

Идентификация параметров распределенной динамической системы, описываемой одномерным уравнением диффузии-адвекции-реакции, с применением расширенного фильтра Калмана

Е. А. Копытина, email: zhemkaterina@yandex.ru¹

А. В. Копытин, email: kopytin@cs.vsu.ru¹

М. Г. Матвеев, email: mgmatveev@yandex.ru¹

¹ Воронежский государственный университет

Аннотация. Предложен комбинированный метод идентификации уравнений математической физики, описывающих динамику пространственно-распределенных процессов, на основе одномерного уравнения диффузии-адвекции-реакции. Первой составляющей метода является получение МНК-оценок параметров разностной схемы Кранка-Николсон. Однако, эти оценки оказываются смещенными в силу наличия ошибок в регрессорах. С целью уменьшения указанного смещения в качестве второй составляющей метода применяется расширенный фильтр Калмана. Приводится вычислительный эксперимент, подтверждающий эффективность предложенной методики.

Ключевые слова: оценка параметров, МНК, разностная схема Кранка-Николсон, расширенный фильтр Калмана.

Введение

Задачи идентификации параметров динамических систем являются одними из важнейших задач технических, экономических и социальных приложений. Им посвящено большое число работ. При этом большинство исследований посвящено стационарным системам с сосредоточенными параметрами (см., например, [1-7]). Значительно меньше работ посвящено идентификации динамических систем и систем с распределенными параметрами, причем в большинстве этих работ рассматриваются приближенные методы, в том числе, основанные на обработке наблюдений многомерных временных рядов в узлах разностных схем, аппроксимирующих соответствующие дифференциальные уравнения [8-10].

В представленном исследовании для параметрической идентификации модели распределенного динамического объекта

предлагается комбинация фильтра Калмана и простого МНК, служащего для оценки начальной точки рекурсивных вычислений.

1. Постановка задачи

Рассмотрим распределенную динамическую систему, описываемую одномерным уравнением диффузии-адвекции-реакции:

$$\frac{\partial x(t, l)}{\partial t} = p_D \frac{\partial^2 x(t, l)}{\partial l^2} + p_S \frac{\partial x(t, l)}{\partial l} + p_A x(t, l), \quad (1)$$

где $\mathbf{p} = (p_D, p_S, p_A)^T$ – вектор оцениваемых параметров. Пусть $\{(t_k, l_i) : k = 1, \dots, n; i = 0, \dots, m-1\}$ – регулярная прямоугольная сетка с шагом Δt по времени и шагом Δl по пространственной переменной, в узлах которой мы наблюдаем значения функции x с некоторой погрешностью. Обозначим $x_i^k = x(t_k, l_i)$. Пусть $y_i^k = x_i^k + \varepsilon_i^k$ – наблюдаемые значения, где ε_i^k – независимые одинаково распределенные по нормальному закону ошибки измерений с нулевым математическим ожиданием и стандартным отклонением σ . Задача состоит в оценке неизвестных параметров \mathbf{p} уравнения **Ошибка! Источник ссылки не найден.** по зашумленным данным.

2. Идентификация параметров методом наименьших квадратов

Для применения метода наименьших квадратов, , составим явную четырехточечную разностную схему для уравнения **Ошибка! Источник ссылки не найден.**, заменив точные значения решения в узлах сетки x_i^k на наблюдаемые значения y_i^k :

$$\frac{y_i^{k+1} - y_i^k}{\Delta t} = p_D \frac{y_{i+1}^k - 2y_i^k + y_{i-1}^k}{(\Delta l)^2} + p_S \frac{y_{i+1}^k - y_{i-1}^k}{2\Delta l} + p_A y_i^k + \zeta_i^k, \quad (2)$$

неявную четырехточечную разностную схему:

$$\frac{y_i^{k+1} - y_i^k}{\Delta t} = p_D \frac{y_{i+1}^{k+1} - 2y_i^{k+1} + y_{i-1}^{k+1}}{(\Delta l)^2} + p_S \frac{y_{i+1}^{k+1} - y_{i-1}^{k+1}}{2\Delta l} + p_A y_i^{k+1} + \nu_i^k, \quad (3)$$

а также схему Кранка-Николсон:

$$\begin{aligned} \frac{y_i^{k+1} - y_i^k}{\Delta t} &= \frac{p_D}{2(\Delta l)^2} \left((y_{i+1}^{k+1} - 2y_i^{k+1} + y_{i-1}^{k+1}) + (y_{i+1}^k - 2y_i^k + y_{i-1}^k) \right) + \\ &+ \frac{p_S}{4\Delta l} \left((y_{i+1}^{k+1} - y_{i-1}^{k+1}) + (y_{i+1}^k - y_{i-1}^k) \right) + \frac{p_A}{2} (y_i^{k+1} + y_i^k) + \zeta_i^k, \end{aligned} \quad (4)$$

где ζ_i^k , v_i^k и ζ_i^k – случайные ошибки. Изменяя i от 1 до $m-2$ и k от 0 до $n-1$, получаем систему линейных относительно параметров p_D , p_S и p_A уравнений вида (2), (3) или (4). Каждая из этих систем может быть использована для получения МНК-оценок неизвестных параметров p_D , p_S и p_A . Однако, в любом случае МНК-оценки параметров p_D , p_S и p_A будут смещенными из-за наличия ошибок в регрессорах, как показано в [11].

