

Российская академия наук
Институт прикладной физики

НЕЛИНЕЙНЫЕ ВОЛНЫ' 2004

Нижний Новгород
2005

2.3. Другие модели

Кроме вращательных движений оснований заметный вклад в процесс расплетания двойной спирали ДНК, а также в процесс денатурации молекулы вносят поперечные смещения полинуклеотидных цепей. Эти движения детально изучались в работе Пейарда и Бишопа [5]. Был построен соответствующий гамилтониан, получены динамические уравнения и найдены солитонные решения этих уравнений. Если к уравнениям (2) добавить уравнения Пейарда и Бишопа, а также дополнить все уравнения слагаемыми, учитывающими взаимодействия между вращательными движениями и поперечными смещениями оснований, то модель, имитирующая внутреннюю динамику молекулы ДНК, существенно улучшится.

Дальнейшее улучшение модели потребовало бы учета слагаемых, описывающих влияние внешней среды. И прежде всего необходимо было бы учесть воздействие термостата, ионного окружения и внешних полей. Необычайно важно было бы учесть также тот факт, что основа ДНК неодинаковые. Для этого потребовалось бы ввести в коэффициенты уравнения (2), которые до сих пор считались константами, зависимость от переменной z . Такая зависимость отражала бы уникальную для каждого живого организма последовательность оснований, и введение ее в уравнения значительно приблизило бы модель к реальной ситуации.

Вся совокупность перечисленных выше проблем как раз и составляет математическую основу нелинейного подхода в исследованиях ДНК. Привлекательность этого направления исследований заключается в том, что у него имеется достаточно серьезный шанс объяснить многие черты и механизмы функциональной активности ДНК исходя из нелинейных динамических свойств этой молекулы.

Литература

1. McCollum J. A., Harvey S. C. Dynamics of Proteins and Nucleic Acids. Cambridge University Press. 1987.
2. Yakushevich L. V. Nonlinear dynamics of biopolymers: theoretical models, experimental data // Quart. Rev. Biophys. 1993. V. 26, № 2. P. 201—223.
3. Englander S. W., Kallenbach N. R., Heeger A. J., Krumholz J. A., Litwin A. Nature of the open state in long polynucleotide double helices: possibility of soliton excitations // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1980. V. 77, № 12. P. 7222—7226.
4. Yakushevich L. V. Nonlinear Physics of DNA. Weinheim: Wiley-VCH, 2004.
5. Peyrard M., Bishop A. R. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62, № 23. P. 2755—2758.
6. Yakushevich L. V., Savin A. V., Manevitch L. I. On the internal dynamics of topological solitons in DNA // Phys. Rev. E. 2002. V. 66. 016614-29.

НЕКОТОРЫЕ ПРОБЛЕМЫ РЕКОНСТРУКЦИИ МОДЕЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ПО ВРЕМЕННОМУ РЯДУ И ПУТИ ИХ РЕШЕНИЯ

Б. П. Безручко, М. Б. Бодров, Т. В. Диканев,
А. С. Караваев, В. И. Пономаренко, М. Д. Прохоров,
Е. П. Селезнев, И. В. Сысоев, Д. А. Смирнов

Формирование моделей на основе результатов наблюдений и исследование их свойств — вот, по существу, основное содержание науки. Л. Льюис [1], с. 15.

В исследовательской практике типичны ситуации, когда процессы, протекающие в объекте, обусловлены нечетко очерченной совокупностью явлений различной природы или общие законы (аналогичные законам Ньютона в механике) для рассматриваемой области не установлены. В этом случае основным источником информации о поведении объекта часто становятся данные измерений скалярной или векторной величины η (наблюдаемой), сделанные в отдельные моменты времени t_i — временные ряды $\{\eta_i\}$. Здесь $\eta_i = \eta(t_i)$, $t_i = i\Delta t$, Δt — интервал выборки, $i = 1, 2, 3, \dots, N$, N — длина ряда¹. Используя экспериментальные ряды, создают эмпирические модели поведения объекта во времени². Модели эти менее универсальны, чем конструкции, создаваемые на основе «первых принципов», и в некотором смысле подобны уникальной одежде, изготовленной методом заворачивания клиента в куски ткани и сшивания по краям. Но развитие вычислительной техники, формирование концепции динамического хаоса и труд поколений исследователей привели к тому, что такие модели прошли путь от элементарных функций $x = f(t)$, аппроксимирующих множества экспериментальных точек на плоскости (x, t) [2], к многомерным системам нелинейных разностных и дифференциальных уравнений. Это направление моделирования актуально, например, для физики, метеорологии, сейсмографии, финансов, медицины,

¹ Так выглядит сигнал на выходе любого аналого-цифрового преобразователя, но зачастую принципиально не меняется, если говорить о дискретных отсчетах в различных точках пространства, а не в различные моменты времени.

² Это направление деятельности в математической статистике и теории автоматического управления получило название *идентификация систем* [1]. В нелинейной динамике оно именуется *реконструкцией динамических систем*. Хотя, на наш взгляд, использование слова реконструкция (в значении «восстановление») оправдано лишь при восстановлении уравнений по их решениям, в случае же моделирования реальных систем больше подошел бы термин *конструирование*.

физиологии и используется для решения сложных фундаментальных и прикладных задач [3, 4].

Речь пойдет о глобальной³ реконструкции по зашумленным хаотическим рядам, которые типичны для природных и рукотворных нелинейных систем. Ранее задача описания столь сложных движений, как правило, решалась с помощью вероятностных моделей [5]. В настоящее время, когда известно, что хаотическое поведение свойственно и простым (маломерным) нелинейным динамическим системам, продуктом реконструкции стали и разностные и дифференциальные уравнения (обыкновенные, с запаздыванием, в частных производных). Список всех публикаций занял бы много страниц, поэтому мы упомянем лишь некоторые пионерские работы [6—9] и обзорные материалы [10—16].

Целью статьи является представление некоторых проблем, возникающих при эмпирическом моделировании, и демонстрация возможностей их преодоления. Речь идет о моделях в виде разностных или дифференциальных уравнений вида

$$x(t_i) = F(x(t_{i-1}), c). \quad (1)$$

Здесь $x \in R^D$ — вектор состояния; F — вектор-функция; $c \in R^p$ — вектор параметров; t_i — дискретное время;

$$dx(t)/dt = F(x(t), c), \quad (2)$$

где время t непрерывно.

Материал излагается по принципу «от простого к сложному» — по мере увеличения неопределенности в постановке задачи: от случая, когда о структуре модели все известно и остается только вычислить коэффициенты в уравнении (параметры модели), до ситуации, когда об объекте, а следовательно, и о виде его адекватной модели практически ничего не известно априори. При этом мы будем опираться на типовую «технологю» реконструкции, а для иллюстрации по возможности использовать примеры из собственного опыта.

1. Типовая схема процесса моделирования по рядам данных

Несмотря на безграничное число ситуаций, объектов и целей, вносящих в процесс свое специфическое, можно выделить типичную схему моделирования (рис. 1). Работа над моделью начинается рассмотрением известного об объекте с позиций поставленных целей, с анализа имею-

³ Термин «глобальная» означает, что модельные уравнения описывают поведение объекта во всем фазовом пространстве (глобально), в отличие от «локальных» моделей, которые используются отдельная конструкция со своим набором параметров для малой окрестности каждой точки в фазовом пространстве.

щихся или получения доступных экспериментальных данных — этап 1, и заканчивается использованием полученной модели в приложении к конкретной задаче. Но этот процесс обычно сопровождается неоднократными повторениями, возвратами в исходную и промежуточные точки схемы, являясь вариантом метода последовательных приближений.

