

01;12

Новый метод обработки экспериментальных данных на основе теории оптимального управления

© К.Н. Козлов,¹ А.М. Самсонов²¹ Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 19 мая 2003 г.)

Задача выбора наилучшего набора параметров заданной математической модели, хорошо описывающей полученные независимо экспериментальные данные, сформулирована в рамках теории оптимального управления. Минимизируется сумма квадратов отклонений полученных экспериментальных данных от их аналогов, найденных в результате вычислений в рамках некоторой заданной математической модели процесса. Получено решение задачи, выведены необходимые условия оптимальности выбора параметров математической модели, приводится обобщение алгоритма на случай наличия штрафной функции, предложен эффективный способ учета ограничений в виде неравенств. Алгоритм был апробирован в задачах о нахождении коэффициента теплопроводности монокристалла в классическом опыте Иоффе, коэффициента температуропроводности тонкой пластины и при поиске параметров экспрессии генов в процессе развития эмбриона дрозофилы.

Введение

Предположим, что математической моделью физического процесса служит некая краевая задача для системы уравнений с заданным типом дифференциального оператора и граничными (начальными) условиями. При проведении экспериментов для проверки модели коэффициенты уравнений неоднородные слагаемые в уравнениях и граничных условиях оказываются неизвестными (либо частично известными) и должны быть найдены так, чтобы данная модель хорошо описывала полученные независимо экспериментальные данные. Часто эту задачу решают при помощи наилучшего набора параметров краевой задачи (коэффициентов уравнений, функции источника и т.п.) среди всех возможных при заданных условиях. Если простейшая интерполяция не приводит к цели, то такая задача может быть сформулирована в рамках теории оптимального управления. Разработка такого подхода к обработке экспериментальных данных и является целью настоящей работы.

Для определения феноменологических параметров модели можно использовать такое приближение к данным, полученным экспериментально, которое строится с помощью метода наименьших квадратов. Тогда с точки зрения теории оптимального управления минимизируемый функционал качества модели есть сумма квадратов отклонений заданных экспериментальных данных от аналогичных величин, полученных путем независимых вычислений в рамках заданной математической модели. При этом суммируются отклонения всех величин во все моменты времени, в которые эти величины определены в опытах. Такой функционал может иметь несколько локальных минимумов, содержать при необходимости дополнительную штрафную функцию, и на некоторые

параметры задачи могут быть наложены ограничения в виде неравенств.

Подобная задача в простейшей постановке была кратко рассмотрена в [1], где приведено подробное описание и обобщение алгоритма на случай присутствия штрафной функции и предложен эффективный способ учета ограничений в виде неравенств.

1. Постановка задачи

Пусть известны значения некоторой векторной функции $y(t_i) = (y_0(t_i), \dots, y_{K-1}(t_i))^T$, характеризующей состояние системы в разные моменты времени. Здесь верхний индекс T означает транспонирование, $i = 1, \dots, J$, где J — общее число моментов времени, для которых получены независимые экспериментальные данные; K — количество переменных состояния исследуемой системы. Будем считать, что задана система дифференциальных уравнений первого порядка по независимой переменной t , зависящая от вектора параметров $q = (q_0, \dots, q_{I-1})^T$, где I есть число параметров,

$$\frac{\partial v}{\partial t} = f(v, q); \quad v(0) = v_0, \quad (1)$$

описывающая поведение физической системы при экспериментах, и задано начальное условие. Левая часть в (1) представляет собой вектор размерности K из производных по времени функций $v(t, q)$, характеризующих переменные состояния, а правая часть — вектор-функцию $f(v, q)$. При необходимости в задачу может быть дополнительно введена некоторая штрафная функция $P(q)$.

Введем I_l — множество индексов параметров, для которых определены ограничения в виде неравенств

$$q_i^{\text{low}} \leq q_i \leq q_i^{\text{up}} \quad i \in I_l \subset I. \quad (2)$$

Задача оптимального управления состоит теперь в таком выборе параметров, чтобы функционал качества — некоторая мера отклонения измеренных данных от рассчитанных в рамках независимой модели физического явления, например

$$\begin{aligned} F(v, q) &= \sum_{i=1}^J (v(t_i, q) - y(t_i))^T (v(t_i, q) - y(t_i)) + P(q) \\ &= \varphi(v_1, \dots, v_J) + P(q), \\ v_i &= v(t_i, q), \end{aligned} \quad (3)$$

принимал наименьшее возможное значение.

Заметим, что многие задачи математической физики, сформулированные в виде дифференциальных уравнений высокого порядка, могут быть приведены к нормальной форме, а именно к системе уравнений первого порядка с дополнительными параметрическими переменными (специальной системе Пфаффа) [2]. Это оправдывает выбор системы уравнений (1) в качестве основной для рассматриваемой задачи.

