

Прикладная и вычислительная математика

Научная статья

УДК 519.65, 53.088

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18212>

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА СИСТЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В СВЯЗИ С ИЗУЧЕНИЕМ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ И БИМЕДИЦИНСКИХ ПРОЦЕССОВ

А. П. Головицкий 

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

 alexandergolovitski@yahoo.com

Аннотация. В работе представлен новый метод решения задачи вычисления априори неизвестных и не поддающихся прямым измерениям параметров, входящих в состав систем дифференциальных уравнений, адекватно описывающих имеющиеся экспериментальные данные, но не имеющих аналитической формы решения. Задачи такого рода нередко встречаются при физических исследованиях полупроводниковых материалов, а также в электронике, биофизике и медицинской физике. Новизна заключается в предложенной идее численного расчета частных производных, что позволило применить для решения такой задачи метод нелинейной аппроксимации Левенберга – Марквардта. На конкретных примерах показано, что погрешность вычисления значений параметров оказывается не больше погрешности экспериментальных данных.

Ключевые слова: обратная задача, система дифференциальных уравнений, косвенные измерения, метод Левенберга – Марквардта

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2023-0016).

Для цитирования: Головицкий А. П. Обратная задача систем дифференциальных уравнений в связи с изучением полупроводниковых материалов и биомедицинских процессов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 2. С. 132–143. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18212>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18212>

AN INVERSE PROBLEM OF DIFFERENTIAL EQUATION SYSTEMS IN CONNECTION WITH THE STUDY OF SEMICONDUCTOR MATERIALS AND BIOMEDICINAL PROCESSES

A. P. Golovitskii 

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

 alexandergolovitski@yahoo.com

Abstract. This paper puts forward a new method of solving the problem for calculating the unknown and non-measurable parameters, that are included in a system of differential equations, whose solution adequately reproduces the given experimental data, but has no analytical form. The problems of this kind are often found in physical research of semiconductor materials, biomedical processes and in electronics. The novelty lies in the proposed idea of numerical calculations of partial derivatives which has made it possible to adapt the Levenberg – Marquardt method of non-linear approximations for solving the said problem. Our specific examples showed that calculation errors of the parameter values were not more than the experimental errors.

Keywords: inverse problem, differential equation system, indirect measurements, Levenberg – Marquardt method

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2023-0016).

For citation: Golovitskii A. P., An inverse problem of differential equation systems in connection with the study of semiconductor materials and biomedical processes, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (2) (2025) 132–143. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18212>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ДУ), имеющие решения в виде периодических нелинейных незатухающих колебаний, широко используются для математического моделирования автоколебательных физических, химических и биологических процессов [1 – 4, 10]. Аргументом этих решений обычно является время t .

Реальные процессы живой и неживой природы, как правило, включают большое количество отдельных подпроцессов или стадий разного рода – часто самих по себе очень сложных и многоступенчатых, особенно если речь идет о сложных процессах протекания тока в полупроводниковых материалах [10] или о биологических процессах [3 – 6, 13]. В идеале в их модельное описание требуется вовлекать большое количество связанных между собой переменных, что усложняет анализ, приводит к плохой обусловленности моделей и неустойчивости модельных решений, обычно получаемых численно, так как весьма часто оказывается, что аналитических решений таких моделей не существует.

В связи с изложенным, исследователь вынужден упрощать модели для придания им ясности и устойчивости, т. е. сокращать число переменных, пренебрегая какими-то мало-важными (на его взгляд) реакциями и объединять другие в комплексы реакций, с целью количественного учета (хотя бы не в полной мере) влияния тех многих реакций, которые не определяют качественного протекания рассматриваемого процесса в целом.

Для сохранения количественной адекватности упрощенных моделей, включающих такие объединенные комплексы реакций, необходимо правильно задать их скоростные коэффициенты, которые фактически становятся подгоночными параметрами.

Здесь уместно добавить, что даже скорости отдельных конкретных биохимических реакций или значения некоторых параметров новых полупроводниковых материалов тоже бывают известны довольно приблизительно; разброс данных у разных авторов велик.

Итак, модели могут включать неизвестные или «плохо» известные параметры. И было бы очень желательно уметь вычислять и уточнять их значения с целью получения новой количественной физической информации.

Если переменные, составляющие решение системы ДУ, измерены экспериментально, то появляется возможность вычисления неизвестных параметров при сопоставлении модельных расчетных и экспериментальных результатов. Такая обратная задача системы ДУ может стать основой косвенных экспериментальных измерений – когда неизвестные параметры нельзя измерить непосредственно, но можно их рассчитать через известную связь (модель) с другими, измеряемыми величинами и/или переменными.

Разработка методики решения такой обратной задачи и ее тестирование составляют цели настоящей работы.