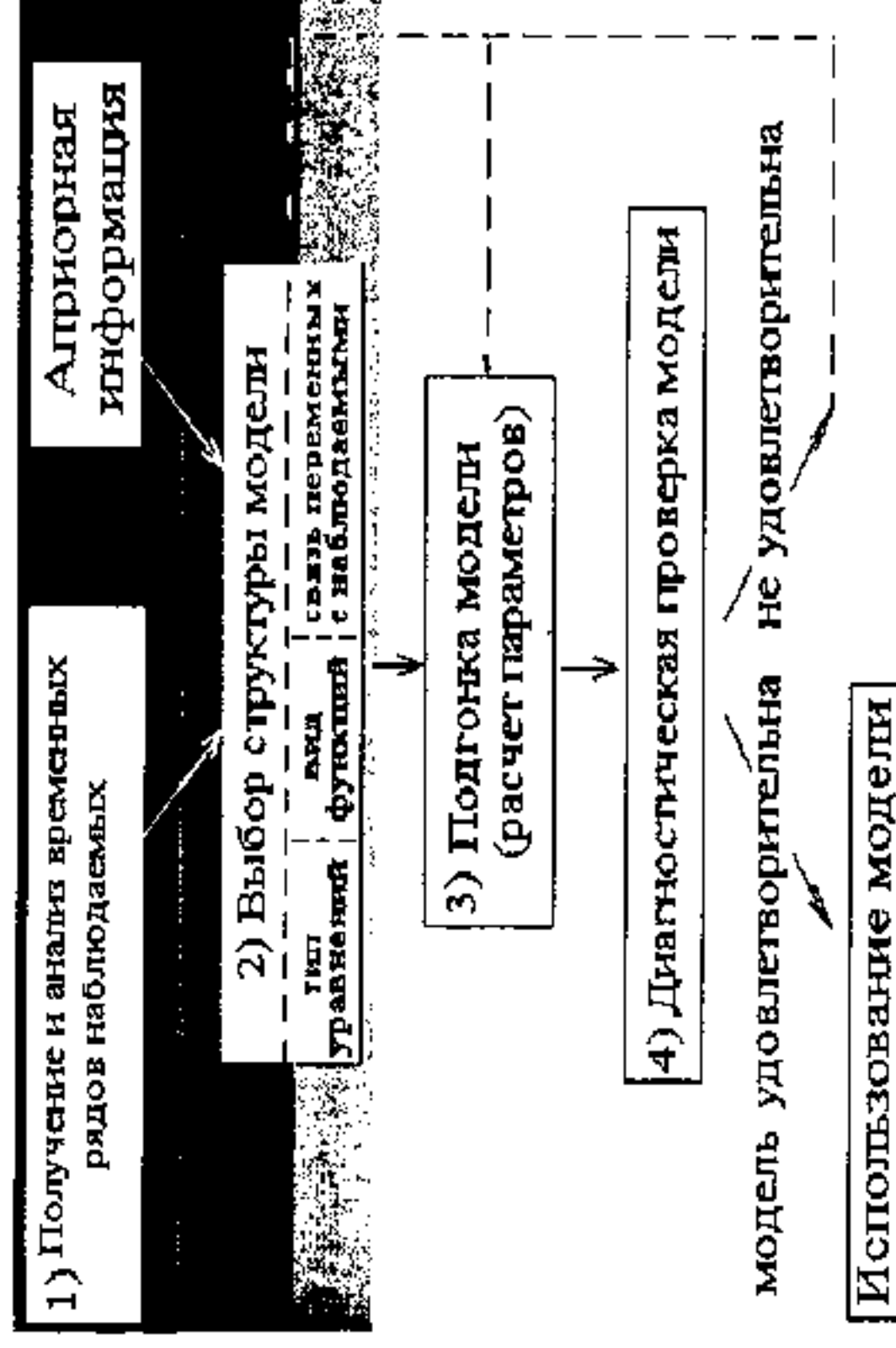


Рис. 1. Типовая схема моделирования по временному ряду

На этапе 2 формируется структура модели: выбираются тип и число уравнений, задается вид входящих в них функций F и динамических переменных x . В качестве переменных могут использоваться и непосредственно наблюдаемые величины, но в общем случае связь переменных с наблюдаемыми приходится специально выбирать: $\eta(t_n) = h(x(t_n)) + \xi(t_n)$. Функцию h , связывающую наблюдаемые и переменные модели (состояние), называют *измерительной функцией*, а ξ — измерительным шумом. На этапе 3 подбираются оптимальные значения параметров уравнений. При этом используется некий критерий качества, определяемый целью моделирования, например минимальное отклонение решений полученных уравнений от данных эксперимента или обеспечение максимальной длительности прогноза. Наконец, модель проверяется с использованием бережливой для этой цели тестовой части ряда — этап 4. В зависимости от результата проверки полученная конструкция берется дело или возвращается на доработку на любой из этапов технологической схемы. Фон, на котором изображена схема рис. 1, меняется от черного («тма незнания») до белого, отражая степень неопределенности, с которой приходится сталкиваться при моделировании. Наименее благо-

приятна для моделирования ситуация, получившая название «черного ящика», когда информация о структуре возможной адекватной модели объекта отсутствует и начинать приходится с самого верха описанной схемы. Чем больше известно о том, как должна выглядеть модель, тем вероятнее успех — «ящик» становится «серым» и даже «прозрачным».

От решения проблем, встречающихся на нижних ярусах технологической схемы, уклониться невозможно, с ними неизбежно сталкивается исследователь, преодолевший специфические трудности менее определенной задачи. Поэтому есть смысл начать обещанное в заголовке рассмотрение возникающих при реконструкции проблем с наиболее простой для моделирования ситуации, когда о модели известно все, кроме конкретных значений ее параметров, на рисунке ей соответствует белый фон.

2. Структура уравнений адекватной модели полностью известна из «первых принципов» или других соображений — «прозрачный» ящик

Задача сводится к оценке P неизвестных параметров $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_p)$ по наблюдаемым данным. Такая постановка весьма востребована и встречается в различных приложениях. В отсутствие шумов в рядах наблюдаемых и при возможности сформировать все ряды переменных задача выливается в решение системы алгебраических уравнений. Но наличие шума качественно меняет ситуацию — вместо точного решения приходится ограничиться статистическими оценками.

Не вдаваясь в подробности, мы только перечислим известные подходы к оцениванию в порядке повышения статистической эффективности получаемых с их помощью результатов: *простого усреднения, статистических моментов, наименьших квадратов, максимального правдоподобия* (обсуждение методов см., например, в [17]) и, наконец, *метод Байеса* — целая область статистики, которая занимается получением распределения вероятностей для параметров по выборке [18]. Причем чаще всего используется метод наименьших квадратов, согласно которому минимизируется сумма квадратов отклонений наблюдаемых величин или величин, полученных по наблюдаемым η , от соответствующих модельных величин u :

$$S(\mathbf{c}, \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N (\eta(t_i) - u(t_i, \mathbf{x}, \mathbf{c}))^2 \rightarrow \min. \quad (3)$$

И далее сосредоточим внимание на проблеме «скрытых переменных», которая возникает, если отсутствует возможность сформировать по экспериментальным наблюдаемым рядам всех D динамических переменных D -мерной модели, необходимые для последующего подбора и оптими-

зации P параметров (коэффициентов модельных функций). Она возникает, например, из-за невозможности измерить нужные величины, сложности измерительной функции, чрезмерной зашумленности рядов наблюдаемых и приводит к нехватке данных для подбора параметров. Дело осложняется тем, что при заданной структуре модели, включая выбор переменных (т. е. все до этапа 3 на схеме рис. 1 строго определено), для формирования рядов переменных по наблюдаемым не удается воспользоваться стандартными методами реконструкции вектора состояния по скалярному ряду. Полученные, например, последовательным дифференцированием или методом задержек переменные в общем случае не будут соответствовать *заложенным в модель переменным* ни по своему физическому смыслу, ни количественно. Поэтому для реконструкции значительных параметров модели при наличии d скрытых переменных требуются специальные подходы. Их основная идея — расширить круг неизвестных величин, включив в него не только параметры, но и значения переменных состояния модели⁴, перенеся центр тяжести проблемы с реконструкции рядов переменных на многопараметрическую оптимизацию (метод «начального состояния» [19]). На этом этапе решаются модельные уравнения со стартовыми значениями набора $(P + d)$ искомым величин. Последние затем подгоняются так, чтобы временные ряды известных $(D-d)$ переменных модели (или ряды других величин, связанных с переменными модели и соответствующих наблюдаемым) были как можно ближе к наблюдаемым рядам.