Поиск минимума функционала качества основан на выводе необходимых условий стационарности первого порядка. Для их получения для системы общего вида (1) удобно применить метод множителей Лагранжа, но при этом необходимо включить неравенства (2), которыми ограничены управляющие параметры, в расширенный функционал качества, что требует преобразования условий типа неравенств (2) в уравнения.

2. Необходимые условия минимума

Для вывода необходимых условий стационарности заданного функционала качества (3) (условий „оптимальности“) надо ввести дополнительные управления u_i так, чтобы для них можно было записать эквивалентные равенства. В силу неоднозначного выбора этих уравнений будут рассмотрены алгебраическое и тригонометрическое преобразования неравенств в эквивалентные равенства.

1) Алгебраическое преобразование ограничений типа неравенств. Заменим ограничения в виде неравенств (2) алгебраическими равенствами [3]

$$\xi_i = (q_i - q_i^{\text{low}})(q_i^{\text{up}} - q_i) - u_i^2 = 0. \quad (4)$$

Ясно, что условие $u_i = 0$ будет выполнено, если исходный параметр принимает одно из заданных граничных значений $q_i = q_i^{\text{low}}$ или $q_i = q_i^{\text{up}}$, а любому $u_i \neq 0$ отвечает промежуточное значение управляющего параметра $q_i^{\text{low}} < q_i < q_i^{\text{up}}$.

Введем векторную функцию множителя Лагранжа $\psi(t)$ для включения уравнений (1) и нужное количество множителей Лагранжа μ_i для учета ограничений типа неравенств, преобразованных в (4), и запишем расширенный функционал задачи

$$\begin{aligned} L &= \varphi(v_1, \dots, v_J) + \sum_{i=0}^{J-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \psi^T(t) \left(-\frac{\partial v}{\partial t} + f(v, q) \right) dt \\ &\quad + \mu^T \xi + P(q), \end{aligned} \quad (5)$$

где для всех $i \in I_l$ введен вектор $\mu = \{\mu_i\}$, векторная функция $\xi(q, u) = \{\xi_i(q, u)\}$ и $u = \{u_i\}$.

Теперь ограничения включены в расширенный функционал, он достигает экстремума одновременно с (3), что позволяет воспользоваться стандартной процедурой для вывода необходимых условий стационарности.

Вычислив первую вариацию функционала качества — меры отклонения измеренных данных от рассчитанных

$$\delta F = \frac{\partial \varphi}{\partial v_1} \delta v_1 + \dots + \frac{\partial \varphi}{\partial v_J} \delta v_J + \left(\frac{\partial P}{\partial q} \right)^T \delta q \quad (6)$$

и первую вариацию дифференциальных связей, т. е. уравнений модели (1)

$$-\frac{\partial \delta v}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial v} \delta v + \frac{\partial f}{\partial q} \delta q = 0, \quad (7)$$

запишем первую вариацию функции Лагранжа в виде

$$\begin{aligned} \delta L &= \sum_{i=1}^J \frac{\partial \varphi}{\partial v_i} \delta v_i + \sum_{i=0}^{J-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \psi^T(t) \left(-\frac{\partial \delta v}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial v} \delta v \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial f}{\partial q} \delta q \right) dt + \mu^T \left(\frac{\partial \xi}{\partial q} \delta q + \frac{\partial \xi}{\partial u} \delta u \right) + \left(\frac{\partial P}{\partial q} \right)^T \delta q, \end{aligned} \quad (8)$$

где введен вектор $\partial P / \partial q$ с компонентами $\partial P / \partial q_i$.

Интегрируя (8) по частям, получим

$$\begin{aligned} \delta L &= \sum_{i=1}^J \frac{\partial \varphi}{\partial v_i} \delta v_i + \sum_{i=0}^{J-1} [\psi^T(t_i + 0) \delta v_i - \psi^T(t_{i+1} - 0) \delta v_{i+1}] \\ &\quad + \left(\frac{\partial P}{\partial q} \right)^T \delta q + \sum_{i=0}^{J-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \left[\left(\psi^T \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{\partial \psi^T}{\partial t} \right) \delta v + \psi^T \frac{\partial f}{\partial q} \delta q \right] dt \\ &\quad + \mu^T \left(\frac{\partial \xi}{\partial q} \delta q + \frac{\partial \xi}{\partial u} \delta u \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь через $\psi(t_i + 0)$ и $\psi(t_{i+1} - 0)$ обозначены правый и левый пределы множителей Лагранжа $\psi(t)$ в тех промежуточных точках, где имеются экспериментальные данные, поэтому значения множителей Лагранжа (функций) $\psi(t)$ изменяются скачкообразно.

Запишем теперь необходимые условия первого порядка для минимума функционала качества [4], используя условие стационарности $\delta L = 0$,

$$\frac{\partial f}{\partial v} \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 \quad \forall \quad t \in [t_i, t_{i+1}); \quad (10)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial v_i} - \psi(t_i - 0) + \psi(t_i + 0) = 0, \quad (11)$$

$$i = 1, \dots, (J - 1);$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial v_J} - \psi(t_J) = 0; \quad (12)$$

$$\mu_i u_i = 0, \quad i \in I_1. \quad (13)$$

Эта система уравнений замыкает задачу минимизации отклонения измеренных экспериментальных данных от рассчитанных по решению данной краевой задачи.

