УДК 519.254

ИДЕНТИФИКАЦИЯ И ДИСКРИМИНАЦИЯ S-ОБРАЗНЫХ КРИВЫХ РОСТА

к.т.н. В.Ю. Дубницкий
(представил д.ф.-м.н., проф. С.В. Смеляков)

Изложена процедура оценки параметров кривых, описывающих процессы с насыщением и выбора наилучшего приближения экспериментальных данных одной из них.

Постановка задачи. При описании процессов, для которых характерно явление насыщения, используют S-образные кривые роста [1]:

– кривую Перла-Рида

$$y_1 = \frac{a_0}{1 + a_1 \exp(-a_2 t)}, \quad a_0 > 0;\ a_1 > 0;\ a_2 > 0; \tag{1}$$

– логистическую кривую

$$y_2 = \left(a_3 + a_4 b_1^t\right)^{-1}, \quad 0 < b < 1;\ a_3 > 0;\ a_4 > 0; \tag{2}$$

– кривые Гомперца вида

$$y_3 = a_5 \exp\left(-a_6 e^{-a_7 t}\right), \quad a_5 > 0;\ a_6 > 0 \tag{3}$$

$$\text{или}\ \ y_4 = \exp\left(a_8 b_2^t + a_9\right), \quad 0 < a_8 < 1;\ a_9 > 0; \tag{4}$$

– кривую Джонсона

$$y_5 = \exp\left(a_{10} - \frac{a_{11}}{a_{12} + t}\right); \quad a_{10} > 0;\ a_{11} > 0. \tag{5}$$

Несмотря на внешнюю схожесть, кривые (1) – (5) являются решением различных дифференциальных уравнений [2], что свидетельствует о различной природе процессов, вызвавших их появление.

Целью данной работы является создание вычислительной процедуры, позволяющей оценить по экспериментальным данным численные значения параметров трехпараметрических кривых (1) – (5), (идентифицировать модели); проверить соответствие расчетных значений фактическим данным (проверить адекватность моделей) и, в случае, если адекватными окажутся несколько моделей, то выбрать лучшую из них (дискриминация моделей).

1. Решение задачи идентификации в общем виде. Идентификацию моделей проводят, используя методы нелинейного регрессионного анализа [3, 4]. Предположим, что все условия классического регрессионного анализа выполнены. Тогда примем, что вектор оцениваемых параметров равен $A=(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)$. Оценкой $\hat{A}$ вектора *A* будет такой вектор A, для которого

$$Q(A)=\sum_{k=1}^{\ell}(y_k-f(A;t_k))^2 \tag{6}$$

принимает минимальное значение, т.е.

$$\hat{A}=\arg\inf Q(A), \qquad A\in R^m \tag{7}$$

при условии, что m = 3, k = 1, … , *l* – известные экспериментальные данные.

Решение задачи (6) – (7) выполняли методом Ньютона в варианте, описанном в [4]:

$$A^{(1)}=A^{(0)}+H^{-1}q; \quad \dots \quad A^{(q)}=A^{(q-1)}+H^{-1}q. \tag{8}$$

Правила прекращения процесса вычислений приведены в [4]. В условии (8) принято, что $A^{(0)}$ – вектор начального приближения, q – антиградиент функции (6), равный (– q):

$$q_i=-2\left(Q(A)^{1/2}\right)\frac{\partial f_k}{\partial\alpha_i}, \quad i=1,2,\dots,m;\ k=1,2,\dots,\ell. \tag{9}$$

Условимся, что далее, если это не будет вызывать недоразумений, перечисления для i и k будут опущены.

Пусть H – гессиан функции (6), вычисленный в каждой k-й точке:

$$H_{ij}=2\left(\sum_{k=1}^{1}\frac{\partial f_k}{\partial\alpha_i}\cdot\frac{\partial f_k}{\partial\alpha_j}-\left(Q(A)^{1/2}\right)\frac{\partial^2 f_k}{\partial\alpha_i\cdot\partial\alpha_j}\right); \quad i=\overline{1,m};\ j=\overline{1,m}. \qquad 10)$$

2. Решение задачи идентификации моделей (1) – (5).

Примем, что
$$y_\infty=\lim_{t\to\infty}f(A;t) \tag{11}$$
и
$$y_0=f(A;t)_{t=0}. \tag{12}$$

Тогда, для кривой (1) с учетом (11) и (12) получим систему:

$$\begin{cases} y_\infty=a_0; \\ y_0=a_0/(1+a_1); \\ \ln\left(\left(y^{-1}-1\right)/a_1\right)=-a_2t_k, \end{cases} \tag{13}$$

откуда
$$a_1=(y_\infty-y_0)/y_0 \tag{14}$$
и
$$a_2=(-1)\frac{\sum_{k=1}^{1}\ln\frac{y_k^{-1}-1}{a_1}\cdot t_k}{\sum_{k=1}^{1}t_k^2}. \tag{15}$$

Для кривых вида (2) – (5) решения аналогичных систем приведены в табл. 1. Оптимизация выбранных начальных условий выполнена по процедуре, описанной в [5].

