

Типы задач математического моделирования (слайд 2)

Среди многообразия задач моделирования можно выделить две большие группы задач. Первые связаны с расчетом различных характеристик модели (ее поведения), исходя из имеющихся уравнений, начальных данных, параметров и т.д. такие задачи условно можно называть **прямыми задачами**.

Другие задачи занимают так называемым восстановлением каких-то характеристик модели (параметров, уравнений и т.д.) по уже имеющимся данным о ее поведении. Как правило, данные о поведении модели берутся из экспериментов. Такие задачи часто называют **обратными задачами** математического моделирования (другие термины – идентификация математической модели, верификация математической модели).

Подходы к решению обратной задачи

Все методы идентификации параметров делятся на два класса. Первый класс использует для своей работы процесс расчета модели (прямую задачу), второй тип расчета модели не требует.

Большую нишу в методах первого типа занимают так называемые эволюционные и генетические методы, известные своим применением в задачах оптимизации [1,2,3]. Для использования эволюционных и генетических методов в задаче идентификации, задача идентификации представляется как оптимизационная, где целевой функцией выступает «дальность» рассчитанной с данными параметрами динамики модели от экспериментальной динамики. В такой постановке задача идентификации непосредственно и решается с помощью эволюционных и генетических методов. Сложность методов этого типа, особенно с увеличением размерности системы, возрастает экспоненциально, т.к. возрастает сложность решения прямой задачи (в случае динамических систем – интегрирования системы), требуемого на каждой итерации. Алгоритмы второго типа базируются на определенных вычислениях, позволяющих избегать указанной выше процедуры численного интегрирования системы. По принципу осуществления этой идеи методы могут быть разделены на две основные группы: дифференциальные и интегральные [4,5]. После этого задача идентификации сводится к решению набора систем алгебраических уравнений.

Вариант генетического алгоритма для идентификации ГС (3-6)

Идея алгоритма заключается в последовательной эволюции так называемых "особей" - моделей генных сетей, обладающих "генотипом" – конкретным набором констант модели. Генотип однозначно определяет "фенотип" - динамику генной сети. Особи образуют "популяцию", которая является материалом для эволюционного отбора наиболее приспособленных особей. Эволюция состоит в последовательном изменении состава популяции, которая осуществляется за один эволюционный такт. Эволюционный такт составляет элементарную единицу эволюционного процесса и, в свою очередь, слагается из следующих подтактов.

Первый подтакт заключается в выделении субпопуляции, члены которой порождают потомков. В одной из моделей выделения субпопуляции для последующего размножения среди всех особей текущей популяции отбирается фиксированное количество особей, имеющих наилучшие характеристики индивидуальной приспособленности. В другой модели реализован вероятностный отбор, где вероятность принять участие в процессе размножения зависит определенным образом от приспособленности особи (более приспособленные особи имеют больше шансов продолжить свой род, однако и самые слабые особи также не лишены такой возможности, в отличие от рассмотренной выше модели). В этой модели число особей в субпопуляции может менять на разных шагах алгоритма. Все остальные особи, не попавшие в субпопуляцию, считаются вымершими и в дальнейшем не рассматриваются.

Второй подтакт состоит в размножении особей выделенной субпопуляции. Существует несколько моделей размножения, которое может осуществляться разными способами - каждая выжившая особь может давать строго фиксированное или произвольное

(ограниченное только числом потомков) количество потомков. В результате возникает популяция, в которой содержатся материнские выжившие особи, а также их потомки. В процессе размножения возможен мутационный процесс. Существует несколько моделей порождения "мутаций". Например, одна из моделей порождает дочерние особи, которые отличаются от материнской не более чем по одному параметру (модель точечной мутации). В другой модели фиксируется максимальное допустимое число мутаций на одну особь, и дочерние особи уже могут иметь несколько отличий в константах, но не более фиксированного (эта модель реализует дилемму Холдейна – эволюционный процесс не может идти по большому числу параметров одновременно). Кроме моделей порождения мутаций, существуют модели, реализующие половое размножение (модели кроссинговера). В этих моделях дочерняя особь получает часть параметров от одной материнской особи, оставшуюся часть параметров – от второй материнской особи. Модели могут различаться типом кроссинговера (простой или множественный) и количеством родителей дочерней особи (от двух до всех особей в субпопуляции). После того как популяция порождена, для каждой особи рассчитывается фенотип (динамика функционирования особи), по которому, из сравнения с эталонным фенотипом - экспериментальными данными об этой динамике, на третьем подтакте вычисляется функция приспособленности. Функция приспособленности может представлять собой среднеквадратическое отклонение, взвешенное среднеквадратическое отклонение и другие расстояния в пространстве (дискретных) функций. Полученные результаты подаются на начало следующего эволюционного такта, процесс отбора и размножения повторяется. Косвенные знания о параметрах генной сети позволяют вводить ограничения на изменения отдельных генов особей. В результате такого отбора особи в популяции постепенно становятся все ближе и ближе по фенотипу к эталону. Процесс эволюции продолжается до тех пор, пока одна или несколько особей не будут иметь фенотип, достаточно близкий к эталону. После этого генотипы этих лучших особей могут считаться решениями обратной задачи.

Распараллеливание Генетического Алгоритма (слайды 7-8)

Вышеописанный алгоритм может быть распараллелен весьма эффективно. Примерная схема распараллеливания выглядит следующим образом.

Шаг 1. Генерация начальной популяции (главный компьютер).

Шаг 2. Рассылка генотипов особей (констант моделей) по узлам.

Шаг 3. Расчет фенотипов - динамики моделей (все узлы).

Шаг 4. Расчет функций приспособленности для полученных фенотипов (все узлы).