Таким образом, условие стационарности может быть переписано в виде векторного равенства для градиента ξ функции Лагранжа;

$$\xi(v, q) \equiv \int_{t_0}^{t_f} \psi^T \frac{\partial f}{\partial q} dt + \frac{\partial P}{\partial q} + \mu^T \frac{\partial \xi}{\partial q} = 0. \quad (14)$$

2) Описание алгоритма численного решения задачи. Предположим, что задан некоторый набор из I параметров q , физический процесс описывается системой уравнений вида (1) и необходимо найти такие коэффициенты уравнений, чтобы решение математической модельной задачи в каждой точке интервала минимально отличалось от результата измерений. Тогда алгоритм решения задачи (1)–(3) состоит из следующих шагов.

1. Интегрируется уравнение (1).

2. Интегрируется уравнение (10) в обратном времени от t_J до t_0 с учетом начального условия (12) и условий (11) в тех промежуточных точках, где заданы экспериментальные данные.

3. Рассчитывается градиент параметров $\xi^k = \xi(v^k, q^k)$ по формуле (14).

4. Условие (13) для множителей Лагранжа, отвечающих алгебраическим связям для дополнительных управлений u_i , удовлетворяется следующим образом. Если для некоторого параметра q_i в (2) выполнено строгое неравенство, то тогда $\mu_i = 0$, в противном случае $u_i = 0$, и значение μ_i выбирается таким образом, чтобы новое значение параметра q_i было допустимым.

5. Находятся новые значения параметров q^{k+1} по формуле

$$q^{k+1} = q^k - \alpha^k \xi^k, \quad (15)$$

где k — номер итерации; α^k — параметр, который выбирается так, чтобы на каждом шаге значение функционала (3) уменьшалось.

Шаги 1–5 циклически повторяются вплоть до выполнения заданного условия точности вычислений, напри-

мер, пока само значение функционала не станет меньше некоторой заданной величины. Полученный на последнем шаге вектор параметров q^N определяет решение задачи.

3) Тригонометрическое преобразование ограничений. В теории оптимального управления часто применяется замена управляющих параметров q_i , для которых заданы условия в виде неравенств (2), на новые управления u_i посредством тригонометрических соотношений, например

$$u_i = \alpha_i + \beta_i \sin(\gamma q_i), \quad (16)$$

где свободный множитель γ выбирается из условия улучшения сходимости при численных экспериментах, а константы α и β определяются через верхний и нижний пределы исходных управлений следующим образом:

$$\alpha_i = (q_i^{\text{up}} + q_i^{\text{low}})/2; \quad \beta_i = (q_i^{\text{up}} - q_i^{\text{low}})/2.$$

Очевидно, такое преобразование не единственно, поэтому имеет смысл рассматривать и другое финитное представление

$$u_i = \alpha_i + \beta_i \text{th}(\gamma q_i). \quad (17)$$

Эти преобразования нужны не для всех q_i , а только для тех, которые должны удовлетворять условиям (2). Таким образом, вместо (1) получим после преобразования

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \bar{f}(v, \bar{q}, u), \quad (18)$$

где $\bar{q} = \{q_i\}$, причем $i \notin I_1$, а в то же время $u = \{u_i\}$ при $i \in I_1$.

Переобозначим $\{u_i\}$ через $\{q_i\}$, где $i \in I_1$, тогда (18) можно снова записать в форме (1), где $q = \{q_i\}$ и $i = 0 \dots I - 1$.

Для вывода необходимых условий минимума функционала отклонений измеренных значений от вычисленных запишем функцию Лагранжа

$$L = \varphi(v_1, \dots, v_J) + \sum_{i=0}^{J-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \psi^T(t) \left(-\frac{\partial v}{\partial t} + f(v, q) \right) dt + P(q), \quad (19)$$

где $\psi(t)$, как и при алгебраическом преобразовании, обозначена вектор-функция множителей Лагранжа.

Теперь не требуется введения дополнительных множителей для включения в расширенный функционал ограничений в виде неравенств, так как они включены в уравнения.

