

基于粒子群优化算法的 Richards 模型参数估计和算法有效性

燕振刚^{1*}, 胡贺年², 李 广¹

(1. 甘肃农业大学 信息科学技术学院, 兰州 730070; 2. 甘肃农业大学 经济管理学院, 兰州 730070)

(*通信作者电子邮箱 yanzhg908@163.com)

摘 要:针对 Richards 模型参数估计较为困难的实际问题, 提出将 Richards 模型的参数估计问题转化为一个多维无约束函数优化问题。结合谷氨酸菌体的实际生长浓度数据, 在 Matlab 2012b 环境中, 利用粒子群优化 (PSO) 算法建立适应度函数, 在最小线性二乘意义下估计 Richards 模型中的 4 个参数, 并建立了拟合的生长曲线和最优值变化曲线。为进一步验证算法有效性, 将 PSO 算法与该模型传统参数估计法中的四点法和遗传算法 (GA) 进行了比较, 以相关指数和剩余标准差作为评价指标。结果表明, PSO 算法对 Richards 模型的拟合效果良好, 对模型的参数估计有着很好的适用性。

关键词:粒子群优化算法; Richards 模型; 参数估计; 算法有效性

中图分类号: TP301.6 **文献标志码:** A

Parameter estimation of Richards model and algorithm effectiveness based on particle swarm optimization algorithm

YAN Zhengang^{1*}, HU Henian², LI Guang¹

(1. College of Information Science and Technology, Gansu Agricultural University, Lanzhou Gansu 730070, China;

2. College of Economics and Management, Gansu Agricultural University, Lanzhou Gansu 730070, China)

Abstract: Aiming to the practical problem that it is difficult to estimate the Richards model parameters, the parameter estimation problem of the Richards model was formulated as a multi-dimensional unconstrained function optimization problem. Combined with the actual growth concentration of glutamic acid, in Matlab 2012b environment, the fitness function was established by Particle Swarm Optimization (PSO) algorithm, four parameters of Richards model were estimated by the least square method, and the growth curve and the optimum curve were established. To further verify the effectiveness of the algorithm, the PSO algorithm was compared with traditional parameter estimation method, such as four point method and Genetic Algorithm (GA) method, the related index and the residual standard deviation were used as the evaluation index. The results show that, the PSO algorithm has better fitting effect for Richards model and good applicability for parameter estimation.

Key words: Particle Swarm Optimization (PSO) algorithm; Richards model; parameter estimation; algorithm effectiveness

0 引言

在模型的建立过程中, 对生物生长过程的数量化描述较为知名的模型有 Mitscherlich、Compertz、Brody 和 logistic 等模型。由于它们具有固定的拐点, 都只能准确描述一种特定形状的 S 曲线, 或者说完整 S 曲线的一个特定部分。Richards 方程是 4 参数非线性方程, 通过其中一个参数在数轴上的滑动取值, 使其不仅包含了上述的所有生长方程, 而且包含了它们的中间过渡形式及更为广义的形式, 对生长过程描述的准确性达到前所未有的水平^[1]。Richards 生物增长模型以其参数具备合理实际意义和对多样性增长过程的描述能力很强而受到广泛应用, 对于模拟生物生长有着很强的适应性, 但 Richards 模型是一个含四参数的非线性回归模型, 参数估计

较为复杂^[2]。

非线性模型参数估计的纯数学方法有四点法、三段法等。近年来, 随着智能化算法的发展和应用, 遗传算法 (Genetic Algorithm, GA)、粒子群优化 (Particle Swarm Optimization, PSO) 算法等智能算法也应用到非线性模型参数估计。但是, 这些参数估计方法究竟哪种更有效, 只有通过有效性验证才能得出结论。

1 Richards 模型及估计方法

1.1 Richards 模型

Richards 模型数学方程为:

$$y_i = \alpha(1 + e^{\beta - \alpha})^{-\frac{1}{\delta}} + \varepsilon \quad (1)$$

或

收稿日期: 2014-05-08; 修回日期: 2014-06-16。

基金项目: 甘肃省自然科学基金资助项目 (1308RJZA215, 1308RJZA272); 甘肃农业大学盛彤笙科技创新基金资助项目 (CSAU-STS-1321)。

