احتمال حقیقی نیست، زیرا تابع اولیه این چگالی بر روی پارامتر σ یا β نامتناهی است. ولی کاربرد چنین تابع «آگاهی نابخش» یا «غیر واقعی» پیشین قابل توجیه است، یعنی چگالی پسین دارای تابع اولیه‌ای متناهی روی کلیه مقادیر پارامترها و قابل تبدیل به نرمال است، به طوری که حاصل تابع اولیه مساوی واحد شود. علت این است که در الگوهای خطی اگر $\|\beta\| \rightarrow \infty$ و $\|\eta(\beta)\| \rightarrow \infty$ و η ثابت باشد، آن‌گاه $\|z\| \rightarrow \infty$ خواهد بود. در نتیجه $l(\beta, \sigma|y) \rightarrow 0$ (در عمل موارد بیشتری برای تابع اولیه‌گیری متناهی لازم است. باید عبارت $l(\beta, \sigma|y)$ به سرعت به صفر میل کند، که در این جا انجام می‌پذیرد). اغلب یک چگالی پیشین آگاهی نابخش می‌تواند به عنوان حد چگالی پیشین واقعی که به اندازه کافی اشاعه داده شده باشد، در نظر گرفته

شود. (برای مثال، حد چگالی‌های پیشین نرمال چند متغیر بر روی \mathbf{B} با ماتریس‌های واریانس، کوواریانس شامل ماتریس ثابت ضرب شده توسط عاملی که به نامتناهی میل می‌کند). در این فرایند حدی، کمیت‌های محاسبه شده از چگالی‌های پسین - از قبیل نواحی چگالی پسین (اعلی (HPD)) - به طور ملایم به مقدار محدودی میل می‌کند. هر چند اغلب برای الگوهای غیر خطی این موضوع صحت ندارد، که توابع پسین یکنواخت موضعی تولید کننده چگالی‌های پسین واقعی باشند. الگوهای غیر خطی اغلب دارای مجانبند. چون اگر $\|\theta\| \rightarrow \infty$ ، آنگاه دلیل بر $\|\eta(\theta)\| \rightarrow \infty$ یا $l(\theta, \sigma|y) \rightarrow 0$ نیست. (برای مثال اگر $\theta \rightarrow \infty$ الگوی رانفورد به حد متناهی $T(60, \dots, 60)$ میل می‌کند). این بدان معنی است، که هر گاه یک تابع پیشین غیر واقعی بر روی پارامترها به کار رود، چگالی پسین نیز غیر واقعی است. حتی اگر پسین ناآگاهی بخش را به عنوان حد رشته‌ای از چگالی‌های پیشین واقعی در نظر بگیریم، شرایط تغییر نمی‌کند. زیرا، خواص چگالی پسین به مقداری محدود و رضایت بخش میل نمی‌کند. برای مثال، اگر یک چگالی پیشین یکنواختی بر روی θ در الگو رانفورد و بازه $0 \leq \theta < k$ به کار ببریم و اجازه بدهیم که k نامتناهی شود، آنگاه هنگام محاسبه بازه HPD ۹۵٪ برای هر مقدار k ، نقاط انتهایی سمت راست بازه‌های HPD نامتناهی می‌شوند.

ملاحظه‌های مثال رانفورد، ما را قادر می‌سازد که چگونه از حصول چگالی‌های پسین غیر واقعی دوری کنیم. یعنی به جای قرار دادن یک پیشین یکنواخت موضعی در فضای پارامتر، باید آن را در رویه انتظار قرارداد تا نمایش دهنده یک پیشین ناآگاهی بخش باشد (بیتر، ۱۹۷۸). برای الگوهای خطی، یک پیشین یکنواخت موضعی در فضای پارامتر، یک پیشین یکنواخت موضعی را در صفحه انتظار ایجاد می‌کند. در نتیجه این پیشین با تمرین‌های استاندارد برای الگوهای خطی سازگار است. برای یک الگوی غیر خطی، پیشین ناآگاهی بخش روی θ ، متناسب با ژاکوبی تصویر بر صفحه انتظار است. در نتیجه داریم:

$$p(\theta) \propto \frac{dA}{d\theta} = |\mathbf{V}^T \mathbf{V}|^{1/2}$$

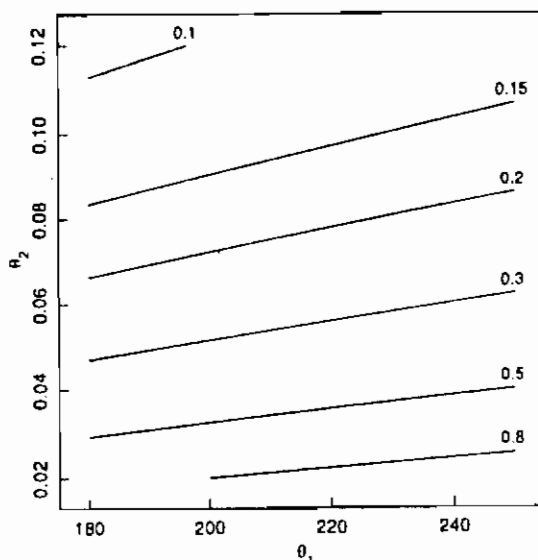
که dA نمایش دهنده نمو مساحت در رویه انتظار است.

برای مثال رانفورد ۱ رویه انتظار متناهی است، در نتیجه یک چگالی پیشین یکنواخت روی رویه انتظار، یک چگالی پیشین واقعی خواهد بود. بنابراین، چگالی پسین نیز یک چگالی واقعی خواهد بود. این در هنگامی است که رویه انتظار گسترش نامتناهی دارد. چون پیشین ناآگاهی بخش یک چگالی واقعی نیست. درست نمایی سعی خواهد کرد، که چگالی پسین را واقعی کند، زیرا رویه به طور نامتناهی گسترش می‌یابد. (از نظر ریاضی به دست آوردن رویه‌ای با گسترش نامتناهی به طوری که مقید به ناحیه‌ای محدود در فضای پاسخ باشد، امکان‌پذیر است. ولی چنین موردی در آسیب‌شناسی به عنوان رویه‌های انتظار رخ نمی‌دهند).

همچنین می‌توانیم یک پیشین یکنواخت موضعی را در روی رویه انتظار توجیه کنیم، با این دلیل که چشم پوشی پیشین در مورد پاسخ‌ها، متناظر است با پیشین یکنواخت موضعی در فضای نمونه برای پارامترهای الگو، یعنی θ القاء می‌کند. توجه شود که این انتخاب، پیشین را مستقل از عامل بندی به کار برده شده در تابع الگوی می‌نماید. بنابراین ژاکوبی تبدیل حذف می‌شود.

مثال : پروماینسین ۱۷

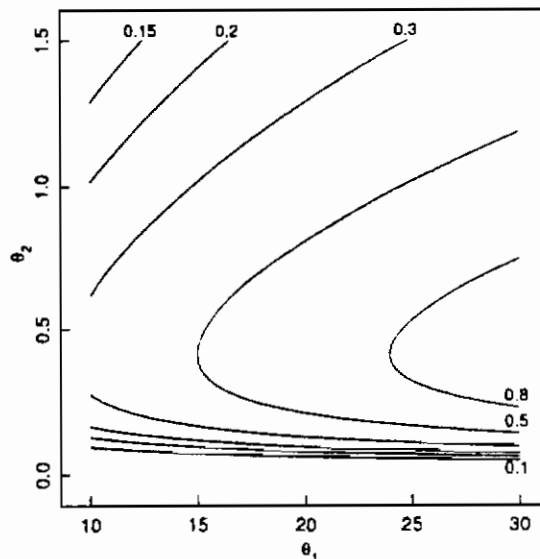
منحنی‌های میزان چگالی پیشین $\hat{p}(\theta)$ برای الگو و طرح داده‌های پروماینسین در نمودار (۶-۱۳) نشان داده شده است. چگالی پیشین به گونه‌ای مقیاس‌بندی شده که به مقدار حداکثر یک بر روی ناحیه‌ای که شامل مساحت درست نمائی مقتضی است برسد. این پیشین، وزن بیشتری به مقادیر کوچکتر θ_2 می‌دهد، ولی تغییر در وزن‌ها کم است. برای این داده‌ها (که منحنی، آنها در نمودار (۶-۱) نشان داده است) درست نمائی به روشنی تسلط پیشین را در محاسبه چگالی پسین نشان می‌دهد. همچنین، منحنی‌های چگالی پسین به تقریب مساوی منحنی‌های تابع درست نمایی به نظر می‌رسند. (مقدار حداکثر و حداقل تابع پیشین روی این ناحیه نسبتی در حدود ۱۰ دارد، در حالی که مقادیر حداکثر و حداقل درست نمایی نسبتی در حدود ۱۰^{۱۹۵} را دارا هستند.



نمودار ۶-۱۳. منحنی نواز چگالی پیشین نسبی برای پارامترهای الگوی پروماینسین. چگالی پسین چنان مقیاس بندی شده که به مقدار حداکثر در روی ناحیه نشان داده شده می‌رسد.

مثال ۱۱: BOD

منحنی‌های چگالی پیشین برای الگو و طرح داده‌های BOD در نمودار (۱۴-۶) نشان داده شده است. مانند قبل، چگالی پیشین به گونه‌ای مقیاس بندی شده که حداکثر مقدار یک را روی ناحیه‌ای که شامل حداکثر مساحت درست نمائی مقتضی است، بگیرد. در این مثال، نمی‌توانیم همهٔ مقادیر پارامترها را در درست نمائی مقتضی داخل کنیم. چون، آن ناحیه نامحدود است، که در مثال BOD_V نمایش داده شده. پیشین به طور قابل ملاحظه‌ای بر روی ناحیه تغییر می‌کند و در $\theta_2 = 0$ به صفر می‌رسد. پیشین برای مقادیر بزرگ θ_2 ، خیلی کوچک است. این متناظر با ناحیه‌ای از رویهٔ انتظار است که منحنی‌های پارامتر به یک حدی مطابق مثال ۷ BOD می‌رسند. مقادیر خیلی کوچک پیشین، مقادیر پارامتر را در داده‌ها رقم نمی‌زنند.



نمودار ۱۴-۶- منحنی‌های تراز چگالی نسبی پیش برای پارامترهای الگوی داده‌های BOD.

برای کامل کردن چگالی پیشین، باید پیشین توأم را به θ و σ اختصاص داد. بنابراین اکس و تیاو (۱۹۷۳)،

$$p(\sigma) \propto \sigma^{-1} \quad \text{و} \quad \theta \text{ را با } p(\sigma) \propto \sigma^{-1} \text{ انتخاب می‌کنیم. در نتیجه چگالی پیشین، عبارت است از:}$$

$$p(\theta, \sigma) \propto p(\theta)p(\sigma) = |\mathbf{V}^T \mathbf{V}|^{1/2} \sigma^{-1} \quad (۱۴-۶)$$

دانستن این که چگالی پیشین مستقل از عامل بندبست، ارزشمند است. ولی وابستگی به طرح مورد استفاده توسط محقق دارد. این موضوع، دیدگاه خوبی را ارائه می‌کند، زیرا، هیچ آزمایش علمی به طور کامل عاری از

علم نیست. و یک پیشین دقیق، دانش جاری بر آزمایش را در سرتاسر طرح گسترش می‌دهد. برای روشنتر شدن موضوع، فرض کنید می‌خواهیم BOD یک رودخانه را اندازه‌گیری کنیم و الگوی مناسب به صورت: $f = \theta_1(1 - e^{-\theta_2 x})$ باشد. BOD و در نتیجه پارامتر به فصل سال، عرض جغرافیایی، مقدار جریان، تعداد و نوع منابع آلوده‌کننده و نوع بستر رودخانه و غیره بستگی دارد. در رودخانه‌های کوهستانی با جریانهای تند و به دور از منابع آلوده‌کننده، احتمالاً ثابت نرخ θ_2 خیلی کوچک خواهد بود. بنابراین، نمونه‌های برداشتی از رودخانه در فواصل و زمان‌های به نسبت طولانی برداشت خواهند شد، که هر سه روز یکبار و به مدت سه هفته است. در عوض در رودخانه پيچشی با جریان آهسته و در یک ناحیه صنعتی، احتمالاً ثابت نرخ، بزرگ خواهد بود. در نتیجه نمونه‌ها باید در فاصله‌های کوتاه‌تر و فاصله زمانی کوچکتر برداشت و تحلیل شوند، که هر ۱۲ ساعت یکبار و به مدت پنج هفته است. این ملاحظه‌ها به طور مشخص در طرح اثر می‌گذارند. در نتیجه بر پیشین و پارامترها نیز موثراند.

۶-۲-۲- نواحی توأم HPD

بعد از انتخاب یک چگالی پیشین، چگالی پسینی را توسط ضرب پیشین در تابع درست نمایی می‌سازیم. در نتیجه چگالی پیشین $p(\theta, \sigma | y)$ به شکل زیر در می‌آید، که در آن $S(\theta)$ مجموع مربعات باقی‌مانده‌ها در θ است:

$$p(\theta, \sigma | y) \propto |V^T V|^{1/2} \sigma^{-(N+1)} \exp \left[-\frac{S(\theta)}{2\sigma^2} \right]$$

همان‌گونه که باکس ویتاوا نشان داده‌اند (۱۹۷۳)، چگالی پسین حاشیه‌ای θ توسط تابع اولیه‌گیری از پسین توأم بر روی پارامتر اغتشاش به دست می‌آید.

$$p(\theta | y) = \int_0^\infty p(\theta, \sigma | y) d\sigma$$

$$\propto |V^T V|^{1/2} [S(\theta)]^{-N/2} \quad (7-6)$$

یک ناحیه HPD توسط یک منحنی میزان از این تابع چگالی پسین یا به طور مشابه توسط منحنی زیر محدود می‌شود:

$$\frac{S(\theta)}{|V^T V|^{1/N}}$$
 برای نسبت دادن یک مقدار احتمال به ناحیه‌ای، باید سطح منحنی تراز محاسبه شود. روش دقیق محاسبه

ناحیه $PHD_{1-\alpha}$ ، تابع اولیه گیری از (۷-۶) روی تمام مقادیر ممکن θ ، به دست آوردن ثابت تناسب و تابع اولیه گیری از پسین نرمال شده به همراه منحنی های چگالی پسین است تا محتوای احتمالی مورد نظر به دست آید. تمام توابع اولیه موجود در این روش دقیق، آن را به اندازه کافی و برای مقصودهای کلی قابل محاسباتی می کند، ولی خوشبختانه تقریب سر راستی برای احتمال موجود در یک منحنی میزان وجود دارد. برای هر رویه انتظار مجموعه ای از پارامترها ژئودریک به نام ϕ وجود دارد، به طوری که به تقریب چگالی پیشین نزدیک ϕ ثابت باشد. یعنی:

$$|\mathbf{V}_\phi^T \mathbf{V}_\phi| \approx \text{constant} \quad (8-6)$$

$$\mathbf{V}_\phi = \frac{d\eta}{d\phi} \quad \text{که در آن:}$$

اگر رویه انتظار به طور کامل صاف باشد، اغلب، دارای انحنای گوسی صفر است. این عمل در جایی رخ می دهد که (انیل ۱۹۶۶) رابطه (۸-۶) به یک تساوی شود. علاوه برداشتن یک چگالی پیشین یکنواخت، پارامترهای ϕ نیز دارای یک بسط ساده تابع درست نمایی اند. چون هنگامی که رویه انتظار تا حد معقولی بر روی ناحیه درست نمایی محسوس صاف باشد، مجموع مربعات تابع $S_\phi(\phi)$ برحسب ϕ درجه دوم است، یعنی:

$$P_\phi(\phi|\mathbf{y}) \propto |S_\phi(\phi)|^{-N/2}$$

$$\approx \left[S_\phi(\hat{\phi}) + \frac{1}{2}(\phi - \hat{\phi})^T \frac{\partial^2 S_\phi}{\partial \phi \partial \phi^T} \bigg|_{\hat{\phi}} (\phi - \hat{\phi}) \right]^{-N/2}$$

عبارت بالا به شکل چگالی T چند متغیره است (باکس و ویتا، ۱۹۷۳). در نتیجه یک ناحیه $HPH_{1-\alpha}$ تقریبی، شامل تمام مقادیر ϕ پوشیده شده توسط منحنی $S_\phi(\phi)$ است، که توسط رابطه زیر بیان می شود.

$$\frac{|S_\phi(\phi) - S_\phi(\hat{\phi})|/P}{S_\phi(\hat{\phi})/(N-P)} \geq F(P, N-P; \alpha)$$

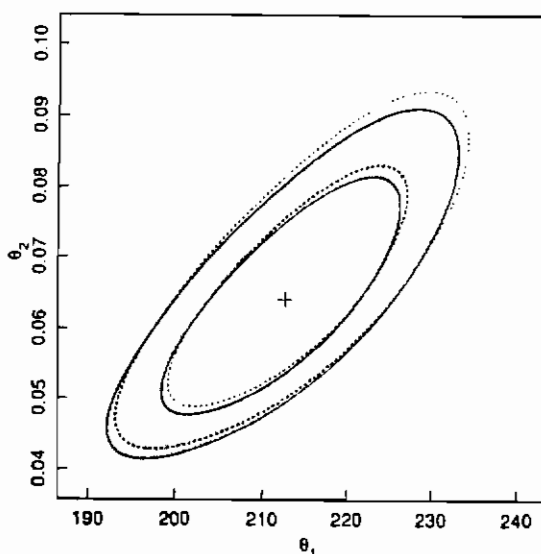
ناحیه $HPD_{1-\alpha}$ برحسب θ به صورت منحنی در $S(\theta)/|\mathbf{V}^T \mathbf{V}|^{1/N}$ در می آید. در نتیجه ناحیه $HPH_{1-\alpha}$ تقریبی، در θ توسط منحنی زیر محدود می شود.

$$\frac{S(\theta)}{|\mathbf{V}^T \mathbf{V}|^{1/N}} = \frac{S(\hat{\theta})}{|\hat{\mathbf{V}}^T \hat{\mathbf{V}}|^{1/N}} \left[1 + \frac{P}{N-P} F(P, N-P; \alpha) \right]$$

از نظر محاسباتی، تعیین کردن منحنی های تراز $S(\theta)/|\mathbf{V}^T \mathbf{V}|^{1/N}$ بسیار راحت تر است. بخصوص گاهی بر روی مرز ناحیه پارامتر (مطابق مثال ۱۱ BOD)، داریم: $|\mathbf{V}^T \mathbf{V}| = 0$

مثال: پرومپسین ۱۸

ناحیه‌های تقریبی ۸۰ و ۹۰ درصدی HPD برای پارامترهای پرومپسین در نمودار (۶-۱۵) به همراه ناحیه‌های درست نمائی متناظر (خط نقطه‌ها) نشان داده شده است. منحنی‌های HPD بسیار شبیه منحنی‌های درست نمائی هستند. ولی با تقارن بیشتری در حدود برآورد کمترین مربعات، بنابراین مقادیر بزرگ θ_2 ، وزن‌های کمتری را ارائه می‌دهند.



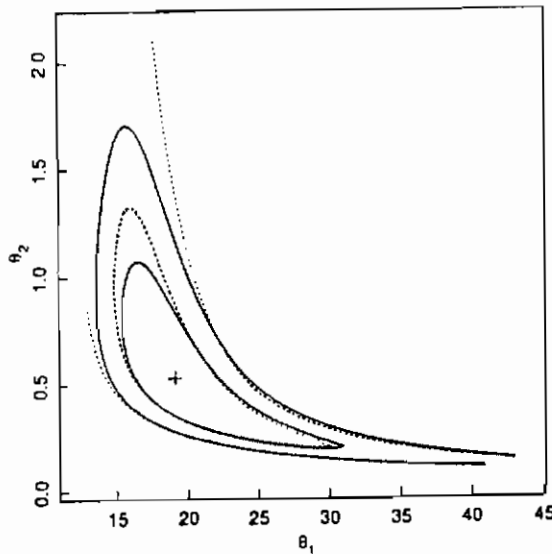
نمودار ۱۵-۶- ناحیه‌های اسمی ۸۰ و ۹۰ درصدی HPD (خط سمند) و نواحی درست نمائی متناظرشان (نقطه چین) برای پارامترهای پرومپسین.

مثال: BOD ۱۲

ناحیه‌های تقریب ۸۰ و ۹۵ درصدی HPD برای پارامترهای BOD به همراه بخش‌هایی از ناحیه‌های متناظر درست نمائی (خط نقطه) نشان داده شده است. منحنی‌های نزدیک HPD در جهت θ_2 هستند، که برخلاف منحنی‌های درست نمائی متناظرشان است. ولی هنوز به طور مشخص غیر بیضوی هستند.

طرح‌ها می‌توانند از تصاویر دو گانه نواحی HPD یا به کارگیری شیوه مشابهی با ناحیه‌های درست نمائی ساخته شوند. به جای کمینه کردن مجموع مربعات شرطی، اثرهای نیمرخی پسین را با کمینه کردن $S(\theta)/|V^T V|^{1/N}$ محاسبه می‌کنیم. کمینه کردن این رابطه بسیار مشکل‌تر از کمینه کردن مجموع مربعات

نیمرخ است. ولی خوشبختانه مکان هندسی کمینه‌ها: $\theta_p^*(\theta_p)$ (یعنی اثر نیمرخ پسین) به طور اساسی مساوی با $(\theta_p, \bar{\theta}_p)$ (اثر درست نمائی) است، زیرا جمله $|V^T V|^{1/N}$ به طور معمول بسیار آهسته‌تر از جمله $S(\theta)$ تغییر می‌کند. بنابراین ارزیابی چگالی پسین در امتداد اثر درست نمائی ساده است، همچنین طرحهای تولید شده توسط تصویر ناحیه‌های HPD به کمک روشهای پیوست شماره ۶ امکان‌پذیر است.



نمودار ۱۶-۶- ناحیه‌های ۸۰ و ۹۵ درصدی HPD (خط‌ممتد) و ناحیه‌های درست‌نمائی متناظرشان (نقطه‌چین) برای پارامترهای BOD

از دید نظری، استنباط حاشیه‌ای بیزی سر راست است، تابع اولیه چگالی پسین به سادگی بر روی پارامترهای اغتشاش، درست مانند حذف کردن σ به دست می‌آید. اگر θ_1 پارامتر تکی مورد نظر و θ_{-1} نشان‌دهنده پارامترهای اغتشاش باشد، چگالی حاشیه‌ای θ_1 به صورت زیر است:

$$p_{\theta_1}(\theta_1) \propto \int p_{\theta}(\theta_1, \theta_{-1}^T) d\theta_{-1}$$

در این روش حذف مؤلفه‌های θ ، اغلب نیاز به یک مقدار احتمالی تابع اولیه گیری است، زیرا، تقریب‌ها بر مبنای شرایط چگالی روی پارامتر مورد نظر به کار رفته بنا شده است. یک تقریب اولیه، مشابه درست نمائی

نیمرخ به شرح زیر است:

$$\int p_{\theta}(\theta_1, \theta_{-1}^T) d\theta_{-1} \propto p_{\theta}(\theta_1, \theta_{-1}^*(\theta_1))$$

در این جا $(\theta_1, \theta_{-1}^*)$ مقداری است که $p_{\theta}(\theta_1, \theta_{-1})$ را روی θ_{-1} برای مقادیر θ_1 حداکثر می‌کند. یعنی فرض

می‌شود که چگالی حاشیه‌ای برای θ_1 ، متناسب با مقدار حداکثر چگالی شرطی بر روی θ_1 است. برای به دست آوردن بازه‌های دقیقتر، می‌توان یک تقریب درجه دوم را به کار برد به طوری که تابع اولیه چگالی توأم با مقدار حداکثر و اندازه‌ای از پراکندگی در حداکثر تعویض شده باشد، که در تیرنی و کادان (۱۹۸۶) بحث شده است.

۳-۶- ناحیه‌های اطمینان دقیق نظریه نمونه‌گیری

روش‌های نظری نمونه‌گیری رگرسیون خطی، قابل تعمیم به فراهم کردن نواحی اطمینان توأم برای پارامترهای رگرسیون غیرخطی است. ما آن را فقط برای تکمیل ارائه می‌دهیم و این شیوه را توصیه نمی‌کنیم. این روش شامل فرض‌هایی به شکل زیر است:

$$H_0: \theta = \theta_0$$

$$H_A: \theta \neq \theta_0$$

فرض مقابل

مطابق الگوهای خطی، آزمون بر مبنای طول‌های نسبی مؤلفه‌های مماسی و قائم بردار باقی‌مانده $Z_0 = y - \eta(\theta_0)$ بنا شده است. در الگوهای خطی، صفحه مماسی مستقل از θ بوده و طول مؤلفه قائم بردار باقی‌مانده مقداری ثابت است. در الگوهای غیرخطی، چون صفحه مماس با θ تغییر می‌کند، در نتیجه دارای طول مؤلفه قائم است.

حتی در یک الگوی غیرخطی، این آزمون، یک آزمون نااریب خیلی قوی موضعی از فرض‌ها را فراهم می‌کند. و تحت فرضهای الگو، ناحیه اطمینان زیر یک ناحیه اطمینان $1 - \alpha$ دقیق است.

$$\frac{\|Q_1^T(\theta)z(\theta)\|^2 / P}{\|Q_2^T(\theta)z(\theta)\|^2 / (N - P)} \leq F(P, N - P; \alpha) \quad (9-6)$$

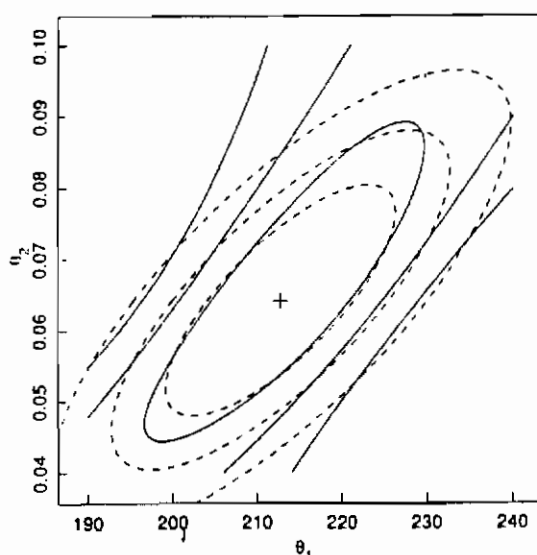
در رابطه (۹-۶) عبارت‌های $Q_1(\theta)$ و $Q_2(\theta)$ قسمت‌های متعامد تجزیه QR بردار $V(\theta)$ (مشتق ماتریس بر حسب θ) است. هرگاه یک برآورد واریانس مستقل s_r^2 با ν_r درجه آزادی وجود داشته باشد، یک شکل جانشینی از ناحیه اطمینان به صورت زیر خواهد بود:

$$\|Q_1^T(\theta)z(\theta)\|^2 \leq P s_r^2 F(P, \nu_r; \alpha)$$

مثال: پرومایسین ۱۹

نمودار ۱۷-۶- قسمتی از ناحیه اطمینان دقیق ۸۰، ۹۵، ۹۹ درصدی پارامترهای پرومایسین را نشان می‌دهد. ناحیه ۸۰٪ بیضوی کامل و به طور جالبی در محدوده برآورد کمترین مربعات $\hat{\theta}$ متمرکز شده است.

ولی نواحی ۹۹،۹۵ درصدی رفتار بسیار بدی دارند. هیچ ناحیه‌ای بسته به نظر نمی‌رسد. با مقایسه نمودار (۱۷-۶) با (۱-۶) و (۱۵-۶) دیده می‌شود که ناحیه‌های اطمینان بزرگتر و رفتار کمتری نسبت به ناحیه‌های درست نمایی یا *HPD* متناظر دارند. حقیقت این است، که ناحیه‌های اطمینان نزدیک به سطح‌های اطمینان متوسط برای این مثال خوش - رفتار نیستند، پرداخت خسارت در مقابل به کارگیری ناحیه‌های اطمینان دقیق است.

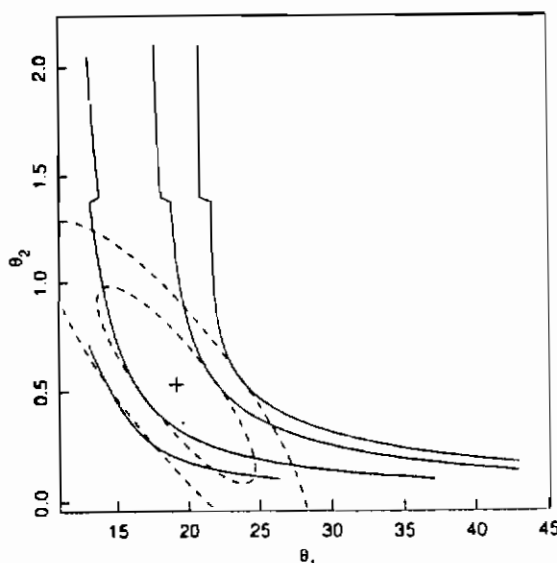


نمودار ۱۷-۶- نواحی اطمینان اسمی ۸۵، ۹۵ و ۹۹ درصدی (خط پر) و تقریب خطی بیضوی (خط فاصله) برای پارامترهای پرومابیسین.

مثال ۱۳: BOD

ناحیه‌های اطمینان دقیق ۸۰ و ۹۵ درصدی داده‌های *BOD* در نمودار (۱۸-۶) نشان داده شده است. بار دیگر دیده می‌شود که منحنی‌های موجود در سطح‌های اطمینان میانی باز بوده و رفتار بدی را نسبت به منحنی‌های درست نمایی و *HPD* دارند. شانه‌های واقع بر منحنی‌ها در نزدیکی، $\theta_2 = 1.4$ یک محصول حاصل از برنامه منحنی کردن نیست و به ظاهر یک چهره ذاتی از منحنی هاست. همان گونه که در بیل (۱۹۶۰) خاطر نشان شده است، ناحیه‌های اطمینان نظریه نمونه‌گیری دارای خواص دلخواه نیستند. زیرا، آنها توسط مقادیری از یک نسبت، که در آن صورت و مخرج کسر هر دو با θ تغییر

می‌کند به دست آمده است. نسبت موجود در رابطه (۹-۶) می‌تواند کوچک باشد، که خود به علت کوچکی مؤلفه مماسی یا بزرگی مؤلفه قائم است. هنگامی که رویه انتظار خم می‌شود، بیشتر اوقات در زیر مقدار بحرانی - برای نقاطی که خیلی از مقادیر مجموع مربعات دوراند - قرار می‌گیرد. زیرا صفحه مماسی کج شده است.



نمودار ۱۸۶- نواحی اطمینان ۸۰ و ۹۵ درصدی (خط پر) و تقریب خطی بیشوی (خط فاصله) برای پارامترهای BOD

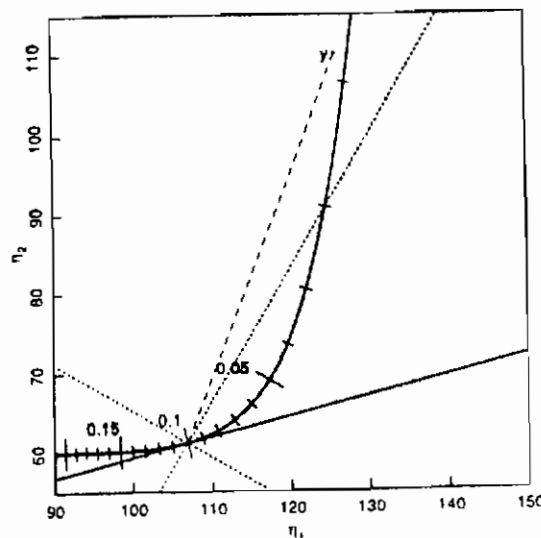
مثال : رانفور ۷

آموزنده است که ناحیه‌های اطمینان دقیق را از نظر هندسی به طور مشروح بررسی کنیم. در مثال دو حالتی رانفور، یک ناحیه ۵۰٪ پارامتر θ به صورت مجموعه‌ای از مقادیر پارامترهای θ ، که در آنها نسبت F از مقدار $1 = f(1, 140/50)$ کمتر است تعریف می‌شود. یعنی نقطه θ^0 در ناحیه اطمینان ۵۰٪ قرار می‌گیرد. این در صورتی است که زاویه‌ای که بردار باقی مانده با خط مماسی می‌سازد از 45° بیشتر شود. برای این مثال، ناحیه شامل مقادیر نزدیک به نقطه کمترین مربعات $0.832/0.1$ است. همچنین شامل مقادیر نزدیک به $0.1/1$ نیز هست. نمودار (۱۹-۶) نشان‌دهنده شرایطی برای $0.1/1 = \theta^0$ است. که در آن، زاویه میان بردار باقی مانده و خط مماس حدود 54° است. (ناحیه سایه دار محدود به خطهای 45° بیان‌کننده ناحیه حذفی بردارهای باقی مانده در $0.1/1 = \theta^0$ است).

در حقیقت رسم نسبت F در مقابل θ ، مطابق نمودار (۶-۲۰)، نشان می‌دهد که نسبت F در محدوده θ ابتدا به حداقل می‌رسد، سپس به حداکثری رسیده، آن‌گاه در نزدیکی $0/1$ به حداقل دیگری می‌رسد. و در حالتی که $\theta \rightarrow \infty$ میل کند، کوچک باقی می‌ماند. بعضی از بازه‌های اطمینان (به طور دقیقتر مجموعه‌های اطمینان) حاصل از این طریق در جدول (۶-۱) ارائه شده است.

جدول ۶-۱- مجموعه اطمینان برای مثال دو حالتی رانفورد.

Confidence Level (%)	Set
50	[0.0076, 0.0091] and [0.0813, 0.3869]
80	[0.0058, 0.0111] and [0.0475, ∞]
90	[0.0032, 0.0154] and [0.0302, ∞]
95	[0, ∞]

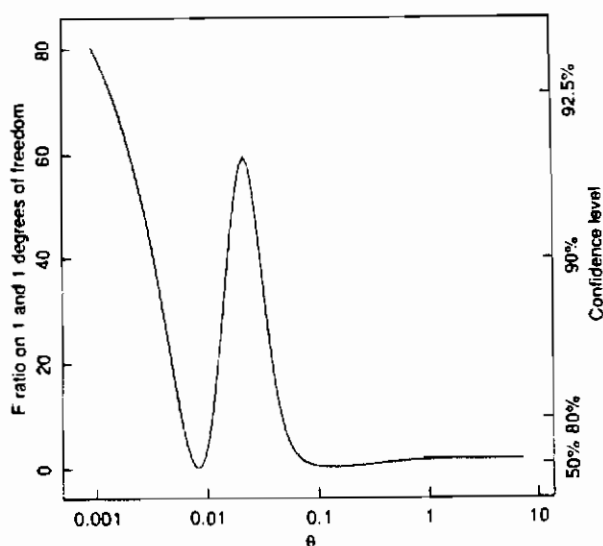


نمودار ۶-۱۹- آزمون مربوط به محاسبه این که آیا $\theta = 0/1$ شامل فاصله اطمینان ۵۰٪ داده‌های دو حالتی رانفورد هست یا خیر؟ خط ممند پررنگ منحنی انتظار، خط ممند کم رنگ مماس در $\eta(0/1)$ است. خطهای نقطه چین در 45° به طرف مماس، حدود ناحیه (سایه دار) را برای بردارهای باقی مانده در $\theta = 0/1$ مشخص می‌کند. چون بردار باقیمانده (خط - فاصله) یک زاویه‌ای بیشتر از 45° را نسبت به مماس ایجاد می‌کند، $\theta = 0/1$ در مجموعه اطمینان ۵۰٪ قرار نمی‌گیرد.

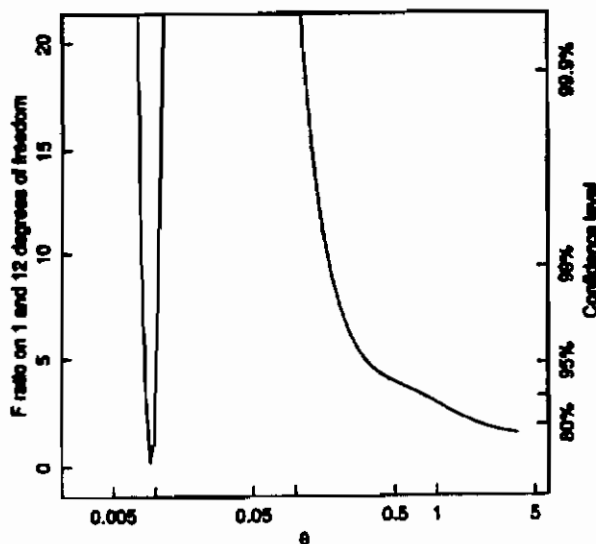
ممکن است محاسبه بازه‌های اطمینان برای مجموعه داده‌ها در دو حالتی، معقول به نظر نرسد، زیرا، فقط یک درجه آزادی برای باقی مانده‌ها وجود دارد. ولی رفتار مشابهی با مجموعه کامل داده‌ها رخ می‌دهد. نسبت‌های F در نمودار (۶-۲۱) رسم شده‌اند. که دارای یک حداقل در $\hat{\theta} = 0.009426$ بوده، سپس به یک حداکثری می‌رسد، آنگاه با $\theta \rightarrow \infty$ کاهش می‌یابد و مجموعه‌های اطمینانی مطابق جدول (۶-۲) را تولید می‌کند. دیده می‌شود که حتی برای یک الگوی ساده تک پارامتری، ناحیه اطمینان دقیق می‌تواند شامل قسمت‌های جدائی باشد. این قسمت‌ها شامل مقداری از پارامتر است، که بردارهای باقی مانده‌هایشان بسیار طولی‌تر از بردار باقی مانده در $\hat{\theta}$ است. به علاوه، حتی بدون تولید ناحیه‌های اطمینان در قسمت‌های جدا، این روش نشان دهنده مقادیر نامناسب پارامتر در مجموعه اطمینان است.

جدول ۶-۲. مجموعه اطمینان برای داده‌های زانفورد.

Confidence Level (%)	Set
50	{0.0076, 0.0091} and [0.0813, 0.3869]
80	[0.0058, 0.0111] and [0.0475, ∞]
90	[0.0032, 0.0154] and [0.0302, ∞]
95	[0, ∞]



نمودار ۶-۲. رسم نسبت F در مقابل θ برای مثال در حالتی زانفورد.

نمودار ۲۱-۶- رسم نسبت F در مقابل θ برای داده‌های رانفورد

پیکربندی استنباط حاشیه‌ای با کاربرد نظریه نمونه‌گیری مشکل است. زیرا روش ساختن ناحیه‌های اطمینان توأم یا حاشیه‌ای برای پارامترها در یک الگوی خطی قابل تعمیم به الگوهای غیر خطی نیست. بجز هنگامی که غیر خطی شرطی قابل کشف باشد (هامیلتون، ۱۹۸۶). مطابق توصیف بخش (۱-۲-۳)، برای الگوهای خطی، روش شامل تجزیه بردار باقی‌ماند (برای یک نقطه نمایش دهند و در زیر صفحه تعریف شده به ازاء $\beta_2=c$) به سه مولفه است: یکی عمود بر صفحه انتظار، دیگری در صفحه انتظار و عمود بر زیر صفحه و سومی موازی زیر صفحه است. برای یک الگوی خطی، رویه انتظار و زیر رویه هر دو به علت محدودیتی مانند $\theta_2=c$ ، غیرخطی‌اند و تجزیه کلی که سه مؤلفه متعامد را ارائه نماید وجود ندارد. از دید نظری، ناحیه‌های اطمینان حاشیه‌ای قابل محاسبه‌اند، ولی باید یک توزیع مرجع برای هر الگوی هر مجموعه داده‌ها و هر مقدار پارامتر به دست آورد. بنابراین راه مستقیمی برای به دست آوردن ناحیه‌های اطمینان حاشیه‌ای با به کارگیری توزیع‌های استاندارد (F یا t) وجود ندارد.

هنگامی شیوه حاصل از الگوهای خطی قابل کاربرد است، که پارامترهای خطی شرطی وجود داشته باشند. اگر الگو به یک الگو خطی با فرض این که زیر مجموعه‌ای از پارامترها ثابت نگه داشته شده‌اند، تبدیل شود، آن‌گاه ناحیه‌های اطمینان دقیق برای پارامترهای غیر خطی قابل محاسبه است. برای مثال در الگوی:

$$f(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 e^{0.3x}$$

هنگامی که θ_3 ثابت فرض شود، به الگویی خطی تبدیل می‌شود. بنابراین بازه‌های اطمینان برای θ_3 به کمک توزیع t قابل محاسبه است. این موضوع در هالپیرین (۱۹۶۳) و ویلیامز (۱۹۶۲) توصیف شده است.

۴-۶- مقایسه درست نمائی، بیزی و شیوه‌های نظریه نمونه‌گیری

چهار روش برای خلاصه کردن ناحیه‌های استنباط توأم و حاشیه‌ای معرفی شده در فصل دوم برای تقریب خطی را مورد بحث قرار دادیم. در این بخش نمودار t نیم‌رخ، نمودار زوج نیم‌رخ، روش‌های بیزی توأم و حاشیه‌ای HPD و روش‌های نظریه نمونه‌گیری ارائه شده‌اند. در کاربرد، روشهای تقریب خطی ساده‌ترین هستند. اکثر برنامه‌ای رایانه‌ای رگرسیون غیر خطی، تولید خطاهای استاندارد تقریب خطی برای پارامترها و تولید ماتریس همبستگی تقریبی را برای پارامترها به همراه برآورد پارامترها انجام می‌دهند. اصلی‌ترین خسارت تقریبهای خطی این است، که برقراری تقریب روی ناحیه مورد نظر شناخته شده نیست. این تقریب شامل هر دو فرض مسطح بودن و مختصات یکنواخت است، به طوری که یکی یا هر دوی آن‌ها می‌تواند برقرار نباشند. این مطلب در فصل آینده بررسی می‌شود، که به طور معمول فرض یکنواختی مختصات است. شیوه‌های دیگر برای استنباط، تولید ناحیه‌های توأمی می‌کنند که به وسیله منحنی‌های میزان تعریف می‌شوند. محاسبه نمایش منحنی‌های دقیق و با دقت در حالت $P > 2$ بسیار گران است. ولی نمایش نمودار t نیم‌رخ، اثرهای نیم‌رخ و طرح‌های زوج نیم‌رخ عملی‌تر است. این شیوه نیازمند به مقدار کمی محاسبه‌های اضافی در روش تقریب خطی دارد. با این وجود اطلاعات ارزشمندی را در رفتار ناحیه‌های توأم حاشیه‌ای ارائه می‌کند. خوشبختانه، محاسبه‌ها فقط نیازمند تعدیل کمی در برنامه‌های غیر خطی استاندارد است. سطح اطمینان مربوط به نواحی درست نمایی به خوبی تعریف نشده است. ولی برعکس در بازه‌های تقریب خطی، ناحیه‌های درست نمائی فقط نیازمند فرض مسطح بودن است.

همچنین، امتحان کردن ناحیه‌های تقریب توأم و حاشیه‌های HPD ، اطلاعات بسیار مهمتری از تقریب خطی فراهم می‌کنند. تابع چگالی پیش بیزی تمایل منحنی‌های درست نمائی را به باز بودن در حالی که تابع الگو به مجانبی میل می‌کند تخفیف داده و بازه‌های بیزی رضایت بخش‌تری را می‌سازد. احتمال مربوط به بازه‌های HPD ، بر مبنای تقریب در رویه انتظار مشابه شیوه درست نمائی بنا شده، که فقط فرض مسطح بودن را نیاز دارد. شیوه بیزی، هویت قوی‌تری در محتوای احتمالی یا سطح یک ناحیه نسبت به شیوه درست نمائی دارد.

بیان این نکته مهم است که، چگالی پیشین به عامل بندی بستگی ندارد. ولی به طرح به کار برده شده توسط محقق بستگی دارد. همان گونه که در نمودار (۶-۲-۱) نمایش داده شده، هر چند احساس خوبی را القاء

می‌کند، ولی تجربه علمی در نبود دانش انجام نگرفته است و در پیشین، بیانگر دانش جاری از آزمایش در دورن طرح است.

شیوه نظریه نمونه گیری که نسبت طول‌های مؤلفه‌های بردار باقی‌مانده را به جای مجموع طول بردار باقی‌مانده برای محاسبه ناحیه به کار می‌برد، می‌تواند از ناحیه‌هایی که شامل مقادیر نامناسب پارامتر است نتیجه شود. به علاوه، مشکل تعریف ناحیه‌های حاشیه‌ای برای حالت کلی، این شیوه را به طور کامل غیر مفید ساخته است. در پایان باید گفت: هنگامی که یک رگرسیون غیرخطی شکل می‌گیرد. توصیه می‌شود، که خطاهای استاندارد و تقریب خطی، همبستگی‌ها، نمودار t نیم‌رخ و طرح‌های نیم‌رخ و طرح‌های زوج نیم‌رخ برای تابع درست نمائی یا چگالی پسین بیزی تولید شود.

تمرین

۱-۶ برنامه‌ای به زبان دلخواه خود چنان بنویسید که t نیم‌رخ و رسم‌های اثر نیم‌رخ را تولید کند. زیر برنامه غیر خطی مسأله (۱-۲) را به کار ببرید.

۲-۶ ضرب‌های لاگرانژ را برای تحلیل این که مقدار t نیم‌رخ را برای یک پارامتر در الگوی خطی می‌توان به صورت معادله (۲-۶) نوشت به کار ببرید.

