

Идентификация параметров осциллирующих процессов в живой природе, моделируемых дифференциальными уравнениями

1 Модели осциллирующих процессов в живой природе

1.1 Модель Лотки

1.1.1 Осциллирующие химические реакции

В некоторых химических реакциях концентрации реагентов осциллируют в следующем смысле. Соединение каких-то начальных веществ приводит к их химическому взаимодействию, в результате чего образуются новые вещества, которые также начинают взаимодействовать с другими реагентами. В течении всех этих реакций концентрации реагентов колеблются и, наконец, все химические преобразования завершаются и в качестве результата остаются какие-то определенные вещества, которые уже не реагируют между собой. Первая математическая модель осциллирующих химических реакций была предложена в работе Лотки [7].

Рассматривается математическая модель взаимодействия на молекулярном уровне веществ A, X, Y, B на основе следующих предположений:

1. При взаимодействии с молекулой вещества X молекула вещества A превращается в молекулу вещества X . Это описывают в форме молекулярной реакции:



Такую реакцию относят к классу автокаталитических, так как наличие вещества X обеспечивает превращение другого вещества в X .

2. При взаимодействии с молекулой вещества Y молекула вещества X превращается в молекулу вещества Y , то есть происходит автокаталитическая молекулярная реакция:



3. Вещество Y в то же время необратимо распадается, превращаясь в вещество B , то есть происходит молекулярная реакция



4. Скорости протекания реакций (1), (2), (3) пропорциональны концентрациям веществ в левых частях этих реакций, то есть равны соответственно:

$$k_1[A][X], \quad k_2[X][Y], \quad k_3[Y], \quad (4)$$

где символами $[A]$, $[X]$, $[Y]$ обозначены концентрации веществ A , X , Y соответственно, а коэффициенты k_1 , k_2 , k_3 - положительные числа.

5. Скорость изменения концентрации каждого вещества равна сумме скоростей изменения концентраций этого вещества во всех реакциях, в которых оно участвует.

Из условий 1 – 5 следуют равенства:

$$\begin{aligned}\frac{d[A]}{dt} &= -k_1[A][X], \\ \frac{d[X]}{dt} &= k_1[A][X] - k_2[X][Y], \\ \frac{d[Y]}{dt} &= k_2[X][Y] - k_3[Y], \\ \frac{d[B]}{dt} &= k_3[Y],\end{aligned}\tag{5}$$

где $[B]$ — концентрация вещества B . Это система ОДУ Лотки.

1.1.2 Осцилляция популяций в системе “хищник-жертва”

Первая экологическая модель типа “хищник – жертва” была предложена в книге Лотки [8]. Она основана на тех же уравнениях (5).

Пусть на острове живут жертвы X (зайцы) и хищники Y (волки). Рассматривается математическая модель изменения величин A (растительная пища для зайцев), X , Y , B (умершие волки) на основе следующих предположений:

1. Наличие зайцев X и еды для них A приводит к увеличению количества зайцев, что можно записать формулой:



2. Наличие волков Y и еды для них X приводит к увеличению количества волков:



3. Волки умирают от болезней или старости:



4. Скорость изменения количества зайцев по формуле (6), скорость изменения количества волков по формуле (7) и скорость увеличения количества умерших волков по формуле (8) равны соответственно:

$$k_1[A][X], \quad k_2[X][Y], \quad k_3[Y],\tag{9}$$

где символами $[A]$, $[X]$, $[Y]$ обозначены количества растительной пищи, зайцев и волков, а k_1 , k_2 , k_3 - положительные коэффициенты.

5. Скорость изменения каждого из количеств $[A]$, $[X]$, $[Y]$, $[B]$ (количество умерших волков) равна сумме скоростей изменения этих количеств в каждом из процессов (6), (7), (8), в котором соответствующая величина A , X , Y , B участвует.

Из условий 1-5 следуют уравнения Лотки (5), только символы имеют другой смысл.

Более общие модели поведения n хищников и m жертв в различных экологических ситуациях были предложены в лекциях Вольтерры [1]. В связи с этим, уравнения Лотки (5) называют часто уравнениями Лотки-Вольтерра.

И все же большая часть работ по этой тематике посвящена даже более упрощенному по сравнению с моделью Лотки двумерному случаю, так как это позволяет применять методы фазовой плоскости для динамических систем.

Сведение модели (5) к двумерной основано на предположении, что величина $[A]$ постоянна. В случае модели осциллирующих химических реакций это означает, что вещества A достаточно много, а в случае модели “хищник - жертва” это означает, что еды у зайцев достаточно много. Из этого предположения следует, что $[A] = const$. Так как величина $[B]$ входит только в последнее из уравнений (5), то второе и третье уравнения отделяются:

$$\begin{aligned} \frac{d[X]}{dt} &= k_0[X] - k_2[X][Y], \\ \frac{d[Y]}{dt} &= k_2[X][Y] - k_3[Y], \end{aligned} \tag{10}$$

где $k_0 = k_1[A]$.