Стандартная процедура для вывода необходимых условий минимума приводит к формуле для первой

вариации лагранжиана задачи после интегрирования по частям в виде

$$\delta L = \sum_{i=1}^J \frac{\partial \varphi}{\partial v_i} \delta v_i + \sum_{i=0}^{J-1} [\psi^T(t_i+0) \delta v_i - \psi^T(t_{i+1}-0) \delta v_{i+1}] + \sum_{i=0}^{J-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \left[\left(\psi^T \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \delta v + \psi^T \frac{\partial f}{\partial q} \delta q \right] dt + \left(\frac{\partial P}{\partial q} \right)^T \delta q. \tag{20}$$

Необходимые условия минимума в силу условия стационарности $\delta L = 0$ имеют вид

$$\frac{\partial f}{\partial v} \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 \quad \forall t \in [t_i, t_{i+1}); \tag{21}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial v_i} - \psi(t_i - 0) + \psi(t_i + 0) = 0, \tag{22}$$

$i = 1, \dots, (J - 1);$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial v_J} - \psi(t_J) = 0. \tag{23}$$

Таким образом, условие стационарности может быть записано в виде векторного равенства

$$\xi(v, q) = 0. \tag{24}$$

где ξ — градиент функции Лагранжа

$$\xi(v, q) = \int_{t_0}^{t_f} \psi^T \frac{\partial f}{\partial q} dt + \frac{\partial P}{\partial q}. \tag{25}$$

4) Алгоритм численного решения при тригонометрическом преобразовании ограничений. Пусть дан некоторый набор параметров q . Тогда алгоритм задачи (1)–(3) будет включать следующие шаги.

Предположим, что задан некоторый набор из I параметров q , физический процесс описывается системой уравнений вида (1) и необходимо найти такие коэффициенты уравнений, чтобы решение математической модельной задачи в каждой точке интервала минимально отличалось от результата независимых измерений. Тогда алгоритм решения задачи (1)–(3) будет включать следующие шаги.

1. Интегрируется система (1) с заданной точностью.
2. Интегрируется сопряженная система (21) в обратном времени от момента t_f до t_0 с учетом (23) и (22).
3. Вычисляется градиент параметров $\xi^k = \xi(v^k, q^k)$ по формуле (24).
4. Находятся новые значения параметров q^{k+1} по формуле

$$q^{k+1} = q^k - \alpha^k \xi^k, \tag{26}$$

где k — номер итерации; шаг градиентного метода α^k выбирается таким образом, чтобы на каждом шаге значение функционала (3) уменьшалось.

Шаги 1–4 повторяются до тех пор, пока не будет удовлетворен критерий точности вычислений, например, пока значение функционала не станет меньше некоторой заданной величины. Полученный на последнем шаге вектор параметров q^N дает решение задачи.

При сравнении с разделом 2.2 видно, что теперь нет необходимости в описанном там шаге 4, так как теперь ограничения автоматически учтены в новом расширенном функционале.

3. Численные эксперименты в задачах теплопроводности

Простым примером рассматриваемой задачи служит определение температурных полей в образце и определение по ним коэффициентов соответствующих уравнений. Покажем применимость предлагаемого метода обработки данных для определения коэффициента теплопроводности (или температуропроводности) образца по значениям температуры, измеряемым при эксперименте.

1) Определение теплопроводности монокристалла. Для проверки работы метода используем классические результаты А.Ф. Иоффе и А.В. Иоффе [5] по определению теплопроводности некоторых монокристаллов. Предположим, как и в [5], что условия опыта удовлетворяют обычному уравнению теплопроводности

$$\frac{\partial T(\tau, x)}{\partial \tau} = \frac{k}{c} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \tag{27}$$

где τ — время, x — пространственная координата, T — температура образца, k — коэффициент теплопроводности образца, c — теплоемкость образца.

Надо найти коэффициент теплопроводности k , такой чтобы отклонение решения (27) от экспериментальной кривой было бы минимальным в указанном ранее смысле.

Опыт Иоффе проводился с монокристаллом NaCl, помещенным между двумя медными блоками, имевшими в начале опыта одинаковую температуру. Затем нижний блок погружался в охлаждающую смесь или жидкий воздух. Одна термopара измеряла разность температур ($T_1 - T_2$) между блоками, другая — температуру T_2 верхнего блока по отношению к комнатной температуре (T_0). Наблюдения показаний обеих термopар фиксировались каждые 30 s в течение $\tau_{\text{end}} = 7 \text{ min}$ и сведены в таблицу, часто которой приведена здесь для удобства в табл. 1.

При использовании этой таблицы из [5] необходимо ввести два предположения. Во-первых, так как в опыте были приняты меры по предотвращению потерь тепла, то мы будем считать, что можно ограничиться рассмотрением одномерной задачи и направить ось x перпендикулярно границам между блоками и образцом от „теплого“ блока к „холодному“, т.е. сверху вниз. Во-вторых, так как в опыте градиент температуры медленно меняется, то предположим, что значение температуры в точках $x = 0$ и $x = L$, где проводились измере-

Таблица 1. Экспериментальные данные для определения теплопроводности образца NaCl из [5]

№	τ	$T_1 - T_2$	T_2
1	1	7.7	0.22
2	1'30	10.7	1.5
3	2	12.3	3.2
4	2'30	13.4	5.0
5	3	13.9	6.85
6	3'30	14.2	8.75
7	4	15.0	10.7
8	4'30	15.2	12.75
9	5	16.1	14.80
10	5'30	16.3	16.85
11	6	16.7	18.95
12	6'30	16.8	21.0
13	7	16.8	23.1

Таблица 2. Абсолютные значения температуры

№	τ	T_2	T_1
1	0	24	24
2	1	23.78	16.08
3	1'30	22.5	11.8
4	2	20.8	8.5
5	2'30	19	5.6
6	3	17.5	3.25
7	3'30	15.25	1.05
8	4	13.3	-1.7
9	4'30	11.25	-3.95
10	5	9.2	-6.9
11	5'30	7.15	-9.15
12	6	5.05	-11.65
13	6'30	3	-13.80
14	7	0.9	-15.9

ния, можно линейно интерполировать по времени. При этом точка $x = 0$ лежит на границе „теплого“ блока и образца, а точка $x = L$, где $L = 0.64$ см — образца и „холодного“ блока.