Постановка задачи

В общем виде задача формулируется следующим образом. Имеются данные эксперимента о переменных $u(t_i)$, $v(t_i)$, $w(t_i)$, ..., зарегистрированных (с погрешностью) в k моментах времени t_i . Также имеется система ДУ:

$$\left. \begin{aligned} \dot{\tilde{u}} &= f(t, \tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}, \dots, a, b, c, \dots) \\ \dot{\tilde{v}} &= g(t, \tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}, \dots, a, b, c, \dots) \\ \dot{\tilde{w}} &= h(t, \tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}, \dots, a, b, c, \dots) \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \right\}, \quad (1)$$

имеющая N компонент решения

$$\tilde{u}(t_i, a, b, c, \dots), \tilde{v}(t_i, a, b, c, \dots), \tilde{w}(t_i, a, b, c, \dots), \dots$$

Полагается, что система (1) не имеет аналитического решения и что компоненты решения (1) можно найти только численно.

Положим также, что эти компоненты способны адекватно соответствовать данным эксперимента, обозначенным далее как

$$u_i \equiv u(t_i), v_i \equiv v(t_i), w_i \equiv w(t_i), \dots$$

Пусть начальные условия всех уравнений (1) заданы в условном начале отсчета времени t_0 ; тогда система ДУ (1) является задачей Коши. Требуется найти неизвестные численные значения параметров a, b, c, \dots , входящих в систему (1), которые минимизируют функционал сумм квадратов отклонений компонент решения системы (1) от соответствующих им экспериментальных данных:

$$\begin{aligned} S = & \sum_{i=1}^k [\tilde{u}(t_i, a, b, c, \dots) - u_i]^2 + \sum_{i=1}^k [\tilde{v}(t_i, a, b, c, \dots) - v_i]^2 + \\ & + \sum_{i=1}^k [\tilde{w}(t_i, a, b, c, \dots) - w_i]^2 + \dots \rightarrow \min_{a, b, c, \dots} \end{aligned} \quad (2)$$

Число сумм в функционале S равно n – числу тех переменных системы (1), для которых получены экспериментальные данные.

Стоит отметить, что в ходе выполнения настоящей работы выяснилось, что наличие данных эксперимента для всех N переменных системы (1) не обязательно. Для вычисления параметров с приемлемой точностью достаточно данных о меньшем числе переменных $n < N$, а нередко – всего об одной переменной.

Задача, подобная сформулированной в данном разделе, ставилась ранее в статье [5] применительно к модели реакции Белоусова – Жаботинского [6]. «Экспериментальные» данные в работе [5] моделировались решением прямой задачи; какой-либо дополнительной модельной погрешности этих данных не вводилось. Поиск минимума S по параметрам был проведен авторами работы [5] по методу Хука – Дживса [7], который представляет собой один из вариантов метода покоординатного спуска [9]. Метод является прямым, так что обратная задача (2) фактически решалась методом перебора решений прямой задачи (1). Для таких методов решения обратных задач сходимость гарантируется лишь в весьма малой окрестности минимума; также характерны большое время счета и невысокая точность результатов. Точность вычисления трех скоростных коэффициентов, заявленная в статье [5], оказалась не вполне удовлетворительной: 12, 14 и 420 %.

Алгоритм решения задачи

Для нахождения параметров, минимизирующих функционал (2), в настоящей работе предлагается альтернативный метод, который по идее близок к методу нелинейной аппроксимации Левенберга – Марквардта [11], включающему элементы градиентного спуска наряду с предобуславливанием и регуляризацией.

Тот факт, что решение (1), хотя и существует, но аналитический вид его компонент

$$\tilde{u}(t_i, a, b, c, \dots), \tilde{v}(t_i, a, b, c, \dots), \tilde{w}(t_i, a, b, c, \dots), \dots$$

остаётся неизвестным, вынуждает допустить нелинейную зависимость компонент от параметров a, b, c, \dots . Поэтому для нахождения последних целесообразно применить один из методов нелинейной минимизации функционала S .

Все такие методы основаны на идее линеаризации уклонений

$$\tilde{u}(t_i, a, b, c, \dots) - u_i; \tilde{v}(t_i, a, b, c, \dots) - v_i; \tilde{w}(t_i, a, b, c, \dots) - w_i; \dots \text{ и т.д.}$$

относительно малых приращений параметров da, db, dc, \dots .

Допустим, что из физических соображений известен некий стартовый набор параметров

$$a_0, b_0, c_0, \dots \equiv \mathbf{p}_0.$$

Здесь имеет смысл попытаться сразу решить систему (1) со стартовым набором \mathbf{p}_0 , рассчитать относительную невязку вида

$$\rho_0 = \frac{1}{n} \left\{ \frac{\sum_{i=1}^k [\tilde{u}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots) - u_i]^2}{\sum_{i=1}^k u_i^2} + \frac{\sum_{i=1}^k [\tilde{v}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots) - v_i]^2}{\sum_{i=1}^k v_i^2} + \right. \\ \left. + \frac{\sum_{i=1}^k [\tilde{w}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots) - w_i]^2}{\sum_{i=1}^k w_i^2} + \dots \right\}^{1/2} \quad (3)$$

и сопоставить ее с относительной погрешностью эксперимента ρ .

