



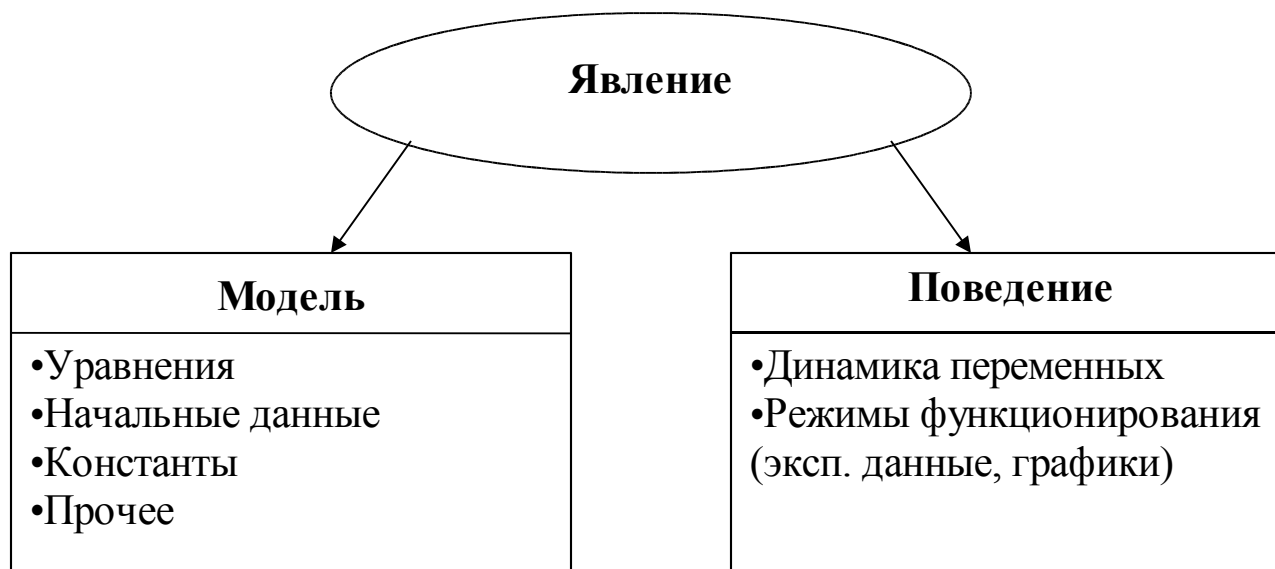
Верификация параметров математических моделей: Решение обратной задачи

Лашин С.А.

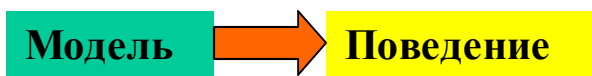
Институт Цитологии и Генетики СО РАН



Прямые и обратные задачи моделирования



Прямая задача



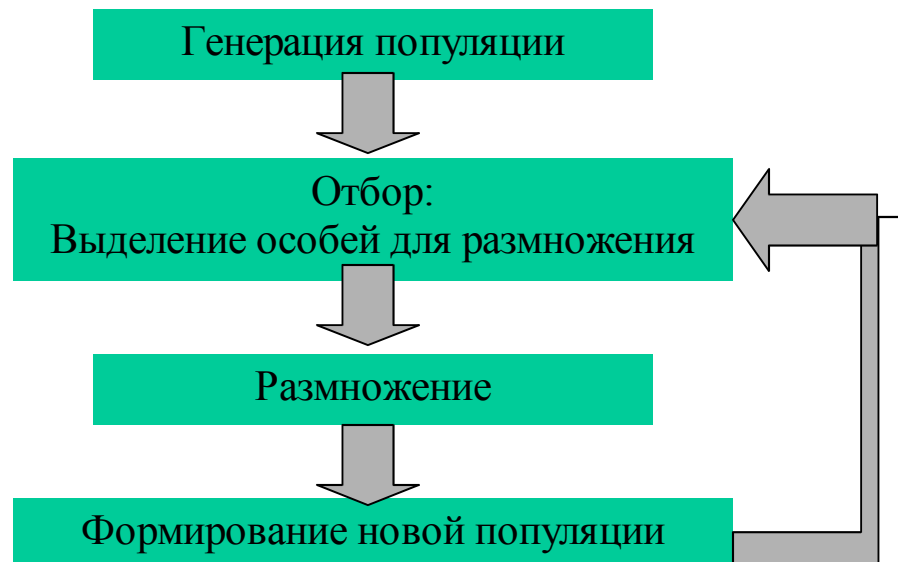
Обратная задача





Генетические и эволюционные алгоритмы для решение ОЗ

$F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ - целевая функция (функция приспособленности в терминах ГА)
 $x_1, x_2, \dots, x_n$ - параметры целевой функции (гены, в терминах ГА)