2. Идентификация параметров в системах, описываемых ОДУ

2.1 Градиентные уравнения

Градиентные уравнения возникают в связи с задачей нахождения экстремумов функций многих аргументов. Важно, что эти аргументы сами могут зависеть от решений каких-то уравнений - численных, дифференциальных и иных. Мы будем использовать их для минимизации функций аргументов, зависящих от решений обыкновенных дифференциальных уравнений.

Рассмотрим вещественнозначную функцию $\Phi(k)$ аргумента $k = (k_1, \dots, k_m)$, $(k_1, \dots, k_m) \in R^m$ и пусть $l = (l_1, \dots, l_m) \in R^m$ и $l_1^2 + \dots + l_m^2 = 1$. Тогда величина

$$\frac{\partial \Phi(k)}{\partial l} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Phi(k + hl) - \Phi(k)}{h} = \frac{d}{dh} \Phi(k + hl) |_{h=0} \tag{11}$$

то есть производная функции $\Phi(k)$ по направлению l характеризует скорость изменения $\Phi(k)$ при изменении k в направлении вектора l .

Из формулы (11) получаем:

$$\frac{\partial \Phi(k)}{\partial l} = \frac{d}{dh} \Phi(k_1 + hl_1, \dots, k_m + hl_m) |_{h=0} = \frac{\partial \Phi(k)}{\partial k_1} l_1 + \dots + \frac{\partial \Phi(k)}{\partial k_m} l_m = (\nabla \Phi(k), l) \quad (12)$$

где $\nabla \Phi(k) = \frac{\partial \Phi(k)}{\partial k_1}, \dots, \frac{\partial \Phi(k)}{\partial k_m}$ — градиент функции $\Phi(k)$, а это дает:

$$\frac{\partial \Phi(k)}{\partial l} = |\nabla \Phi(k)| \cos(\nabla \Phi(k), l), \quad (13)$$

$$-|\nabla \Phi(k)| \leq \frac{\partial \Phi(k)}{\partial l} \leq |\nabla \Phi(k)|, \quad (14)$$

$$\frac{\partial \Phi(k)}{\partial l} = \begin{cases} +|\nabla \Phi(k)|, & \nabla \Phi(k) / |\nabla \Phi(k)| = +l / |l| \\ -|\nabla \Phi(k)|, & \nabla \Phi(k) / |\nabla \Phi(k)| = -l / |l| \end{cases} \quad (15)$$

Таким образом, вектор $\nabla \Phi(k)$ является направлением наискорейшего роста функции $\Phi(k)$ в точке k , а вектор $-\nabla \Phi(k)$ — это направление наискорейшего ее убывания в этой точке.

Градиентной кривой функции $\Phi(k)$ называют кривую $k(\tau) = (k_1(\tau), \dots, k_m(\tau))$, $(k_1(\tau), \dots, k_m(\tau)) \in R^m$, $\tau \in [0, +\infty]$, касательное направление к которой в каждой точке τ противоположно направлению вектора градиента $\nabla \Phi(k(\tau))$, то есть совпадает с направлением наискорейшего убывания $\Phi(k)$.

Это означает, что $k(\tau)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению:

$$\frac{dk}{d\tau} = -\nabla \Phi(k) \quad (16)$$

или в координатной форме:

$$\frac{dk_i}{d\tau} = -\frac{\partial \Phi(k_1, \dots, k_m)}{\partial k_i}, \quad i \in [1 : m] \quad (17)$$

К уравнениям (16) или (17) добавляем начальные условия:

$$k(0) = k^0 \quad (18)$$

или в координатной форме:

$$k_i(0) = k_i^0, \quad i \in [1 : m] \quad (19)$$

Решение задачи Коши (16), (18) (или (17), (19)) определяет градиентную кривую проходящую через точку k^0 . Будем рассматривать это решение как вектор-функцию $k(k^0, \tau) = (k_1(k^0, \tau), \dots, k_m(k^0, \tau))$ аргументов $k^0 \in R^m$ и $\tau \in [0, +\infty]$.

Зададимся теперь целью найти точку k^* локального минимума неотрицательной функции $\Phi(k)$, если она существует и достаточно близка к k^0 . Если за начальное приближение для k^* взять k^0 , то движение вдоль градиентной кривой, проходящей через k^0 (то есть движение вдоль траектории решения $k(k^0, \tau)$) можно считать идеальным путем к точке k^* .

Если решение задачи (16),(18) существует при $\tau \in [0, +\infty]$, то при любом таком τ получаем, что:

$$\frac{d\Phi(k(\tau))}{d\tau} = -(\nabla\Phi(k(\tau)), \nabla\Phi(k(\tau))) < 0 \quad \text{при} \quad \nabla\Phi(k(\tau)) \neq 0 \quad (20)$$

$$\frac{d\Phi(k(\tau))}{d\tau} = 0 \quad \text{при} \quad \nabla\Phi(k(\tau)) = 0 \quad (21)$$

и мы вправе ожидать, что

$$\lim_{\tau \rightarrow +\infty} k(k^0, \tau) = k^* \quad (22)$$

Метод градиентных уравнений нахождения локального минимума функции $\Phi(k)$ заключается в численном интегрировании задачи Коши (16),(18) вдоль оси τ до достижения точки $k(\tau)$, достаточно близкой к k^* .