Повышения точности решения задачи идентификации параметров уравнения **Ошибка! Источник ссылки не найден.** можно достичь на основе комбинирования методов идентификации.

3. Применение комбинации расширенного фильтра Калмана и метода наименьших квадратов

Уравнения **Ошибка! Источник ссылки не найден.**, но уже для точного решения x , можно записать в виде:

$$\begin{aligned} & (\theta_2 - \theta_1)x_{i-1}^{k+1} + (1 + 2\theta_1 - \theta_3)x_i^{k+1} - (\theta_1 + \theta_2)x_{i+1}^{k+1} = \\ & = (\theta_1 - \theta_2)x_{i-1}^k + (1 - 2\theta_1 + \theta_3)x_i^k + (\theta_1 + \theta_2)x_{i+1}^k, \end{aligned}$$

где $\theta_1 = \frac{p_D \Delta t}{2(\Delta l)^2}$, $\theta_2 = \frac{p_S \Delta t}{4\Delta l}$, $\theta_3 = \frac{p_A \Delta t}{2}$, $i = 1, \dots, m-2$, $k = 0, \dots, n-1$.

Или в матричном виде:

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{B}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{x}_k + \mathbf{\Gamma}(\boldsymbol{\theta})(x_0^k, x_0^{k+1}, x_{m-1}^k, x_{m-1}^{k+1})^T, \quad k = 0, \dots, n-1, \quad (5)$$

где $\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})$ и $\mathbf{B}(\boldsymbol{\theta})$ – трехдиагональные матрицы размера $(m-2) \times (m-2)$, зависящие от вектора параметров $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)^T$, следующего вида:

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} 1 + 2\theta_1 - \theta_3 & -\theta_1 - \theta_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \theta_2 - \theta_1 & 1 + 2\theta_1 - \theta_3 & -\theta_1 - \theta_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \theta_2 - \theta_1 & 1 + 2\theta_1 - \theta_3 & -\theta_1 - \theta_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \theta_2 - \theta_1 & 1 + 2\theta_1 - \theta_3 & -\theta_1 - \theta_2 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \theta_2 - \theta_1 & 1 + 2\theta_1 - \theta_3 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} 1 - 2\theta_1 + \theta_3 & \theta_1 + \theta_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \theta_1 - \theta_2 & 1 - 2\theta_1 + \theta_3 & \theta_1 + \theta_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \theta_1 - \theta_2 & 1 - 2\theta_1 + \theta_3 & \theta_1 + \theta_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \theta_1 - \theta_2 & 1 - 2\theta_1 + \theta_3 & \theta_1 + \theta_2 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \theta_1 - \theta_2 & 1 - 2\theta_1 + \theta_3 \end{pmatrix},$$

$\mathbf{x}_k = (x_1^k, x_2^k, \dots, x_{m-2}^k)^T$ – вектор размера $(m-2) \times 1$, а $\mathbf{\Gamma}(\boldsymbol{\theta})$ – матрица размера $(m-2) \times 4$, также зависящая от вектора $\boldsymbol{\theta}$, следующего вида:

$$\mathbf{\Gamma}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} \theta_1 - \theta_2 & \theta_1 - \theta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \theta_1 + \theta_2 & \theta_1 + \theta_2 \end{pmatrix}.$$

В силу невырожденности матрицы $\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})$ умножим левую и правую части уравнений **Ошибка! Источник ссылки не найден.** на обратную матрицу $\mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{\theta})$. Получим

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) (\mathbf{B}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{x}_k + \mathbf{\Gamma}(\boldsymbol{\theta}) (x_0^k, x_0^{k+1}, x_{m-1}^k, x_{m-1}^{k+1})^T), \quad k = 0, \dots, n-1. \quad (6)$$

Тогда рассматриваемая нами линейная динамическая модель может быть записана в пространстве состояний следующим образом:

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{B}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{x}_k + \mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{\Gamma}(\boldsymbol{\theta}) (\mathbf{u}_k + \boldsymbol{\xi}_k), \\ \mathbf{y}_k = \mathbf{x}_k + \boldsymbol{\eta}_k, \end{cases} \quad (7)$$

где $\mathbf{u}_k = (y_0^k, y_0^{k+1}, y_{m-1}^k, y_{m-1}^{k+1})^T$ интерпретируется в терминах фильтра Калмана как вектор управляющих воздействий, $\boldsymbol{\xi}_k = -(\varepsilon_0^k, \varepsilon_0^{k+1}, \varepsilon_{m-1}^k, \varepsilon_{m-1}^{k+1})^T$ – шум процесса, $\mathbf{y}_k = (y_1^k, y_2^k, \dots, y_{m-2}^k)^T$ – вектор измерений, $\boldsymbol{\eta}_k = (\varepsilon_1^k, \varepsilon_2^k, \dots, \varepsilon_{m-2}^k)^T$ – измерительный шум.

