Часть II. *Моделирование по временным рядам*

Формирование моделей на основе результатов наблюдений и исследование их свойств – вот, по существу, основное содержание науки.

Л. Льюнг. «Идентификация систем. Теория для пользователя» [111]

Глава 5. Постановки задач моделирования по рядам

5.1. Схема процесса построения модели по временному ряду

Несмотря на безграничное число ситуаций, объектов и целей, вносящих в процесс свое специфическое, можно выделить основные этапы моделирования и представить их в виде схемы (рис.5.1). Работа начинается с рассмотрения имеющейся информации об объекте (экспериментальных данных о нем самом или подобных объектах; теорий, разработанных для описания исследуемого класса объектов; интуитивных представлений и т.д.) с позиций цели исследования, с получения и предварительного анализа рядов наблюдаемых величин, а заканчивается использованием полученной модели для решения конкретной задачи. Но этот процесс обычно является итерационным – сопровождается неоднократными повторениями, возвратами в исходную и промежуточные точки схемы, последовательными приближениями к «хорошей» модели.

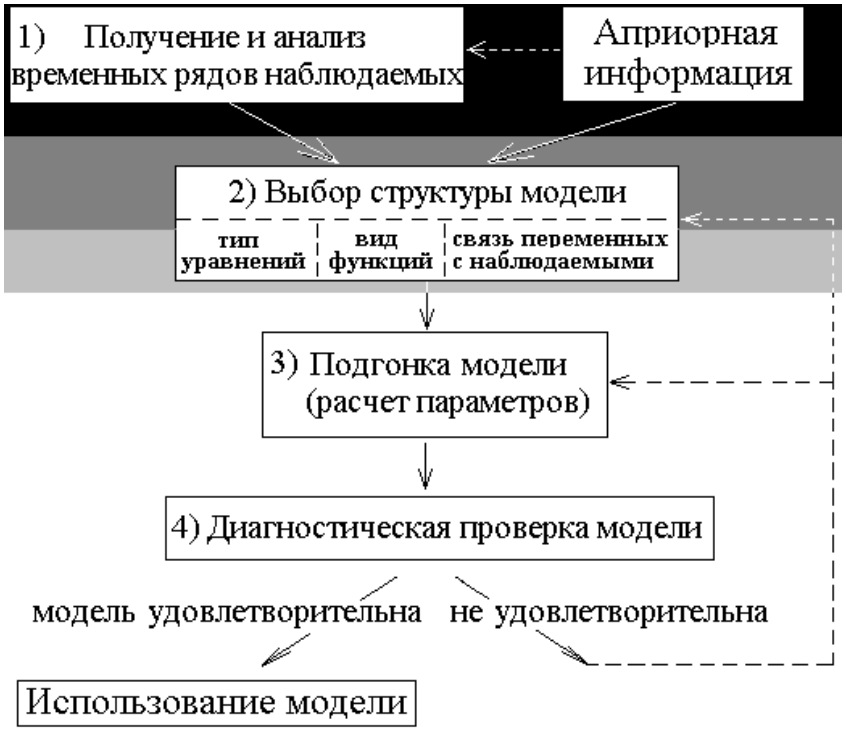

Рис.5.1. Типовая схема процесса эмпирического моделирования

На ключевом в схеме этапе 2 формируется *структура модели*.[1] Во-первых, выбирается тип уравнений. Мы будем говорить в основном о конечномерных детерминированных моделях в виде отображений

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_n, \mathbf{c}) \tag{5.1}$$

или обыкновенных дифференциальных уравнений

$$d\mathbf{x}/dt = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{c}), \tag{5.2}$$

где $\mathbf{x}$ – D-мерный вектор состояния, $\mathbf{f}$ – вектор-функция, $\mathbf{c}$ – P-мерный вектор параметров, n – дискретное время, t – непрерывное время. Во-вторых, задается вид входящих в них функций (скалярных компонент функции $\mathbf{f}$). В-третьих, устанавливается связь динамических переменных (компонент вектора $\mathbf{x}$) с наблюдаемыми величинами $\boldsymbol{\eta}$. В качестве переменных могут выступать сами наблюдаемые, но в более общем случае эту связь задают в виде $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{h}(\mathbf{x})$, где $\mathbf{h}$ называют *измерительной функцией*. Часто вводят еще случайную добавку $\boldsymbol{\zeta}$: $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{h}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\zeta}$, чтобы учесть *измерительный шум*. Чтобы сделать модель более реалистичной, случайную добавку вводят нередко и в сами уравнения (5.1) или (5.2) – так называемый *динамический шум*.