۳-۶ (۱) با به کارگیری داده‌ها و الگوی پیوست بخش ۴A-۱، t نیم‌رخ و نمودارهای اثر نیم‌رخ را برای پارامترها بسازید. آیا این الگو، پارامتری کردن مجموعه داده‌ها را از غیر خطی بودن بدی حفظ می‌کند. (۲) نمودار t نیم‌رخ را برای محاسبه بازه‌های ۹۵، ۷۵، ۵۰ درصدی اسمی پارامترها بکار ببرید.

(۳) نقاط واقع بر روی اثرهای نیم‌رخ متناظر با ۹۵، ۷۵، ۵۰ درصدی سطح اطمینان اسمی در صفحه (θ_1, θ_2) را رسم کنید. اطلاعات مربوط به مماس منحنی‌ها در این نقاط را به کار ببرید. ناحیه‌های توأم را رسم کنید.

(۴) نمودار خود را با منحنی‌های مجموع مربعات دقیق حاصل از مسأله (۲-۶) با تذکر در دقت ترسیم، مقایسه کنید.

۴-۶ داده‌های پیوست ۴ بخش ۴A-۳ و الگوی برازشی در مسأله (۴-۳) را برای ساختن t نیم‌رخ و نمودار اثر نیم‌رخ پارامترها به کار ببرید.

۵-۶ داده‌ها و الگوی پیوست ۴ بخش ۴A-۴ را برای ساختن t نیم‌رخ نمودار اثر نیم‌رخ برای پارامترها به کار ببرید.

(۱) الگوی با عامل مرکزی شده $\frac{1}{x_3}$ به کار ببرید.

(۲) الگو را با به کارگیری $\theta_1 = e^{\phi_1}$ و $\theta_2 = e^{\phi_2}$ عامل بندی دوباره کنید، و مقادیر t نیم‌رخ را رسم کنید. آیا محاسبه دوباره مقادیر t یا مقادیر اثر مورد نیاز است؟

۶-۶ (۱) الگو و داده‌های پیوست ۴ بخش ۴A-۵ را برای ساختن t نیم‌رخ و رسم‌های اثر نیم‌رخ برای پارامتر به کار ببرید.

(۲) با به کارگیری $\theta_2^{-\theta_3 x} = e^{-\theta_3(x-\phi_2)}$ در بخش (۱)، الگو را عامل بندی دوباره کنید. آیا نیاز به محاسبه دوباره مقادیر t یا مقادیر اثر است؟ کدام یک؟

(۳) تغییری در اثرهای این تبدیل بر روی نمودار t نیم‌رخ و بر روی رسم‌های اثر نیم‌رخ ارائه کنید.

۷-۶ (۱) منحنی‌های چگالی پیشین بیزی الگوی نمائی افزایشی مثال ۲ BOD را با کاربرد طرحی با

- $x = (2, 10)^T$ محاسبه و رسم کنید. (این یک طرح آزمایش بهینه برای الگو با فرض این که مقدار واقعی پارامتر $\theta_2 = 0.5$ و $x_{\max} = 10$ است) ناحیه مشابهی برای θ مطابق نمودار (۶-۱۴) به کار ببرید.
- (۲) این تابع پیشین را با تابع پیشین نمایش داده شده در نمودار (۶-۱۴) مقایسه کنید.
- (۳) منحنی‌های پیشین متناظر با n تکرار از طرح بهینه را که $n = 2, 4, 8$ ، محاسبه و رسم کنید. تفسیری در اثر افزایش تعداد تکرارها بیان کنید.

فصل ۷

اندازه‌های انحنای غیرخطی بودن

«بزرگترین مصیب علم، نابود کردن فرضی زیبا توسط حقیقتی زشت است».

توماس هاکسلی

در فصل دوم، بازه‌های استنباط تقریب خطی و نواحی پارامترها در الگوهای رگرسیون غیر خطی را بررسی کردیم. در بخش ششم، بسط روش‌های خلاصه کردن استنباط مربوط به پارامترها را بررسی نمودیم. یک فرض مهم به کار رفته در بسط این روش، مسطح بودن رویه انتظار است (فرض مسطح بودن) به طوری که صفحه مماس یک تقریب دقیق را فراهم کند. در این فصل، اندازه‌های انحنای نسبی غیرخطی بودن شرایط یک برآورد را بسط می‌دهیم و بحث می‌کنیم که چگونه آنها می‌توانند برای نشان دادن کفایت تقریب خطی در حالت ویژه به کار روند. سپس، اندازه‌های انحنای ترکیب ۶۷ مجموعه داده - الگوی واقعی به کار می‌بریم تا چند ایده جدی برای دو نوع غیر خطی بودن را در عمل به دست آوریم. در پایان مشخصه‌های مستقیم بیشتری را در غیر خطی بودن ذاتی، (برای فراهم کردن شناخت فرض مسطح بودن) مورد بحث قرار می‌دهیم.

بنابر بحث (۵-۲)، نواحی استنباط تقریب خطی می‌تواند از تقریب سری تیلور مرتبه یک بر تابع انتظار در $\hat{\theta}$ به دست آیند. ناحیه $I-\alpha$ ، به شرح زیر است:

$$(\theta - \hat{\theta})^T \hat{V}^T \hat{V} (\theta - \hat{\theta}) \leq P s^2 F(P, N-P : \alpha) \quad (۱-۷)$$

که در آن \hat{V} ماتریس مشتق در $\hat{\theta}$ است.

به طور هندسی، ناحیه استنباط تقریب خطی (۱-۷) فرض می‌کند که در روی ناحیه مورد نظر، تصویر θ بر

$\eta(\theta)$ برابر است با :

$$\hat{\eta} + \hat{V}(\theta - \hat{\theta}) \quad (۱-۷)$$

این تقریب، که توسط ییل (۱۹۶۰) خاطر نشان و در بخش (۵-۲) بحث شد، هنگامی خوب است که رویه انتظار به اندازه کافی مسطح باشد تا صفحه مماسی بتواند جانشین آن شود. اگر خطهای مستقیم و هم فضای موازی در فضای پارامتر به توی خطهای به تقریب مستقیم و هم فضای موازی در رویه انتظار، تصویر شوند، در این حالت، می توان فرض کرد که ناحیه استنباط رویه انتظار کراهی به شعاع $\sqrt{Ps'F(P, N-P, \alpha)}$ روی صفحه مماس است، به طوری که تصویر صفحه مماس بر فضای پارامتر یک خط باشد.

برای محاسبه چگونگی مسطح بودن رویه انتظار و چگونگی یکنواخت بودن خطوط پارامتر واقع بر صفحه مماس، از مشتقات دوم تابع انتظار استفاده می کنیم. تا اندازه انحنا ذاتی و اثرات غیر خطی بودن پارامترها به دست آیند. همچنین، انحناها می تواند در عامل بندی دوباره رویه انتظار به کار روند تا الگوهای که دارای نواحی استنباط پارامتر تقریب خطی بیشتری هستند، در نظر گرفته شوند.

۷-۱- بردهای سرعت و شتاب

یکی از وجوه اساسی الگوهای خطی این است که مشتقات دوم و مراتب بالاتر رویه انتظار نسبت به پارامترها صفر اند. در نتیجه منطقی است که برای اندازه گیری غیر خطی بودن یک الگو به کمک مشتق دوم تابع انتظار تلاش کنیم (بیتر ۱۹۷۸ و بیتر و واتر، ۱۹۸۰ و ییل، ۱۹۶۰). برای مشخص شدن، بالا نویس های نقطه ای را برای تفکیک بین مشتقات اول و دوم در نظر می گیریم. بنابراین برای الگوی غیرخطی $\eta(\theta)$ ، ماتریس مشتق $N \times P$ به صورت \dot{V} بادرایه های زیر نوشته می شود.

$$\{\dot{V}\}_{np} = \frac{\partial f(x_n, \theta)}{\partial \theta_p} \quad (۷-۲)$$

درایه مشتق دوم $N \times P \times P$ به صورت \ddot{V} نوشته می شود، که مؤلفه های آن عبارت اند از:

$$\{\ddot{V}\}_{npq} = \frac{\partial^2 f(x_n, \theta)}{\partial \theta_p \partial \theta_q} \quad (۳-۷)$$

در (۷-۲) و (۳-۷)، n از ۱ تا N ، p و q از ۱ تا P تغییر می کنند. به صورت ماتریسی داریم:

$$\dot{V} = \frac{\partial \eta}{\partial \theta^T}$$

که هر سطر \dot{V} گرادیان یک مختص $\eta(\theta)$ نسبت به θ است. به طور جانشینی ممکن است \dot{V} را شامل بردار

\dot{V}_p ، $p = 1, 2, \dots, P$ بگیریم.

همچنین داریم :

$$\ddot{V} = \frac{\partial^2 \eta}{\partial \theta \partial \theta^T}$$

که هر وجه \ddot{V}_n از \ddot{V} ، یک ماتریس کامل مشتق دوم $p \times p$ یا هسیان یک درایه از $\eta(\theta)$ نسبت به θ است.

براین اساس ممکن است آرایه هسیان را شامل بردار \ddot{V}_{pq} ، $p, q = 1, 2, \dots, P$ در نظر بگیریم.

در حقیقت بردارهای \dot{V} عبارت‌اند از: بردارهای مماس که معمولاً آنها را بردارهای سرعت نیز می‌گویند.

زیرا، نرخ تغییر η نسبت به هر پارامتر را نشان می‌دهد. همچنین، بردارهای \ddot{V} را بردارهای شتاب می‌گویند. چون

نرخ تغییر بردار سرعت را نسبت به پارامترهای نشان می‌دهد. یعنی:

$$\ddot{V}_{pq} = \frac{\partial \dot{V}_p}{\partial \theta_q}$$

مثال : پروماینس ۲۱

برای تابع انتظار میشلیز - متن، یعنی:

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 x}{\theta_2 + x}$$

بردارهای واقع در \dot{V} عبارت‌اند از:

$$(\dot{V})_{n1} = \frac{x_n}{\theta_2 + x_n}$$

$$(\dot{V})_{n2} = \frac{-\theta_1 x_n}{(\theta_2 + x_n)^2}$$

این توابع در هر مقدار x_n برای زوج پارامتر خاص θ ، ماتریس \ddot{V} حاصل می‌شود.

اعضای \ddot{V} را نیز می‌توان به شرح زیر بدست آورد:

$$(\ddot{V})_{n11} = 0$$

$$(\ddot{V})_{n12} = \frac{-x_n}{(\theta_2 + x_n)^2}$$

$$(\ddot{V})_{n21} = (\ddot{V})_{n12}$$

$$(\ddot{V})_{n22} = \frac{2\theta_1 x_n}{(\theta_2 + x_n)^3}$$

برای داده‌های پروماینس، غلظت و بردارهای سرعت وشتاب در $\hat{\theta}$ ، در جدول (۱-۷) داده شده است.

Conc.	Velocity		Acceleration		
	\dot{v}_1	\dot{v}_2	\ddot{v}_{11}	\ddot{v}_{12}	\ddot{v}_{22}
0.02	0.237812	-601.458	0	-2.82773	14 303.4
0.02	0.237812	-601.458	0	-2.82773	14 303.4
0.06	0.483481	-828.658	0	-3.89590	13 354.7
0.06	0.483481	-828.658	0	-3.89590	13 354.7
0.11	0.631821	-771.903	0	-3.62907	8 867.4
0.11	0.631821	-771.903	0	-3.62907	8 867.4
0.22	0.774375	-579.759	0	-2.72571	4 081.4
0.22	0.774375	-579.759	0	-2.72571	4 081.4
0.56	0.897292	-305.807	0	-1.43774	980.0
0.56	0.897292	-305.807	0	-1.43774	980.0
1.10	0.944936	-172.655	0	-0.81173	296.6
1.10	0.944936	-172.655	0	-0.81173	296.6

جدول ۱-۷. بردارهای مماس و شتاب بر داده‌های پروماینس. در $\hat{\theta} = (212.7, 0.0641)^T$

۲-۱-۱- شتاب‌های قائم و مماس

بردارهای شتاب قابل تجزیه به دو مؤلفه در صفحات مماس و قائم‌اند. زیرا، اینها $\frac{p(p+1)}{2}$ بردار شتابی مجزا هستند، که زیر فضایی با حداکثر بعد $\frac{p(p-1)}{2}$ است (هامیلتون، ۱۹۸۰). در بعضی حالات بعد ترکیبی، کسی بیشتر از p است، که آن را $p+p'$ می‌گویند.

مثال: پروماینس ۲۲

در الگوی میشلیز - منتن، $\ddot{v}_{11}=0$. زیرا θ_1 یک پارامتر خطی شرطی است. این خطی شرطی سبب می‌شود که بردار شتاب $\ddot{v}_{12}=\ddot{v}_{21}$ یک مضرب ساده‌ای از \dot{v}_2 باشد، به طوری که تنها بردار شتابی که در صفحه مماسی قرار ندارد، بردار \ddot{v}_{22} است. فضای مماس دارای بعد ۲، فضای شتابی بعد ۲ و فضاهای ترکیبی مماسی و شتابی دارای بعد ۳ است.

در نمودار (۱-۷) تصویر بردارهای مماسی و شتابی به توی فضای توأم مماس و شتاب را برای داده‌های پروماینس نشان داده‌ایم. برای فراهم کردن نموداری روشنتر، مقیاس پاسخ را $\frac{1}{100}$ و مقیاس غلظت را ده برابر کرده‌ایم. توجه شود که فقط بردار \ddot{v}_{22} دارای مؤلفه‌ای خارج از صفحه مماس بوده و این مؤلفه کوچک است. برای محاسبه مؤلفه‌های قائم و مماس بردار شتاب، بردارهای شتاب را به توی صفحه مماس و فضای قائم را بر فضای مماس که توسط بردارهای شتاب تولید شده است، تصویر می‌کنیم. این عمل به سادگی با جادادن $\frac{p(p+1)}{2}$ بردار شتاب غیر زائد در ماتریس \ddot{W} و ترکیب کردن آنها با بردارهای مماس در \dot{V} ، به شرح

زیر امکان پذیر است.

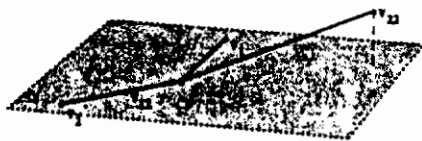
$$D = (\dot{\mathbf{V}}, \ddot{\mathbf{W}}) \quad (۴-۷)$$

سپس، یک تجزیه QR را روی D به صورت $D = (Q_1 | Q'_1 | Q_2)R$ تشکیل داده و آرایه‌های $\dot{\mathbf{V}}$ را در $(Q_1 | Q'_1)^T$ ضرب می‌کنیم تا عبارت زیر به دست آید:

$$\ddot{\mathbf{A}} = [(Q_1 | Q'_1)^T | \dot{\mathbf{V}}] \quad (۵-۷)$$

در این جا Q_1 اولین p ستون Q و Q'_1 و P' ستون بعدی Q است. این عمل یک آرایه شتاب فشرده $(P+P') \times P \times P$ از $\ddot{\mathbf{A}}$ را با P وجه در فضای مماسی و P' وجه در فضای شتاب فراهم می‌کند. (کروشه نشانگر این است که جمع روی زیرنویس صورت کسر است. یعنی: اعضای موجود در وجه n ام و سطر p ام و ستون q ام از ضرب $A = [B][C]$. در این رابطه B ماتریسی $N_1 \times N_2$ و C آرایه‌ای $N_2 \times N_3 \times N_4$ و A آرایه‌ای $N_2 \times N_3 \times N_4$ است).

$$\{\mathbf{A}\}_{npq} = \sum_{i=1}^{N_2} \{\mathbf{B}\}_{ni} \{\mathbf{C}\}_{ipq}$$



نمودار ۱-۷- تصویر بردارهای مقیاس‌بندی شده شتاب و سرعت برای داده‌های پروماینس در $\hat{\theta} = (212.7, 0.0641)^T$ ، در فضای سه بعدی تولید شده توسط این بردارها. صفحه مماسی سایه‌دار است.

مثال : پروماینس ۲۳

برای نشان دادن این محاسبات، بردارهای سرعت و شتاب مثال پروماینس ۲۱، جدول (۱-۷) را انتخاب نموده تا ماتریس D را تشکیل دهیم. با تشکیل تجزیه QR بر D، داریم:

$$\mathbf{R}_1 = [(Q_1 | Q'_1)^T][D] = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2.44 & 1568.7 & 0 & 7.378 & -16185.7 \\ 0 & 1320.3 & 0 & 6.210 & -25030.4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 8369.1 \end{bmatrix}$$

ماتریس 2×2 سمت چپ بالا \mathbf{R}_{11} ، ساده شده $\hat{\mathbf{R}}_1$ در تجزیه QR بردار $\dot{\mathbf{V}}$ است (مثال پروماینس ۷). ماتریس 2×3 سمت راست بالا (\mathbf{R}_{12}) ، تصویر بردار سرعت را به توی صفحه مماس $[Q^T][\dot{\mathbf{W}}]$ ارائه می‌کند.

ماتریس 1×3 سمت راست پایین (R_{22})، تصویر آن بخشی از بردار شتاب را که عمود بر فضای مماس، ولی موجود در فضای تولید شده توسط بردارهای سرعت باشد، را نشان می‌دهد $[Q^T][W]$. در این مثال این فضای اضافی دارای بعد $P=1$ است.

با قراردادن درایه‌های R_{12} و R_{22} در داخل آرایه‌ای $3 \times 2 \times 2$ از شتاب \ddot{A} داریم.

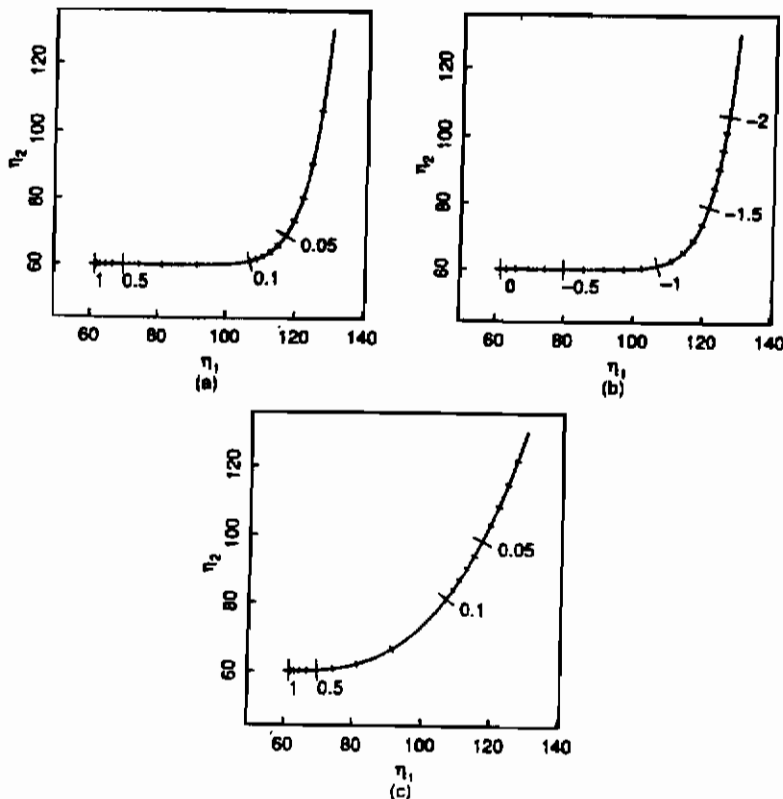
$$\ddot{A} = \begin{bmatrix} 0 & 7.378 \\ 7.378 & -16185.7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 6.210 \\ 6.210 & -25030.4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 8369.1 \end{bmatrix}$$

این‌ها مقادیری هستند که مطابق مثال پرومیسین ۲۲ مقیاس‌بندی شده تا نمودار (۱-۷) تولید شود. مقدار گسترش بردار شتاب که خارج از صفحه مماس قرار می‌گیرد، سیزان انحراف رویه انتظار از صفحه و در نتیجه غیر مسطح بودن رویه انتظار را مشخص می‌کند. ما این غیر مسطح بودن را غیر خطی بودن ذاتی می‌نامیم. زیرا بنابر بحث فصل دوم، بستگی به عامل بندی انتخاب شده تابع انتظار ندارد. ولی فقط به طرح و بسط تابع انتظار بستگی دارد. تصویر بردارهای شتاب در صفحه مماس اجباراً بستگی به عامل بندی دارند و مقدار نایکخواختی خطهای پارامتر صفحه مماس را اندازه‌گیری می‌کند. این نایکخواختی غیر خطی بودن اثرات پارامتر یا به طور ساده‌تر، اثرات پارامتر نامیده می‌شود.

به علت این که مؤلفه‌های موجود در بردار \ddot{A} ، اطلاعات مؤثر بر پارامتر و غیر خطی‌های ذاتی رافراهم می‌کنند، اولین p وجه مربوط به \ddot{A} را به صورت A^0 می‌نویسیم تا نشانگر اثرات پارامتر آرایه شتاب بوده و آخرین P وجه را به صورت A^1 می‌نویسیم تا نشانگر آرایه شتاب ذاتی باشد.

مثال : رانفوردها

در نمودار (۷a-۲)، رویه انتظار (منحنی) $\eta(\theta)$ را از الگوی رانفوردها با طرح $x=(4,41)^T$ و عامل بندی $f=60+70 e^{-x\theta}$ نشان دادیم. علامتهای موجود در روی منحنی انتظار متناظر با: $1/0$ و $1/9$ ، $1/20$ ، $1/40$ ، $1/80$ ، $1/160$ ، $1/320$ ، $1/640$ ، $1/1280$ ، $1/2560$ ، $1/5120$ ، $1/10240$ ، $1/20480$ ، $1/40960$ ، $1/81920$ ، $1/163840$ ، $1/327680$ ، $1/655360$ ، $1/1310720$ ، $1/2621440$ ، $1/5242880$ ، $1/10485760$ ، $1/20971520$ ، $1/41943040$ ، $1/83886080$ ، $1/167772160$ ، $1/335544320$ ، $1/671088640$ ، $1/1342177280$ ، $1/2684354560$ ، $1/5368709120$ ، $1/10737418240$ ، $1/21474836480$ ، $1/42949672960$ ، $1/85899345920$ ، $1/171798691840$ ، $1/343597383680$ ، $1/687194767360$ ، $1/1374389534720$ ، $1/2748779069440$ ، $1/5497558138880$ ، $1/10995116277760$ ، $1/21990232555520$ ، $1/43980465111040$ ، $1/87960930222080$ ، $1/175921860444160$ ، $1/351843720888320$ ، $1/703687441776640$ ، $1/1407374883553280$ ، $1/2814749767106560$ ، $1/5629499534213120$ ، $1/11258999068426240$ ، $1/22517998136852480$ ، $1/45035996273704960$ ، $1/90071992547409920$ ، $1/180143985094819840$ ، $1/360287970189639680$ ، $1/720575940379279360$ ، $1/1441151880758558720$ ، $1/2882303761517117440$ ، $1/5764607523034234880$ ، $1/11529215046068469760$ ، $1/23058430092136939520$ ، $1/46116860184273879040$ ، $1/92233720368547758080$ ، $1/184467440737095516160$ ، $1/368934881474191032320$ ، $1/737869762948382064640$ ، $1/1475739525896764129280$ ، $1/2951479051793528258560$ ، $1/5902958103587056517120$ ، $1/11805916207174113034240$ ، $1/23611832414348226068480$ ، $1/47223664828696452136960$ ، $1/94447329657392904273920$ ، $1/188894659314785808547840$ ، $1/377789318629571617095680$ ، $1/755578637259143234191360$ ، $1/1511157274518286468382720$ ، $1/3022314549036572936765440$ ، $1/6044629098073145873530880$ ، $1/12089258196146291747061760$ ، $1/24178516392292583494123520$ ، $1/48357032784585166988247040$ ، $1/96714065569170333976494080$ ، $1/193428131138340667952988160$ ، $1/386856262276681335905976320$ ، $1/773712524553362671811952640$ ، $1/1547425049106725343623905280$ ، $1/3094850098213450687247810560$ ، $1/6189700196426901374495621120$ ، $1/12379400392853802748991242240$ ، $1/24758800785707605497982484480$ ، $1/49517601571415210995964968960$ ، $1/99035203142830421991929937920$ ، $1/198070406285660843983859875840$ ، $1/396140812571321687967719751680$ ، $1/792281625142643375935439503360$ ، $1/1584563250285286751870879006720$ ، $1/3169126500570573503741758013440$ ، $1/6338253001141147007483516026880$ ، $1/12676506002282294014967032053760$ ، $1/25353012004564588029934064107520$ ، $1/50706024009129176059868128215040$ ، $1/101412048018258352119736256430080$ ، $1/202824096036516704239472512860160$ ، $1/405648192073033408478945025720320$ ، $1/811296384146066816957890051440640$ ، $1/1622592768292133633915780102881280$ ، $1/3245185536584267267831560205762560$ ، $1/6490371073168534535663120411525120$ ، $1/12980742146337069071326240823050240$ ، $1/25961484292674138142652481646100480$ ، $1/51922968585348276285304963292200960$ ، $1/103845937170696552570609926584401920$ ، $1/207691874341393105141219853168803840$ ، $1/415383748682786210282439706337607680$ ، $1/830767497365572420564879412675215360$ ، $1/1661534994731144841129758825350430720$ ، $1/3323069989462289682259517650700861440$ ، $1/6646139978924579364519035301401722880$ ، $1/13292279957849158729038070602803445760$ ، $1/26584559915698317458076141205606891520$ ، $1/53169119831396634916152282411213783040$ ، $1/106338239662793269832304564822427566080$ ، $1/212676479325586539664609129644855132160$ ، $1/425352958651173079329218259289710264320$ ، $1/850705917302346158658436518579420528640$ ، $1/1701411834604692317316873037158841057280$ ، $1/3402823669209384634633746074317682114560$ ، $1/6805647338418769269267492148635364229120$ ، $1/13611294676837538538534984297270728458240$ ، $1/27222589353675077077069968594541456916480$ ، $1/54445178707350154154139937189082913832960$ ، $1/108890357414700308308279874378165827665920$ ، $1/217780714829400616616559748756331655331840$ ، $1/435561429658801233233119497512663310663680$ ، $1/871122859317602466466238995025326621327360$ ، $1/1742245718635204932932477990050653242654720$ ، $1/3484491437270409865864955980101306485309440$ ، $1/6968982874540819731729911960202612970618880$ ، $1/13937965749081639463459823920405225941237760$ ، $1/27875931498163278926919647840810451882475520$ ، $1/55751862996326557853839295681620903764951040$ ، $1/111503725992653115707678591363241807529902080$ ، $1/223007451985306231415357182726483615059804160$ ، $1/446014903970612462830714365452967230119608320$ ، $1/892029807941224925661428730905934460239216640$ ، $1/1784059615882449851322857461811868920478433280$ ، $1/3568119231764899702645714923623737840956866560$ ، $1/7136238463529799405291429847247475681913733120$ ، $1/14272476927059598810582859694494951363827466240$ ، $1/28544953854119197621165719388989902727654932480$ ، $1/57089907708238395242331438777979805455309864960$ ، $1/114179815416476790484662877555959610910619729920$ ، $1/228359630832953580969325755111919221821239459840$ ، $1/456719261665907161938651510223838443642478919680$ ، $1/913438523331814323877303020447676887284957839360$ ، $1/1826877046663628647754606040895353774569915678720$ ، $1/3653754093327257295509212081790707549139831357440$ ، $1/7307508186654514591018424163581415098279662714880$ ، $1/14615016373309029182036848327162830196559325429760$ ، $1/29230032746618058364073696654325660393118650859520$ ، $1/58460065493236116728147393308651320786237301719040$ ، $1/116920130986472233456294786617302641572474603438080$ ، $1/233840261972944466912589573234605283144949206876160$ ، $1/467680523945888933825179146469210566289898413752320$ ، $1/935361047891777867650358292938421132579796827504640$ ، $1/1870722095783555735300716585876842265159593655009280$ ، $1/3741444191567111470601433171753684530319187310018560$ ، $1/7482888383134222941202866343507369060638374620037120$ ، $1/14965776766268445882405732687014738121276749240074240$ ، $1/29931553532536891764811465374029476242553498480148480$ ، $1/59863107065073783529622930748058952485106996960296960$ ، $1/119726214130147567059245861496117904970213993920593920$ ، $1/239452428260295134118491722992235809940427987841187840$ ، $1/478904856520590268236983445984471619880855975682375680$ ، $1/957809713041180536473966891968943239761711951364751360$ ، $1/1915619426082361072947933783937886479523423902729502720$ ، $1/3831238852164722145895867567875772959046847805459005440$ ، $1/7662477704329444291791735135751545918093695610918010880$ ، $1/15324955408658888583583470271503091836187391221836021760$ ، $1/30649910817317777167166940543006183672374782443672043520$ ، $1/61299821634635554334333881086012367344749564887344087040$ ، $1/122599643269271108668667762172024734689499129774688174080$ ، $1/245199286538542217337335524344049469378998259549376348160$ ، $1/490398573077084434674671048688098938757996519098752696320$ ، $1/980797146154168869349342097376197877515993038197505392640$ ، $1/1961594292308337738698684194752395755031986076395010785280$ ، $1/3923188584616675477397368389504791510063972152790021570560$ ، $1/7846377169233350954794736779009583020127944305580043141120$ ، $1/15692754338466701909589473558019166040255888611160086282240$ ، $1/31385508676933403819178947116038332080511777222320172564480$ ، $1/62771017353866807638357894232076664161023554444640345128960$ ، $1/125542034707733615276715788464153328322047108889280690257920$ ، $1/251084069415467230553431576928306656644094217778561380515840$ ، $1/502168138830934461106863153856613313288188435557122761031680$ ، $1/1004336277661868922213726307713226626576376871114245522063360$ ، $1/2008672555323737844427452615426453253152753742228491044126720$ ، $1/4017345110647475688854905230852906506305507484456982088253440$ ، $1/8034690221294951377709810461705813012611014968913964176506880$ ، $1/16069380442589902755419620923411626025222029937827928353013760$ ، $1/32138760885179805510839241846823252050444059875655856706027520$ ، $1/64277521770359611021678483693646504100888119751311713412055040$ ، $1/128555043540719222043356967387293008201776239502623426824110080$ ، $1/257110087081438444086713934774586016403552479005246853648220160$ ، $1/514220174162876888173427869549172032807104958010493707296440320$ ، $1/1028440348325753776346855739098344065614209916020987414592880640$ ، $1/2056880696651507552693711478196688131228419832041974829185761280$ ، $1/4113761393303015105387422956393376262456839664083949658371522560$ ، $1/8227522786606030210774845912786752524913679328167899316743045120$ ، $1/16455045573212060421549691825573505049827358656335798633486090240$ ، $1/32910091146424120843099383651147010099654717312671597266972180480$ ، $1/65820182292848241686198767302294020199309434625343194533944360960$ ، $1/131640364585696483372397534604588040398618869250686389067888721920$ ، $1/263280729171392966744795069209176080797237738501372778135777443840$ ، $1/526561458342785933489590138418352161594475477002745556271554887680$ ، $1/1053122916685571866979180276836704323188950954005491112543109775360$ ، $1/2106245833371143733958360553673408646377901908010982225086219550720$ ، $1/4212491666742287467916721107346817292755803816021964450172439101440$ ، $1/8424983333484574935833442214693634585511607632043928900344878202880$ ، $1/16849966666969149871666884429387269171023215264087857800689756405760$ ، $1/33699933333938299743333768858774538342046430528175715601379512811520$ ، $1/67399866667876599486667537717549076684092861056351431202759025623040$ ، $1/134799733335753198973335075435098153368185722112702862405518051246080$ ، $1/269599466671506397946670150870196306736371444225405724811036102492160$ ، $1/539198933343012795893340301740392613472742888450811449622072204984320$ ، $1/1078397866686025591786680603480785226945485776901622899244144409968640$ ، $1/2156795733372051183573361206961570453890971553803245798488288819937280$ ، $1/4313591466744102367146722413923140907781943107606491596976577639874560$ ، $1/8627182933488204734293444827846281815563886215212983193953155279749120$ ، $1/17254365866976409468586889655692563631127772430425966387906310559498240$ ، $1/34508731733952818937173779311385127262255544860851932775812621118996480$ ، $1/69017463467905637874347558622770254524511089721703865551625242237992960$ ، $1/138034926935811275748695117245540509049022179443407731103250484475985920$ ، $1/276069853871622551497390234491081018098044358886815462206500968951971840$ ، $1/552139707743245102994780468982162036196088717773630924413001937903943680$ ، $1/1104279415486490205989560937964324072392177435547261848826003875807887360$ ، $1/2208558830972980411979121875928648144784354871094523697652007751615774720$ ، $1/4417117661945960823958243751857296289568709742189047395304015503231549440$ ، $1/8834235323891921647916487503714592579137419484378094790608031006463098880$ ، $1/17668470647783843295832975007429185158274838968756189581216062012926197760$ ، $1/353369412955676865916659500148583703165496779375123791624321240258523955$



نمودار ۷-۲. رسم رویه انتظار (منحنی) برای مثال رانفورد دو حالتی. در قسمت a، طرح: $T(4,41)$ و پارامتر، پارامتر مرکزی θ است. در قسمت b، طرحی مشابه به کار رفته ولی پارامتر $\phi = \log_{10} \theta$ است. در قسمت c، پارامتر مرکزی θ به کار رفته است. ولی طرح به $T(4,12)$ تغییر یافته است.

توجه شود که منحنی‌های انتظار مساوی‌اند و فقط تغییر اطمینانی از نقاط روی منحنی است. علت این است که منحنی با عامل بندی تغییر نمی‌کند و ما آن را ذاتی غیر خطی نامیدیم. همچنین توجه شود. نقاط هم فضا در فضای ϕ ، هنوز به نقاط ناهم فضا بر روی منحنی انتظار تصویر می‌شوند. ولی، نایکخواختی موجود در فضا بندی η ، به اندازه عامل بندی θ جدی نیست. بنابراین عامل بندی ϕ دارای غیر خطی بودن اثرات پارامتر کوچکتری است.

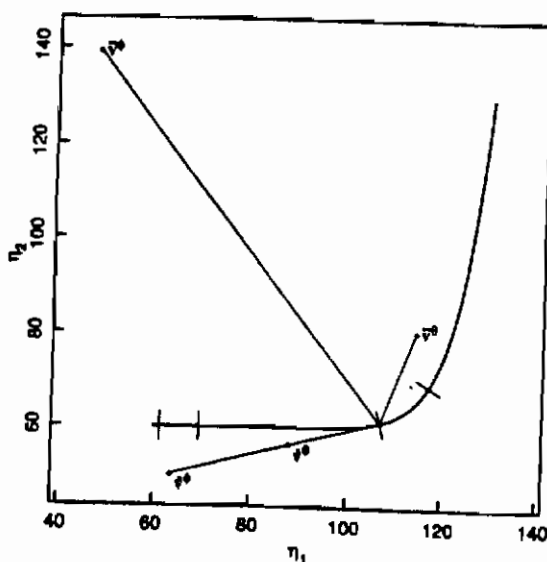
در نمودار (۷-۲c)، رویه انتظار $\eta(\theta)$ الگوی رانفورد با عامل بندی θ و طرح $x = T(4,12)$ ، نشان داده شده است. اصلی‌ترین نکته قابل ذکر این است که: رویه انتظار متفاوت از رویه نمودار (۷-۲a) و (۷-۲b)

است. زیرا طرح عوض شده است.

عامل بندی دوباره یک الگو نه تنها در تصویرهای خطهای پارامتر بر رویه انتظار اثر می گذارد، بلکه بر بردارهای شتاب و مماس و در نتیجه بر غیر خطی بودن اثرات پارامتر نیز اثر دارد.

مثال : رانفور ۹

نمودار (۳-۷)، نشان دهنده رویه انتظار و بردارهای مماس و شتاب در نقطه‌ای از رویه است. مطابق مثال پرومیسین ۲۲، پارامتر متغیر طرح را چنان مقیاس بندی کرده ایم که نمودار روشتری داشته باشیم. متغیر طرح با $1/10$ و پارامتر θ با 10 مقیاس بندی شده اند. در این مقیاس نقاط عبارت اند از: $(\phi=0.0), \theta=1.0$ برای طرح و $(0.4, 4.8)^T$ ، که متناظر با نقاط $\theta=0.1$ و $(Q=-1.0)$ برای طرح $(4.41)^T$ در مقیاس اولیه است. توجه شود که بردارهای مماس در یک جهت اند. همچنان که هر دو باید مماس بر یک منحنی باشند. طولهای بردار مماس بسیار متفاوت اند، ولی بردارهای شتاب نه تنها در طول، بلکه در جهت نیز متفاوت اند. هر دوی این اختلافات ناشی از عامل بندی دوباره بوده و به این ترتیب مقداری از اثرات غیر خطی بودن پارامتر را می بینیم.



نمودار ۳-۷. بردارهای مقیاس بندی شده شتاب و سرعت در $\theta=1$ برای مثال رانفور ۹ در حالتی با کاربرد پارامتر θ و پارامتر $\phi = \log_{10} \theta$.

۷-۱-۲- شتاب در یک جهت دلخواه

بردارهای شتاب و سرعت فقط اطلاعات مربوط به رویه انتظار - متناظر با تغییرات در امتداد محور پارامتر - در فضای پارامتر را فراهم می‌کنند. برای اندازه‌گیری سرعت و شتاب نزدیک به $\hat{\theta}$ در جهت دلخواه u در فضای پارامتر، پارامتر فاصله b را معرفی کرده و فرض می‌کنیم $\theta = \hat{\theta} + bu$. باشد که u یک بردار واحد $p \times 1$ است. خط $\theta(b) = \hat{\theta} + bu$ را روی رویه انتظار تصویر می‌نماییم و منحنی $\eta_u(b) = \eta(\hat{\theta} + bu)$ را در نقطه $\eta(\hat{\theta})$ تولید می‌کند. بردار مماس و شتاب آن منحنی در $\hat{\theta}$ توسط مشتق‌گیری نسبت به b و بررسی مشتق در $b=0$ به دست می‌آیند. در نتیجه:

$$\left. \frac{d\eta_u}{db} \right|_0 = \sum_{p=1}^P \left. \frac{\partial \eta}{\partial \theta_p} \right|_{\hat{\theta}} \left. \frac{d\theta_p}{db} \right|_0$$

$$= \sum_{p=1}^P \dot{v}_p u_p$$

یا به اختصار:

$$\dot{\eta}_u = \dot{V}u \quad (6-7)$$

بردار شتاب در جهت u به شرح زیر است.

$$\left. \frac{d^2 \eta_u}{db^2} \right|_0 = \sum_{q=1}^P \left. \frac{\partial \sum_{p=1}^P \dot{v}_p u_p}{\partial \theta_q} \right|_{\hat{\theta}} \left. \frac{d\theta_q}{db} \right|_0 \quad (7-7)$$

$$= \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^P \ddot{v}_{pq} u_p u_q$$

که به اختصار داریم:

$$\ddot{\eta}_u = u^T \ddot{V} u \quad (8-7)$$

بنابر (6-7)، دیده می‌شود که سرعت متناظر با جهت u ، فقط ترکیبی خطی از بردارهای سرعت \dot{V} است. و بنابر (7-7) و (8-7)، شتاب نیز فقط ترکیبی خطی از بردارهای شتابی \ddot{V} است. در (8-7)، بردار $N \times 1$ ، $\ddot{\eta}_u$ ، توسط پیش ضرب و پس ضرب آرایه $N \times P \times P$ توسط یک بردار $1 \times p$ و $p \times 1$ تشکیل شده است. هر مختصات $\ddot{\eta}_u$ صورت $u^T \ddot{V}_n u$ است که \ddot{V}_n وجه n ام آرایه \ddot{V} است.

چون خواسته اولیه ما شتاب واقع در صفحه مماس و عمود بر آن است، می‌توانیم آنها را به طور اختصار با تبدیل \ddot{V} به \ddot{A} مطابق (5-7) نمایش دهیم. در این حالت، شتاب متناظر با جهت u به شکل زیر در می‌آید:

$$Q^T \ddot{\eta}_u = u^T \ddot{A} u \quad (9-7)$$

یا

$$Q^T \ddot{\eta}_a = \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^P (\ddot{A})_{pq} u_p u_q \quad (۱۰-۷)$$

در این رابطه $\{\ddot{A}\}_{pq}$ بردار $(p+p) \times I$ در آرایه \ddot{A} است. توجه شود که اینها ستون‌های ماتریس R_1 حاصل از تجزیه QR ماتریس D ی معادله (۴-۷) هستند. با توجه به صورت ماتریس زیر

$$\begin{bmatrix} R_{12} \\ R_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11}, r_{12}, r_{22}, \dots, r_{pp} \end{bmatrix} \quad (۱۱-۷)$$

عبارت (۱۰-۷) به صورت زیر قابل نوشتن است.

$$Q^T \ddot{\eta}_a = \sum_{p=1}^P r_{pp} u_p^2 + 2 \sum_{p=1}^P \sum_{q=p+1}^P r_{pq} u_p u_q \quad (۱۲-۷)$$

و این ساختار مناسبی برای محاسبه است.

مثال : پروماین ۲۴

برای بررسی محاسبات موجود در (۱۲-۷) شتاب متناظر با جهت $u = (0/8, 0/6, 0/4)^T$ را محاسبه می‌کنیم. برای این منظور (۱۲-۷) و مقادیر واقع در R_1 از مثال پروماین ۲۳ را به کار می‌بریم.

$$\begin{aligned} Q^T \ddot{\eta}_a &= (0.6)^2 r_{11} + (0.8)^2 r_{22} + 2(0.6)(0.8) r_{12} \\ &= 0.36 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + 0.64 \begin{bmatrix} -16185.7 \\ -25030.4 \\ 8369.1 \end{bmatrix} + 0.96 \begin{bmatrix} 7.378 \\ 6.210 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -10351.8 \\ -16013.5 \\ 5356.2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

۲-۷-۲- انحناهای نسبی

می‌دانیم شتابها بیانگر غیر خطی بودن هستند. ولی، برای اندازه‌گیری آن مفید نیستند، چون وابسته به مقیاس‌بندی داده‌ها و پارامترهایند. برای نمونه، در مثال رانفورد اندازه‌گیری دما بر حسب سیلیسیوس به جای فارنهایت یا اندازه‌گیری زمان به ساعت به جای دقیقه، شتاب‌های متفاوتی را تولید می‌کند. برای رهایی از این وابستگی شتابها را به انحناهای نسبی تبدیل می‌کنیم.

انحنای c_u در جهت u در یک نقطه به صورت نسبت طول بردار سرعت به مربع طول بردار مماس تعریف

$$c_u = \|\ddot{\eta}_u\| / \|\dot{\eta}_u\|^2 \quad \text{می‌شود:}$$

برای انحنای اثرات پارامتر، داریم:

$$c_u^\theta = \|\ddot{\eta}_u^\theta\| / \|\dot{\eta}_u\|^2 \quad (۱۳-۷)$$

و برای انحنای ذاتی داریم:

$$c_u^1 = \|\ddot{\eta}_u^1\| / \|\dot{\eta}_u\|^2 \quad (۱۴-۷)$$

با ضرب Q^T در بردارهای مماس و شتاب، اندازه‌های صورت و یا مخرج عوض نمی‌شوند. بنابراین، آرایه خلاصه‌تر A^θ را برای محاسبه صورت رابطه (۱۳-۷) به کار می‌بریم.

$$\|u^T A^\theta u\|^2 = \sum_{p=1}^P (u^T \ddot{A}_p u)^2$$

حال صورت کسر (۱۴-۷) به شکل زیر در می‌آید.

$$\|u^T A^1 u\|^2 = \sum_{p=p+1}^{P+P} (u^T \ddot{A}_p u)^2$$

برای محاسبه مخرج‌ها داریم.

$$\begin{aligned} \|\dot{\eta}_u\|^2 &= \|\dot{y}u\|^2 \\ &= u^T R_{11}^T R_{11} u \\ &= \|R_{11}u\|^2 \end{aligned}$$

در این جا R_{11} حاصل از تجزیه QR ماتریس D مربوط به رابطه (۴-۷) است.

برای ساده کردن محاسبات، انحناها $\|\eta_u\|^2 = 1$ را برای هر u با $\|u\| = 1$ ، توسط تبدیل خطی به پارامترهای متعامد مرتب می‌کنیم.

$$\phi = R_{11}(\theta - \hat{\theta}) \quad (۱۵-۷)$$

به علاوه، چون انحناها بر حسب واحد عکس پاسخ اندازه‌گیری شده‌اند، لذا، مقادیر آنها بستگی به مقیاس‌بندی داده‌ها دارد. برای حذف این بستگی، \sqrt{P} را در انحناها و پاسخ ضرب می‌کنیم تا به انحناهای نسبی بی بعد تبدیل شوند. نتیجه نهایی، آرایه انحنای نسبی زیر است.

$$C = R_{11}^{-T} \ddot{A} R_{11}^{-1} \sqrt{P} \quad (۱۶-۷)$$

این انحنا شامل یک آرایه C^θ مربوط به انحنای نسبی اثرات پارامتر $P \times P \times P$ است. و از اولین P وجه C و $P \times P \times P$ انحنای نسبی ذاتی آرایه C^1 و از آخرین وجه P مربوط به C ایجاد شده است.

یک نتیجه مهم حاصل از مقیاس‌بندی توسط \sqrt{P} این است که: منحنی مجموع مربعات یک ناحیه

درست نمایی اسمی α - محدود در ادراک صفحه مماسی یا به طور ساده ترقصی باشد $F(P, N - P, \alpha)$ را ایجاد می کند و خود ناحیه درست نمایی محاسبه شده از (۱-۶)، تبدیل به همه مقادیر θ می شود که برای آنها مجموع مربعات (مقیاس شده) برابر با $F(P, N - P; \alpha)$ است. این عمل موجب مقیاس مناسبی از اندازه گیری برای انحناها می شود.