2.2 Уравнения в вариациях

Рассмотрим задачу Коши:

$$\frac{dx_j}{dt} = f_j(x_1, \dots, x_n; k_1, \dots, k_m), \quad (23)$$

$$x_j(t_0) = x_{j0}, \quad j \in [1 : n] \quad (24)$$

где k_1, \dots, k_m - параметры. В дальнейшем мы рассмотрим функционалы, зависящие от параметров k_1, \dots, k_m через решение задачи Коши (23),(24). Тогда градиентные уравнения будут зависеть от производных по k_1, \dots, k_m решения задачи (23),(24), и мы должны уметь их вычислять. Дифференцируя уравнения (23), (24) по k_r получаем, что функции

$$y_{jr}(t) = \frac{\partial x_j(t, k_1, \dots, k_m)}{\partial k_r}, \quad j \in [1 : n], \quad r \in [1 : m] \quad (25)$$

удовлетворяют следующей задаче Коши:

$$\frac{dy_{jr}}{dt} = \frac{\partial f_j}{\partial k_r} + \sum_{p=1}^n \frac{\partial f_j}{\partial x_p} y_{pr} \quad (26)$$

$$y_{jr}(t_0) = 0, \quad j \in [1 : n], \quad r \in [1 : m] \quad (27)$$

Уравнения (26) относительно производных (25) называют уравнениями в вариациях для уравнений (23).

2.3 Функционалы метода наименьших квадратов

Мы не можем рассмотреть здесь все многообразие функционалов метода наименьших квадратов и ограничимся одним достаточно общим функционалом. Он соответствует следующей задаче: модель некоторого процесса описывается задачей Коши (23),(24) (такие модели, в частности, достаточно распространены в биологической кинетике), даны измерения

$$x_{jk} = x_j(t_k), \quad k = 1, \dots, M, \quad t_1 < t_2 < \dots < t_M, \quad j = 1, \dots, q, \quad (28)$$

то есть даны $q \cdot M$ приближений для значений величин $x_1(t), \dots, x_n(t)$ в моменты времени $t = t_1, \dots, t_M$, и требуется найти параметры $k = (k_1, \dots, k_m)$ на основе заданного начального приближения $k^0 = (k_1^0, \dots, k_m^0)$.

В методе наименьших квадратов нахождения (идентификации) параметров $k = (k_1, \dots, k_m)$ рассматривают функционал

$$\Phi(k_1, \dots, k_m) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^q \sum_{p=1}^M \alpha_{jp} \cdot (x_j(t_p, k_1, \dots, k_m) - x_{jp})^2 \quad (29)$$

где α_{jp} - фиксированные весовые коэффициенты, а $x_j(t_p, k_1, \dots, k_m)$, $j = 1, \dots, q$ - значения первых q компонент решения задачи (23),(24) в точке t_p при заданных $k = (k_1, \dots, k_m)$.

В методе наименьших квадратов полагают, что значение k^* , доставляющее минимум этой функции $\Phi(k)$, является адекватным приближением к реальному значению параметра $k = (k_1, \dots, k_m)$ для принятой модели процесса.

Для того, чтобы воспользоваться методом градиентных уравнений, необходимо выписать уравнения (17) для функционала (29):

$$\frac{dk_i}{d\tau} = - \frac{\partial \Phi(k_1, \dots, k_m)}{\partial k_i} = - \sum_{j=1}^q \sum_{p=1}^M \alpha_{jp} \cdot (x_j(t_p, k_1, \dots, k_m) - x_{jp}) y_{ji}(t_p, k_1, \dots, k_m) \quad (30)$$

Эти градиентные уравнения надо дополнить начальными условиями:

$$k_i(0) = k_i^0, \quad i \in [1 : m] \quad (31)$$

2.4 Численное решение градиентных уравнений

Обратимся к функционалу $\Phi(k)$, $k = (k_1, \dots, k_m)$, определенному в п.2.3. Прямой способ нахождения приближенного значения точки $k^* = (k_1^*, \dots, k_m^*)$, определенной по формуле (26) (то есть точки предполагаемого минимума

функционала $\Phi(k)$), – это численное интегрирование градиентных уравнений (30) при начальных условиях (31).

Правые части уравнений (30) зависят от неизвестных k_1, \dots, k_m через значения функций $x_j(t)$, $y_{ji}(t)$ в точках t_p при $j \in [1 : q]$, $i \in [1 : m]$, $p \in [1 : M]$. При фиксированных значениях $k = (k_1, \dots, k_m)$ величины $x_j(t_p)$, $y_{ji}(t_p)$ могут быть получены численным интегрированием уравнений (23), (26) при начальных условиях (24), (27).