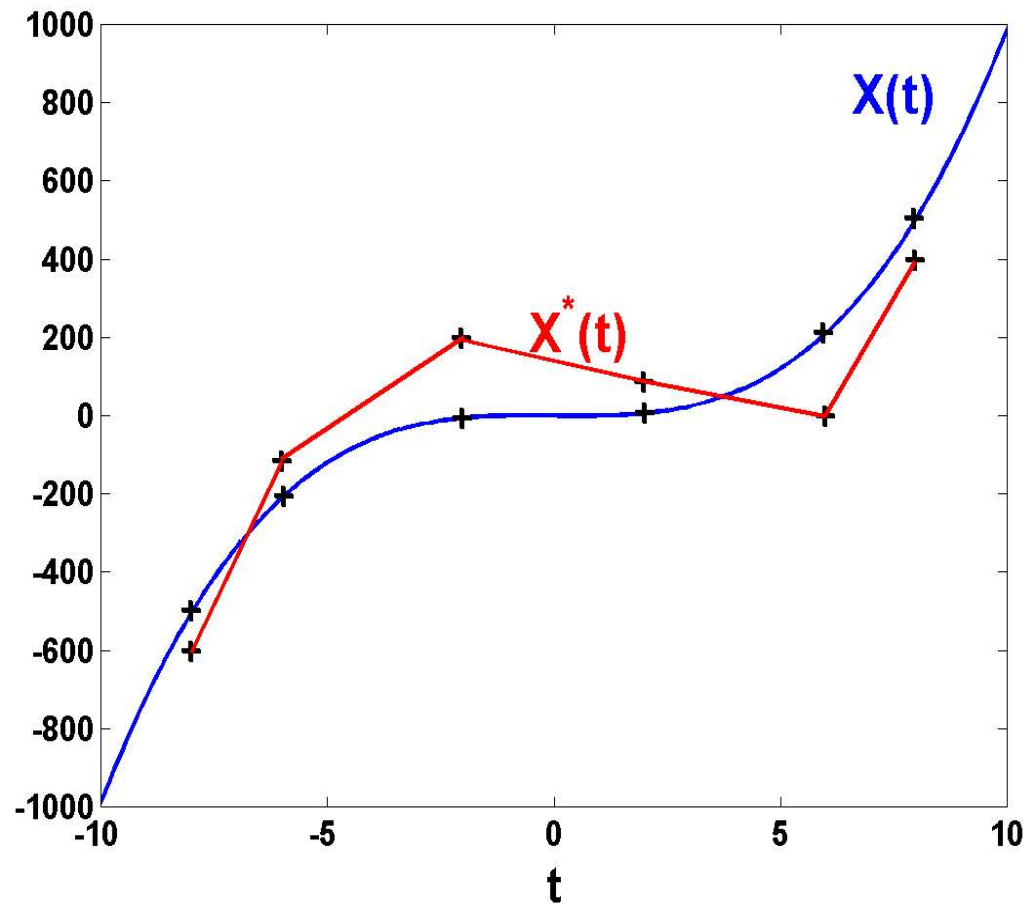


Модификация ГА для верификации моделей ГС

- Особь – математическая модель ГС
- Генотип особи – параметры модели (константы реакций и т.д.)
- Фенотип особи – набор динамических переменных модели (изменения концентраций веществ во времени (т.о., вычисление фенотипа есть расчет динамики модели, что, фактически, является решением прямой задачи)
- Приспособленность особи – близость рассчитанной динамики модели к экспериментальным данным (например, среднеквадратическое отклонение) – чем ближе рассчитанная динамика к этим данным, тем выше приспособленность особи
- «Идеальная» особь – модель с поведением, достаточно близким к экспериментальным данным (достаточность определяет исследователь ГС)