مثال: پروماینسین ۲۵

برای داده های پروماینسین $s = 10/93$ و $P = 2$ داریم:

$$R_{11}^{-1} = \begin{bmatrix} -0.4092 & 0.4861 \\ 0 & 0.0007574 \end{bmatrix}$$

و از مثال پروماینسین ۲۳ داریم:

$$\ddot{A} = \begin{bmatrix} 0 & 7.378 \\ 7.378 & -16185.7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 6.210 \\ 6.210 & -25030.4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 8369.1 \end{bmatrix}$$

$$C = \begin{bmatrix} 0.000 & -0.035 \\ & -0.059 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.000 & -0.030 \\ & -0.151 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.000 & 0.000 \\ & 0.074 \end{bmatrix}$$

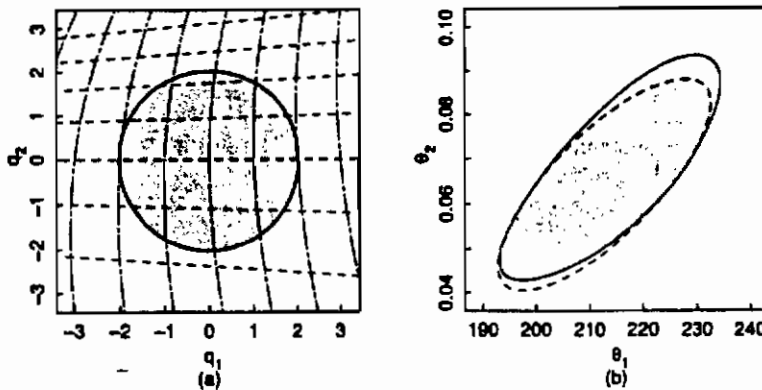
ضرب دو ماتریس اولی C^0 را می دهد و سومی C^1 را. چون ماتریس های مربوط به C متقارن هستند، فقط قسمت بالا مثلثی را نوشته ایم. برای مثال در آرایه بالا، $c_{221} = -0.03 = c_{212}$ است. به علت کوچکی انحناها، انتظار داریم که صفحه مماسی تقریب خوبی را برای رویه انتظار فراهم کند و تصویر منحنی های پارامتر بر روی صفحه مماس به طور کامل یکنواخت باشند. در نمودار (۴a-۷)، تصاویر منحنی های پارامتر ϕ روی صفحه مماس نشان داده شده است. بنابر انتظارمان، منحنی ها به طور کامل مستقیم، موازی و هم فضا هستند.

همچنین در نمودار (۴a-۷)، نشان داده شده که صفحه مماس، قرصی به شعاع $\sqrt{F(2, 10, 0.05)} = 2/0.2$ است. چون ناحیه خیلی بزرگ نیست، منحنی های پارامتر در داخل آن رفتار خوبی دارند و انتظار داریم که یک ناحیه تقریب خطی، تقریب خوبی به ناحیه درست نمایی واقعی بدهد. این در حقیقت حالتی است که در نمودار (۴b-۷) نمایش داده شده است. جایی که ناحیه تقریب خطی (خط فاصله) و ناحیه درست نمایی (خط ممتد) از منحنی مجموع مربعات (مقیاس شده) به دست آمده است.

$$S(\theta) = 1 + (2/10)4.10 = 1.82$$

آرایه انحنا نسبی C یکتا نیست، زیرا هر تبدیل به پارامترهای متعامد ϕ قابل استفاده بوده و هر دوران

متعامد فضای پاسخ نیز قابل استفاده است و مماس و عمود مربوط به خود را مجزا نگه می‌دارد. تبدیل پارامتری ارائه شده توسط R_{11} مناسب است.



نمودار ۴-۷. نواحی درست نمائی برای پارامترهای الگوهای پرومابین. در قسمت a، انحنای پارامتر برای پارامتر $\phi = R_{11}(\theta - \hat{\theta})$ روی صفحه مماس با فرض درست نمایی ۹۵٪ تصویر شده است. فرض شده که روی انتظار مسطح است (سایه دار). در قسمت b، ناحیه به فضای پارامتر θ تبدیل شده است (سایه دار). بیضی نشان داده شده توسط خط ناصله در قسمت b حاصل از تقریب خطی است.

یک الگوریتم برای محاسبه آرایه انحنای نسبی در بیتر، هامیلتون و واتر (۱۹۸۳) معرفی شده است. آنها \vec{V} و بردار غیر زائد \vec{V} را در یک ماتریس D ترکیب کرده‌اند. اولین P ستون به گونه‌ای است که شامل مشتق اول بردار \vec{v}_p و $\frac{P(P+1)}{2}$ ستون باقی مانده، شامل مشتق دوم بردارهای \vec{v}_{pq} بوده، که در یک روش ذخیره‌ای متقارن گنجانیده شده است. یعنی، به ترتیب: $11, 12, 13, \dots, PP$. سپس، آنها یک تجزیه QR محوری (دو نگار او دیگران، ۱۹۷۹ فصل ۹) را برای نوشتن $D = QRE$ به کار برده‌اند. در این جا Q یک ماتریس متعامد $N \times N$ و E یک ماتریس جایگشتی مربعی $\frac{P(P+3)}{2}$ بوده به طوری که زیر ماتریس چپ - بالای $P \times P$ ، بالا مثلثی باشد. آنها فرض کردند که \vec{V} نامنفرد است ولی نیازی به نامنفرد بودن D نیست.

با افراز کردن R به صورت زیر، R_{11} آماده شده و برای تولید ϕ و R_{12} به کار می‌رود، سپس C^0 و R_{22} تولید و در آخر C^1 تولید می‌شود.

$$R = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

تعداد سطرهاى غير صفر R بعد فضاي تركيبى شتابى و مماسى است. اولين P ستون Q ، يعنى: Q_1 يك پايه متعامد براى فضاي مماس و ستونهاى بعدى P' ، يعنى: Q_1' ، يك پايه متعامد براى فضاي شتابى بنا مى كنند. براى محاسبه آرايه هاى انحنا، هر وجه $P \times P$ ، آرايه سه بعدى تشكيل شده توسط گسترش ستون هاى مشتق دوم حاصل از روش ذخيره هاى متقارن، بايد توسط R_{11}^{-1} پس ضرب و توسط R_{11}^{-T} پيش ضرب شود. اين دو حاصل ضرب توسط يك پس ضرب ساده آخرين ستونهاى $\frac{P(P+1)}{2}$ مربوط به R توسط ماتريسي متشكل از آرايه هاى R_{11}^T جانشيني مى شوند، كه نسخه ذخيره متقارن از آرايه هاى انحنا با بعد $(P+P') \times (P+P')$ است (بيتر، هميلتون و واژت ۱۹۸۳). ماتريس انحناى نسبى نمايش فشرده تري از انحناهاست. اولين P ستون، جمله هاى انحناى نسبى اثر پارامتر را آشكار مى كند و دومين P ستون، جمله هاى انحناى ذاتى را. به طور جانشيني هر ستون، يك بردار انحنا براى زوج پارامتر ويژه هاى را ارائه مى كند.

مثال : پرومايسين ۲۶

در مثال پرومايسين ۲۵ ماتريس انحنا به صورت زير است:

$$\begin{bmatrix} 0 & -0.035 & -0.059 \\ 0 & -0.030 & -0.151 \\ 0 & 0 & 0.074 \end{bmatrix}$$

براى اين الگو و مجموعه داده ها، همه انحناهاى نسبى كوچك اند. در نتيجه، به احتمال زياد، غير خطى بودن، اثر بدى در شرايط برآورد نمى گذارد.

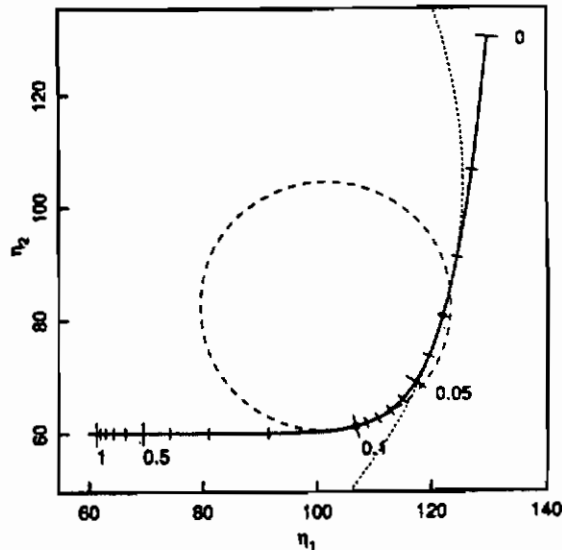
۷-۲-۱- تفسير جمله هاى موجود در آرايه هاى انحناها

۷-۲-۱-۱- انحناهاى ذاتى

تفسير هندسى انحناى ذاتى عبارت است از: عكس شعاع دايره اى كه بهترين تقريبات را بر رويه انتظار و در جهت η_{II} دارا باشد. بنابراين، اگر فرض مسطح بودن خوب باشد، انحناى ذاتى كوچك خواهد بود.

مثال : رانفورد ۱۰

در نمودار (۷-۵)، منحنى انتظار براى الگوى رانفورد، با طرح $x = (4, 41)^T$ ، به همراه بخش هاى دايره هاى تقريبات در نقاط متناظر با $\theta = 0/1$ و $\theta = 0/3$ نشان داده شده است. براى $\theta = 0/1$ ، دايره دارى انحناى $0/46 = \frac{706}{37490}$ با شعاع $22 = \frac{1}{0/46}$ است. براى $\theta = 0/3$ ، دايره بزرگتر انحناى $0/115 = \frac{1}{0/115}$ با شعاع 87 را دارد.



نمودار ۵-۷- دایره‌های تقریبی بر رویه انتظار برای مثال رانفور در حالتی. دایره خط - فاصله، تقریبی بر رویه بنا شده در انحنای ذاتی در $\theta = 1/1$ است. دایره نقطه چین، تقریبی بر رویه بنا شده در انحنای ذاتی در $\theta = 1/3$ است.

مثال : پروماینسین ۲۷

در نمودار (۶-۷)، رویه انتظار را در فضای تولید شده توسط بردارهای مماس و بردار باقی مانده داده‌های پروماینسین نشان داده‌ایم. رویه بی نهایت مسطح است. در نتیجه صفحه مماس یک تقریب عالی را در نزدیکی $\hat{\theta}$ برای رویه انتظار فراهم می‌کنند. می‌توان انتظار داشت اندازه‌های آرایه انحنای ذاتی بشرح زیر باشند.

$$C^i = \begin{bmatrix} 0.000 & 0.000 \\ & 0.074 \end{bmatrix}$$

۲-۱۲-۷- تأثیرات پارامتر در انحناها

هریک از جمله‌های c_{npq} در آرایه انحنای نسبی، دارای یک تفسیر هندسی است. این خود کمک به درک غیرخطی بودن است (بیتز و واتز، ۱۹۸۱). برای تفسیر جمله‌های c_{npq} ، یک مثال دو پارامتری را در نظر می‌گیریم.

مؤلفه‌های مماسی بردارهای مقیاس شده سرعت و شتاب در $\phi=0$ به شرح زیر اند.

$$\dot{v}_1(\phi=0)=q_1$$

$$\dot{v}_2(\phi=0) = q_2$$

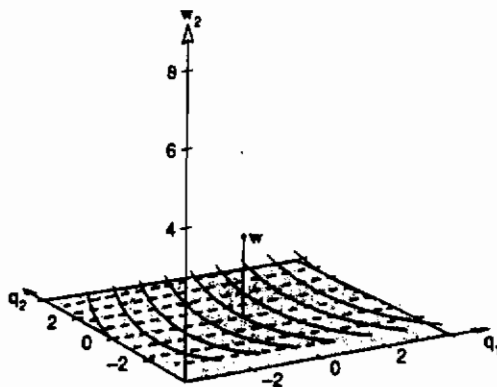
$$\ddot{v}_{11} = c_{111}q_1 + c_{211}q_2$$

$$\ddot{v}_{12} = c_{112}q_1 + c_{212}q_2$$

$$\ddot{v}_{22} = c_{122}q_1 + c_{222}q_2$$

$$\dot{v}_1(\phi=0) = q_1$$

$$\dot{v}_2(\phi=0) = q_2$$



نمودار ۶-۷. تصویر منحنی‌های پارامتر مربوط به پارامترهای متعامد $\phi = R_{11}(\theta - \hat{\theta})$ برای الگوی داده‌های پرومپسین به نوبت فضای سه بعدی تولید شده توسط بردارهای مماس q_1 و q_2 و بردار باقیمانده دوران یافته w . صفحه مماس سایه‌دار است.

در نقطه دیگری مانند $\phi = \delta$: بردارهای مماس جدید به تقریب به صورت زیر هستند.

$$\dot{v}_1(\delta) = \dot{v}_1(0) + \delta_1 \left. \frac{\partial \dot{v}_1}{\partial \phi_1} \right|_{\phi=0} + \delta_2 \left. \frac{\partial \dot{v}_1}{\partial \phi_2} \right|_{\phi=0}$$

$$= q_1 + \delta_1 \ddot{v}_{11} + \delta_2 \ddot{v}_{12}$$

$$\dot{v}_2(\delta) = q_2 + \delta_1 \ddot{v}_{21} + \delta_2 \ddot{v}_{22}$$

با ادغام کردن جمله‌های q_1 و q_2 داریم.

$$\dot{v}_1(\delta) = q_1(1 + \delta_1 c_{111} + \delta_2 c_{112}) + q_2(\delta_1 c_{211} + \delta_2 c_{212})$$

$$\dot{v}_2(\delta) = q_1(\delta_1 c_{112} + \delta_2 c_{122}) + q_2(1 + \delta_1 c_{212} + \delta_2 c_{222})$$

c_{111} تغییر در جهت q_1 از بردار \dot{v}_1 را بنابر تغییر واحد در ϕ_1 ارائه می‌کند. یعنی جمله‌هایی به شکل c_{ppp}

سبب می‌شوند که \dot{v}_p در طول تغییر کند. بنابراین، ما به c_{ppp} به عنوان جمله‌های مقایسه‌ای مراجعه می‌کنیم. چون

آنها سبب مقایسه یا بسط مقیاس در امتداد یک خط پارامتر ϕ_p می‌شوند. جمله c_{211} تغییر در جهت q_2 از بردار \hat{v}_1 بنابر تغییر واحد در ϕ_1 را می‌دهد. یعنی جمله‌هایی به شکل $c_{qpq} (q \neq p)$ سبب تغییرات در جهت q از خطهای پارامتر ϕ_p - هنگامی که در امتداد آنها حرکت کنیم - می‌شود. ما به این‌ها به عنوان جمله‌های قوسی مراجعه می‌کنیم. جمله c_{212} تغییر در جهت q_2 از بردار \hat{v}_2 بنابر تغییر واحد در ϕ_1 را می‌دهد. یعنی: جمله‌هایی به شکل c_{qpq} ، سبب تغییرات در جهت q از منحنی‌های پارامتر ϕ_p هنگامی که در عرض منحنی‌های پارامتر ϕ_q حرکت کنیم، می‌شود. ما این‌ها را مؤلفه‌های پنکه‌ای (یا مخروطی) می‌نامیم. زیرا خط پارامتر ϕ_p به صورت پنکه‌ای از نقطه مشترکی از محور q_p خارج می‌شوند. همچنین، چون $c_{qpq} = c_{qqp}$ ، پس جمله‌هایی به شکل c_{qpq} نیز سبب پنکه‌ای شدن ϕ_p می‌شوند.

با دو پارامتر، فقط مقایسه‌های قوسی و پنکه‌ای می‌تواند رخ دهد. با بیش از دو پارامتر فقط یک نوع دیگر از اثر پارامتر قابل رخ دادن است. به شرطی که همه زیر نویس‌ها متفاوت باشند. جمله‌ای مانند c_{npq} سبب تغییر در جهت q_n از بردار مماسی \hat{v}_p ، بنابر تغییر واحد در ϕ_p می‌شود. ما به این، به عنوان مؤلفه پیچشی مراجعه می‌کنیم، زیرا آنها سبب پیچش رویه پارامتر (ϕ_p, ϕ_q) می‌شوند. جایی که یک رویه پارامتر مشابه با یک منحنی پارامتر است و خود متشکل از نقاط تولید شده توسط ثابت نگه داشتن همه ϕ_p ‌ها (به جز دو تا که متغیراند) است.

تفسیر درایه‌های مجزا در C نیز کمک به تفسیر انحنای اثرات پارامتر در جهت مخصوص می‌کند. در یک جهت u که موازی با محور پارامتر است، c_{uu}^θ ریشه دوم مجموع مربعهای جمله مقایسه و همه جمله‌های قوسی برای پارامتر است. این نیز حالتی برای u در حالت کلی است. c_{uu}^θ ترکیبی از قوسی بودن و مقایسه در جهت u را اندازه‌گیری می‌کند.

مثال ۱۴: BOD

برای داده‌ها BOD ، آرایه انحنای اثرات پارامتر عبارت است از:

$$C^\theta = \begin{bmatrix} 0.000 & -0.157 \\ & 2.100 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.000 & -0.096 \\ & 0.497 \end{bmatrix}$$

با آزمایش جمله‌های واقع در C^θ ، مواد زیر آشکار می‌شوند.

(۱) خطهای پارامتر ϕ_2 با دقت و به طور یکنواخت در امتداد خطوط ϕ_1 جا گرفته است، چون ϕ_1 مرتبه c_{111} برابر صفر است.

(۲) منحنی‌های پارامتر ϕ_1 به طور مشخصی به طور غیر یکنواخت در امتداد خطهای ϕ_2 جای گرفته‌اند.

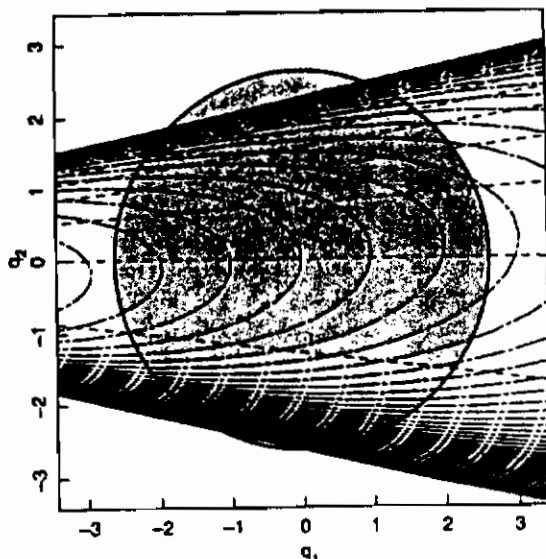
چون ϕ_2 که جمله c_{222} را فشرده کرده، بزرگ است ($0/497$).

(۳) خطهای پارامتر ϕ_2 به طور مشخصی منحنی شده، زیرا ϕ_1 که جمله c_{122} را قوسی کرده، خیلی بزرگ است. ($2/100$).

(۴) خطهای پارامتر ϕ_1 مستقیم خواهند بود، زیرا ϕ_2 که جمله c_{211} را قوسی کرده صفر است.

(۵) خطهای پارامتر ϕ_2 نشان دهنده بهترین شکل پنکه‌ای است. زیرا ϕ_1 که جمله $c_{121}=c_{112}$ را پنکه‌ای کرده به طور کامل کوچک است ($0/157$).

(۶) خطهای پارامتر ϕ_1 نشان دهنده بهترین شکل پنکه‌ای است. زیرا ϕ_2 که جمله $c_{221}=c_{212}$ را پنکه‌ای کرده، به طور کامل کوچک است. ($0/096$).



نمودار ۷-۷. منحنی‌های پارامتر برای پارامترهای متعامد $\phi = R_{11}(\theta-\hat{\theta})$ ، برای داده‌های BOD منحنی‌های پارامتر بر روی صفحه مماس تصویر شده‌اند و ناحیه دایره‌ای شکل سایه‌دار با ترازهای احتمالی ۹۵٪ است (رویه انتظار سطح فرض شده). منحنی پارامتر برای ϕ_1 با خط نقطه‌های کوچک و منحنی پارامتر ϕ_2 با خط نقطه‌های بزرگ مشخص شده‌اند.

در نمودار (۷-۷)، منحنی‌های پارامتر BOD - که روی صفحه مماسی تصویر شده - نشان داده شده است. دوباره می‌گوییم، که یک منحنی پارامتر با پارامتر متغیری شریک شده است. در نتیجه، منحنی‌های کم سایه متناظر با ϕ_2 همان منحنی‌های واقعی ϕ_1 هستند. و منحنی‌های سایه دار کوتاه بلند - متناظر با ϕ_1 تثبیت شده - همان منحنی‌های پارامتر واقعی ϕ_2 هستند. بنابراین، با رجوع به نمودار (۷-۷)، می‌توان دید که منحنی‌های

پارامتر رفتاری در جهت پیش‌بینی شده دارند.

توجه شود که قرص درست نمائی ۹۵٪ در ورای رویه انتظار امتداد یافته و خطهای پارامتر تقریب خطی به طور کافی منحنی‌های پارامتر واقعی داخل قرص را تقریب نمی‌کند.

۲-۲-۷- عامل بندی دوباره

در بخش (۱-۷) دیدیم که یک تبدیل از پارامترها می‌تواند تغییر زیادی را در غیرخطی بودن اثرات پارامتر ایجاد کند. در فصل ششم دیدیم که چنین تبدیلی می‌تواند نمودارهای درست نمائی نیم‌رخ را بسط دهد. متأسفانه، راهنمای کمی برای انتخاب عامل بندی دوباره و اثراتش در شرایط خاص وجود دارد. بنا به بستر وواتر (۱۹۸۱)، تبدیلی برای انواع خاصی از پارامترها و الگوها توصیه شده است، به طوری که بتواند غیرخطی بودن اثرات پارامتر را برای یک مجموعه داده‌ها کاهش و برای دیگری افزایش دهد. در نتیجه، ممکن است لازم باشد تا آزمایشی با چند تبدیل برای گزینش مناسبترین آنها انجام پذیرد. برای مثال رجوع کنید به راتکوسکی (۱۹۸۳).

محاسبه تبدیلات پارامتر توسط یافتن آرایه انحنای اثرات پارامتر برای یک مجموعه داده‌ها - تابع انتظار با ترکیب کردن تحت عامل بندی دوباره توسط موارد زیر خسته کننده است.

(۱) دوباره الگو را بر حسب پارامترهای جدید شروع می‌کنیم.

(۲) همه مشتقات را دوباره حساب می‌کنیم.

(۳) آرایه C را محاسبه می‌کنیم. ولی می‌توان از این کار چشم پوشی کرد.

چنانچه به فرض، مایل به محاسبه آرایه اثرات پارامتر C^β متناظر با عامل بندی دوباره‌ای باشیم، که در آنها پارامترهای جدید β با مشخصات زیر تبدیلات غیرخطی θ هستند.

$$\beta = G(\theta)$$

$$\beta_p = G_p(\theta) \quad p=1,2,\dots,P \quad \text{یا}$$

تبدیل وارون $\theta = D(\beta)$ یا $\theta_p = D_p(\beta)$ با $p=1,2,\dots,P$ را در نظر می‌گیریم. و ماتریسهای ژاکوبی $P \times P$ را به صورت \dot{D} و \dot{G} به ترتیب با (n,p) تا درایه $\partial D_n / \partial \beta_p$ و $\partial G_n / \partial \theta_p$ می‌نویسیم.

آرایه‌های مشتق دوم $p \times p \times p$ به شکل \ddot{D} و \ddot{G} ، به ترتیب با درایه‌های $\partial^2 D_n / \partial \beta_p \partial \beta_q$ و $\partial^2 G_n / \partial \theta_p \partial \theta_q$ نوشته می‌شود. جمله با زیرنویس npq بیانگر n وجه، p سطر و q ستون است. (خالی از فایده نیست، که تذکر دهیم، سطر n ام \dot{G} گرادیان G_p یعنی $\partial G_n / \partial \theta^T$ است و سطر p ام از وجه n ام مربوط به \ddot{G} ، گرادیان

یعنی، $(\partial/\partial \theta^T) \partial G_n / \partial \theta_p$ است).

با کاربرد قاعده زنجیری برای متشق گیری، بردارهای مماسی جدید در برآوردهای حداقل مربعات $\hat{\beta} = G(\hat{\theta})$ به شرح زیراند.

$$\begin{aligned} \dot{b}_p &= \left. \frac{\partial \eta}{\partial \beta_p} \right|_{\hat{\beta}} \\ &= \sum_{q=1}^p \left[\left. \frac{\partial \eta}{\partial \theta_q} \right|_{\hat{\theta}} \right] (\dot{D})_{qp} \\ &= \sum_{q=1}^p \dot{v}_q (\dot{D})_{qp} \end{aligned}$$

که \dot{v}_q ، ستون q ام \dot{V} است، به طور هم ارز داریم.

$$\begin{aligned} \dot{B} &= (\dot{b}_1, \dot{b}_2, \dots, \dot{b}_p) \\ &= \dot{V} \dot{D} \\ &= Q_1 R_1 \dot{D} \end{aligned} \quad (۱۷-۷)$$

به طور مشابه بردارهای مشتق دوم جدید عبارتند از:

$$\begin{aligned} \ddot{b}_{pq} &= \left. \frac{\partial^2 \eta}{\partial \beta_p \partial \beta_q} \right|_{\hat{\beta}} \\ &= \frac{\partial}{\partial \beta_q} \left[\sum_{r=1}^p \dot{v}_r (\dot{D})_{rp} \right] \\ &= \sum_{r=1}^p \dot{v}_r (\ddot{D})_{rpq} + \sum_{r=1}^p \sum_{s=1}^p (\dot{D})_{rp} \ddot{v}_{rs} (\dot{D})_{sq} \end{aligned}$$

در این جا \ddot{v}_{rs} بردار (r,s) ام در آرایه \ddot{V} است. بنابراین، داریم:

$$\begin{aligned} \ddot{B} &= \dot{D}^T \ddot{V} \dot{D} + \{\dot{V}\}(\ddot{D}) \\ A^0 &= [Q_1^T] \ddot{B} = \dot{D}^T A^0 \dot{D} + [R_1] \ddot{D} \end{aligned} \quad (۱۸-۷)$$

در نتیجه:

در این جا نیز مانند قبل گروه‌ها دلالت بر این دارد که جمع موجود در ضرب در زیرنویس صورت کسر اعمال می‌شود، حال داریم:

$$C^0 = R_1^T A^0 R_1^{-1}$$

و بسط هم ارزی برای C^θ به کمک (۷-۱۷)، عبارت است از:

$$C^\theta = (R_1 \dot{D})^{-T} A^\theta (R_1 \dot{D})^{-1}$$

بنابراین:

$$\begin{aligned} C^\theta &= (R_1 \dot{D})^{-T} [R_1] [\ddot{D}] (R_1 \dot{D})^{-1} + R_1^{-T} A^\theta R_1^{-1} \\ &= (R_1 \dot{D})^{-T} [R_1] [\ddot{D}] (R_1 \dot{D})^{-1} + C^\theta \\ &= [R_1] [R_1^{-T} \dot{D}^{-T} \ddot{D} \dot{D}^{-1} R_1^{-1}] + C^\theta \\ &= -[R_1] [R_1^{-T} T R_1^{-1}] + C^\theta \end{aligned} \quad (۷-۱۹)$$

کمیت T ، آرایه انحنای تبدیل نامیده می‌شود، چون به صورت یک انحناست. یعنی:

شتاب تقسیم بر توان دوم سرعت.

$$T = -\dot{D}^{-T} \ddot{D} \dot{D}^{-1} \quad (۷-۲۰)$$

بنابراین، آرایه C^θ مساوی آرایه مرکزی C^θ ، منهای یک تعدیل است.

$$C^\theta = C^\theta - [R_1] [R_1^{-T} T R_1^{-1}]$$

حال T بر حسب مشتقات نسبت به β ارائه می‌شود و مناسبتر است که آن را بر حسب پارامترهای مرکزی داشته باشیم. با نوشتن $\beta = G(D(\beta))$ و مشتق‌گیری نسبت به β داریم:

$$\frac{\partial \beta}{\partial \beta^T} = I = \dot{G} \dot{D}$$

و همچنین از (۷-۲۰)، داریم.

$$\frac{\partial^2 \beta}{\partial \beta \partial \beta^T} = 0 = \dot{D}^T \ddot{G} \dot{D} + [\dot{G}] [\ddot{D}]$$

در انتها نتایج زیر را داریم.

$$T = [\dot{G}^{-1}] [\ddot{G}] \quad (۷-۲۱)$$

$$C^\theta = C^\theta - [R_1] [R_1^{-T} [\dot{G}^{-1}] [\ddot{G}] R_1^{-1}]$$

مثال: پرومیسین ۲۸

الگوی میشلیز - منتن، نسبتی از دو چند جمله‌ای است، در نتیجه بنابر تذکر انتهای بخش (۶-۱-۲)، یک عامل بندی دوباره به شکل: $f = \frac{x}{\beta_1 + \beta_2 x}$ ، اثرات پارامتر را کاهش می‌دهد (همچنین برای این مثال، آنها کوچک‌اند). عامل بندی دوباره در این حالت، عبارت است از:

$$\beta = \begin{bmatrix} \frac{\theta_2}{\theta_1} \\ \frac{1}{\theta_1} \end{bmatrix}$$

و در نتیجه داریم:

$$\dot{\mathbf{G}} = \begin{bmatrix} \frac{-\theta_2}{\theta_1^2} & \frac{1}{\theta_1} \\ \frac{-1}{\theta_1^2} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\ddot{\mathbf{G}} = \begin{bmatrix} \frac{2\theta_2}{\theta_1^3} & \frac{-1}{\theta_1^2} \\ \frac{-1}{\theta_1^2} & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{2}{\theta_1^3} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

حال حاصل $\mathbf{T} = [\mathbf{G}^{-1}][\ddot{\mathbf{G}}]$ ، عبارت است از:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \frac{-2}{\theta_1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \frac{-1}{\theta_1} \\ \frac{-1}{\theta_1} & 0 \end{bmatrix}$$

در آخر، با جانشین کردن مقادیر پارامتر و انجام ضرب و تفریق لازم، مطابق (۷-۲۱)، داریم:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}^{\beta} &= \begin{bmatrix} 0.000 & -0.035 \\ & -0.059 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.000 & -0.030 \\ & -0.151 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.000 & 0.003 \\ & -0.027 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.000 & 0.002 \\ & -0.005 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0.000 & -0.038 \\ & -0.032 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.000 & -0.032 \\ & -0.146 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

همان گونه که انتظار می‌رود، تغییر در اثرات پارامتر کم است.

مثال : هم ترکیبی ۶

برای داده‌های هم ترکیبی داریم :

$$C^{\theta} = \begin{bmatrix} 0.000 & -0.110 & -0.256 & 0.361 \\ & -0.064 & 1.762 & -18.157 \\ & & 8.180 & -48.275 \\ & & & 119.610 \\ 0.000 & 0.000 & -0.032 & 0.000 \\ & 0.013 & -0.102 & -0.004 \\ & & 0.413 & -4.919 \\ & & & 0.009 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0.000 & -0.032 & 0.000 & 0.000 \\ & -0.264 & 0.269 & -4.898 \\ & & 0.008 & -0.004 \\ & & & 0.008 \\ 0.000 & 0.000 & 0.000 & -0.032 \\ & 0.020 & -0.004 & -0.102 \\ & & -0.001 & 0.265 \\ & & & -9.826 \end{bmatrix}$$

در نتیجه، غیر خطی بودن اثرات پارامتر فاجعه‌آمیز است. اگر به کمک پارامترهای β از مثال هم ترکیبی ۵، دوباره عامل بندی کنیم، بنابراین فصل ششم روشن است که اثرات پارامتر به مقدار خیلی کوچکی کاهش خواهند یافت. با کاربرد روش بالا، آرایه‌های اثرات پارامتری برای پارامتر β عبارت‌اند از:

$$C^{\beta} = \begin{bmatrix} -0.069 & 0.011 & -0.007 & 0.006 \\ & -0.062 & 0.001 & 0.004 \\ & & -0.060 & 0.003 \\ & & & -0.052 \\ -0.007 & 0.001 & -0.060 & 0.003 \\ & -0.016 & -0.015 & 0.005 \\ & & 0.018 & -0.005 \\ & & & -0.035 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0.011 & -0.062 & 0.001 & 0.004 \\ & -0.032 & -0.016 & 0.007 \\ & & -0.015 & 0.005 \\ & & & -0.039 \\ 0.006 & 0.004 & 0.003 & -0.052 \\ & 0.007 & 0.005 & -0.039 \\ & & -0.005 & -0.035 \\ & & & -0.088 \end{bmatrix}$$

همان‌گونه که بر اساس فصل ششم انتظار داشتیم، اثرات پارامتر کاهش ناچیزی داشته‌اند.

دو نکته مهم باید مد نظر قرار گیرد. اولاً: آرایه انحنای تبدیل T بر حسب پارامترهای مرکزی θ بسط داده شده است، بنابراین، نمی‌توانیم وارون تبدیل را محاسبه کنیم. ثانیاً یک آرایه جدید C^{β} از آرایه C^{θ} محاسبه شده و ماتریس R_1 حاصل از محاسبات اخیر دارای فقط $P^2(P+3)/2$ مقدار است: در نتیجه معادله (۷-۲۱) دارای بسطی است که برای محاسبه اثر تبدیل کافی است.

۳-۷-۳-۷ انحنای RMS

یکی از فواید جمله‌های واقع در آرایهٔ انحناء، سودمندی در درک غیرخطی بودن است. ولی برای تحلیل داده‌ها نیاز به یک ملاک جامع و ساده‌ای از غیرخطی بودن داریم، به طوری که بتوانیم کیفیت تقریب خطی را در شرایطی خاص ارزیابی کنیم. برای این مقصود، جذر میانگین توان دوم (RMS) که جذر میانگین مربع انحناء در همهٔ جهات است را به کار می‌بریم. انحنای اثرات پارامتر RMS را برای c^0 و انحنای ذاتی را به صورت c^1 نشان می‌دهیم. بسط رسمی انحنای عمومی RMS در زیر بیان شده است. نتایج حاصل برای اثرات پارامتر با انحنای ذاتی با درج کردن بالانویس‌های سادهٔ t, θ در معادلات نتیجه و انتخاب دامنه مناسب زیر نویس n قابل حصول است.

۳-۷-۱-۳-۷ محاسبهٔ انحنای RMS

انحنای متناظر با جهت u واقع بر روی صفحه مماس مطابق زیر است. که C_n وجه n ام C است.

$$c_u = \|u^T C u\|$$

$$= \sqrt{\sum_n (u^T C_n u)^2}$$

حال میانگین توان دوم انحناء توسط تابع اولیه‌گیری c_u^2 در همهٔ جهات u - که توسط رویه A از کرهٔ p بعدی تفکیک شده - قابل حصول است. یعنی:

$$c^2 = \frac{1}{A} \int \sum (u^T C_n u)^2 dA \quad (22-7)$$

dA جزء سطح روی کره است. این تابع اولیه را می‌توان به صورت مجموع تابع اولیه‌هایی نوشت. نتیجهٔ نهایی (بیترو واتر، ۹۸۰) عبارت است از:

$$c^2 = \frac{1}{P(P+2)} \sum_n \left[2 \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^P c_{npq}^2 + \left(\sum_{p=1}^P c_{npp} \right)^2 \right] \quad (23-7)$$

در (۲۲-۷) و (۲۳-۷)، زیرنویس n برای c^0 از ۱ تا P و برای c^1 از $P+1$ تا $\frac{P(P+3)}{2}$ ، تغییر می‌کند. میانگین توان دوم انحناء برای الگوهای دو پارامتری قابل بسط به صورت تابع اولیه‌گیری یک بعدی بر روی زاویهٔ ω است. زیرا، $u = [\cos \omega, \sin \omega]^T$. حال معادلهٔ (۲۲-۷) به صورت زیر تبدیل می‌شود.

$$c^2 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[c_{n11} \cos^2 \omega + 2c_{n12} \sin \omega \cos \omega + c_{n22} \sin^2 \omega \right]^2 d\omega$$

بعد از اعمال توان ۲ در تابع اولیه، همه جملات شامل توانهای فرد \sin یا \cos برابر صفراند. تابع اولیه‌های

باقی‌مانده شامل مقادیر $3/8 C_{n11}^2$ ، $3/8 C_{n22}^2$ ، $1/4 C_{n11} C_{n22}$ و $1/2 C_{n12}^2$ بوده که با (۷-۲۳) هماهنگ است.

مثال : پروماییسین ۲۹

برای الگوهای دو پارامتری با پارامترهای خطی شرطی، مانند الگوی میشلیز - متن، آرایه انحنای ذاتی، اغلب شامل یک وجه است. تنها درایه غیر صفر، c_{322} است، به شرطی که θ_1 یک پارامتر خطی شرطی باشد. در نتیجه، میانگین توان دوم انحنای ذاتی، فقط $3/8 c_{322}^2$ است. به عبارت دیگر، یازده بردار در C^0 صفراند و میانگین توان دوم انحنای اثرات پارامتر فقط $\frac{1}{4} \|C_{11}^0\|^2 + \frac{3}{8} \|C_{22}^0\|^2$ است. اندازه‌های انحنای RMS بسیار پرمعنی نیستند. زیرا نمی‌دانیم کدامیک مقدار بزرگی دارد.

یک مقیاس مناسب به عنوان مرجع را می‌تواند با مقایسه انحنای RMS با فرض اطمینان در سطح ویژه ۹۵٪ به دست آورد. بنابراین، یک انحنای RMS را کوچک فرض می‌کنیم اگر به اندازه کافی از انحنای قرص اطمینان ۹۵٪ کوچکتر باشد. یعنی اگر $c \leq \frac{1}{\sqrt{F}}$ یا به عبارت معادل، هرگاه $\sqrt{F} < 1$ باشد. که $F = F(P, N-P; \alpha/0.05)$ است.

برای داشتن یک مقیاس مرجع، هنوز باید کوچکی \sqrt{F} مورد قبول واقع شود. با استفاده از بیتز و واتر (۱۹۸۰)، یک رویه انتظار با شعاع $\frac{1}{c}$ را در نظر گرفته و انحراف رویه را از صفحه مماسی در فاصله \sqrt{F} از نقطه مماس بررسی می‌کنیم. این انحراف که خود بسطی از درصدی از شعاع قرص اطمینان می‌شود، برابر است با $\sqrt{F}(1 - \sqrt{1 - c\sqrt{F}})/c$ به طوری که مقداری از $\sqrt{F} = 0.1$ سبب انحراف رویه به اندازه ۵٪ شعاع اطمینان در لبه قرص اطمینان شود و مقداری از $\sqrt{F} = 0.12$ سبب انحراف ۱۰٪ و برای $\sqrt{F} = 0.15$ سبب انحراف ۱۵٪ و در آخر برای $\sqrt{F} = 0.4$ به اندازه ۲۱٪ شود. اگر انحرافی کمتر از ۱۵٪ را به پذیریم، آن‌گاه می‌توان اعلام کرد که یک تحلیل دارای انحنای غیر قابل قبول است، هرگاه حداقل یک مقدار \sqrt{F} آن بیشتر از 0.3 باشد.

مثال : پروماییسین ۳۰

برای داده‌های پروماییسین داریم: $c^0 = 0.105$ و $c^1 = 0.045$ و $c^2 = 0.09$. در نتیجه: $c^0\sqrt{F} = 0.21$ ، انحنای اثرات پارامتر RMS در حدوداً دو بار بزرگتر از انحنای ذاتی در این حالت است. ولی همچنان انحنای اثرات پارامتر براساس معیار بالا قابل قبول است. با رجوع به نمودار (۷-۴۸)، می‌توان یک اندیشه خوب از گسترش اثرات پارامتر - در حالی که اندازه \sqrt{F} مساوی 0.2 است - به دست آورد.

مثال ۱۵: BOD

برای داده‌های BOD داریم: $c^1 = 0/184$ و $c^0 = 1/328$ ، لذا، $c^1\sqrt{F} = 0/49$ و $c^0\sqrt{F} = 3/50$.
در این حالت هر دو انحنای اثرات پارامتر و ذاتی بزرگ‌اند. ولی، اثرات پارامتر خیلی پرت است. با رجوع به نمودار (۷-۷)، می‌توانیم یک ایده خوب از گسترش اثرات پارامتر هنگامی که اندازه $c^0\sqrt{F}$ برابر $3/5$ است به دست آوریم.

مثال ۷: هم ترکیبی

برای داده‌های هم ترکیبی داریم: $C^1 = 0/084$ و $C^0 = 48/39$ و لذا $c^1\sqrt{F} = 0/81$ و $c^0\sqrt{F} = 81/92$.
انحنای اثرات پارامتر در این حالت بسیار بزرگ است. بنابراین، نواحی استنباط تقریب خطی به طور کامل نامناسب‌اند. این مورد، مشابه یافته‌های بخش ششم است، جایی که نمودارهای t نیم‌رخ بدجوری، منحنی شده بودند و اثرهای نیم‌رخ رفتار بدی داشتند.

۷-۳-۲ کاربرد انحنای RMS

در این بخش، به بحث در مورد انحنای RMS برای ۶۷ الگو - مجموعه داده‌های ترکیب شده می‌پردازیم.
داده‌ها از مقالات، کتب درسی و تحقیقات به گونه‌ای گردآوری شده که واقعی باشند نه شبیه‌سازی تا بتوانند در عمل هر چه بیشتر حقایق را منعکس کنند. بعضی از مجموعه داده‌ها با بیش از یک تابع انتظار به کار برده شده است. در نتیجه، فقط ۳۷ مجموعه جدای داده‌ها و ۱۹ تابع انتظار وجود دارد. کلیدی بر توابع انتظار و مجموعه‌های داده‌ها در پیوست شماره ۷ ارائه شده است.

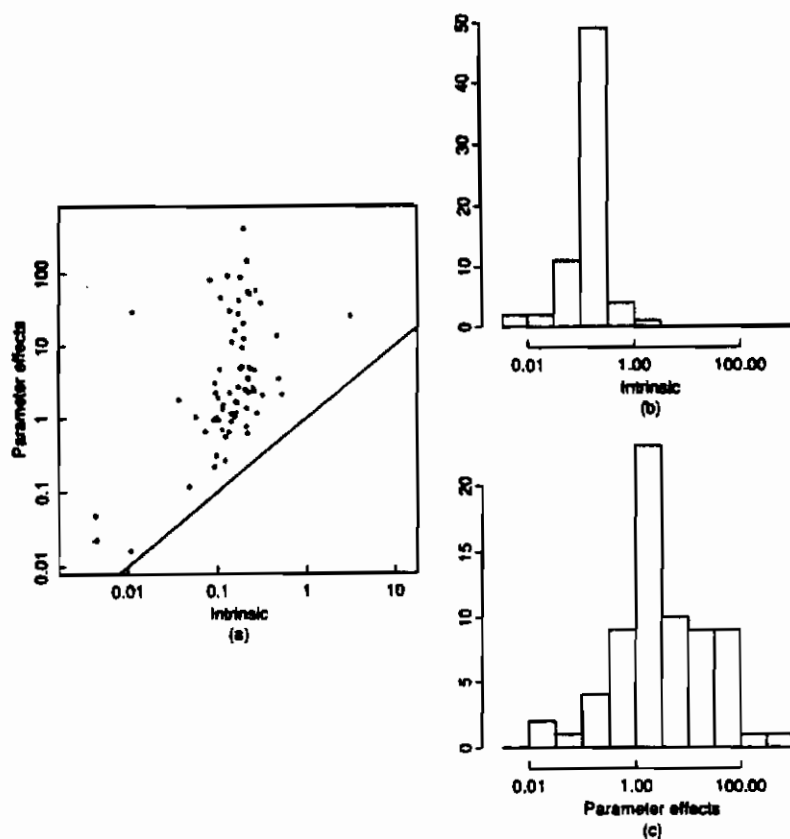
در جدول (۷-۲)، RMS ذاتی و مقادیر اثرات پارامتر برای $\alpha = 0/05$ در ۶۷ الگو مجموعه داده‌های ترکیبی مورد مطالعه ارائه شده‌اند. در این جدول N تعداد کل مشاهدات، P تعداد پارامترهای الگو، v تعداد درجات آزادی تکرارهاست. در نمودار (۷-۸)، پراکندگی اثرات پارامتر را در مقابل مقادیر ذاتی نشان داده‌ایم. در نمودار (۷-۸)، پراکندگی اثرات پارامتر را در مقابل مقادیر $c^0\sqrt{F}$ ذاتی نشان داده‌ایم. در نمودار (۷-۸) و (۷-۸c) بافت نگار مقادیری که در مقیاسی لگاریتمی هستند را نشان داده‌ایم. خط ممتد، در نمودار (۷-۸) خط هم ارزی است. در نتیجه، به سادگی دیده می‌شود که انحنای ذاتی کوچکتر است و به تقریب در همه موارد از انحنای اثرات پارامتر کوچکتر است. همچنین نمودار (۷-۸)، یک همبستگی مثبتی را بین انحنای ذاتی و اثرات پارامتر آشکار می‌کند.