Таким образом, нам надо обсудить численные методы интегрирования задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений. Наиболее распространены пошаговые методы, которые позволяют для задачи Коши

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) \in R^m, x = (x_1, \dots, x_m), f = (f_1, \dots, f_m), \quad (32)$$

$$x(t_0) = x_0 = (x_{1,0}, \dots, x_{m,0}), \quad (33)$$

отправляясь от значения $x(t_0)$, последовательно получать приближенные значения $\tilde{x}(t_1), \dots, \tilde{x}(t_k), \dots$, решения в точках $t_1 = t_0 + h_1, \dots, t_k = t_{k-1} + h_k, \dots$

Числа h_1, \dots называют шагами интегрирования, а числа t_1, \dots – узлами таблицы или сетки численного интегрирования. Совокупность узлов называют сеткой, а величины $\tilde{x}(t_1), \dots$ называют значениями решения на узлах сетки. Если $h_1 = h_2 = \dots$, то говорят о равномерной сетке или об интегрировании с постоянным шагом.

Численное интегрирование градиентных уравнений, как правило, требует частой смены величины шага интегрирования. Хорошо к быстрой смене шага приспособлены явные методы Рунге-Кутты и метод рядов Тейлора.

Пошаговые методы численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений хорошо освещены в литературе по численному анализу (см., например, [2,3]).

2.4.1 Полиномиальные системы

Полиномиальной системой мы будем называть автономную систему ОДУ

$$\frac{dx_j}{dt} = Q_j(x_1, \dots, x_n), j \in [1 : n], \quad (34)$$

где Q_j - алгебраические полиномы по x_1, \dots, x_n .

Какие системы ОДУ можно свести к полиномиальным и как это делается? Начнем с примера. Рассмотрим задачу Коши:

$$\frac{dx_1}{dt} = x_1 \sin \ln x_2 + x_1^2 \ln x_2, \quad \frac{dx_2}{dt} = x_2 \ln x_1 \quad (35)$$

$$x_1(t_0) = e, \quad x_2(t_0) = 1 \quad (36)$$

Вводя дополнительные переменные

$$x_3 = \ln x_2, \quad x_4 = \ln x_1, \quad x_5 = \sin \ln x_2, \quad x_6 = \cos \ln x_2, \quad x_7 = x_1 x_3 \quad (37)$$

получаем следующую квадратичную задачу Коши:

$$\begin{aligned} dx_1/dt &= x_1 x_7 + x_1 x_5, & dx_2/dt &= x_2 x_4, & dx_3/dt &= x_4, & dx_4/dt &= x_7 + x_5, \\ dx_5/dt &= x_4 x_6, & dx_6/dt &= -x_4 x_5, & dx_7/dt &= x_7^2 + x_5 x_7 + x_1 x_4, \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} x_1(t_0) &= e, & x_2(t_0) &= 1, & x_3(t_0) &= 0, & x_4(t_0) &= 1, \\ x_5(t_0) &= 0, & x_6(t_0) &= 1, & x_7(t_0) &= 0 \end{aligned} \quad (39)$$

Теперь рассмотрим достаточно общий случай. Рассмотрим класс Ψ систем ОДУ (32), правые части которых можно представить в виде:

$$f_i(x_1, \dots, x_m, t) = P_i(x_1, \dots, x_m, t, \psi_1(x_1, \dots, x_m, t), \dots, \psi_k(x_1, \dots, x_m, t)) \quad (40)$$

где все функции P_1, \dots, P_m , а также все функции

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_r}{\partial t} &= \Psi_r(x_1, \dots, x_m, t, \psi_1, \dots, \psi_k), \\ \frac{\partial \psi_r}{\partial x_s} &= \Psi_{r,s}(x_1, \dots, x_m, t, \psi_1, \dots, \psi_k), \\ r &\in [1 : k], \quad s \in [1 : m] \end{aligned} \quad (41)$$

являются алгебраическими полиномами по $x_1, \dots, x_m, t, \psi_1, \dots, \psi_k$.

Любая система из Ψ сводится к полиномиальной. Действительно, если в (32), (33) ввести дополнительные переменные $x_{m+1} = t$, $x_{m+2} = \psi_1, \dots$, $x_n = \psi_k$, то:

$$\frac{dx_j}{dt} = X_j(x_1, \dots, x_n) \quad (42)$$

$$x_j(t_0) = x_{j,0}, \quad j \in [1 : n], \quad n = m + k + 1, \quad (43)$$

где все правые части

$$\begin{aligned} X_1 &= P_1, \dots, \quad X_m = P_m, \quad X_{m+1} = 1, \\ X_{m+2} &= \sum_{r=1}^m \Psi_{12} X_r + \Psi_1, \dots, \quad X_n = \sum_{r=1}^m \Psi_{kr} X_r + \Psi_k \end{aligned} \quad (44)$$

— алгебраические полиномы по x_1, \dots, x_n с постоянными коэффициентами.

Уравнения кинетики, как правило, либо имеют вид (34), либо могут быть сведены к такой системе введением дополнительных переменных. Поэтому важно знать какие функции удовлетворяют полиномиальным системам, или, иначе говоря, насколько богаты содержанием модели, основанные на полиномиальных системах ОДУ.