Реализация описанной идеи обещает получение оценок не только искомым параметров, но и рядов скрытых переменных и сулит ряд соблазнительных приложений. Это — проверка адекватности заложенных в модель представлений, «измерение» величин, недоступных прибору экспериментатора, восстановление утерянных или искаженных участков временной зависимости измеряемой величины, входящей в априори известную модель, уход от необходимости численного дифференцирования зашумленной наблюдаемой⁵ и т. п.

Однако опыт реализации описанной процедуры при наличии характерной для хаотических систем неустойчивости к малым возмущениям показал невозможность использовать для подгонки всю длину экспери-

⁴ На практике приходится вводить в круг искомым параметров начальные значения всех компонент вектора состояния. Хотя, казалось бы, достаточно искать начальные условия только для скрытых переменных. Это диктуется технологией подгонки параметров при сшивании отдельных фрагментов (см. далее) и, кроме того, позволяет «исправить» начальные условия, если наблюдаемые существенно зашумлены.

⁵ Речь идет о случаях, когда динамические переменные в модели являются последовательными производными от наблюдаемых величин. При больших уровнях шума и порядке дифференцирования бывает выгоднее отказаться от плохих экспериментальных данных и считать эту переменную скрытой.

ментальных рядов в методе начального состояния. Использование же коротких рядов приводит к большой дисперсии оценок. Поэтому было предложено [19] рассматривать задачу расчета реализации модели в формуле (3) не как задачу Коши, а как краевую задачу, — разделить ряд длиной N точек на L сегментов по n точек каждый, $N = Ln$, и рассматривать начальный вектор x_i на каждом сегменте ($i = 1, \dots, L$) тоже как известную искомую величину. Но это не свободные параметры задачи, на них накладывается условие непрерывности реализации модели

$$x_{i+1} = x(t_{i+1} - t_i, x_i, c), \quad i = 1, \dots, L-1. \quad (4)$$

При таком подходе (который называют методом «множественной стрельбы») функция S (см. сноску 4) теперь зависит от $LD+r$ переменных, независимыми из которых являются $d+r$. Задача поиска оценок становится задачей условной минимизации S при условиях (4), что технически более сложно, чем безусловная минимизация. Она решается чаще всего с помощью обобщенного метода Гаусса — Ньютона. Результат коренным образом зависит от числа искомых параметров P и числа начальных условий искомых состояний DL , а также «удачности» стартовых догадок для них. Для хаотических временных рядов функция $S(c, x)$ имеет множество минимумов, из которых только один — глобальный — с точностью до шумов и погрешностей расчёта соответствует истинным значениям параметров⁶. Попадание в локальный минимум приводит к большому ошибкам описания ряда и даже качественно отличному от наблюдаемого типу поведения полученной модели.

Опыт моделирования показывает, что в некоторых случаях результативным оказывается ослабление требований подгонки. Речь идет о выделении в длинном ряде v сегментов длиной n , на каждом из которых начальные состояния считаются независимыми (свободные параметры задачи), а параметры с удерживаются *одинаковыми* на всех сегментах. Внутри каждого сегмента реализуется метод множественной стрельбы (деление сегмента на L «подсегментов» и т. д.). Такой метод назовем гибридным. В итоге имеем задачу условной минимизации функции S , но независимых переменных имеется уже $vD + r$. Но даже по длинному ряду при надлежащем подборе v , L , n находится глобальный минимум в тех случаях, где все предыдущие методики находили локальный, либо расходились.

Прокллюстрируем сказанное, используя в качестве критерия качества алгоритма реконструкции размеры области параметров, заданные стартовых догадок в которой обеспечивает сходимость процесса оптимизации в глобальный минимум. При этом воспользуемся нормирован-

⁶ Если только такие значения существуют, т. е. если имеющаяся модель действительно способна хорошо описывать наблюдаемую динамику.

ными параметрами $b_i = (\gamma_i - c_i^0)/c_i^0$, характеризующими отклонение стартовых догадок γ_i для параметров от их истинных значений c_i^0 . Тогда $b = 0$ в прострстве этих параметров соответствует истинным значениям (или глобальному минимуму, если пренебречь шумами и погрешностями расчётов). С центром в этой точке задавалась область стартовых догадок в виде шара радиуса r . За меру μ принимался относительный объём концентрической шарообразной области, из которой обеспечивалась сходимость к глобальному минимуму. Значение μ можно принимать как вероятность попадания в глобальный минимум, если стартовые догадки для параметров заданы с ошибкой, не большей r . Другим критерием эффективности алгоритма может служить максимальное значение r , при котором имеет место стопроцентная сходимость ($\mu = 1$). Обозначим его индексом r_{100} . В качестве объекта использовалась система Лоренца:

$$dx/dt = c_1(y - x), \quad dy/dt = -y + x(c_3 - z), \quad dz/dt = -c_2z + xy. \quad (5)$$

Стартовые догадки для скрытых переменных задавались равными скалярной наблюдаемой. Использовались временные ряды, записанные при значениях параметров $c^0 = \left(10, \frac{8}{3}, 46\right)$ и начальных условиях

$$x^0 = (-7,60, -12,37, 38,66), \text{ как в [20]. На рис. 2, а, б приведено сечение}$$

пространства параметров, где белым цветом обозначены точки, откуда достигается сходимость в глобальный минимум целевой функции S , оттенками серого — точки, откуда методы сходятся в какой-либо локальный минимум, чёрным — расходятся. Видно, что лучшие шансы получить хорошую модель имеются при использовании модифицированного метода: для метода множественной стрельбы $r_{100} = 1,062$ (рис. 2, а), для гибридного — $r_{100} = 1,304$ (рис. 2, б). Однако результаты моделирования зависят не только от стартовых догадок для параметров и скрытых переменных, но и от N , L , v , истинных значений параметров, от того, какая переменная является наблюдаемой, от уровня шума и т. д. Поэтому вывод о превосходстве одного метода над другим можно делать только на основе анализа зависимости меры r_{100} от всех перечисленных факторов. На рис. 2, в приведена зависимость $r_{100}(N)$ при оптимальном подборе количества фрагментов L . Видно, что как в среднем, так и по максимальным показателям (наибольший из всех r_{100} и максимальная длина ряда, при которой достигается сходимость с ненулевым радиусом) гибридный метод эффективнее.