Если окажется, что $\rho_0 \approx \rho$, то можно полагать, что искомые параметры угаданы. Но обычно бывает не так, и $\rho_0 > \rho$. Если же значение ρ_0 чересчур превышает величину ρ , то стоит попытаться уточнить стартовый набор методом проб и ошибок, варьируя a_0, b_0, c_0, \dots , находя ρ_0 по выражению (3) и сравнивая значения ρ_0 и ρ .

Добавим, что зависимости некоторых компонент решения (1) от времени часто имеют вид последовательности узких импульсов с большой скважностью. Практика показывает, что уверенная сходимость гарантируется при перекрытии импульсов решения (1) с соответствующими экспериментальными данными, составляющем не менее 10%.

Далее разлагаем уклонения на i -м месте:

$$\tilde{u}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots) - u_i; \tilde{v}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots) - v_i; \tilde{w}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots) - w_i; \dots \quad (4)$$

в окрестности a_0, b_0, c_0, \dots в ряды Тейлора по приращениям параметров da, db, dc, \dots и удерживаем лишь линейные члены разложения:

$$S = \sum_{i=1}^k \left\{ \left[\tilde{u}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots) - u_i + \frac{\partial \tilde{u}(t_i)}{\partial a} \Big|_{\mathbf{p}_0} da + \frac{\partial \tilde{u}(t_i)}{\partial b} \Big|_{\mathbf{p}_0} db + \dots \right]^2 + \right. \\ \left. + \left[\tilde{v}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots) - v_i + \frac{\partial \tilde{v}(t_i)}{\partial a} \Big|_{\mathbf{p}_0} da + \frac{\partial \tilde{v}(t_i)}{\partial b} \Big|_{\mathbf{p}_0} db + \dots \right]^2 + \right. \\ \left. + \left[\tilde{w}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots) - w_i + \frac{\partial \tilde{w}(t_i)}{\partial a} \Big|_{\mathbf{p}_0} da + \frac{\partial \tilde{w}(t_i)}{\partial b} \Big|_{\mathbf{p}_0} db + \dots \right]^2 + \dots \right\}. \quad (5)$$

Тем самым задача (2) оказывается линеаризованной относительно приращений da, db, dc, \dots .

Затем, как в линейном методе наименьших квадратов, следует найти частные производные

$$\frac{\partial S}{\partial [da]}, \frac{\partial S}{\partial [db]}, \frac{\partial S}{\partial [dc]}, \dots,$$

приравнять их нулю, и тогда можно получить систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) относительно неизвестных da, db, dc, \dots :

$$\begin{cases} A_{aa}[da] + A_{ab}[db] + A_{ac}[dc] + \dots = A_{a0}, \\ A_{ba}[da] + A_{bb}[db] + A_{bc}[dc] + \dots = A_{b0}, \\ A_{ca}[da] + A_{cb}[db] + A_{cc}[dc] + \dots = A_{c0}, \\ \dots \end{cases} \quad (6)$$

$$\left. \begin{aligned} A_{ab} &= \sum_{i=1}^k \left[\frac{\partial \tilde{u}(t_i)}{\partial a} \Big|_{\mathbf{p}_0} \frac{\partial \tilde{u}(t_i)}{\partial b} \Big|_{\mathbf{p}_0} + \frac{\partial \tilde{v}(t_i)}{\partial a} \Big|_{\mathbf{p}_0} \frac{\partial \tilde{v}(t_i)}{\partial b} \Big|_{\mathbf{p}_0} + \frac{\partial \tilde{w}(t_i)}{\partial a} \Big|_{\mathbf{p}_0} \frac{\partial \tilde{w}(t_i)}{\partial b} \Big|_{\mathbf{p}_0} + \dots \right]; \\ A_{a0} &= - \sum_{i=1}^k \left\{ \frac{\partial \tilde{u}(t_i)}{\partial a} \Big|_{\mathbf{p}_0} [\tilde{u}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots) - u_i] + \frac{\partial \tilde{v}(t_i)}{\partial a} \Big|_{\mathbf{p}_0} [\tilde{v}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots) - v_i] + \dots \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Главной проблемой осуществления метода линеаризации для нахождения параметров систем ДУ, в отличие от других методов нелинейной минимизации (включая и метод Левенберга – Марквардта), является невозможность аналитического расчета частных производных в системе (7), так как исходно делалось предположение, что система (1) не имеет аналитического решения.

В настоящей работе предлагается находить частные производные численно.

Зададим стартовый набор $\mathbf{p}_0 \equiv a_0, b_0, c_0, \dots$ и начальные условия системы (1) из экспериментальных данных. Решим систему (1) численно и найдем компоненты решения

$$\tilde{u}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots), \tilde{v}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots), \dots \text{ и т.д.}$$

После этого зададим малое приращение параметру a_0 : такое, что $|\delta a| \ll |a_0|$, а все остальные параметры оставим без изменений. Подставим $a_0 + \delta a$ в систему (1) вместо a_0 , решим ее с теми же начальными условиями и найдем

$$\tilde{u}(t_i, a_0 + \delta a, b_0, c_0, \dots), \tilde{v}(t_i, a_0 + \delta a, b_0, c_0, \dots), \dots \text{ и т.д.}$$

Затем, вычислив отношение

$$\frac{\tilde{u}(t_i, a_0 + \delta a, b_0, c_0, \dots) - \tilde{u}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots)}{\delta a} = \frac{\delta \tilde{u}(t_i, a_0, b_0, c_0, \dots)}{\delta a}, \quad (8)$$

получим численный аналог частной производной

$$\frac{\partial \tilde{u}(t_i, a, b, c, \dots)}{\partial a} \Big|_{\mathbf{p}_0}.$$

Таким же образом находятся частные производные $\frac{\partial}{\partial a} \Big|_{\mathbf{p}_0}$ и для остальных компонент решения (1).