Обсудим этот вопрос. Будем говорить, что скалярная функция скалярного аргумента удовлетворяет полиномиальной системе, если она является одной из компонент решения такой системы. Класс скалярных функций, удовлетворяющих полиномиальной системе назовем Σ . За исключением некоторых теоретико-числовых функций (гамма-функция Эйлера, дзета-функция Римана и т.п.) остальные функции из известных математических справочников принадлежат классу Σ .

Этот класс замкнут относительно операций $+$, $-$, \times , \div , ∂ , f , \circ (сложение, вычитание, умножение, деление, дифференцирование, интегрирование, суперпозиция). Это означает, что если функции x_1, \dots, x_m принадлежат Σ , то и любая их композиция, полученная при помощи конечного числа операций $+$, $-$, \times , \div , ∂ , f , \circ , также принадлежит Σ .

2.4.2 Метод рядов Тейлора

Введем в рассмотрение оператор T_M , сопоставляющий решению $x(t, t_0, x_0)$ задачи Коши (32), (33) его полином Тейлора

$$T_M x(t, t_0, x_0) = \sum_{m=0}^M \frac{x_0^{(m)}(t-t_0)^m}{m!}, \quad x_0^{(m)} = x^{(m)}(t_0) \quad (45)$$

порядка M . Радиус сходимости ряда $T_\infty x(t, t_0, x_0)$ обозначим $R(t_0, x_0)$.

Метод рядов Тейлора решения задачи Коши (32), (33) заключается в построении таблицы приближенных значений $\tilde{x}(t_w)$ по формулам:

$$\begin{aligned} \tilde{x}(t_1) &= T_{M_1} x(t_1, t_0, x_0), \\ &\dots \\ \tilde{x}(t_w) &= T_{M_w} x(t_w, t_{w-1}, \tilde{x}(t_{w-1})), \dots, \end{aligned} \quad (46)$$

где M_1, M_2, \dots - натуральные, $t_1 = t_0 + h_1$, $t_2 = t_1 + h_2, \dots$, а h_1, h_2, \dots удовлетворяют неравенствам $|h_w| < R(t_{w-1}, \tilde{x}(t_{w-1}))$.

Для программной реализации метода рядов Тейлора необходимы алгоритмы нахождения коэффициентов Тейлора и автоматического выбора величины шага интегрирования.

Нахождение коэффициентов Тейлора

Рассмотрим квадратичную задачу Коши

$$\dot{x}_k = a_k + \sum_{l=1}^n a_{kl}x_l + \sum_{i,j=1}^n a_{k,i,j} x_i x_j, \quad (47)$$

$$x_k(t_0) = c_k, \quad (48)$$

где $t_0, c_k, a_k, a_{kl}, a_{k,i,j}$ - вещественные или комплексные постоянные, а t - вещественная или комплексная переменная.

Подставляя в (47) разложение Тейлора

$$x_k = \sum_{m=0}^{\infty} x_{km} (t - t_0)^m, \quad (49)$$

получаем:

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1) x_{k,m+1} (t - t_0)^m - \left(a_k + \sum_{l=1}^n a_{kl} \sum_{m=0}^{\infty} x_{l,m} (t - t_0)^m + \right. \\ \left. + \sum_{i,j=1}^n a_{k,i,j} \sum_{m=0}^{\infty} \left(\sum_{p=0}^m x_{i,p} x_{j,m-p} \right) \cdot (t - t_0)^m \right) = 0 \end{aligned} \quad (50)$$

Приводя подобные члены и приравнявая все коэффициенты полученного степенного ряда нулю, получаем искомые формулы:

$$\begin{aligned} x_{k,m+1} = \frac{1}{m+1} \left[\delta_m a_k + \sum_{l=1}^n a_{k,l} x_{l,m} + \sum_{i,j=1}^n a_{k,i,j} \sum_{p=0}^m x_{i,p} x_{j,m-p} \right]; \\ x_{k,0} = c_k, \quad k = 1, \dots, n, \quad m = 0, 1, \dots, \end{aligned} \quad (51)$$

где $\delta_0 = 1, \delta_1 = \delta_2 = \dots = 0$.

Аналогичные формулы легко вывести и для общего случая полиномиальной системы степени $L \geq 2$.

Оценка погрешности и выбор шага

Рассмотрим полиномиальную задачу Коши:

$$\frac{dx}{dt} = Q(x), \quad (52)$$

$$x(t_0) = x_0, \quad (53)$$

где $x = (x_1, \dots, x_n), x_0 = (x_{10}, \dots, x_{n0}), Q = (Q_1, \dots, Q_n)$, а максимальная степень полиномов $Q_j(x)$ (степень системы (52)) равна $L \geq 2$.

Введем обозначения:

$$|x| = \max_{i \in [1:n]} |x_i|, \quad |x_0| = \max_{i \in [1:n]} |x_{i0}|, \quad (54)$$

$$Q_j(x) = \sum_{0 \leq i_1, \dots, i_n \leq L} a_{i_1, \dots, i_n} x_1^{i_1} \cdot \dots \cdot x_n^{i_n} = Q_j(\{a_{i_1, \dots, i_n}\}, x_1, \dots, x_n)$$

и будем предполагать, что $Q_j(0) = 0$, $j \in [1:n]$.

