УДК 517.9

ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНОГО МЕТОДА ИДЕНТИФИКАЦИИ ПАРАМЕТРОВ РАСПРЕДЕЛЕННОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

А. В. Копытин, Е. А. Копытина

Воронежский государственный университет

Поступила в редакцию 26.12.2018 г.

Аннотация. Предложен интегральный метод параметрической идентификации уравнений математической физики, описывающих динамику пространственно-распределенных процессов, на основе экспериментальных многомерных временных рядов. Проведенный вычислительный эксперимент показывает значительное улучшение качества оценок параметров уравнения по сравнению с известными методами.
Ключевые слова: уравнения в частных производных; параметрическая идентификация; МНК; интегральный метод.
Annotation. An integral method for the parameters estimation of equations of mathematical physics describing the dynamics of spatially-distributed processes on the basis of experimental multidimensional time series is proposed. The computational experiment performed shows a significant improvement in the quality of estimates of the parameters of the equation in comparison with the known methods.
Keywords: partial differential equations; parametric identification; OLS; integral method.

ВВЕДЕНИЕ

Динамические системы обычно описываются дифференциальными уравнениями. В реальных приложениях параметры этих уравнений, как правило, неизвестны и должны быть оценены на основе имеющихся измерений. Различные статистические методы были разработаны для оценки параметров моделей, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями. Так, например, в [1–3] предложены иерархические байесовские подходы к этой проблеме. Эти методы требуют неоднократного численного решения соответствующих обыкновенных дифференциальных уравнений, что неэффективно по времени. Для оценки постоянных параметров модели в [4] предложен обобщенный сглаживающий подход, основанный на идеях метода максимального правдоподобия. В [5] предложен каскадный метод оценки изменяющихся по времени параметров. Этот метод оценивает параметры путем оптимизации определенного критерия, причем достижение глобального минимума проблематично с вычислительной точки зрения.

Другим подходом к оцениванию параметров обыкновенных дифференциальных уравнений (см. [6, 7]) является двухэтапный метод, в котором на первом этапе, используя сглаживающие методы, по зашумленным данным оцениваются функция и ее производные, а затем на втором этапе строятся МНК-оценки параметров уравнения. Двухэтапный метод легко реализовывается, однако, он может быть статистически неэффективным, так как производные не могут быть точно оценены по зашумленным данным, особенно производные старших порядков.

Что касается моделей, описываемых дифференциальными уравнениями в частных производных, то в [8] предложены каскадный и байесовский подходы к оценке параметров этих моделей. В первом подходе решение дифференциального уравнения аппроксимируется тензорным произведением B-сплайнов. Гибкость аппроксимации уравновешивается затем штрафом, представляющим собой интеграл от результата применения дифференциального оператора к аппроксимации решения B-сплайнами.

Продолжая исследования, начатые в [9–13], в настоящей работе рассматривается многомерный динамический процесс $u(\mathbf{x})$, где $\mathbf{x}=(x_1,\ldots,x_p)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^p$, описываемый дифференциальным уравнением в частных производных вида:

$$\mathcal{F}\left(\mathbf{x},u,\frac{\partial u}{\partial x_1},\ldots,\frac{\partial u}{\partial x_p},\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2},\ldots,\frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_p},\ldots,\boldsymbol{\theta}\right)=0, \tag{1}$$

где $\boldsymbol{\theta}=(\theta_1,\ldots,\theta_q)^{\mathrm{T}}$ – вектор параметров. Будем считать, что функция $\mathcal{F}$ линейна по u и ее производным.

Предположим, что значения функции u известны в узлах регулярной сетки с некоторой погрешностью, т. е. для $i=1,\ldots,N$ мы наблюдаем данные $(\mathbf{x}_i,y_i)$, такие что

$$y_i=u(\mathbf{x}_i)+\varepsilon_i,$$

где ε_i – независимые одинаково распределенные по нормальному закону ошибки измерений с нулевым математическим ожиданием и стандартным отклонением σ. Задача состоит в оценке неизвестных параметров $\boldsymbol{\theta}$ уравнения (1) и построении доверительных интервалов по зашумленным данным.

МЕТОДЫ И МАТЕРИАЛЫ

Идея предлагаемого нами интегрального метода состоит в том, чтобы при помощи интегрирования уравнения (1) по переменным $x_1,\ldots,x_p$ получить уравнения относительно параметров $\boldsymbol{\theta}$, не содержащие производных функции u.

