

РЕКОНСТРУКЦИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ: ПРИЛОЖЕНИЯ В БИОФИЗИКЕ, НЕЙРОФИЗИОЛОГИИ, КЛИМАТОЛОГИИ

Д. А. Смирнов, Б. П. Безручко

В работе представлено обсуждение некоторых общих вопросов реконструкции динамических систем, включая систематизацию постановок задач по объему априорной информации об объекте. Описаны методы построения и возможности использования эмпирических моделей в условиях детальной, частичной и отсутствующей априорной информации. Представлены примеры моделирования реальных сложных процессов из области биофизики, нейрофизиологии, климатологии.

Благодаря современной измерительной технике в различных областях исследований накоплены большие массивы данных наблюдений и экспериментов в цифровой форме. Типичными стали ситуации, где основным источником информации о поведении исследуемого сложного объекта являются значения величины η (наблюдаемой), сделанные в последовательные моменты времени. Такой набор данных называют *временным рядом* и обозначают $\{\eta_1, \dots, \eta_N\}$, где $\eta_i = \eta(t_i)$, $t_i = i\Delta t$, Δt – интервал выборки, N – длина ряда. *Анализ временных рядов* представляет собой широкое направление исследований, уходящее корнями далеко в прошлое [1], но активно развивающееся и в настоящее время во многом за счет использования идей и методов теории колебаний и нелинейной динамики [2].

Центральное место в области анализа временных рядов занимает проблема построения математической модели по наблюдаемым данным, которая известна как «реконструкция динамических систем» в нелинейной динамике [3-5] и «идентификация систем» в статистике [1,6]. Полученная эмпирическая модель может использоваться для решения целого ряда задач, включая прогноз, управление, реконструкцию нелинейных характеристик, диагностику взаимодействия систем. Развита многочисленная методика построения моделей, в том числе нелинейных дифференциальных и разностных уравнений. Однако примеров успешного применения этих методов для моделирования реальных сложных процессов пока немного.

Цель данной работы состоит в том, чтобы проиллюстрировать полезные практические приложения методов эмпирического моделирования на примерах исследования реальных объектов различной природы.

1. Общие вопросы реконструкции динамических систем

Современные задачи реконструкции динамических систем имеют корни в теории аппроксимации и регрессионном анализе. Долгое время наблюдаемые процессы моделировались с помощью явных функций времени $\eta = f(t)$, аппроксимирующих множество экспериментальных точек на

1

плоскости (t, η) . В начале XX века серьезный шаг в развитии методов эмпирического моделирования был сделан в математической статистике, когда было предложено использовать линейные стохастические модели авторегрессии – скользящего среднего. Этот подход к моделированию был основным в течение полувека и нашел многочисленные приложения, особенно для автоматического управления [1,6]. Формирование концепции динамического хаоса и развитие вычислительной техники привели к тому, что в последние годы эмпирическое моделирование проводится уже на основе нелинейных разностных и дифференциальных уравнений, в том числе многомерных. Такие эмпирические модели востребованы в различных областях науки и практики [2,4,5]: в физике, метеорологии, экономике, медицине, физиологии и др.

Несмотря на безграничное число ситуаций, объектов и целей, вносящих в процесс свое специфическое, можно выделить следующие основные этапы процедуры моделирования [5].

1) Работа начинается с рассмотрения имеющейся информации об объекте (экспериментальных данных о подобных объектах, теорий, разработанных для описания исследуемого класса объектов, и т.д.), получения и предварительного анализа временных рядов.

2) Формируется *структура модели*. Во-первых, выбирается тип уравнений. Здесь речь идет о моделях в виде отображений $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_n, \mathbf{c})$ или дифференциальных уравнений $d\mathbf{x}/dt = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{c})$, где \mathbf{x} – вектор состояния, \mathbf{c} – вектор параметров. Во-вторых, задается вид функции \mathbf{f} . В-третьих, устанавливается связь динамических переменных \mathbf{x} с наблюдаемой η . В общем случае эту связь задают в виде $\eta = h(\mathbf{x}) + \zeta$, где h называют измерительной функцией, а случайную добавку ζ – измерительным шумом.

3) Определяются значения параметров \mathbf{c} . Для этого, как правило, проводится поиск экстремального значения некоторой целевой функции, например, минимизируется сумма квадратов отклонений наблюдаемых данных от решения модельных уравнений.

4) Проводится проверка адекватности модели в отношении интересующих исследователя свойств объекта или ее пригодности для решения поставленной практической задачи. Если модель удовлетворительна, то процедура заканчивается использованием полученной модели, иначе модель возвращается на доработку на любой из предыдущих этапов.

Следует отметить, что задачи реконструкции принадлежат к классу обратных задач и часто являются некорректно поставленными [7]. Некорректность проявляется в том, что множество (достаточно сложных) моделей с различной структурой могут одинаково хорошо воспроизвести наблюдаемый конечный набор данных. Эта некорректность чаще всего снимается за счет дополнительных предположений или априорной информации о структуре модели, что позволяет сузить класс моделей, в котором

ищется решение задачи. С практической точки зрения удобно упорядочить различные постановки задачи моделирования по степени осведомленности исследователя о подходящей структуре модели.