Затем дается малое приращение параметру b_0 и так же находятся численные аналоги $\frac{\partial}{\partial b} \Big|_{\mathbf{p}_0}$ и т.д.

В итоге проблема расчета всех элементов СЛАУ (6) успешно решена.

Решением СЛАУ (6) станет вектор

$$d\mathbf{p} \equiv [da, db, dc, \dots].$$

На первый взгляд, задачу (2) следует решать итеративно: задать стартовый набор параметров \mathbf{p}_0 , составить и решить СЛАУ (6), найти $d\mathbf{p}$, затем $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_0 + d\mathbf{p}$. После этого надо проверить, снизится ли величина S в формуле (2) при подстановке туда \mathbf{p}_1 вместо \mathbf{p}_0 .

Если снизится, то \mathbf{p}_1 берется за \mathbf{p}_0 и начинается следующая итерация: снова решается система (1), составляется СЛАУ (6) и т.д., до тех пор, пока значение S , монотонно убывая, не стабилизируется.

Пока все выглядит логичным, поскольку здесь изложен давно разработанный метод Гаусса – Ньютона для поиска минимума. Однако в настоящей работе выяснилось, что в практике решения обратных задач систем ДУ этот метод фактически непригоден. При его использовании величина S часто вовсе не убывает – когда стартовое приближение не очень близко к набору параметров, дающему минимум, и/или когда матрица A из СЛАУ (6) плохо обусловлена [12].

При решении обратных задач систем ДУ методом Гаусса – Ньютона обычно на первой итерации получается, что $S(\mathbf{p}_1) > S(\mathbf{p}_0)$ вместо $S(\mathbf{p}_1) < S(\mathbf{p}_0)$, а нередко бывает, что $S(\mathbf{p}_1)$ оказывается много больше, чем $S(\mathbf{p}_0)$. Дело в том, что физические соображения часто дают такой набор a_0, b_0, c_0, \dots , что ни приращения параметров da, db, dc, \dots , ни отклонения (4) не являются достаточно малыми для того, чтобы пренебречь высшими членами рядов (5). Тогда все выражения, начиная с (5), строго говоря, неверны, т.е. не соответствуют задаче. Но все эти выражения соответствовали бы ей, если бы приращения da, db, dc, \dots были бы малыми.

Поэтому далее предлагается, во-первых, как и в методе Левенберга – Марквардта [11], проделать с матрицей A преобуславливающую процедуру, именуемую масштабированием, при котором матрица A переходит в матрицу R :

$$R = \begin{pmatrix} 1 & r_{ab} & r_{ac} & \dots \\ r_{ba} & 1 & r_{bc} & \dots \\ r_{ca} & r_{cb} & 1 & \vdots \\ \vdots & \vdots & \dots & \ddots \end{pmatrix}, \text{ где } \forall m, n > 0 \quad r_{mn} = \frac{A_{mn}}{\sqrt{A_{mm}A_{nn}}}. \quad (9)$$

При этом необходимо пересчитать и элементы столбца свободных членов СЛАУ (6):

$$\forall m > 0 \quad r_{m0} = A_{m0} / \sqrt{A_{mm}}. \quad (10)$$

Масштабированная СЛАУ вместо СЛАУ (6) в матричной форме приобретет вид

$$Rz = R_0, \quad (11)$$

а компоненты ее решения z_m (их число равно числу искомых параметров) окажутся связанными с компонентами решения СЛАУ (6) соотношением

$$\forall m > 0 \quad [d\mathbf{p}]_m = z_m / \sqrt{A_{mm}}. \quad (12)$$

СЛАУ (11) оказывается гораздо лучше обусловленной, а ее решение – более устойчивым, чем у СЛАУ (6).

Во-вторых, чтобы дополнительно улучшить обусловленность СЛАУ и ускорить сходимость метода, в настоящей работе, опираясь на результаты статьи [11], предлагается ввести дополнительную регуляризацию: к диагональным элементам матрицы R (которая является положительно определенной и имеет все положительные собственные числа) следует добавить положительное число μ – так называемый коэффициент вязкости. Помимо снижения числа обусловленности СЛАУ (12), введение коэффициента μ , согласно Левенбергу [11], принудительно делает приращения параметров малыми.

В итоге вместо СЛАУ (6) нужно решить следующую СЛАУ:

$$(R + I\mu)z = R_0, \quad (13)$$

где I – единичная матрица.

Величина μ должна уточняться в ходе решения задачи. На первой итерации рекомендуется взять $\mu \approx 0,1 - 0,3$.