Продемонстрируем наш подход на примере одномерного уравнения конвекции-диффузии-реакции:

$$\frac{\partial u(t,z)}{\partial t}-\theta_1\frac{\partial^2 u(t,z)}{\partial z^2}-\theta_2\frac{\partial u(t,z)}{\partial z}-\theta_3 u(t,z)=0. \tag{2}$$

Пусть $\{(t_k,z_j): k=1,\ldots,n;\ j=1,\ldots,m\}$ – регулярная прямоугольная сетка с шагом τ по времени и шагом h по пространственной переменной, в узлах которой мы наблюдаем значения функции u с некоторой погрешностью. Обозначим $u_j^k=u(t_k,z_j)$. Пусть $y_j^k=u_j^k+\varepsilon_j^k$ – наблюдаемые значения, где ε_j^k – независимые одинаково распределенные по нормальному закону ошибки измерений с нулевым математическим ожиданием и стандартным отклонением σ. Для произвольного $a\in\{2,3,\ldots,[(\min\{m,n\}-1)/2]\}$ зафиксируем $k\in\{a+1,a+2,\ldots,n-a\}$ и $j\in\{a+1,a+2,\ldots,m-a\}$.

Сначала проинтегрируем уравнение (2) по переменной t по отрезку $[t_{k-a},t_{k+a}]$. Получим

$$\int_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}\frac{\partial u(t,z)}{\partial t}dt-\theta_1\int_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}\frac{\partial^2 u(t,z)}{\partial z^2}dt-\theta_2\int_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}\frac{\partial u(t,z)}{\partial z}dt-\theta_3\int_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}u(t,z)\,dt=0.$$

Применяя формулу Ньютона-Лейбница в первом слагаемом, получим

$$u(t_{k+a},z)-u(t_{k-a},z)-\theta_1\int_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}\frac{\partial^2 u(t,z)}{\partial z^2}dt-\theta_2\int_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}\frac{\partial u(t,z)}{\partial z}dt-\theta_3\int_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}u(t,z)\,dt=0. \tag{3}$$

Теперь проинтегрируем уравнение (3) по переменной z по отрезку $[z_j-s,z_j+s]$, где $s\in[0,ah]$, меняя при этом порядок интегрирования во втором, третьем и четвертом слагаемых и применяя формулу Ньютона – Лейбница. Получим

$$\int_{z_j-s}^{z_j+s}\left[u(t_{k+a},z)-u(t_{k-a},z)\right]dz-\theta_1\int_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}\left[\frac{\partial u(t,z_j+s)}{\partial z}-\frac{\partial u(t,z_j-s)}{\partial z}\right]dt-\theta_2\int_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}\left[u(t,z_j+s)-u(t,z_j-s)\right]dt-\theta_3\int_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}\int_{z_j-s}^{z_j+s}u(t,z)\,dz\,dt=0. \tag{4}$$

Проинтегрируем, наконец, (4) по переменной s по отрезку $[0,ah]$. Получим

$$\int_0^{ah}\int_{z_j-s}^{z_j+s}\left[u(t_{k+a},z)-u(t_{k-a},z)\right]dz\,ds=$$

$$=\theta_1\int\limits_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}\left[u(t,z_{j+a})-2u(t,z_j)+u(t,z_{j-a})\right]dt+$$
$$+\theta_2\int\limits_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}\int\limits_0^{ah}\left[u(t,z_j+s)-u(t,z_j-s)\right]ds\,dt+ \quad (5)$$
$$+\theta_3\int\limits_{t_{k-a}}^{t_{k+a}}\int\limits_0^{ah}\int\limits_{z_j-s}^{z_j+s}u(t,z)\,dz\,ds\,dt.$$

Изменяя a, k и j в указанных диапазонах, получим переопределенную систему линейных относительно параметров θ_1, θ_2 и θ_3 уравнений вида (5). Интегрирование в (5) осуществляется с помощью составной формулы Симпсона, используя в качестве узлов интегрирования узлы сетки (t_k, z_j), а в качестве значений в них – зашумленные значения y_j^k. С помощью МНК находим оценки параметров $\hat{\boldsymbol{\theta}}=(\hat{\theta}_1,\hat{\theta}_2,\hat{\theta}_3)^{\mathrm{T}}$. Для построения доверительных интервалов оценим стандартное отклонение погрешности наблюдений σ.

