

Использование методов регрессии и аппроксимации для предиктивного планирования расхода биохимических реагентов

А.Н. Сидоров

Тюменский индустриальный университет, Тюмень

Аннотация: В статье рассмотрена проблема учета и планирования расходных материалов в клиничко-диагностических лабораториях в современное время. Представлены результаты использования методов аппроксимации (полиномиальная, экспоненциальная, ряд Фурье, функция Гаусса, степенная, рациональные полиномы, сумма синуса) и линейных регрессий для предиктивного планирования расхода биохимических реагентов. Проведен сравнительный анализ используемых методов с вычислением коэффициента детерминации (коэффициент достоверности).

Ключевые слова: регрессия, аппроксимация, исследование, критерий, полином, центрост, вероятность, детерминация, реагент, метрика, модель.

В настоящее время математические методы прогнозирования становятся более актуальными и популярными. Они широко применяются в различных областях, включая медицину [1]. Одной из проблем является оптимизация учета реагентов в клиничко-диагностических лабораториях в связи с трудностями в поставках расходных материалов. Поэтому решение данной проблемы становится важной задачей, которую можно решить с помощью разработки программно-математического комплекса на основе математического прогнозирования локальных показателей [2].

По полученным данным проведенных клиничко-диагностических исследований за 5 лет, ранее был проведен статистический анализ: определена плотность вероятности (соответствие нормальному закону распределения) и рассчитаны критерии значимости [3].

Для предиктивного планирования расхода биохимических реагентов, были использованы методы регрессии [4], аппроксимации целевой функции (количество проведенных биохимических анализов за период 60 месяцев).

Существует прямая корреляция между количеством проведенных исследований и количеством расходуемого реагента. Так на 1 рабочий буфер реагента приходится более 10 исследований, это зависит от производителя

реагентов и используемого оборудования для анализа (биохимический анализатор), поэтому необходимо оптимальное планирование для повышения эффективности работы клинико-диагностической лаборатории [5].

В данной работе рассмотрены различные методы аппроксимации функции с помощью средств Matlab [6, 7]:

1. Полиномиальная;
2. Экспоненциальная;
3. Ряд Фурье;
4. Функция Гаусса;
5. Степенная;
6. Рациональные полиномы;
7. Сумма синуса.

Таблица № 1

Сравнительный анализ методов по достоверности полученных результатов

№ п/п	Метод аппроксимации	Коэффициент детерминации, доля
1	Полином 9-ой степени	0,3255
2	Экспоненциальная (Сумма двух экспонент)	0,1076
3	Ряд Фурье	0,9223
4	Функции Гаусса	0,9435
5	Степенная	0,0690
6	Рациональные полиномы	-40,629
7	Сумма синуса	0,9395

Лучший результат получен с помощью Гауссовой модели, представляющей собой полином суммой семи квадратичных экспонент по формуле 1:

$$y = \sum_{i=1}^n a_i e^{\left[-\left(\frac{x-b_i}{c_i}\right)^2\right]} \quad (1)$$

Обозначения, используемые в формуле 1: a – это амплитуда, b – центроид, c – пиковая ширина.

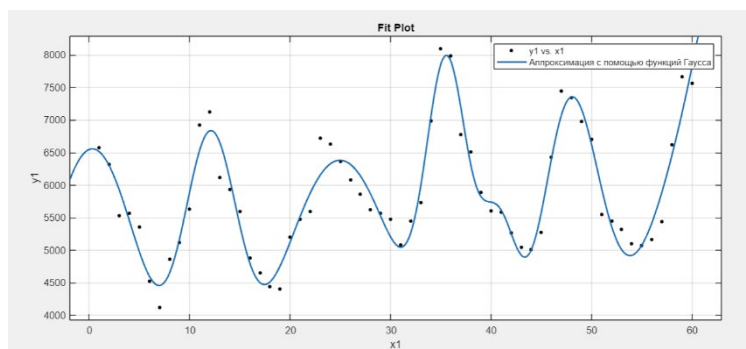


Рис. 1. – График аппроксимации с помощью функций Гаусса

На рис. 1 по оси абсцисс x_1 – количество месяцев целевой функции, по оси ординат y_1 – количество проведенных биохимических исследований. Коэффициент детерминации составляет 0.9435, что означает достаточно высокую точность аппроксимации, что соответствует нормальному закону распределения [8]. При уменьшении звеньев в полиноме, значительно уменьшается точность аппроксимации. Недостатками данной аппроксимации является ее громоздкость и ее будущее применение для выборок более 60 значений.

Также были рассмотрены методы линейной регрессии алгоритмов машинного обучения, лучшим из которых в данном случае является экспоненциальный гауссовский процесс регрессии (Exponential Gaussian Process Regression) [9].

Параметры модели: тренировочные данные 100%, валидация 0%, тест 0%, 5 предикторов, 1 целевая функция – количество проведенных биохимических анализов за 5 лет. На рис. 2 указан гауссовский процесс регрессии.

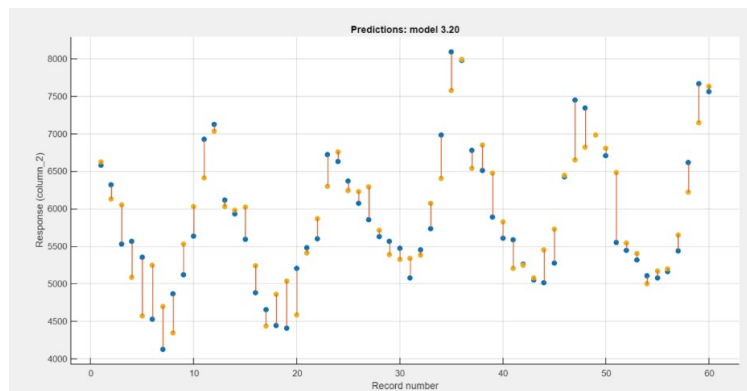


Рис. 2. – Гауссовский процесс регрессии

На рис. 2 по оси абсцисс количество месяцев целевой функции, по оси ординат количество проведенных биохимических исследований, синим цветом фактические значения, оранжевым цветом прогнозируемые значения. Коэффициент детерминации составляет 0.8397, что меньше, чем аппроксимация с помощью функций Гаусса.