Формирование структуры модели – наиболее сложный и творческий этап процедуры моделирования. После него остается только определить конкретные значения параметров $\mathbf{c}$ (этап 3). Здесь часто говорят об *оценке параметров* или «подгонке» модели.[2] Для этого, как правило, проводится поиск экстремального значения некоторой *целевой функции*,[3] например, минимизируется сумма квадратов отклонений решения модельных уравнений от наблюдаемых данных. При необходимости на данном этапе проводятся предварительные преобразования наблюдаемого ряда: фильтрация от шумов, численное дифференцирование или интегрирование и т.п. Это, в основном, технический этап численных расчетов, но и здесь нужно сделать выбор принципа расчета параметров и методики для его реализации.

Выбор приходится делать и в финале, приступая к проверке «качества» модели (этап 4). Обычно качество модели проверяется с использованием прибереженной для этой цели тестовой части ряда. Исходя из целей моделирования, в теории идентификации выделяют два типа задач – «познавательные» (где целью является получение адекватной модели) и «практические» (где есть практическая цель, которую стремятся

---

[1] В теории идентификации этот этап называют «структурной идентификацией» [57]. Согласно [111] «структура модели – это параметризованное множество моделей».

[2] Другое название – «параметрическая или непараметрическая идентификация» [57].

[3] Она носит различные названия: функция потерь, функция стоимости, функция риска.

достичь с помощью построенной модели, например, прогноз) [57]. В зависимости от того, какая из постановок имеет место, проводится либо проверка *адекватности*[4] (верификация) модели в отношении интересующих исследователя свойств объекта, либо проверка *эффективности*[5] модели для достижения поставленной цели. Если модель признана удовлетворительной (адекватной или эффективной), полученная конструкция берется в дело, иначе – возвращается на доработку на любой из этапов схемы рис.5.1.

5.2. Систематизация задач по объему априорной информации

Фон, на котором изображена схема рис.5.1, меняется от черного (тьма незнания) до белого, отражая степень априорной неопределенности, с которой приходится сталкиваться при моделировании. Наименее благоприятна ситуация, получившая название «черного ящика», когда информация о структуре возможной адекватной модели отсутствует, и начинать приходится с самого верха описанной схемы. Чем больше известно о том, как должна выглядеть модель, т.е. чем ниже «стартовая точка» на схеме, тем вероятнее успех – «ящик» становится «серым» и даже «прозрачным». Последнее означает, что структура модели полностью известна априори.

Способы предварительного анализа временных рядов, которые могут дать полезную информацию о структуре модели и облегчить задачу моделирования, изложены ниже в главе 6. От решения проблем, встречающихся на нижних ярусах схемы, уклониться невозможно, с ними неизбежно сталкивается исследователь, преодолевший этап структурной идентификации. Поэтому в главах 7 и 8 мы рассмотрим проблемы реконструкции, начиная с наиболее простой ситуации, когда о модели известно все, кроме конкретных значений ее параметров, на рис.5.1 ей соответствует белый фон.

В зависимости от происхождения временных рядов складываются две качественно различные ситуации при постановке задачи моделирования. Первая – когда наблюдения представляют собой реализацию некоторой математической модели (системы уравнений), полученную численными методами. Именно для нее полностью уместны термины «реконструкция» или «восстановление» уравнений. Здесь существенно проще проверка качества модели, т.к. имеется «истинное» исходное уравнение: с ним и со свойствами его решений можно сравнивать результаты моделирования. Кроме того, здесь можно сформулировать теоретические условия эффективности методов моделирования для различных классов систем. Во

---

[4] Под адекватностью понимают соответствие свойств модели свойствам объекта (верное воспроизведение моделью свойств оригинала) [168, с. 13].

[5] Эффективной будем называть модель, обеспечивающую достижение цели.

втором, качественно ином случае, когда временной ряд получен в результате измерений реального процесса, единственно правильной модели не существует (глава 1) и успех моделирования гарантировать нельзя. Можно только удивляться «непостижимой эффективности математики», если будет получена «хорошая» модель.

Далее мы рассмотрим различные методы построения моделей. Для объяснения и иллюстрации технологии моделирования будем использовать, в основном, первую из описанных ситуаций – реконструировать уравнения по их численным решениям, добавляя для большей реалистичности шумы того или иного вида. Рассмотрение различных постановок задачи моделирования будем вести последовательно (главы 8 – 10) в соответствии со следующей «иерархией».

1) Оценка параметров. Структура модельных уравнений полностью записана из физических или других содержательных соображений, неизвестны только значения параметров. В этом случае задача наиболее проста – «прозрачный ящик». Но могут возникать существенные технические трудности, связанные с большим числом неизвестных параметров и ненаблюдаемых (скрытых) динамических переменных.

