

Инструкция по работе с программой

"Численный алгоритм решения обратной задачи для системы дифференциальных уравнений".

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В работе предлагается программа, предназначенная для решения обратной задачи для системы линейных дифференциальных уравнений типа:

$$\begin{cases} \dot{X}_1 = k_{11}X_1 + k_{12}X_2 + \dots + k_{1N}X_N + A_1e^{a_1t}, \\ \dot{X}_2 = k_{21}X_1 + k_{22}X_2 + \dots + k_{2N}X_N + A_2e^{a_2t}, \\ \vdots \\ \dot{X}_N = k_{N1}X_1 + k_{N2}X_2 + \dots + k_{NN}X_N + A_Ne^{a_Nt}. \\ X_1(0) = X_{10}, X_2(0) = X_{20}, \dots, X_N(0) = X_{N0} \end{cases} \quad (1)$$

Обратная задача состоит в нахождении матрицы параметров: $K = (k_{ij})$ по дополнительной информации о решении прямой задачи вида:

$$\Phi_i^{(m)} = X_i(t_m, K), i = 1, \dots, N, \quad m = 1, \dots, M_i. \quad (2)$$

Рассмотрим вариационную постановку обратной задачи (1), (2), состоящую в минимизации следующего функционала:

$$J(K) = \sum_{i=1}^N \sum_{m=1}^{M_i} (X_i(t_m, K) - \Phi_i^{(m)})^2 \quad (3)$$

2. ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМА

Оптимизационный алгоритм решения обратной задачи состоит из следующих шагов:

1. Задается точность ε и начальное приближение K_0 . Предположим, что матрица K_j вычислена. Опишем алгоритм нахождения K_{j+1} .
2. Проверяется условие $J(K_j) < \varepsilon$. Если $J(K_j) > \varepsilon$, то:
3. Вычисляется решение прямой задачи (2)

$$\begin{cases} \dot{X} = K_j X + A e^{at} \\ X(0) = X_0. \end{cases} \quad (4)$$

с матрицей K_j . Решение имеет вид: $X_i(t_m, K_j), i = 1, \dots, N, m = 1, \dots, M_i$.

4. Решается сопряженная задача (7) с матрицей K_j

$$\begin{cases} \psi_t + K_j^* \psi = 0 \\ \psi(T) = 0 \\ [\psi]_i^{t=t_m} = 2(X_i(t_m, K_j) - \Phi_i^{(m)}), i = 1, \dots, N, m = 1, \dots, M_i. \end{cases} \quad (5)$$

5. Вычисляется градиент целевого функционала (5) по формуле $(J'(K_j))_{kl} = -\int_0^T \psi_k X_l dt$
6. Задается оптимизационный параметр $\alpha_j > 0$ и следующая итерация

$$K_{j+1} = K_j - \alpha_j J'(K_j).$$

После проверяется условие 2.

3. ОПИСАНИЕ РАБОТЫ С ПРОГРАММОЙ

Для работы с программой необходимо заполнить 2 файла: **input_data.txt** и **input.txt**.

В **input.txt** находится информация о модели и ее параметрах, а так же параметры метода. Программа поддерживает следующий синтаксис заполнения файла (указан в порядке ввода):

1. Условие останковки ϵ метода.
2. Граница T временного промежутка $[0, T]$, на котором рассматривается задача.
3. Коэффициент α метода простой итерации Ландвебера.
4. Размерность системы уравнений, которой соответствует рассматриваемая модель.
5. Количество зафиксированных элементов в матрице параметров K (фиксируются в том числе элементы, значения которых есть константы).
6. Соответственно, номера фиксированных элементов в матрице и, через пробел, их значения. Каждый элемент на отдельной строке. Количество строк соответствует числу элементов, введенному в пункте 5.
7. Количество элементов матрицы параметров, для которых известны ограничения (интервал, в котором лежит параметр).
8. Соответственно, номера ограниченных элементов в матрице и, через пробел, значение интервала. Интервал заполняется в виде $[a, b]$. Каждый элемент на отдельной строке. Количество строк соответствует числу элементов, введенному в пункте 7.
9. Начальные значения функций (значения в точке 0). Значения заполняются через пробел. Их количество соответствует числу, введенному в пункте 4.
10. Программа поддерживает системы уравнений с неоднородностью в виде экспоненты. В этом пункте заполняются коэффициенты перед перед экспонентами. Значения заполняются через пробел. Их количество соответствует числу, введенному в пункте 4.
11. Степени экспонент. Значения заполняются через пробел. Их количество соответствует числу, введенному в пункте 4. Если имеется неоднородность в виде константы, то степень выставляется нулевой, а коэффициент перед экспонентой считается данной константой.