作者简介: 燕振刚 (1978 -), 男, 甘肃定西人, 副教授, 博士研究生, 主要研究方向: 智能算法、虚拟作物; 胡贺年 (1989 -), 男, 甘肃永登人, 硕士研究生, 主要研究方向: 农业经济信息管理; 李广 (1971 -), 男, 内蒙古化德人, 教授, 博士生导师, 博士, 主要研究方向: 作物生长机理模型、精准农业。

$$y_i = \alpha(1 + e^{\beta - \alpha})^{-\frac{1}{\delta}} \quad (2)$$

式(1)~(2)中: y_i 为 t 时刻某变量的增长量,参数 α 为增长量的极限值, β 为初始值参数, r 为增长速率参数, δ 为曲线的形状参数, ε 为随机误差。它的图形是以 α 为渐近线的S型曲线。

1.2 四点法

四点法在解决 Richards 模型参数估计的过程中,首先要选取四个点 $M_1(t_1, y_1)$ 、 $M_2(t_2, y_2)$ 、 $M_3(t_3, y_3)$ 、 $M_4(t_4, y_4)$,将整个时间序列划分为相等的四个部分,对于每个部分中各点的横坐标(t),纵坐标(y)分别进行平均,将其平均数作为选取点的坐标,然后将这四个点代入所满足的 Richards 方程中。

$$y_2^{-2\delta} + y_3^{-2\delta} + y_1 y_4^{-\delta} - y_2 y_4^{-\delta} - y_2 y_3^{-\delta} - y_1 y_3^{-\delta} = 0 \quad (3)$$

$$r = \frac{1}{h} \ln \left(\frac{y_1^{-\delta} - y_2^{-\delta}}{y_2^{-\delta} - y_3^{-\delta}} \right) \quad (4)$$

$$h = t_2 - t_1 = t_3 - t_2 = t_4 - t_3 \quad (5)$$

$$\alpha = \left(\frac{y_2^{-\delta} e^{rh} - y_1^{-\delta}}{e^{rh} - 1} \right)^{\frac{1}{\delta}} \quad (6)$$

$$\beta = rt_1 + \ln \left(\frac{y_1^{-\delta}}{\alpha^{-\delta}} - 1 \right) \quad (7)$$

通过上述步骤, Richards 模型中的四个参数即可求解。主要缺点是当时序序列较短,所选取的四个点中纵坐标的值变化不大时, Richards 模型中的第四个参数 δ 估计不准确,导致拟合的模型失真,同时计算方程(3)时数据量较大,实际计算精度低。

1.3 遗传算法

遗传算法在求解 Richards 模型参数的过程中,将实际的观测值与 Richards 方程联系起来,通过二者差值平方和,形成一个适应度函数;再进行遗传算法本身的选择、交叉、变异运算,根据终止条件,得出最优解,而这个最优解即就是所求的参数估计值。遗传算法的主要缺点是选择、交叉、变异的过程繁琐。遗传算法在运行中要不断迭代,因此所求的解可能是局部最优解而非全局最优解。

1.4 粒子群优化算法

粒子群算法是从生物种群行为特性中得到启发并用于求解优化问题。在粒子群算法中,每个优化问题的潜在解都可以想像成 D 维搜索空间上的一个点,并将该点称之为“粒子”(Particle),所有的粒子都有一个被目标函数决定的适应值(Fitness Value, FV),每个粒子还有一个速度决定它们飞翔的方向和距离,然后粒子们就追随当前的最优粒子在解空间中搜索。Poli 等^[3]对鸟群飞行的研究发现,鸟仅仅是追踪它有限数量的邻居但最终的整体结果是整个鸟群好像在一个中心的控制之下,即复杂的全局行为是由简单规则的相互作用引起的。

在标准的 PSO 算法中,设在一个 D 维的目标搜索空间中,有 N 个粒子组成一个群体,其中第 i 个粒子表示为一个 D 维向量 $\mathbf{X}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iD})$ ($i = 1, 2, \dots, N$),每个粒子的位置就是一个潜在的解。将 \mathbf{X}_i 代入一个目标函数就可以算出其适应值,根据适应值的大小衡量解的优劣。第 i 个粒子的飞行速度也是 D 维向量,记为 $\mathbf{V}_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{iD})$ 。记第 i 个粒子迄今为止搜索到的最优位置为 $\mathbf{P}_i = (p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{iD})$,整个粒子群迄今为止搜索到的最优位置为 $\mathbf{P}_g = (g_1, g_2, \dots, g_D)$ 。则可用下列公式对粒子的速度和位置进行更新:

$$v_{ij}(t+1) = w v_{ij}(t) + r_1 c_1 (p_{ij} - x_{ij}(t)) + r_2 c_2 (g_{ij} - x_{ij}(t))$$

$$x_{ij}(t+1) = x_{ij}(t) + v_{ij}(t+1)$$

其中 r_1 和 r_2 是服从 $U(0,1)$ 分布的随机数; c_1 和 c_2 是随机因子,通常取 $c_1 = c_2 = 2$; w 是惯性因子。在每一维,粒子都有一个最大限制速度 V_{\max} ,如果某一维的速度超过了 V_{\max} ,那么这一维的速度就限定为 V_{\max} ,即 $|v_{ij}| \leq V_{\max}$ 。

1.5 粒子群算法的流程

步骤1 设置相关初始参数,如种群规模 m ,惯性权重 w ,加速度常数 c_1 和 c_2 ,辨识所估计参数的大致论域范围,算法结束条件等^[4]。

步骤2 初始化群体中的微粒,包括微粒的初始位置和初始速度。

步骤3 评价各微粒的适应度函数值 $fitness$ 。

步骤4 对每个微粒,将其适应度值与历史最好位置 \mathbf{P}_{best} 相比较,如果当前适应度值更优,则用当前适应度值更新 \mathbf{P}_{best} 。

步骤5 将每个微粒的适应度值与群体经历过的历史最佳位置 \mathbf{g}_{best} 相比较,如果当前群体中最好的适应度值较好,则将其置为新的 \mathbf{g}_{best} 。

步骤6 根据上述公式更新各微粒的位置和速度。

步骤7 计算优化目标函数,如果达到结束条件,则返回当前最佳微粒的结果,算法结束;否则返回步骤3。粒子群算法过程如图1所示。

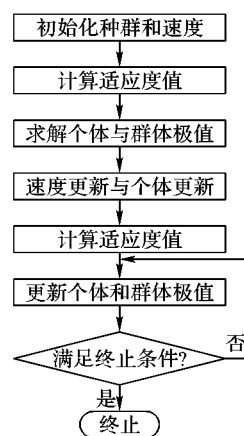


图1 粒子群算法流程

2 非线性模型的转换

在非线形模型的参数估计中,非线性模型表达式的结构是给定的。非线性模型的一般表达式为 $y = f(x, \theta) + e$, $e \sim N(0, \delta^2)$ 。其中: x 为系统输入, y 为系统输出, θ 为待估计的模型参数, e 是均值为0、方差为 δ^2 的白噪声。

非线性模型的参数估计问题就是在模型结构已经确定的情况下,根据已知的观测输入输出数据 (x_i, y_i) ($i = 1, 2, \dots, n$),求出存在于非线性模型中的参数 θ 。在非线形模型的参数估计中,通常将参数估计转化成非线性函数的优化问题。最大似然估计法和最小线性二乘法就是两种常用的转换方法。最大似然估计法主要在模型中用于总体参数的估计,此方法的基本思想是:当从模型总体随机抽取 n 组样本观测值后,最合理的参数估计量应该使得从模型中抽取该 n 组样本观测值的概率最大。最小线性二乘法和最大似然估计法本质的区别就在于最小二乘法旨在得到使得模型能最好地拟合样本数据的参

数估计量。因此结合上述两种转换方法的异同点,本文选择最小线性二乘法来对 Richards 模型进行最优化处理。

根据已知的 (x_i, y_i) ,求解偏差平方和 $J(\theta) = \left(\sum_{i=1}^n y_i - f(x_i, \theta) \right)^2$ 为最小的 θ 值。其实质是拟合出一个新函数 $f(x_i, \theta)$ 与实际的输出 y_i 进行比较,二者的差值越小说明拟合出来的函数越接近实际的值,从而也说明估计的参数也越来越准确。这样一个非线性模型参数估计的问题也就转换成了非线性函数优化的问题。采用传统的方法来解决非线性函数优化问题是很困难的,因为在解决问题的过程中不得不考虑模型的限制条件。通过最小线性二乘法的转换,利用粒子群算法对 $J(\theta) = \left(\sum_{i=1}^n y_i - f(x_i, \theta) \right)^2$ 函数的最小值进行优化,得出的 θ 也就是要估计的非线性模型中的参数。

