

Разработка приложения для идентификации параметров пространственно-распределенных динамических систем с использованием комбинированных методов

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

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

¹ Воронежский государственный университет

***Аннотация.** Предложен комбинированный метод идентификации уравнений математической физики, описывающих динамику пространственно-распределенных процессов, на основе экспериментальных многомерных временных рядов. 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 с использованием разработанного приложения.*

***Ключевые слова:** приложение, ИТ, оценка параметров, МНК, разностная схема Кранка-Николсон, расширенный фильтр Калмана, комбинированные методы.*

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 дифференциальным уравнением в частных производных с начальными и граничными условиями, которое имеет следующий общий вид:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = D \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} - v \frac{\partial x}{\partial z}, \quad (1)$$

$$x(0, z) = \varphi(z),$$

$$x(t, z^{\min}) = f_1(t), \quad x(t, z^{\max}) = f_2(t).$$

где $D \geq 0$ – коэффициент диффузии, $v \geq 0$ – скорость адвекции, z – пространственная координата.

Источником информации о поведении системы являются данные натуральных измерений переменной x_i^k с погрешностью ε_i^k в виде нормального «белого шума» – $y_i^k = x_i^k + \varepsilon_i^k$ с математическим ожиданием $M(\varepsilon_i^k) = 0$ и $\text{cov}(\varepsilon_i^k, \varepsilon_j^l) = 0$, в последовательные моменты времени t_k , $k = 0, 1, \dots, n$, в узлах одномерной пространственной регулярной сетки $i = 0, 1, \dots, m - 1$, т. е. многомерный временной ряд. Рассмотрение одномерной сетки ничем не ограничивает дальнейшие исследования, зато позволяет избежать громоздких построений, характерных для плоских и объемных пространств.

Задача заключается в идентификации процессов конвективной диффузии на основе анализа многомерных временных рядов и разработке алгоритмов параметрической идентификации механистической модели с постоянными коэффициентами по наблюдаемым значениям y_i^k .

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 :

$$\frac{y_i^{k+1} - y_i^k}{\Delta t} = D \frac{y_{i+1}^k - 2y_i^k + y_{i-1}^k}{(\Delta z)^2} - v \frac{y_{i+1}^k - y_{i-1}^k}{2\Delta z} + \zeta_i^k, \quad (2)$$

неявную четырехточечную разностную схему:

$$\frac{y_i^{k+1} - y_i^k}{\Delta t} = D \frac{y_{i+1}^{k+1} - 2y_i^{k+1} + y_{i-1}^{k+1}}{(\Delta z)^2} - v \frac{y_{i+1}^{k+1} - y_{i-1}^{k+1}}{2\Delta z} + v_i^k, \quad (3)$$

а также схему Кранка-Николсон:

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

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 D и v уравнений вида **Ошибка! Источник ссылки не найден., Ошибка! Источник ссылки не найден.** или **Ошибка! Источник ссылки не найден..** Любая из этих систем может быть использована для получения МНК-оценок неизвестных параметров D и v , но, как показывает проведенный в ходе исследования эксперимент, наиболее точные оценки получаются при использовании уравнений вида **Ошибка! Источник ссылки не найден.**, т.е. схемы Кранка-Николсон. Однако, и в этом случае МНК-оценки параметров v и D будут смещенными из-за наличия ошибок в регрессорах, как показано в [11, 12].

Повышения точности решения задачи идентификации параметров уравнения **Ошибка! Источник ссылки не найден.** можно достичь на основе комбинирования методов идентификации, а именно комбинации расширенного фильтра Калмана и метода наименьших квадратов.

3. Приложение для идентификации параметров пространственно-распределенных динамических систем на основе комбинированных методов

Для разработки приложения был выбран объектно-ориентированный язык программирования Python.

Средой разработки приложения является PyCharm. Для разработки графического пользовательского интерфейса использован Qt Designer. Библиотека `numpy` использована для работы с вычислительной математикой. Библиотека `matplotlib` требовалась для создания статических визуализаций на Python.