После составления СЛАУ (6), преобразования ее к виду (13) и нахождения решения следует выполнить демасштабирование (12), тем самым вычисляя приращения искомых параметров da, db, dc, \dots . Затем находят

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_0 + d\mathbf{p} \equiv a_0 + da, b_0 + db, c_0 + dc, \dots = a_1, b_1, c_1, \dots$$

Далее подставляют найденные значения параметров a_1, b_1, c_1, \dots в систему (1), решают ее, и рассчитывают невязку ρ_1 :

$$\rho_1 = \frac{1}{n} \left\{ \frac{\sum_{i=1}^k [\tilde{u}(t_i, a_1, b_1, c_1, \dots) - u_i]^2}{\sum_{i=1}^k u_i^2} + \frac{\sum_{i=1}^k [\tilde{v}(t_i, a_1, b_1, c_1, \dots) - v_i]^2}{\sum_{i=1}^k v_i^2} + \frac{\sum_{i=1}^k [\tilde{w}(t_i, a_1, b_1, c_1, \dots) - w_i]^2}{\sum_{i=1}^k w_i^2} + \dots \right\}^{1/2} \quad (14)$$

Теперь следует проверить, будет ли $\rho_1 \approx \rho$. Если да, то искомые параметры найдены (это a_1, b_1, c_1, \dots), поставленная задача успешно решена.

Конец вычислений.

В случае если $\rho_1 > \rho_0$, то итерация не засчитывается, величину μ надлежит увеличить (примерно в 1,5 раза) и следует вернуться к началу решения (13). Случается, что соотношение $\rho_1 > \rho_0$ вдруг возникает в ходе расчетов не на первой итерации. Тогда процедура увеличения μ может помочь восстановить сходимость и устойчивость. Если же μ достигла чересчур большой величины (превышает значение 2), то это указывает на ошибку в формулировании задачи, например, когда в системе ДУ имеется ошибка и система плохо соответствует экспериментальным данным.

Конец вычислений.

Если же $\rho_1 < \rho_0$, но все еще $\rho_1 > \rho$, то \mathbf{p}_1 берут за \mathbf{p}_0 , а ρ_1 за ρ_0 . Следует уменьшить величину μ (умножить на 0,6 – 0,9) и начать очередную итерацию: снова составить СЛАУ (6) и т.д.

Итерации проводятся, пока S не стабилизируется, а ρ_1 не станет примерно равным ρ .

Примеры решения обратных задач систем ДУ

В данном разделе в качестве примеров рассмотрены две широко известные модели, которые можно назвать классическими. Для численного решения системы (1) в настоящей работе применялся метод Рунге – Кутта IV порядка с апостериорным уточнением по Рунге [8, 9].

Модель автокаталитической реакции «Брюсселятор». (Модель I). Модель «Брюсселятор» [13] создана И. Пригожиным и Р. Лефевром первоначально в качестве «вычислительного эксперимента», т.е. с целью поиска и установления разумного физико-химического механизма протекания периодических биохимических реакций. Впоследствии модель позволила изучать свойства диссипативных структур в различных нелинейных системах, в том числе и нехимической природы. Модель не относится к какой-либо конкретной реакции, поэтому значения всех скоростей гипотетических промежуточных стадий реакции являлись подгоночными параметрами, значения которых подбирались так, чтобы решения модельных уравнений демонстрировали колебательный характер.

Система ДУ, предложенная в статье [13], имеет следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= a - (b+1)x + x^2 y; \\ \dot{y} &= bx - x^2 y \end{aligned} \right\}$$

Переменные $x(t)$ и $y(t)$ пропорциональны концентрациям веществ, участвующих в реакции, и, в принципе, могли бы быть измерены экспериментально. Значения параметров a и b полагались неизвестными.

Погрешность модельных «экспериментальных» данных по временным функциям $x(t)$ и $y(t)$ была взята для данного примера около 5%. Стартовые приближения для значений параметров a_0 и b_0 подбирались методом проб и ошибок. В итоге были взяты $a_0 = 1,0$; $b_0 = 2,5$. При этом отклонение $x_0(t)$ и $y_0(t)$ от «экспериментальных» данных составило 97% (рис. 1, a, b).

Результаты работы алгоритма после 18 итераций показаны на рис. 1, c, d : найденные значения параметров составили $a = 1,09$; $b = 3,16$: погрешность не превышала 1,3% (модельные значения 1,1 и 3,2), что следует признать хорошим результатом.

Приведенный пример показывает, что при наличии экспериментальных данных о временной зависимости концентраций реагентов и продуктов конкретной реакции можно было бы количественно определить скорости промежуточных ступеней этой реакции (что составляет суть косвенного эксперимента) и на этой основе установить механизм их протекания.