Среднеквадратичное отклонение



$$F(x(t), x^*(t)) = \sqrt{\sum_i (x(t_i) - x^*(t_i))^2}$$



ГА для верификации моделей ГС

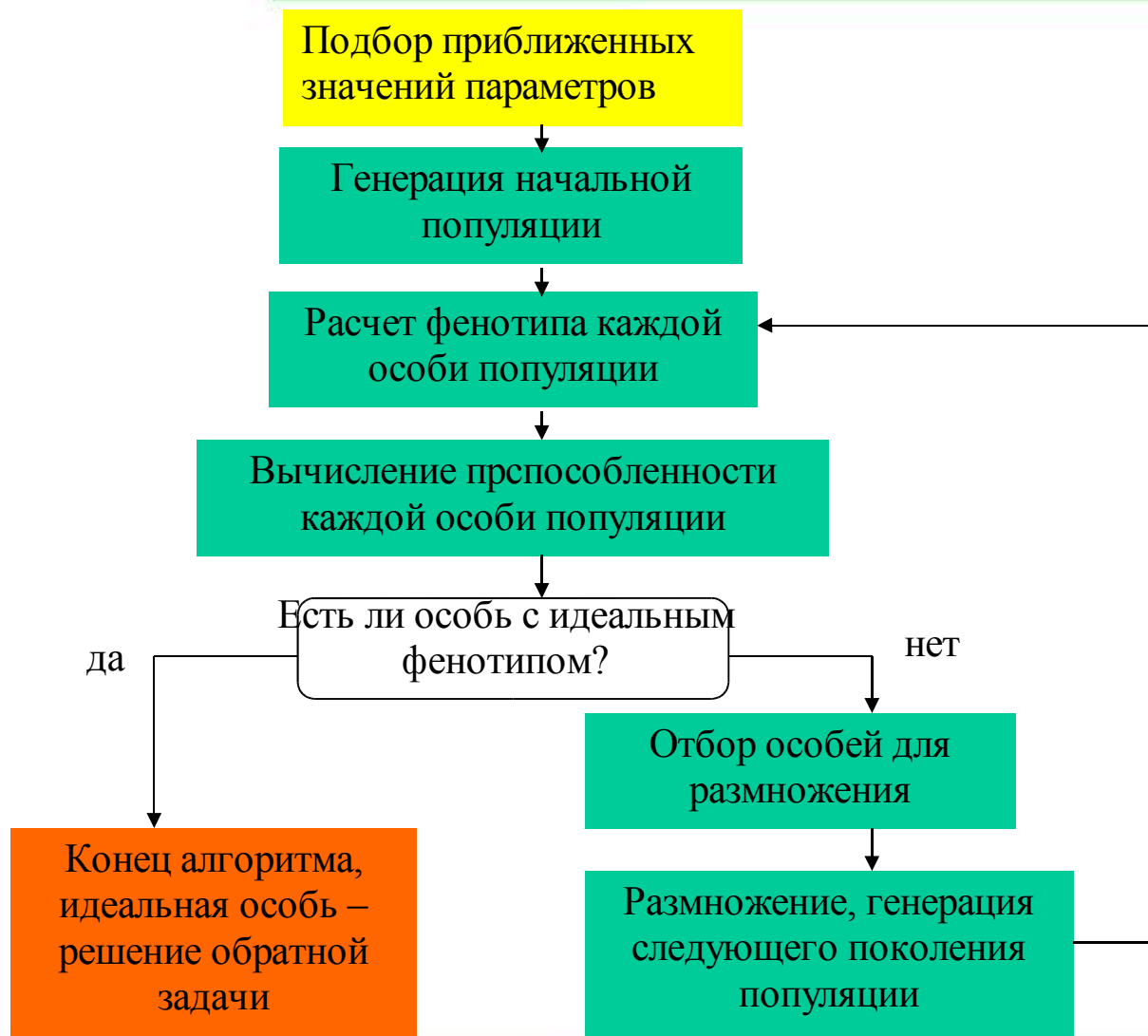
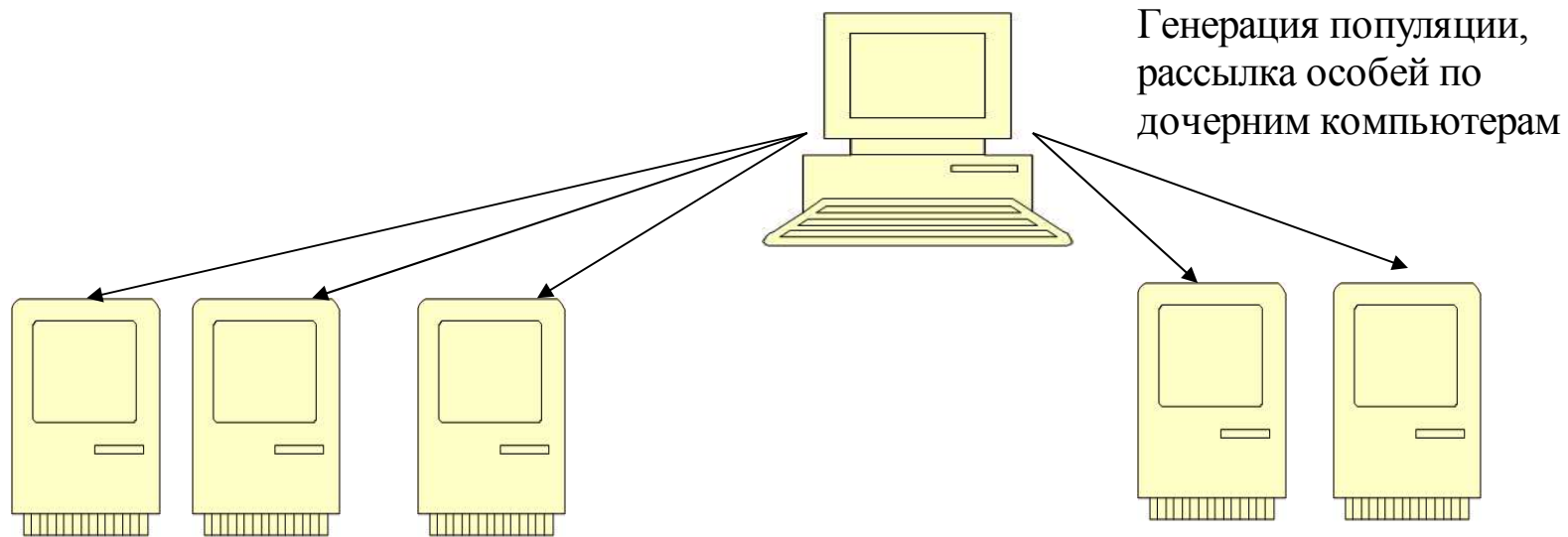