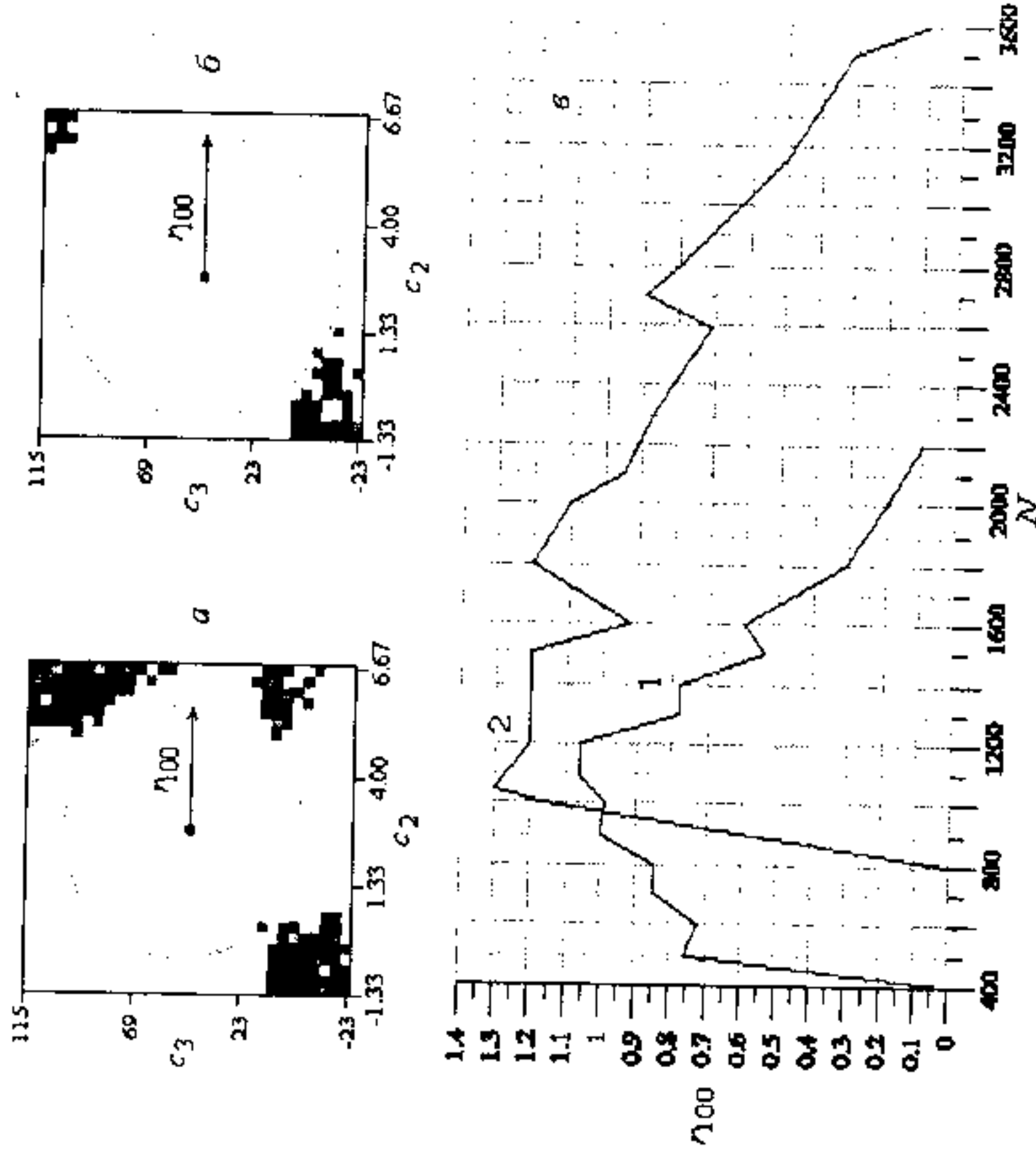


Рис. 2. Сечение пространства параметров системы Лоренца плоскостью $c_1 = 10$ в центре истинные значения параметров: а — метод множественной стрельбы; при $L = 35$, $n = 30$; б — гибридный при $L = 15$, $n = 30$, $v = 2$; в — зависимость r_{100} от N для двух методов.

Мы также исследовали зависимость меры r_{100} от L , n , выбора наблюдаемой из трех имеющихся переменных, влияния шумов. показали, что $r_{100}(v)$ в общем случае не убывает с ростом v . Аналогичное исследование было проведено для системы Рёсслера. Полученные результаты также свидетельствуют о преимуществе гибридного метода над методом множественной стрельбы.

3. Априорная информация позволяет частично определить структуру модели («серый ящик»)

Можно предположить множество вариантов не полностью определенной структуры модели. Часто неизвестны, например, размерность системы и вид аппроксимирующих функций. В таких случаях прибегают

к использованию стандартных структур (см. пример в п. 3.1) и универсальных функциональных представлений, в частности степенных полиномов. Это влечет за собой наличие слишком большого числа неизвестных параметров, оценка которых представленными в разделе 2 методами (особенно при наличии скрытых переменных) практически невозможна. Для решения задачи в такой ситуации приходится предпринимать не всегда успешные усилия по снижению размерности модели, сокращению числа параметров, подбору функционального базиса и т. п.). Другим путем к успеху может оказаться отказ от универсальности методики моделирования и специализация подхода применительно к классам объектов, о специфических чертах которых имеется априорная информация. Направление работы может подсказать анализ рядов наблюдаемых. Рассмотрим сказанное на двух примерах реконструкции обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ).

3.1. Стандартная структура модели

Одна из теорем Такенса свидетельствует о том, что для почти любой динамической системы (с достаточно гладкими функциями в правых частях) ее движение может быть описано в терминах произвольной (типичной) наблюдаемой величины и ее последовательных производных. Поэтому есть основания (при предположении о «детерминированности, конечности и гладкости» исследуемого процесса)⁷ искать модель в виде

$$d^D x/dt^D = F(x, dx/dt, \dots, d^{D-1}x/dt^{D-1}), \quad (6)$$

где $\eta(t) = x(t) + \xi(t)$. Но размерность модели должна быть достаточно большой: $D \geq M + 1$, где M — размерность наблюдаемого движения (фрактальная размерность аттрактора, если движение происходит на аттракторе).

При глобальном моделировании искомая функция F представляется с помощью единой формулы, описывающей поведение модели во всем фазовом пространстве. Ее чаще всего ищут в виде суммы известных базисных функций с неизвестными коэффициентами:

$$F(x) = \sum_{j=1}^M c_j f_j(x). \quad (7)$$

Широко распространено использование стандартного полиномиального базиса — функций $1, x_1, \dots, x_D, x_1^2, x_1 x_2, \dots, x_D^2, \dots$, обоснованное тео-

⁷ Жаргон — речь идет о модели процесса или модели объекта, в котором он наблюдается. Кроме того, заметим, при моделировании реальных объектов, реверансы в сторону теорем Такенса скорее традиционны и наукообразны, чем обязательны.

ремой Вейерштрасса. Значения коэффициентов оцениваются, как правило, путем минимизации

$$\epsilon^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(d^p \eta(t_i) / dt^p - F(\eta(t_i), d\eta(t_i)/dt, \dots, d^{p-1} \eta(t_i) / dt^{p-1}) \right)^2.$$

Производные наблюдаемой ищутся численно, что вызывает при наличии шумов большие проблемы. Иногда их можно решить с помощью фильтрации, например, фильтра Савицки — Голзя, но при достаточной больших шумах трудности непреодолимы.

Однако все известные нам успехи моделирования реальных объектов в представленном универсальном виде носят единственный характер. Как правило, структура (6) с алгебраическим многочленом в правой части приводит к очень громоздким уравнениям с расходящимися решениями и особенно неэффективна в случае функций многих переменных.

3.2. Специализация применительно к системам, находящимся под внешним воздействием [21]

При наличии априорной информации или диагностических предположений о наличии внешнего воздействия на систему успеха можно добиться, используя при моделировании *неавтономные* ОДУ. В этом случае в уравнения модели включаются описывающие воздействие функции, *явно* зависящие от времени⁸. Например, если воздействие функциональное и аддитивное, целесообразна модель в виде

$$d^D x / dt^D = F(x, dx/dt, \dots, d^{D-1} x / dt^{D-1}) + a \cos(\omega t) + b \sin(\omega t), \quad (8)$$

размерность D которой на единицу меньше, чем у стандартной формы. Предпосылкой к выбору структуры (8) может быть дискретный пик в спектре мощности. По нему можно грубо оценить частоту воздействия ω , уточнив ее значение затем перебором в окрестности. При этом удаётся избавиться от необходимости для определения параметров решать нелинейные уравнения. Значения a , b и коэффициенты F находятся решением линейной системы уравнений. Оптимальная размерность модели и порядок многочлена определяются перебором значений в соответствии с выбранным критерием качества модели.