Поскольку $\boldsymbol{\theta}$ – постоянный вектор, вполне естественно положить

$$\boldsymbol{\theta}_{k+1} = \boldsymbol{\theta}_k, \quad k = 0, \dots, n-1. \quad (8)$$

Тогда система **Ошибка! Источник ссылки не найден.** вместе с предположением **Ошибка! Источник ссылки не найден.** может быть переформулирована как нелинейная модель

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{k+1} \\ \boldsymbol{\theta}_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_k) \mathbf{B}(\boldsymbol{\theta}_k) \mathbf{x}_k \\ \boldsymbol{\theta}_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_k) \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{\theta}_k) \mathbf{u}_k \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_k) \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{\theta}_k) \boldsymbol{\xi}_k \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{y}_k = (\mathbf{I}_{m-2} \quad \mathbf{0}) \begin{pmatrix} \mathbf{x}_k \\ \boldsymbol{\theta}_k \end{pmatrix} + \boldsymbol{\eta}_k, \end{cases} \quad (9)$$

где \mathbf{I}_{m-2} – единичная матрица размера $(m-2) \times (m-2)$. Теперь расширенный фильтр Калмана может быть применен для оценки вектора состояния, содержащего $\boldsymbol{\theta}_k$ в качестве своих компонент. Однако, для этого нам необходимо иметь оценки матриц ковариации

$\mathbf{Q} = \text{cov}(\boldsymbol{\xi}_k)$ и $\mathbf{R} = \text{cov}(\boldsymbol{\eta}_k)$, начальную оценку вектора состояния $\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{x}}_{0|0} \\ \hat{\boldsymbol{\theta}}_{0|0} \end{pmatrix}$ и оценку ковариационной матрицы $\mathbf{P}_{0|0}$ начальной оценки вектора состояния.

Предположим, что имеется некоторая оценка $\hat{\sigma}^2$ дисперсии σ^2 измерительной погрешности ε_i^k . Тогда оценки матриц \mathbf{Q} и \mathbf{R} имеют вид: $\hat{\mathbf{Q}} = \hat{\sigma}^2 \mathbf{I}_4$, $\hat{\mathbf{R}} = \hat{\sigma}^2 \mathbf{I}_{m-2}$.

В качестве оценки $\hat{\mathbf{x}}_{0|0}$ естественно взять вектор $(y_1^0, y_2^0, \dots, y_{m-2}^0)^T$, а в качестве оценки $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{0|0}$ – вектор $\hat{\boldsymbol{\theta}}_0 = \left(\frac{\hat{p}_D \Delta t}{2(\Delta t)^2}, \frac{\hat{p}_S \Delta t}{4 \Delta t}, \frac{\hat{p}_A \Delta t}{2} \right)^T$, где \hat{p}_D , \hat{p}_S и \hat{p}_A – МНК-оценки параметров p_D , p_S и p_A . Тогда оценка матрицы $\mathbf{P}_{0|0}$ примет вид:

$$\hat{\mathbf{P}}_{0|0} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}^2 \mathbf{I}_{m-2} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_3 \end{pmatrix}.$$

Можно применить алгоритм расширенного фильтра Калмана, представленного в [12,13].

В качестве итоговой оценки вектора параметров $\boldsymbol{\theta}$ можно использовать последнее значение оценки $\hat{\boldsymbol{\theta}} = \hat{\boldsymbol{\theta}}_{n|n}$, полученное при

$k = n$. Тогда вектор оценок исходных параметров p_D , p_S и p_A имеет

$$\text{вид} \left(\frac{2(\Delta l)^2 \hat{\theta}_1}{\Delta t}, \frac{4\Delta l \hat{\theta}_2}{\Delta t}, \frac{2\hat{\theta}_3}{\Delta t} \right)^T.$$

4. Обсуждение результатов вычислительного эксперимента

Сравним результаты работы данного метода с результатами методов, предложенных в работах [10] и [14].