با مراجعه به بافت نگار، می‌توان دید که انحنای ذاتی (نمودار ۷-۸b) به طور عموم بزرگ نیست. (حدود ۹۳٪ از تحلیل‌ها دارای مقدار $c^1\sqrt{F}$ کمتر از $0/3$ بوده، که متناظر با ۱۵٪ انحراف رویه انتظار از صفحه

مماسی است). ولی انحنای اثرات پارامتر اغلب بد هستند. (فقط در ۱۰٪ از تحلیل‌ها \sqrt{F} کمتر از ۰/۳ است، که متناظر با انحرافی کمتر از ۱۵٪ از مختصات یکنواخت است و در حدود ۸۰٪ حالات، مقدار \sqrt{F} بیشتر از ۱/۵ است، که متناظر با انحراف پارامتر منحنی از خط راست در بیش از ۱۰۰٪ است). این نتایج، که بر مبنای مجموعه‌های داده‌های گرفته شده از منابع مختلف بنا شده و شخص را به این نتیجه هدایت می‌کند که با نواحی استنباط تقریب خطی - که نیازمند فرض مختصات یکنواخت است - می‌تواند در خیلی از شرایط عملی گمراه‌کننده باشد. همچنین آنها تضمین قویی باشند برای برقراری فرض مسطح بودن که در انشقاق ۴ نیم‌رخ و رسم‌های زوج نیم‌رخ فصل ششم به کار رفته است. برای برقراری اساسی‌تر فرض مسطح بودن، اثرات غیر خطی ذاتی را به طور مشروح در بخش آینده مورد بررسی قرار می‌دهیم.

۷-۴- ارزیابی مستقیم اثرات غیر خطی ذاتی

در بخش قبل دیدیم که انحنای ذاتی RMS به طور عموم کوچک اند، در نتیجه باید کوشش‌هایی در توجیه برقراری فرض مسطح بودن انجام شود. برای ارائه توجیه بیشتر در اثرات غیر خطی بودن حاصل از دیدگاه مختلف - با این ملاحظه که ساخت نواحی درست نمایی شامل دو مرحله است - می‌پردازیم، در مرحله اول، مقطع رویه انتظار با کره درست نمایی مرکزی شده در لارا محاسبه می‌کنیم. و در مرحله دوم، مختصات آن مقطع را به توی فضای پارامتر تصویر می‌کنیم. حال یک ناحیه تقریب خطی، توسط تشکیل تقریبی در هر یک از این مراحل قابل حصول است. در مرحله اول، رویه انتظار واقعی را با صفحه جانشین می‌کنیم. بنابراین، تولید یک فرض در صفحه مماس می‌شود و در مرحله دوم، تصویر قرص را بر صفحه پارامتر توسط یک نگاشت خطی تقریب می‌کنیم. اگر غیر خطی ذاتی بزرگ باشد - به طوری که صفحه مماس یک تقریب کافی را فراهم نکند - می‌توانیم یک تقریب درجه دوم را به کار ببریم (هامیلتون، ۱۹۸۰، هامیلتون، بیتز و واتز، ۱۹۸۲).



نمودار ۸-۷. بافت نگار و پراکنش مقایس بندی شده ذاتی و اثرات پارامتر انحناى مجموعه داده‌های حقیقی. در قسمت a، پراکنشی از اثرات پارامتر درمقابل انحناهای ذاتی داده شده است. خط ممتد، خط هم‌ارزی است. بافت نگار انحناها در قسمت‌های b و c داده شده است.

جدول ۷-۲. انحناهای عقیاس شده RMS نسبت به فرض اطمینان با شعاع ۹۵٪ و محور اضافی نسبت‌ها برای مجموعه‌ای از الگوها و مجموعه داده‌های واقعی.

P	Model*	Data				Axis Ratios		
		Set*	N	v	$c^0\sqrt{F}$	$c^1\sqrt{F}$	Min.	Max.
2	A	1	7	0	0.12	0.05	1.00	1.00
		2	11	5	0.26	0.12	1.00	1.08
		3	12	6	0.21	0.09	1.00	1.05
	B	4	7	0	1.02	0.10	1.00	1.04
		5	8	0	1.04	0.06	0.99	1.00
		6	6	0	3.09	0.09	0.96	1.00
		7	6	0	4.55	0.26	0.97	1.00
		8	6	0	1.33	0.11	1.00	1.02
		9	6	0	1.63	0.17	1.00	1.04
		10	6	0	1.17	0.27	1.00	1.13
		11	6	0	3.50	0.49	1.00	1.01
		12	4	0	1.91	0.10	1.00	1.02
	C	13	44	26	0.93	0.10	1.00	1.01
	D	14	38	17	0.02	0.01	1.00	1.00
	E	15	43	21	46.28	0.11	0.98	1.00
3	F	16	9	0	93.49	0.13	0.92	1.00
		17	15	0	11.21	0.14	0.87	1.00
		18	9	0	2.66	0.17	0.91	1.00
		19	15	0	30.43	0.14	0.88	1.00
		20	27	7	1.18	0.16	1.00	1.06
		21	6	0	2.10	0.32	1.00	1.06
		22	4	0	25.67	3.11	0.89	1.00
		23	13	0	1.80	0.04	1.00	1.04
	G	16	9	0	0.65	0.07	0.97	1.01
		17	15	0	2.24	0.14	0.95	1.01
		18	9	0	0.55	0.12	1.00	1.05
		19	15	0	1.52	0.11	0.98	1.04
		24	7	0	2.65	0.25	0.99	1.06
		25	7	0	2.26	0.22	0.99	1.03
		26	7	0	3.47	0.22	1.00	1.01
		27	7	0	2.36	0.26	1.00	1.06
		28	7	0	3.64	0.22	0.99	1.02

دنباله جدول ۲-۷

P	Model	Data			$c^0\sqrt{F}$	$c^1\sqrt{F}$	Axis Ratios	
		Set	N	v			Min.	Max.
3	H	16	9	0	2.27	0.09	0.95	1.02
		17	15	0	0.62	0.22	0.95	1.10
		18	9	0	0.64	0.13	0.97	1.06
		19	15	0	0.76	0.21	0.95	1.17
		24	7	0	5.11	0.19	1.00	1.01
		25	7	0	4.80	0.18	0.98	1.02
		26	7	0	9.35	0.19	0.97	1.02
		27	7	0	5.02	0.23	0.97	1.06
		28	7	0	12.51	0.20	0.96	1.04
	I	24	7	0	42.21	0.17	0.97	1.00
		25	7	0	88.93	0.18	0.94	1.00
		26	7	0	410.78	0.19	0.94	1.00
		27	7	0	147.59	0.21	0.93	1.00
	J	24	7	0	1.03	0.15	1.00	1.01
		25	7	0	0.89	0.14	0.99	1.00
		26	7	0	1.70	0.16	0.98	1.00
		27	7	0	1.38	0.21	0.97	1.00
		28	7	0	2.48	0.20	0.96	1.00
	K	29	5	0	4.70	0.10	1.00	1.01
		30	5	0	4.76	0.24	1.00	1.05
	L	31	40	32	1.17	0.14	1.00	1.01
4	M	32	24	0	81.92	0.08	0.95	1.01
		33	57	2	0.68	0.11	1.00	1.03
		34	57	2	2.13	0.53	0.86	1.03
	O	16	9	0	27.52	0.17	0.95	1.08
		17	15	0	20.26	0.19	0.93	1.05
		18	9	0	0.94	0.09	0.97	1.01
		19	15	0	16.12	0.16	0.97	1.09
	P	16	9	0	55.26	0.22	0.99	1.06
		17	15	0	58.45	0.27	0.91	1.09
		18	9	0	39.00	0.31	0.88	1.07
		19	15	0	52.16	0.23	0.89	1.03
5	Q	35	33	0	29.49	0.01	1.00	1.01
6	R	36	24	1	13.52	0.47	0.96	1.07
9	S	37	53	2	0.30	0.10	0.95	1.02

برای به دست آوردن یک تقریب درجه دوم، یک نقطه θ را در فضای پارامتر در نظر می‌گیریم. نقطه به وسیله تبدیل غیرخطی $\eta(\theta)$ به نقطه‌ای در روی صفحه مماس با مختصات زیر تصویر می‌شود.

$$\tau = Q^T [\eta(\theta) - \eta(\hat{\theta})]$$

مختصات τ ، یک دستگاه مرجع طبیعی را برای رویه انتظار فراهم می‌کند، که در حالت خاص یک مجموعه موضعی از مختصات، بدون غیر خطی بودن اثرات پارامتر به وجود می‌آید.

تقریبی بر رویه انتظار به وسیله رویه درجه دوم مرکزی شده در $\eta(\hat{\theta})$ عبارت است از:

$$\eta(\tau) = \eta(\hat{\theta}) + Q_1 \tau + \frac{[Q_1^T C^T \tau]}{2}$$

که C آرایه انحنای نسبی و Q_1 و Q_1^T از تجزیه QR ماتریس D - که شامل مشتق اول و برادرهای مشتق دوم غیر زائد است - به دست آمده‌اند (بخش ۷-۱ را ببینید). با یادآوری از بخش (۷-۱)، که گروه‌ها نشانگر ضرب ماتریسی در حالتی است که جمع بر روی اندیس‌های صورت کسر انجام می‌گیرد.

یک ناحیه درست نمائی رویه انتظار تقریبی و تصویر آن روی صفحه مماس، با دوباره نویسی معادله

(۷-۱) به شکل زیر

$$\frac{\mathbf{z}^T \mathbf{z}}{\hat{\mathbf{z}}^T \hat{\mathbf{z}}} = \left[1 + \frac{P}{N-P} F(P, N-P; \alpha) \right] \quad (۷-۲۴)$$

و جانشین کردن بردار باقی‌مانده دقیق $\mathbf{z}(\theta) = \mathbf{y} - \eta$ با بردار باقی‌مانده تقریبی $\bar{\mathbf{z}} = \mathbf{y} - \eta(\tau)$ امکان‌پذیر است.

در این جا τ نقطه‌ای در روی صفحه مماس در مختصات به دست آمده از ستون‌های Q است. اکنون بردار باقی‌مانده تقریبی در نقطه $\eta(\tau)$ برابر است با:

$$\bar{\mathbf{z}} = \hat{\mathbf{z}} - Q_1 \tau - \frac{[Q_1^T C^T \tau]}{2}$$

و بنابراین:

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^T \mathbf{z} &\approx \bar{\mathbf{z}}^T \bar{\mathbf{z}} \\ &= \hat{\mathbf{z}}^T \hat{\mathbf{z}} + \tau^T (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \tau + \frac{(\tau^T C^T \tau)(\tau^T C^T \tau)}{4} \end{aligned} \quad (۷-۲۵)$$

که $\mathbf{B} = [(Q_1^T \hat{\mathbf{z}})^T][C^T]$ یک ماتریس $P \times P$ به دست آمده از ضرب نقطه‌ای بردار باقی‌مانده دوران یافته

$Q_1^T \hat{\mathbf{z}}$ و آرایه انحنای ذاتی است. ماتریس \mathbf{B} ، ماتریس انحنای باقی‌مانده مؤثر نامیده می‌شود. زیرا انحنای نرمال مؤثر در جهت بردار باقی‌مانده $\hat{\mathbf{z}}$ را ارائه می‌کند (هامیلتون، واتر و بیتز، ۱۹۸۲).

با چشم پوشی از جمله شامل توان چهارم مربوط به طول T در (۷-۲۵) و جاگذاری دو جمله اول

(۷-۲۴)، ناحیه رویه انتظار تقریب به دست می‌آید.

$$\tau^T (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \tau = F(P, N-P; \alpha) \quad (۷-۲۶)$$

بنابراین تصویر صفحه مماس ناحیه درست نمائی رویه انتظار به طور تقریب یک بیضیگون است. زیرا، مطابق زیر $I-B$ معین مثبت است. ییلر (۱۹۶۰) نیز تذکر داده است که منحنی‌های مجموعه مربعا در مختصات z به تقریب بیضیگون وار هستند. (هامیلتون، واتر و بیتز، ۱۹۸۲) تقریب مشابهی بر (۷-۲۶) برای نواحی اطمینان به دست آورده‌اند. هر چند بنابر دلایل آمده در فصل ششم، به کارگیری نواحی اطمینان را برای الگوهای غیرخطی توصیه نمی‌کنیم.

بیضیگون‌های صفحه مماس، بستگی دارند به رویه انتظار بردار باقی‌مانده که توسط ماتریس انحنا باقی‌مانده مؤثر B پیکربندی شده‌اند و درایه‌های آن تصاویر بردارهای شتاب واقع در روی بردار باقی‌مانده را ارائه می‌کند. اگر رویه انتظار به سمت بردار باقی‌مانده خم شود، همه تصاویر و همه مقادیر ویژه B مثبت خواهند بود. در نتیجه، بیضیگون صفحه مماس از کره تقریب خطی بزرگتر است. این مطلب به طور مشهودی درست است، زیرا هنگامی که رویه انتظار به طرف بردار باقی‌مانده خم می‌شود، بیشتر نقاط واقع بر رویه انتظار نزدیکتر به نقاط مشاهده‌ای اند، تا هنگامی که رویه انتظار یک صفحه است. دلایل مشابهی در هنگامی که رویه انتظار به صورت منحنی از بردار باقی‌مانده دور می‌شوند نیز وجود دارد، که سبب منفی شدن مقادیر ویژه B و کوچکتر شدن بیضیگون صفحه مماس می‌شود.

مثال ۱۶: BOD

چون الگوی داده‌های BOD یک الگوی دو پارامتری با پارامتر خطی شرطی است، بنابراین فضای شتاب نرمال یک بعدی است. برای این داده‌ها داریم:

$$C^t = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0.301 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0.017 \end{bmatrix}$$

$$Q_1^T T \hat{z} = 0.056 \text{ و بنابراین:}$$

(هنگامی که فضای شتاب نرمال، یک بعدی باشد، B حاصل ضربی از وجه تکی در C^t است). انحنا باقی‌مانده مؤثر بسیار کوچک است و نشانگر این است که رویه انتظار فقط به آرامی به طرف پاسخ‌های مشاهده‌ای خم شده است.

باکس و کوتی (۱۹۵۶) یک ناحیه اطمینان تقریبی برای θ را به صورت زیر توصیه کرده‌اند.

$$(\theta - \hat{\theta})^T W (\theta - \hat{\theta})$$

$$W = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial \theta \partial \theta^T} \Big|_{\hat{\theta}}$$

که در آن:

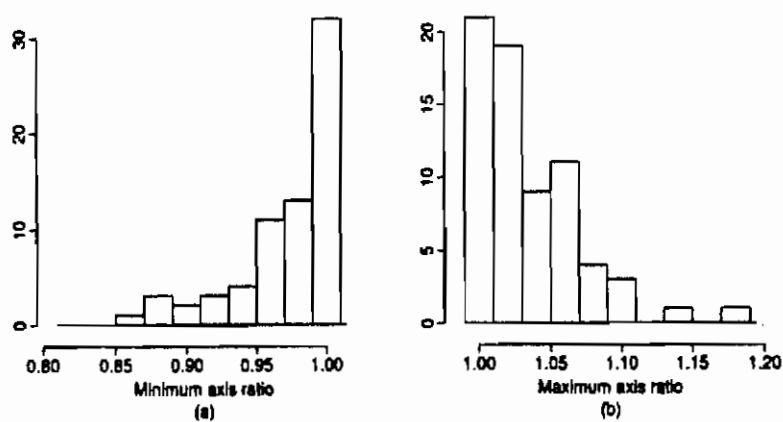
$$W = \dot{V}^T \dot{V} - [\hat{z}^T][\ddot{V}] \quad \text{یا}$$

$$R_{11}^T (I-B) R_{11}$$

چون ناحیه استنباط بر مبنای مشتقات دوم تابع مجموع مربعات بنا شده و ممکن است تصویری در فضای پارامتر از ناحیه درست‌نمایی صفحه مماسی بیضیگون وار (۷-۲۶) در نظر گرفته شود. لذا، فرض می‌شود که غیرخطی بودن اثرات پارامتر وجود ندارد و یک نگاشت خطی از صفحه مماسی بر صفحه پارامتر برقرار است. چون $S(\hat{\theta})$ یک کمینه موضعی است، در نتیجه W و بنابراین $I-B$ معین مثبت است.

یک ارزیابی مستقیم از اثر غیر خطی ذاتی در نواحی درست‌نمایی، می‌تواند به وسیله محاسبه مقدار انحراف بیضیگونهای استنباط صفحه مماس از کره‌های تقریب خطی انجام گیرد. ما این عمل را توسط محاسبه نسبت طولهای محوری بیضیگون تا شعاع کره تقریب خطی انجام می‌دهیم. نسبت مربوط به محور p به صورت $\rho_p = (1-\lambda_p)^{-1/2}$ است، به طوری که λ_p مقدار ویژه p ام B است. بنابراین نسبت‌های نهائی طول محوری ρ_1 و ρ_p ، قابل کاربرد به صورت نشانگر مستقیم از اثرات غیر خطی ذاتی است.

دو ستون آخر جدول (۷-۲)، نسبت‌های نهائی طول محوری را برای ۶۷ ترکیب الگو - مجموعه داده‌ها ارائه می‌کند. و نمودار (۷-۹)، نمایش دهنده بافت نگار این نسبت‌ها است. با توجه به داده‌ها و بافت نگار دیده می‌شود، که اثر غیر خطی ذاتی در نواحی درست‌نمایی بسیار کوچک است. با ۹۵٪ حداقل نسبت‌های محوری کمتر از ۱/۱ و با ۷۰٪ کمتر از ۱/۰۵ هستند. انحراف یک بیضیگون از یک کره به اندازه ۵٪ یا ۱۰٪ به طور کامل کوچک است. بنابراین، نتیجه می‌گیریم که، فرض مسطح بودن بر خلاف فرض مختصات یکنواخت، به طور معمول دقیق و معقول است. به این علت منحصر کردن نتایج استنباط حاصل از تحلیلی خطی به وسیله t نیم‌رخ و نمودارهای زوج نیم‌رخ را توصیه می‌کنیم. چون آنها فقط فرض مسطح بودن را لازم دارند.



نمودار ۹.۷- بافت نگار حداقل و حداکثر نسبت‌های محوری برای ۶۷ داده حقیقی

تمرین

۱-۷ الف) با به کارگیری داده‌های پیوست شماره ۴ بخش (۱-۴A)، بردارهای سرعت و شتاب را در $\hat{\theta} = (2/498, 0/2025)^T$ به دست آورید.

ب) بردارهای شتابهای غیر زائد و سرعتی را در یک ماتریسی مانند W قرار دهید، و تجزیه QR را در W انجام دهید. ماتریس‌های R_{12} و R_{22} را برای ساختن آرایه شتابی به کار ببرید.

پ) انحنای نسبی را مطابق معادله (۱۶-۷) محاسبه کنید. در صورتی که برای این مجموعه داده، $s\sqrt{P} = 0/0661\sqrt{2} = 0/935$.

۲-۷ الف) روشهای بخش (۲-۲-۷) را برای محاسبه اثرات عامل بندی دوباره الگوی مسأله (۱-۷) با $\beta = \ln \theta$ ، که به صورت زیر است، به کار ببرید.

$$f(x, \theta) = \theta_1 (1 - e^{-\theta_2 x})$$

$$f(x, \beta) = e^{\beta_1} [1 - \exp(-e^{\beta_2} x)]$$

ب) انحنای اثرات پارامتر RMS را برای هر دو حالت محاسبه کنید.

پ) کدام عامل بندی می‌تواند بازه‌های استنباط تقریب خطی بهتری را فراهم کند؟

ت) بازه‌های تقریب خطی ۹۵، ۷۵، ۵۰ درصدی را برای β_1 و β_2 محاسبه کنید و آنها را به بازه‌هایی در θ_1 و θ_2 تبدیل کنید. بازه‌های استنباط ۹۵، ۷۵، ۵۰ درصدی تقریب خطی را برای پارامترهای θ ، بعد از بسط مجدد با بازه‌های درست نمایی ستناظر محاسبه شده از نمودارهای مسأله (۳-۶)، مقایسه کنید.

۳-۷ فرض کنید یک شیئی به داخل یک آئینه که به طرف خط تصویر کج شده، تصویر شده باشد.

الف) نشان دهید که تبدیل غیر خطی متناظر این تصویر فقط شامل مؤلفه‌های پنکه‌ای است، علت چیست؟

ب) تصویر یک دایره چیست، آیا جهت چرخش مهم است؟

پ) تصویر یک مربع چیست؟ آیا جهت چرخش مهم است؟

پیوست یک

داده‌های به کار رفته در مثالها

PCB : ۱-A۱

داده‌های غلظت پلی کلرینات بی فنیل رسوبی، در یک دنباله از استخرهای پرورش ماهی قزالا، در دریاچه کابوگا، NY، که در پیچ و دیگران گزارش شده (۱۹۷۲)، در جدول (A۱-۱) ارائه شده است. سن ماهی به دقت مشخص است. زیرا، ماهی‌های یک ساله هر سال جمع آوری شده و بر حسب سال دسته‌بندی می‌شوند. تمام ماهی‌ها به طور خودکار صید شده و نمونه‌های پنج گرمی انتخاب می‌شوند. نمونه‌ها، مورد استفاده قرار گرفته و رسوبات PCB با کاربرد کروماتوگراف ستونی، برآورد شده است (قسمت در میلیون PPM).

جدول A۱-۱- غلظت PCB در مقابل سن برای ماهی‌های دریاچه

Age (years)	PCB Conc. (ppm)	Age (years)	PCB Conc. (ppm)
1	0.6	6	3.4
1	1.6	6	9.7
1	0.5	6	8.6
1	1.2	7	4.0
2	2.0	7	5.5
2	1.3	7	10.5
2	2.5	8	17.5
3	2.2	8	13.4
3	2.4	8	4.5
3	1.2	9	30.4
4	3.5	11	12.4
4	4.1	12	13.4
4	5.1	12	26.2
5	5.7	12	7.4

الگوی به صورت: $f(x, \beta) = \beta_1 + \beta_2 x$

راچنان انتخاب کرده ایم که، f پیش بینی کننده (غلظت $ln(PCB)$ و x ریشه سوم سن $\sqrt[3]{age}$ است.

۲-۸۱: رامفورد

داده های اندازه حرارت تولید شده توسط اصطحکاک، به دست آمده توسط کنت رامفورد در سال ۱۷۹۸ است. یک لوله را در یک استوانه ثابت جای داده و آن را در ته استوانه به کمک پیچ محکم نموده است. لوله توسط تعدادی اسب، به مدت سی دقیقه، چرخانیده شده است. این کار پس از این که رامفورد دماسنج را نزدیک به چهل و پنج دقیقه در محل خود قرار داد، انجام گرفته است. سپس، در فاصله زمانی مناسب، دمای کاهشی اندازه گیری شده است. (رولر، ۱۹۵۰). (جدول ۲-۸۱، را ببینید).

الگوی بر مبنای قانون خنک شدن نیوتن به صورت زیر در نظر گرفته شده است:

$$f(x, \theta) = 60 + 70 e^{-\theta x}$$

در این جا f دمای پیش بینی شده و x زمان است.

جدول ۲-۸۱- دما در مقابل زمان برای آزمایش خنک شدن رامفورد.

Time (min)	Temperature (°F)	Time (min)	Temperature (°F)
4	126	24	115
5	125	28	114
7	123	31	113
12	120	34	112
14	119	37.5	111
16	118	41	110
20	116		

۳-۸۱: پرومیسین

داده ها مربوط به «سرعت» واکنش آنزیمی است که توسط تلوور (۱۹۷۴) به دست آمده است. تعداد شمارش در دقیقه محصول رادیواکتیو به حاصل از واکنش، به شکل تابعی از غلظت ماده، به صورت قسمت در میلیون (ppm) بیان شده و از این شمارش ها، نرخ اولیه، یا «سرعت» واکنش محاسبه شده است (شمارش در مجذور دقیقه). آزمایش یک بار با تیمار آنزیم با پرومیسین انجام گرفته است. (α) در جدول (۳-۸۱) و بار

دیگر با عدم تیمار آنزیم b . فرض می‌شود که سرعت نهائی (θ_1) توسط پرومیسین معرفی شده، تحت تأثیر قرار گرفته است. ولی پارامتر نیمه - سرعت (θ_2) چنین نیست. الگوی میشلیز - متن عبارت است از:

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 x}{\theta_2 + x}$$

در این جا، f سرعت پیش بینی شده و x غلظت ماده است.

جدول ۳-۴۱- سرعت واکنش در مقابل غلظت ماده برای آزمایش پرومیسین.

Substrate Concentration (ppm)	Velocity (counts/min ²)	
	(a) Treated	(b) Untreated
0.02	76	67
	47	51
0.06	97	84
	107	86
0.11	123	98
	139	115
0.22	159	131
	152	124
0.56	191	144
	201	158
1.10	207	160
	200	

BOD : ۴-۴۱

داده‌های نیاز اکسیژن بیوشیمی توسط مارسک (۱۹۶۷) به دست آمده است. برای محاسبه، نمونه‌ای از آب جاری رودخانه‌ای انتخاب و در آن، خوراک غیر زنده و اکسیژن نامحلول را تزریق نموده، سپس، در بطریهای BOD تقسیم بندی شده‌اند. هر بطری با ترکیبی از موجودات ذره بینی بی آزار کشت و مهر و موم گردیده و در دمای ثابتی نگهداری شده است. بطری‌ها به صورت متناوب باز و غلظت اکسیژن محلول برحسب میلیگرم در لیتر (mg/l) مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است (جدول ۴-۴۱). مقادیر داده شده در جدول، معدل دو تجزیه و تحلیل در هر بطری است.

جدول ۴-۸۱- نیاز اکسیژن بیوشیمی بر حسب زمان.

Time (days)	Biochemical Oxygen Demand (mg/l)	Time (days)	Biochemical Oxygen Demand (mg/l)
1	8.3	4	16.0
2	10.3	5	15.6
3	19.0	7	19.8

الگوئی نمائی کاهشی با نرخ ثابت به شرح زیر به دست آمده است. که در آن f نیاز اکسیژن بیوشیمی پیش‌بینی شده و x زمان است.

$$f(x, \theta) = \theta_1 (1 - e^{-\theta_2 x})$$

۵-۸۱: هم ترکیبی

داده‌های نرخ واکنش کاتالیزور هم ترکیبی m پنتان به ایزوپنتان بر حسب فشار جزئی اکسیژن m پنتان و ایزوپنتان در کار (۱۹۶۰) ارائه شده و در جدول (۵-۸۱) دوباره تولید شده است. هم ترکیبی یک فرایند شیمیایی است، که یک ترکیب مرکب شیمیائی به واحدهای ساده‌تری به نام ایزومر تبدیل می‌شوند. عمل کاتالیزور سرعت بخشیدن به انجام واکنش است. نرخ واکنش به عوامل متعددی، مانند فشار جزئی تولیدی و غلظت کاتالیزور بستگی دارد. نرخ واکنش دیفرانسیلی بر حسب گرم از ایزوپنتان تولید شده در گرم از کاتالیزور در ساعت (hr^{-1}) بیان شده است. فشار جزئی دائم یک مؤلفه به صورت کسری از مؤلفه زمان کل فشار، بر حسب پوند در قدر مطلق اینچ مربع ($PsiA$) در نظر گرفته شده است.

یک شکل عادی الگو برای نرخ واکنش، الگوی هوگن - واتسن است. (هوگن و واتسن، ۱۹۴۷). حالت خاصی از این الگو به شرح زیر است.

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 \theta_3 (x_2 - x_3 / 1.632)}{1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_3}$$

در این الگو، f نرخ واکنش پیش‌بینی شده، x_1 فشار جزئی هیدروژن، x_2 فشار جزئی ایزوپنتان و x_3 فشار جزئی n پنتان است.

جدول ۵-۸۱- نرخ واکنش هم ترکیبی n-پنتان به ایزوپنتان.

Partial Pressure (psia)			Reaction Rate (hr ⁻¹)
Hydrogen	n-Pentane	Isopentane	
205.8	90.9	37.1	3.541
404.8	92.9	36.3	2.397
209.7	174.9	49.4	6.694
401.6	187.2	44.9	4.722
224.9	92.7	116.3	0.593
402.6	102.2	128.9	0.268
212.7	186.9	134.4	2.797
406.2	192.6	134.9	2.451
133.3	140.8	87.6	3.196
470.9	144.2	86.9	2.021
300.0	68.3	81.7	0.896
301.6	214.6	101.7	5.084
297.3	142.2	10.5	5.686
314.0	146.7	157.1	1.193
305.7	142.0	86.0	2.648
300.1	143.7	90.2	3.303
305.4	141.1	87.4	3.054
305.2	141.5	87.0	3.302
300.1	83.0	66.4	1.271
106.6	209.6	33.0	11.648
417.2	83.9	32.9	2.002
251.0	294.4	41.5	9.604
250.3	148.0	14.7	7.754
145.1	291.0	50.2	11.590

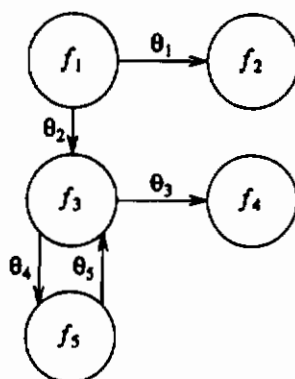
۶-۸۱-α-پینن

داده‌های هم ترکیبی گرمای α-پینن، مؤلفه‌ای از ترپنتین، در فوگیت و هاوکینز (۱۹۴۷) گزارش شده است. در این آزمایش، غلظت نسبی (α-%) پینن و سه محصول فرعی تولیدی، در هر ۸ زمان اندازه‌گیری شده است. غلظت نسبی هر چهار محصول فرعی نسبت داده شده از سایر غلظتهاست. در جدول (۶-۸۱)، غلظت اولیه α-پینن ۱۰۰٪ در نظر گرفته شده است.

یک الگوی جنبشی خطی که در شکل (۶-۸۱) نشان داده شده در باکس و دیگران (۱۹۷۳) پیشنهاد شده است. این الگو برای تولید دی-پینن و آلوسیمین فراهم شده است، که α و β-پیرنون و یک دیمر را به نوبت تولید می‌کند.

جدول ۶-۸۱. غلظت نسبی تولیدات در مقابل زمان برای داده‌های هم ترکیبی گرمای α -پینن در $189/5^\circ$ سانتی‌گراد.

Time (min)	α -Pinene (%)	Dipentene (%)	Alloocimene (%)	Pyronene (%)	Dimer (%)
1 230	88.35	7.3	2.3	0.4	1.75
3 060	76.4	15.6	4.5	0.7	2.8
4 920	65.1	23.1	5.3	1.1	5.8
7 800	50.4	32.9	6.0	1.5	9.3
10 680	37.5	42.7	6.0	1.9	12.0
15 030	25.9	49.1	5.9	2.2	17.0
22 620	14.0	57.4	5.1	2.6	21.0
36 420	4.5	63.1	3.8	2.9	25.7



نمودار ۱-۸۱. دستگاه نموداری برای الگوی α -پینن. f_1 غلظت α -پینن، f_2 غلظت دی پنتان، f_3 غلظت آلوسپین، f_4 غلظت پیرونن و f_5 غلظت دیمر.

۷-۸۱: سولفوسیگنازول

داده‌های تغییر شکل سولفوسیگنازول که توسط کاپلان و دیگران (۱۹۷۲) به دست آمده، در جدول (۷-۱) دوباره تولید شده‌اند. در این آزمایش، سولفوسیگنازول به یک موضوع داخل وریدی تزریق می‌شود. نمونه‌های خون در زمان‌های مشخصی برداشت شده و غلظت سولفوسیگنازول موجود در پلاسما بر حسب میکروگرم در میلیون (Mg/ml) اندازه‌گیری شده است. برای داده‌های وریدی یک الگوی دو قسمتی پیشنهاد شده، ما آن را به صورت مجموع دو جمله نمائی نوشته‌ایم. در این الگو که به شرح زیر است، f غلظت سولفوسیگنازول پیش‌بینی شده در زمان x است.

$$f(x, \theta) = \theta_1 e^{-\theta_2 x} + \theta_2 e^{-\theta_4 x}$$

جدول ۷-۸۱- غلظت سولفوسیگنازول در مقابل زمان

Time (min)	Sulfisoxazole Conc. (µg/ml)	Time (min)	Sulfisoxazole Conc. (µg/ml)
0.25	215.6	3.00	101.2
0.50	189.2	4.00	88.0
0.75	176.0	6.00	61.6
1.00	162.8	12.00	22.0
1.50	138.6	24.00	4.4
2.00	121.0	48.00	0.1

۸-۸۱: روغن ماشین

داده‌های به دست آمده از گرانروی جنبشی یک روغن ماشین به استوکس به عنوان تابعی از: دما ($^{\circ}\text{C}$) و فشار (بر حسب جو atm) در جدول (۸-۸۱) ارائه شده است. الگویی لگاریتمی برای گرانروی مطابق بحث لینسن (۱۹۷۵) پیشنهاد شده است. الگوی مزبور به شرح زیر است.

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1}{\theta_2 + x_1} + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_2^2 + \theta_5 x_2^3 + (\theta_6 + \theta_7 x_2^2) x_2 \exp \left[\frac{-x_1}{\theta_8 + \theta_9 x_2^2} \right]$$

در این الگو f لگاریتم طبیعی گرانروی پیش‌بینی شده، x_1 دما و x_2 فشار است.

جدول ۹-۸۱. لگاریتم گرانیوزی روغن ماشین در مقابل فشار و دما.

T = 0°C		T = 25°C	
Pressure (atm)	ln[viscosity (s)]	Pressure (atm)	ln[viscosity (s)]
1.000	5.10595	1.000	4.54223
740.803	6.38705	805.500	5.82452
1407.470	7.38511	1505.920	6.70515
363.166	5.79057	2339.960	7.71659
1.000	5.10716	422.941	5.29782
805.500	6.36113	1168.370	6.22654
1868.090	7.97329	2237.290	7.57338
3285.100	10.47250	4216.890	10.3540
3907.470	11.92720	5064.290	11.9844
4125.470	12.42620	5280.880	12.4435
2572.030	9.15630	3647.270	9.52333
		2813.940	8.34496

T = 37.8°C		T = 98.9°C	
Pressure (atm)	ln[viscosity (s)]	Pressure (atm)	ln[viscosity (s)]
516.822	5.17275	1.000	3.38099
1737.990	6.64963	685.950	4.45783
1008.730	5.80754	1423.640	5.20675
2749.240	7.74101	2791.430	6.29101
1375.820	6.23206	4213.370	7.32719
191.084	4.66060	2103.670	5.76988
1.000	4.29865	402.195	4.08766
2922.940	7.96731	1.000	3.37417
4044.600	9.34225	2219.700	5.83919
4849.800	10.51090	3534.750	6.72635
5605.780	11.82150	4937.710	7.76883
6273.850	13.06800	6344.170	8.91362
3636.720	8.80445	7469.350	9.98334
1948.960	6.85530	5640.940	8.32329
1298.470	6.11898	4107.890	7.13210

۹-۸۱: کلراید

داده‌های مربوط به نرخ انتقال یونهای سولفید سلولهای خونی معلق در یک نمک محلول توسط و. ه. دنیس و پ. وود در دانشگاه ویسکانزی که توسط سردنی (۱۹۷۰) تجزیه و تحلیل شده است، غلظت کلراید (%) از یک منحنی پیوسته تولید شده توسط پتانسیل الکتریکی محاسبه شده است (جدول ۹-۸۱).
الگوی به صورت زیر به کمک نظریه انتقال یونی به دست آمده است. در این الگو، f غلظت کلراید

یش‌بینی شده و x زمان است.

$$f(x, \theta) = \theta_1 (1 - \theta_2 e^{-\theta_3 x})$$

جدول ۹-۸۱. غلظت کلراید در مقابل زمان

Time (min)	Conc. (%)	Time (min)	Conc. (%)	Time (min)	Conc. (%)
2.45	17.3	4.25	22.6	6.05	26.6
2.55	17.6	4.35	22.8	6.15	27.0
2.65	17.9	4.45	23.0	6.25	27.0
2.75	18.3	4.55	23.2	6.35	27.0
2.85	18.5	4.65	23.4	6.45	27.0
2.95	18.9	4.75	23.7	6.55	27.3
3.05	19.0	4.85	24.0	6.65	27.8
3.15	19.3	4.95	24.2	6.75	28.1
3.25	19.8	5.05	24.5	6.85	28.1
3.35	19.9	5.15	25.0	6.95	28.1
3.45	20.2	5.25	25.4	7.05	28.4
3.55	20.5	5.35	25.5	7.15	28.6
3.65	20.6	5.45	25.9	7.25	29.0
3.75	21.1	5.55	25.9	7.35	29.2
3.85	21.5	5.65	26.3	7.45	29.3
3.95	21.9	5.75	26.2	7.55	29.4
4.05	22.0	5.85	26.5	7.65	29.4
4.15	22.3	5.95	26.5	7.75	29.4

۱۰-۸۱: اتیل آکریل

داده‌های مربوط به تغییر شکل اتیل آکریل که از پرتو افشانی رادیواکتیو اتیل اکریل بر خرگوش‌ها به دست آمده است (واتر، دبتزی و استیراتلی، ۱۹۸۶). به هر خرگوش مقدار مشخصی از ترکیب از طریق لوله‌ای که در معده‌اش نصب شده خورنده شده و در قفس بسته‌ای نگهداری می‌شود، به طوری که هوا بتواند داخل شیشه جمع آوری شود. اگرالیت به داخل شیشه نگهداری دمیده شده به طوری که پاسخ تجمعی اندازه‌گیری شده، همان CO_2 در فاصله‌های جمع‌آوری است. پاسخ‌های ارائه شده در جدول ۱۰-۸۱، معدل ۹ خرگوش است، که از میان CO_2 تجمعی نرمال شده توسط داروی واقعی بر حسب واحد گرم CO_2 بر گرم آکریلیت در گرم خرگوش است. یک الگوی تجربی با سه جمله‌نمایی بر حسب نقاط مورد انتظار و علل فیزیکی به شرح زیر ارائه شده است. لگاریتم تابع تجمعی بر لگاریتم داده‌ها برازش داده شده و پالایش‌های

بخش (۹-۳) نیز انجام گرفته شده است. الگوی تجمعی به شرح زیر است.

$$F(x, \theta) = -\frac{\theta_4 + \theta_5}{\theta_1} e^{-\theta_1 x_1} (1 - e^{-\theta_1 x_2}) + \frac{\theta_4}{\theta_2} e^{-\theta_2 x_1} (1 - e^{-\theta_2 x_2}) + \frac{\theta_5}{\theta_3} e^{-\theta_3 x_1} (1 - e^{-\theta_3 x_2})$$

که F مقدار CO_2 پیش‌بینی شده بیرون داده شده در یک بازه، x_1 بازه شروع زمانی و x_2 بازه در هنگام آزمایش است.

جدول ۱۰-۱A- بازه‌های جمع آوری مقدار متوسط CO_2 خروجی نرمال شده.

Collection Interval (hr)		CO_2 (g)
Start	Length	
0.0	0.25	0.01563
0.25	0.25	0.04190
0.5	0.25	0.05328
0.75	0.25	0.05226
1.0	0.5	0.08850
1.5	0.5	0.06340
2.0	2.0	0.13419
4.0	2.0	0.04502
6.0	2.0	0.02942
8.0	16.0	0.02716
24.0	24.0	0.01037
48.0	24.0	0.00602

۱۱-A۱: ساکارین

داده‌های تغییر شکل مؤلفه‌های ساکارین که توسط رنویک (۱۹۸۲) به دست آمده است. در این آزمایش به هر خرگوش یک مقدار مشخص ساکارین داده شده و مقدار ساکارین جذب شده توسط جمع آوری اوره موجود در بازه‌های پیوسته از زمان اندازه‌گیری شده است. اندازه‌گیری پاسخ سطح رادیواکتیوی از ادرار است که بر حسب مقدار ساکارین در میکروگرم (μg) تبدیل شده است. (جدول ۱۱-A، را ببینید).

جدول A1-۱۱. بازه‌های جمع‌آوری شده و مقدار ساکارین جذبی.

Collection Interval (min)		Saccharin (μg)
Start	Length	
0	5	7518
5	10	6275
15	15	4989
30	15	2580
45	15	1485
60	15	861
75	15	561
90	15	363
105	15	300

یک الگوی تجربی حجره‌ای با دو جمله نمایشی، از برازش داده‌های مورد انتظار در نظر گرفته شده است. لگاریتم تابع تجمعی بر لگاریتم داده‌ها برازش داده شده و پالایش مطابق بخش (۳-۹) انجام گرفته است. تابع تجمعی به شرح زیر است.

$$F(x, \theta) = \frac{\theta_3}{\theta_1} e^{-\theta_1 x_1} (1 - e^{-\theta_1 x_2}) + \frac{\theta_4}{\theta_2} e^{-\theta_2 x_1} (1 - e^{-\theta_2 x_2})$$

در این الگو، F ساکارین جذبی پیش‌بینی شده در یک بازه، x_1 بازه نرمال شروع و x_2 بازه طول انجام آزمایش است.

A1-۱۲: نیتريت مصرفی

داده‌های مصرف نیتريت توسط بوته‌های لوییا به عنوان تابعی از شدت نور توسط ج - ر - الیوت و در. پیرسن از دانشگاه ویلفرید لورپیر به دست آمده است. قسمتی از برگ‌های اولیه بوته‌های لویای شانزده روزه به هشت سطح از شدت و بر حسب میکروانیشترین در متر مربع در ثانیه ($\mu\text{E}/\text{m}^2/\text{s}$) تقسیم شده و نیتريت جذب شده بر حسب نانومول از N_2O_2 در گرم در ساعت ($\text{nmol}/\text{g}/\text{hr}$) اندازه‌گیری شده است. آزمایش در چند روز انجام پذیرفته است. (جدول A1-۱۲).

یک الگوی تجربی چنان در نظر گرفته شده که نیتروژن جذب شده صفر، در شدت نور صفر انجام پذیرد و به یک مجانبی از شدت نور افزایشی میل کند. دو الگو برازش داده شده که هر دو به یک نقطه اوج می‌رسند و سپس، نزول می‌نمایند. شرح آن در بخش (۳-۱۲) ارائه شد. این الگوها به شرح زیر است:

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 x}{\theta_2 + x + \theta_3 x^2} \quad \text{و} \quad f(x, \theta) = \theta_1 (e^{-\theta_3 x} + e^{-\theta_2 x})$$

در این الگوها f نیتروژن مصرفی پیش‌بینی شده و x شدت نور است.

جدول ۱۲-ا۱- نیتريت مصرفی در مقابل شدت نور.

Light Intensity ($\mu\text{E}/\text{m}^2 \text{ s}$)	Nitrite Utilization (nmol/g hr)	
	Day 1	Day 2
2.2	256	549
	685	1 550
	1 537	1 882
5.5	2 148	1 888
	2 583	3 372
	3 376	2 362
9.6	3 634	4 561
	4 960	4 939
	3 814	4 356
17.5	6 986	7 548
	6 903	7 471
	7 636	7 642
27.0	9 884	9 684
	11 597	8 988
	10 221	8 385
46.0	17 319	13 505
	16 539	15 324
	15 047	15 430
94.0	19 250	17 842
	20 282	18 185
	18 357	17 331
170.0	19 638	18 202
	19 043	18 315
	17 475	15 605

S-PMMA : ۱۳-ا۱

داده‌های رفتار هادی گونه پلی سیندیو تاکتیک (متیل متاکریلیت) *S-PMMA*، که توسط هاوریلیاک و نگامین (۱۹۶۷) به دست آمده است. یک قرص از پلیمر در بین دو الکترود فلزی پل نارسا جا داده شده، به طوری که یک بازو از چهاربازوی پل الکتریکی را تشکیل می‌دهد. پل با ولتاژ متناوب با بسامد تغذیه می‌شود. به طوری که این ولتاژ بین ۵ تا ۵۰۰,۰۰۰ هرتز (H_2) قابل تغییر است. تعادل پل توسط به کارگیری ظرفیت و ضریب هدایتی استاندارد قابل دستیابی است. ثابت مختلط عبور برق توسط به کارگیری تغییر از استاندارد

نسبی به ثابت سلولی هدایت برق محاسبه شده است. اندازه گیری با بهره گیری از تصحیح پیوسته ظرفیت (واقعی) و هدایت (مجازی) بازوهای پل که در یک بسامد خاص تحریک شده، انجام پذیرفته است. پاسخهای اندازه گیری شده ظرفیت نسبی و نارسانا نسبی است (بی بعد) جدول (۱۳-۴۱) را ببینید.

جدول ۱۳-۴۱- ثابت عایق واقعی و مجازی در مقابل بسامد برای S-PMMA در $۸۶/۷^\circ\text{F}$

Frequency (Hz)	Relative Impedance		Frequency (Hz)	Relative Impedance	
	Real	Imag		Real	Imag
30	4.220	0.136	3000	3.358	0.305
50	4.167	0.167	5000	3.258	0.289
70	4.132	0.188	7000	3.193	0.277
100	4.038	0.212	10000	3.128	0.255
150	4.019	0.236	15000	3.059	0.240
200	3.956	0.257	20000	2.984	0.218
300	3.884	0.276	30000	2.934	0.202
500	3.784	0.297	50000	2.876	0.182
700	3.713	0.309	70000	2.838	0.168
1000	3.633	0.311	100000	2.798	0.153
1500	3.540	0.314	150000	2.759	0.139
2000	3.433	0.311			

الگو تجربی است و تعمیم یافته ای از دو الگویی است که براساس نظریه بنا شده اند. الگو مطابق زیر است.

$$f(x, \theta) = \theta_2 + \frac{\theta_1 - \theta_2}{\left[1 + \left(i2\pi x e^{-\theta_3} \right)^{\theta_4} \right]^{\theta_5}}$$

در این الگو، f مقاومت مختلط نسبی برق پیش بینی و x بسامد است.