В случае произвольного регулярного воздействия (сложного периодического и квазипериодического) удобно представление

$$F(x, t) = f(x) + g(t), \quad (9)$$

⁸ Если повезло и воздействие задано временным рядом, оно может непосредственно (без промежуточных преобразований) использоваться в реконструкции при любой его сложности.

где f — алгебраический многочлен, а функция $g(t)$ описывает воздействие и также содержит неизвестные параметры. Для этого можно использовать тригонометрический многочлен:

$$g(t) = a_0 + \sum_{j=1}^k a_{1,j} \cos\left(\frac{2\pi j t}{T_1} + \phi_{1,j}\right) + \dots + \sum_{j=1}^k a_{m,j} \cos\left(\frac{2\pi j t}{T_m} + \phi_{m,j}\right). \quad (10)$$

Эффективность подхода проверялась нами на численных примерах реконструкции уравнений по зашумленной хаотической реализации при различных видах воздействия: периодическом импульсном, периодическом с субгармониками, квазипериодическом (см., например, рис. 3). Важно отметить, что адекватные модели с тригонометрическими многочленами могут быть получены и *при очень большом числе (сотни) используемых гармоник*. Примечательно, что при стандартной аппроксимации степенными полиномами увеличение членов ряда чревато неустойчивостью моделей.

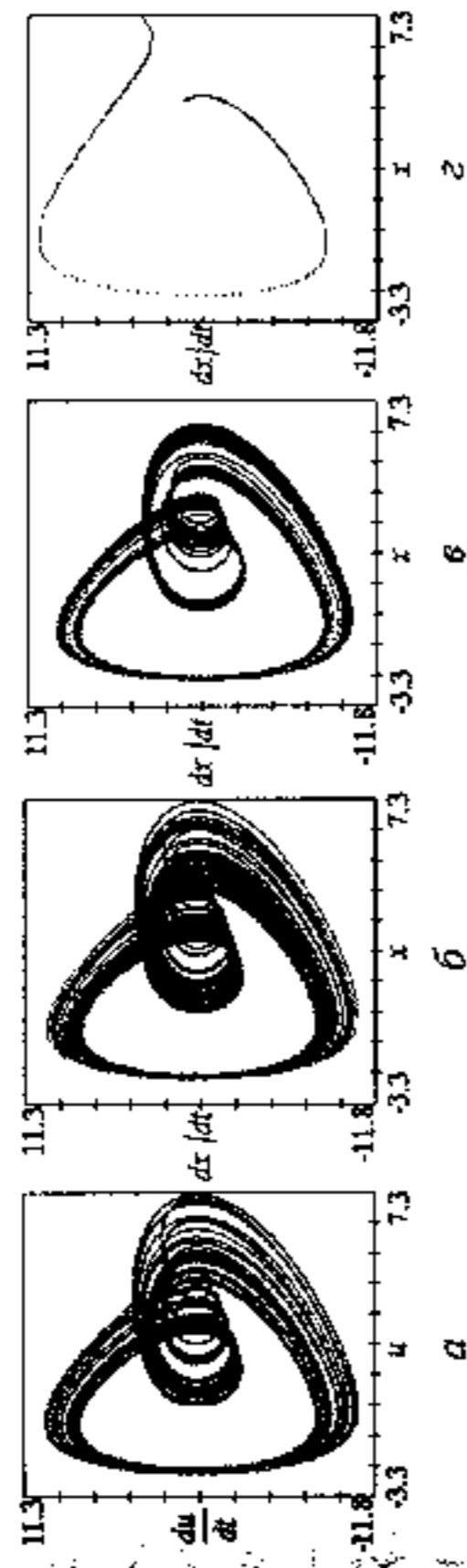


Рис. 3. Реконструкции нелинейного осциллятора Тода: $d^2 u / dt^2 = -0,45 du/dt + (5 + 4 \cos t)(e^{-u} - 1) + 7 \sin t$: аттрактор объекта (а); фазовые траектории модели (б), (в) ($D = 2$, $K = 9$) (б); модели (8) ($D = 2$, $K = 10$) (в) и стандартной модели ($D = 4$, $K = 6$) (з). K — порядок полинома.

3.3. Специализация применительно к системам с запаздыванием [22]

Методика восстановления систем с запаздыванием опирается на особенности расположения экстремумов во временных реализациях наблюдаемых колебаний (рис. 5, б), которые выявляются при анализе временного ряда наблюдаемой и используются как диагностический признак принадлежности объекта к системам этого класса. Статистический анализ временных интервалов, разделяющих экстремумы во временных реализациях различных модельных и реальных систем с запаздыванием, позволяет установить, что зависимость числа N пар экстремумов временной реализации, удаленных друг от друга на время τ , от величины τ имеет четкий минимум при времени, соответствующем времени запаз-

дывания системы (рис. 5, б). Закономерность этой особенности можно пояснить с помощью уравнения с запаздыванием вида

$$\epsilon_1 \dot{x}(t) = -x(t) + f(x(t - \tau_1)), \quad (11)$$

где τ_1 — время запаздывания, а ϵ_1 — параметр, характеризующий инерционность системы. При наличии инерционности ($\epsilon_1 > 0$), что соответствует реальным ситуациям, экстремумы во временной реализации $x(t)$ близки к квадратичным, а следовательно, в экстремальных точках $\dot{x}(t) = 0$, $\ddot{x}(t) \neq 0$. Продифференцировав (11) по t , получим

$$\epsilon_1 \ddot{x}(t) = -\dot{x}(t) + \frac{df(x(t - \tau_1))}{dx(t - \tau_1)} \dot{x}(t - \tau_1). \quad (12)$$

Если при $\dot{x}(t) = 0$ в типичном случае $\ddot{x}(t) \neq 0$, то, как видно из уравнения (2), при $\epsilon_1 \neq 0$ должно выполняться условие $\dot{x}(t - \tau_1) \neq 0$. Это означает, что на удалении τ_1 от квадратичного экстремума не должно быть другого экстремума, а следовательно, значение $N(\tau_1) \rightarrow 0$.

Аналогичными свойствами обладают многие системы с запаздыванием при наличии инерционности (ограниченности полосы пропускания), делающей экстремумы во временной реализации колебаний «округлыми». В чем можно убедиться, продифференцировав уравнение с запаздыванием общего вида, например, $\dot{x}(t) = F(x(t))$, $x(t - \tau_1)$, и повторив только что проведенные рассуждения. Далее с помощью найденного значения τ_1 по хаотической временной реализации найдутся параметры инерционности ϵ_1 и нелинейной функции f . Для этого проводится проектирование бесконечномерного фазового пространства системы с запаздыванием в специальном образом выбранные подпространства малой размерности. Например, если записать уравнение (11) в виде $\epsilon_1 \dot{x}(t) + x(t) = f(x(t - \tau_1))$ и построить на плоскости множество точек с координатами $(x(t - \tau_1), \epsilon_1 \dot{x}(t) + x(t))$, то оно воспроизведет функцию f . Поскольку заранее величина ϵ_1 не известна, зависимость $\epsilon_1 \dot{x}(t) + x(t)$ от $x(t - \tau_1)$ строят для различных значений ϵ_1 , добиваясь однозначной зависимости на плоскости $(x(t - \tau_1), \epsilon_1 \dot{x}(t) + x(t))$, которая возможна лишь при $\epsilon = \epsilon_1$. В качестве количественного критерия однозначности при таком поиске ϵ_1 используется минимальная длина линии $L(\epsilon)$, соединяющей точки на плоскости $(x(t - \tau_1), \epsilon_1 \dot{x}(t) + x(t))$, упорядоченные по величине координаты $x(t - \tau_1)$. Минимум зависимости $L(\epsilon)$ наблюдается при $\epsilon = \epsilon_1$, а множество точек на плоскости $(x(t - \tau_1), \epsilon_1 \dot{x}(t) + x(t))$ при этом воспроизводит нелинейную функцию, которую при необходимости можно аппроксимировать.