Конечноразностный аналог уравнения (2) имеет вид:

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}-\theta_1\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}-$$
$$-\theta_2\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}-\theta_3 u_j^k=\eta_j^k,$$

где η_j^k – ошибки аппроксимации, или

$$u_j^{k+1}=(r_1-r_2)u_{j-1}^k+(1-2r_1+r_3)u_j^k+$$
$$+(r_1+r_2)u_{j+1}^k+\xi_j^k, \quad (6)$$

где $r_1=\dfrac{\tau\theta_1}{h^2}$, $r_2=\dfrac{\tau\theta_2}{2h}$, $r_3=\tau\theta_3$ и $\xi_j^k=\tau\eta_j^k$. Обозначим, $\alpha_1=r_1-r_2$, $\alpha_2=1-2r_1+r_3$ и $\alpha_3=r_1+r_2$. Получим систему рекуррентных зависимостей

$$u_j^{k+1}=\alpha_1 u_{j-1}^k+\alpha_2 u_j^k+\alpha_3 u_{j+1}^k+\xi_j^k, \quad (7)$$

где $k=1,\ldots,n-1$, $j=2,\ldots,m-1$. Используя полученные с помощью интегрального метода оценки $\hat{\theta}_1$, $\hat{\theta}_2$ и $\hat{\theta}_3$, найдем оценки $\hat{\alpha}_1$, $\hat{\alpha}_2$ и $\hat{\alpha}_3$ параметров уравнений (7). Тогда имеем

$$e_j^k=y_j^{k+1}-\hat{\alpha}_1 y_{j-1}^k-\hat{\alpha}_2 y_j^k-\hat{\alpha}_3 y_{j+1}^k=$$
$$=u_j^{k+1}+\varepsilon_j^{k+1}-\hat{\alpha}_1 u_{j-1}^k-\hat{\alpha}_1\varepsilon_{j-1}^k-$$
$$-\hat{\alpha}_2 u_j^k-\hat{\alpha}_2\varepsilon_j^k-\hat{\alpha}_3 u_{j+1}^k-\hat{\alpha}_3\varepsilon_{j+1}^k=$$
$$=(\varepsilon_j^{k+1}-\hat{\alpha}_1\varepsilon_{j-1}^k-\hat{\alpha}_2\varepsilon_j^k-\hat{\alpha}_3\varepsilon_{j+1}^k)+$$
$$+(u_j^{k+1}-\hat{\alpha}_1 u_{j-1}^k-\hat{\alpha}_2 u_j^k-\hat{\alpha}_3 u_{j+1}^k)=$$
$$=\varepsilon_j^{k+1}-\hat{\alpha}_1\varepsilon_{j-1}^k-\hat{\alpha}_2\varepsilon_j^k-\hat{\alpha}_3\varepsilon_{j+1}^k+\hat{\xi}_j^k,$$

где $\hat{\xi}_j^k$ близко к ξ_j^k. В силу независимости погрешностей наблюдений и свойств дисперсии имеем

$$D(e_j^k)=D(\varepsilon_j^{k+1})+\hat{\alpha}_1^2 D(\varepsilon_{j-1}^k)+$$
$$+\hat{\alpha}_2^2 D(\varepsilon_j^k)+\hat{\alpha}_3^2 D(\varepsilon_{j+1}^k)+D(\hat{\xi}_j^k)=$$
$$=\sigma^2(1+\hat{\alpha}_1^2+\hat{\alpha}_2^2+\hat{\alpha}_3^2)+D(\hat{\xi}_j^k).$$

Так как $D(\hat{\xi}_j^k)$ близки к 0, можно взять $\sigma^2(1+\hat{\alpha}_1^2+\hat{\alpha}_2^2+\hat{\alpha}_3^2)$ в качестве оценки $D(e_j^k)$. С другой стороны, мы можем оценить $D(e_j^k)$ с помощью

$$\frac{\sum(e_j^k)^2}{(n-1)(m-2)-3}.$$

Таким образом, в качестве оценки стандартного отклонения можно взять

$$\hat{\sigma}=\sqrt{\frac{\sum(e_j^k)^2}{((n-1)(m-2)-3)(1+\hat{\alpha}_1^2+\hat{\alpha}_2^2+\hat{\alpha}_3^2)}}. \quad (8)$$

Далее, для построения доверительных интервалов к наблюдаемым значениям y_j^k многократно добавляем сгенерированный белый гауссовский шум с нулевым математическим ожиданием и стандартным отклонением $\hat{\sigma}$. Для каждого полученного таким образом набора значений находим оценки параметров θ_1, θ_2 и θ_3. Для полученных наборов оценок находим выборочные стандартные отклонения и умножаем на соответствующую квантиль распределения Стьюдента. Эти произведения примем за половины длин доверительных интервалов для оценок $\hat{\theta}_1$, $\hat{\theta}_2$ и $\hat{\theta}_3$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Сравним результаты работы интегрального метода с результатами двух методов, предложенных в работе [8]. Для этого решим численно уравнение (2) с истинными значениями параметров $\theta_1=1$, $\theta_2=0.1$ и $\theta_3=0.1$, граничным условием $u(t,0)=0$ и начальным условием $u(0,z)=(1+0.1\times(20-z)^2)^{-1}$ в области $[1,20]\times[1,40]$. График численного решения показан на рис. 1.