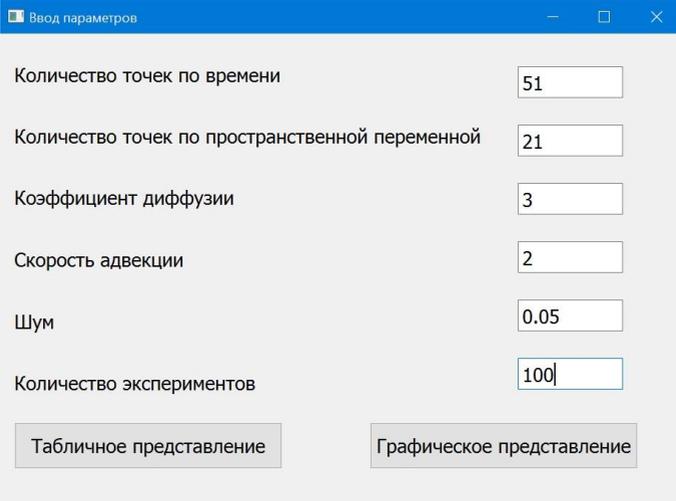
Разработанное приложение состоит из следующих программных модулей:

- `main`;
- `kalman_filters`;
- `adv_diff_kalman_all` [13].

Поскольку пользователь взаимодействует с приложением посредством графического пользовательского интерфейса были разработаны следующие формы:

- main_form.ui;
- table_form.ui.

Модуль main служит для запуска формы main_form.ui для ввода параметров и выбора способа отображения результатов исследования. Интерфейс формы main_form.ui представлен на рис. 1.



Параметр	Значение
Количество точек по времени	51
Количество точек по пространственной переменной	21
Коэффициент диффузии	3
Скорость адвекции	2
Шум	0.05
Количество экспериментов	100

Рис. 1. Форма ввода параметров

Модуль kalman_filters содержит в себе следующие функции:

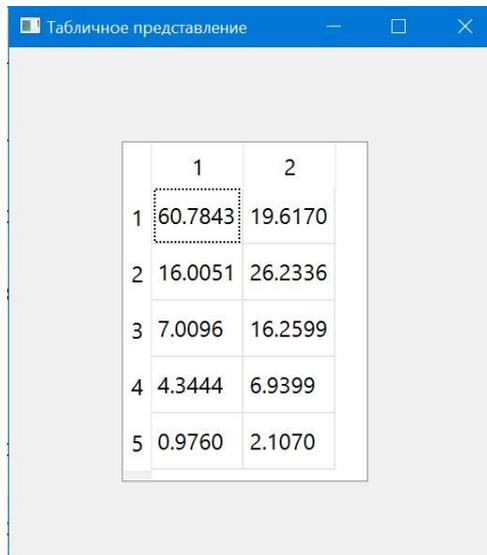
- explicit_kf;
- implicit_kf;
- kf_crank_nicolson.

Модуль kalman_filters служит для задания явной, неявной разностных схем и схемы Кранка-Николсон. Модуль adv_diff_kalman_all служит для реализации самого вычислительного эксперимента в результате, которого будет произведен расчет средней абсолютной ошибки в процентах для каждого из методов идентификации параметров пространственно-распределенной динамической системы, а именно:

- МНК, как самостоятельного метода.

- Комбинации методов: расширенного фильтра Калмана, построенного на основе явной разностной схемы, где в качестве начальной точки выступает точка, найденная МНК.
- Комбинации методов: расширенного фильтра Калмана, построенного на основе неявной разностной схемы, где в качестве начальной точки выступает точка, найденная МНК.
- Комбинации методов: расширенного фильтра Калмана, построенного на основе схемы Кранка-Николсон, где в качестве начальной точки выступает произвольная точка.
- Комбинации методов: расширенного фильтра Калмана, построенного на основе схемы Кранка-Николсон, где в качестве начальной точки выступает точка, найденная МНК.

Результаты вычислительного эксперимента при нажатии кнопки «Табличное представление» формы `main_form.ui` будут отображены в виде таблицы на форме `table_form.ui`, как показано на рис. 2.



	1	2
1	60.7843	19.6170
2	16.0051	26.2336
3	7.0096	16.2599
4	4.3444	6.9399
5	0.9760	2.1070

Рис. 2. Табличное представление результатов вычислительного эксперимента

При выборе графического представления на форме `main_form.ui` будет открыто окно с результатами вычислительного эксперимента в виде графика (см. рис. 3).