Предложенный статистический подход к определению времени задержки может быть распространен на системы с запаздыванием более высокого порядка, чем (11), а также на системы с несколькими различными временами задержки. Подход экономен по отношению к машинному времени и используется для восстановления нелинейной функции все точки временного ряда. Последнее позволяет по коротким временным рядам восстанавливать нелинейную функцию даже в случаях слаборазвитого хаоса. Он не критичен к присутствию шума в наблюдаемой.

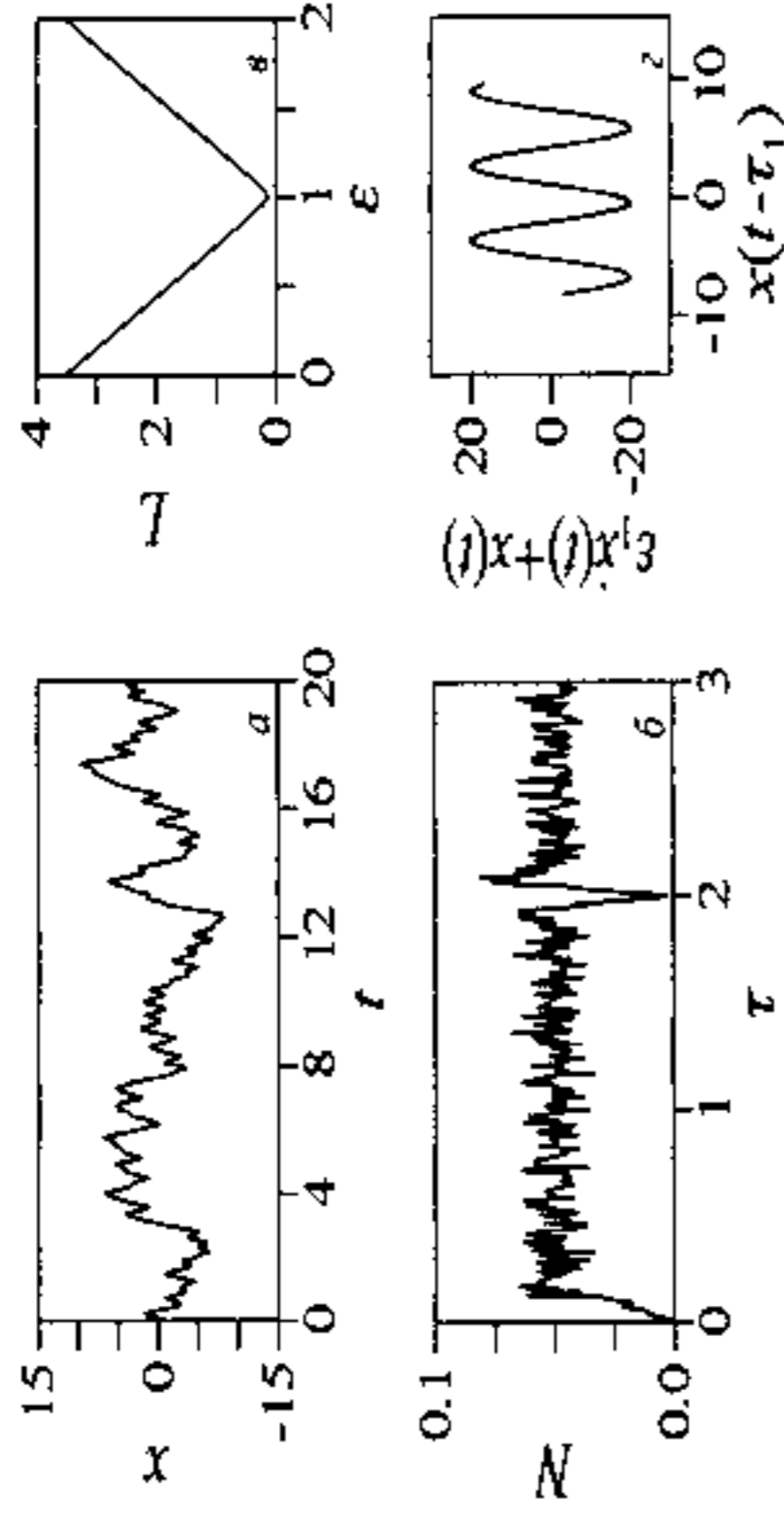


Рис. 4. Временная реализация уравнения Икеды (б) (а). Число пар экстремумов $N(\tau)$ нормировано на общее число экстремумов во временном ряду, $N_{\text{норм}}(\tau) = N(2,00)$ (б). Длина L линии в зависимости от ϵ , $L(\epsilon)$ нормирована на число точек, $L_{\text{норм}}(\epsilon) = L(1,00)$ (в). Восстановленная нелинейная функция (z). Численные эксперименты с добавлением шума показывают возможность реконструкции при уровнях шума до 20% от уровня сигнала.

На рис. 4 в качестве примера приведены результаты реконструкции по хаотической временной реализации (рис. 4, а) уравнения Икеды, описывающего динамику пассивного оптического резонатора:

$$\dot{x}(t) = -x(t) + \mu \sin(x(t - \tau_1) - x_0). \quad (13)$$

4. Дополнительные приемы реконструкции в ситуации «черного ящика»

Перейдем к обсуждению ситуации, когда о структуре уравнений заранее ничего не известно. Кроме гадания, остается надеяться на универсальные технологии, типа представленной в п. 3.1, и поиск возможностей хоть как-то сузить множество вариантов возможной структуры модели, опираясь на анализ экспериментальных рядов. Рассмотрим несколько примеров действий такого рода.

4.1. Оптимизация выбора динамических переменных [23]

Координаты векторов x могут быть получены, например, методом последовательных производных, временных задержек и т. д. Ряд «левых частей» модельных уравнений $\{y(t_i)\}$ обычно получают из ряда переменных $\{x(t_i)\}$: для ОДУ — численным дифференцированием ряда $\{x(t_i)\}$, а для отображений $x(t_{i+1}) = F(x(t_i))$ — сдвигом ряда $\{x(t_i)\}$ по времени. Затем задают вид функций F и находят значения их коэффициентов. Неудачный выбор динамических переменных может затруднить аппроксимацию зависимости $y(x)$ гладкой функцией или сделать ее вообще невозможной, если связь y с x окажется неоднозначной. Попыткой избежать от этой неприятности является следующая процедура выбора более перспективного для глобального моделирования вида переменных (рис. 5). Область V , внутри которой содержится множество векторов $\{x(t_i)\}$, разбивается на одинаковые «гиперкубические» ячейки стороной δ . Из них выбираются все ячейки, содержащие больше одного вектора каждой: s_1, s_2, \dots, s_M . Разность между максимальным и минимальным значениями y в пределах ячейки s_k назовем *локальным разбросом*: ϵ_k . Величина максимального локального разброса $\epsilon_{\max} = \max_{1 \leq k \leq M} \epsilon_k$ и

график $\epsilon_{\max}(\delta)$ используются в качестве *основных* характеристик исследуемой зависимости $y(x)$. Пригодность рассматриваемых величин x и y для глобального моделирования оценивается из следующих соображений. Для построения глобальной модели переменные нужно выбирать так, чтобы график $\epsilon_{\max}(\delta)$ стремился к началу координат плавно, без изломов, причем с наибольшим наклоном (рис. 5, б, нижняя кривая).