۱۴-۴۱: تتراسایکلین

داده های تغییر شکل تتراسایکلین که در واگنر (۱۹۶۷) ارائه شده است. در این آزمایش یک مؤلفه تتراسایکلین از راه دهن به موجودی خورنده شده و غلظت تتراسایکلین هیدروکلراید موجود در خونابه بر حسب میکروگرم در میلی لیتر ($\mu\text{g/ml}$) در دوره های ۱۶ ساعته اندازه گیری شده است (جدول ۱۴-۴۱). یک الگوی دو حجره ای با مشارکت زمان تلف شده به شرح زیر در نظر گرفته شده است.

$$f(x, \theta) = \theta_3 [e^{-\theta_1(x-\theta_4)} + e^{-\theta_2(x-\theta_4)}]$$

که در آن، f غلظت تتراسیکلین هیدورکلراید در زمان x است.

جدول ۱۴-۸۱- غلظت تتراسایکلین در مقابل زمان

Tetracycline		Tetracycline	
Time (hr)	Conc. ($\mu\text{g/ml}$)	Time (hr)	Conc. ($\mu\text{g/ml}$)
1	0.7	8	0.8
2	1.2	10	0.6
3	1.4	12	0.5
4	1.4	16	0.3
6	1.1		

۱۵-۸۱: روغن معدنی

داده‌های مربوط به روغن کشتی از سنگ که توسط هیوبارد و رینسون (۱۹۵۰) به دست آمده و در جدول (۱۵-۸۱) گزارش شده است. روغن معدنی شامل مواد عالی است که به طور سامان یافته‌ای در ساختمان سنگ محصور شده است. برای استخراج از سنگ، حرارت دادن لازم است. به همین دلیل این روش را روغن کشتی می‌گویند. در هنگام روغن کشتی، مواد عالی بنزن - که به کروژن معروف است - را به روغن و قیر معدنی، به روش شیمیائی تفکیک می‌کند. همچنین، محصولات فرعی غیر قابل اندازه‌گیری از مواد عالی غیر حلال باقی مانده و گازهای سبک وجود دارد. پاسخهای اندازه‌گیری شده، غلظت روغن و غیر معدنی (%) است. غلظت اولیه کروژن ۱۰۰٪ است. زایگل و گورمن (۱۹۸۰) یک الگوی جنبشی خطی با دستگاه نموداری مربوطه در شکل (۲-۸۱) ارائه شده است.

جدول ۱۵A۱- غلظت نسبی قیر معدنی و روغن در مقابل زمان و دما برای روغن کشی از سنگ روغنی.

T = 673 K			T = 698 K		
Time	Concentration (%)		Time	Concentration (%)	
(min)	Bitumen	Oil	(min)	Bitumen	Oil
5	0.0	0.0	5.0	6.5	0.0
7	2.2	0.0	7.0	14.4	1.4
10	11.5	0.7	10.0	18.0	10.8
15	13.7	7.2	12.5	16.5	14.4
20	15.1	11.5	15.0	29.5	21.6
25	17.3	15.8	17.5	23.7	30.2
30	17.3	20.9	20.0	36.7	33.1
40	20.1	26.6	25.0	27.3	40.3
50	20.1	32.4	30.0	16.5	47.5
60	22.3	38.1	40.0	7.2	55.4
80	20.9	43.2	50.0	3.6	56.8
100	11.5	49.6	60.0	2.2	59.7
120	6.5	51.8			
150	3.6	54.7			

T = 723 K			T = 748 K		
Time	Concentration (%)		Time	Concentration (%)	
(min)	Bitumen	Oil	(min)	Bitumen	Oil
5.0	8.6	0.0	3.0	0.7	0.0
7.5	15.8	2.9	4.5	17.3	2.9
8.0	25.9	16.5	5.0	23.0	17.3
9.0	25.2	24.4	5.5	24.4	20.9
10.0	26.6	29.5	6.0	23.0	25.9
11.0	33.8	35.2	6.5	33.1	29.5
12.5	25.9	39.5	7.0	31.6	33.8
15.0	20.1	45.3	8.0	20.9	45.3
17.5	12.9	43.1	9.0	10.1	53.2
17.5	9.3	54.6	10.0	4.3	58.2
20.0	3.6	59.7	12.5	0.7	57.5
20.0	2.2	53.9	15.0	0.7	61.1

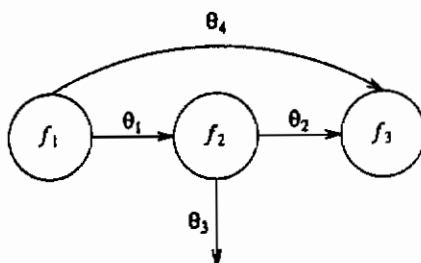
T = 773 K			T = 798 K		
Time	Concentration (%)		Time	Concentration (%)	
(min)	Bitumen	Oil	(min)	Bitumen	Oil
3.0	6.5	0.0	3.00	25.2	20.9
4.0	24.4	23.0	3.25	33.1	25.2
4.5	26.6	32.4	3.50	21.6	17.3
5.0	25.9	37.4	4.00	20.9	36.7
5.5	17.3	45.3	5.00	4.3	56.8
6.0	21.6	45.3	7.00	0.0	61.8
6.5	1.4	57.5			
10.0	0.0	60.4			

۱۶-۱- لیوپروتئین

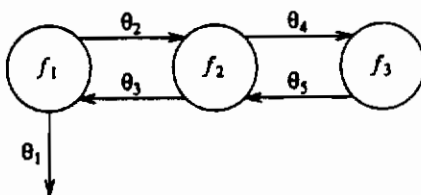
داده‌های تغییر شکل لیوپروتئین که در اندرسن (۱۹۸۳) گزارش شده است. پاسخ، همان غلظت است که به صورت درصدی از ردیاب است که در خونابه یک میمون موجود بوده و توسط مقدار کمی از ماده تزریقی حاصل شده است. اندازه‌گیری در فواصل نیم و یک روزه انجام شده است (جدول ۱۶-۱). یک الگوی حجره‌ای با دو جمله نمائی بر اساس ترسیم داده‌ها پیشنهاد شده است. نمودار دستگاهی مربوط به الگوی نهائی زنجیره‌ای سه حجره‌ای که در بخش (۴-۵) برازش داده شد، در نمودار (۳-۱) ارائه شده است. (یک الگوی مادری به شرح بخش (۴-۵) نیز برازش داده شده است. فرض می‌شود که غلظت اولیه در حجره ۱ مساوی ۱۰۰٪ و بنابراین تنها پاسخ اندازه‌گیری شده غلظت حجره شماره یک است.

جدول ۱۶-۱- غلظت ردیاب لیوپروتئین در مقابل زمان.

Time (days)	Tracer Conc. (%)	Time (days)	Tracer Conc. (%)
0.5	46.10	5.0	3.19
1.0	25.90	6.0	2.40
1.5	17.00	7.0	1.82
2.0	12.10	8.0	1.41
3.0	7.22	9.0	1.00
4.0	4.51	10.0	0.94



نمودار ۲-۱- دستگاه، نموداری برای الگوی سنگ روغن، f_1 تروگن، f_2 قیر معدنی و f_3 روغن است.



نمودار ۳-۱- نمودار دستگاهی برای الگوی ترانساکلین، f_1 غلظت در حجره نمونه‌ای است. سایر حجره‌ها تفسیر فیزیکی ندارند.

پیوست ۲

تجزیه QR به کمک تبدیل هوس هولدر

برای تجزیه QR ماتریس X با بعد $N \times P$ ، تبدیل هوس هولدر (هوس هولدر، ۱۹۵۸) را که تعمیمی از بازتاب دو صفحه است به کار می‌بریم. فرض کنیم ماتریس‌های $N \times N$ به شکل زیر وجود دارند:

$$H_u = I - 2uu^T$$

که در این جا I ماتریس همانی $N \times N$ و u بردار همانی N بعدی $\|u\| = \sqrt{u^T u} = 1$ و H_u یک ماتریس متقارن و متعامد است، بنابراین:

$$H_u^T = I^T - 2uu^T = H_u$$

$$H_u^T H_u = I - 4uu^T + 4uu^T uu^T = I$$

و

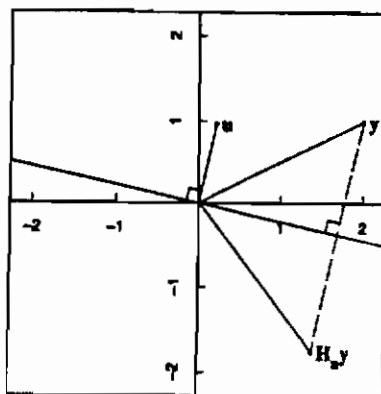
اگر برداری مانند y را از سمت راست در H_u ضرب می‌کنیم. داریم:

$$H_u y = y - 2uu^T y$$

که متناظر با بازتاب y نسبت به خط عمودی u و گذرنده از مبدأ مطابق شکل (۱-۸۲) است. با انتخاب یکی از دو مورد زیر، که $e_1 = (1, 0, 0, \dots, 0)^T$ است، تبدیل هوسی هولدر با انتخاب بردار y واقع بر محور x ها (که یک دستگاه مختصات جدید دوران یافته است) قابل ساختن است. یعنی در مختصات جدید بردار $H_u y$ دارای مختصات $(\pm \|y\|, 0, \dots, 0)^T$ است.

$$U = \frac{y - \|y\| e_1}{\|y - \|y\| e_1\|} \quad (1-82)$$

$$U = \frac{y + \|y\| e_1}{\|(y + \|y\| e_1)\|} \quad (۲-۴۲)$$



نمودار ۲-۴۲. تبدیل هوس هولدر، نشان دهنده بازتاب بردار y نسبت به خط عمود بر u برای تشکیل $H_u y$

مثال ۱۴: PCB

برای تجزیه QR از ماتریس x زیر مربوط به مثال (۳-PCB)، یک تبدیل H_{u_1} را انتخاب می‌کنیم تا اولین ستون x_1 از X واقع بر محور x ها با به کارگیری (۲-۴۱) را به دست آوریم. u_1 و X_1 به شرح زیر به دست می‌آید.

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1.26 \\ 1 & 1.82 \\ 1 & 2.22 \end{bmatrix}$$

$$u_1 = \frac{(1, 1, 1)^T - \sqrt{3}(1, 0, 0)^T}{1.5925} = \frac{(-0.7321, 1, 1)^T}{1.5925}$$

$$X_1 = H_{u_1} X = \begin{bmatrix} 1.7321 & 3.0600 \\ 0 & -0.6388 \\ 0 & -0.2388 \end{bmatrix}$$

حال دومین دوران را عمود بر اولی با انتخاب u_2 انجام می‌دهیم. H_{u_2} سطرهاى زیر قطری از ستون دوم X_1 بدون تغییر ستون اول را صفر می‌کند. برای اطمینان از این که اولین ستون تغییر نکرده، اولین درایه u_2 را صفر می‌کنیم. در این حالت بردار u_2 به شرح زیر است:

$$u_2 = \frac{(0, -0.6388, -0.2388)^T - 0.6820(0, 1, 0)^T}{1.3422}$$

در نتیجه داریم :

$$R = H_{u_2} H_{u_1} X = \begin{bmatrix} 1.7321 & 3.0600 \\ 0 & 0.6820 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

همچنان که در مثال بالا نشان داده شده است. ماتریس R همزمان، با ایجاد بردارهای بازتاب هوس هولدر u_1, \dots, u_p ، به دست می آید. Q مورد نظر توسط $R = Q^T X$ قابل محاسبه نیست که، $Q^T = H_{u_p}, \dots, H_{u_1}$ است. به علت متقارن بودن تبدیل هوس هولدر، داریم.

$$Q = H_{u_1}^T \dots H_{u_p}^T = H_{u_1} \dots H_{u_p}$$

توجه شود که Q تقریباً هیچ گاه به طور صریح قابل محاسبه نیست، درحالی که هر مضارب Q یا Q^T به کارگیری تبدیل هوس هولدر با ترتیب مناسب قابل تشکیل است. برای انجام تبدیل هوس هولدر H_{u_i} بر یک بردار y باید $2u_i^T y$ را از y کاست. در نتیجه محاسبه یک ضرب داخلی و کاستن مضربی از یک بردار از بردار دیگری نیاز است.

در رگرسیون خطی و غیر خطی، گاهی راحت تر است که تجزیه QR را برای ماتریس افزوده X بایر بردار y تشکیل دهیم. تجزیه QR از $(X|y)$ بردار w_1 را به طور مستقیم در p سطر اول $(p+1)$ امین ستون R تولید می کند [۱-۲۱] را ببینید]. درایه $(p+1)$ ام آن ستون $\|w_2\|$ را ارائه می کند، که می تواند در آزمون همگرایی رگرسیون غیر خطی مطابق بحث بخش (۲-۲-۳) به کار رود. پس از همگرایی می توان انحراف معیار باقی مانده را حساب کرد.

مثال ۱۵ : PCB

بنابرا داده های مثال PCB-۳ با $y = \begin{bmatrix} 0.92 \\ 2.15 \\ 2.52 \end{bmatrix}$ ، ماتریس $Q^T y$ را حساب می کنیم. $Q^T y = H_{u_1} (y - 2u_1 u_1^T y)$

$$= H_{u_1} \begin{bmatrix} 3.2275 \\ -1.0024 \\ -0.6324 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.2275 \\ 1.1601 \\ -0.2414 \end{bmatrix}$$

کاربرد تبدیل هوس هولدر سریعتر و از نظر محاسبات عددی پایدارتر از روش صریح تشکیل Q است. به ویژه هنگامی که N نسبت به P بزرگ باشد. بعلاوه در کاربرد تبدیل هوس هولدر، فقط نیاز به مرتب کردن P بردار u_1 تا u_p را دارد، که در ذخیره سازی نسبت به مرتب کردن N^2 درایه Q بهتر و اساسی تر است.

در اجرا کردن واقعی تجزیه QR ، مانند کدگذاری مطابق لینیک (دو نگارا و دیگران ۱۹۷۹ فصل ۱۹) انتخاب (۱- A_2) یا (۲- A_2) برای تعریف Π بر مبنای علامت اولین مؤلفه Π بنا شده است. اگر این مؤلفه منفی باشد (۱- A_2) به کار می‌رود و در صورت مثبت بودن ۲- A_2 را بکار می‌بریم. برای بحث بیشتر در تجزیه QR به دو نگارا و دیگران (۱۹۷۹) و استوارت (۱۹۷۳) مراجعه شود.

پیوست ۳

شبه برنامه گام‌های محاسباتی برای محاسبه الگوریتم‌ها

در چند بخش این کتاب چگونگی برآورد و خلاصه محاسبات را بیان کردیم. برای کمک به خواننده در درک روشهای محاسبه و برای فراهم کردن ابزار راهنمایی شبه برنامه‌ای برای اکثر الگوریتم‌های مهم در این پیوست بیان می‌شود.

A۳-۱: کمترین مربعات غیر خطی

الگوریتم گوس - نیوتن برای حداقل مربعات خطی برای یک معیار همگرایی خارج از مجموعه به شرح شبه برنامه زیر است:

شبه برنامه

شمارنده نخستین تکرار را صفر و عامل مرحله‌ای را $l = 1$ در نظر بگیرید و موارد زیر را تکرار کنید.
حلقه تکرار:

نمؤ شمارنده تکرار

- اگر خطا بیشتر از بزرگترین شمارنده تکرار شود خارج شو.

- مشتق‌ها را به صورت QR تجزیه کن.

- اگر R به طور محاسباتی منفرد شود خارج شو.

- $Q^T z$ را جانشین باقی مانده‌ها کن.

- برای δ حل کن.

- معیار همگرایی را ارزیابی کن.

- اگر (نوسان < معیار) به صورت نرمال خارج شو.

حلقه تکرار:

- باقی مانده ها را در $\theta + \lambda\delta$ ارزیابی کن

- اگر $S(\theta + \lambda\delta) < S(\theta)$ ، حلقه را بشکن

- λ را نصف کن

- اگر (حداقل مجاز $\lambda <$ خارج شو

پایان حلقه :

- $S(\theta + \lambda\delta)$ را جانشین $S(\theta)$ کن.

- $\theta + \lambda\delta$ را جانشین θ کن.

- λ را حداکثر تا ۱، دو برابر کن.

پایان حلقه :

ما این الگوریتم را برای سه سطح بالا مطابق زیر به شرح ذیل آماده کرده ایم. S (بکر، چمبرز و ویلکس ۱۹۸۸)، $GAUSS$ (ادلفسن و جونز، ۱۹۸۶) و SAS/IML (مؤسسه SAS ، ۱۹۸۵).

۱-۱-۸۳- اجرا در S

یکی از پیامدهای اساسی که باید در اجرای الگوریتم های غیر خطی حل شود، روش بسته بندی تابع الگو و متغیرهای مستقل است. در K می توانیم مقادیر جانشینی برای شناسه ها در تابع برای منظور بالا را به کار برد. برای مثال، الگوی میشلیز - متن با داده های پرومیسین را تعریف می کنیم، که به شرح زیر است.

```
Puromycin ← function(theta = (205., 0.08), derivs = F,
  conc = (0.02, 0.02, 0.06, 0.06, 0.11, 0.11, 0.22,
    0.22, 0.56, 0.56, 1.1, 1.1), rate = (76., 47., 97.,
    107., 123., 139., 159., 152., 191., 201., 207., 200.))
{
  denom ← theta[2] + conc
  res ← rate - (theta[1] * conc/denom)
  if(!derivs) return(res)
  grad ← matrix((conc/denom, - theta[1] * conc/denom^2), ncol = 2)
  list(residual = res, gradient = grad)
}
```

تابع پرومیسین دارای ۴ شناسه است ($rate$, $Conc$, $Derivs$, $theta$). ولی شناسه هایی که در هنگام فراخوانی زیر برنامه ها تغییر می کند. فقط $theta$ پارامترهای الگو، مشتقات و یک مقدار منطقی که دلالت بر محاسبه مشتق دارد، است. تمام شناسه های واقعی مخصوص این دو شناسه رسمی، جایگزین مقادیر جانشینی می شوند. به کارگیری $Conc$ (غلظت مشاهده ای) و $rate$ (نرخ های واکنش مشاهده ای) به عنوان شناسه، یک

راه آسانی برای مشارکت اطلاعات درباره پاسخ مشاهده‌ای و متغیرهای رگرسیونی با بسطی از باقی مانده‌ها و مشتقات تابع الگوست.

الگوریتم حداقل مربعات غیر خطی گوس - نیوتن، نیز تابعی با شناسه‌های جانشینی برای مشخص کردن مشخصه‌ها، مانند حداکثر تعداد تکرار و حداقل عامل مرحله را در نظر می‌گیرد. این تابع را *nlsfit* می‌نامیم که به شرح زیر است :

```
nlsfit ← function(model, theta = eval(model[["theta"]]), maxiter = 25 * P,
  minfactor = 1/2^10, tolerance = 0.001, verbose = T)
{
  resid ← model(theta, derivs = F)
  newssq ← sum(resid^2)
  P ← length(theta)
  N ← length(resid)
  ndof ← N - P
  mult ← sqrt(ndof/P)
  iteration ← 0
  stepfactor ← 1.
  repeat {
    iteration ← iteration + 1
    if(iteration > maxiter)
      stop("Maximum number of iterations exceeded")
    oldssq ← newssq
    resgrad ← model(theta, derivs = T)
    qrstr ← qr(resgrad$gradient)
    if(qrstr$rank!=P) stop("Singular derivative matrix")
    qrslv ← qr.coef(qrstr, resgrad$residual)
    incr ← qrslv$coef
    converge ← mult * sqrt(sum(qrslv$qty[1:P]^2)
      /sum(qrslv$qty[-(1:P)]^2))
    if(verbose) cat(iteration, "<", converge, ">", incr, fill = T)
    if(converge < tolerance) break
    repeat {
      trial ← theta + stepfactor * incr
      if(stepfactor < minfactor)
        stop("Step factor reduced below minimum")
      newssq ← sum(model(trial, derivs = F)^2)
      if(verbose) cat(" ", stepfactor,
        "(", newssq, ")", trial, fill = T)
      if(newssq <= oldssq) break
      stepfactor ← stepfactor/2
    }
    stepfactor ← min(1., 2 * stepfactor)
    theta ← trial
  }
  list(model = model, coef = theta, qr = qrstr,
    residuals = resgrad$residual, criterion = converge)
}
```

نام *nlstfit* به این دلیل انتخاب شده که متناظر با *lsfit* باشد، که همان برازش تابع *S* در الگوهای رگرسیون خطی است. به بیان دیگر، هدف *nlstfit* همانند هدف *lsfit* است. زیرا سایر تابع‌های موجود در *S* که مربوط به خلاصه کردن برازش کمترین مربعات خطی است، قابل کاربرد در خلاصه‌ای عددی موجود در برازش حداقل مربعات غیر خطی نیز هستند. برنامه *S* خیلی نزدیک به شبه برنامه‌ای است که در قبل ذکر شده است. یک ارزیابی اولیه از باقی مانده‌ها در مقادیر آغازین برای *theta* انجام می‌پذیرد تا مجموع مربعات را برای مقایسه‌های بعدی مهیا کند. طول این بردار باقی مانده تعداد مشاهدات یعنی *N* بوده و به همراه آن تعداد پارامترها یعنی *P*، نیز به کار می‌رود تا یک ضریبی به نام *Mult* برای معیار همگرایی حساب شود. تابع *S* گونه *qr*، تجزیه *QR* یک ماتریس را تشکیل می‌دهد و تابع *qr.coefquay*، هر دو بردار ضریب *Q^Ty* و *δ* ی مورد نظرم را برمی‌گرداند. معیار همگرایی از مجموع مربعات اولین *P* درایه *Q^Tz* (با نماد *P* : ۱ در برنامه) که *Q^Tz* در حالت مورد نظر ماست، مجموع مربعات هر چیز دیگری بجز اولین *P* درایه (با نماد *P* : ۱ در برنامه) قابل دسترس است.

اگر در شناسه *verbose*، *T* درست باشد، خروجی مناسب توسط تابع *cat* در طول هر تکرار مربوط به حلقه بیرونی و هر تکرار حلقه درونی قابل تولید است، خروجی‌های مناسب برای داده‌های پرومیسین به صورت زیر آشکار می‌شوند.

```
PUR.out ← nlstfit(Puromycin)
1 < 2.8046 > 8.02889 -0.0171078
   1.0000 ( 1205.66 ) 213.029 0.0628922
2 < 0.204279 > -0.425519 0.00109553
   1.0000 ( 1195.48 ) 212.603 0.0639878
3 < 0.0103471 > 0.0720588 0.000120553
   1.0000 ( 1195.45 ) 212.675 0.0641083
4 < 0.00100142 > 0.0075058 1.17256e-05
   1.0000 ( 1195.45 ) 212.683 0.06412
5 < 9.65585e-05 > 0.000725621 1.13078e-06
```

خروجی حلقه بیرونی شامل اعداد تکراری در حاشیه چپ، سپس، معیار همگرایی (در داخل پرانتز) و پس از آن نمو مورد نظر است. خروجی‌های حلقه درونی کمی جلوتر نوشته شده‌اند به طوری که شامل عامل مرحله‌ای *l*، سپس، مجموع مربعات باقی مانده (داخل پرانتز) و در آخر مقادیر پارامتر است.

۲-۱-۳-۲. اجرا در GAUSS

ورودی‌های اصلی در روش *GAUSS nlstfit (proc)* الگوئی تابعی است که آن را مشابه در اجرا با *S* با دو تفاوت قابل توجه، کدگذاری کرده‌ایم. اولی، باقی مانده‌ها و ماتریس مشتقات را به صورت ماتریس

$N \times (p+1)$ در می آورد. زیرا، نسخه موجود *GAUSS* (۱/۴۹b)، نسخه ۱۹ به یک *proc* اجازه می دهد که فقط یک ماتریس را برگرداند. دومی، داده های خام است که به عنوان متغیرهای عمومی مشخص شده اند، به طوری که برای مقاصد دیگر نیز قابل کاربرد اند. با این شرایط ما الگوی میشلیز - منتن با داده های پرومیسین را به شرح زیر تعریف می کنیم.

```
P_MYCIN.PRG;
let conc = .02 .02 .06 .06 .11 .11 .22 .22 .56 .56 1.1 1.1 ;
let rate = 76 47 97 107 123 139 159 152 191 201 207 200 ;
proc p_mycin( theta, derivs);
  local denom, resid, grad;
  denom = theta[2,1] + conc;
  resid = rate - ( theta[1,1] * conc./denom );
  if not derivs;
    retp(resid);
  endif;
  grad = conc./denom - theta[1,1] * conc./denom.^2;
  retp(resid,grad);
endp;
```

روش *GAUSS nlsfit* شبیه زیر روال *S* است، با این تفاوت که *GAUSS* تسهیلاتی در تعریف آرگومانهای جانشینی ندارد. تعداد تکرار، حداقل عامل مرحله و تعادل در رشته فراخوانی را وارد می کنیم. روش *nlsfit* تعداد $P+2$ بردار $(\text{Theta/ssq/criterion})$ (برآورد حداقل مربعات، مجموع مربعات و معیار همگرایی با این تذکر که خارج از روش محاسبه می شود) را بر می گرداند. اگر همگرایی به دست نیاید. یک رمز خطا توسط کاربرد تابع خطا برگردانده می شود. خروجی های سودمند هنگامی نوشته می شوند که *verbose* با فراخوانی روش *dragnost* غیر صفر باشد، اگر مایل باشیم، باقی مانده ها و ماتریس مشتق قابل برگرداندن به متغیرهای عمومی به کمک تابع *varpvt* است. روش به شرح زیر است :

```

proc nlsfit(&model, theta, maxiter, minstep, tol, verbose);
local model;proc, mult, iter, stepsize, resgrad, res, incr, fullrank,
    criterion, ssq, trial, newssq;
res = model( theta, 1);
nobs = rows( res );
npar = rows( theta );
mult = sqrt( (nobs - npar) / npar );
iter = 0;
stepsize = 1;
do while 1;
    iter = iter + 1;
    resgrad = model( theta, 1);
    ssq = sumc( resgrad[ ,1] .^ 2 );
    gosub qr_solv;
    pop incr;pop criterion;pop fullrank;
    if verbose;
        call diagnost(iter|"<"|criterion|">"|incr,1);
    endif;
    if not fullrank;
        "Singular derivative matrix";stop;
    elseif criterion < tol;
        retp(theta|ssq|criterion);
    elseif iter > maxiter;
        "Maximum iterations reached";stop;
    endif;
    gosub step;
    pop stepsize;pop theta;
endo;

step:
do while 1;
    trial = theta + stepsize * incr;
    newssq = sumc( model( trial, 0 ) .^ 2 );
    if verbose;
        call diagnost(stepsize*"("|newssq|")"|trial,0);
    endif;
    if stepsize < minstep;
        "Stepsize reduced below minimum ";stop;

```

زیرروال *step* شامل محاسبات اندازه گامهای جدید و بردار پارامترهای متناظر و تبدیل آنها به بدنه روش

است. به طوری که آنها به داخل متغیرهای مورد نظر پرش می کنند.

```

    elseif newssq < ssq;
        return( trial, minc( 1 | 2 * stepsize ));
    endif;
    stepsize = stepsize / 2 ;
endo;

```

نتیجه به دست آمده برای محاسبه تجزیه *QR* در زیر روال *qr-solv* به کار می رود. اجراء تجزیه *QR* توسط *GAUSS* بنابر زیرروالهای *Linpack* (دو نگارا و دیگران، ۱۹۷۹) *DQRSL*، *DQRDC* با کاربرد

تذکره‌های *loadexe/callexe* قابل اجراست. برای کاربرد تکرار کاراتر، بهتر است که ابتدا در شروع برنامه رمز *Linpack* را فراخوانی کنیم. برای بحث بیشتر در این خصوص به خبرنامه *GAUSS* در دسامبر ۱۹۸۶ جلد ۲، شماره ۶۰، رمز برای زیرروال *qr-solv* با کاربرد تذکره‌های *callexe* مراجعه شود.

```
qr_solv:
local flag, qraux, work, jpvt, qty, dum, job, info, grad,
    beta, karg, ss_tan, ss_orth;
flag = 1;
qraux = zeros( npar, 1 );
work = qraux;
jpvt = qraux;          @--- all columns free ---@
qty = zeros( nobs, 1 );
dum = 0;
job = 100;              @--- compute beta and Q'y ---@
info = 0;
grad = submat(resgrad,0,seqa(2,1,npar));
res = resgrad[.,1];
callexe qqrdr(grad,nobs,nobs,npar,qraux,jpvt,work,flag);
beta = abs( diag( trim( grad', 0, nobs-npar) ) );
karg = sumc( beta > beta[1,1] * 1e-14 );
beta = zeros(npar,1);
callexe
    qqrsl(grad,nobs,nobs,karg,qraux,res,dum,qty,beta,dum,dum,job,info);
beta = submat( sortc( beta ~ jpvt, 2 ), 0, 1 );
ss_tan = sumc( submat( qty, seqa(1,1,npar), 0 ) .^2 );
ss_orth = sumc( submat( qty, seqa( npar+1, 1, nobs - npar ), 0 ) .^2 );
return( karg == npar, multi*sqrt(ss_tan/ss_orth), beta );
endp;
end;
```

با این *pross* برنامه *nlsfit* (*&p-m*)(*in*, 2, 5/0.08, 10, 00.1, 00.1, 0.1, 1) خروجی زیر را می‌دهد.

```
-----Nonlinear estimation-----

Starting values:      205.00000000      0.08000000
01 < 2.804604 >      8.028894 -0.017108
    1.000000 ( 1205.661845 ) 213.028894 0.062892
02 < 0.204279 >     -0.425519 0.001096
    1.000000 ( 1195.477124 ) 212.603375 0.063988
03 < 0.010347 >      0.072059 0.000121
    1.000000 ( 1195.449080 ) 212.675434 0.064108
04 < 0.001001 >      0.007506 0.000012
    1.000000 ( 1195.448817 ) 212.682940 0.064120
05 < 0.000097 >      0.000726 0.000001
```

۳-۱-۳-۸۳ SAS/IML اجرا

ورودیهای اساسی در ماژول برنامه *nlsfit* مربوط به *SAS/IML* یک الگوی تابعی است که ما آن را در یک زیر ماژول به نام الگو نشانه گذاری (رمز) کرده‌ایم. این زیر ماژول، شامل داده‌ها و نشانه گذاری (رمز) برای باقی مانده‌ها و مشتقات است. برای الگوی میشلیز - منتن با داده‌های پرومایسین داریم.

```

start model(theta,res,grad,derivs);
conc = { .02,.02,.06,.11,.11,.22,.22,.56,.56,1.1,1.1};
rate = { 76,47,97,107,123,139,159,152,191,201,207,200};
denom = theta(2,1) + conc;
res = rate - (theta(1,1) * conc / denom );
if derivs = 1 then do;
grad = (conc/denom)||((-theta(1,1)*conc/(denom ** 2)));
end;
finish;

```

در *SAS/IML* تجزیه *QR* توسط تابع *SORTH* که ماتریس‌های *R* و *Q* را برمی‌گرداند، قابل دسترس است. برای محاسبهٔ نموّ تابع، $Incr = solve(rmat, resid)$ به کار می‌رود و معیار همگرایی توسط دخالت تجزیه فیثاغورثی مجموع مربعات کل قابل محاسبه است. مشابه *GAUSS* در ساختمان *SAS/IML*، امکان فقدان ضمنی بودن تکرار / توقف و همچنین با کاربرد فرایند *DO* تا اینکه حلقهٔ عامل مرحله‌ای را حساب کند، وجود دارد.

شرط $newssq < oldssq$ در انتهای حلقه ارزیابی می‌شود، بگونه‌ای که احتیاج به آغازین کردن *newssq* نیست. چون عامل مرحله‌ای نصف مقدار خارج شده از حلقه است. آنرا در ۴ ضرب می‌کنیم تا به حداکثر ۱ برسد. حلقهٔ اصلی به صورت *Do iter=1 to max* عمل می‌کند. در هنگام خروج از حلقه پیغامی چاپ و برنامه متوقف می‌شود. هنگامی که همگرایی حاصل شد، برنامه به طور مستقیم به یک جمله پایانی متصل شده و بر می‌گردد. یک موضوع ارزشمند این است که مشتقات و باقی مانده‌ها هر دو به مقادیر آغازینشان که در ابتدای برنامه داده شده باز می‌گردند. برای هر تکرار جدید، آنها دوباره به کمک پارامترهای جدید و در انتهای حلقهٔ اصلی محاسبه می‌شوند و ارزیابی تابع نیز ذخیره می‌شود.

اگر عملگر *verbose* انتخاب شود، عملگر بی‌نامی جانشین می‌شود و باید دوباره آن را به حالت قبل از خروج از عملکرد مقایسه‌ای برگرداند. خروجی سودمند مانند حالت تابع *S* است. نشانگر (رمز) برای مازول مقایسه‌ای *nlscfit* به شرح زیر است.

```

run model( theta, resid, grad, 1);
p = nrow( theta );
n = nrow( resid );
ndof = n - p;
mult = sqrt( ndof / p );
Stepsize = 1;
do iter = 1 to maxiter;
  oldssq = ssq(resid);
  call gsort( qhat, rhat, rank, grad);
  if rank = 1 then do;
    print "singular derivative matrix";
    stop;
  end;
  tan = qhat * resid;
  ss_tan = ssq( tan );
  incr = solve( rhat, tan );
  criterion = mult * sqrt( ss_tan / ( oldssq - ss_tan ) );
  if verbose then
    print iter( (format=2.0) ) criterion (incr);
  if criterion < tol then link returns;
  do until(newssq < oldssq);
    if stepsize < minstep then do;
      print "step factor reduced below minimum";
      stop;
    end;
    trial = theta + stepsize * incr;
    run model( trial, resid, grad, 0);
    newssq = ssq( resid );
    if verbose then
      print stepsize newssq (trial);
    stepsize = stepsize / 2;
  end;
  theta = trial;
  stepsize = min( 1 || 4 * stepsize );
  run model( theta, resid, grad, 1);
end;
print " Maximum number of iterations reached: program terminated";
stop;
returns: finish;

```

```

title NLSFIT to puromycin data;
PROC IML;
start model(theta,res,grad,derivs);
...
start nlsfit( theta, criterion, maxiter, minstep, tol, verbose);
...
theta = { 205, 0.08 };
run nlsfit(theta,criterion,10,.,001,.,001,1);

```

```
reset name; print theta;
```

produces the following output:

NLSFIT to puromycin data

1	2.8046	8.0289	-0.0171
1.0000	1205.7	213.0	0.0629
2	0.2043	-0.4255	.0010955
1.0000	1195.5	212.6	0.0640
3	0.0103	0.0721	1.2E-04
1.0000	1195.4	212.7	0.0641
4	.0010014	.0075058	1.2E-05
1.0000	1195.4	212.7	0.0641
5	9.7E-05	7.3E-04	1.1E-06

THETA	COL1
ROW1	212.7
ROW2	0.0641

۲-۳- خلاصه‌های خطی و باقی‌مانده‌های استیودنتائز

باروش بیان شده در بخش (۱-۲-۳) به سادگی می‌توان خلاصه خطی و برآورد پارامترها را محاسبه کرد.

شبه برنامه این عمل به شرح زیر است.

$$s = \sqrt{S(\hat{\theta})/(N-P)} \text{ را بگیر.}$$

- R_1^{-1} را حساب کن.

- طول هر سطر از R_1^{-1} را حساب کن.

- هر سطر R_1^{-1} را بر طولش تقسیم کن تا L به دست آید.

- طول هر سطر را در S ضرب کن تا خطای استاندارد پاراستر را به دست آوری.

- ماتریس همبستگی LL^T را تشکیل بده.

برای محاسبه باقی مانده‌های استیودنتائز، به قطر «ماتریس کلاه» $Q_1 Q_1^T$ نیازمندیم.

ولی این فقط مربع طول سطرهای Q_1 است. شبه برنامه برای محاسبه باقی مانده‌های استیودنتائز به شرح زیر

است.

- ماتریس Q_1 را توسط تبدیل هوس هولدر تشکیل بده، که Q را بنابر اولین P ستون ماتریس همانی $N \times N$

تعریف کن.

- مجموع مربعات درایه‌های سطرهای Q_1 را برای به دست آوردن h_{nn} حساب کن. باقی مانده n ام را بر

$$\sqrt{1 - h_{nn}} \text{ } S \text{ تقسیم کن.}$$

راحت تر است که دو عملگر محاسبه مقادیر خلاصه خطی را ترکیب نموده باقی مانده‌های استیودنتایز را به یک تابع تکی تبدیل کرده و آن را خلاصه ls ، بنامیم، به طوری که در عمل بازگشت $nlstfit$ مؤثر باشد.

A۳-۳- برآورد چند پاسخی

الگوریتم بهینه سازی معیار چند پاسخی شبیه الگوریتم مجموع مربعات غیر خطی بخش (A۳-۱) است. تفاوت اصلی، در محاسبه نمو در هر گام است. شبه برنامه مطابق زیر است.

- شمارنده آغازین تکرار را صفر و عامل مرحله‌ای را $\lambda=1$ بگیر.

حلقه تکرار

- شمارنده نمو تکرار

- اگر خطا از حداکثر شماره تکرارها بیشتر شد، خارج شو.

- ماتریس باقی مانده‌ها و آرایه‌های مشتق را ارزشیابی کن.

- $|Z^T Z|$, ω , Ω را محاسبه کن

- تجزیه چولسکی $\Omega = C^T C$ را انجام بده.

- اگر Ω معین مثبت نباشد آن گاه:

- معیار به اندازه کافی بزرگ است (تذکر ۱)

- به صورت $\Omega = U D U^T$ تجزیه کن.

$$\delta = -U(D + 2d_1 I)^{-1} U^T \omega$$

در غیر این صورت:

- $\omega = -C^T \delta$ را برای $C \delta$ حل کن.

- معیار همگرایی را برای حل δ ارزیابی کن.

پایان اگر:

اگر تعادل $<$ معیار باشد به طور نرمال خارج شو.

- تکرار کن.

- Z را در $\theta + \lambda \delta$ ارزیابی کن.

- اگر (مقدار قبلی $|Z^T Z|$) حلق را بشکن.

- λ را نصف کن.

- اگر (حداقل مورد نظر $< \lambda$) خطا، خارج شو.

پایان تکرار:

- $|Z^T Z|$ قبلی را به جای مقدار جاری جانشین کن.

- $\theta + \lambda \delta$ را جانشین θ کن.

- λ را دو برابر تا حداکثر l

پایان تکرار

تذکرات

۱- هنگامی که Ω معین مثبت نباشد. معیار همگرایی به یک مقداری قبل از محاسبات بستگی دارد، به طوری که از تعادل بیشتر است، به همین دلیل همگرایی اظهار نمی‌شود. علت این است که دترمینان در این نقطه، تا هنگامی که Ω معین مثبت نیست، نمی‌تواند حداقل شود.

۲- تجزیه $\Omega = UDU^T$ ، یک تجزیه مقادیر ویژه - بردار ویژه از ماتریس متقارن Ω است. ماتریس قطری D دارای درایه‌های قطری $d_1 \leq d_2 \leq \dots \leq d_p$ است، به طوری که U یک ماتریس متعامد $P \times P$ است. محاسبه $|Z^T Z|$ ، ω و Ω از روی ماتریس باقی مانده‌ها و آرایه گزاردانی بیان شده در بخش (۲-۲-۴) انجام می‌شود. شبه برنامه به صورت زیر است.

- Z را به صورت QR تجزیه کن.

- $|Z^T Z|$ را به صورت مربع حاصل ضرب آرایه‌های قطری R_1 ارزیابی کن.

For $p=1$ To P -

- $G_p = Q^T Z_{(p)} R_1^{-1}$ را جانشین $Z(p)$ کن.

- $\{\omega\}_p$ را از قطرهای G_p محاسبه کن.

For $q=1$ to p -

- $\{\Omega\}_{pq}$ را مطابق (۲۴-۴) حساب کن.

- $\{\Omega\}_{qp} = \{\Omega\}_{pq}$ بگیر.

NEXT q

NEXT p

این الگوریتم در بیت و واتر (۱۹۸۴) به کمک برنامه فورترن اجرا شده است.

۴-۳-۲- دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی

شبه برنامه برای روشهای بیان شده در پیوست شماره ۵ - هنگامی که A قطری شدنی باشد - در این جا داده شده است. تعمیم برای حالت غیر قطری A یا مقادیر ویژه موهوی از روابط بخش (۲-۵A) و (۳-۴A) به دست می آید.

قبل از معرفی شبه برنامه، ماراه فشرده ای از اختصاص شکل دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی و چگونگی ورود θ به دستگاه رایان می کنیم. پارامتری که ماتریس J را به کار می گیرید، دارای سه ستون است. درایه های اولین ستون تعداد پارامترها، در دومین ستون حجه های منبع و در سومین ستون حجه های ته نشینی قرار دارد. اگر پارامتر به جای داشتن نرخ ثابتی، شامل شرط اولیه باشد باید عدد ۱ - در ستون سوم درج شود. اگر پارامتر یک زمانی مرده باشد، مقدار صفر در ستون های دوم و سوم به کار می رود. برای مثال در α - پین ۳ که شامل نرخ ثابت است، ماتریس پارامتر مورد استفاده به شرح زیر است:

$$J = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 3 \\ 3 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 5 \\ 5 & 5 & 3 \end{bmatrix}$$

برای مثال α - پین ۹ که مسیر واکنش از ۳ به ۴ افت می کند، داریم.

$$J = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 3 \\ 3 & 3 & 5 \\ 4 & 5 & 3 \end{bmatrix}$$

دو ستون آخر پارامتر به کار برده شده در ماتریس، متناظر با دو ستون جدول خلاصه پارامترهاست، که در این مثالها به کار برده ایم.

در مثال تراسیکلین ۲، سومین پارامتر شرط آغازین در حجه ای است. بنابراین ماتریس به کاربرد شده عبارت است از:

$$J = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 0 \\ 3 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

هنگامی که زمان تلف شده دخالت می کند (مانند مثال تراسیکلین ۴) حجه های منبع و ته نشینی با عدد صفر نشان گذاری می شوند. بنابراین ماتریس مورد استفاده به صورت زیر گسترش می یابد.

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 0 \\ 3 & 1 & -1 \\ 4 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

شبه برنامه تولید مقادیر A , γ_0 , t_0 , $A_{(p)}$, $\gamma_{(p)}(\theta)$ و $\partial t_0 / \partial \theta_p$ در حالت $P=I, \dots, P$ از ماتریس J استفاده می‌کند. بردار پارامتر θ و قسمت ثابت شرایط آغازی γ_{fix} به شرح زیر است.

```

initialize A to 0,  $\gamma_0$  to  $\gamma_{fix}$ 
for  $p=1, \dots, P$ 
    initialize  $A_{(p)}$  to 0,  $\gamma_{(p)}(0)$  to 0
    initialize  $dt_0/d\theta^T$  to 0
    for  $j=1, \dots, J$  {
         $p = \{J\}_{j1}$ 
         $\phi = \exp(\{\theta\}_p)$ 
         $i = \{J\}_{j2}$ 
         $k = \{J\}_{j3}$ 
        if  $(i=0)$  {
             $t_0 = \{\theta\}_p$ 
             $\{dt_0/d\theta^T\}_p = 1$ 
        } else if  $(k=-1)$  {
            increment  $\{\gamma_0\}_i$  by  $\phi$ 
            increment  $\{\gamma_{(p)}(0)\}_i$  by  $\phi$ 
        } else {
            decrement  $\{A\}_{ii}$  by  $\phi$ 
            decrement  $\{A_{(p)}\}_{ii}$  by  $\phi$ 
            if  $(k > 0)$  {
                increment  $\{A\}_{ki}$  by  $\phi$ 
                increment  $\{A_{(p)}\}_{ki}$  by  $\phi$ 
            }
        }
    }
}

```

در این نشانه‌گذاری، لگاریتم پارامترهای نرخ و شرایط اولیه به کار رفته است. ولی پارامتر زمان تأخیر تبدیل نشده است.

شبه برنامه‌ای که این مقادیر را برای پیش‌بینی پاسخ H و مشتقات $H(p)$ ، $p=I, \dots, P$ در زمان t_n ، $n=I, \dots, N$ به کار می‌برد، به شرح زیر است.

- $A = UAU^{-1}$ را تجزیه کن.

- اگر (مقادیر ویژه موهومی باشند) خطا، خارج شو.

- U را به صورت LU تجزیه کن و شرط (note 1) را واریسی کن.

۱- اگر (شرط قبول نیست) خطا، خارج شو.

۲- معادله $U\xi_0 = \gamma_0$ را برای ξ_0 حل کن.

```

for  $p = 1, \dots, P$ 
  solve  $UC_{(p)} = A_{(p)}U$  for  $C_{(p)}$ 
for  $n = 1, \dots, N$  {
   $\tau = t_n - t_0$ 
  if ( $\tau < 0$ )  $\tau = 0$ 
  for  $k = 1, \dots, K$  {
     $(\xi)_{kj} = e^{\lambda_{kj}\tau} (\xi_0)_{kj}$ 
    for  $j = 1, \dots, K$  {
       $dif = \lambda_{kj} - \lambda_{kj}$ 
      if ( $\tau dif < \epsilon$ )
         $(B)_{kj} = \tau e^{\lambda_{kj}\tau}$ 
      else
         $(B)_{kj} = \frac{e^{\lambda_{kj}\tau} - e^{\lambda_{kj}\tau}}{dif}$ 
    }
  }
  store  $\gamma_n = U\xi$ 
  for  $p = 1, \dots, P$  {
     $\xi_{(p)}(\tau) = e^{\lambda_{(p)}\tau} \xi_{(p)}(0) + \tau_{(p)} e^{\lambda_{(p)}\tau} \wedge \xi_0$ 
    increment  $\xi_{(p)}(\tau)$  by the componentwise product
    of  $C_{(p)}$  and  $B$  times  $\xi_0$ 
    store  $\gamma_{(p)n} = U\xi_{(p)}(\tau)$ 
  }
}

```

تذکره :

۱) تجزیه LU مربوط به U (دو نگار و دیگران، ۱۹۷۹، فصل ۱) با برآوردی از شرایط ماتریس برای محاسبه U به کار می‌رود. به این شرط که U به طور محاسباتی منفرد باشد و بتوان دستگاه خطی مبنی بر U را حل کرد.