Шаг 5. Если есть достаточно хороший фенотип, то прекратить счет и считать найденным решение обратной задачи, выход. Иначе отправить полученные характеристики на главный компьютер.

Шаг 6. Произвести отбор и размножение наиболее приспособленных особей, остальных считать умершими. Сформировать новую популяцию, перейти к Шагу 1. Т.к. время расчета фенотипа особи (динамики модели) гораздо больше, чем время, требующееся на управление популяцией и рассылку/прием данных главным компьютером, то предложенная схема является достаточно эффективной при применении на кластерах [7].

Явные алгоритмы решения задачи идентификации (слайды 9-13)

Алгоритмы этого типа базируются на определенных вычислениях, позволяющих избежать отмеченной выше процедуры численного интегрирования системы (решения прямой задачи). По принципу осуществления этой идеи методы могут быть разделены на две основные группы: дифференциальные и интегральные [4].

Дифференциальные методы аппроксимируют с помощью экспериментальных данных значения производных dX/dt и правой части $f_i(C, X)$. После этого задача идентификации сводится к набору систем алгебраических уравнений [5].

Интегральные методы являются альтернативой дифференциальным методам. Они основаны на интегральных преобразованиях исходной системы дифференциальных уравнений (1), с последующим приближенным вычислением интегралов. В отличие от дифференциальных методов, обладающих тем недостатком, что приближенное вычисление производных является плохо обусловленной задачей, интегральные методы работают с гораздо меньшими ошибками, т.к. приближенное вычисление интегралов – вычислительно корректная задача.

Изложенный ниже метод является интегральным и, будучи рассчитанным на решение задачи идентификации систем определенного вида (с квадратично-линейной правой частью), сводит исходную задачу к задаче решения набора систем линейных алгебраических уравнений.

Рассмотрим класс нелинейных динамических моделей, а именно, представленных системой дифференциальных уравнений с квадратично-линейной правой частью:

$$\frac{dX_i(t)}{dt} = \sum_{k \leq l} c_{kl}^i X_k(t) X_l(t), \quad (1)$$

где $X_i(t)$ – набор динамических переменных модели ($i=1, \dots, N$), c_{kl}^i – параметры (константы) модели ($k \leq l=1, \dots, N$). Интегрируя систему (1) в пределах от t_0 до t_m ($m=1, \dots, M$), получаем:

$$X_i(t_m) - X_i(t_0) = \int_{t_0}^{t_m} \left(\sum_{k \leq l} c_{kl}^i X_k(t) X_l(t) \right) dt = \sum_{k \leq l} c_{kl}^i \int_{t_0}^{t_m} X_k(t) X_l(t) dt. \quad (2)$$

Таким образом, обладая достаточным количеством экспериментальных данных, мы можем вычислить соответствующие величины

$$d_m^i = X_i(t_m) - X_i(t_0), \quad (3)$$

и

$$A_{klm}^i = \int_{t_0}^{t_m} X_k(t) X_l(t) dt. \quad (4)$$

Используя обозначения (3), (4), выражение (2) можно переписать в виде

$$\sum_{k \leq l} c_{kl}^i A_{klm}^i = d_m^i, \quad m=1, \dots, M \quad (5)$$

а выражение (5) можно привести к стандартной форме записи системы линейных уравнений. Для этого надо перенумеровать двойные индексы kl в одинарный индекс j : $k \otimes l \leftrightarrow j$ ($k \leq l=1, \dots, N \leftrightarrow j=1, \dots, N(N+1)/2$). После перенумерации получаем систему линейных уравнений в стандартной форме записи.

$$\sum_{j=1}^{N(N+1)/2} c_j^i A_{jm}^i = d_m^i, \quad m=1, \dots, M, \quad (6)$$

где в роли неизвестных выступают параметры c_j^i . При $M=N(N+1)/2$ матрица A является квадратной и полученную систему линейных уравнений (6) можно решать различными численными методами. Решив систему, мы найдем параметры, входящие в i -е уравнение системы (1). Таким образом, решив N систем, мы найдем все параметры системы (1) и задача идентификации будет решена.

Применяя сходные преобразования к более сложным классам систем, чем (1), также возможно получение подобных формул.

Причины, которые могут повлиять на качество решения, полученного с помощью методов явного типа, заключаются в том, что при довольно низком качестве экспериментальных данных о динамике биологических явлений величины (3) и (4) рассчитываются с **очень** большой ошибкой.

Распараллеливание явного алгоритма (слайд 14)

Схема распараллеливания явного интегрального метода также достаточно просто и эффективна. Общий вид ее примерно следующий [7].

Шаг 1. Распределение соответствующих данных по узлам (главный компьютер).

Шаг 2. Подсчет величин d_{im}^i и A_{ijm}^i , решение соответствующей линейной системы (узлы).

Список литературы.

1. Батищев Д. И. Генетические алгоритмы решения экстремальных задач / Под ред. Львовича Я.Е.: Учеб. пособие. Воронеж, 1995.
2. Сергей Исаев, Популярно о Генетических Алгоритмах <http://www.xaoc.ru/a72/>
3. Перечень ссылок по генетическим алгоритмам <http://algotlist.manual.ru/ai/ga/index.php>
4. Ермакова А., Новый комплекс численных методов идентификации и анализа кинетических моделей
5. Карнаухов А.В., Карнаухова Е.В. Применение нового метода идентификации нелинейных динамических систем для задач биохимии. БИОХИМИЯ, 2003, том 68, вып. 3, с. 309-317
6. Ссылка http://www.gotai.net/documents-genetic_algorithms.aspx
Доп. Лит.
7. Корнеев В.Д. Параллельное программирование в MPI. Москва Ижевск 2003