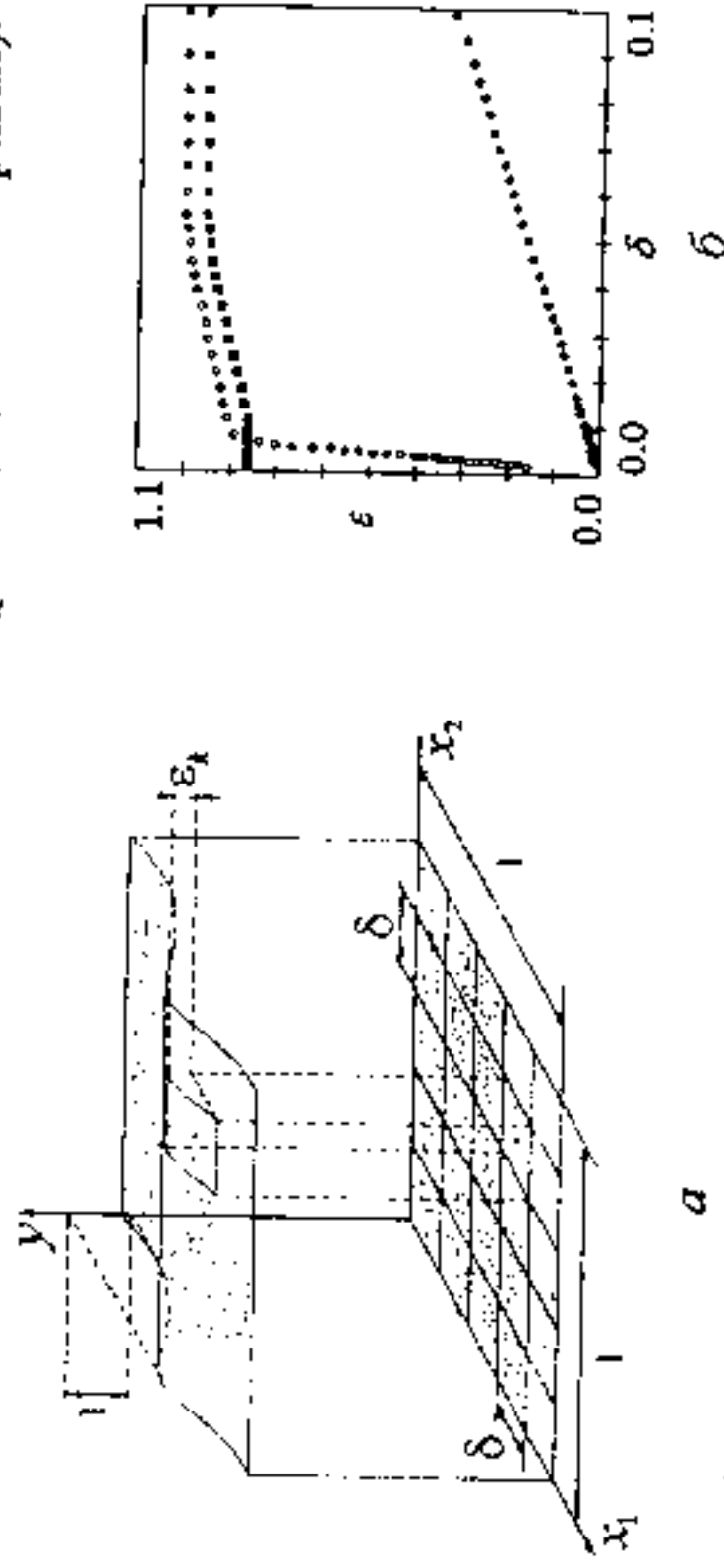


Рис. 5. Иллюстрация методики проверки зависимости $y(x)$ на однозначность и непрерывность тестирования в случае $D = 2$ (а) и графики $\epsilon_{\max}(\delta)$ для различных вариантов выбора переменных (б).

4.2. Оптимизация структуры модельных уравнений (выделение лишних слагаемых) [24]

Упомянутые в п. 3.1 недостатки стандартных структур модели обычно возникают в связи с очень большим числом членов в функциональных рядах, часть которых лишние. Их появление связано с неадекватностью рядов наблюдаемых, например, из-за шумов. Удаление лишних коэффициентов улучшает качество модели, оцениваемое критерием, диктуемым целью моделирования. Но как их выявить, скажем, из десятков членов аппроксимирующего степенного полинома? Одним из эффективных принципов идентификации лишних слагаемых является наложение за их поведением при реконструкции модели по различным участкам временного ряда — по точкам, лежащим в отличающихся областях фазового пространства. Наиболее естественно это делается с использованием временных рядов переходных процессов. Коэффициенты адекватной глобальной модели стационарной системы не должны зависеть от того, каких участков ее временного ряда ведется реконструкция. Коэффициенты же, появившиеся из-за искажений на отдельных тренировочных участках ряда, могут претерпевать в зависимости от выбора заметные изменения (рис. 6).