Теорема. Решение $x(t, t_0, x_0) = (x_1(t, t_0, x_0), \dots, x_n(t, t_0, x_0))$ задачи (52), (53) голоморфно в круге $O_\rho(t_0) = \{t \in C \mid |t - t_0| < \rho\}$ и удовлетворяет там неравенствам:

$$|x_j(t, t_0, x_0) - T_M x_j(t, t_0, x_0)| \leq |x_0| \cdot \left(1 - \frac{|t - t_0|}{\rho}\right)^{-1/L-1} \cdot \left(\frac{|t - t_0|}{\rho}\right)^{M+1}, \quad (55)$$

где

$$\rho = \frac{1}{(L-1) \cdot s}, \quad s = \max_{j \in [1:n]} s_j, \quad s_j = Q_j(\{|a_{i_1, \dots, i_n}|_j, |x_0|, \dots, |x_0|\}) \quad (56)$$

Используя эту теорему несложно построить алгоритм автоматического выбора шага в методе рядов Тейлора по заданной пользователем границе абсолютной (или относительной) погрешности.

2.4.3 Метод Рунге-Кутты

Этим методам посвящено много работ, и они хорошо изложены в многочисленных учебниках (см., например, [2,3]).

3 Идентификация параметров модели Лотки

3.1 Дифференциальные уравнения

Задачу Коши для уравнений Лотки (5) п.1 запишем, используя более стандартные математические обозначения:

$$\begin{aligned} dx_1/dt &= -k_1 x_1 x_2, \\ dx_2/dt &= k_1 x_1 x_2 - k_2 x_2 x_3, \\ dx_3/dt &= k_2 x_2 x_3 - k_3 x_3, \\ dx_4/dt &= k_3 x_3, \end{aligned} \quad (57)$$

$$x_j(t_0) = x_{j0}, \quad j \in [1:4] \quad (58)$$

Задача Коши (26), (27) п.2 будет следующей:

$$\begin{aligned}
dy_{11}/dt &= -k_1x_2y_{11} - x_1(x_2 + k_1y_{21}), \\
dy_{12}/dt &= -k_1(x_2y_{12} + x_1y_{22}), \\
dy_{13}/dt &= -k_1(x_2y_{13} + x_1y_{23}), \\
dy_{21}/dt &= x_1x_2 + k_1x_2y_{11} - k_2x_2y_{31} + (k_1x_1 - k_2x_3)y_{21}, \\
dy_{22}/dt &= (k_1x_1 - k_2x_3)y_{22} - x_2(x_3 - k_1y_{12} + k_2y_{32}), \\
dy_{23}/dt &= (k_1x_1 - k_2x_3)y_{23} + x_2(k_1y_{13} - k_2y_{33}), \\
dy_{31}/dt &= k_2x_3y_{21} + (k_2x_2 - k_3)y_{31}, \\
dy_{32}/dt &= x_2x_3 + k_2y_{22}x_3 + (k_2x_2 - k_3)y_{32}, \\
dy_{33}/dt &= x_3(k_2y_{23} - 1) + (k_2x_2 - k_3)y_{33}, \\
dy_{41}/dt &= k_3y_{31}, \\
dy_{42}/dt &= k_3y_{32}, \\
dy_{43}/dt &= x_3 + k_3y_{33},
\end{aligned} \tag{59}$$

$$y_{ij}(t_0) = 0, i \in [1 : 4], j \in [1 : 3] \tag{60}$$

Как видим, задача Коши (57), (58), (59), (60) полиномиальная, и для ее численного интегрирования можно применять метод рядов Тейлора.

3.2 Постановки задачи идентификации и функционалы МНК

Для конкретных биологических или иных моделей проводят реальные эксперименты по определению величин x_{jp} , от которых зависят функционалы типа (29) п.2.3. Каждый реальный эксперимент имеет и свои возможности (часто весьма ограниченные) и свою цену (возможно высокую) определения каждой величины x_{jp} .

Естественно поэтому использовать различные функционалы, зависящие от того или иного набора величин x_{jp} . Мы рассмотрим три функционала. Первые два из них ориентированы на различные типы экспериментов с весьма ограниченными возможностями, а третий является их обобщением.

В эксперименте первого типа, при одном и том же начальном данном x_0 измеряются значения

$$x_{qp} = x_q(t_p, t_0, x_0) \tag{61}$$

одной из переменных $x_q(t, t_0, x_0)$ в различные моменты $t = t_p, p \in [1 : M]$.

В эксперименте второго типа, при начальных данных $x_0 = x_0^r, r \in [1 : N]$, измеряются значения

$$x_{jM}^r = x_j(t_M, t_0, x_0^r), \tag{62}$$

q величин $x_j(t, t_0, x_0), j \in [1 : q]$ в один и тот же момент времени $t = t_M$.