Схема распараллеливания ГА (в случае MPI)

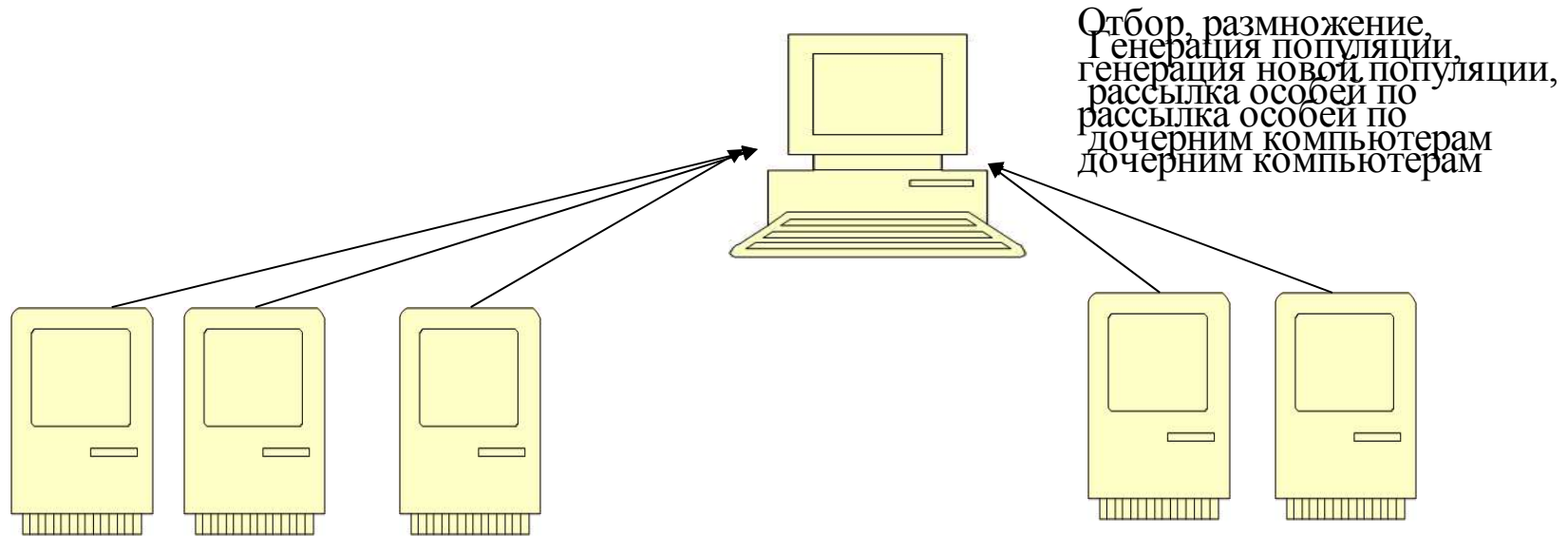


Расчет фенотипов, приспособленности,
проверка на «идеальность»