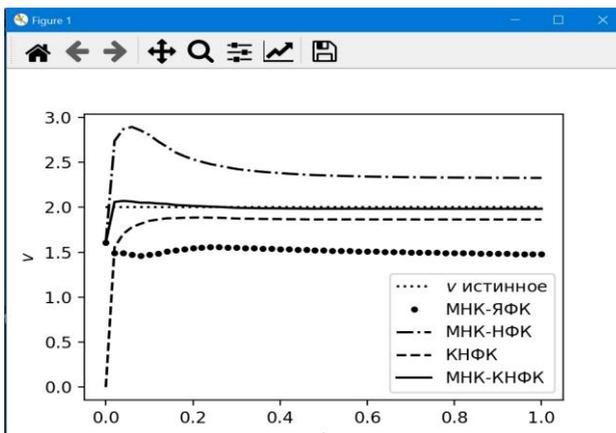


Рис. 3. Графическое представление результатов вычислительного эксперимента

4. Обсуждение результатов вычислительного эксперимента

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

Рассмотрим следующее решение уравнения

Ошибка! Источник ссылки не найден.:

$$x(t, z) = \exp\left(\frac{v}{2D}\left(z - \frac{vt}{2}\right)\right) \left(\exp(-Dt) \sin(z) + \exp(-4Dz) \sin(2z) + \exp\left(-\frac{9}{5}Dz\right) \sin(3z) \right)$$

в прямоугольной области $[0, 1] \times [1, 3]$ при значениях параметров D и v равных соответственно 3 и 2. График решения представлен на рис.4.

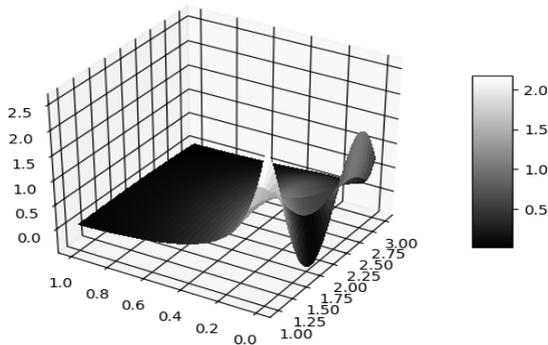


Рис. 4. График решения уравнения
Ошибка! Источник ссылки не найден.

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 значения стандартного отклонения случайной погрешности наблюдений σ равное 2%, 5% и 10% от среднего значения модуля решения (5) в узлах сетки, что соответствует низкому, среднему и высокому уровню погрешности. Возьмем $\Delta l = 0.02$ и $\Delta t = 0.02$.

Модельный эксперимент многократно повторим (200 раз) по каждому методу получения оценок и при каждом уровне интенсивности помехи, что позволит получить средние значения оценок параметров D и v методом наименьших квадратов (МНК), комбинацией МНК с расширенным фильтром Калмана, построенным по явной разностной схеме (МНК-ЯФК), комбинацией МНК с расширенным фильтром Калмана, построенным по неявной разностной схеме (МНК-НФК), расширенным фильтром Калмана, построенным по схеме Кранка-Николсон с произвольным выбором начального значения вектора параметров $\hat{\theta}_0$ (КНФК), $\hat{\theta}_0 = (0, 0)^T$, и комбинацией МНК с

расширенным фильтром Калмана, построенным по схеме Кранка-Николсон (МНК-КНФК). Результаты моделирования представлены в табл. 1.

Таблица 1

Результаты моделирования при $\Delta t = 0.02$

Погрешность	2%		5%		10%	
	D	v	D	v	D	v
МНК	22.59	22.14	31.56	21.07	48.61	19.61
МНК-ЯФК	10.11	20.55	10.35	20.76	11.71	22.00
МНК-НФК	8.31	17.67	8.27	17.69	7.72	17.11

Продолжение табл. **Ошибка! Источник ссылки не найден.**

Погрешность	2%		5%		10%	
	D	v	D	v	D	v
КНФК	3.63	6.16	3.68	6.24	3.93	6.50
МНК-КНФК	0.44	0.59	0.32	0.61	0.47	1.16

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

Заключение

Проведенные исследования с использованием разработанного приложения, о котором говорится в статье, 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 / Н. 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. 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.
13. 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».

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.