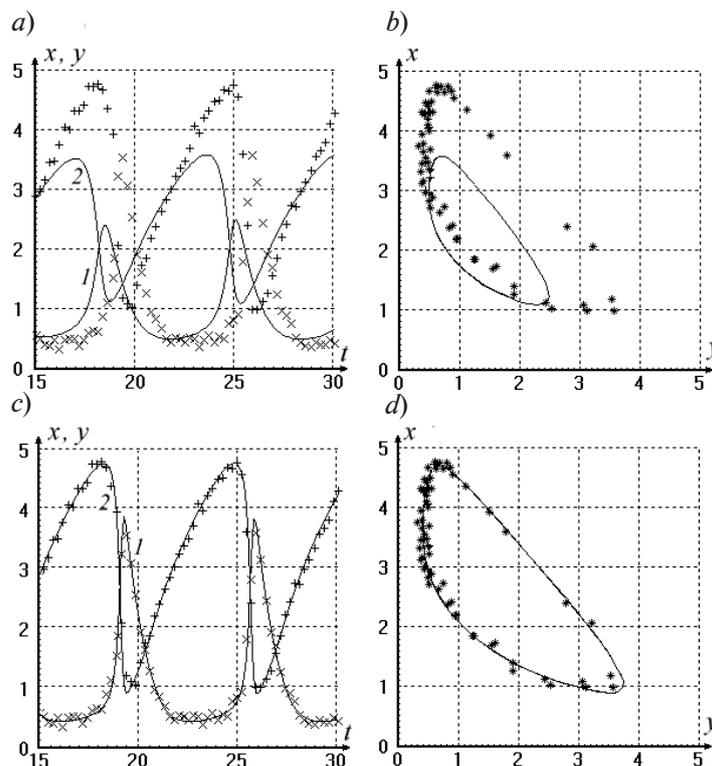


Рис. 1. Результаты решения для модели I обратной задачи системы ДУ относительно $x(t)$ (кривые 1) и $y(t)$ (кривые 2); на графиках показаны экспериментальные данные ((ЭД), символы) и результаты вычислений (линии): a – переменные, вычисленные из стартовых приближений параметров; b – предельный цикл, построенный по ЭД и по стартовым приближениям; c – переменные при найденных оптимальных значениях параметров и ЭД; d – предельные циклы, построенные по переменным с оптимальными значениями параметров и по ЭД

Модель периодической реакции «Орегонатор» (модель II). Эта модель предложена Р. Дж. Филдом и Р. М. Нойесом в работе [6] и является удачным примером тех «упрощенных» моделей, о которых говорилось во введении. Она описывает механизм целого класса реакций типа реакции Белоусова – Жаботинского, реально включающей порядка 80 разных стадий. Сводя такую сложносоставную реакцию к системе из всего трех уравнений для концентраций главных реагентов, авторы работы [6] неизбежно должны были подразделить всю массу промежуточных реакций на небольшое количество комплексов

с какими-то эффективными скоростями, уточнение величин которых более или менее удачно ведется до сих пор [5]. Однако заметим, что целью приведенного примера являлось не изучение самой реакции, а выявление достоинств предлагаемого в настоящей работе алгоритма по отношению к алгоритмам, применяемым другими авторами для решения обратной задачи одной и той же системы ДУ.