Таблица 1

Параметры кривых (2) – (5)

Тип кривой (номер уравнения)	Параметры кривой	Начальные приближения
Тип 2(2)	a_3	y_∞^{-1}
	a_4	$\dfrac{y_\infty - y_0}{y_\infty \cdot y_0}$
	b_1	$\sum\limits_{k=1}^{l} \ln \dfrac{\ln(y_k / y_\infty)}{\ln(y_0 / y_\infty)} \cdot t_k \cdot \left(\sum\limits_{k=1}^{l} t_k^2 \right)^{-1}$
Тип 3(3)	a_5	y_∞
	a_6	$-\ln \dfrac{y_0}{y_\infty}$
	a_7	$-\sum\limits_{k=1}^{l} \ln \dfrac{\ln \frac{y_k}{y_\infty}}{\ln \frac{y_0}{y_\infty}} \cdot t_k \cdot \left(\sum\limits_{k=1}^{l} t_k^2 \right)^{-1}$
Тип 4(4)	a_8	$\ln \dfrac{y_o}{y_\infty}$
	a_9	$\ln y_\infty$
	b_2	$\exp\left[\sum\limits_{k=1}^{l} \ln \dfrac{\ln \frac{y_k}{y_\infty}}{\ln \frac{y_0}{y_\infty}} \cdot t_k \cdot \left(\sum\limits_{k=1}^{l} t_k^2 \right)^{-1} \right]$
Тип 5(5)	a_{10}	$\ln y_\infty$
	a_{11}	$(\ln y_\infty - \ln y_0)\, a_{12}$
	a_{12}	$\dfrac{\ln y_\infty - \ln \tau}{\ln y_\tau - \ln y_0} \ln \tau$ *

*Примечание: τ – одно, произвольно выбранное, значение t_k из множества значений $T = t_1, t_2, \ldots, t_l$.

Составляющие градиента q_i (9) получены из следующих условий.

Для кривой (1):

$$\frac{\partial y_1}{\partial a_0} = \frac{y_1}{a_0}; \quad k = 1, 2, \dots, l; \tag{16}$$

$$\frac{\partial y}{\partial a_1} = (-y_1) \cdot \frac{\exp(-a_2 t_k)}{1 + a_1(\exp(-a_2 t_k))}; \quad k = 1, 2, \dots, l; \tag{17}$$

$$\frac{\partial y}{\partial a_2} = y_1 \cdot \frac{t a_1 \exp(-a_2 t_k)}{1 + a_1 \exp(-a_2 t_k)}; \quad k = 1, 2, \dots, l. \tag{18}$$

Для кривой (2):

$$\frac{\partial y_2}{\partial a_3} = (-y_2) \cdot \frac{1}{\left(a_3 + a_4 b_1^{t_k}\right)^2}; \quad k = 1, 2, \dots, l; \tag{19}$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial a_4} = (-y_2) \cdot \frac{b_1^{t_k}}{a_3 + a_4 b_1^{t_k}}; \quad k = 1, 2, \dots, l; \tag{20}$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial b_1} = (-y_2) a_4 b_1^{t_k^{-1}} t_k; \quad k = 1, 2, \dots, l. \tag{21}$$

Для кривой (3):

$$\frac{\partial y_3}{\partial a_5} = \frac{y_3}{a_5}; \tag{22}$$

$$\frac{\partial y_3}{\partial a_6} = (-y_3) \exp(-a_7 t_k); \tag{23}$$

$$\frac{\partial y_3}{\partial a_7} = t_k y_3 a \quad \exp(-a_7 t_k). \tag{24}$$

Для кривой (4):

$$\frac{\partial y_4}{\partial a_8} = b_2^{t_k} y_4; \tag{25}$$

$$\frac{\partial y_4}{\partial y_9} = y_4; \tag{26}$$

$$\frac{\partial y_4}{\partial b_2} = t_k a_8 b_2^{t_{k-1}} y_4. \tag{27}$$

Для кривой (5):

$$\frac{\partial y_5}{\partial a_{10}} = y_5; \tag{28}$$

$$\frac{\partial y_5}{\partial a_{11}} = -\frac{y_5}{a_{12} + t_k}; \tag{29}$$

$$\frac{\partial y_5}{\partial a_{12}} = \frac{a_{11} y_5}{\left(a_{12} + t_k^2\right)}. \qquad (30)$$

В условиях (16) – (30) по умолчанию принято, что функции $y_p\left(p = \overline{1,5}\right)$ – функции аргумента t_k, k = 1, 2, … , *l*.