В **input_data.txt** находится информация о данных обратной задачи. Программа поддерживает следующий синтаксис заполнения файла (указан в порядке введения):

1. Количество функций, для которых известны дополнительные данные.
2. Номера функций, для которых известны дополнительные данные.
3. Количество известных данных.
4. Заполнение дополнительных данных. Вводятся данные последовательно для функций, номера которых записаны в пункте 2. Их количество соответствует числу, введенному в пункте 3. Заполняются, соответственно, время и, через пробел, значения данных.

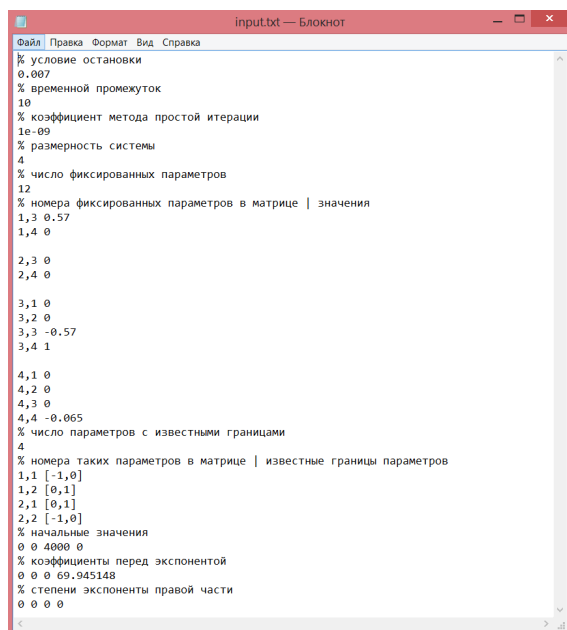
4. ПРИМЕР

4.1. Фармакокинетическая модель секреции и кинетики С-пептида.

$$\begin{cases} \dot{c}p_1(t) = -[k_{01} + k_{21}]cp_1(t) + k_{12}cp_2(t) + mx(t) \\ \dot{c}p_2(t) = k_{21}cp_1(t) - k_{12}cp_2(t) \\ \dot{x}(t) = -mx(t) + y(t) \\ \dot{y}(t) = -\alpha(y(t) - \beta[G - h]) \\ cp_1(0) = 0, \quad cp_2(0) = 0, \quad x(0) = x_0, \quad y(0) = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Модель характеризуется 7 параметрами. Три из них относятся к кинетике С-пептида (показателя, отражающего уровень секреции инсулина): k_{01}, k_{21}, k_{12} ; остальные относятся к секреции поджелудочной железы: α, β, m, h . Концентрация глюкозы G считается известной и равной 100. Матрица параметров K имеет вид

$$K = \begin{pmatrix} -(k_{01} + k_{21}) & k_{12} & m & 0 \\ k_{21} & -k_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -m & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha \end{pmatrix}$$



```

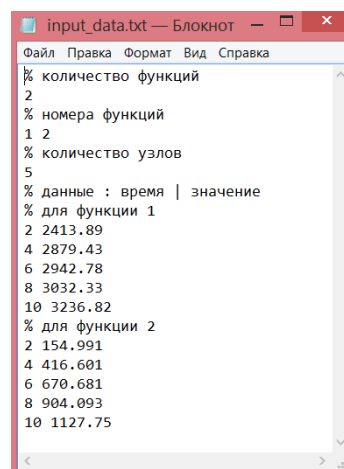
% условие остановки
0.007
% временной промежуток
10
% коэффициент метода простой итерации
1e-09
% размерность системы
4
% число фиксированных параметров
12
% номера фиксированных параметров в матрице | значения
1,3 0.57
1,4 0
2,3 0
2,4 0
3,1 0
3,2 0
3,3 -0.57
3,4 1
4,1 0
4,2 0
4,3 0
4,4 -0.065
% число параметров с известными границами
4
% номера таких параметров в матрице | известные границы параметров
1,1 [-1,0]
1,2 [0,1]
2,1 [0,1]
2,2 [-1,0]
% начальные значения
0 0 4000 0
% коэффициенты перед экспонентой
0 0 69.945148
% степени экспоненты правой части
0 0 0