2) Восстановление нелинейных характеристик. В значительной степени структура уравнений известна из физических соображений, поэтому нет необходимости искать функцию **f**, зависящую от многих переменных. Неизвестны только некоторые ее компоненты – функции одной-двух переменных (возможно, нелинейные). Термин «восстановление нелинейных характеристик» заимствован из радиофизики, где под характеристиками понимаются неизвестные компоненты функции **f.** Он часто уместен в физических, биологических и других приложениях.

3) Реконструкция в случае «черного ящика». Поскольку априорной информации нет, функция **f** ищется в каком-либо универсальном виде. Решение такой задачи чаще всего называют собственно «реконструкцией уравнений движения». Это наиболее тяжелая ситуация.

Переход от первой постановки к третьей (от «прозрачного ящика» к «черному») является постепенным. Многие ситуации можно упорядочить в направлении возрастания сложности («темноты серого тона» или «непрозрачности»). Но это не линейное упорядочение, т.к. не все ситуации можно легко сравнить и сказать, что эта – «светлее», а эта – «темнее». Например, трудно сравнить информацию о наличии гармонического воздействия и о какой-либо симметрии фазовых траекторий в пространстве состояний.

5.3. Особенности задач эмпирического моделирования

5.3.1. Прямые и обратные задачи

Часто говорят, что задачи построения модельных уравнений по наблюдаемой временной реализации принадлежат к классу *обратных задач*. Термин «обратная задача» используется во многих математических дисциплинах. Обратные задачи – это задачи, в которых входные данные и искомые величины меняются местами по сравнению с постановкой некоторых привычных «базовых» задач, которые традиционно называют «прямыми».

Как правило, прямые задачи – это задачи, формулировки которых логически возникают первыми при создании математического аппарата. Причем обычно имеются регулярные методы решения прямых задач, т.е. это зачастую относительно простая проблема. К прямым задачам относится, например, задача Коши для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений: для заданных начальных условий найти частное решение системы ОДУ, удовлетворяющее этим условиям (прямая задача динамики). Задачу получения системы ОДУ, частным решением которой является заданная функция, называют обратной задачей динамики.

Об обратных задачах уместно говорить при анализе экспериментальных данных, когда по измеренным величинам нужно рассчитать параметры математической модели исследуемого процесса. Например, в спектроскопии и молекулярном моделировании возникает задача: по наблюдаемым спектрам поглощения вещества вычислить параметры и определить геометрическую конфигурацию молекул вещества. Это обратная задача, а прямая – расчет спектров поглощения для заданной модели молекул.

5.3.2. Корректно и некорректно поставленные задачи

Обратные задачи часто являются некорректно поставленными в некотором строгом смысле, оговоренном ниже.

Пусть задача формулируется следующим образом: по некоторым входным данным X найти искомую величину Y – решение задачи. Задача называется *устойчивой по входным данным*, если решение зависит от входных данных *непрерывно* $Y = \Phi(X)$, т.е. при очень малом изменении X решение тоже очень мало изменяется. Задача называется *корректно поставленной* (по Адамару), если выполняются три условия: 1) решение существует; 2) решение единственно; 3) задача устойчива по входным данным.

Первые два условия не нуждаются в пояснении. Третье – важно для практики, поскольку данные всегда измеряются с некоторыми

погрешностями, и если при небольшом изменении входных данных резко меняется ответ задачи, то мы не можем быть уверены в его надежности, да и вообще полезность полученного ответа оказывается под сомнением. Это условие и требует, чтобы ответ менялся мало при малом изменении входных данных.

Если хотя бы одно из трех условий нарушается, то задача называется *некорректной* (по Адамару). Конечно, всегда следует стремиться корректно ставить задачи, поэтому долгое время некорректные задачи вовсе находились вне интересов математиков [160]. Считалось, например, что они не имеют «физического смысла», обязательно должны быть переформулированы, и т.п. Но с течением времени такие задачи все чаще и чаще возникали в различных областях практики. Поэтому начали развиваться специальные подходы к их решению, такие как регуляризация и построение квази-решений.

По мере изложения материала мы нередко будем обсуждать корректность возникающих задач. Некорректность постановки – не «окончательный приговор», это еще не значит, что «все плохо». Так, некорректной является даже задача дифференцирования, но дифференцирование широко используется.[6] Хотя, конечно, предпочтительнее было бы иметь дело с корректными постановками, для практических целей может оказаться вполне приемлемой модель, полученная и при некорректной постановке задачи. Например, это возможно в том случае, когда некорректность состоит в существовании множества решений, но удается выбрать одно решение (или даже