Учтем, что в начале опыта вся установка имела температуру $T_0 = 24^\circ\text{C}$ и составим теперь таблицу с абсолютными значениями температуры (табл. 2).

Дискретизируем уравнение (27) по пространству, введем равномерную сетку $\{x_i = i \cdot h, h = L/(K - 1)\}$, где $i = 0, \dots, K - 1$, и учтем, что распределение температур будет зависеть от коэффициента теплопроводности параметрически. Запишем систему дифференциально-разностных уравнений (28)

$$\frac{\partial T(\tau, x_i, k)}{\partial \tau} = \frac{k}{c} (T(\tau, x_{i-1}, k) - 2T(\tau, x_i, k) + T(\tau, x_{i+1}, k)); \quad i = 1, \dots, K - 2 \quad (28)$$

с начальным условием

$$T(0, x_i, k) = T_0; \quad i = 0, \dots, K - 1 \quad (29)$$

и граничными условиями

$$T(\tau, x_0, k) = T_2(\tau); \quad \forall \tau \in [0, \tau_{\text{end}}]; \quad (30)$$

$$T(\tau, x_{K-1}, k) = T_1(\tau); \quad \forall \tau \in [0, \tau_{\text{end}}], \quad (31)$$

содержащую один неизвестный параметр — теплопроводность k .

Сумма квадратов разностей температур в момент окончания эксперимента во всех точках, рассчитанных с помощью модели (27) и полученных при экспериментах

$$F(k) = \sum_{i=1}^{K-2} (T(\tau_{\text{end}}, x_i, k) - T(\tau_{\text{end}}, x_i))^2, \quad (32)$$

представляет собой функционал качества в задаче обработки опытных данных.

К сожалению, функция $\bar{T}(\tau_{\text{end}}, x)$ в работе [5] известна только в двух точках $x = 0$ и $x = L$. Так как для граничных условий выбрана линейная аппроксимация, то по уравнению (27) можно предположить, что вторая производная по пространству постоянна и, следовательно, сама функция квадратична по координате x . В качестве функции $\bar{T}(\tau_{\text{end}}, x)$ была взята парабола вида $ax^2 + bx$, так как по двум точкам можно определить только два коэффициента.

Был проведен расчет с 40 различными случайно выбранными начальными приближениями, равномерно распределенными на отрезке (0.005; 0.025), и результаты превзошли ожидания. Среднее значение рассчитанного коэффициента теплопроводности составило $k = 0.012$ против $k = 0.013$, полученного в работе Иоффе. Отклонение (интегральное) расчетных данных от измеренных (значение функционала качества) составило $9 \cdot 10^{-3}$ в конце расчета.

На рис. 1 представлен типичный график сходимости для задачи определения коэффициента теплопроводности монокристалла.

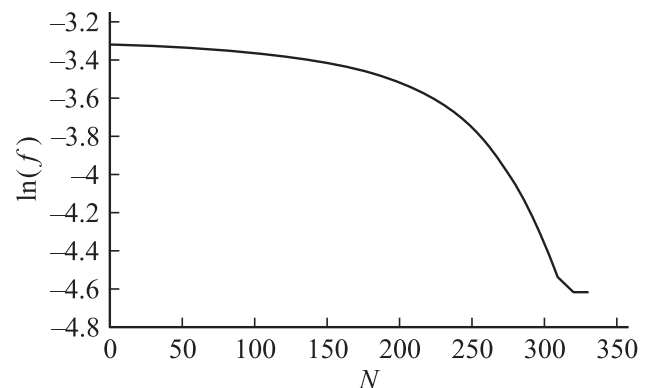


Рис. 1. Зависимость сходимости по функционалу от количества итераций при определении коэффициента теплопроводности. По оси абсцисс отложен номер итерации, по оси ординат — натуральный логарифм значения функционала качества.

2) Определение коэффициента температуропроводности пластины. В качестве второго примера рассмотрим задачу в [6] по определению коэффициента температуропроводности пластины толщиной $h = 10$ см; на одной поверхности которой температура равна T_{av} , а на другой и в середине образца испытуемого материала амплитуды колебаний температуры составляют $T_{II} = 10^\circ\text{C}$ и $T_x = 8^\circ\text{C}$ соответственно. Период колебаний τ_0 равен 1 h.