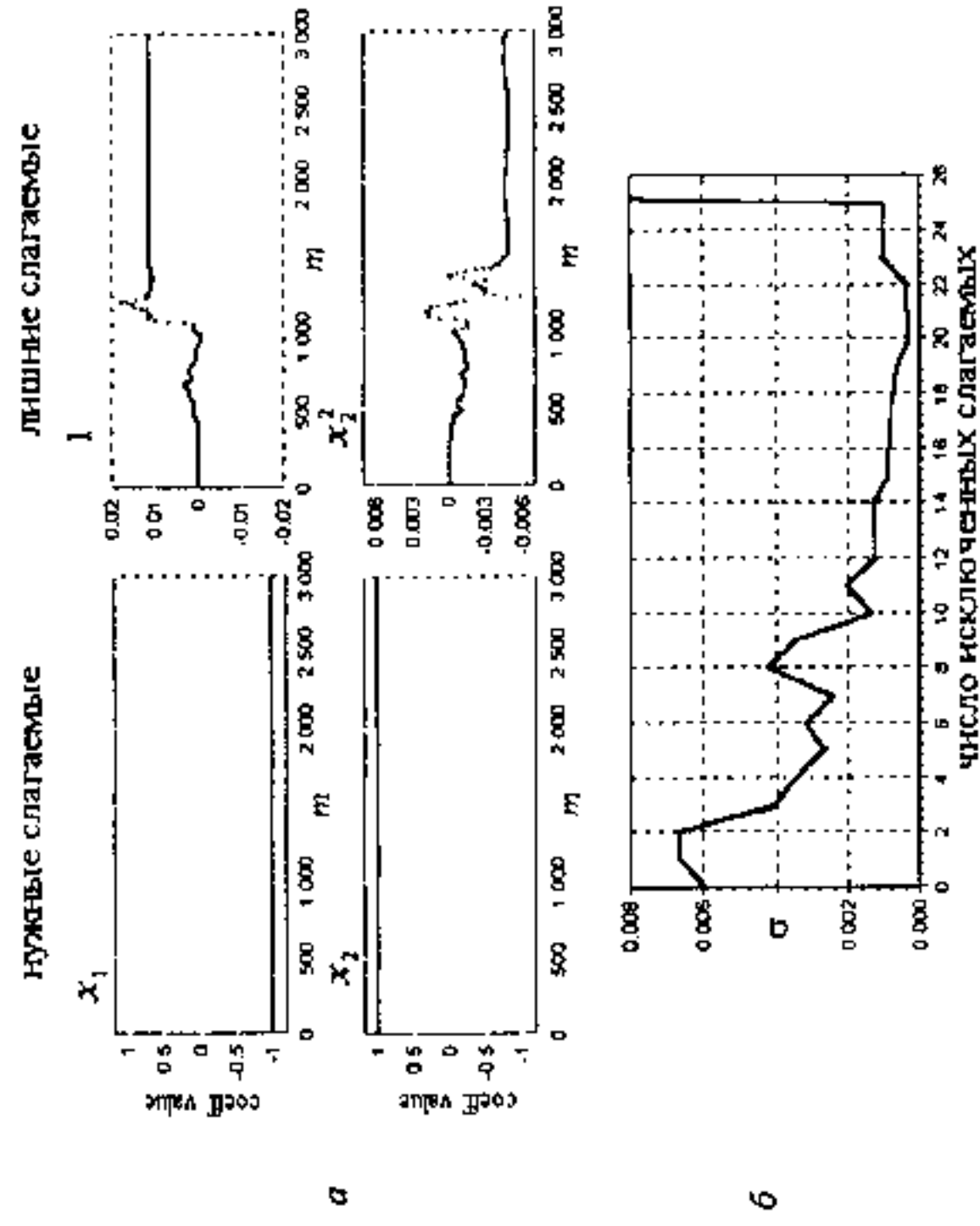


Рис. 6. Результаты реконструкции уравнения осциллятора Ван-дер-Поля — Года $(d^2x/dt^2 = (1-x^2)dx/dt - 1 + e^{-x})$ по скалярному ряду: а — зависимость коэффициентов (при указанных рядом слагаемых полинома) модели от положения окна реконструкции; б — зависимость ошибки аппроксимации δ от числа исключенных лишних слагаемых.

Можно предложить процедуру улучшения структуры модели, основанную на последовательном удалении слагаемых, коэффициенты в которых наиболее нестабильны при изменении m . О степени стабильности (надежности) какого-либо коэффициента a можно судить по величине отношения его среднего значения к его стандартному отклонению, где усреднение проводится по ансамблю значений, полученных при разных m .

Заключение

Математическое моделирование по временным рядам — активно развивающаяся область математической статистики и нелинейной динамики. Построение и верификация эмпирических моделей имеют фундаментальное значение для лучшего понимания процессов самой различной природы. Их практические приложения очень разнообразны: от прогнозов будущего до технической и медицинской диагностики, но процедуры получения эффективных моделей не формализуются. Математическое моделирование, по-видимому, всегда останется в значительной степени искусством, но могут быть выделены некоторые общие принципы и частные рецепты (технологические приемы). Существенная часть из них описана в данной лекции. Мы попытались систематизировать их, опираясь на схему рис. 1, разные элементы которой были проиллюстрированы на примерах рассмотренных нами задач. Представлены в основном оригинальные методики, относящиеся к различным постановкам задач (от «прозрачного» до «черного ящика») и целям моделирования. Все они апробированы на численных примерах реконструкции по зашумленным решениям эталонных уравнений. Многие применялись нами для исследования реальных систем (нелинейных электрических цепей, функциональных систем живых организмов), а также для обработки записей биопотенциалов. Естественно, что изложенное является лишь «экскурсом в...», а не исчерпывающим изложением, намеренное, впрочем, вечного вопроса о возможности математического моделирования объектов и явлений природы.

Исследования проводились при финансовой поддержке грантов РФФИ (проект № 03-02-17593, CRDF (REC-006), Минобразования РФ, Минпромнауки РФ, Президента РФ (МК-1067.2004.2), Фонда содействия отечественной науке, INTAS (No. 03-55-920).

Литература

1. *Львов Л.* Идентификация систем. Теория для пользователя. М.: Наука, 1991. 432 с.
2. *Демиденко Е. З.* Линейная и нелинейная регрессия. М.: Финансы и статистика, 1981. 302 с.
3. *Horbelt W., Tünner J., Büttner M. J., Meucci R., Ciofini M.* Identifying physical properties of a CO₂ laser by dynamical modeling of measured time series // *Phys. Rev. E.* 2001. V. 64. 016222.

4. *Фейнман А. М., Мольков Я. И., Мухин Д. Н., Лоскутов Е. М.* Прогноз качественного поведения динамической системы по хаотическому временному ряду // *Изв. вузов. Радиофизика.* 2001. Т. 44, № 5—6. С. 376—399.
5. *Бокс Дж., Дженкинс Т.* Анализ временных рядов. Прогноз и управление. Ч. 1. М.: Мир, 1974. 242 с.
6. *Crutchfield J. P., McNamara B. S.* Equations of motion from a data series // *Complex Systems.* 1987. V. 1. P. 417—452.
7. *Cremers J., Hubler A.* Construction of differential equations from experimental data // *Z. Naturforschung A.* 1987. V. 42. P. 797—802.
8. *Casdagli M.* Nonlinear prediction of chaotic time series // *Physica D.* 1989. V. 35. P. 335—356.
9. *Smith L. A.* Identification and prediction of low-dimensional dynamics // *Physica D.* 1992. V. 58. P. 50—76.
10. *Kantz H., Schreiber T.* Nonlinear time series analysis / Cambridge: Cambridge University Press, 1997. Chapter 12. P. 202—222.
11. *Малынецкий Г. Г., Поляков А. Б.* Современные проблемы нелинейной динамики. М.: Эдиториал УРСС, 2000. 336 с. (гл. 13—14, с. 239—311).
12. *Chaos and Its Reconstructions* / Eds. G. Gouesbet, S. Meunier-Guttin-Cluzel and O. Menard. N. Y.: Nova Science Publishers, 2003. 320 p.
13. *Rapp P. E., Schmah T. J., Mees A. J.* Models of knowing and the investigation of dynamical systems // *Physica D.* 1999. V. 132. P. 133—149.
14. *Павлов А. Н., Яков Н. Б., Анищенко В. С.* Реконструкция динамических систем // *Радиотехника и электроника.* 1999. Т. 44, вып. 9. С. 1075—1092.
15. *Аносов О. Л., Бутковский О. Я., Крацов Ю. А.* Восстановление динамических систем по хаотическим временным рядам (краткий обзор) // *Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика.* 2000. Т. 8, № 1. С. 29—51.
16. *Bezruchko B. P., Sefeznev Ye. P., Polomarenko V. I., Prokhorov M. D., Smirnov D. A., Dikanov T. V., Sysoev I. V., Karavaev A. S.* Special approaches to global reconstruction of equations from time series // *Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика.* 2002. Т. 10, № 3. С. 137—158.
17. *Pisarenko V.F., Sornette D.* On statistical methods of parameter estimation for deterministically chaotic time series // *Phys. Rev. E.* 2004. V. 69. 036122.
18. *Bremer C. L., Kaplan D. T.* Markov chain Monte Carlo estimation of nonlinear dynamics from time series // *Physica D.* 2001. V. 160. P. 116—126.
19. *Bock H. G.* Numerical treatment of inverse problems in chemical reaction kinetics // *Modelling of Chemical Reaction Systems* / Eds. K. H. Ebert, P. Deuffhard, W. Jaeger. N. Y.: Springer, 1981. V. 18. P. 102—125.
20. *Baake E., Baake M., Bock H. J., Briggs K. M.* Fitting ordinary differential equations to chaotic data // *Phys. Rev. A.* 1992. V. 45. P. 5524—5529.
21. *Bezruchko B. P., Smirnov D. A.* Constructing nonautonomous differential equations from a time series // *Phys. Rev. E.* 2001. V. 63. 016207.
22. *Bezruchko B. P., Karavaev A. S., Polomarenko V. I., Prokhorov M. D.* Reconstruction of time-delay systems from chaotic time series // *Phys. Rev. E.* 2001. V. 64. 056216.
23. *Smirnov D. A., Bezruchko B. P., Sefeznev Ye. P.* Choice of dynamical variables for global reconstruction of model equations from time series // *Phys. Rev. E.* 2002. V. 65. 026205.
24. *Bezruchko B. P., Dikanov T. V., Smirnov D. A.* Role of transient processes for reconstruction of model equations from time series // *Phys. Rev. E.* 2001. V. 64. 036210.