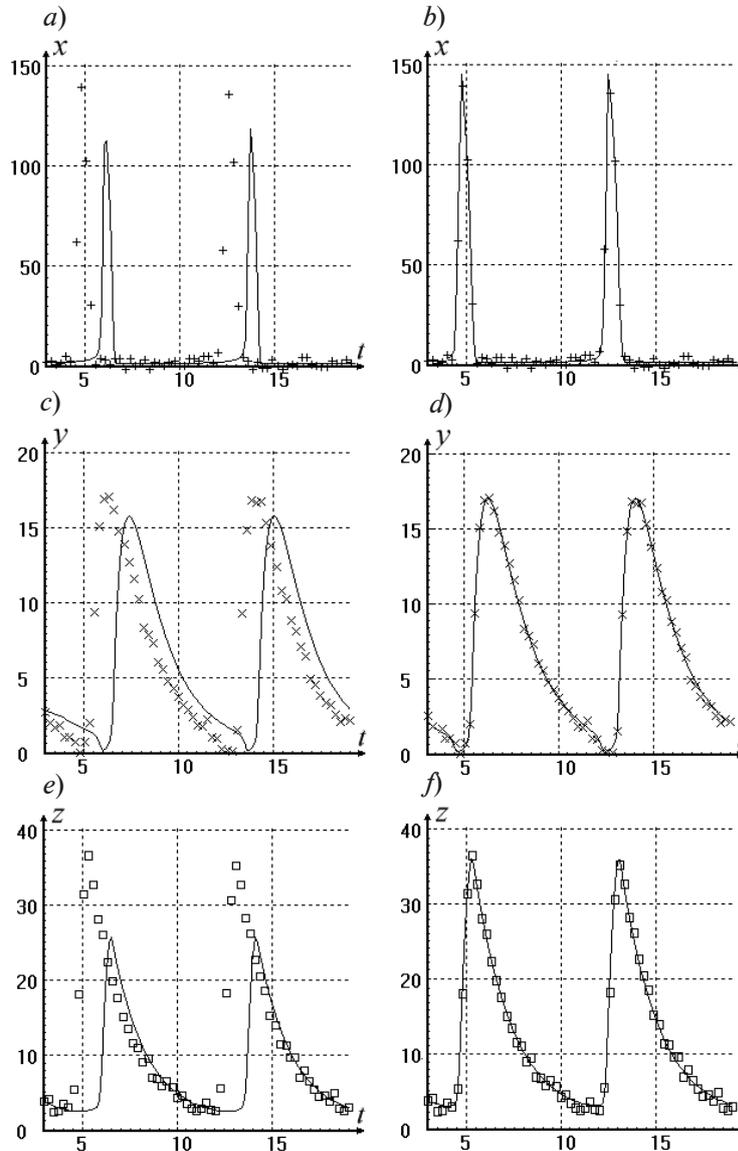


Рис. 2. Результаты решения обратной задачи системы ДУ (модель II): *a, c, e* – «экспериментальные» значения (символы) и компоненты решения системы (15) при стартовых приближениях параметров (линии); *b, d, f* – сравнение компонент решения системы (15) при найденных оптимальных значениях параметров (линии) с экспериментальными данными (символы)

Соответствующая система уравнений имеет следующий вид [6]:

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= a(x + y - qx^2 - xy); \\ \dot{y} &= 2hz - y - xy; \\ \dot{z} &= (x - z)/2 \end{aligned} \right\}. \quad (15)$$

Стартовые значения параметров, подобранные методом проб и ошибок, составляли:

$$a_0 = 30,0; q_0 = 0,005; h_0 = 1,0.$$

Вводимая погрешность «экспериментальных» данных была около 5%. Уклонение стартовых переменных $x_0(t)$, $y_0(t)$ и $z_0(t)$ от «экспериментальных» данных составило 84% (рис. 2, *a, c, e*). Результаты работы алгоритма представлены на рис. 2, *b, d, f*. После 21 итерации получено:

$$\rho_1 = 5,17\%; a = 34,6; q = 0,0059; h = 0,758;$$

уклонения параметров от модельных значений ($a = 33,3; q = 0,006; h = 0,75$) – не более 3,9%, что можно признать хорошим результатом.

При этом важно отметить, что точность результатов, полученных методом решения обратной задачи систем ДУ, который предложен в настоящей работе, оказалась порядка точности экспериментальных данных (это верно и для модели I) и существенно превышает точность упомянутых выше результатов, полученных прямым методом Хука – Дживса в статье [5] для той же модели «Орегонатор».

Оба приведенных здесь примера показывают, что представленный алгоритм решения обратной задачи систем ДУ, не имеющих аналитических решений, способен обеспечить удовлетворительную точность косвенных измерений значений параметров, входящих в состав названных систем ДУ.

Обсуждение результатов

Если в обратной задаче системы ДУ неизвестен всего один параметр a , то вместо предложенного выше (довольно сложного) алгоритма линеаризации целесообразно выполнить минимизацию величины

$$S = \sum_{i=1}^k [\tilde{u}(t_i, a) - u_i]^2 + \sum_{i=1}^k [\tilde{v}(t_i, a) - v_i]^2 + \sum_{i=1}^k [\tilde{w}(t_i, a) - w_i]^2 + \dots \rightarrow \min_a,$$

используя более простой алгоритм золотого сечения [9], в который, естественно, надо включить и алгоритм решения системы (1). Обычно многократного решения прямой задачи перебором при решении обратных задач стараются, если возможно, избегать, ввиду длительности счета и не вполне удовлетворительной точности получаемых решений. Однако в случае одного неизвестного параметра метод золотого сечения совмещает быструю сходимость с получением хорошей точности значения параметра. Но для двух или большего числа параметров предложенный в данной работе подход предпочтительней, так как метод золотого сечения оказывается непригодным, а иные методы решения обратных задач, основанные на многократном решении прямой задачи перебором на многомерной сетке, требуют большого времени вычислений при посредственной точности результата.

Встречаются задачи, когда требуется вычислить не постоянные значения параметров, входящих в систему ДУ, а неизвестную функцию $f(t)$, также входящую в состав системы ДУ (1), но не относящуюся к компонентам ее решения. Тогда если удастся (например, из физических соображений) представить эту функцию как зависимость от конечного числа параметров $f(t, a, b, \dots)$, то вполне можно воспользоваться предложенным методом решения обратной задачи системы ДУ и определить численные значения этих параметров так, как это описано выше.