В эксперименте третьего типа, при начальных данных $x_0 = x_0^r, r \in [1 : N]$, измеряются значения

$$x_{jp}^r = x_j(t_{jp}, t_0, x_0^r) \quad (63)$$

q величин $x_j(t, t_0, x_0), j \in [1 : q]$ в один и тот же момент времени $t = t_{jp}, j \in [1 : q], p \in [1 : M_j]$.

Соответствующие функционалы равны:

$$\Phi_I(k) = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^M \alpha_p \cdot (x_q(t_p, x_0, k) - x_{q,p})^2, \quad (64)$$

$$\Phi_{II}(k) = \frac{1}{2} \sum_{r=1}^N \sum_{j=1}^q \alpha_{rj} \cdot (x_j(t_M, x_0^r, k) - x_{j,M}^r)^2, \quad (65)$$

$$\Phi_{III}(k) = \frac{1}{2} \sum_{r=1}^N \sum_{j=1}^q \sum_{p=1}^{M_j} \alpha_{rjp} \cdot (x_j(t_{jp}, x_0^r, k) - x_{j,p}^r)^2, \quad (66)$$

где $\alpha_p, \alpha_{rj}, \alpha_{rjp}$ - фиксированные весовые коэффициенты.

Градиентные уравнения и соответствующие начальные условия для этих функционалов следующие:

$$\frac{dk_i}{d\tau} = -\frac{\partial \Phi_I(k)}{\partial k_i} = -\sum_{p=1}^M \alpha_p (x_q(t_p, x_0, k) - x_{q,p}) \cdot y_{qi}(t_p, x_0, k), \quad (67)$$

$$\frac{dk_i}{d\tau} = -\frac{\partial \Phi_{II}(k)}{\partial k_i} = -\sum_{r=1}^N \sum_{j=1}^q \alpha_{rj} (x_j(t_M, x_0^r, k) - x_{j,M}^r) \cdot y_{ji}(t_M, x_0^r, k), \quad (68)$$

$$\frac{dk_i}{d\tau} = -\frac{\partial \Phi_{III}(k)}{\partial k_i} = -\sum_{r=1}^N \sum_{j=1}^q \sum_{p=1}^{M_j} \alpha_{rjp} (x_j(t_{jp}, x_0^r, k) - x_{j,p}^r) \cdot y_{ji}(t_{jp}, x_0^r, k) \quad (69)$$

$$k_i(0) = k_i^0, i \in [1 : m] \quad (70)$$

3.3 Как ускорить вычисления

Опыт реальных вычислений показывает, что минимизация функционала методом градиентных уравнений естественно делится на два этапа. На первом этапе происходит быстрое уменьшение функционала. На втором этапе это уменьшение становится все более медленным, и процесс нахождения достаточно точного приближения параметров, соответствующих локальному минимуму функционала, может потребовать неприемлемо больших затрат машинного времени.

Для того, чтобы ускорить вычисления на втором этапе, необходимо ускорить численное интегрирование исходных уравнений, уравнений в вариациях и градиентных уравнений. Исходные уравнения и уравнения в вариациях, как правило, полиномиальные и для их численного интегрирования можно использовать метод рядов Тейлора.

Градиентные уравнения не полиномиальные, и на первом из упомянутых выше этапов их естественно интегрировать методами Рунге-Кутты. На втором этапе идентифицируемые параметры изменяются медленно и правые части градиентных уравнений можно аппроксимировать полиномами по этим параметрам в окрестности некоторого их текущего значения.

Эта аппроксимация достаточно точна только на некотором промежутке изменения τ , поэтому ее нужно время от времени строить заново в окрестности очередного текущего значения параметров. На соответствующих промежутках изменения τ приближенные полиномиальные градиентные уравнения можно интегрировать методом рядов Тейлора.

Отметим, что построение каждой аппроксимации градиентных уравнений требует многократного численного решения исходных уравнений и уравнений в вариациях, для чего можно использовать метод рядов Тейлора.

Перейдем к формулам. Уравнения точной градиентной задачи Коши

$$\frac{dk_i}{d\tau} = -\frac{\partial\Phi(k)}{\partial k_i} \quad (71)$$

$$k_i(\bar{\tau}) = \bar{k}_i, \quad i \in [1 : m], \quad (72)$$

где $\Phi(k) = \Phi_I(k), \Phi_{II}(k), \Phi_{III}(k)$, мы хотим заменить на приближенные градиентные уравнения:

$$\frac{dk_i}{d\tau} = Q_i(k, c) = -\frac{\partial Q(k, c)}{\partial k_i}, \quad i \in [1 : m], \quad (73)$$

где $Q(k, c)$ - полином по k_1, \dots, k_m , а $c = (c_1, \dots, c_n)$ - набор его коэффициентов.