3 仿真及结果分析

为了验证利用粒子群算法对 Richards 模型参数估计的有效性,本文以谷氨酸菌体生长浓度为真实观测数据,求解 Richards 模型在最小线性二乘意义下的参数估计,即将粒子群算法中的 fitness 函数写为: $fitness = \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha(1 + e^{\beta - r_i})^{-\frac{1}{\delta}})^2$ 。结果分析中,以相关指数和剩余标准差作为拟合效果评价指标。

3.1 谷氨酸菌体实际生长浓度

已知谷氨酸菌体的生长符合 Richards 生长模型。表 1 为谷氨酸菌体的实际生长浓度^[5],即菌体浓度 (Cell Concentration, CC)。

表 1 菌体浓度实际观测数据

时间/菌体浓度/ h (g · L ⁻¹)	时间/菌体浓度/ h (g · L ⁻¹)	时间/菌体浓度/ h (g · L ⁻¹)	时间/菌体浓度/ h (g · L ⁻¹)
2 0.32	7 0.64	12 0.86	17 0.9
3 0.35	8 0.74	13 0.87	18 0.9
4 0.36	9 0.78	14 0.87	19 0.9
5 0.40	10 0.82	15 0.89	20 0.9
6 0.58	11 0.85	16 0.89	21 0.9

粒子群算法参数设置如下:种群规模 $m = 20$; w 从 1.2 线性递减到 0.1;加速度常数取 $c_1 = c_2 = 2$;因要对 Richards 模型的四个参数求解,所以设 $D = 4$;待估计参数 α, β, r, δ 的搜索空间设为 $[0, 5]$; $V_{max} = 2.5$ 。

3.2 算法实现过程

在实验中,使用 Matlab 2012b 作为编写粒子群算法的工具,并使算法中的迭代次数达到 10 000 次。程序代码分为两块:一是粒子群算法 pso. m,二是适应度函数 fitness. m。

3.3 结果分析

通过对代码在 Matlab 2012b 中的运行,可以得到四个参数的估计值,运行结果如下:

```
gbest =
    0.9069    2.5000    0.4142    1.4827
```

即 Richards 模型中所要估计的四个参数 α, β, r, δ 分别为 0.9069, 2.5000, 0.4142, 1.4827。

```
>> fitnessfcn(gbest)
ans =
    0.0152
```

即通过最小线性二乘法,菌体浓度真实值与估算的菌体浓度之间差的平方和为 0.0152,这个值越小说明拟合的 Richards 模型越良好,从而证明参数估计的有效性。

拟合的菌体生长曲线,如图 2 所示。

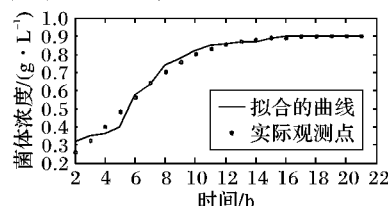


图 2 拟合的菌体生长曲线

通过对拟合的生长曲线的分析,可以看出实际的观测点基本在拟合的 Richards 曲线上,说明拟合的效果良好。

最优值变化曲线,如图 3 所示。

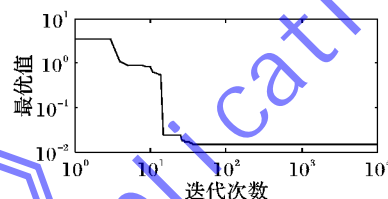


图 3 最优值变化曲线

通过对最优值变化曲线的分析,可以得出当粒子群算法迭代接近 100 次的时候最优值趋于稳定。

3.4 有效性验证

为了验证粒子群算法对参数估计的有效性,将菌体的实际浓度与 PSO 算法、GA 和四点法得到的预测浓度进行比较,以相关指数和剩余标准差作为评价标准,从而证明粒子群算法的有效性。相关指数越接近于 1 说明拟合程度越好,剩余标准差越小说明拟合的效果越好。