Коэффициент температуропроводности в [6] был найден с помощью графика критерия Фурье Fo и оказался равным $a = 0.009$ м²/h.

Формализуем постановку задачи для применения метода. Изменение температуры описывается уравнением

$$\frac{\partial T(\tau, x)}{\partial \tau} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (33)$$

где τ — время, x — пространственная координата, T — температура образца, a — коэффициент температуропроводности образца.

Дискретизируем уравнение (33) по координате x , введем равномерную сетку $\{x_i = i \cdot r, \quad r = h/(K-1)\}$, где $i = 0, \dots, K-1$, и учтем, что распределение температур будет зависеть от коэффициента температуропроводности как от параметра. Получим систему дифференциально-разностных уравнений

$$\frac{\partial T(\tau, x_i, a)}{\partial \tau} = a(T(\tau, x_{i-1}, a) - 2T(\tau, x_i, a) + T(\tau, x_{i+1}, a)) \quad i = 1, \dots, K-2 \quad (34)$$

с начальным условием

$$T(0, x_i, a) = T_{av}; \quad i = 0, \dots, K-1 \quad (35)$$

и граничными условиями

$$T(\tau, x_0, a) = T_{av} + T_{II} \sin\left(2\pi \frac{\tau}{\tau_0}\right); \quad \forall \tau \in [0, \tau_{\text{end}}]; \quad (36)$$

$$T(\tau, x_{K-1}, a) = T_{av}; \quad \forall \tau \in [0, \tau_{\text{end}}], \quad (37)$$

содержащую один неизвестный параметр — коэффициент температуропроводности a .

Дополнительным условием, позволяющим записать функционал качества, является известная зависимость температуры в центре образца от времени $\bar{T}(\tau, h/2)$. Хотя в условии задачи явно не указан период этих колебаний, его нельзя принять равным τ_0 , так как в этом случае коэффициент температуропроводности стал бы неограниченно возрастать. Предположим, что период колебаний температуры в середине образца есть $\tau_{h/2} = 2\tau_0$, и выберем $\tau_{\text{end}} = \tau_0/2$. Принимая во внимание то, что пластина тонкая, а режим квазиустановившийся [6], интерполируем значения температуры по x между точками $x = 0$, $x = h/2$ и $x = h$ линейно и обозначим

полученное таким путем распределение температуры $\bar{T}(\tau_{\text{end}}, x)$. Тогда функционал качества примет вид

$$F(a) = \sum_{i=1}^{K-2} (T(\tau_{\text{end}}, x_i, a) - \bar{T}(\tau_{\text{end}}, x_i))^2. \quad (38)$$

Результаты расчетов хорошо совпадают с найденным в [6]. Были проведены расчеты в 20 различными случайно выбранными начальными приближениями, равномерно распределенными на отрезке (0.0006; 0.018). Средние значения коэффициента температуропроводности составило $a = 0.0094$ против $a = 0.0090$ из [6]. Значение функционала качества составило 23.63 в конце расчетов.

Численные эксперименты по обработке данных в задаче молекулярной биологии

Сравнительно новой областью применения предлагаемого алгоритма могут быть разнообразные задачи обработки очень больших массивов данных эксперимента, например одновременный поиск сотен феноменологических параметров в математических задачах молекулярной биологии и геномики, в частности в модели генных цепей. Концентрации белков сильно меняются при развитии биологического объекта и измеряются с большой точностью, проблемой является сопоставление этих данных с рассчитанными по какой-либо из современных теоретических моделей. В рамках одной из них динамика системы описывается сильно нелинейными уравнениями реакции-диффузии (НРД), содержащими пятьдесят и более параметров, на значительную часть которых наложены ограничения в виде неравенств.

В [1] была приведена подробная математическая формулировка задачи молекулярной биологии о детерминации сегментов в стандартной биологической системе — эмбрионе плодовой мушки (*Drosophila melanogaster*), которая описывается системой дифференциальных уравнений НРД

$$\frac{\partial v_i^a}{\partial t} = R^a g(w_i^a) + D^a [(v_{i+1}^a - v_i^a) + (v_{i-1}^a - v_i^a)] - \lambda^a v_i^a, \quad (39)$$

где аргументом функции g служит выражение

$$w_i^a = \sum_{j=0}^{N-1} T^{aj} v_i^j + m^a v_i^{\text{bcd}} + h^a.$$

Основой этой модели является матрица \mathbf{T} , описывающая генную цепь, элементы T^{aj} которой характеризуют влияние концентрации белка — продукта одного гена на концентрацию белка — продукта другого гена с помощью числа для каждой возможной пары a и j .