Для этого решим численно уравнение **Ошибка! Источник ссылки не найден.** с истинными значениями параметров $p_D = 1$, $p_S = 0.1$ и $p_A = 0.1$, граничным условием $x(t, 0) = 0$ и начальным условием $x(0, l) = (1 + 0.1 \times (20 - l)^2)^{-1}$ в области $[1, 20] \times [1, 40]$. График численного решения показан на рис. 1.

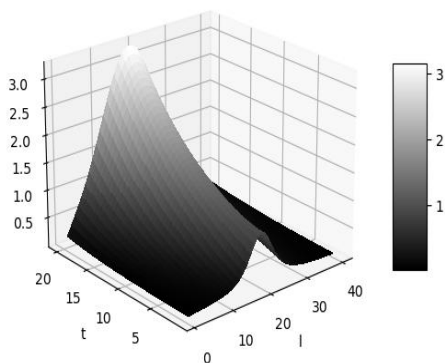


Рис. 1. График численного решения уравнения **Ошибка! Источник ссылки не найден.**

Далее к значениям x_i^k численного решения в узлах пространственно-временной сетки с некоторым шагом Δl по пространственной координате и некоторым шагом Δt по времени добавим смоделированную с помощью генератора случайных чисел погрешность в виде нормального «белого шума» с некоторой дисперсией σ и по полученным значениям y_i^k найдем сначала МНК-оценки параметров уравнения **Ошибка! Источник ссылки не найден.** применяя алгоритмы расширенного фильтра Калмана, построенные по схеме Кранка-Николсон.

В экспериментах будем использовать одно значение стандартного отклонения случайной погрешности наблюдений σ равное 0.05. Возьмем $\Delta t = 1$ и $\Delta t = 1$.

Результаты моделирования, включая смещения (Bias), стандартные отклонения (STD), квадратный корень из среднеквадратичных ошибок (RMSE) для интегрального метода, байесовского метода, каскадного метода комбинации МНК и расширенного фильтра Калмана, представлены в табл. 1.

Таблица 1

Результаты моделирования при $\Delta t = 1.0$

Параметры		p_D	p_S	p_A
Значения		1.0	0.1	0.1
Bias $\times 10^3$	Каскадный метод	-55.9	-0.2	-0.5
	Байесовский метод	-35.6	1.0	0.6
	Интегральный метод	-5.8	-0.005	-0.07
	МНК-КНФК	-1.5	0.3	-0.1
STD $\times 10^3$	Каскадный метод	40.5	6.2	0.8
	Байесовский метод	22.2	3.8	0.5
	Интегральный метод	21.0	3.7	0.5
	МНК-КНФК	20.6	3.6	0.5
RMSE $\times 10^3$	Каскадный метод	69.1	6.2	1.0
	Байесовский метод	42.0	3.9	0.8
	Интегральный метод	21.7	3.7	0.5
	МНК-КНФК	20.6	3.6	0.5

Из табл. 1 видно, что расширенный фильтр Калмана дает наилучшие результаты из всех представленных методов.

Заключение

Проведенные исследования показывают, что комбинирование МНК и расширенного фильтра Калмана, построенного по разностной схеме Кранка-Николсон, как показывают результаты табл. 1, существенно улучшает качество оценки за счет рационального выбора начальных значений начального приближения рекурсивной процедуры фильтра Калмана в форме смещенных МНК-оценок.

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. 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.
6. 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.
7. 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.
8. Muller, T. Fitting parameters in partial differential equations from partially observed noisy data / T. Muller, J. Timmer // *Physical Review*. – 2002. – Vol. 171. – P. 1-7.
9. Muller, T. Parameter identification techniques for partial differential equations / T. Muller, J. Timmer // *International Journal of Bifurcation and Chaos*. – 2004. – Vol. 14. – P. 2053-2060.
10. Parameter estimation of partial differential equation models / X. Hun [и др.] // *Journal of the American Statistical Association*. – 2013. – Vol. 108. – P. 1009–1020.
11. Ben-Moshe, D. Identification of linear regressions with errors in all variables / D. Ben-Moshe // *Econometric Theory*. – 2020. – P. 1-31.
12. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021617892 Российской Федерация. Применение расширенного фильтра Калмана в распределенных динамических системах: № 2021617140: заявл. 13.05.2021: опубл. 20.05.2021 / Е. А. Копытина, А. В. Копытин; заявитель федеральное государственное бюджетное

образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный университет».

13. Копытин, А. В. Идентификация распределенной динамической системы с использованием расширенного фильтра Калмана / А. В. Копытин, Е. А. Копытина, М. Г. Матвеев // Информационные технологии и вычислительные системы. – 2021. – № 2. – С. 75-83. – DOI 10.14357/20718632210208.

14. Копытин, А. В. Применение интегрального метода идентификации параметров распределенной динамической системы / А. В. Копытин, Е. А. Копытина // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Системный анализ и информационные технологии. – 2019. – № 1. – С. 21-26.