۳A-۵- محاسبات نیم‌رخ

۳A-۵-۱- تولید τ و اثرهای نیم‌رخ

برای تولید مقادیر τ و اثرهای نیم‌رخ، فرض می‌کنیم که مؤلفه‌های $\hat{\theta}$ و خطاهای استاندارد تقریبی آنها معلوم باشند. برای هر مؤلفه θ_p ، $\tau(\theta_p)$ و اولین اثر نیم‌رخ سمت چپ $\hat{\theta}_p$ یعنی $\hat{\theta}_{p.p}(\theta_p)$ را تولید می‌کنیم. سپس سمت راست را با محاسبه مقادیر τ تا هنگامی دنبال می‌کنیم، که قدر مطلق مقدار حاصل کمتر از α باشد. $\tau_{max} = \sqrt{F(P, N-P)}$ باشد. $\alpha = 0.01$ (مقدار کوچکی) در نظر گرفته می‌شود. در بعضی از حالات مانند مثال ۸-BOD یا مثال هم ترکیبی ۵، مقدار τ به یک مقدار مجانبی کمتر از τ میل می‌کند. به همین

دلیل یک شرط روی بزرگترین عدد مربوط به مقادیر k_{\max} که از دو طرف (چپ و راست) $\hat{\theta}_p$ محاسبه می‌شود اعمال می‌کنیم، که $k_{\max}=30$ می‌شود، یک گام غیر رسمی به اندازه $Se(\hat{\theta}_p)/Step$ با $step=8$ را برای شروع فرایند به کار می‌بریم. آن گاه اندازه گام از شیب منحنی τ در مقابل زمان را به گونه‌ای محاسبه می‌کنیم که اجازه بزرگ شدن بیش از حد اندازه گام را ندهد. شبه برنامه محاسبات به شرح زیر است.

```
for  $p = 1, \dots, P$  {
   $\Delta = -se(\hat{\theta}_p)/step$ 
   $i = 0$ 
  repeat {
     $invslope = 1$ 
    for  $k = 1, \dots, k_{\max}$  {
       $i = i + invslope$ 
      minimize  $S(\theta)$  with  $\theta_p = \hat{\theta}_p + \Delta \times i$  obtaining  $\bar{S}(\theta_p)$  and  $\bar{\theta}_p$ 
       $invslope = \text{abs} \left[ \frac{\tau \times s^2}{se \times z^T v_p} \right]$ 
      record  $\tau(\theta_p) = \text{sign}(\Delta) \times \sqrt{\bar{S} - \bar{S}/s}$ ,  $\theta$ , and  $invslope$ 
       $invslope = \min(4, \max(invslope, 1/16))$ 
      if  $(\text{abs}(\tau) > \tau_{\max})$  break loop
    }
     $\Delta = -\Delta$ 
    if  $(\Delta < 0)$  break loop
  }
}
```

کمینه کردن $S(\theta)$ با مشخصه $\theta_p = \hat{\theta}_p + \Delta \cdot K$ ، با کمی پیرایش نمودن نشانگر گوس - نیوتن قابل انجام است. به علاوه برای باقی مانده‌ها و مشتقات باید p امین ستون از مشتقات را حذف نمود. آن گاه برای نمونه $\delta_{\cdot p}$ حل کرد. سپس δ را از روی $\delta_{\cdot p}$ با درج صفر در P امین موقعیت تشکیل داد. توجه شود که $\bar{\theta}_{\cdot p}$ به عنوان مقدار آغازی تکرار بعدی به کار می‌رود.

۲-۵-۸۳- رسم‌های زوج نیم‌مرخی

برای رسم‌های زوج نیم‌مرخی، ابتدا برداری از مقادیر τ به نام τ_p ، $p = 1, \dots, P$ را با طول n_p برای هر پارامتر تولید می‌کنیم. سپس ماتریس M_p با بعد $n_p \times p$ متناظر با مقادیر پارامتر را نیز تولید می‌کنیم. هر یک از این ماتریس‌ها تبدیل به مقیاس τ به شرح گامهای زیر می‌شود.

```
for  $p = 1, 2, \dots, P$  {
  store  $s_{\theta \rightarrow \tau, p}$ , the interpolating spline for the  $p$ th
  column of  $M_p$  as a function of  $\tau_p$ .
  store  $s_{\tau \rightarrow \theta, p}$ , the interpolating spline for  $\tau_p$ 
  as a function of the  $p$ th column of  $M_p$ 
  for  $q = 1, 2, \dots, P$  and  $q \neq p$  {
     $B_{pq} = s_{\theta \rightarrow \tau, p}(\text{p}th \text{ column of } M_q)$ 
```

```

        overwrite  $g_{pq}$  by  $\arccos(g_{pq}/\tau_p)$ 
        store  $s_{i \rightarrow g, pq}$  the interpolating spline for
         $g_{pq}$  as a function of  $\tau_p$ 
    }
}

```

هنگام محاسبه نوارهای باریک $S_{\theta \rightarrow \tau, p}$ و $S_{\tau \rightarrow \theta, p}$ باید یک عدد صفر در τ_p و در سطر متناظر $\hat{\theta}$ در M_p را وارد کرد. این عدد و سطر متناظر، باید قبل از تقسیم بر τ_p حذف شود.

برای درون یابی تصویر منحنی های میزان $S(\theta) = S^i$ و $i = 1, \dots, m$ در داخل صفحه (θ_p, θ_q) ، باید سطوح را در مقیاس τ به شرح زیر برگرداند.

$$k' = \sqrt{S^i - S(\hat{\theta})} / s$$

و زاویه های نقاط مربوط به اثرهای بحث شده در پیوست شماره ۶ را حساب کرد. این چهار زوج زاویه به شرح زیر است.

$$p_1 = (0, s_{i \rightarrow g, pq} (+k'))$$

$$p_2 = (\pi, s_{i \rightarrow g, pq} (-k'))$$

$$p_3 = (s_{i \rightarrow g, qp} (+k'), 0)$$

$$p_4 = (s_{i \rightarrow g, qp} (-k'), \pi)$$

ما این زاویه ها را به یک زاویه متوسط و حالت متفاوتی به کمک زیر برنامه زیر بر می گردانیم.

```

for  $j = 1, \dots, 4$  {
     $a_j = (|p_j|_1 + |p_j|_2) / 2$ 
     $d_j = |p_j|_1 - |p_j|_2$ 
    if ( $d_j < 0$ ) {
        replace  $d_j$  by  $-d_j$ 
        replace  $a_j$  by  $-a_j$ 
    }
}

```

و برای d_j به صورت تابعی از d_j و $SP_{a \rightarrow d, pqi}$ را حساب نموده یک درون یابی از نوار باریک با تناوب 2π را به دست می آوریم. رشته ای از k نقطه (به طور معمول k بین ۵۰ و ۱۰۰ است) در درون یابی منحنی با به کارگیری یک زیر روال به شرح زیر در نظر گرفته می شود و سپس ترسیم می شود.

```

for  $k = 1, \dots, K$  {
     $a = (k - 1) \times 2\pi / (K - 1) - \pi$ 
     $d = SP_{a \rightarrow d, pqi}(a)$ 
     $\tau_p = \cos(a + d/2)$ 
     $\tau_q = \cos(a - d/2)$ 
     $\theta_p = s_{\tau \rightarrow \theta, p}(\tau_p)$ 
     $\theta_q = s_{\tau \rightarrow \theta, q}(\tau_q)$ 
}

```

پیوست ۴

مجموعه داده‌های به کار رفته در مسائل

۱-۸۴ - مجموعه دوم داده‌های BOD

داده‌های نیاز اکسیژن بیوشیمی (BOD) توسط مارسک (۱۹۶۷) به دست آمده و در پیوست ۱ بخش (۳-۸۱) توصیف شده‌اند. مجموعه دیگر داده‌ها در جدول (۱-۸۴) ارائه شده، است. الگوئی بر اساس نمایی نزولی با یک نرخ ثابت به شرح زیر در نظر گرفته شده است.

$$f(x, \theta) = \theta_1 (1 - e^{-\theta_2 x})$$

در این الگو، θ_1 نیاز اکسیژن بیوشیمی پیش بینی شده و x زمان است.

جدول ۱-۸۴ - نیاز اکسیژن بیوشیمی در مقابل زمان.

Time (days)	Biochemical Oxygen Demand (mg/l)	Time (days)	Biochemical Oxygen Demand (mg/l)
1	0.47	5	1.60
2	0.74	7	1.84
3	1.17	9	2.19
4	1.42	11	2.17

۲-۴-۲- نیترون دپین

داده‌های مربوط به جادادن نیترون دپین [^3H] در قسمت‌های همگن قلب خرگوش توسط عبدالله (۱۹۸۶) به دست آمده است. در این تحقیق، آزمایش بر اساس مناسب بودن جاگذاری در محل‌های بین نیترون دپین (NTD) یک مجرا کلسیم مخالف و نیفدپین (NIF) به عنوان مجرای کلسیم مخالف دیگر. بافت‌های قلب همگن شده و توسط ماده رادیواکتیو NTD بر حسب غلظت مولار ($\approx 5 \times 10^{-5}$) اشغال شده است. این عمل در حضور غلظت‌های مختلف NIF که در جدول (۲-۴) به صورت (غلظت NID) $x = \text{Log}_{10}$ ارائه شده (در سطرهایی که صفراند، غلظت واقعی صفر است)، انجام پذیرفته است. NIF قابلیت جاگیری بیشتری را داراست. بنابراین جای NTD را اشغال می‌کند. شمارش ماده رادیواکتیو برای محاسبه این که چه مقدار ماده تحت شرایط مختلف محدود شده است، انجام پذیرفته است. هنگامی که غلظت NIF برابر صفر باشد، تمام رادیواکتیو NTD در محل‌ها محصور می‌شود. بنابراین عدد بزرگی قرائت می‌شود. با افزایش غلظت NIF، جای NTD را اشغال نموده و بنابراین شماره‌های پایین خوانده می‌شود. چون غلظت اسمی NTD برابر $10^{-11} \times 5$ بوده است، مقادیر واقعی برای چهار نمونه از بافت به ترتیب $4/76$ ، $5/11$ ، $4/78$ ، $10^{-11} \times 5/02$ به دست آمده است. الگوی پیشنهادی به شرح زیر است، که در آن f ، شمارش نهایی پیش بینی شده و x برابر (غلظت NIF) $\text{Log} 10$ است.

$$f(x, \theta) = \theta_1 + \frac{\theta_2}{1 + \exp[-\theta_4(x - \theta_3)]}$$

۳-۴-۳- مجموعه دوم داده‌های ساکارین

داده‌های غلظت ساکارین در پلاسما توسط رنویک (۱۹۸۲) گزارش شده و در جدول (۳-۴) ارائه شده است.

۴-۴-۴- جذب تدریجی

داده‌های ناپدید شدن O-xylenc به صورت تابعی از غلظت اکسیژن، غلظت O-xylenc و ورودی و دما که توسط جوسولا (۱۹۷۱) به دست آمده و پس از آن توسط پریتچارد (۱۹۸۲) تجزیه تحلیل شده است. داده‌ها در جدول (۴-۴) چاپ شده.

الگوی فرضی یک الگوی جذب حالت تدریجی است که به شرح زیر است:

$$f(x, \theta) = \frac{f_1 f_2}{f_1 + 2.2788 f_2}$$

$$f_1 = \theta_1 x_1 e^{-\theta_3/x_3}$$

$$f_2 = \theta_2 x_2 e^{-\theta_4/x_3}$$

جدول ۲-۴A- رادیو اکتیو ته در مقابل غلظت مولاری نیتروژن برای چهار نمونه بافت.

$x = \log_{10}(NIF)^b$	Counts ^a			
	Tissue Sample 1	2	3	4
(0)	6 696	4 403	6 133	5 327
(0)	6 211	5 042	5 688	6 274
(0)	6 385	*	6 544	5 210
-11	6 396	5 259	6 783	6 811
-11	6 283	5 598	6 194	6 751
-11	6 071	*	6 188	7 289
-10	6 545	4 868	5 674	7 214
-10	6 378	4 769	5 583	5 652
-10	5 932	*	6 027	5 700
-9	5 509	3 931	5 458	6 184
-9	6 573	4 503	5 482	5 175
-9	5 932	*	5 878	5 802
-8	4 763	2 588	4 173	3 582
-8	5 389	3 089	3 837	7 021
-8	4 131	*	4 852	4 187
-7	4 583	2 084	4 359	3 838
-7	3 815	3 665	3 936	3 273
-7	3 539	*	4 468	4 562
-6	3 211	2 149	3 110	4 004
-6	4 263	2 216	3 860	3 520
-6	3 537	*	4 297	4 581
-5	*	1 433	3 471	3 719
-5	*	1 926	3 674	2 915
-5	*	*	3 990	4 504
(0)	*	*	5 938	6 396
(0)	*	*	5 948	6 071

جدول ۳-۴A- غلظت ساکارین در پلاسما در مقابل زمان.

Saccharin		Saccharin	
Time	Conc.	Time	Conc.
(min)	($\mu\text{g/ml}$)	(min)	($\mu\text{g/ml}$)
0	0	60	14.1
5	184.3	75	8.0
15	102.0	90	5.7
30	50.5	105	4.0
45	24.9	120	2.9

۵-۴- برگها

داده‌های رشد برگ‌ها توسط هیزوبران (۱۹۵۶) مطابق جدول (۵-۴) گزارش شده است. یک الگو برای این داده‌ها، الگوی ریچارد به شرح زیر است، در این جا f طول برگ پیش‌بینی شده و x زمان است.

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1}{(1 + \theta_2 e^{-\theta_3 x})^{1/\theta_4}}$$

جدول ۴-۴. نرخ اکسید شدن O-xylene در مقابل غلظت اکسیژن (gm-mole/L). غلظت O-xylene ورودی (g-mol-1) و دما (K)، نرخ واکنش برحسب (g-mole/g-mole) کاتالیزور در طول عمر کاتالیزور استاندارد خوانده شده است.

Oxygen	o-Xylene	Temp.	Rate	Oxygen	o-Xylene	Temp.	Rate
0.00502	0.000200	543	116	0.00249	0.000198	563	224
0.00499	0.000190	543	120	0.00571	0.000049	563	198
0.00504	0.000200	543	114	0.00555	0.000347	563	463
0.00505	0.000200	543	117	0.00549	0.000274	563	370
0.01000	0.000351	543	245	0.00554	0.000095	563	258
0.01010	0.000351	543	230	0.00507	0.000191	573	543
0.01030	0.000050	543	106	0.00502	0.000187	573	561
0.01040	0.000361	543	230	0.00505	0.000192	573	560
0.01010	0.000049	543	121	0.00506	0.000188	573	578
0.01010	0.000050	543	115	0.00500	0.000201	573	542
0.01010	0.000050	543	127	0.00100	0.000350	573	197
0.00570	0.000201	563	408	0.00505	0.000202	573	559
0.00552	0.000201	563	380	0.00306	0.000349	573	414
0.00551	0.000202	563	320	0.00502	0.000198	573	467
0.00551	0.000186	563	399	0.00504	0.000201	573	468
0.00554	0.000202	563	371	0.01017	0.000245	573	933
0.00553	0.000199	563	368	0.00499	0.000187	573	509
0.00108	0.000051	563	63	0.01000	0.000253	573	955
0.00707	0.000099	563	333	0.00496	0.000346	573	650
0.00554	0.000197	563	322	0.01000	0.000253	573	902
0.00605	0.000351	563	413	0.00502	0.000199	573	532
0.00552	0.000202	563	344	0.00399	0.000357	573	552
0.01016	0.000189	563	543	0.00107	0.000196	573	184
0.00552	0.000200	563	372	0.00499	0.000353	573	663
0.00603	0.000049	563	229	0.00503	0.000100	573	409
0.01000	0.000201	563	563	0.00251	0.000199	573	326
0.01010	0.000151	563	490	0.00499	0.000277	573	580
0.00805	0.000354	563	595	0.00906	0.000205	573	831
0.00552	0.000199	563	352				

جدول ۵-۸۴- طول برگ در مقابل زمان

Time (days)	Leaf Length (cm)	Time (days)	Leaf Length (cm)
0.5	1.3	8.5	16.4
1.5	1.3	9.5	18.3
2.5	1.9	10.5	20.9
3.5	3.4	11.5	20.5
4.5	5.3	12.5	21.3
5.5	7.1	13.5	21.2
6.5	10.6	14.5	20.9
7.5	16.0		

۶-۴۸- مجموعه دوم داده‌های α -پینن

داده‌های مربوط به هم ترکیبی α -پینن حرارتی در $20.4/5^{\circ}\text{C}$ توسط فوگیت و هاوکینز (۱۹۴۷). مطابق بحث پیوست ۱، بخش (۶-۸۱) در جدول (۶-۸۴) گزارش شده است. الگوی جنبشی خطی مطابق شکل (۱-۸۱) برای این داده‌ها نیز پیشنهاد شده است.

جدول ۶-۸۴- غلظت نسبی محصولات در مقابل زمان برای هم ترکیبی حرارتی α -پینن در $20.4/5^{\circ}\text{C}$.

Time (min)	α -Pinene (%)	Dipentene (%)	Alloocimene (%)	Pyronene (%)	Dimer (%)
440	85.9	8.2	4.1	0.4	0.6
825	74.3	15.6	6.8	0.8	1.6
1200	65.1	21.5	7.7	1.0	3.4
1500	58.6	25.5	8.4	1.2	5.0
2040	48.1	31.9	8.5	1.6	8.2
3060	32.1	42.0	8.2	2.0	13.5
6060	11.2	54.7	6.9	2.7	21.9
16020		61.3	5.0	3.0	27.8

۷-۸۴- گزارش تجزیه زغال

داده‌های مربوط به گزارش تجزیه زغال در لایتگو (۱۹۸۶) تجزیه تحلیل شده است. شرایط عمل و داده ورودی (x) و خروجی (y) در جدول ۷-۸۴، قسمت‌های a, b, c ارائه شده است. الگوی پیکربندی شده

توسط لایتگو به شرح زیر است.

$$y_1 = x_1 + \theta_1 x_8 - \phi_1 f$$

$$y_2 = x_2 + \theta_2 x_8 + \alpha_2 \phi_1 f - \phi_2 f$$

$$y_3 = x_3 + \theta_3 x_8 + \beta_3 \phi_2 f$$

$$y_4 = x_4 + \theta_4 x_8 + \beta_4 \phi_2 f$$

$$y_5 = x_5 + \theta_5 x_8 + \beta_5 \phi_2 f$$

$$y_6 = x_6 + \theta_6 x_8 + \beta_6 \phi_2 f$$

$$y_7 = x_7 + \theta_7 x_8 + \alpha_7 \phi_1 f + \beta_7 \phi_2 f$$

$$\phi_1 = \gamma_1 P [1 + (F/100)] e^{-\gamma_2/T}$$

$$\phi_2 = \gamma_3 [1 + (F/100)] TR_{feed} e^{-\gamma_4/T}$$

جدول ۷۸۸۴- شرایط عمل برای انجام گرازش تجزیه زغال

Run No.	Time (min)	Temp (K)	Pressure (MPa)	Fe ₂ O ₃ (wt% maf) ^a	TR _{feed} (wt% maf) ^a
52	25	713.7	16.028	2.608	66.341
53	25	713.7	16.304	2.609	66.340
54	25	713.7	16.166	2.611	66.341
55	25	713.7	16.166	2.607	66.339
56	25	713.7	13.960	2.597	66.358
57	25	713.7	13.822	2.607	66.373
58	25	705.4	13.684	2.611	66.395
59	40	705.4	13.546	2.612	66.380
60	25	705.4	13.063	2.640	85.878
61	25	705.4	13.063	2.639	77.927
64	25	705.4	13.684	2.609	83.915
65	25	705.4	16.235	2.511	56.633
77	25	705.4	13.684	2.593	66.358
78	70	697.0	13.270	2.589	66.359
79	90	688.7	13.270	2.599	66.346
80	70	697.0	13.339	2.599	66.351
81	25	697.0	13.339	2.597	66.358
82	55	697.0	12.926	2.599	66.351
86	55	697.0	15.270	1.688	48.740
91	55	697.0	18.717	0.000	46.306
92	55	697.0	17.338	1.723	46.440
94	55	697.0	14.442	1.650	24.786
95	55	697.0	17.338	2.611	66.332

جدول ۷b-A۴- ترکیبات ورودی برای اجرای گزارش تجزیه زغال (وزن به %).

Run No.	Unconv. Coal x_1	Thermal Resid. x_2	C ₄ -822K Dist. x_3	C ₁ -C ₃ Gases x_4	Byproduct Gases x_5	Water x_6	Hydrogen x_7	Coal In x_8
52	0.015	22.308	41.013	0.180	0.008	0.820	2.029	33.627
53	0.015	22.306	41.009	0.180	0.007	0.820	2.040	33.623
54	0.015	22.316	41.027	0.184	0.016	0.820	1.984	33.638
55	0.015	22.308	41.013	0.180	0.008	0.820	2.030	33.627
56	0.015	22.384	41.133	0.180	0.009	0.821	1.726	33.731
57	0.015	22.381	41.130	0.180	0.008	0.822	1.746	33.719
58	0.015	22.390	41.134	0.180	0.007	0.823	1.730	33.722
59	0.015	22.388	41.142	0.180	0.007	0.823	1.717	33.728
60	0.015	28.726	35.106	0.181	0.009	0.819	1.694	33.450
61	0.015	26.043	37.783	0.185	0.017	0.818	1.719	33.419
64	0.012	23.684	45.926	0.151	0.006	0.688	1.310	28.223
65	0.014	18.764	43.472	0.173	0.011	2.812	1.622	33.132
77	0.015	22.423	41.217	0.000	0.000	0.822	1.733	33.790
78	0.015	22.388	41.147	0.184	0.019	0.820	1.689	33.738
79	0.015	22.389	41.166	0.179	0.007	0.822	1.676	33.747
80	0.015	22.416	41.207	0.000	0.000	0.823	1.757	33.783
81	0.015	22.418	41.209	0.000	0.000	0.822	1.753	33.783
82	0.015	22.387	41.154	0.180	0.009	0.822	1.693	33.740
86	0.000	17.879	41.423	0.000	0.000	2.137	1.880	36.682
91	0.000	16.896	39.141	0.000	0.000	4.805	2.670	36.489
92	0.000	16.879	39.110	0.000	0.000	4.998	2.669	36.345
94	0.000	9.017	51.088	0.000	0.000	1.570	1.946	36.380
95	0.018	20.634	37.928	0.000	0.000	7.618	2.696	31.106

جدول ۷C-A۴- ترکیبات خروجی برای اجرای گزارش تجزیه زغال (وزن به %).

Run No.	Unconv. Coal y_1	Thermal Resid. y_2	C_4-822K Dist. y_3	C_1-C_3 Gases y_4	Byproduct Gases y_5	Water y_6	Hydrogen y_7
52	1.702	35.197	53.884	1.729	1.985	4.010	1.491
53	1.777	34.870	54.317	1.715	1.830	4.020	1.470
54	1.390	36.224	52.909	1.902	2.063	4.027	1.485
55	1.674	36.295	52.692	1.842	2.006	4.017	1.474
56	2.392	35.439	52.698	2.046	2.146	3.986	1.294
57	1.909	34.650	53.758	1.972	2.067	4.401	1.242
58	2.694	36.093	53.323	1.442	1.935	3.234	1.279
59	1.843	33.549	55.452	1.816	2.041	4.151	1.148
60	2.998	42.572	46.972	1.404	1.620	3.199	1.235
61	2.793	40.889	48.832	1.461	1.744	3.051	1.229
64	2.103	34.867	56.440	1.182	1.619	2.759	1.030
65	2.455	36.858	48.818	1.567	3.015	5.909	1.380
77	2.276	38.326	50.961	1.424	1.797	3.870	1.346
78	1.500	36.885	52.210	2.225	2.099	3.990	1.091
79	1.699	35.716	53.325	1.854	2.289	4.032	1.084
80	1.679	36.764	52.093	2.017	2.183	4.085	1.178
81	3.138	38.821	50.516	0.927	1.710	3.532	1.356
82	1.615	36.610	52.378	1.744	2.137	4.403	1.113
86	2.177	39.042	46.474	1.904	3.339	5.737	1.327
91	4.423	35.829	44.133	1.989	3.558	7.811	2.258
92	1.672	35.249	47.062	1.882	3.356	8.813	1.967
94	2.347	29.585	55.937	1.832	3.231	5.660	1.410
95	1.226	31.952	50.266	1.856	2.203	10.507	1.989

با توجه به شرایط زیر مربوط به الگو، متغیرهای شرایط واکنش عبارت اند از: t (زمان)، T (دما)، p (فشار)، f (غلظت) Fe_2O_3 مواد ورودی و TR_{feed} و باقی مانده های حرارتی مواد ورودی.

$$\theta_1 + \dots + \theta_7 = 1$$

$$\alpha_2 + \alpha_7 = 1$$

$$\beta_3 + \dots + \beta_7 = 1$$

ترکیبات ورودی و خروجی عبارت اند از زوج های: (x_1, y_1) زغال تبدیل نشده، (x_2, y_2) باقی مانده حرارتی، (x_3, y_3) عصاره C_4-822K ، (x_4, y_4) ، گازها (x_5, y_5) ، گازهای تولیدی، (x_6, y_6) آب، (x_7, y_7) هیدروژن و زغال ورودی x_8 است.

توجه شود که هیدروژن مصرف می شود. بنابراین پارامترهای θ_7 ، α_7 ، β_7 منفی هستند.

۸-۸۴- هالوپریدول

داده‌های غلظت پلاسمای هالوپریدول که توسط واگنر (۱۹۷۵ صفحه ۶۳-۶۰) گزارش شده در جدول (۸-۸۴) درج شده است.

جدول ۸-۸۴- غلظت هالوپریدول در مقابل زمان

Time (hr)	Haloperidol Conc. (ng/ml)	Time (hr)	Haloperidol Conc. (ng/ml)
0.17	2.99	4.00	0.945
0.33	4.82	6.00	0.679
0.67	2.86	8.00	0.619
1.00	2.23	12.00	0.462
1.50	1.65	24.00	0.336
2.00	1.33	48.00	0.178
3.00	1.05	72.00	0.084

پیوست ۵

بررسی نما ماتریسی‌ها و پیچشی‌ها

در بخش (۱-۵) و (۱-۵) چگونگی به دست آوردن توابع پاسخ برای دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی و چگونگی پیدا کردن مشتقات توابع پاسخ نسبت به پارامتر را نشان دادیم. در این پیوست، روش‌های کار برای ارزیابی توابع، بردار پارامتر داده شده θ و N حالت زمانهای مشاهده t_1, \dots, t_n را ارائه خواهیم نمود.

بسط‌های تابع الگو و مشتقات مربوط به یک الگوی حجره‌ای که به صورت نما ماتریسی $e^{A t}$ و پیچشی‌های این ماتریس داده شده است. در عمل، توصیه شده است (مولر و وان لون ۱۹۷۰) که مقادیر ویژه و بردارهای ویژه ماتریس A هنگام بررسی $e^{A t}$ در نقطه‌ای از مقادیر مختلف t به کار رود. ممکن است این طور دیده شود که محاسبات برای به دست آوردن مقادیر ویژه A برای هر مقدار θ که برای آن γ ارزیابی می‌شود، لازم باشد. ولی این گونه نیست، زیرا اغلب k ، بعد ماتریس A کوچک و A نیز اغلب تنک است. این تنکی می‌تواند چند مقدار ویژه را بدون نیاز به محاسبات تکراری، مجزا کند. این عمل در مثال تتراسایکلین ۲ جایی که مقادیر ویژه از قبل در روی قطر A مجزا شده‌اند، رخ داده است، زیرا روالهایی مانند *BALANC* از برنامه *EISPACK* (اسمیت و دیگران ۱۹۷۶)، این مقادیر ویژه را با فرض امکان تغییر سطر و ستون مجزا می‌کند.

روش‌های محاسبه نما ماتریسی و پیچشی بستگی به این دارد که آیا: A قطری شدنی است و آیا تمام مقادیر ویژه حقیقی‌اند یا خیر؟ ماتریس A قطری شدنی است هر گاه یک ماتریس وارون پذیر ماتریس قطری Λ به صورت $A = U \Lambda U^{-1}$ وجود داشته باشد. اعضای ماتریس قطری Λ مقادیر ویژه و سطرها U بردارهای ویژه (راست) A هستند. قطری شدنی همواره امکان‌پذیر نیست. برای مثال، اگر $\theta_1 = \theta_2$ ، در مثال تتراسایکلین ۲

ماتریس وارون پذیر U وجود ندارد تا A را قطری پذیر کند.

هر چند به علت گرد کردن اعداد، روال محاسبه بردارهای ویژه ماتریس U حتی در حالت قطری نشدنی حاصل می شود. ولی این U شرایط بدی اعمال می کند. باید شرایط به دست آمدن U به کمک روالهای برنامه *LinDack* (دوتگارا و دیگران ۱۹۷۹) که A را قطری شدنی می کند، واری می شود. می توان از تعدیل های اظهار شده و در مولر و وان لون (۱۹۷۸) برای روالهای *HQR, ORTRAN, WRTHES* از برنامه *EISPACK* (اسمیت و دیگران ۱۹۷۶) استفاده نمود و تجزیه QR از U را بدست آورد و شرایط R را با استفاده از زیرروالها *LINDCK* ارزیابی نمود. در بخش ۱-۵ ما روش هایی برای A (در صورت امکان قطری شدن) و در بخش ۳-۵ نیز در حالتی که A دارای مقادیر ویژه موهومی است، معرفی کردیم.

۱-۵-۱- قطری کردن A

هرگاه U بتواند توسط یک ماتریس خوش - شرط قطری شدنی باشد. محاسبات نما ماتریس و پیچشی ها قابل تبدیل به محاسباتی به شکل عددی اند. زیرا تمام بسط ها دنباله های توانی، ناشی از تولیدات داخلی $U^{-1}U$ بوده که لغو می شوند و توان های λ قابل قطری شدن توسط توان های مناسب λ واقع بر قطر اصلی خواهد بود.

$$A^k = (UAU^{-1}) \dots (UAU^{-1})(UAU^{-1}) = UA^kU^{-1} \quad (1-45)$$

و بنابراین ۶-۵، به رابطه زیر تبدیل می شود که $e^{\lambda t}$ قطری شده با درایه $e^{\lambda t}$ در روی قطر اصلی است.

$$e^{At} = Ue^{\Lambda t}U^{-1}$$

به علت وجود عامل های U و U^{-1} ، که در بعضی از بسطها مورد نیاز است، راحت تر است که تبدیلی خطی از مختصات برای γ به صورت زیر نوشته شود.

$$\xi(t) = U^{-1}\gamma(t)$$

$$\xi_0 = U^{-1}\gamma_0$$

$$\kappa = U^{-1}\iota$$

همچنین برای مشتقات نیز داریم:

$$\xi_{(p)}(t) = U^{-1}\gamma_{(p)}(t)$$

$$\kappa_{(p)} = U^{-1}\iota_{(p)}$$

$$C_{(p)} = U^{-1}A_{(p)}U$$

نمادهای $\xi_{(p)}$ و $\kappa_{(p)}$ مناسب اند ولی به طور کامل صحیح نیستند. برای مثال $\xi_{(p)}$ مشتق نسبی $U^{-1}\gamma(t)$ نسبت به θ_p نیست.

با جانشین کردن $A = UAU^{-1}$ در (۱-۵) و (۱۳-۵) و ضرب کردن هر دو طرف معادلات (از سمت

$$\xi(t) = e^{\Lambda t} \xi_0 + (e^{\Lambda t} * I) \kappa$$

راست) در U^{-1} داریم.

که $e^{\Lambda t}$ مطابق بالا ارزیابی می‌شود. ماتریس $e^{\Lambda t} * I$ نیز یک ماتریس قطری با اعضای قطری اصلی مطابق زیر است.

$$(e^{\Lambda t} * I)_{ii} = e^{\lambda_i t} * 1 \\ = \begin{cases} \frac{e^{\lambda_i t} - 1}{\lambda_i} & \lambda_i \neq 0 \\ t & \lambda_i = 0 \end{cases}$$

چون ماتریس‌های $e^{\Lambda t} * C_{(p)} e^{\Lambda t} * I$ و $e^{\Lambda t} * C_{(p)} e^{\Lambda t}$ قطری نیستند، باید هر عضو را ارزیابی نمود. ولی این اعضا به صورت پیش‌پیش‌های عددی قابل نوشتن است.

$$(e^{\Lambda t} * C_{(p)} e^{\Lambda t})_{ij} = (C_{(p)})_{ij} e^{\lambda_i t} * e^{\lambda_j t}$$

و

$$(e^{\Lambda t} * C_{(p)} e^{\Lambda t} * I)_{ij} = (C_{(p)})_{ij} e^{\lambda_i t} * e^{\lambda_j t} * 1$$

برای ارزیابی پیش‌پیش‌های عددی، با توجه به رابطه $f * g = g * f$ ، مبادرت به مرتب نمودن $\lambda_i \leq \lambda_j$ می‌کنیم.

همچنین با توجه به تشکیل Λ می‌دانیم: $\lambda_i \leq 0$ و $\lambda_j \leq 0$ ، بنابراین داریم.

$$e^{\lambda_i t} * e^{\lambda_j t} = e^{\lambda_j t} (e^{(\lambda_i t - \lambda_j t)} * 1) = \begin{cases} \frac{e^{\lambda_i t} - e^{\lambda_j t}}{\lambda_i - \lambda_j} & \lambda_i < \lambda_j \\ t e^{\lambda_i t} & \lambda_i = \lambda_j \end{cases}$$

$$e^{\lambda_i t} * e^{\lambda_j t} * 1 = \begin{cases} 1 * 1 * 1 & \lambda_i = \lambda_j = 0 \\ e^{\lambda_i t} * 1 * 1 & \lambda_i < \lambda_j = 0 \\ e^{\lambda_i t} (e^{-\lambda_i t} * 1 * 1) & \lambda_i = \lambda_j < 0 \\ e^{\lambda_i t} * \frac{e^{\lambda_j t} - 1}{\lambda_j} & \lambda_i < \lambda_j < 0 \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \frac{t^2}{2} & \lambda_i = \lambda_j = 0 \\ \frac{e^{\lambda_i t} - (1 + \lambda_i t)}{\lambda_i^2} & \lambda_i < \lambda_j = 0 \\ \frac{1 - e^{\lambda_i t} (1 - \lambda_i t)}{\lambda_i^2} & \lambda_i = \lambda_j < 0 \\ \frac{1}{\lambda_i \lambda_j} \left[1 + \frac{\lambda_j e^{\lambda_i t} - \lambda_i e^{\lambda_j t}}{\lambda_i - \lambda_j} \right] & \lambda_i < \lambda_j < 0 \end{cases}$$

در عمل شرط $\lambda_j = \lambda_j$ با مقایسه $|(\lambda_i - \lambda_j)f_{\max}|$ توسط دقت نسبی ماشین محاسبه می‌شود. که در این جا بیشتری مقدار f_{\max} برای حالتی است که دستگاه در نظر گرفته شده است. اگر خطا کمتر از دقت نسبی ماشین باشد، آن گاه حالات تساوی به کار می‌رود.

۲-۲-۵- حالت قطری نشدنی A

هنگامی که A نمی‌تواند قطری شود، روشی توسط باولی و استوارت (۱۹۷۹) ارائه شده، که A را به صورت زیر بلوک - قطری می‌کند.

$$A = UBU^{-1}$$

در این جا B توسط r بلوک مثلثی B_i به اندازه $i=1, \dots, r$ روی قطر اصلی - به طوری که اعضای قطرهای هر بلوک به تقریباً مساوی اند - تشکیل می‌شود. هر B_i را می‌توان به صورت زیر نوشت.

$$B_i = d_i I + E_i$$

در این جا d_i معدل اعضای روی قطر اصلی B_i ، ماتریس همانی با اندازه K_i و E_i باقی مانده است. چون E_i مثلثی و اعضای روی قطرش کوچک اند، بنابراین توان k_i ام از E_i به تقریب صفر است. این بلوک‌ها در ماتریس D و E با بعد $k \times k$ گنجانیده شده و B را مطابق زیر می‌سازند.

$$B = D + E$$

در این جا D بلوک گونه و ضریبی از ماتریس همانی است و داریم:

$$E^j \approx 0$$

که J حداکثر K_i های $i=1, \dots, r$ است. چون D بلوک گونه و ضریبی از ماتریس واحد است، بنابراین با E خاصیت جابه جایی دارد. داریم:

$$DE = ED$$

و بنابراین:

$$e^{Bt} = e^{(D+E)t} = e^{Dt} e^{Et} = e^{Et} e^{Dt}$$

(مطلب بالا به طور کلی برای ماتریس‌های است که در آنها نمای مربوط به یک مجموع، مساوی حاصلضرب نماها است.)

چون D قطری است، e^{Dt} نیز قطری بوده و اعضای قطر آن به صورت $e^{d_{ii}t}$ در بلوک i ام می‌باشد. جمله بعدی به کمک رابطه زیر بیان می‌شود و پیچشی‌ها قابل ارزیابی برای هر جمله از دنباله است.

$$e^{Et} = I + E t + \frac{E^2 t^2}{2!} + \dots + \frac{E^J t^J}{J!}$$

برای مثال داریم:

$$\begin{aligned} e^{Dt} * I &= e^{Dt} \left(I + Et + \frac{E^2 t^2}{2!} + \dots + \frac{E^J t^J}{J!} \right) * I \\ &= e^{Dt} * I + Et e^{Dt} * I + \dots + \frac{E^J t^J e^{Dt} * I}{J!} \end{aligned}$$

پیچشی‌های اسکالری پایه‌ای زیر:

$$t^k e^{-at} * I = \frac{k! [1 - e^{-at} (1 + at + \dots + a^k t^k / k!)]}{a^k}$$

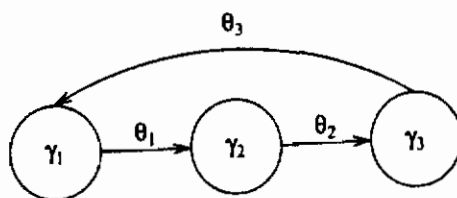
برای ارزیابی ماتریس پیچشی به کار می‌رود تا بسطی مشابه برای سایر ماتریس‌های پیچشی به شرح زیر به کار بست.

$$e^{Bt} * C_{(p)} e^{Bt} * I$$

۳-۸۵- مقادیر ویژه موهومی

در بیشتر الگوهای ساده حجره‌ای، مقادیر ویژه حقیقی‌اند و روش‌های بیان شده در بخش قبل قابل کاربرد است.

در حقیقت، تمام مقادیر ویژه الگوهایی که بزرگترین طول هر چرخه الگو کمتر از ۳ باشد، اعداد حقیقی است. چرخه عبارت است از زنجیره‌ای از حجره‌های مجزا که در آن تبدیل مواد از اولی به دومی و به همین ترتیب تا آخری وجود دارد و تبدیل دوباره به اولی بازمی‌گردد. الگوهای شعاعی و زنجیره‌ای توصیف شده در بخش (۴-۵) فقط درازای طول چرخه ۲ هستند. یک چرخه با طول ۳ به سادگی قابل تولید است. برای مثال مطابق شکل (۱-۸۵) و این دستگاه می‌تواند مقادیر ویژه موهومی داشته باشد.



شکل ۳-۸۵

مقادیر ویژه موهومی و بردارهای ویژه متناظرشان اغلب به صورت زوج‌های مزدوج ظهور می‌کنند. چون

مقادیر تابع الگو و مشتقاتش حقیقی بوده، بنابراین جدول مرتب کردن دوباره اعداد موهی قابل محاسبه‌اند. الگوی پایه با مؤلفه حقیقی ابتدا A را به یک ماتریس شبه مثلثی و سپس آن را به یک ماتریس شبه قطری تبدیل می‌کند. یک ماتریس شبه مثلثی، ماتریس مثلثی بوده، جز این که برای بلوک‌های مجزای مرتبه ۲ روی قطر، در هر بلوک یک زوج از مقادیر ویژه مزدوج موهومی متناظر قرار دارد. این کاهش در تشکیل روش QR مشارکت می‌کند با تغییر مکان‌های ضمنی به عنوان اجزاء در زیر روال $HQRZ$ از $EISPACK$ (۱۹۷۶) یا $HQR3$ (استوارت ۱۹۷۶) و نتایج در یک ماتریس متعامد به شرح زیر شبه مثلثی است.

$$C = Q^T A Q$$

هر بلوک 2×2 واقع بر قطر C به صورت زیر است. که در آن $(a-d)^2 + 4bc < 0$ است.

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

هنگامی که ماتریس C شبه مثلثی ایجاد شد باید کوشش نمود که ماتریس شبه قطری به کمک روش باولی و استوارت (۱۹۷۹) ساخت، که این روش بر مبنای زیر روال $SHRSLV$ (بارتلز و استوارت ۱۹۷۲) استوار است. یعنی ماتریسی مانند R به گونه‌ای ساخته شود که $D = R^{-1} C R$ قطری باشد، بجز برای بلوک‌های 2×2 واقع بر قطر متناظر با هر زوج مزدوج موهومی. ماتریس R بالا مثلثی با عدد یک روی قطر بوده و بلوک‌های داخل D مساوی بلوک‌های متناظر C است. اگر تمام مقادیر ویژه حقیقی باشند، ماتریس Q و R که به این طریق تولید می‌شود، تجزیه QR ماتریس با بردارهای ویژه از A است.

اگر ماتریس A دارای بردارهای ویژه موهومی بوده و همچنین غیر قطری باشد، آن گاه R قابل محاسبه نیست (یا در عمل، شرایط بدی را اعمال می‌کند). در این حالت روش‌های این بخش باید با روش‌های بخش (۲.۴.۵) ترکیب شود. خوشبختانه، ماتریس‌های قطری نشدنی با مقادیر ویژه موهومی به ندرت رخ می‌دهند. بنابراین شکل‌های ضمنی را ارائه نمی‌کنیم. چون بسیار پیچیده‌اند. با فرض اینکه R خوش - شرایط قابل محاسبه باشد، داریم:

$$A = Q R D R^{-1} Q^T$$

عبارات زیر را تشکیل می‌دهیم:

$$\xi(t) = R^{-1} Q^T \gamma(t)$$

$$\xi_0 = R^{-1} Q^T \gamma_0$$

$$\kappa = R^{-1} Q^T \mathbf{1}$$

$$\xi_{(p)}(t) = R^{-1} Q^T \gamma_{(p)}(t)$$

$$\kappa_{(p)} = R^{-1} Q^T \mathbf{1}_{(p)}$$

و مطابق بخش (۱-۴۵) داریم:

$$C_{(p)} = R^{-1} Q^T A_{(p)} Q R$$

ارزیابی تابع الگو و مشتقات به ارزیابی e^{Dt} و پیچشی‌هایی مانند: $e^{Dt} \cdot C_{(p)}$ و $e^{Dt} \cdot I$ تبدیل می‌شود. هر ماتریس $e^{Dt} \cdot I$ و $e^{Dt} \cdot C_{(p)}$ شبه قطری با بلوک‌های 2×2 در جهتی مشابه با D هستند. بنابراین ما فقط نیاز به در نظر گرفتن چگونگی نتایج هر بلوک 2×2 بوده، که مشابه بلوکهای قطری 1×1 ، مطابق بخش (۲-۴۵) است. هر بلوک 2×2 دارای شکل زیر با شرط $(a-d)^2 + 4bc < 0$ است.

$$D_i = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

ما مقادیر زیر را حساب می‌کنیم.

$$\zeta = \frac{a+d}{2}$$

$$\delta = \frac{a-d}{2}$$

$$\rho = \sqrt{-\delta^2 - bc}$$

همچنین ماتریس زیر را نیز محاسبه می‌کنیم:

$$F_i = \begin{bmatrix} \frac{\delta}{\rho} & \frac{b}{\rho} \\ \frac{c}{\rho} & -\frac{\delta}{\rho} \end{bmatrix}$$

تا دو عبارت زیر را به دست آوریم.

$$e^{D_i t} = e^{\zeta_i t} \{ (\cos \rho t) I + (\sin \rho t) F_i \}$$

در این جا:

$$\mu = (\zeta^2 + \rho^2)^{-1/2}$$

$$\phi = \tan^{-1}(-\rho/\zeta)$$

و

زاویه تأخیر ϕ اغلب در اولین ربع قرار دارد، زیرا ϕ برای الگوهای حجره‌ای منفی است.