Таблица 3. Результаты расчетов (см. пояснения в тексте)

Значение функционала	2	3	4	5	6
< 1	2(7229)	Нет	Нет	Нет	100(512621)
< 10	13(48840)	3(77896)	"	3(449563)	Нет
< 50	41(46000)	9(31755)	21(56027)	27(96432)	"
< 100	50(52341)	9(31755)	39(54134)	33(123410)	"
> 100	50(69730)	91(69873)	61(98863)	67(301301)	"

Управляющие воздействия белка Bicoid-продукта материнского гена *bcd* учтены в уравнениях как внешнее возмущение, заданное параметром m^a , параметр h^a характеризует пороговое значение регуляторного воздействия.

Пусть позиция ядра на продольной оси эмбриона определяется индексом i и каждое ядро содержит копию регулярной цепи из N генов, определяемой матрицей T размера $N \times N$.

Первое слагаемое в правой части уравнения (39) описывает регуляцию гена и синтез белка, параметр R^a задает уровень синтеза. Второе слагаемое отвечает за обмен продуктами генов (белками) между соседними ядрами, параметр D^a отвечает за интенсивность обмена. Параметр λ^a определяет период полураспада белка, а третье слагаемое описывает распад продуктов генов.

Дифференциальные связи, соответствующие функции f в (1), описываются системой нелинейных уравнений типа (39). Целью численного моделирования является получение $N(N+5)$ параметров системы, где N — число генов.

Экспериментально наблюдаемыми являются картины активности генов, которые, по предположению, совпадают с решениями уравнений типа (39). Искомым является такой набор параметров, который дает наиболее близкое приближение решений этих уравнений к экспериментально наблюдаемым данным. Как и ранее, необходимо минимизировать сумму квадратов разностей между концентрациями всех белков, вычисленных по методу генных цепей, и полученных в независимом эксперименте. Сумма берется по всем ядрам и всем моментам времени, для которых имеются опытные данные.

1) Проверка работоспособности метода. Применим описанный нами выше метод для обработки данных и нахождения феноменологических параметров модели, содержащей систему из сотен уравнений НРД вида (39).

Для проверки состоятельности метода рассмотрим систему, описывающую регуляторную цепь всего из двух генов, что приводит к тестовому примеру из 16 уравнений, содержащих $2(2+5) = 14$ параметров.

Выберем некоторый набор параметров и решим прямую задачу, т.е. проинтегрируем систему (1). Будем считать известными значениями функции $y(t_i) = (y_0(t_i), \dots, y_{K-1}(t_i))^T$ те величины $v(t_i, q) = (v_0(t_i, q), \dots, v_{K-1}(t_i, q))^T$, которые вычислены в выбранном числе точек $J, i = 1, \dots, J$ данного интервала времени. Будем называть такие данные искусственными и, используя их, попробуем восстановить исходный набор параметров. В этом случае значение функционала качества в точке глобального минимума известно и равняется нулю, что позволяет оценить качество решения по значению функционала.

Пусть на 6 параметров, входящих в уравнения вида (39) линейно, наложены ограничения в виде неравенств. Введем экспоненциально возрастающую штрафную функцию, зависящую от комплекса, составленного из остальных 8 параметров, и решим численно задачу минимизации отклонений так, как это описано ранее.

Расчет был проведен для 100 различных начальных приближений, выбранных случайным образом и равномерно распределенных в пространстве параметров. Для каждой начальной точки были получены несколько результатов с помощью: метода случайного поиска (simulated annealing) [7] и градиентного метода, в котором для преобразования ограничений типа неравенств использовались алгебраическое преобразование, тригонометрические \sin -преобразование и th -преобразование с различными коэффициентами γ .

Критерий остановки вычислений формулировался следующим образом: если значение функционала на каждом из заданного количества шагов менялось менее, чем на заданную величину, то вычисления прекращались и полученный на последнем шаге набор параметров q считался оптимальным.

Численные результаты, представленные в табл. 3, полностью согласуются с теорией. В столбцах 2–6 приведено количество попыток (начальных точек) в процентах от общего числа, которые привели к значению функционала, попадающему в указанный в первом столбце промежуток. В скобках дано среднее для этих попыток количество интегрирований системы уравнений, которое характеризует затраты машинного времени.

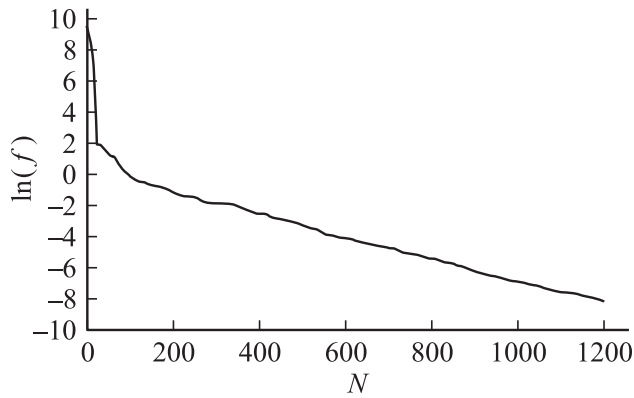


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, при определении феноменологических параметров задачи молекулярной биологии.