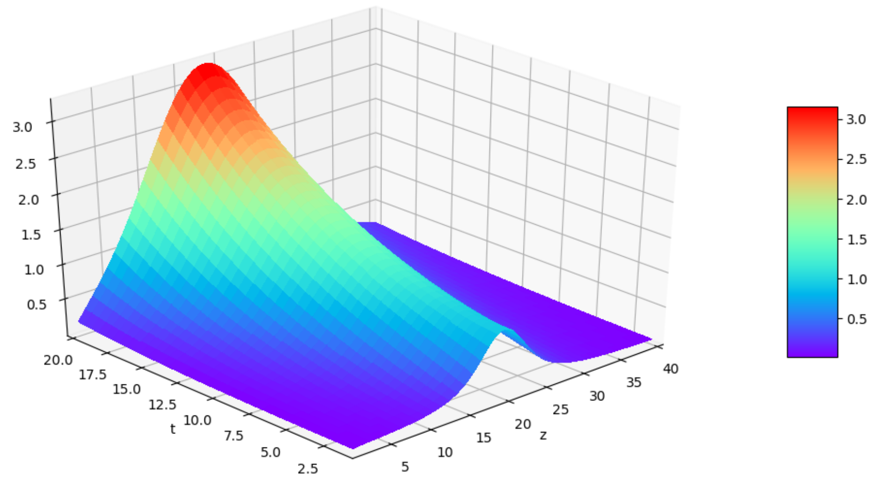

Рис. 1. График численного решения уравнения (2)

Затем наблюдаемые данные моделируются путем добавления к численному решению уравнения (2) в точках с целыми координатами t и z независимых и одинаково распределенных гауссовских погрешностей со стандартным отклонением σ. Другими словами, наши смоделированные данные представляют собой решетку 20×40 в области $[1,20]\times[1,40]$.

Интегральный метод вместе с каскадным и байесовским методами из работы [8] применяются для оценки трех параметров уравнения (2), используя смоделированные данные. Моделирование производится по 1000 раз для значений $\sigma \in \{0.02, 0.05\}$.

Результаты моделирования, включая смещения (Bias), стандартные отклонения (STD), квадратный корень из среднеквадратичных ошибок (RMSE) и вероятности покрытия 95 % доверительными интервалами (CP95) для интегрального метода (IM), байесовского метода (BM) и каскадного метода (PC) представлены в табл. 1.

Табл. 1 показывает, что при примерно одинаковом стандартном отклонении с байесовским методом, интегральный метод имеет значительно меньшее смещение, что, в свою

Таблица 1

Результаты моделирования

Погрешность		$\sigma = 0.02$			$\sigma = 0.05$		
Параметры		θ_1	θ_2	θ_3	θ_1	θ_2	θ_3
Значения		1.0	0.1	0.1	1.0	0.1	0.1
Bias $\times 10^3$	IM	–1.0	–0.04	–0.0003	–5.8	–0.005	–0.07
	BM	–16.5	–0.4	–0.2	–35.6	1.0	0.6
	PC	–29.7	–0.1	–0.3	–55.9	–0.2	–0.5
STD $\times 10^3$	IM	8.8	1.5	0.2	21.0	3.7	0.5
	BM	9.1	1.6	0.2	22.2	3.8	0.5
	PC	24.9	3.8	0.5	40.5	6.2	0.8
RMSE $\times 10^3$	IM	8.82	1.50	0.20	21.7	3.7	0.5
	BM	18.81	1.66	0.27	42.0	3.9	0.8
	PC	38.96	3.75	0.54	69.1	6.2	1.0
CP95	IM	94.9 %	94.4 %	95.5 %	95.2 %	95.1 %	93.6 %
	BM	93.9 %	99.9 %	98.8 %	74.0 %	97.8 %	86.4 %
	PC	84.3 %	96.7 %	94.9 %	78.1 %	96.5 %	93.5 %