Попарные произведения первых частных производных, входящие в (10), можно легко получить из выражений (16) – (30), поэтому в целях экономии места они опущены. Выражения для элементов, составляющих гессианы, соответствующие уравнениям кривых (1) – (5), приведены ниже.

Для кривой (1):

$$\frac{\partial^2 y_1}{\partial a_0 \partial a_1} = -y^2 \exp\left(-a_2 t\right) \cdot a_0^{-2}; \qquad (31)$$

$$\frac{\partial^2 y_1}{\partial a_0 \partial a_2} = y^2 a_1 t \exp\left(-a_2 t\right) a_0^{-2}; \qquad (32)$$

$$\frac{\partial^2 y_1}{\partial a_1 \partial a_2} = \frac{y^2}{a_0} t \left(\exp\left(-a_2 t\right) - \frac{2}{a_0} a_1 \exp\left(-a_2 t\right) \right); \qquad (33)$$

$$\frac{\partial^2 y_1}{\partial^2 a_0} = 0; \qquad (34)$$

$$\frac{\partial^2 y_1}{\partial a_1^2} = \frac{2 \exp\left(-a_2 t\right)^2 \cdot y^3}{a_0^2}; \qquad (35)$$

$$\frac{\partial^2 y_1}{\partial a_2^2} = a_1 t^2 \left(\frac{2y}{a} a_1 \exp\left(-a_2 t\right)^2 - \exp\left(-a_2 t\right) \right). \qquad (36)$$

Для кривой (2):

$$\frac{\partial y_2^2}{\partial a_3 \partial a_4} = 2 y_2^3 b_1^t; \qquad (37)$$

$$\frac{\partial^2 y_2}{\partial a_3 \partial b_1} = 2 a_4 b_1^{t-1} \cdot t y_2^3; \qquad (38)$$

$$\frac{\partial^2 y_2}{\partial a_4 \partial b_1} = t y^2 b_1^{t-1} \left(2 a_4 y - 1\right); \qquad (39)$$

$$\frac{\partial^2 y_2}{\partial a_3^2} = 2 y_2^3; \qquad (40)$$

$$\frac{\partial^2 y_2}{\partial a_4^2} = 2\left(b_1^t\right)^2 y_2^3; \qquad (41)$$

$$\frac{\partial^2 y_2}{\partial b_1^2} = a_4 b_1^{t-2}\left(2y_2 a_4 b_1^t \cdot t - t + 1\right). \qquad (42)$$

Для кривой (3):

$$\frac{\partial^2 y_3}{\partial a_5 \partial a_6} = \frac{y_3}{a_5}\exp(-a_7 t); \qquad (43)$$

$$\frac{\partial^2 y_3}{\partial a_5 \partial a_7} = \frac{y_3}{a_5} a_6 t \exp(-a_7 t); \qquad (44)$$

$$\frac{\partial^2 y_3}{\partial a_6 \partial a_7} = y_3 t\left(\exp(-a_7 t) - a_6 \exp(-a_7 t)^2\right); \qquad (45)$$

$$\frac{\partial^2 y_3}{\partial a_5^2} = 0; \qquad (46)$$

$$\frac{\partial^2 y_3}{\partial a_6^2} = y_3 \exp(-a_7 t)^2; \qquad (47)$$

$$\frac{\partial^2 y_3}{\partial a_7^2} = y a_6 t^2\left(a_6 \exp(-a_7 t)^2 - \exp(-a_7 t)\right). \qquad (48)$$

Для кривой (4):

$$\frac{\partial^2 y_4}{\partial a_8 \partial a_9} = b_2^t y_4; \qquad (49)$$

$$\frac{\partial^2 y_4}{\partial a_8 \partial b_2} = ytb_2^{-1}\left(b_2^{t-2} + a_8\left(b_2^t\right)^2\right); \qquad (50)$$

$$\frac{\partial^2 y_4}{\partial a_9 \partial b_2} = y_4 a_8 t\, b_2^{t-1}; \qquad (51)$$

$$\frac{\partial^2 y_4}{\partial a_8} = (b_2)^t\, y_4; \qquad (52)$$

$$\frac{\partial^2 y_4}{\partial a_9} = y_4; \qquad (53)$$

$$\frac{\partial^2 y_4}{\partial b_2} = y_4 a_8 t b_2^{t-2}\left(t - 1 + a_8 b_2^t \cdot t\right). \qquad (54)$$