Недостатком данной модели является малая выборка, отсутствие валидации и тестирования. Для улучшения коэффициента детерминации необходимо увеличение выборки.

Таким образом для повышения коэффициента детерминации при использовании методов машинного обучения необходимо провести дополнительный анализ важности метрик [10], влияющих на целевую функцию, взять данные большей периодичности, чтобы изменять соотношения параметров модели. В перспективе необходимо выяснить, что в данном случае будет более подходящим решением: анализ и прогнозирование с помощью статистических моделей временных рядов,

таких как Autoregressive Integrated Moving Average – ARIMA, Long Short-Term Memory – LSTM и др или использование машинного обучения [11].

Литература

1. Егоров Д. Б., Захаров С. Д., Егорова А. О. Современные методы анализа и прогнозирования временных рядов и их применение в медицине // Искусственный интеллект в здравоохранении. 2020. №1. – С. 21-26.
2. Куклина О. К., Михайлова Е. А., Яхина А. С. Программно-математическое обеспечение прогнозирования локальных показателей // Вестник Забайкальского государственного университета. 2015. №11. – С. 97-104.
3. Сидоров А. Н. Оценка соответствия данных о количестве проведённых клинико-диагностических исследований закону нормального распределения // Международная научно-техническая конференция молодых ученых БГТУ им. В. Г. Шухова. Белгород: 2025. С. 177-179.
4. Умеров А. Н., Шуршев В. Ф. Методы и программные средства аппроксимации экспериментальных данных // Нефтегазовые технологии и экологическая безопасность. 2005. №1. С. 97-104.
5. Яковлева Г. Е. Основные аспекты эффективной организации биохимических исследований // Ремедиум Приволжье. - 2015. - №8. - С. 35.
6. Хамитов Р. Н., Грицай А. С., Червенчук И. В., Синицин Г. Э. Исследование методов аппроксимации для решения задачи краткосрочного прогнозирования суточного электропотребления // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Технические науки. 2016. №4. С. 91-97.
7. Di Y., Li M., Qiao T., Lu N. Edge detection and mathematic fitting for corneal surface with Matlab software // International Journal of Ophthalmology. 2017. V. 10. №. 3. pp. 336-342.

8. Власов А. И., Юлдашев М.Н. Гауссовские процессы в регрессионном анализе состояний беспроводной сенсорной сети с учетом электромагнитных помех // Технологии электромагнитной совместимости. 2017. №3. С. 35-43.

9. Lacouture Y., Cousineau D. How to use MATLAB to fit the ex-Gaussian and other probability functions to a distribution of response times // Tutorials in Quantitative Methods for Psychology. 2008. V. 4. №. 1. pp. 35-45.

10. Билалов Т. Р., Лаврухина Д. А., Павлов А. Д., Шлеймович М. П. Прогнозирование процесса растворимости вещества в сверхкритических флюидах на основе машинного обучения // Инженерный вестник Дона, 2025, №4 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2025/10017.

11. Аббакумов А. А., Ямашкин С. А., Карнетов В. Г., Рощихин Д. С. Прогнозирование спроса и управления запасами с помощью машинного обучения // Инженерный вестник Дона, 2025, №6 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n6y2025/10157/.

References

1. Egorov D. B., Zakharov S. D., Egorova A. O. Iskusstvennyy intellekt v zdavookhranenii. 2020. №1. pp.21-26.

2. Kuklina O. K., Mikhaylova E. A., Yakhina A. S. Vestnik Zabaykalskogo gosudarstvennogo universiteta. 2015. №11. pp. 97-104.

3. Sidorov A. N. Mezhdunarodnaya nauchno-tekhnicheskaya konferentsiya molodykh uchenykh BGTU im. V. G. Shukhova. Belgorod: 2025. pp. 177-179.

4. Umerov A. N., Shurshev V. F. Neftegazovye tekhnologii i ekologicheskaya bezopasnost. 2005. №1. pp. 97-104.

5. Yakovleva G. E. Remedium Privolzhye. 2015. №8. pp. 35.

6. Khamitov R. N., Gritsay A. S., Chervenchuk I. V., Sinitsin G. E. Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Seriya: Tekhnicheskiye nauki. 2016. №4. pp. 91-97.



7. Di Y., Li M., Qiao T., Lu N. International Journal of Ophthalmology. 2017. V. 10. №. 3. pp. 336-342.
8. Vlasov A. I., Yuldashev M.N. Tekhnologii elektromagnitnoy sovместимости. 2017. №3. pp. 35-43.
9. Lacouture Y., Cousineau D. Tutorials in Quantitative Methods for Psychology. 2008. V. 4. №. 1. pp. 35-45.
10. Bilalov T. R., Lavrukhina D. A., Pavlov A. D., Shleymovich M. P. Inzhenernyj vestnik Dona. 2025. №4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2025/10017.
11. Abbakumov A. A., Yamashkin S. A., Karnetov V. G., Roshchikhin D. S. Inzhenernyj vestnik Dona. 2025. №6. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n6y2025/10157/.

Авторы согласны на обработку и хранение персональных данных.

Дата поступления: 27.10.2025

Дата публикации: 13.11.2025