یعنی: $0 < \phi \leq \frac{\pi}{2}$

پیوست ۶

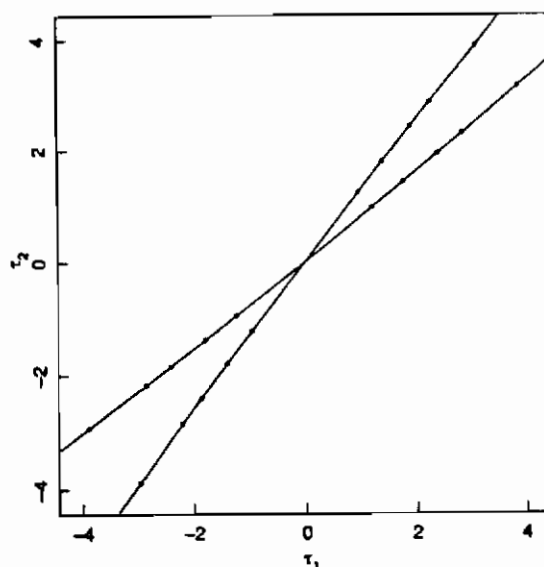
درون یابی منحنی‌های میزان زوج نیمرخی

برای درون یابی تصویر (p, q) منحنی‌های میزان احتمالی برای نقاط اثرهای نیمرخی، ابتدا محورهای مختصات θ_p را به τ_q و τ_p به کمک منحنی‌های اسپلاین درجه سوم تبدیل می‌کنیم. این تبدیل رویه احتمالی را چنان منتقل می‌کند که، در مختصات τ ، رویه نزدیک به یک سهمیگون با منحنی‌های میزان بیضوی است و درون یابی نقاط روی این تقریباً - بیضی ساده است.

مثال : پروماینس ۲۸

اثرهای نیمرخی برای پارامترهای پروماینس که در نمودار (۷-۶) نمایش داده شده، در شکل (۱-۴۶) در محورهای مختصات τ رسم شده است. در شکل اخیر دیده می‌شود که اثرهای نیمرخی خطاها، خطهای خیلی نزدیک به خط مستقیم و گذرنده از مبدأ هستند.

به علت مستقیم بودن اثرات، منحنی‌ها نزدیک به بیضوی خواهند بود و بنابراین رویه احتمالی در این مختصات به طور کامل سهمیگون است. منحنی‌های موجود در محورهای مختصات θ نیز به طور کامل بیضوی است، زیرا نمودارهای t نیمرخی (شکل ۴-۶) به طور کامل مستقیم اند. مورد اخیر چنین نتیجه می‌دهد که رویه احتمالی نیز به طور کامل سهمیگون است.



نمودار ۱۶-۱: اثرهای نیمرخی در مختصات τ برای پارامترهای پرومپسین.

مثال ۱۷: BOD

اثرهای نیمرخی برای پارامترهای BOD مربوط به شکل (۸-۶) را در محورهای مختصات مطابق شکل (۳-۴۶) نشان داده‌ایم. اثرهای نیمرخی برای پارامترهای BOD منحنی گونه بوده و گرایش به یک مجانب مشترک در ربع چهارم دارند. برای این مثال، رویه احتمالی نزدیک به یک سهمیگون بیضوی نیست. حتی در محورهای مختصات τ نیز وضع به همین شکل است. بنابراین نمی‌توان قبول کرد که منحنی‌های میزان خوبی درون یابی شود.

برای درون‌یابی یک منحنی خاص، باید مختصات τ را مقیاس بندی نمود که این عمل با تقسیم بر $\sqrt{\text{PF}(P, N-P, \alpha)}$ انجام می‌پذیرد. به طوری که یک منحنی احتمالی توأم $1-\alpha$ اسمی در مختصات مقیاس‌بندی شده τ در مربع $-1 \leq \tau_p$ و $\tau_q \leq 1$ محصور شده است.

اگر منحنی یک بیضی بود، امکان نمایش آن در مختصات مقیاس بندی شده به صورت پارامتری به شرح زیر وجود داشت:

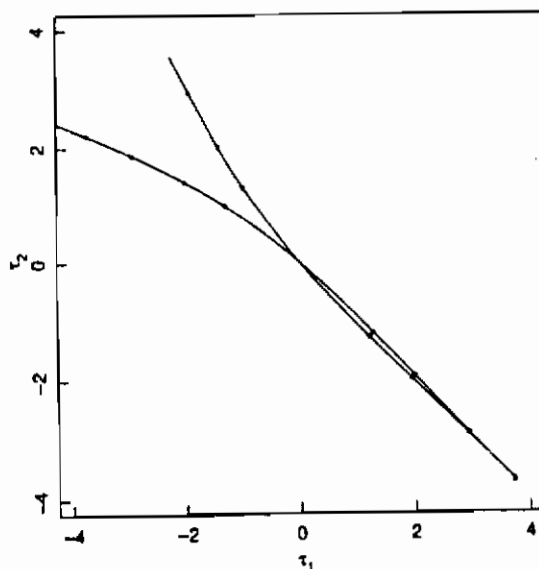
$$\tau_p = \cos(a+d/2)$$

$$\tau_q = \cos(a-d/2)$$

(۱-۴۶)

دامنه a برابر $[-\pi, \pi]$ و تأخیر d مقداری ثابت است. هنگامی که منحنی بیضوی نیست، زاویه تأخیر متغیر

خواهد بود. بنابراین برای درون یابی منحنی با مجموعه نقاط $(\tau_{p,r}, \tau_{q,r})$ ، $r = 1, \dots, 4$ می توان $s_{p,r} = \arccos(\tau_{p,r})$ و $s_{q,r} = \arccos(\tau_{q,r})$ را از معدل ها و تفاضل های حساب نموده و تفاضل ها را به صورت تابی از متوسط ها درون یابی کرد. در آخر می توان به کمک (۱-۴۶) انتقال معکوس را برای τ_q و τ_p انجام داد.



نمودار ۲-۴۶ اثرهای نیمرخی در محورهای مختصات τ برای پارامترهای BOD

مثال : پرومایسین ۲۹

محورهای مختصات مقیاس بندی شده τ برای نقاط منحنی های ۹۵٪ اسمی پارامترهای پرومایسین که از اثرهای نیمرخی به دست آمده در جدول (۱-۴۶) به همراه \arccos و متوسط ها و تفاضلهای \arccos درج شده است. چون این منحنی نزدیک به بیضوی است، تأخیر d می تواند با تقریب ثابت فرض شود و زاویه α در فاصله $[-\pi, \pi]$ تغییر کند، هر چند در جدول می توان دید، که تفاضل های \arccos ها در علامت تغییر می کنند و متوسط \arccos ها همگی بین $0, \pi$ قرار دارند.

حتی برای یک بیضی، تفاضل \arccos در علامت تغییر خواهند نمود و متوسط \arccos ها نیز در محدوده 0 و π قرار خواهند گرفت، زیرا تبدیل \arccos ها فقط مقادیر را در دامنه صفر و π نگه می دارد. برای به دست آوردن مقادیر مناسب برای a و d ، باید متوجه باشیم که چون $\cos(-x) = \cos(x)$ (ر.ک ۱-۴۶) τ_q و τ_p مشابهی حاصل خواهد شد، بشرط تعویض علامت متوسط و تفاضل. همچنین ما علامت هر تفاضل منفی

و متوسط متناظرش را عوض می‌کنیم تا مقادیر b, a مناسبی با درون‌یابی به کمک منحنی‌های اسپلاین متناوب به دست آوریم.

جدول ۱-۸۶- محاسبات زاویه و تأخیر برای منحنی ۹۵٪ پروماینسین.

Scaled		Arccosine				Angle	Phase
τ_1	τ_2	1	2	Avg.	Diff.	a	d
1.000	0.801	0.000	0.641	0.321	-0.641	-0.321	0.641
0.795	1.000	0.651	0.000	0.326	0.651	0.326	0.651
-1.000	-0.762	3.142	2.437	2.789	0.704	2.789	0.704
-0.769	-1.000	2.448	3.142	2.795	-0.693	-2.795	0.693

مثال : پروماینسین ۳۰

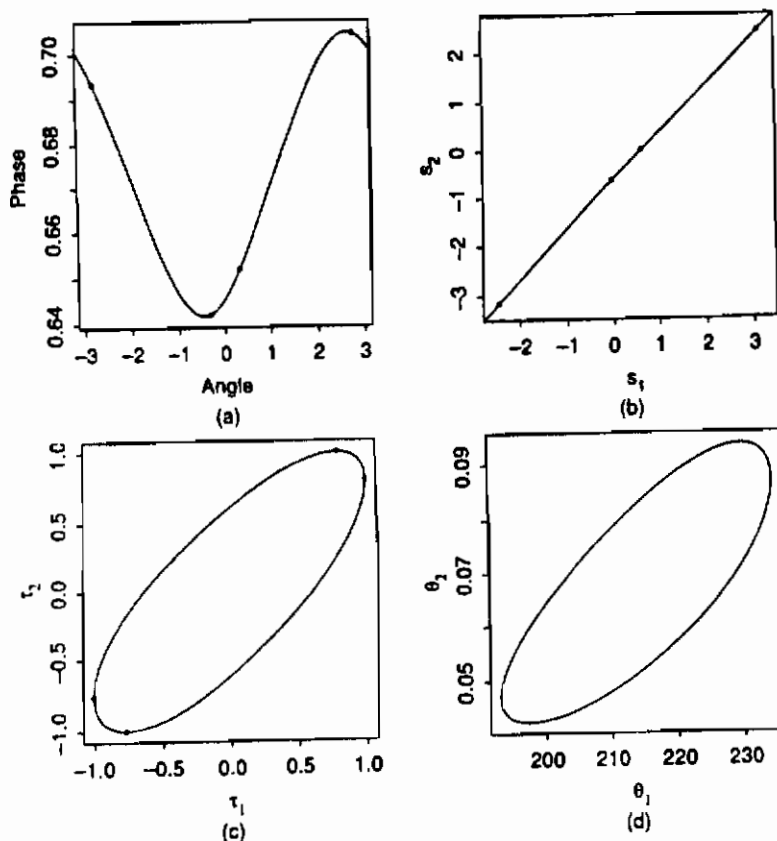
زاویه a و تأخیر d برای نقاط منحنی ۹۵٪ پارامترهای پروماینسین جدول (۱-۸۶) در شکل (۳-۸۶) رسم شده است. همچنین دیده می‌شود که تأخیر درون‌یابی شده به نسبت ثابت بوده و در دامنه $0.64 < d < 0.71$ نوسان می‌کند. این مطلب مؤید این است که رسم $a-d/2$ در مقابل $a+d/2$ خیلی به خط راست نزدیک خواهد بود، که در شکل (۳-۸۶) نمایش داده شده است. همچنین این تأخیر نسبتاً ثابت بر این دلالت دارد که منحنی در محورهای مختصات (τ_1, τ_2) مطابق شکل، نزدیک به بیضوی است. در آخر، به علت نمودار t نیمرخ پارامترهای پروماینسین که به طور کامل خط راست هستند، منحنی تقریباً بیضی موجود در محورهای مختصات τ به منحنی تقریباً بیضوی در محورهای مختصات θ تصویر می‌شود. این عمل در شکل (۳-۸۶) نشان داده شده است.

مثال : BOD ۱۸

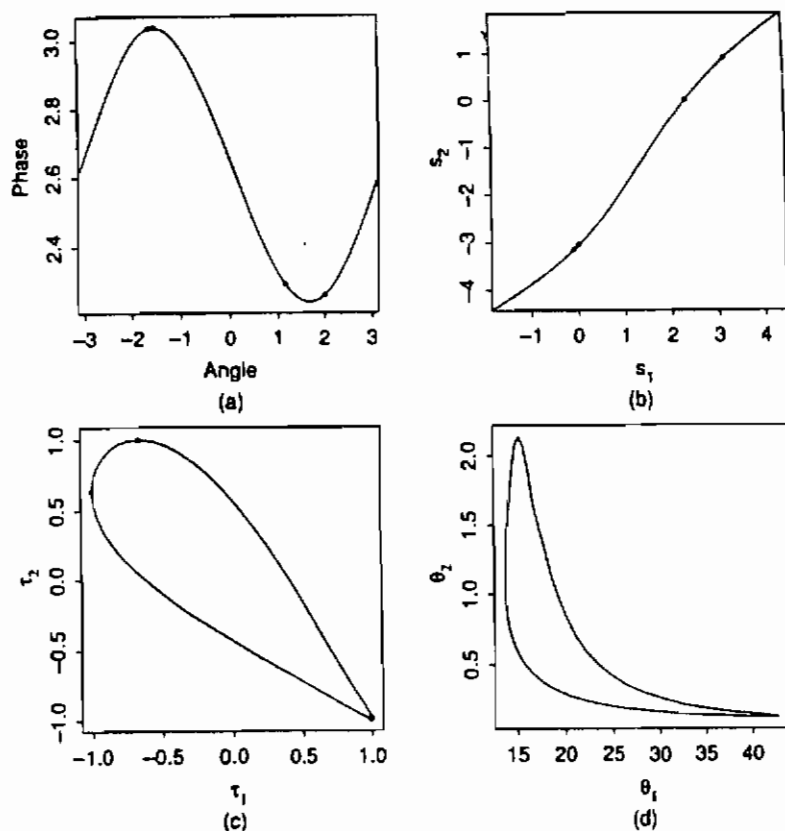
در شکل (۳-۸۶) تأخیر d را در مقابل زاویه a برای منحنی ۹۰٪ پارامترهای BOD به همراه منحنی درون‌یابی شده رسم کرده‌ایم. برای این مثال، تأخیر خیلی متغیر است. بنابراین نمودار $a-d/2$ در مقابل $a+d/2$ خیلی ساده نخواهد بود. شکل (۳-۸۶) گویای این موضوع است. همچنین این موضوع دلالت می‌کند بر این که منحنی در محورهای مختصات (τ_1, τ_2) یک بیضی نیست. شکل نیز این موضوع را نشان می‌دهد. در آخر، به علت این که نمودارهای t نیمرخ پارامترهای BOD بدجوری منحنی شده‌اند، بیضی باریک شده در محورهای مختصات τ به یک منحنی میزان به تدریج باریک شده در محورهای مختصات θ مطابق شکل (۳-۸۶) تصویر شده است. این نمایش به نسبت ضعیف از طریق نمودارهای اثر نیمرخ در نظر گرفته شده، پیش‌بینی شده است. ما آن را از منحنی‌های درون‌یابی شده که بر اساس فقط چهار نقطه بنا شده با اهمیت

بیشتری یافته‌ایم.

در مثال بالا از روی t نیم‌رخ و نمودار اثر نیم‌رخ پیدا است که منحنی‌های میزان واقعی بدرفتارند، بنابراین درون یابی‌ها فقط بر مبنای ۴ نقطه مقطع از منحنی‌ها با اثرها استوار است، که دقیق نخواهند بود. برای تولید و رسم منحنی‌های میزان دقیقتر، نقاط اضافی واقع بر منحنی‌ها باید محاسبه و در فرایند درون یابی به کار گرفته شوند. یک روش برای اضافه کردن نقاط رسم منحنی‌های دقیق بر مبنای اثرهای در حال توسعه است.



نمودار ۳-۸۶ درون یابی منحنی احتمالی ۹۵٪ پارامترهای پرومابیسین تأخیرهای (•) متناظر با نقاط موجود در اثرهای نیم‌رخ در قسمت a به همراه منحنی درون یابی شده نشان داده شده است. نقاط متناظر (•) و مقادیر درون یابی شده $a+d/2$ و $a-d/2$ در قسمت b نشان داده شده است. نقاط روی اثرها (•) و منحنی‌های درون یابی شده در محورهای مختصات c در قسمت c و در قسمت d محورهای مختصات θ نشان داده شده است.



نمودار ۴-۸۶. درون یابی منحنی احتمالی ۹۰٪ پارامترهای BOD، تأخیرهای (e) متناظر با نقاط اثرهای نیمرخ در قسمت a به همراه منحنی های درون یابی شده، و نقاط متناظر (e) و مقادیر درون یابی شده $a+d/2$ و $a-d/2$ در قسمت b نشان داده شده است. نقاط واقع بر اثرها (e) و منحنی های درون یابی شده. در محوره های مختصات τ در قسمت x در محوره های مختصات θ در قسمت d نشان داده شده است.

پیوست ۷

الگوهای به کار رفته در مجموعه داده‌ها

توابع الگو برای مجموعه داده‌های بخش (۷-۳-۲) به شرح زیر است.

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 x}{\theta_2 + x}$$

الگوی A: الگوی میشلیز - متن

الگوی B:

$$f(x, \theta) = \theta_1 [1 - \exp(-\theta_2 x)]$$

الگوی C:

$$f(x, \theta) = \theta_1 + (0.49 - \theta_1) \exp[-\theta_2 (x - 8)]$$

الگوی D:

$$f(x, \theta) = \exp \left\{ -\theta_1 x_1 \exp \left[-\theta_2 \left[\frac{1}{x_2} - \frac{1}{620} \right] \right] \right\}$$

الگوی E:

$$f(x, \theta) = \theta_1 x^{\theta_2}$$

الگوی F: الگوی رگرسیونی مجانبی

$$f(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 \exp(\theta_3 x)$$

الگوی G : الگوی لوجستیک

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1}{1 + \theta_2 \exp(\theta_3 x)}$$

الگوی H : الگوی رشد گمپرتز

$$f(x, \theta) = \theta_1 \exp[-\exp(\theta_2 - \theta_3 x)]$$

الگوی I :

$$f(x, \theta) = \theta_1 [1 - \theta_2 \exp(-\theta_3 x)]$$

الگوی J : الگوی رشد لگ لوجستیک

$$f(x, \theta) = \theta_1 - \ln[1 + \theta_2 \exp(-\theta_3 x)]$$

الگوی K :

$$f(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 / x^{\theta_3}$$

الگوی L :

$$f(x, \theta) = \ln[\theta_1 \exp(-\theta_2 x) + (1 - \theta_1) \exp(-\theta_3 x)]$$

الگوی M :

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 \theta_3 (x_2 - x_3 / 1.632)}{1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_3}$$

الگوی N : الگوی جذب تدریجی

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1 x_1 \exp(-\theta_3 x_{inv}) \theta_2 x_2 \exp(-\theta_4 x_{inv})}{\theta_1 x_1 \exp(-\theta_3 x_{inv}) + 2.28 \theta_2 x_2 \exp(-\theta_4 x_{inv})}$$

که در آن

$$x_{inv} = \frac{1}{x_3 + 273} - \frac{1}{558}$$

الگوی O : الگوی رشد مورگان - مرسر - فلورین

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_2 \theta_3 + \theta_1 x^{\theta_4}}{\theta_3 + x^{\theta_4}}$$

الگوی P : الگوی رشد ریچاردز

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1}{[1 + \theta_2 \exp(-\theta_3 x)]^{1/\theta_4}}$$

الگوی Q :

$$f(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 \exp(-\theta_4 x) + \theta_3 \exp(-\theta_5 x)$$

الگوی R :

$$f(x, \theta) = \frac{x \exp\left[\frac{\theta_1 - \theta_2/x}{R}\right]}{1 + \exp\left[\frac{\theta_3 - \theta_4/x}{R}\right] + \exp\left[\frac{\theta_5 - \theta_6/x}{R}\right]}$$

که در آن $R=1.98$ است.

الگوی S :

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_1}{\theta_2 + x_1} + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_2^2 + \theta_5 x_2^3 + (\theta_6 + \theta_7 x_2^2) x_2 \exp\left[\frac{-x_1}{\theta_8 + \theta_9 x_2^2}\right]$$

مرجع برای مجموعه داده‌ها در جدول (۱۴۷) داده شده است. بعضی از این مجموعه داده‌ها در مثال‌ها و تمرین‌ها به کار رفته است. تناظر بین شماره مجموعه داده‌ها و بخش‌های پیوست ۱ یا ۴ در جدول (۲۴۷) داده شده است.

جدول A۷-۱. مرجع برای مجموعه داده‌های بخش (۲-۳-۷)

Data Set	Reference
1	Michaelis and Menten (1913)
2	Treloar (1974)
3	Treloar (1974)
4	Draper and Smith (1981), p. 522, problem L, set 1
5	Draper and Smith (1981), p. 522, problem L, set 2
6	Draper and Smith (1981), p. 522, problem L, set 3
7	Draper and Smith (1981), p. 522, problem L, set 4
8	Draper and Smith (1981), p. 522, problem L, set 5
9	Draper and Smith (1981), p. 522, problem L, set 6
10	Draper and Smith (1981), p. 522, problem L, set 7
11	Draper and Smith (1981), p. 522, problem L, set 8
12	Draper and Smith (1981), p. 522, problem L, set 9
13	Draper and Smith (1981), p. 476
14	Draper and Smith (1981), p. 519, problem H
15	Draper and Smith (1981), p. 519, problem M
16	Ratkowsky (1983), p. 88, set 1
17	Ratkowsky (1983), p. 88, set 2
18	Gregory (1956)
19	Heyes and Brown (1956)
20	Ratkowsky (1983), Appendix 5.A, set 1
21	Ratkowsky (1983), Appendix 5.A, set 2
22	Ratkowsky (1979), barley yields
23	Pimentel-Gomes (1953)
24	Draper and Smith (1981), p. 524, problem N, set 1
25	Draper and Smith (1981), p. 524, problem N, set 2
26	Draper and Smith (1981), p. 524, problem N, set 3
27	Draper and Smith (1981), p. 524, problem N, set 4
28	Draper and Smith (1981), p. 524, problem N, set 5
29	Draper and Smith (1981), p. 524, problem P, tensile strength
30	Draper and Smith (1981), p. 524, problem P, yield strength
31	Dierburg and Ewel (1982)
32	Carr (1960)
33	Pritchard (1972), model 1
34	Pritchard (1972), model 2
35	Osborne (1971)
36	Miller (1983)
37	Linssen (1975)

جدول ۲-۸۷. تناظر شماره‌های مجموعه داده‌ها و بخشهای پیوست ۱ یا ۴

Data Set	Section.
2	A1.3, Table A1.3 <i>b</i>
3	A1.3, Table A1.3 <i>a</i>
5	A4.1
11	A1.4
19	A4.5
32	A1.5
33	A4.4
37	A1.8

References

مراجع انگلیسی

- Abdollah, Shirin (1986), *The Effect of Doxorubicin on the Specific Binding of [³H] Nitrendipine to Rat Heart Microsomes*. Master's Thesis, Queen's University at Kingston.
- Anderson, David H. (1983), *Compartmental Modeling and Tracer Kinetics*. Springer Verlag.
- Ansley, Craig F. (1985), "Quick proofs of some regression theorems via the QR algorithm." *American Statistician*, 39(1), 55-59.
- Armstrong, P. W., D. G. Watts, D. C. Hamilton, M. A. Chiong, and J. O. Parker (1979), "Quantification of myocardial infarction: Template model for serial creatine kinase analysis." *Circulation*, 60(4), 856-865.
- Bache, C. A., J. W. Serum, W. D. Youngs, and D. J. Lisk (1972), "Polychlorinated biphenyl residues: Accumulation in Cayuga Lake trout with age." *Science*, 117, 1192-1193.
- Bacon, D. W., and D. G. Watts (1971), "Estimating the transition between two intersecting straight lines." *Biometrika*, 58, 525-534.
- Bard, Y. (1974), *Nonlinear Parameter Estimation*. New York: Academic Press.
- Bartels, R. H., and G. W. Stewart (1972), "Algorithm 432, the solution of the matrix equation $AX - XB = C$." *Communications of the Association for Computing Machinery*, 15(9), 820-826.
- Bates, Douglas M. (1978), *Curvature Measures of Nonlinearity*. Ph.D. Thesis, Queen's University at Kingston.
- Bates, D. M., D. C. Hamilton, and D. G. Watts (1983), "Calculation of intrinsic and parameter-effects curvatures for nonlinear regression models." *Communications in Statistics—Simulation and Computation*, 12, 469-477.
- Bates, Douglas M., and Mary J. Lindstrom (1986), "Nonlinear least squares with conditionally linear parameters," in *Proceedings of the Statistical Computing Section*. New York: American Statistical Association.
- Bates, D. M., and D. G. Watts (1980), "Relative curvature measures of nonlinearity (with discussion)." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 42(1), 1-25.
- Bates, D. M., and D. G. Watts (1981a), "Parameter transformations for improved approximate confidence regions in nonlinear least squares." *Annals of Statistics*, 9(6), 1152-1167.
- Bates, D. M., and D. G. Watts (1981b), "A relative offset orthogonality convergence criterion for nonlinear least squares." *Technometrics*, 23(2), 179-183.
- Bates, D. M., and D. G. Watts (1984), "A multi-response Gauss-Newton algorithm." *Communications in Statistics—Simulation and Computation*, 13(5), 705-715.
- Bates, Douglas M., and Donald G. Watts (1985), "Multiresponse estimation with special application to systems of linear differential equations (with discussion)." *Technometrics*, 27(4), 329-360.

- Bates, Douglas M., and Donald G. Watts (1987), "A generalized Gauss-Newton procedure for multi-response parameter estimation." *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing*, 7(1), 49-55.
- Bates, Douglas M., Dennis A. Wolf, and Donald G. Watts (1985), "Nonlinear least squares and first-order kinetics," in David Allen, Ed., *Proceedings of Computer Science and Statistics: Seventeenth Symposium on the Interface*. New York: North-Holland.
- Bavely, Connie A., and G. W. Stewart (1979), "An algorithm for computing reducing subspaces by block diagonalization." *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 16(2), 359-367.
- Beale, E. M. L. (1960), "Confidence regions in nonlinear estimation (with discussion)." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 22, 41-88.
- Becker, Richard A., John M. Chambers, and Allan R. Wilks (1988), *The New S Language: A Programming Environment For Data Analysis and Graphics*. Belmont, Calif.: Wadsworth.
- Belsley, D. A., E. Kuh, and R. E. Welsch (1980), *Regression Diagnostics—Identifying Influential Data and Sources of Variation*. New York: Wiley.
- Bliss, C. I., and A. T. James (1966), "Fitting the rectangular hyperbola." *Biometrics*, 22, 573-602.
- Box, G. E. P. (1960), "Fitting empirical data." *Annals of the New York Academy of Sciences*, 86, 792-816.
- Box, G. E. P., and G. A. Coutie (1956), "Applications of digital computers in the exploration of functional relationships." *Proceedings of the IEEE*, 103B (Supplement no. 1), 100-107.
- Box, George E. P., and David R. Cox (1964), "An analysis of transformations." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 26, 211-252.
- Box, G. E. P., and N. R. Draper (1959), "A basis for the selection of a response surface design." *Journal of the American Statistical Association*, 54, 622-653.
- Box, G. E. P., and N. R. Draper (1965), "The Bayesian estimation of common parameters from several responses." *Biometrika*, 52, 355-365.
- Box, George E. P., and Norman R. Draper (1987), *Empirical Model-Building and Response Surfaces*. New York: Wiley.
- Box, G. E. P., and W. J. Hill (1974), "Correcting inhomogeneity of variance with power transformation weighting." *Technometrics*, 16, 385-389.
- Box, G. E. P., and W. G. Hunter (1965), "Sequential design of experiments for nonlinear models" in *IBM Scientific Computer Symposium in Statistics*, pp. 113-137.
- Box, G. E. P., W. G. Hunter, and J. S. Hunter (1978), *Statistics for Experimenters*. New York: Wiley.
- Box, G. E. P., W. G. Hunter, J. F. MacGregor, and J. Erjavec (1973), "Some problems associated with the analysis of multiresponse models." *Technometrics*, 15(1), 33-51.
- Box, George E. P., and Gwilym M. Jenkins (1976), *Time Series Analysis: Forecasting and Control* (revised edition). San Francisco: Holden-Day.
- Box, George E. P., and Hiromitsu Kanemasu (1984), "Constrained nonlinear least squares," in Klaus Hinkelmann, Ed., *Contributions to Experimental Design, Linear Models, and Genetic Statistics: Essays in Honor of Oscar Kempthorne*. New York: Marcel Dekker.
- Box, G. E. P., and H. L. Lucas (1959), "Design of experiments in non-linear situations." *Biometrika*, 46, 77-90.
- Box, G. E. P., and G. C. Tiao (1973), *Bayesian Inference in Statistical Analysis*. Reading, Mass.: Addison-Wesley.
- Box, George E. P., and Paul W. Tidwell (1962), "Transformations of the independent

- variables." *Technometrics*, 4, 531-550.
- Box, M. J. (1968), "The occurrence of replications in optimal designs of experiments to estimate parameters in nonlinear models." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 30, 290-302.
- Box, M. J. (1971), "An experimental design criterion for precise parameter estimation of a subset of the parameters in a nonlinear model." *Biometrika*, 58, 149-153.
- Box, M. J., N. R. Draper, and W. G. Hunter (1970), "Missing values in multi-response nonlinear data fitting." *Technometrics*, 12, 613-620.
- Caracotsios, M., and W. E. Stewart (1985), "Sensitivity analysis of initial value problems with mixed ODE's and algebraic equations." *Computers and Chemical Engineering*, 9(4), 359-365.
- Carr, N. L. (1960), "Kinetics of catalytic isomerization of n-pentane." *Industrial and Engineering Chemistry*, 52, 391-396.
- Carroll, Raymond J., and David Ruppert (1984), "Power transformation when fitting theoretical models to data." *Journal of the American Statistical Association*, 79(386), 321-328.
- Chambers, J. M. (1977), *Computational Methods for Data Analysis*. New York: Wiley.
- Chambers, John M., William S. Cleveland, Beat Kleiner, and Paul A. Tukey (1983), *Graphical Methods for Data Analysis*. Belmont, Calif.: Wadsworth.
- Cleveland, William S. (1984), "Graphs in scientific publications." *American Statistician*, 38(4), 261-269.
- Cleveland, William S. (1985), *Elements of Graphing Data*. Belmont, Calif.: Wadsworth.
- Cochran, W. G. (1973), "Experiments for nonlinear functions." *Journal of the American Statistical Association*, 68, 771-778.
- Cochran, W. G., and G. M. Cox (1957), *Experimental Designs*. New York: Wiley.
- Cole, K. S., and R. H. Cole (1941), "Dispersion and absorption in dielectrics I: Alternating current characteristics." *Journal of Physical Chemistry*, 9, 341-351.
- Conte, Samuel D., and Carl de Boor (1980), *Elementary Numerical Analysis, an Algorithmic Approach* (third edition). New York: McGraw-Hill.
- Cook, R. D., and S. Weisberg (1982), *Residuals and Influence in Regression*. London: Chapman and Hall.
- Cook, R. D., and S. Weisberg (1983), "Diagnostics for heteroscedasticity in regression." *Biometrika*, 70(1), 1-10.
- Daniel, C., and F. S. Wood (1980), *Fitting Equations to Data* (second edition). New York: Wiley.
- Davies, O. L., Ed. (1956), *The Design and Analysis of Industrial Experiments* (second edition). Edinburgh: Oliver and Boyd.
- Dennis, Jr., J. E., D. M. Gay, and R. E. Welsch (1981), "An adaptive nonlinear least-squares algorithm." *ACM Transactions on Mathematical Software*, 7, 348-368.
- Dennis, Jr., J. E., and Robert B. Schnabel (1983), *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. Englewood Cliffs, N. J.: Prentice Hall.
- Dierburg, F., and K. C. Ewel (1982), "The effects of treated sewage effluent on decomposition and organic matter accumulation in cypress domes," in K. C. Ewel and H. T. Odum, Eds., *Cypress Domes*. Florida University Press.
- Dongarra, J. J., J. R. Bunch, C. B. Moler, and G. W. Stewart (1979), *Linpack Users' Guide*. Philadelphia: SIAM.
- Draper, N. R., and H. Smith (1981), *Applied Regression Analysis* (second edition). New York: Wiley.
- Edlefsen, Lee E., and Samuel D. Jones (1986), *GAUSS™ Programming Language Manual*. Kent, Wash.: Aptech Systems Inc..
- Ehrenberg, A. S. C. (1981), "The problem of numeracy." *American Statistician*, 35(2),

- 67-71.
- Ehrenberg, A. S. C. (1982), "Writing technical reports or papers." *American Statistician*, 36(4), 326-329.
- Elliot, J. R., and D. R. Pierson (1986), Private communication.
- Fedorov, V. V. (1972), *Theory of Optimal Experiments*. New York: Academic Press. (Translated by W. J. Studden and E. M. Klimko.)
- Fisher, R. A. (1935), *Design of Experiments*. London: Oliver and Boyd.
- Froment, Gilbert F., and Kenneth B. Bischoff (1979), *Chemical Reactor Analysis and Design*. New York: Wiley.
- Fuguitt, R. E., and J. E. Hawkins (1945), "The liquid-phase thermal isomerization of α -pinene." *Journal of the American Chemical Society*, 67, 242-245.
- Fuguitt, R. E., and J. E. Hawkins (1947), "Rate of the thermal isomerization of α -pinene in the liquid phase." *Journal of the American Chemical Society*, 69, 319-322.
- Gill, P. E., W. Murray, and M. H. Wright (1981), *Practical Optimization*. New York: Academic Press.
- Godfrey, Keith (1983), *Compartmental Models and Their Application*. New York: Academic Press.
- Golub, G. H., and V. Pereyra (1973), "The differentiation of pseudo-inverses and nonlinear least squares problems whose variables separate." *Journal of SIAM*, 10, 413-432.
- Gregory, F. G. (1956), "General aspects of leaf growth," in F. L. Milthorpe, Ed., *The Growth of Leaves*. London: Butterworth.
- Halperin, M. (1963), "Confidence interval estimation in nonlinear regression." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 25, 330-333.
- Hamilton, D. C. (1980), *Experimental Design for Nonlinear Regression Models*. Ph.D. Thesis, Queen's University at Kingston.
- Hamilton, D. C. (1986), "Confidence regions for parameter subsets in nonlinear regression." *Biometrika*, 73(1), 57-64.
- Hamilton, David C., and Donald G. Watts (1985), "A quadratic design criterion for precise estimation in nonlinear regression models." *Technometrics*, 27(3), 241-250.
- Hamilton, D. C., D. G. Watts, and D. M. Bates (1982), "Accounting for intrinsic nonlinearity in nonlinear regression parameter inference regions." *Annals of Statistics*, 10(2), 386-393.
- Hartley, H. O. (1961), "The modified Gauss-Newton method for the fitting of non-linear regression functions by least squares." *Technometrics*, 3, 269-280.
- Havriliak, Stephen Jr., and S. Negami (1967), "A complex plane representation of dielectric and mechanical relaxation processes in some polymers." *Polymer*, 8, 161-205.
- Havriliak, Stephen Jr., and Donald G. Watts (1987), "Estimating dielectric constants: A complex multiresponse problem," in C. Mallows, Ed., *Data, Design, and Analysis*. New York: Wiley.
- Heyes, J. K., and R. Brown (1956), "Growth and cellular differentiation," in F. L. Milthorpe, Ed., *The Growth of Leaves*. London: Butterworth.
- Hill, P. D. H. (1980), "D-optimal designs for partially nonlinear regression models." *Technometrics*, 22(2), 275-276.
- Hill, W. J., and W. G. Hunter (1974), "Design of experiments for subsets of the parameters." *Technometrics*, 16, 425-434.
- Hill, W. J., W. G. Hunter, and D. W. Wichern (1968), "A joint design criterion for the dual problem of model discrimination and parameter estimation." *Technometrics*, 10, 145-160.
- Himmelblau, D. M. (1972), "A uniform evaluation of unconstrained optimization techniques," in F. A. Lootsma, Ed., *Numerical Methods for Nonlinear Optimization*.

- London: Academic Press.
- Hinkley, D. V. (1969), "Inference about the intersection in two-phase regression." *Biometrika*, 56, 495-504.
- Hocking, R. R. (1983), "Developments in linear regression methodology: 1959-1982 (with discussion)." *Technometrics*, 25(3), 219-249.
- Hougen, O. A., and K. M. Watson (1947), *Chemical Reaction Principles*. New York: Wiley.
- Householder, A. S. (1958), "Unitary triangularization of a nonsymmetric matrix." *Journal of the Association for Computing Machinery*, 5, 339-342.
- Hubbard, A. B., and W. E. Robinson (1950), "A thermal decomposition study of colorado oil shale." U.S. Bureau of Mines, Rept. Invest. No. 4744.
- Huber, P. J. (1981), *Robust Statistics*. New York: Wiley.
- Jennrich, R. I., and P. B. Bright (1976), "Fitting systems of linear differential equations using computer generated exact derivatives (with discussion)." *Technometrics*, 18(4), 385-399.
- Jennrich, R. I., and P. F. Sampson (1968), "An application of stepwise regression to non-linear estimation." *Technometrics*, 10(1), 63-72.
- Joiner, B. L. (1981), "Lurking variables: Some examples." *American Statistician*, 35, 227-233.
- Jupp, David L. B. (1978), "Approximation to data by splines with free knots." *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 15(2), 328-343.
- Juusola, J. A. (1971), *A Kinetic Mechanism for the Vapor-phase Oxidation of o-Xylene over a Vanadium Oxide Catalyst*. Ph. D. thesis, Queen's University at Kingston.
- Kaplan, Stanley A., Robert E. Weinfeld, Charles W. Abruzzo, and Margaret Lewis (1972), "Pharmacokinetic profile of sulfoxazole following intravenous, intramuscular, and oral administration to man." *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 61, 773-778.
- Kaufman, Linda (1975), "A variable projection method for solving separable nonlinear least squares problems." *BIT*, 15, 49-57.
- Kennedy, Jr., W. J., and J. E. Gentle (1980), *Statistical Computing*. New York: Marcel Dekker.
- Khuri, A. I. (1984), "A note on D-optimal designs for partially nonlinear regression models." *Technometrics*, 26(1), 59-61.
- Lawton, W. H., E. A. Sylvestre, and M. S. Maggio (1972), "Self modeling nonlinear regression." *Technometrics*, 14(3), 513-532.
- Levenberg, K. (1944), "A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares." *Quarterly of Applied Mathematics*, 2, 164-168.
- Linssen, H. N. (1975), "Nonlinearity measures: a case study." *Statistica Neerlandica*, 29, 93-99.
- Lythgoe, Steven C. (1986), *A model for the Thermal Dissolver of the Wilsonville Direct Coal Liquefaction Process*. Master's Thesis, Queen's University at Kingston.
- Marquardt, D. W. (1963), "An algorithm for the estimation of non-linear parameters." *Journal of SIAM*, 11, 431-441.
- Marske, Donald (1967), *Biochemical Oxygen Demand Data Interpretation Using Sum of Squares Surface*. M.S. Thesis, University of Wisconsin—Madison.
- McLean, D. D., D. J. Pritchard, D. W. Bacon, and J. Downie (1979), "Singularities in multiresponse modelling." *Technometrics*, 21(3), 291-298.
- Michaelis, L., and M. L. Menten (1913), "Kinetik der Invertinwirkung." *Biochemische Zeitschrift*, 49, 333.
- Miller, Allan (1983), "BMD P3R - A warning." CSIRO-DMS Newsletter, Sydney, Australia: CSIRO.

- Moler, Cleve, and Charles Van Loan (1978), "Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix." *SIAM Review*, 20(4), 801-836.
- Montgomery, Douglas C., and Elizabeth A. Peck (1982), *Introduction to Linear Regression Analysis*. New York: Wiley.
- O'Neill, Barrett (1966), *Elementary Differential Geometry*. New York: Academic Press.
- Osborne, M. R. (1971), "Some aspects of non-linear least squares calculations," in F. A. Lootsma, Ed., *Numerical Methods for Non-linear Optimization*. New York: Academic Press.
- Pimentel-Gomes, F. (1953), "The use of Mitscherlich's regression law in the analysis of experiments with fertilizers." *Biometrics*, 9, 498-516.
- Pritchard, Douglas (1972), *Statistical Design and Analysis Using Experimental Kinetic Data*. Master's Thesis, Queen's University.
- Ralston, M. L., and R. I. Jennrich (1978), "DUD, a derivative-free algorithm for nonlinear least squares." *Technometrics*, 20, 7-14.
- Ratkowsky, David A. (1979), "Choosing the 'best' parameterization of the asymptotic regression model." Technical Report, CSIRO Division of Mathematics and Statistics, Tasmania.
- Ratkowsky, D. A. (1983), *Nonlinear Regression Modelling: A Unified Practical Approach*. New York: Marcel Dekker.
- Ratkowsky, D. A. (1985), "A statistically suitable general formulation for modelling catalytic chemical reactions." *Chemical Engineering Science*, 40(9), 1623-1628.
- Renwick, A. G. (1982), "Pharmacokinetics in toxicology," in A. Wallace Hayes, Ed., *Principles and Methods of Toxicology*. New York: Raven Press, pp. 659-710.
- Roller, Duane (1950), *The Early Development of the Concepts of Temperature and Heat: The Rise and Decline of the Caloric Theory*. Cambridge, Mass.: Harvard University Press.
- SAS Institute Inc. (1985), *SAS User's Guide: Statistics, Version 5 Edition*. Cary, N.C.: SAS Institute Inc..
- SAS Institute Inc. (1985), *SASIML™ User's Guide, Version 5 Edition*. Cary, N.C.: SAS Institute Inc..
- Seber, G. A. (1977), *Linear Regression Analysis*. New York: Wiley.
- Silvey, S. D., and D. M. Titterton (1973), "A geometric approach to optimal design theory." *Biometrika*, 60, 21-32.
- Smith, B. T., J. M. Boyle, J. J. Dongarra, B. S. Garbow, Y. Ikebe, V. C. Klema, and C. B. Moler (1976), *Matrix Eigensystem Routines—EISPACK Guide*. Springer Verlag.
- Sredni, J. (1970), *Problems of Design, Estimation, and Lack of Fit in Model Building*. Ph.D. Thesis, University of Wisconsin—Madison.
- St. John, R. C., and N. R. Draper (1975), "D-optimality for regression designs: a review." *Technometrics*, 17, 15-23.
- Steinberg, David M., and William G. Hunter (1984), "Experimental design: review and comment (with discussion)." *Technometrics*, 26(2), 71-130.
- Stewart, G. W. (1973), *Introduction to Matrix Computations*. New York: Academic Press.
- Stewart, G. W. (1976), "HQR and EXCHQ: Fortran subroutines for calculating the eigenvalues of a real upper Hessenberg matrix." *ACM Transactions on Mathematical Software*, 2(3), 275-280. (Algorithm 506.)
- Stewart, W. E., and J. P. Sorensen (1981), "Bayesian estimation of common parameters from multiresponse data with missing observations." *Technometrics*, 23, 131-141.
- Tiemey, Luke, and Joseph B. Kadane (1986), "Accurate approximations for posterior moments and densities." *Journal of the American Statistical Association*, 81(393), 82-86.

- Treloar, M. A. (1974), *Effects of Puromycin on Galactosyltransferase of Golgi Membranes*. Master's Thesis, University of Toronto.
- Tufte, Edward R. (1983), *The Visual Display of Quantitative Information*. Cheshire, Conn.: Graphics Press.
- Varah, J. M. (1982), "A spline least squares method for numerical parameter estimation in differential equations." *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing*, 3(1), 28-46.
- Wagner, J. G. (1967), "Use of computers in pharmacokinetics." *Clinical Pharmacology and Therapeutics*, 8, 201.
- Wagner, John G. (1975), *Fundamentals of Clinical Pharmacokinetics*. Hamilton, Illinois: Drug Intelligence Publications.
- Wald, A. (1943), "On the efficient design of statistical investigations." *Annals of Mathematical Statistics*, 14, 134-140.
- Watts, Donald G. (1981), "A task-analysis approach to designing a regression analysis course." *American Statistician*, 35(2), 77-84.
- Watts, D. G., and D. W. Bacon (1974), "Using a hyperbola as a transition model to fit two-regimen straight-line data." *Technometrics*, 16, 369-373.
- Watts, Donald G., Donald deBethizy, and Robert G. Stiratelli (1986), "Toxicity of Ethyl Acrylate." Technical Report, Rohm and Haas Co., Spring House, Pa.
- Williams, E. J. (1962), "Exact fiducial limits in nonlinear estimation." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 24, 125-139.
- Ziegel, E. R., and J. W. Gorman (1980), "Kinetic modelling with multiresponse data." *Technometrics*, 22(2), 139-151.
- Ziegel, Eric R. (1985), "Discussion of the paper by Bates and Watts." *Technometrics*, 27(4), 352-357.

Bibliography

BOOKS

- Bard, Y. (1974), *Nonlinear Parameter Estimation*. New York: Academic Press.
- Beck, J. V., and K. J. Arnold (1977), *Parameter Estimation in Engineering and Science*. New York: Wiley.
- Box, George E. P., and Norman R. Draper (1987), *Empirical Model-Building and Response Surfaces*. New York: Wiley.
- Box, G. E. P., W. G. Hunter, and J. S. Hunter (1978), *Statistics for Experimenters*. New York: Wiley.
- Box, G. E. P., and G. C. Tiao (1973), *Bayesian Inference in Statistical Analysis*. Reading, Mass.: Addison-Wesley.
- Chambers, J. M. (1977), *Computational Methods for Data Analysis*. New York: Wiley.
- Daniel, C., and F. S. Wood (1980), *Fitting Equations to Data* (second edition). New York: Wiley.
- Dennis, Jr., J. E., and Robert B. Schnabel (1983), *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. Englewood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall.
- Dixon, W. J., M. B. Brown, L. Engleman, J. W. Frane, M. A. Hill, R. I. Jennrich, and J. D. Toporek (1983), *BMDP Statistical Software*. Berkeley, Calif.: University of California Press.
- Draper, N. R., and H. Smith (1981), *Applied Regression Analysis* (second edition). New York: Wiley.
- Gallant, A. Ronald (1987), *Nonlinear Statistical Models*. New York: Wiley.
- Kennedy, Jr., W. J., and J. E. Gentle (1980), *Statistical Computing*. New York: Marcel Dekker.
- Myers, R. H. (1986), *Classical and Modern Regression with Applications*. Boston: Duxbury.
- Nash, John C., and Mary Walker-Smith (1987), *Nonlinear Parameter Estimation: An Integrated System in Basic*. New York: Marcel Dekker.
- Neter, J., W. Wasserman, and M. H. Kutner (1983), *Applied Linear Regression Models*. Homewood, Ill.: Irwin.
- Ratkowsky, D. A. (1983), *Nonlinear Regression Modelling: A Unified Practical Approach*. New York: Marcel Dekker.
- SAS Institute Inc. (1985), *SAS User's Guide: Statistics, Version 5 Edition*. Cary, N.C.: SAS Institute Inc..
- Snedecor, George W., and William G. Cochran (1980), *Statistical Methods* (seventh edition). Ames, Iowa: Iowa State University Press.