Столбец 6 соответствует методу случайного поиска, столбец 5 — градиентному методу с алгебраическим преобразованием ограничений, столбцы 3 и 4 — градиентному методу с тригонометрическими тангенс- и синус-преобразованиями ограничений соответственно.

Была показана зависимость оптимальной точки и числа шагов от начального приближения. Для каждой начальной точки были проведены расчеты с применением тангенс-преобразования с различными произвольными коэффициентами γ , затем среди полученных результатов для каждой точки был выбран наилучший. Обобщение этих расчетов приведено в столбце 2.

Основные выводы из результатов расчетов таковы.

Предлагаемый модифицированный градиентный метод может быть успешно использован для отыскания минимума функционала качества в задаче обработки больших массивов экспериментальных данных.

При удачном выборе начальной точки предлагаемому методу для сходимости требуется на два порядка меньше шагов, чем методу случайного поиска.

А priori нельзя указать лучшее среди преобразований ограничений в виде неравенств, но подбор параметра тангенс-преобразования позволил ускорить сходимость наилучшим образом.

На рис. 2 представлен типичный график сходимости в случае применения тангенс-преобразования.

Обсуждение

Проведенные численные эксперименты показывают, что построенный метод обработки больших массивов экспериментальных данных с целью нахождения лучших параметров соответствующей математической модели обладает рядом достоинств, а именно хорошей скоростью сходимости; применимостью даже в том случае, когда экспериментальные данные не являются независимыми, например, если элементы вектора $y(t_i)$, $i = 1, \dots, J$ представляют собой марковскую последовательность.

В последнем примере функция $\varphi(v(t_1, q), \dots, v(t_J, q))$ в (3) примет вид

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^J \ln \left[\frac{1}{\sigma_1(t_i) \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{[y_1(t_i) - v_1(t_i, q)]^2}{2\sigma_1^2(t_i)} \right\} \right] \\ & + \ln \left[\frac{1}{\sigma_2(t_i) \sqrt{2\pi(1-\rho^2(t_i))}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_2^2(t_i)(1-\rho^2(t_i))} \right. \right. \\ & \times \left. \left. \left[y_2(t_i) - v_2(t_i, q) - \frac{\rho(t_i)\sigma_2(t_i)}{\sigma_1(t_i)} (y_1(t_i) - v_1(t_i, q)) \right]^2 \right\} \right] \\ & + \ln \left[\frac{1}{\sigma_K(t_i) \sqrt{2\pi(1-\rho^2(t_i))}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_K^2(t_i)(1-\rho^2(t_i))} \right. \right. \\ & \times \left. \left. \left[y_K(t_i) - v_K(t_i, q) - \frac{\rho(t_i)\sigma_K(t_i)}{\sigma_{K-1}(t_i)} \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. \times (y_{K-1}(t_i) - v_{K-1}(t_i, q)) \right]^2 \right\} \right]. \end{aligned} \quad (40)$$

В [7,8] был предложен и развит метод случайного поиска, так называемый метод „численного отжига“ (simulated annealing, он же метод Метрополиса), для нахождения феноменологических параметров, доставляющих глобальный минимум описанному выше функционалу качества в сходной задаче математической биологии. Было показано, что заданный функционал имеет много локальных минимумов и метод случайного поиска позволяет проходить локальные минимумы и отыскивать глобальный.

Однако использование численного отжига ведет к многократным интегрированиям системы сильно нелинейных дифференциально-разностных уравнений реакции-диффузии, поэтому к очень большому объему вычислений. Укажем для сравнения, что поиск каждого следующего приближения всего вектора параметров по методу случайного поиска требует вычисления функционала качества столько раз, каково число параметров, а по градиентному методу — только один раз. Это становится особенно важным при включении в рассмотрение большего количества белков — продуктов деятельности соответствующих генов, так как необходимое для случайного поиска число интегрирований растет пропорционально квадрату числа рассматриваемых белков.

Список литературы

- [1] Козлов К.Н., Петухов Л.В., Самсонова М.Г., Самсонов А.М. // Тр. СПб ГТУ. Прикладная математика. 2002. Т. 485. С. 73–83.
- [2] Лурье К.А. Оптимальное управление в задачах математической физики. М.: Наука, 1975.
- [3] Троицкий В.А., Петухов Л.В. Оптимизация формы упругих тел. М.: Наука, 1982.

- [4] *Брайсон, Хо Ю-ши.* Прикладная теория оптимального управления. М.: Мир, 1972.
- [5] *Иоффе А.Ф., Иоффе А.В.* // ЖТФ. 1952. Т. 22. Вып. 12. С. 2005–2013.
- [6] *Пеховия А.И., Жидких В.М.* Расчеты теплового режима твердых тел. Л.: Энергия, 1968. Задача 34. С. 196.
- [7] *Reinitz J., Sharp D.* // Mechanisms of Development. 1995. Vol. 49. P. 133–158.
- [8] *Sharp D., Reinitz J.* // Bio Systems. 1998. Vol. 47. P. 79–90.