Для кривой (5):

$$\frac{\partial^2 y_5}{\partial a_{10} \partial a_{11}} = -\frac{y_5}{a_{12} + t}; \qquad (55)$$

$$\frac{\partial^2 y_5}{\partial a_{10}\partial a_{12}} = \frac{a_{11}y_5}{(a_{12}+t)^2}; \qquad (56)$$

$$\frac{\partial^2 y_5}{\partial a_{11}\partial a_{12}} = \frac{y_5}{(a_{12}+t)^2}\left(1-\frac{a_{11}}{a_{12}+t}\right); \qquad (57)$$

$$\frac{\partial^2 y_5}{\partial a_{10}^2} = y_5; \qquad (58)$$

$$\frac{\partial^2 y_5}{\partial a_{11}^2} = \frac{y_5}{(a_{12}+t)^2}; \qquad (59)$$

$$\frac{\partial^2 y_5}{\partial a_{12}^2} = \frac{y_5 a_{11}}{(a_{12}+t)^3}\left(\frac{a_{11}}{a_{12}+t}-2\right). \qquad (60)$$

Дальнейшая процедура получения оценок $\hat{A}$ вектора параметров A совпадает с описанной ранее в работе [5].

Оценка адекватности полученных уравнений. В работе [3] отмечено, что для нелинейной регрессии не существует критериев адекватности, аналогичных критерию Фишера для линейной модели. Поэтому в случае нелинейной регрессии под проверкой адекватности модели понимают проверку гипотезы о том, что остатки модели имеют нулевое среднее.

Пусть

$$\overline{e}_p = \frac{1}{\ell}\sum_{k=1}^{\ell}\left(y_k - f_p\left(\hat{A}_p; t_k\right)\right), \quad p=\overline{1,5}. \qquad (61)$$

Тогда модель считают адекватной, если

$$e_p - t_{\ell-1,\alpha}\frac{S_p}{\sqrt{\ell}} \le E \le e_p + t_{\ell-1,\alpha}\frac{S_p}{\sqrt{\ell}}, \qquad (62)$$

причем число нуль принадлежит указанному в (62) доверительному интервалу.

В условии (62) принято, что S_p – среднеквадратическое отклонение остатков для p-й $\left(p=\overline{1,5}\right)$ модели; $t_{\ell-1,\alpha}$ – значение обратной функции распределения Стьюдента с $(\ell-1)$ степенью свободы на уровне значимости α.

4. Дискриминация моделей. Пусть количество моделей, удовлетворяющих условию (62), равно ω; $\omega \ge 2$. Выбор лучшей модели проводят, используя следующее эвристическое допущение. Наилучшей среди нескольких адекватных моделей будет та, которая несет наибольшее количество информации о выборочной совокупности, для которой составляется соответствующее уравнение нелинейной регрессии. В работе [6] показано, что в данном случае количество информации равно

$$I_p = \log_2 \sqrt{F_p}, \quad p = \overline{1{,}5}, \tag{63}$$

где

$$F_p = \frac{\sum_{k=1}^{\ell} (y_k - \overline{y})^2 / (\ell - 1)}{\sum_{k=1}^{\ell} \left(y_k - f\left(\hat{A}_p; t_k\right)^2 \right) / (k - u)}; \tag{64}$$

u – число оцениваемых параметров; в нашем случае $p = \overline{1{,}5}, \quad u = 3$.

Таким образом, из всех конкурирующих моделей следует выбрать модель с таким номером $p^* \left(p^* \in \left(\overline{1{,}5} \right) \right)$, для которого

$$p^* = \max_p I_p. \tag{65}$$

Выводы. 1. Сформулирована задача выбора наилучшей S-образной кривой, описывающей процессы, протекающие с насыщением.

2. Предложен критерий выбора наилучшей модели среди множества допустимых моделей, основанный на теоретико-информационной оценке результатов регрессионного анализа.

3. Предложен метод решения поставленной задачи.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Лук'яненко І.Г., Краснікова Л.І. Економетрика. – К.: Знання, 1998. – 494 с.*
2. *Урмаев А. С. Основы моделирования на аналоговых вычислительных машинах. – М.: Наука, 1974. – 320 с.*
3. *Бард Й. Нелинейное оценивание параметров. – М.: Статистика, 1979. – 349 с.*
4. *Демиденко Е.З. Линейная и нелинейная регрессии. – М.: Финансы и статистика, 1981. – 301 с.*
5. *Дубницкий В.Ю., Мусиенко М.В. Оптимизация выбора начальных условий для оценивания параметров нелинейной регрессии и идентификация кривой Лоффера // Системи обробки інформації. – Х.: ХВУ. – 2004. – Вип. 2. – С. 180 – 185.*
6. *Мосягин А.Б., Таранцев А.А. Информационно-энтропийный подход в регрессионном анализе // Автоматика и телемеханика. – 1999. – № 12. – С. 201 – 205.*

Поступила 8.12.2004

***ДУБНИЦКИЙ Валерий Юрьевич**, канд. техн. наук, доцент Харьковского банковского института. В 1975 году окончил ХИРЭ. Область научных исследований – исследование операций.*