```

Рис. 1. Содержимое файла input.txt

Будем искать только параметры k_{01}, k_{21}, k_{12} . Для этого нам нужно указать в файле **input.txt** номера тех элементов матрицы, значения которых известны. Поэтому мы фиксируем все элементы со значениями 0 и 1, а так же элементы, в которых есть параметры m и α .

Для параметров, относящихся к скоростям (k_{01}, k_{21}, k_{12}) в фармакокинетике известно, что они неотрицательны и сильно меньше единицы. Поэтому их можно ограничить интервалом $[0,1]$.



```

% количество функций
2
% номера функций
1 2
% количество узлов
5
% данные : время | значение
% для функции 1
2 2413.89
4 2879.43
6 2942.78
8 3032.33
10 3236.82
% для функции 2
2 154.991
4 416.601
6 670.681
8 904.093
10 1127.75

```

Рис. 2. Содержимое файла input_data.txt

Данные обратной задачи вида (??), записываемая в файл **input_data.txt** (см. Рис. ??) были получены с помощью решения прямой задачи для параметров из таблицы 1.

ТАБЛИЦА 1. Значения параметров модели

Параметры	Точное значение
k_{01}	0.064
k_{21}	0.054
k_{12}	0.056
m	0.57
α	0.065
β	11.32
h	4.94

После заполнения файлов **input_data.txt** и **input.txt**, необходимо запустить программу **Gradient matrix method.exe**. Если данные заданы в соответствии с инструкцией, то при двукратном нажатии клавиши "Enter" начнется процесс вычисления параметров. В колонке слева будет указано значение функционала (5), а справа соответствующий номер итерации. При достижении необходимой точности программа остановится, и будет отображен результат. (рис. 3).

```

D:\Статья\2016\ФАП\Gradient method 01.03.2016\C-peptide\Gradient matrix ...
0.00704871: COUNT = 5467
0.00704394: COUNT = 5468
0.00703918: COUNT = 5469
0.00703445: COUNT = 5470
0.00702973: COUNT = 5471
0.00702503: COUNT = 5472
0.00702035: COUNT = 5473
0.00701569: COUNT = 5474
0.00701104: COUNT = 5475
0.00700641: COUNT = 5476
0.0070018: COUNT = 5477

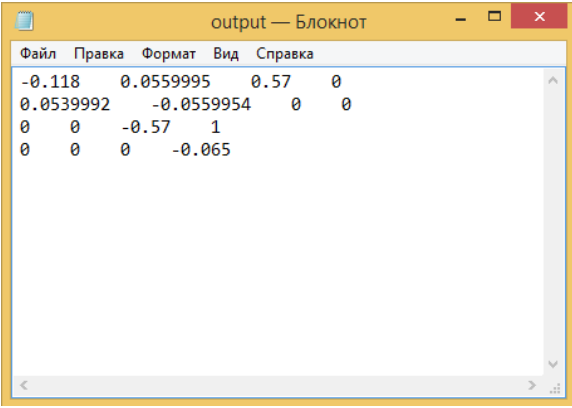
ITERATION NUMBER = 5478
NUMERIC SOLUTION:
-0.118 0.0559995 0.57 0
0.0539992 -0.0559954 0 0
0 0 -0.57 1
0 0 0 -0.065

TIME = 26.022 sec
Для продолжения нажмите любую клавишу . . .

```

Рис. 3. Экран программы.txt

После окончания вычислений результаты записываются в файл **output.txt** в виде матрицы (рис. 4)



```
output — Блокнот
Файл  Правка  Формат  Вид  Справка
-0.118  0.0559995  0.57  0
0.0539992  -0.0559954  0  0
0  0  -0.57  1
0  0  0  -0.065
```

Рис. 4. Содержимое файла output.txt