GENERAL ARTICLES

- Box, G. E. P. (1960), "Fitting empirical data." *Annals of the New York Academy of Sciences*, 86, 792-816.
- Box, G. E. P., and W. G. Hunter (1962), "A useful method of model building." *Technometrics*, 4, 301-318.
- Box, G. E. P., and W. G. Hunter (1965), "The experimental study of physical mechanisms." *Technometrics*, 7, 23-42.
- Gallant, A. R. (1975), "Nonlinear regression." *American Statistician*, 29(2), 73-81.
- Motulsky, H. J., and L. A. Ransnas (1987), "Fitting curves to data using nonlinear regression: a practical and nonmathematical review." *FASEB Journal*, 1, 365-374.
- Watts, D. G. (1981), "An Introduction to Nonlinear Least Squares," in L. Endrenyi, Ed., *Kinetic Data Analysis—Design and Analysis of Enzyme and Pharmacokinetic Experiments*. New York: Plenum. pp. 1-24.

NONLINEAR LEAST SQUARES—THEORY

- Allen, D. M. (1983), "Parameter estimation for nonlinear models with emphasis on compartmental models." *Biometrics*, 39(3), 629-637.
- Bates, D. M., and D. G. Watts (1980), "Relative curvature measures of nonlinearity (with discussion)." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 42(1), 1-25.
- Bates, D. M., and D. G. Watts (1981), "Parameter transformations for improved approximate confidence regions in nonlinear least squares." *Annals of Statistics*, 9(6), 1152-1167.
- Beal, S. L. (1982), "Reader response: Bayesian analysis of nonlinear models." *Biometrics*, 38(4), 1089-1092.
- Beale, E. M. L. (1960), "Confidence regions in nonlinear estimation (with discussion)." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 22, 41-88.
- Berkey, C. S. (1982), "Bayesian approach for a nonlinear growth model." *Biometrics*, 38(4), 953-961.
- Clarke, G. P. Y. (1980), "Moments of the least squares estimators in a nonlinear regression model." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 42(2), 227-237.
- Clarke, G. P. Y. (1987), "Approximate confidence limits for a parameter function in nonlinear regression." *Journal of the American Statistical Association*, 82(397), 221-230.
- Cook, R. D., and C. L. Tsai (1985), "Residuals in nonlinear regression." *Biometrika*, 72(1), 23-29.
- Cook, R. Dennis, and Jeffrey A. Witmer (1985), "A note on parameter-effects curvature." *Journal of the American Statistical Association*, 80(392), 872-878.
- Currie, D. (1982), "Estimating Michaelis-Menten parameters: Bias, variance, and experimental design." *Biometrics*, 38(4), 907-919.
- DiCiccio, T. J. (1984), "On parameter transformations and interval estimation." *Biometrika*, 71(3), 477-485.
- Donaldson, Janet R., and Robert B. Schnabel (1987), "Computational experiences with confidence regions and confidence intervals for nonlinear least squares." *Technometrics*, 29(1), 67-82.
- Gallant, A. R. (1975), "The power of the likelihood ratio test of location in nonlinear regression models." *Journal of the American Statistical Association*, 70(349), 198-203.
- Gallant, A. R. (1975), "Testing a subset of the parameters of a nonlinear regression model." *Journal of the American Statistical Association*, 70(352), 927-932.
- Gallant, A. R. (1977), "Testing a nonlinear regression specification: a nonregular case."

- Journal of the American Statistical Association*, 72(359), 523–529.
- Guttman, I., and D. A. Meeter (1965), "On Beale's measure of nonlinearity." *Technometrics*, 7, 623–637.
- Halperin, M. (1963), "Confidence interval estimation in nonlinear regression." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 25, 330–333.
- Hamilton, D. (1986), "Confidence regions for parameter subsets in nonlinear regression." *Biometrika*, 73(1), 57–64.
- Hamilton, D. C., D. G. Watts, and D. M. Bates (1982), "Accounting for intrinsic nonlinearity in nonlinear regression parameter inference regions." *Annals of Statistics*, 10(2), 386–393.
- Hartley, H. O. (1964), "Exact confidence regions for the parameters in nonlinear regression laws." *Biometrika*, 51, 347–353.
- Hougaard, P. (1982), "Parameterizations of non-linear models." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 44(2), 244–252.
- Hougaard, P. (1985), "The appropriateness of the asymptotic distribution in a nonlinear regression model in relation to curvature." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 47(1), 103–114.
- Jennrich, R. I. (1969), "Asymptotic properties of nonlinear least squares estimation." *Annals of Mathematical Statistics*, 40, 633–643.
- Kass, Robert E. (1984), "Canonical parameterizations and zero parameter-effects curvature." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 46, 86–92.
- Katz, D., S. P. Azen, and A. Schumitzky (1981), "Bayesian approach to the analysis of nonlinear models: Implementation and evaluation." *Biometrics*, 37, 137–142.
- Linssen, H. N. (1975), "Nonlinearity measures: A case study." *Statistica Neerlandica*, 29, 93–99.
- Moolgavkar, Suresh H., Edward D. Lustbader, and David J. Venzon (1984), "A geometric approach to nonlinear regression diagnostics with application to matched case-control studies." *Annals of Statistics*, 12(3), 816–826.
- Peduzzi, P. N., R. J. Hardy, and T. R. Holford (1980), "A stepwise variable selection procedure for nonlinear regression models." *Biometrics*, 36, 511–516. (See also 37, 595–596.)
- Racine-Poon, A. (1985), "A Bayesian approach to nonlinear random effects models." *Biometrics*, 41(4), 1015–1023.
- Ross, G. J. S. (1970), "The efficient use of function minimization in non-linear maximum-likelihood estimation." *Applied Statistics*, 19, 205–221.
- Ross, G. J. S. (1978), "Exact and approximate confidence regions for functions of parameters in non-linear models," in L. Corstein, and J. Hermans, Eds., *COMPSTAT 78, Third Symposium on Computation*. Vienna: Physica-Verlag.
- Schwellick, Hubert, and Volker Tiller (1985), "Numerical methods for estimating parameters in nonlinear models with errors in the variables." *Technometrics*, 27(1), 17–24.
- Wilks, S. S., and J. F. Daly (1939), "An optimum property of confidence regions associated with the likelihood function." *Annals of Mathematical Statistics*, 10, 225–239.
- Williams, E. J. (1962), "Exact fiducial limits in nonlinear estimation." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 24, 125–139.
- Wolter, K. M., and W. A. Fuller (1982), "Estimation of nonlinear errors-in-variables models." *Annals of Statistics*, 10(2), 539–548.
- Wu, C. F. (1981), "Asymptotic theory of nonlinear least squares estimation." *Annals of Statistics*, 9, 501–513.

NONLINEAR LEAST SQUARES — COMPUTING

- Barham, R. H., and W. Drane (1972), "An algorithm for least squares estimation of non-linear parameters when some of the parameters are linear." *Technometrics*, 14, 757-766.
- Bates, Douglas M., and Mary J. Lindstrom (1986), "Nonlinear least squares with conditionally linear parameters," in *Proceedings of the Statistical Computing Section*. New York: American Statistical Association.
- Bates, D. M., and D. G. Watts (1981), "A relative offset orthogonality convergence criterion for nonlinear least squares." *Technometrics*, 23(2), 179-183.
- Chambers, J. M. (1973), "Fitting nonlinear models: Numerical techniques." *Biometrika*, 60, 1-13.
- Dennis Jr., J. E., D. M. Gay, and R. E. Wetsch (1981), "An adaptive nonlinear least-squares algorithm." *ACM Transactions on Mathematical Software*, 7, 348-368.
- Golub, G. H., and V. Pereyra (1973), "The differentiation of pseudo-inverses and nonlinear least squares problems whose variables separate." *J. SIAM*, 10, 413-432.
- Guttman, I., V. Pereyra, and H. D. Scolnik (1973), "Least squares estimation for a class of non-linear models." *Technometrics*, 15(2), 209-218.
- Hartley, H. O. (1961), "The modified Gauss-Newton method for the fitting of non-linear regression functions by least squares." *Technometrics*, 3, 269-280.
- Harville, D. A. (1973), "Fitting partially linear models by weighted least squares." *Technometrics*, 15(3), 509-515.
- Hiebert, K. L. (1981), "An evaluation of mathematical software that solves the nonlinear least squares problem." *ACM Transactions on Mathematical Software*, 7(1), 1-16.
- Jennrich, R. I., and P. B. Bright (1976), "Fitting systems of linear differential equations using computer generated exact derivatives (with discussion)." *Technometrics*, 18(4), 385-399.
- Jennrich, R. I., and P. F. Sampson (1968), "An application of stepwise regression to non-linear estimation." *Technometrics*, 10(1), 63-72.
- Lawton, W. H., and E. A. Sylvestre (1971), "Elimination of linear parameters in non-linear regression." *Technometrics*, 13, 461-467.
- Levenberg, K. (1944), "A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares." *Quarterly of Applied Mathematics*, 2, 164-168.
- Marquardt, D. W. (1963), "An algorithm for the estimation of non-linear parameters." *J. SIAM*, 11, 431-441.
- Marquardt, D. W. (1970), "Generalized inverses, ridge regression, biased linear estimation, and nonlinear estimation." *Technometrics*, 12, 591.
- Meyer, R. R., and P. M. Roth (1972), "Modified damped least squares." *Journal of the Institute of Mathematics and Its Applications*, 9, 218.
- Pedersen, P. V. (1977), "Curve fitting and modeling in pharmacokinetics and some practical experiences with NONLIN and a new program FUNFIT." *Journal of Pharmacokinetics and Biopharmaceutics*, 5, 513.
- Pedersen, P. V. (1978), "Curve fitting and modeling in pharmacokinetics: A reply from the author." *Journal of Pharmacokinetics and Biopharmaceutics*, 6, 447.
- Peduzzi, P. N., R. J. Hardy, and T. R. Holford (1980), "A stepwise variable selection procedure for nonlinear regression models." *Biometrics*, 36, 511-516. (See also 37, 595-596.)
- Ralston, M. L., and R. I. Jennrich (1978), "DUD, a derivative-free algorithm for nonlinear least squares." *Technometrics*, 20, 7-14.

SELF-MODELING

- Armstrong, P. W., D. G. Watts, D. C. Hamilton, M. A. Chiong, and J. O. Parker (1979), "Quantification of myocardial infarction: Template model for serial creatine kinase analysis." *Circulation*, 60(4), 856-865.
- Graham, B. V. (1976), "Wavelength discrimination derived from color naming." *Vision Research*, 16, 559-562.
- Guardabasso, V., P. J. Munson, and D. Rodbard (1988), "A versatile method for simultaneous analysis of families of curves." *FASEB Journal*, 2, 209-215.
- Guardabasso, V., D. Rodbard, and P. J. Munson (1987), "A model-free approach to estimation of relative potency in dose-response curve analysis." *American Journal of Physiology*, 252, E357-E364.
- Lawton, W. H., E. A. Sylvestre, and M. S. Maggio (1972), "Self modeling nonlinear regression." *Technometrics*, 14(3), 513-532.
- Levine, H. D., A. L. Rosen, R. DeWoskin, and G. S. Moss (1977), "Application of self-modeling nonlinear regression to ventricular pressure data." *Computers in Biomedical Research*, 10, 363-372.
- Reeves, R. L., R. S. Kain, M. S. Maggio, E. A. Sylvestre, and W. H. Lawton (1973), "Analysis of the visual spectrum of methyl orange in solvents and in hydrophobic binding sites." *Canadian Journal of Chemistry*, 96, 628-635.
- Reeves, R. L., M. S. Maggio, and L. F. Costa (1974), "Importance of solvent cohesion and structure in solvent effects on binding site probes." *Journal of the American Chemical Society*, 96, 5971-5925.

SPECIAL MODEL FORMS

- Allen, D. M. (1983), "Parameter estimation for nonlinear models with emphasis on compartmental models." *Biometrics*, 39(3), 629-637.
- Bates, Douglas M., Dennis A. Wolf, and Donald G. Watts (1985), "Nonlinear least squares and first-order kinetics," in David Allen, Ed., *Proceedings of Computer Science and Statistics: Seventeenth Symposium on the Interface*. New York: North-Holland.
- Bliss, C. I., and A. T. James (1966), "Fitting the rectangular hyperbola." *Biometrics*, 22, 573-602.
- Currie, D. (1982), "Estimating Michaelis-Menten parameters: Bias, variance, and experimental design." *Biometrics*, 38(4), 907-919.
- Jennrich, R. I., and P. B. Bright (1976), "Fitting systems of linear differential equations using computer generated exact derivatives (with discussion)." *Technometrics*, 18(4), 385-399.
- Kittrell, J. R. (1970), "Mathematical modelling of chemical reactions." *Advances in Chemical Engineering*, 8, 97-183.
- Kittrell, J. R., W. G. Hunter, and C. C. Watson (1965), "Nonlinear least squares analysis of catalytic rate models." *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 11, 1051-1057.
- Mezaki, R., N. R. Draper, and R. A. Johnson (1973), "On the violation of assumptions in nonlinear least squares by interchange of response and predictor variables." *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 12, 251-254.
- Mezaki, R., and J. R. Kittrell (1968), "Nonlinear least squares for model screening." *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 14, 513.
- Peterson, T. I., and L. Lapidus (1966), "Nonlinear estimation analysis of the kinetics of

- catalytic ethanol dehydrogenation." *Chemical Engineering Science*, **21**, 655-664.
- Reilly, P. M., and H. Patino-Leal (1981), "A Bayesian study of the errors-in-variables model." *Technometrics*, **23**, 221-231.

MULTIRESPONSE MODELS

- Bates, D. M., and D. G. Watts (1984), "A multi-response Gauss-Newton algorithm." *Communications in Statistics—Simulation and Computation*, **13**(5), 705-715.
- Bates, Douglas M., and Donald G. Watts (1985), "Multiresponse estimation with special application to systems of linear differential equations (with discussion)." *Technometrics*, **27**(4), 329-360.
- Bates, Douglas M., and Donald G. Watts (1987), "A generalized Gauss-Newton procedure for multi-response parameter estimation." *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing*, **7**(1), 49-55.
- Box, G. E. P., and N. R. Draper (1965), "The Bayesian estimation of common parameters from several responses." *Biometrika*, **52**, 355-365.
- Box, G. E. P., W. G. Hunter, J. F. MacGregor, and J. Erjavec (1973), "Some problems associated with the analysis of multiresponse models." *Technometrics*, **15**(1), 33-51.
- Box, M. J., and N. R. Draper (1972), "Estimation and design criteria for multiresponse nonlinear models with non-homogeneous variance." *Applied Statistics*, **21**, 13-24.
- Box, M. J., N. R. Draper, and W. G. Hunter (1970), "Missing values in multi-response nonlinear data fitting." *Technometrics*, **12**, 613-620.
- Draper, N. R., H. Kanemasu, and R. Mezaki (1969), "Estimating rate constants." *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **8**, 423-427.
- Hunter, W. G. (1967), "Estimation of unknown constants from multi-response data." *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **8**, 423-427.
- McLean, D. D., D. J. Pritchard, D. W. Bacon, and J. Downie (1979), "Singularities in multiresponse modelling." *Technometrics*, **21**(3), 291-298.
- Mezaki, R., and J. B. Butt (1968), "Estimation of rate constants from multiresponse kinetic data." *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **7**, 120-125.
- Stewart, W. E., and J. P. Sorensen (1981), "Bayesian estimation of common parameters from multiresponse data with missing observations." *Technometrics*, **23**, 131-141.
- Ziegel, E. R., and J. W. Gorman (1980), "Kinetic modelling with multiresponse data." *Technometrics*, **22**(2), 139-151.

EXPERIMENTAL DESIGN—PRECISE PARAMETER ESTIMATION

- Atkinson, A. C., and W. G. Hunter (1968), "The design of experiments for parameter estimation." *Technometrics*, **10**(2), 271-289.
- Bates, Douglas M. (1983), "The derivative of $|X'X|$ and its uses." *Technometrics*, **25**(4), 373-376.
- Box, George E. P. (1984), "The importance of practice in the development of statistics." *Technometrics*, **26**(1), 1-8.
- Box, G. E. P., and H. L. Lucas (1959), "Design of experiments in non-linear situations." *Biometrika*, **46**, 77-90.
- Box, M. J. (1968), "The occurrence of replications in optimal designs of experiments to estimate parameters in nonlinear models." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, **30**, 290-302.

- Box, M. J. (1968), "The use of designed experiments in nonlinear model building," in Donald G. Watts, Ed., *The Future of Statistics*. New York: Academic Press, pp. 241-257.
- Box, M. J. (1970), "Some experiences with a nonlinear experimental design criterion." *Technometrics*, 12(3), 569-589.
- Box, M. J. (1971), "An experimental design criterion for precise parameter estimation of a subset of the parameters in a nonlinear model." *Biometrika*, 58, 149-153.
- Box, M. J. (1971), "Simplified experimental design." *Technometrics*, 13(1), 19-31.
- Box, M. J., and N. R. Draper (1971), "Factorial designs, the IX'XI criterion, and some related matters." *Technometrics*, 13, 731-742.
- Chernoff, H. (1953), "Locally optimal designs in estimating parameters." *Annals of Mathematical Statistics*, 24, 586-602.
- Cochran, W. G. (1973), "Experiments for nonlinear functions." *Journal of the American Statistical Association*, 68, 771-778.
- Cox, D. R. (1984), "Design of experiments and regression." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. A*, 147(2), 306-315.
- Currie, D. (1982), "Estimating Michaelis-Menten parameters: Bias, variance, and experimental design." *Biometrics*, 38(4), 907-919.
- Draper, N. R., and W. G. Hunter (1967), "The use of prior distributions in the design of experiments for parameter estimation in nonlinear estimation." *Biometrika*, 54, 147-153.
- Evans, J. W. (1979), "Computer augmentation of experimental designs to maximize IX'XI." *Technometrics*, 21(3), 321-330.
- Graham, R. J., and F. D. Stevenson (1972), "Kinetics of chlorination of niobium oxychloride by phosgene in a tube flow reactor. Application of sequential experimental design." *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 11, 160-164.
- Hahn, Gerald J. (1984), "Experimental design in the complex world." *Technometrics*, 26(1), 19-31.
- Hamilton, David C., and Donald G. Watts (1985), "A quadratic design criterion for precise estimation in nonlinear regression models." *Technometrics*, 27(3), 241-250.
- Herzberg, A. M., and D. R. Cox (1969), "Recent work on the design of experiments: A bibliography and a review." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 31, 29-67.
- Hill, P. D. H. (1980), "D-optimal designs for partially nonlinear regression models." *Technometrics*, 22(2), 275-276.
- Hill, W. J., and W. G. Hunter (1974), "Design of experiments for subsets of the parameters." *Technometrics*, 16, 425-434.
- Hill, W. J., W. G. Hunter, and D. W. Wichern (1968), "A joint design criterion for the dual problem of model discrimination and parameter estimation." *Technometrics*, 10, 145-160.
- Hunter, W. G., and A. C. Atkinson (1966), "Statistical designs for pilot plant and laboratory experiments." *Chemical Engineering*, 73, 159-164.
- Hunter, W. G., W. J. Hill, and T. L. Henson (1969), "Designing experiments for precise estimation of all or some of the constants in a mechanistic model." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 47, 76-80.
- Hunter, W. G., J. R. Kirtrell, and R. Mezaki (1967), "Experimental strategies for mechanistic models." *Transactions of the Institute of Chemical Engineers*, 45, T146-T152.
- Juusola, J. A., D. W. Bacon, and J. Downie (1972), "Sequential statistical design strategy in an experimental kinetic study." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 50,

796-801.

- Katz, D., and D. Z. D'Argenio (1983), "Experimental design for estimating integrals by numerical quadrature." *Biometrics*, 39(3), 621-628.
- Khuri, A. I. (1984), "A note on D-optimal designs for partially nonlinear regression models." *Technometrics*, 26(1), 59-61.
- Kittrell, J. R., W. G. Hunter, and C. C. Watson (1966), "Obtaining precise parameter estimates for nonlinear catalytic rates." *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 12, 5-10.
- Pritchard, D. J., and D. W. Bacon (1977), "Accounting for heteroscedasticity in experimental design." *Technometrics*, 19(2), 109-115.
- Reilly, P. M., R. Bajramovic, G. E. Blau, D. R. Branson, and M. W. Sauerhoff (1977), "Guidelines for the optimal design of experiments to estimate parameters in first order kinetic models." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 55, 614-622.
- St. John, R. C., and N. R. Draper (1975), "D-optimality for regression designs: a review." *Technometrics*, 17, 15-23.
- Steinberg, David M., and William G. Hunter (1984), "Experimental design: Review and comment (with discussion)." *Technometrics*, 26(2), 71-130.

EXPERIMENTAL DESIGN—MODEL DISCRIMINATION

- Atkinson, A. C. (1981), "A comparison of two criteria for the design of experiments for discriminating between models." *Technometrics*, 23, 301-305.
- Atkinson, A. C., and D. R. Cox (1974), "Planning experiments for discriminating between models (with discussion)." *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 36, 321-348.
- Atkinson, A. C., and V. V. Fedorov (1975), "The design of experiments for discriminating between two rival models." *Biometrika*, 62(1), 57-70.
- Atkinson, A. C., and V. V. Fedorov (1975), "Optimal design: Experiments for discriminating between several models." *Biometrika*, 62(2), 289-304.
- Box, G. E. P., and W. J. Hill (1967), "Discrimination among mechanistic models." *Technometrics*, 9(1), 57-71.
- Froment, G. F., and R. Mezaki (1970), "Sequential discrimination and estimation procedures for rate modeling in heterogeneous catalysis." *Chemical Engineering Science*, 25, 293-301.
- Hill, P. D. H. (1978), "A review of experimental design procedures for regression model discrimination." *Technometrics*, 20(1), 15-21.
- Hill, W. J., and W. G. Hunter (1969), "A note on designs for model discrimination: Variance unknown case." *Technometrics*, 11, 396-400.
- Hill, W. J., W. G. Hunter, and D. W. Wichern (1968), "A joint design criterion for the dual problem of model discrimination and parameter estimation." *Technometrics*, 10, 145-160.
- Hunter, W. G., and A. M. Reiner (1965), "Designs for discriminating between two rival models." *Technometrics*, 7, 307-323.
- Kittrell, J. R., and R. Mezaki (1967), "Discrimination among rival Hougen-Watson models through intrinsic parameters." *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 13(2), 389-392.
- Moeter, D., W. Pirie, and W. Blot (1970), "A comparison of two model discrimination criteria." *Technometrics*, 12, 457-470.
- Pritchard, D. J., and D. W. Bacon (1974), "Potential pitfalls in model discrimination." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 52, 103-109.

- Reilly, P. M. (1970), "Statistical methods in model discrimination." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 48, 168–173.

EXPERIMENTAL DESIGN—MULTIRESPONSE MODELS

- Box, M. J., and N. R. Draper (1972), "Estimation and design criteria for multiresponse nonlinear models with non-homogeneous variance." *Applied Statistics*, 21, 13–24.
- Draper, N. R., and W. G. Hunter (1966), "Design of experiments for parameter estimation in multiresponse situations." *Biometrika*, 53, 525–553.
- Draper, N. R., and W. G. Hunter (1967), "The use of prior distributions in the design of experiments for parameter estimation in nonlinear situations: Multi-response case." *Biometrika*, 54, 662–665.

HETEROSCEDASTICITY

- Box, G. E. P., and W. J. Hill (1974), "Correcting inhomogeneity of variance with power transformation weighting." *Technometrics*, 16, 385–389.
- Box, M. J., and N. R. Draper (1972), "Estimation and design criteria for multiresponse nonlinear models with non-homogeneous variance." *Applied Statistics*, 21, 13–24.
- Carroll, Raymond J., and David Ruppert (1984), "Power transformation when fitting theoretical models to data." *Journal of the American Statistical Association*, 79(386), 321–328.
- Pritchard, D. J., and D. W. Bacon (1977), "Accounting for heteroscedasticity in experimental design." *Technometrics*, 19(2), 109–115.
- Pritchard, D. J., J. Downie, and D. W. Bacon (1977), "Further considerations of heteroscedasticity in fitting kinetic models." *Technometrics*, 19(3), 227–236.

DIAGNOSTIC PARAMETERS

- Box, G. E. P., and W. G. Hunter (1962), "A useful method of model building." *Technometrics*, 4, 301–318.
- Hunter, W. G., and R. Mezaki (1964), "A model building technique for chemical engineering kinetics." *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 10, 315–322.
- Kittrell, J. R., W. G. Hunter, and R. Mezaki (1966), "The use of diagnostic parameters for kinetic model building." *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 12(5), 1014–1017.

APPLICATIONS

- Bacon, D. W. (1970), "Making the most of a one-shot experiment." *Industrial and Engineering Chemistry*, 62(7), 27–34.
- Behnken, D. W. (1964), "Estimation of copolymer reactivity ratios: an example of non-linear estimation." *Journal of Polymer Science Part A*, 2, 645–668.
- Bliss, C. I., and A. T. James (1966), "Fitting the rectangular hyperbola." *Biometrics*, 22, 573–602.
- Boag, I. F., D. W. Bacon, and J. Downie (1975), "Analysis of the reaction network for the vanadium-catalyzed oxidation of ortho-xylene." *Journal of Catalysis*, 38, 375–384.

- Currie, D. (1982), "Estimating Michaelis-Menten parameters: Bias, variance, and experimental design." *Biometrics*, **38**(4), 907-919.
- Draper, N. R., H. Kanemasu, and R. Mezaki (1969), "Estimating rate constants." *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **8**, 423-427.
- Fisher, R. A. (1939), "The sampling distribution of some statistics obtained from nonlinear equations." *Annals of Eugenics*, **9**, 238-249.
- Froment, G. F., and R. Mezaki (1970), "Sequential discrimination and estimation procedures for rate modeling in heterogeneous catalysis." *Chemical Engineering Science*, **25**, 293-301.
- Gallant, A. R., and A. Holly (1980), "Statistical inference in an implicit, nonlinear, simultaneous equation model in the context of maximum likelihood estimation." *Econometrica*, **48**, 697-720.
- Graham, R. J., and F. D. Stevenson (1972), "Kinetics of chlorination of niobium oxychloride by phosgene in a tube flow reactor. Application of sequential experimental design." *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, **11**, 160-164.
- Hoffman, T., and P. M. Reilly (1979), "Transferring information from one experiment to another." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, **57**, 367-374.
- Hsiang, T., and P. M. Reilly (1971), "A practical method of discriminating among mechanistic models." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, **49**, 865-871.
- Hunter, W. G. (1967), "Estimation of unknown constants from multi-response data." *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **8**, 423-427.
- Hunter, W. G., and A. C. Atkinson (1966), "Statistical designs for pilot plant and laboratory experiments." *Chemical Engineering*, **73**, 159-164.
- Hunter, W. G., W. J. Hill, and T. L. Henson (1969), "Designing experiments for precise estimation of all or some of the constants in a mechanistic model." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, **47**, 76-80.
- Hunter, W. G., J. R. Kittrell, and R. Mezaki (1967), "Experimental strategies for mechanistic models." *Transactions of the Institute of Chemical Engineers*, **45**, T146-T152.
- Hunter, W. G., and R. Mezaki (1964), "A model building technique for chemical engineering kinetics." *American Institute of Chemical Engineers Journal*, **10**, 315-322.
- Johnson, R. A., N. A. Standal, and R. Mezaki (1968), "Weighted linear plots for discrimination of nonlinear rate models." *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **7**, 181.
- Juusola, J. A., D. W. Bacon, and J. Downie (1972), "Sequential statistical design strategy in an experimental kinetic study." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, **50**, 796-801.
- Kittrell, J. R. (1970), "Mathematical modelling of chemical reactions." *Advances in Chemical Engineering*, **8**, 97-183.
- Kittrell, J. R., W. G. Hunter, and R. Mezaki (1966), "The use of diagnostic parameters for kinetic model building." *American Institute of Chemical Engineers Journal*, **12**(5), 1014-1017.
- Kittrell, J. R., W. G. Hunter, and C. C. Watson (1965), "Nonlinear least squares analysis of catalytic rate models." *American Institute of Chemical Engineers Journal*, **11**, 1051-1057.
- Kittrell, J. R., W. G. Hunter, and C. C. Watson (1966), "Obtaining precise parameter estimates for nonlinear catalytic rates." *American Institute of Chemical Engineers Journal*, **12**, 5-10.
- Kittrell, J. R., and R. Mezaki (1967), "Discrimination among rival Hougen-Watson models through intrinsic parameters." *American Institute of Chemical Engineers*

- Journal*, 13(2), 389–392.
- Kittrell, J. R., R. Mezaki, and C. C. Watson (1965), "Estimation of parameters for nonlinear least squares analysis." *Industrial and Engineering Chemistry*, 57(12), 18–27.
- Kittrell, J. R., R. Mezaki, and C. C. Watson (1966), "Precise determination of reaction orders." *Industrial and Engineering Chemistry*, 58(5), 50–59.
- Kittrell, J. R., R. Mezaki, and C. C. Watson (1966), "Model-building techniques for heterogeneous kinetics." *British Chemical Engineering*, 11(1), 15–19.
- McLean, D. D., D. W. Bacon, and J. Downie (1980), "Statistical identification of a reaction network using an integral plug flow reactor." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 58, 608–619.
- Mezaki, R., and J. B. Butt (1968), "Estimation of rate constants from multiresponse kinetic data." *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 7, 120–125.
- Mezaki, R., N. R. Draper, and R. A. Johnson (1973), "On the violation of assumptions in nonlinear least squares by interchange of response and predictor variables." *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 12, 251–254.
- Mezaki, R., and J. R. Kittrell (1966), "Discrimination between rival models through nonintrinsic parameters." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 44, 285.
- Mezaki, R., and J. R. Kittrell (1967), "Parametric sensitivity in fitting nonlinear kinetic models." *Industrial and Engineering Chemistry*, 59(5), 63–69.
- Mezaki, R., and J. R. Kittrell (1968), "Nonlinear least squares for model screening." *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 14, 513.
- Mezaki, R., J. R. Kittrell, and W. J. Hill (1967), "An analysis of kinetic power function models." *Industrial and Engineering Chemistry*, 59(1), 93–95.
- Peterson, T. I., and L. Lapidus (1966), "Nonlinear estimation analysis of the kinetics of catalytic ethanol dehydrogenation." *Chemical Engineering Science*, 21, 655–664.
- Podolski, W. F., and Y. G. Kim (1974), "Modelling the water-gas shift reaction." *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 13, 415–421.
- Pritchard, D. J., and D. W. Bacon (1974), "Potential pitfalls in model discrimination." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 52, 103–109.
- Pritchard, D. J., and D. W. Bacon (1975), "Statistical assessment of chemical kinetic models." *Chemical Engineering Science*, 30, 567–574.
- Pritchard, D. J., D. D. McLean, D. W. Bacon, and J. Downie (1980), "Testing the assumption of surface homogeneity in modelling catalytic reactions." *Journal of Catalysis*, 61, 430–434.
- Reilly, P. M. (1970), "Statistical methods in model discrimination." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 48, 168–173.
- Reilly, P. M., R. Bajramovic, G. E. Blau, D. R. Branson, and M. W. Sauerhoff (1977), "Guidelines for the optimal design of experiments to estimate parameters in first order kinetic models." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 55, 614–622.
- Reilly, P. M., and G. E. Blau (1974), "The use of statistical methods to build mathematical models of chemical reacting systems." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 52, 289–299.
- Sutton, T. L., and J. F. MacGregor (1977), "The analysis and design of vapour-liquid equilibrium experiments." *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 55, 602–608.

فهرست موضوعی

۳۲۵،۲۳۵،۲۲۶،۲۲۳	اثرهای نیرخی
۱۶۵،۱۳۰،۱۲۹،۱۲۷،۱۰۱	ارزیابی برازش
۱۱	استنباط بیزی
۳۲۱،۱۵۴	استنباط دربرآورد چند پاسخی
۱۱	استنباط درست‌نمایی
۱۰	استنباط نظریه نمونه‌گیری
۳۵۳،۳۵۲،۳۵۱	الگوهای به کاررفته در مجموعه داده‌ها
۱۱۶	الگوهای تودرتو
۲۰۷،۲۰۴،۲۰۳،۲۰۲،۱۹۱،۱۸۷	الگوهای حجره‌ای
۱۲۱	الگوهای ناتودرتو
۱۵۰	الگوی چند پاسخی
۴۱	الگوی خطی شدن
۱۴۳	الگوی خطی شرطی
۵	الگوی رگرسیون خطی
۳۹	الگوی رگرسیون غیرخطی
۱۲۶	انتخاب الگو
۲۸۰،۲۷۸،۲۶۹،۲۶۸،۲۶۴،۲۵۵	انحنای غیرخطی
۳۲۰	باقی‌مانده‌های استیودنتایز
۱۰۴	باقی‌مانده‌های وابسته
۴۶،۱۷،۸	برآوردهای حداقل مربعات
۲۵۶	بردار سرعت
۲۶۳،۲۵۸،۲۵۶	بردار شتاب

- پارامترها تابعی از سایر متغیرها ۱۲۱
- پارامترهای خطی شرطی ۹۷,۸۸,۴۳
- پارامترهای مقید ۸۸
- پارامترهای نموی ۱۱۷
- پایاکردن واریانس ۳۴
- پنکه‌ای ۲۷۱
- پیچش ۳۳۷
- پیرایش الگو ۱۲۸,۱۰۱
- پیشی گرفتن ۷۳
- تابع پیشین بیزی ۲۳۶
- تابع خودهستگی ۱۰۷
- تبدیل پاکس - کاکس ۳۵
- تبدیل پارامترها ۱۹۸,۸۸
- تبدیل هوس هولدر ۳۰۷
- تجزیه QR ۳۰۷,۱۸
- ترکیبات خطی پاسخ‌ها ۱۷۴
- تعدیل لونبرگ - مارکوارت ۹۲
- تقریب خطی ۷۴,۷۰
- جمله خطا ۸۰
- حل معادلات دیفرانسیل خطی ۳۲۳,۱۹۲
- داده‌های بکاررفته در مثال‌ها ۲۹۱ تا ۳۲۸,۳۰۶ تا ۳۳۶
- داده‌های تجمعی ۱۰۹
- داده‌های مفقود ۱۸۰
- دستگاه معادلات دیفرانسیل غیرخطی ۱۸۷,۱۶۳,۷۹
- دستگاه نموداری ۱۸۷
- رسم باقی‌مانده‌ها ۳۳
- رسم نیم‌رخ ۲۳۵,۲۲۳

- روش گوس - نیوتن ۵۰،۴۹،۴۷
- روش گوس - نیوتن تعمیم یافته ۱۵۷
- روش نیوتن - رافسون ۹۱
- روشهای مشتق - آزاد ۹۴
- رویه انتظار - صفحه انتظار ۸۴،۸۳،۷۸،۳۰،۱۴
- زمان مرده ۱۹۴
- شیب و هسیان دترمینان ۱۵۷
- طرح آزمایش ها ۱۳۵
- طرح بهینه D ۱۳۷
- طرح های آغازین ۱۳۸
- طرح های دنباله ای ۱۴۱
- طرح های زوج نیمرخی ۳۴۵،۳۲۶،۲۳۵،۲۲۹،۲۲۳
- طرح های زیرمجموعه ای ۱۴۲
- عامل مرحله ای ۹۶،۴۹
- فاصله اطمینان حاشیه ای ۲۵
- قوسی ۲۷۱
- کاربرد تقریب خطی در استنباط رگرسیون غیرخطی ۶۱
- کاهش ابعاد ۸۷
- کمترین مربعات غیرخطی ۳۱۱
- کمترین مربعات غیرخطی از طریق مجموع مربعات ۷۰
- متغیرهای نشانگر ۱۱۷
- مشتق تابع انتظار ۱۹۷
- معیار دترمینانی ۱۵۳،۱۳۷
- معیار همگرایی چند پاسخی ۱۶۱
- مقادیر آغازین ۲۱۳،۲۰۹،۲۰۱،۱۶۳،۱۶۲،۱۲۷،۸۳
- مقادیر ویژه موهومی ۳۴۱
- مقایسه الگوها ۱۷۹،۱۳۴،۱۱۶

- ۱۵۵ ملاحظه ابعادی در برآورد چند پاسخی
- ۳۶ نابرازشی
- ۲۵۰،۲۴۴ ناحیه اطمینان نظریه نمونه گیری
- ۳۳۷ نما ماتریسی
- ۶۱ نواحی استنباط تقریبی برای پارامترها
- ۲۵۰،۲۳۶ نواحی بیزی
- ۲۵۰،۲۴۰ HPD نواحی توأم
- ۲۵۰،۲۲۰ نواحی درست نمایی
- ۶۷ نوار استنباط تقریبی برای پاسخ مورد انتظار
- ۱۷۱ وابستگی میان پاسخها
- ۱۵۹ هسیان تقریبی
- ۹۸،۹۰،۵۶ همگرایی
- ۵۰ هندسه کمترین مربعات غیرخطی
- ۴۳ هندسه رویه انتظار
- ۱۴ هندسه کمترین مربعات خطی
- ۲۹ هندسه نتایج حداکثر درست نمایی
- ۲۱ هندسه نتایج نظریه نمونه گیری

واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

Accumulated data	داده‌های تجمعی
Approximate inference regions	نواحی استنباط تقریبی
Arcing terms	جمله‌های قوسی
Assessing the fit	ارزیابی برازش
Autocorrelation	خودهمبستگی
Bayesian approach	شیوهٔ بیزی
Bias	اریب
Box - Cox transformation	تبدیل باکس - کاکس
Calibration	جایابی
Catenary system	دستگاه زنجیره‌ای
Centring	مرکزی کردن
Compansion terms	جمله‌های مقایسه‌ای
Compartment models	الگوهای حجره‌ای
Competing models	الگوهای رقیب
Compromise	تعدیل
Conditionally linear parameters	پارامترهای خطی شرطی
Confidence bond	نوار اطمینان
Constant variance	واریانس پایا
Constrained parameters	پارامترهای مقید
Contour	منحنی تراز، منحنی میزان
Convergence	همگرایی

Convolution	پیچش
Correctly coded	درست کدگذاری شدن
Correctly specified	درست تعریف شدن
Curvature	انحناء
D - optimal designs	طرح بهینه D (دترمینانی)
Defective data	داده‌های ناقص
Derivative - Free methods	روشهای مشتق آزاد
Derivative matrix	ماتریس مشتق، ماتریس مشاهدات
Derivative vector	بردار مشتق
Determinant criterion	معیار دترمینانی
Deterministic	قطعی
Diagonalizable	قطری شدنی
Dilution design	طرح رقیق سازی
Disturbance	اخلال
Eigenvalue	مقدار ویژه
Eigenvector	بردار ویژه
Elliptical	بیضی وار
Ellipse	بیضی
Ellipsoid	بیضیگون
Error - prone stage	مرحله خطا آمیز
Estimate	برآورد کردن
Estimator	برآوردگر
Expectation surface	رویه انتظار
Exponential difference model	الگوی تفاضلی نمایی
Extra parameters	پارامترهای اضافی
Extrapolated - cumulative total	تجمعی کل - برون یابی
Facilitating convergence	تسهیل در همگرایی

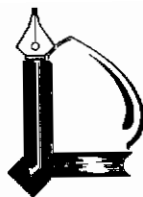
Factor parameter	پارامتر شکل
Factorial desings	طرح‌های عاملی
Fanning terms	جمله‌های پنکه‌ای (مخروطی)
Finite difference	تفاضلات متناهی
Fractional factorial desings	طرح‌های عاملی کسری
Gauss - Newton method	روش گوس - نیوتن
Gauss increment	نمؤگوسی
Globally identifiable	شناخت‌پذیر کلی
Half - Velocity parameter	پارامتر نیمه سرعت
Hessian	هسیان
Highest posterior density (HPD)	چگالی پسین اعلی
ill - Conditioning	غیر شرطی
Improper	غیر واقعی
Indicator variables	متغیرهای نشانگر
Inference	استنباط
Inference region	ناحیه استنباط
Initial	آغازین، اولیه
Intrinsic nonlinear models	الگوهای خطی ذاتی
Intrinsic nonlinearity	غیرخطی ذاتی
Isomerization	هم ترکیبی
Joint confidence region	ناحیه اطمینان توأم
Least square estimator	برآوردگر حداقل مربعات
Levenberg - Marquardt compromise	تعدیل لونبرگ - مارکوارت
Likelihood ratio test	آزمون نسبت درست‌نمایی
Linear regression	رگرسیون خطی
Locally identifiable	شناخت‌پذیر موضعی
Location parameter	پارامتر موقعیت

Lack of fit	ناپرازشی
Logistic model	الگوی لجستیک
Lurking factor	عامل پنهانی
Mamillary system	دستگاه مادری (شعاعی)
Maximum likelihood estimator	برآوردگر حداکثر درست‌نمایی
Mapping	نگاشت
Marginal confidence region	فاصله اطمینان حاشیه‌ای
Marginal posterior density	چگالی پسین حاشیه‌ای
Matrix exponential	نما ماتریسی
Mechanistic model	الگوی مکانیکی
Mechanistic model	الگوی مکانیکی
Michealis - Menten model	الگوی میشلیز - منتن
Model specification	شناخت الگو - اختصاص الگو
Moving average	میانگین متحرک
Mutiresponse	چند پاسخی
Nested models	الگوهای تودرتو
Non - nested models	الگوهای ناتودرتو
Noninformative prior density	چگالی پیشین ناآگاهی بخش
Nonlinear programming	برنامه‌ریزی غیرخطی
Nonlinear regression	رگرسیون غیر خطی
Nominal confidence	بازه اسمی
Normal distribution	توزیع نرمال
Normal equations	معادلات نرمال
Normal vector	بردار نرمال یا عمود
Off - infusion stage	مرحله توقف تزریق
Oil shale	روغن‌کشی
On - infusion stage	مرحله انجام تزریق

Orthogonality	متعامد
Outliers	داده‌های پرت
Outoregressive	خودبرگشت
Over parametrization	پارامترهای اضافی
Overparametrization	پارامترهای زیادی
Overshoot	پیشی گرفتن
Overshoot	پیشی گرفتن
Overestimate	برآورد اضافی
Pairwise plots	رسم‌های زوجی
Parallelepiped	متوازی السطوح
Parallelogram	متوازی الاضلاع
Parameter effects nonlinearity	اثرات غیرخطی پارامتر
Peeling	خلالی کردن
Pivoted QR decomposition	تجزیه QR محوری
Planar	هم صفحه بودن، مسطح بودن
Posterior profile trace	اثر نیمرخی پسین
Power parameter	پارامتر توان
Predictor	پیشگو، متغیر مستقل
Preexponential	پیش‌نمایی
Profile pair sketches	طرح‌های زوج نیمرخی
Profile t analysis	تحلیل نیمرخی ۱
Profile t plots	رسم‌های ۱ نیمرخی
Profile trances	اثرهای نیمرخی
Pseudoinverse	شبه وارون
QR decomposition	تجزیه QR
Qaudratic approximation	تقریب درجه دوم
Quantile	چندک

Quasi - Newton approximation	تقریب شبه - نیوتن
Reasonable parameter value	ناحیه قبول برای مقدار پارامتر
Regular variable	متغیر عادی
Relative curvature	انحنای نسبی
Relative offset convergence criteria	معیار همگرایی تنافر نسبی
Reparametrization	عامل بندی دوباره
Residual sum of squares	مجموع مربعات باقی مانده ها
Response	پاسخ، متغیر وابسته
Robust	تنومند
Runge - Kutta integration routine	زیر برنامه انتگرال گیری رانگ - کوتا
Sampling Theory	نظریه نمونه گیری
Scale parameter	پارامتر مقیاس
Scaling	مقیاس کردن
Scaling matrix	ماتریس مقیاس
Screening tool	ابراز غربالی
Sensitivity functions	توابع حساسیت
Sensitivity function	تابع حساسیت
Sequential designs	طرح های دنباله ای
Sigma - Minus	افزودن - کاستن
Singular	منفرد
Spherical normal	نرمال کروی
Spurious optima	بهینه ساختگی
Standard error	خطای استاندارد
Starting designs	طرح های آغازین
Starting values	مقادیر آغازین
Steepest descent	تندترین کاهش
Step Factor	عامل مرحله ای

Stochastic	غیر قطعی. تصادفی
Studentized residuals	باقی مانده‌های استیودنتایز
Subset designs	طرح‌های زیرمجموعه‌ای
Sulfisoxazole	سولفی سوکسازول
System diagram	دستگاه نموداری
Tangent plane	صفحه مماسی
Temporary variable	متغیرهای اضطراری
Tolerance Level	سطح نوسان
Trace	اثر
Transformably linear models	الگوهای خطی شدن
Transformation curvature array	آرایه انحنای تبدیل
Variance - Stabilizing	پایا کردن واریانس



FERDOWSI UNIVERSITY OF MASHHAD

Publication No. 317

Nonlinear Regression Analysis and Its Applications

Douglas M. Bates - Donald G. Watts

Translated by

H. Rezaee Pazhand - A. Bozorgnia

FERDOWSI UNIVERSITY PRESS

2002