Необходимо также отметить, что решения систем ДУ весьма чувствительны к значениям параметров. С одной стороны, это усложняет выбор стартовых значений параметров, при которых гарантировалась бы уверенная сходимость метода (впрочем, предобусловливание и регуляризация, включенные в предлагаемый метод, серьезно улучшают его сходимость). Но, с другой стороны, такая чувствительность позволяет в итоге добиваться хорошей точности расчета искомых параметров даже при заметных погрешностях экспериментальных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Frame M.** Mathematical models in the biosciences. Vol. I. New Haven, CT, USA: Yale University Press, 2021. 544 p.
2. **Viana M., Espinar J. M.** Differential equations: A dynamical systems approach to theory and practice. Book series: “Graduate Studies in Mathematics”. Vol. 212. Providence, USA: American Mathematical Society, 2021. 536 p.
3. **Alvey Ch., Alvey D.** Mathematical biology discrete and differential equations. Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 2024. 378 p.
4. **De Maria E. (Ed.)** Systems biology modeling and analysis: Formal bioinformatics methods and tools. Hoboken, New Jersey, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2022. 464 p.
5. **Икрамов Р. Д., Мустафина С. А.** Алгоритм поиска констант скоростей колебательной реакции на примере реакции Белоусова – Жаботинского // Башкирский химический журнал. 2015. Т. 22. № 1. С. 87–91.
6. **Field R. J., Noyes R. M.** Oscillations in chemical systems. IV. Limit cycle behavior in a model of a real chemical reaction // The Journal of Chemical Physics. 1974. Vol. 60. No. 5. Pp. 1877–1884.
7. **Hooke R., Jeeves T. A.** Direct search solution of numerical and statistical problems // Journal of the Association for Computing Machinery (JACM). 1961. Vol. 8. No. 2. Pp. 212–229.
8. **Städter Ph., Schälte Y., Schmiester L., Hasenauer J., Stapor P. L.** Benchmarking of numerical integration methods for ODE models of biological systems // Scientific Reports. 2021. Vol. 11. No. 1. January 29. P. 2696.
9. **Калиткин Н. Н.** Численные методы. Серия: «Учебная литература для вузов (BHV)» СПб.: Изд-во БХВ-Петербург, 2011. 592 с.
10. **Sun Z. Z., Sun Y., Wang X. R., Cao J. P., Wang Y. P., Wang Y. Q.** Self-sustained current oscillations in superlattices and the van der Pol equation // Applied Physics Letters. 2005. Vol. 87. No. 18. Pp. 1821100–1821102.
11. **Marquardt D. W.** An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters // Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics. 1963. Vol. 11. No. 2. Pp. 431–441.
12. **Юдин Н. Е.** Модифицированный метод Гаусса–Ньютона для решения гладкой системы нелинейных уравнений // Компьютерные исследования и моделирование. 2021. Т. 13. № 4. С. 697–723.
13. **Prigogine I., Lefever R.** Symmetry breaking instabilities in dissipative systems // The Journal of Chemical Physics. 1968. Vol. 48. No. 4. Pp. 1695–1700.

REFERENCES

1. **Frame M.**, Mathematical models in the biosciences. Vol. I, CT, Yale University Press, New Haven, USA, 2021.
2. **Viana M., Espinar J. M.**, Differential equations: A dynamical systems approach to theory and practice (Book Ser. “Graduate Studies in Mathematics”. Vol. 212). The American Mathematical Society, Providence, USA, 2021.
3. **Alvey Ch., Alvey D.**, Mathematical biology discrete and differential equations, CRC Press, Boca Raton, FL, USA, 2024.
4. **De Maria E. (Ed.)**, Systems biology modelling and analysis: Formal bioinformatics methods and tools, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, USA, 2022.
5. **Ikramov R. D., Mustafina S. A.**, The algorithm of search of rate constants of oscillating reaction to the example of the Belousov–Zhabotinsky reaction, Bashkirskiy Khimicheskiy Zhurnal [Bashkir Chemical Journal]. 22 (1) (2015) 87–91 (in Russian).
6. **Field R. J., Noyes R. M.**, Oscillations in chemical systems. IV. Limit cycle behavior in a model of a real chemical reaction, J. Chem. Phys. 60 (5) (1974) 1877–1884.
7. **Hooke R., Jeeves T. A.**, Direct search solution of numerical and statistical problems, Journal of the ACM. 8 (2) (1961) 212–229.
8. **Städter Ph., Schälte Y., Schmiester L., et al.**, Benchmarking of numerical integration methods for ODE models of biological systems, Sci. Rep. 11 (1; Jan. 29) (2021) 2696.
9. **Kalitkin N. N.**, Chislennyye metody [Numerical methods], Publ. BHV-Petersburg, St. Petersburg, 2011 (in Russian).

10. Sun Z. Z., Sun Y., Wang X. R., et al., Self-sustained current oscillations in superlattices and the van der Pol equation, Appl. Phys. Lett. 87 (18) (2005) 1821100–1821102.
11. Marquardt D. W., An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters, J. Soc. Indust. Appl. Math. 11 (2) (1963) 431–441.
12. Yudin N. E., Modified Gauss–Newton method for solving a smooth system of nonlinear equations, Comput. Res. Model. 13 (4) (2021) 697–723 (in Russian).
13. Prigogine I., Lefever R., Symmetry breaking instabilities in dissipative systems. J. Chem. Phys. 48 (4) (1968) 1695–1700.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ГОЛОВИЦКИЙ Александр Петрович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alexandergolovitski@yahoo.com
ORCID: 0000-0003-4292-0959

THE AUTHOR

GOLOVITSKII Alexander P.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
alexandergolovitski@yahoo.com
ORCID: 0000-0003-4292-0959

Статья поступила в редакцию 25.02.2025. Одобрена после рецензирования 04.03.2025. Принята 04.03.2025.

Received 25.02.2025. Approved after reviewing 04.03.2025. Accepted 04.03.2025.