очередь, приводит к меньшему корню из среднеквадратичной ошибки. Это особенно заметно для оценок параметра θ_1, где интегральный метод дает примерно вдвое меньший корень из среднеквадратичной ошибки, чем байесовский метод. Если говорить о вероятностях покрытия 95 % доверительными интервалами истинных значений параметров, то для интегрального метода они в пяти из шести случаев ближе к номиналу, чем для двух других методов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате работы предложен новый интегральный метод параметрической идентификации дифференциальных уравнений в частных производных по зашумленным данным. Метод продемонстрирован на одномерном уравнении конвекции-диффузии-реакции. Несмотря на сравнительную простоту, как показывает проведенное моделирование, предложенный метод показывает лучшие результаты по сравнению с более сложными аналогами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A Bayesian approach to parameter estimation in HIV dynamical models / H. Putter [и др.] // Statistics in Medicine. – 2002. – Vol. 21. – P. 2199–2214.

2. *Huang, Y.* Hierarchical Bayesian methods for estimation of parameters in a longitudinal HIV dynamic system / Y. Huang, D. Liu, H. Wu // Biometrics. – 2006. – Vol. 62. – P. 413–423.

3. *Huang, Y.* A Bayesian approach for estimating antiviral efficacy in HIV dynamic models / Y. Huang, H. Wu // Journal of Applied Statistics. – 2006. – Vol. 33. – P. 155–174.

4. Parameter estimation for differential equations: a generalized smoothing approach (with discussion) / J. O. Ramsay [и др.] // Journal of the Royal Statistical Society. Series B. – 2007. – Vol. 69. – P. 741–796.

5. *Cao, J.* Penalized nonlinear least squares estimation of time-varying parameters in ordinary differential equations / J. Cao, J. Z. Huang, H. Wu // Journal of Computational and Graphical Statistics. – 2012. – Vol. 21. – P. 42–56.

6. *Liang, H.* Parameter estimation for differential equation models using a framework of measurement error in regression models / H. Liang, H. Wu // Journal of the American Statistical Association. – 2008. – Vol. 103. – P. 1570–1583.

7. *Chen, J.* Efficient local estimation for time-varying coefficients in deterministic dynamic models with applications to HIV-1 dynamics / J. Chen, H. Wu // Journal of the American Statistical Association. – 2008. – Vol. 103. – P. 369–384.

8. Parameter estimation of partial differential equation models / X. Xun [и др.] // Journal of the American Statistical Association. – 2013. – Vol. 108. – P. 1009–1020.

9. Modeling of nonstationary distributed processes on the basis of multidimensional time series / M. G. Matveev [и др.] // Procedia Engineering. – 2017. – Vol. 201. – P. 511–516.

10. Verification of the convective diffusion process based on the analysis of multidimensional time series / M. G. Matveev [и др.] // CEUR Workshop Proceedings. – 2017. – Vol. 2022. – P. 354–358.

11. *Матвеев, М. Г.* Двухшаговый метод идентификации распределенной динамической системы: электронный ресурс / М. Г. Матвеев, А. В. Копытин, Е. А. Копытина // Информатика: проблемы, методология, технологии: сборник материалов 18-й международной научно-методической конференции, Воронеж 8–9 февраля 2018 г.: в 7 т. – Воронеж, 2018 . – Т. 5. – С. 185–191.

12. *Матвеев, М. Г.* Комбинированный метод идентификации параметров распределенной динамической модели / М. Г. Матвеев, А. В. Копытин, Е. А. Сирота // Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ-2018): сборник трудов 4-й Международной конференции и молодежной школы. – Самара, 2018. – С. 1651–1657.

13. *Копытин, А. В.* Применение расширенного фильтра Калмана для идентификации параметров распределенной динамической системы / А. В. Копытин, Е. А. Копытина, М. Г. Матвеев // Вестник Воронеж. гос. ун-та. Сер. Системный анализ и информационные технологии. – 2018. – № 3. – С. 44–50.

Копытин А. В. – канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры информационных технологий управления, факультет компьютерных наук, Воронежский государственный университет.
E-mail: alexkopytin@gmail.com

Копытина Е. А. – ассистент кафедры информационных технологий управления, факультет компьютерных наук, Воронежский государственный университет.
E-mail: zhemkaterina@yandex.ru

Kopytin A. V. – Ph. D. of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Department of Information Technologies in Management, Computer Sciences Faculty, Voronezh State University.
E-mail: alexkopytin@gmail.com

Kopytina E. A. – Postgraduate Student, Department of Information Technologies in Management, Computer Sciences Faculty, Voronezh State University.
E-mail: zhemkaterina@yandex.ru