Отсылка данных на главный компьютер



Схема распараллеливания ГА (в случае MPI)



Расчет фенотипов, приспособленности,
проверка на «идеальность»

Отсылка данных на главный компьютер



Явные алгоритмы решения ОЗ

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dX_1(t)}{dt} = \sum_{k \leq l}^N c_{kl}^1 X_k(t) X_l(t) \\ \dots \\ \frac{dX_i(t)}{dt} = \sum_{k \leq l}^N c_{kl}^i X_k(t) X_l(t) \\ \dots \\ \frac{dX_N(t)}{dt} = \sum_{k \leq l}^N c_{kl}^N X_k(t) X_l(t) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} X_i(t) - \text{динамические переменные модели } (i=1, \dots, N), \\ c_{kl}^i - \text{параметры (константы)} \quad (k \leq l=1, \dots, N) \end{array}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dX_1(t)}{dt} = c_{11}^1 X_1^2(t) + c_{12}^1 X_1(t) X_2(t) + \dots + c_{kl}^1 X_k(t) X_l(t) + \dots + c_{N-1 N}^1 X_{N-1}(t) X_N(t) \\ \dots \\ \frac{dX_i(t)}{dt} = c_{11}^i X_1^2(t) + c_{12}^i X_1(t) X_2(t) + \dots + c_{kl}^i X_k(t) X_l(t) + \dots + c_{N-1 N}^i X_{N-1}(t) X_N(t) \\ \dots \\ \frac{dX_N(t)}{dt} = c_{11}^N X_1^2(t) + c_{12}^N X_1(t) X_2(t) + \dots + c_{kl}^N X_k(t) X_l(t) + \dots + c_{N-1 N}^N X_{N-1}(t) X_N(t) \end{array} \right.$$



$$\left\{ \begin{array}{l} X_1(t_m) - X_1(t_0) = \int_{t_0}^{t_m} \left(\sum_{k \leq l}^N c_{kl}^1 X_k(t) X_l(t) \right) dt \\ \dots \\ X_i(t_m) - X_i(t_0) = \int_{t_0}^{t_m} \left(\sum_{k \leq l}^N c_{kl}^i X_k(t) X_l(t) \right) dt \\ \dots \\ X_N(t_m) - X_N(t_0) = \int_{t_0}^{t_m} \left(\sum_{k \leq l}^N c_{kl}^N X_k(t) X_l(t) \right) dt \end{array} \right. \quad m=1, \dots, M$$

Очевидно,

$$\int_{t_0}^{t_m} \left(\sum_{k \leq l}^N c_{kl}^i X_k(t) X_l(t) \right) dt = \sum_{k \leq l}^N c_{kl}^i \int_{t_0}^{t_m} X_k(t) X_l(t) dt$$

Обозначим

$$d_m^i = X_i(t_m) - X_i(t_0)$$

$$A_{klm}^i = \int_{t_0}^{t_m} X_k(t) X_l(t) dt$$



$$\left\{ \begin{array}{l} d_m^1 = \sum_{k \leq l}^N c_{kl}^1 A_{klm}^1 \\ \dots \\ d_m^i = \sum_{k \leq l}^N c_{kl}^i A_{klm}^i \\ \dots \\ d_m^N = \sum_{k \leq l}^N c_{kl}^N A_{klm}^N \end{array} \right. \xrightarrow{\text{перенумерация двойного индекса } kl \text{ в} \\ \text{одинарный индекс } j: \\ k \otimes l \leftrightarrow j \ (k \leq l = 1, \dots, N \leftrightarrow j = 1, \dots, N(N+1)/2).} \left\{ \begin{array}{l} d_m^1 = \sum_{j=1}^{N(N+1)/2} c_j^1 A_{jm}^1 \\ \dots \\ d_m^i = \sum_{j=1}^{N(N+1)/2} c_j^i A_{jm}^i \\ \dots \\ d_m^N = \sum_{j=1}^{N(N+1)/2} c_j^N A_{jm}^N \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} d_1^i = \sum_{j=1}^{N(N+1)/2} c_j^i A_{j1}^i \\ \dots \\ d_m^i = \sum_{j=1}^{N(N+1)/2} c_j^i A_{jm}^i \\ \dots \\ d_{N(N+1)/2}^i = \sum_{j=1}^{N(N+1)/2} c_j^i A_{jN(N+1)/2}^i \end{array} \right. \xleftarrow{\text{Перегруппировка} \\ \text{уравнений в системы} \\ \text{размера } N(N+1)/2 \\ (M=N(N+1)/2)}$$