При этом мы хотим, чтобы величины

$$\Delta_i(k, c) = \left| Q_i(k, c) - \left(-\frac{\partial\Phi(k)}{\partial k_i} \right) \right|, \quad i \in [1 : m] \quad (74)$$

были достаточно малы при

$$k \in P(h, \bar{k}) = \{k = (k_1, \dots, k_m) \in R^m \mid k_j \in [\bar{k}_j - h, \bar{k}_j + h], j \in [1 : m]\}, \quad (75)$$

где $h > 0$ - некоторое фиксированное число. Коэффициенты $c = (c_1, \dots, c_n)$ полинома $Q(k, c)$ можно найти методом наименьших квадратов с функционалом:

$$\Psi(c) = \sum_{i=1}^m \sum_{p=1}^M \beta_{ip} \cdot \Delta_i^2(k^p, c), \quad (76)$$

где $k^p = (k_1^p, \dots, k_m^p) \in P(h, \bar{k})$, $p \in [1 : M]$, а $\beta_{ip} > 0$ - весовые коэффициенты.

Отметим, что при малых n, m в качестве Q можно рассмотреть полином степени 3 или 4, а при больших n и/или m - полином степени 2.

3.4 Численный эксперимент

Мы опишем здесь постановку и результаты одного из численных экспериментов, проведенных в полном соответствии с рассмотренной выше схемой градиентного метода. Эти результаты опубликованы в работе [4].

Обратимся к дифференциальным уравнениям для модели Лотки в п. 1.1 и в численном эксперименте будем действовать по следующей схеме:

Фиксируем начальные данные

$$x_1(0) = 1, \quad x_2(0) = 0.001, \quad x_3(0) = 0.001, \quad x_4(0) = 0 \quad (77)$$

и параметры

$$k_1 = 1, \quad k_2 = 1.5, \quad k_3 = 0.1 \quad (78)$$

При этих значениях начальных данных $x_0 = (x_{10}, x_{20}, x_{30}, x_{40})$ и параметров $k = (k_1, k_2, k_3)$ численным интегрированием задачи Коши (57), (58) находим значения концентрации реактанта $[B] = x_4(t, k_1, k_2, k_3)$ в моменты времени $t_i = i/2$, $i = 1, \dots, M = 40$, то есть находим $x_4(i/2, k_1, k_2, k_3)$ при $i = 1, \dots, M$.

Теперь можно имитировать “измерения” величин $B_i = x_{4,i}$ по формуле

$$x_{4,i} = (1 + \xi_i)x_4(i/2, k_1, k_2, k_3), \quad i = 1, \dots, M, \quad (79)$$

где ξ_i - независимые случайные величины, равномерно распределенные между -0.2 и $+0.2$. Считаем, что $x_{4,i}$ - измерения, полученные в некотором реальном эксперименте.

Фиксируем начальное приближение:

$$k^0 = k(0) = (k_1^0, k_2^0, k_3^0) = (0.5, 0.7, 0.4) \quad (80)$$

и методом градиентных уравнений находим приближенное значение точки локального минимума $k^* = (k_1^*, k_2^*, k_3^*)$.

Об эффективности метода можно судить по затраченному процессорному времени и по величине относительной погрешности:

$$\frac{1}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}} \cdot \max_{i \in [1:3]} |k_i - k_i^*| \quad (81)$$

Результаты этого численного эксперимента приведены в работе [4].

4 О других методах идентификации

Ограничимся здесь ссылкой на электронную статью [5], в которой идентифицируются три неизвестных параметра в пяти кинетических уравнениях, описывающих изменение концентраций в биохимических реакциях с участием различных тромбинов и их комплексов.

В этой работе рассматривается функционал МНК, использующий различные начальные данные, соответствующие измерениям для всех пяти переменных в фиксированные моменты времени t_1, \dots, t_M , причем все эти измерения взяты из реальных экспериментов.

Для минимизации функционала используется программа VARPRO Стэнфордского университета, а численное интегрирование исходных уравнений (для вычисления функционала) проводится при помощи интегратора SDRIV1 Дэвида Кахане.

Литература

1. В.Вольтерра, "Математическая теория борьбы за существование". Москва. "Наука", 1976.
2. Э.Хайрер, С.Нёрсетт, Г.Ваннер, "Решение обыкновенных дифференциальных уравнений", I. Нежесткие задачи. Москва. "Мир", 1990.
3. Э.Хайрер, Г.Ваннер, "Решение обыкновенных дифференциальных уравнений", II. Жесткие и дифференциально - алгебраические задачи. Москва. "Мир", 1999.
4. L.K.Babadzanjan, J.A.Boyle, D.R.Sarkissian, and J.Zhu, "Parameter Identification for Oscillating Chemical Reactions Modelled by Systems of ODE", Journal of Computational Methods for Sciences and Engineering, 2002.
5. Bert W.Rust, ACMD, Robert W.Ashton, Chemical Science and Technology Laboratory, "Parameter Identifications", 7/15/2001:
<http://math.nist.gov/mcsd/Reports/95/yearly/node28.html>
6. R.Haberman, "Mathematical Models. Mechanical Vibrations, Population Dynamics, and Traffic Flow. Classics in Applied Mathematics, 21", SIAM, Philadelphia, 1977.
7. A.J.Lotka, "Undamped oscillations derived from the law of mass action", Jour. Amer. Chem. Soc. 42 (1920), 1595-1599.
8. A. J. Lotka, "Elements of Physical Biology", Williams and Wilkins, Baltimore, 1925.