---

[6] Значительные трудности численной оценки производных по временному ряду (п. 7.4.2) имеют не технический характер. Они связаны с некорректностью задачи дифференцирования [160]. Поясним это на конкретном примере. Пусть задана непрерывно дифференцируемая функция $x_0(t)$, обозначим $dx_0(t)/dt = y_0(t)$. Пусть теперь $x_0(t)$ задана с некоторой погрешностью, т.е. входные данные представляют собой функцию $x(t) = x_0(t) + \xi(t)$, где добавка $\xi(t)$ непрерывно дифференцируема и очень мала: $|\xi(t)| \le \delta$. Входные данные $x(t)$ очень близки к $x_0(t)$ в смысле метрики L_∞. Производная «зашумленной» функции $x(t)$ есть $dx(t)/dt = y_0(t) + d\xi(t)/dt$. Ее отклонение ε от $y_0(t)$ в той же метрике может быть сколь угодно велико. Пусть, например, $\xi(t) = \delta \sin(\omega t)$, тогда $dx(t)/dt = y_0(t) + \omega\delta\cos(\omega t)$. При этом $\varepsilon = \omega\delta$ может быть сколь угодно большим для сколь угодно малого δ, если ω велико. Т.е. погрешность дифференцирования может быть сколь угодно велика при сколь угодно малой «интенсивности быстро осциллирующего шума $\xi(t)$».

Здесь важно, как понимается близость в пространстве входных данных и в пространстве решений. Так, если считать близкими только такие входные данные, для разности которых $\xi(t)$ выполняется одновременно $|\xi(t)| \le \delta$ и $|d\xi(t)/dt| \le \delta$ (т.е. $\xi(t)$ – медленно меняющаяся функция), то задача дифференцирования корректна.

несколько) из этого множества, дающее вполне удовлетворительные результаты. Так, при моделировании молекул [68] авторы подчеркивают принципиальную некорректность возникающих задач (получение параметров модели по спектру поглощения или по дифракционной картине) и необходимость рассматривать модели, полученные в результате различных постановок эксперимента, как взаимно дополнительные и только частично отвечающие объекту.

Есть и другой распространенный вариант постановки и решения некорректной задачи. Пусть при входных данных X^* существует решение задачи Y^*. Пусть данные X^* заданы с погрешностями, обозначим такой «зашумленный вход» X. Строгого решения при входных данных X задача может и не иметь. Тогда ищут величину $Z = \Phi(X)$, в некотором смысле близкую к решению и такую, что отображение Ф – непрерывно, и $\Phi(X) \to Y^*$ при $\left\| X - X^* \right\| \to 0$. Величину Z называют *квазирешением*.

На практике некорректность постановки задачи моделирования по временному ряду снимается, например, за счет дополнительных предположений или априорной информации о структуре модели (и соответствующего выбора базисных функций, см. главы 7-10). Существуют также процедуры, которые обеспечивают корректность постановки: построение так называемых регуляризирующих функционалов [160, 51]. Типичным примером последней ситуации может служить задача аппроксимации зависимости одной величины Y от другой X на основе конечной «обучающей» выборки (см. ниже п. 7.2). Довольно легко подобрать кривую, проходящую через каждую экспериментальную точку на плоскости (X, Y) (п. 7.2.3.1). Однако, в общем случае, существует бесконечное множество кривых, которые отличаются от выбранной произвольными осцилляциями *между точками*. Все они доставляют минимум эмпирической среднеквадратичной ошибке аппроксимации и в этом смысле являются равноправными решениями задачи. Число решений можно уменьшить, если наложить условие на величину межточечных осцилляций. Это как раз и делает регуляризирующий функционал (подробнее см. п. 7.2.3). Так что анализ корректности задачи важен: он помогает выбрать эффективный способ ее решения и, если нужно, несколько изменить саму постановку.

5.3.3. Плохо обусловленные задачи

В практических приложениях важно выделить вид задач, которые теоретически поставлены корректно, но их решение «достаточно сильно» зависит от малого изменения входных данных. «Достаточно сильно» – это не строгое понятие, которое определяется конкретной задачей, но в общем

случае означает, что при малой относительной погрешности δ во входных данных относительная погрешность решения ε во много раз больше: $\varepsilon = K \cdot \delta$, где $K >> 1$. Хотя формально задача устойчива по входным данным – при бесконечно малой погрешности во входных данных погрешность в решении также бесконечно мала, – но при *конечной* малой погрешности во входных данных погрешность в решении может оказаться очень велика. Такие задачи называют *слабо* устойчивыми по входным данным или *плохо обусловленными* [85, 289].

С практической точки зрения они не отличаются от некорректно поставленных, если учесть, что все расчеты и представление чисел на компьютере имеют конечную точность. Примером плохо обусловленной задачи является задача решения системы линейных алгебраических уравнений, матрица которой близка к вырожденной (такую матрицу тоже часто называют плохо обусловленной) [85, 153]. Плохо обусловленные задачи часто возникают при построении «громоздких» математических моделей по временным рядам. Для их решения требуется привлекать те же идеи и методики, что и в случае некорректных задач.