Пример

$$\begin{cases} \frac{dX_1(t)}{dt} = c_{11}^1 X_1^1(t) + c_{12}^1 X_1(t) X_2(t) + c_{22}^1 X_2^2(t) \\ \frac{dX_2(t)}{dt} = c_{11}^2 X_1^1(t) + c_{12}^2 X_1(t) X_2(t) + c_{22}^2 X_2^2(t) \end{cases}$$

$$N=2, M=2(2+1)/2=3$$

$$\begin{cases} d_{(1)}^1 = c_{11}^1 A_{11(1)}^1 + c_{12}^1 A_{12(1)}^1 + c_{22}^1 A_{22(1)}^1 \\ d_{(1)}^2 = c_{11}^2 A_{11(1)}^2 + c_{12}^1 A_{12(1)}^2 + c_{22}^2 A_{22(1)}^2 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} d_{(1)}^1 = c_1^1 A_{1(1)}^1 + c_2^1 A_{2(1)}^1 + c_3^1 A_{3(1)}^1 \\ d_{(2)}^1 = c_1^1 A_{1(2)}^1 + c_2^1 A_{2(2)}^1 + c_3^1 A_{3(2)}^1 \\ d_{(2)}^1 = c_1^1 A_{1(3)}^1 + c_2^1 A_{2(3)}^1 + c_3^1 A_{3(3)}^1 \end{cases}$$
$$\begin{cases} d_{(2)}^1 = c_{11}^1 A_{11(2)}^1 + c_{12}^1 A_{12(2)}^1 + c_{22}^1 A_{22(2)}^1 \\ d_{(2)}^2 = c_{11}^2 A_{11(2)}^2 + c_{12}^1 A_{12(2)}^2 + c_{22}^2 A_{22(2)}^2 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} d_{(1)}^2 = c_1^2 A_{1(1)}^2 + c_2^2 A_{2(1)}^2 + c_3^2 A_{3(1)}^2 \\ d_{(2)}^2 = c_1^2 A_{1(2)}^2 + c_2^1 A_{2(2)}^2 + c_3^2 A_{3(2)}^2 \\ d_{(2)}^2 = c_1^2 A_{1(3)}^2 + c_2^2 A_{2(3)}^2 + c_3^2 A_{3(3)}^2 \end{cases}$$
$$\begin{cases} d_{(3)}^1 = c_{11}^1 A_{11(3)}^1 + c_{12}^1 A_{12(3)}^1 + c_{22}^1 A_{22(3)}^1 \\ d_{(3)}^2 = c_{11}^2 A_{11(3)}^2 + c_{12}^1 A_{12(3)}^2 + c_{22}^2 A_{22(3)}^2 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} d_{(2)}^2 = c_1^2 A_{1(2)}^2 + c_2^1 A_{2(2)}^2 + c_3^2 A_{3(2)}^2 \\ d_{(2)}^2 = c_1^2 A_{1(3)}^2 + c_2^2 A_{2(3)}^2 + c_3^2 A_{3(3)}^2 \end{cases}$$



Перенумерация

$$\begin{pmatrix} A_{11(1)}^1 & A_{12(1)}^1 \\ 0 & A_{22(1)}^1 \end{pmatrix} \Rightarrow (A_{1(1)}^1, A_{2(1)}^1, A_{3(1)}^1)$$

$$\begin{pmatrix} A_{11(1)}^1 & A_{12(1)}^1 & A_{13(1)}^1 \\ 0 & A_{22(1)}^1 & A_{23(1)}^1 \\ 0 & 0 & A_{33(1)}^1 \end{pmatrix} \Rightarrow (A_{1(1)}^1, A_{2(1)}^1, A_{3(1)}^1, A_{4(1)}^1, A_{5(1)}^1, A_{6(1)}^1)$$

Схема распараллеливания явного алгоритма (в случае MPI)