表 2 菌体实际浓度与模型拟合值的比较 g/L

时间/h	实际值	四点法	GA	PSO 算法
2	0.32	0.2040	0.2532	0.2615
3	0.35	0.3005	0.3272	0.3280
4	0.36	0.4021	0.4082	0.4034
5	0.4	0.4994	0.4915	0.4842
6	0.58	0.5863	0.5717	0.5654
7	0.64	0.6597	0.6463	0.6415
8	0.74	0.7192	0.7066	0.7081
9	0.78	0.7660	0.7578	0.7626
10	0.82	0.8021	0.7982	0.8048
11	0.85	0.8294	0.8292	0.8362
12	0.86	0.8498	0.8524	0.8586
13	0.87	0.8649	0.8696	0.8742
14	0.87	0.8760	0.8821	0.8850
15	0.89	0.8842	0.8912	0.8923
16	0.90	0.8902	0.8977	0.8971
17	0.90	0.8945	0.9023	0.9004
18	0.90	0.8977	0.9056	0.9026
19	0.90	0.9000	0.9080	0.9040
20	0.90	0.9017	0.9097	0.9050
21	0.90	0.9029	0.91008	0.9056

1) 拟合相关指数:

$$R^2 = 1 - \left(\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2} \right)$$

其中: y_i 为实际观测值; \hat{y}_i 为估计值; \bar{y}_i 为实际的 1 组观测值

的平均值。

通过计算得出,四点法下该遗传算法的拟合相关指数为 0.965 8,遗传算法下该模型的拟合相关指数为 0.978 3,在粒子群算法下该模型的拟合相关指数为 0.982 5。表明了粒子群算法下所建立的 Richards 模型适应度良好,非线性高度相关。由此判断所建立的模型完全适用于谷氨酸菌体生长过程的描述,可作为描述菌体生长的实用模型。从上述的实际应用中可以看出,通过拟合出来的生长曲线,可以对菌体生长期任一时间段的生物量进行预测。

2) 剩余标准差:

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2}}$$

通过计算得出,四点法下该模型的剩余标准差为 0.107 4,遗传算法下该模型的剩余标准差为 0.094 8,在粒子群算法下该模型的剩余标准差为 0.081 5。从模型剩余标准差的比较结果可以看出,基于粒子群算法的模型参数估计评价指标要略优于遗传算法和四点法所得的结果,而采用遗传算法和四点法也可得到较好的拟合效果。但从三种方法的实际比较来看,粒子群算法简单,需要调整的参数比较少,运算量也较之四点法小,可见将粒子群算法应用于 Richards 模型的参数估计是可行的、有效的。

4 结语

与三段法和四点法比较而言,粒子群算法在进行 Richards 模型参数估计的时候不用考虑观测值的影响,同时也减少了大量复杂的计算。粒子群算法属于进化算法的一种,与遗传算法相似:它也是从随机解出发,通过迭代寻找最优解;也是通过适应度来评价解的品质,但比遗传算法规则更为简单;它没有遗传算法的交叉和变异操作,通过追随当前搜索到的最优值来寻找全局最优。

粒子群算法对 Richards 模型的参数估计是有效的,并且与模型的限制条件无关,从而为 Richards 模型的参数估计提供了一种新的方法,也为其他非线性模型的参数估计提供了一种思路。

参考文献:

- [1] XING L, SUN M, WANG Y. Richards growth model of living-organism [J]. *Journal of Biomathematics*, 1998, 13(3): 348 - 3498. (邢黎峰,孙明高,王元军.生物生长的 Richards 模型[J].生物数学学报,1998,13(3):348-349.)
- [2] CHENG M. Parameter estimation of richards model and its application [J]. *Mathematics in Practice and Theory*, 2010, 40(12): 139 - 140. (程毛林. Richards 模型参数估计及其模型应用[J]. 数学的实践及其认识, 2010, 40(12): 139 - 140.)
- [3] POLI R, KENNEDY J, BLACKWELL T. Particle swarm optimization: an overview [J]. *Swarm Intelligence*, 2007, 1(1): 33 - 57.
- [4] BIAN F. The research and application of hybrid swarm optimization algorithm for TSP [D]. Wuxi: Jiangnan University, 2008: 1 - 5. (卞峰. 粒子群优化算法在 TSP 中的研究及应用[D]. 无锡: 江南大学, 2008: 1 - 5.)
- [5] SU C, XU Z, WANG S. Application of PSO for parameter estimation of nonlinear system model [J]. *Information and Control*, 2005, 34(1): 123 - 125. (苏成利, 徐志成, 王树青. PSO 算法在非线性和系统模型参数估计中的应用[J]. 信息与控制, 2005, 34(1): 123 - 125.)
- [6] WANG H, FENG X, WANG N, et al. Detection of white foreign fibers based on improved particle swarm algorithm [J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2013, 29(23): 153 - 158. (王昊鹏, 冯显英, 王娜, 等. 基于改进的粒子群多阈值算法的白色异性纤维检测[J]. 农业工程学报, 2013, 29(23): 153 - 158.)
- [7] LI F, WU H, ZHU H, et al. Optimization of agricultural products recall based on modified particle swarm algorithm [J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2013, 29(7): 238 - 245. (李峰, 吴华瑞, 朱华吉, 等. 基于改进粒子群算法的农产品召回优化[J]. 农业工程学报, 2013, 29(7): 238 - 245.)
- [8] GAO F, TONG H. Parameter estimation for chaotic system based on particle swarm optimization [J]. *Acta Physica Sinica*, 2006, 55(2): 577 - 582. (高飞, 童恒庆. 基于改进粒子群优化算法的混沌系统参数估计方法[J]. 物理学报, 2006, 55(2): 577 - 582.)
- [9] ZHENG Y, CHEN S, LING H, et al. Multi-Agent based distributed computing framework for master-slave particle swarms [J]. *Journal of Software*, 2012, 23(11): 3000 - 3008. (郑宇军, 陈胜勇, 凌海风, 等. 多 Agent 主从粒子群分布式计算框架[J]. 软件学报, 2012, 23(11): 3000 - 3008.)
- [10] WEN T, SHENG G, GUO Q, et al. Web service composition based on modified particle swarm optimization [J]. *Chinese Journal of Computers*, 2013, 36(5): 1031 - 1045. (温涛, 盛国军, 郭权, 等. 基于改进粒子群算法的 Web 服务组合[J]. 计算机学报, 2013, 36(5): 1031 - 1045.)
- [11] RATNAWEEN A, HALGAMUGE S K, WATSON H C. Self-organizing hierarchical particle swarm optimizer with time-varying acceleration coefficients [J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2004, 8(3): 240 - 255.
- [12] BONABEAU E, DORIGO M, THERAULAZ G. *Swarm intelligence: from natural to artificial systems* [M]. New York: Oxford University Press, 1999: 10 - 30.
- [9] WANG G, ZHANG Q, HU J. Granular computing review [J]. *Journal of Intelligent Systems*, 2007, 6(2): 8 - 25. (王国胤, 张清华, 胡军. 粒计算综述[J]. 智能系统学报, 2007, 6(2): 8 - 25.)
- [10] MIAO D, FAN S. The calculation of knowledge granulation and its application [J]. *Journal of Systems Science and Information*, 2002, 22(1): 48 - 56. (苗夺谦, 范世栋. 知识的粒度计算及其应用[J]. 系统工程理论与实践, 2002, 22(1): 48 - 56.)
- [11] HANSEN P, JAUMARD B. Cluster analysis and mathematical programming [J]. *Mathematical Programming*, 1997, 79(1/2/3): 191 - 215.
- [12] KAUFMAN L, ROUSSEAUW P J. Agglomerative nesting (program AGNES) in finding groups in data: an introduction to cluster analysis [M]. Hoboken: Wiley Interscience, 2005: 3.
- [13] DAI M, WU Z, SHAO S, et al. GSM mobile communication network optimization [M]. Beijing: Posts and Telecom Press, 2003: 4. (戴美泰, 吴志忠, 邵世祥, 等. GSM 移动通信网络优化[M]. 北京: 人民邮电出版社, 2003: 4.)
- [14] HARTE L, BROMLEY B, DAVID M. Introduction to GSM: physical channels, logical channels, network functions, and operation [M]. Fuquay Varina: Althos Publishing, 2008.
- [15] WANG B, LU X, CHEN J, et al. Solving frequent point's allocation of GSM using EGA [J]. *Computer Technology and Development*, 2013, 23(2): 24 - 27. (王博岩, 卢肖, 陈洁, 等. 基于精英遗传算法的 GSM 网络频点优化设计[J]. 计算机技术与发展, 2013, 23(2): 24 - 27.)

(上接第 2815 页)