1) Структура модельных уравнений полностью записана из физических соображений, неизвестны только значения параметров.

2) Структура уравнений в значительной степени известна из физических соображений. Неизвестны только некоторые компоненты функции f .

3) Структура модели полностью неизвестна – «черный ящик».

Чем больше известно о том, как должна выглядеть модель, тем вероятнее успех моделирования. Ниже последовательно представлены примеры моделирования реальных процессов в трех упомянутых постановках задачи.

2. Оценка параметров и скрытых переменных

Начнем с наиболее простой постановки, когда структура уравнений полностью известна. Пусть временной ряд величины $\eta = h(\mathbf{x}) + \zeta$ генерируется системой ОДУ $dx/dt = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{c})$ при значении $\mathbf{c} = \mathbf{c}_0$, соответствующем хаотическому режиму. Нужно получить оценку $\hat{\mathbf{c}}$ вектора параметров \mathbf{c}_0 . Помимо методической ценности эта постановка важна на практике. Действительно, если все переменные и параметры модели имеют физический смысл, а прямого пути их измерения нет, то процедура реконструкции выступает как замена измерительному прибору. В этой постановке возникают существенные трудности, когда по ряду η не удается сформировать ряды некоторых динамических переменных x_k (скрытые переменные [8]). Тем не менее, существуют методы оценки параметров, позволяющие в ряде случаев добиться успеха на практике.

Метод подгонки начального условия [8] состоит в минимизации отклонений реализации модели от наблюдаемого временного ряда. А именно, при фиксированных пробных значениях \mathbf{c} и начальном состоянии $\mathbf{x}(t_1)$ численным интегрированием получают временную реализацию модели $\eta(t) = h(\mathbf{x}(t))$ и рассчитывают сумму квадратов отклонений S этой реализации от наблюдаемого ряда. Подбирают такие $\mathbf{x}(t_1)$ и \mathbf{c} , чтобы величина S была минимальной. Метод не эффективен для длинных хаотических рядов, т.к. не удается найти глобальный минимум целевой функции.

Метод множественной стрельбы [8] позволяет отчасти обойти трудности. Здесь переходят от задачи Коши (получения траектории модели на всем интервале наблюдения) к решению набора краевых задач. А именно, исходный ряд $\{\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N\}$ разбивают на L не перекрывающихся сегментов и рассматривают начальные состояния модели $\mathbf{x}^{(i)}$ на каждом из них как оцениваемые величины. При этом накладывают условия итогового

3

«сшивания» сегментов, т.е. решают задачу условной минимизации. Стартовым догадкам для искомым величин $\mathbf{c}, \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(L)}$ соответствует траектория модели, состоящая из L не стыкующихся друг с другом кусков. Однако «нестыковки» уменьшаются, если алгоритм минимизации сходится к глобальному минимуму. Это временное допущение разрывности траектории обеспечивает большую гибкость метода.

2.1. Пример из клеточной биологии

Успешная реализация описанных методов обещает не только получение оценок параметров, но и восстановление временных рядов скрытых переменных, а также дает возможность проверить адекватность заложенных в модель представлений. Если есть несколько альтернативных математических конструкций, то результаты моделирования по временным рядам могут выявить наиболее адекватную, т.е. уточнить содержательные представления об исследуемом объекте.

В работе [9] представлен показательный пример успешного моделирования и содержательного вывода о механизме биохимического сигнального процесса в клетках. Процесс представляет собой одну из разновидностей внутриклеточных сигнальных путей, которые дают клетке возможность производить нужные ей вещества в ответ на изменение окружающей обстановки. Это так называемый сигнальный путь JAK-STAT, который преобразует внешний химический сигнал в активацию транскрипции соответствующего гена внутри ядра клетки, см. рис.1. Одна из самых простых моделей этого биохимического процесса имеет вид:

$$\begin{aligned} dx_1(t)/dt &= -k_1 x_1(t)E(t) + 2k_4 x_3(t - \tau), \\ dx_2(t)/dt &= -k_2 x_2^2(t) + k_1 x_1(t)E(t), \\ dx_3(t)/dt &= -k_3 x_3(t) + k_2 x_2^2(t)/2, \\ dx_4(t)/dt &= -k_4 x_3(t - \tau) + k_3 x_3(t), \end{aligned} \quad (1)$$

где k_i – параметры скоростей реакций, $E(t)$ (Еро на рис.1) – концентрация эритропоэтина в окружающей среде, в ответ на изменение которой активируются соответствующие рецепторы в мембране клетки. Рецепторы связываются с тирозинкиназами типа JAK-2, которые имеются в цитоплазме. Последние вступают в реакцию с молекулами вещества STAT5 (его концентрация – x_1). Последние фосфорилируются и получают мономерные фосфорилированные молекулы STAT5 (x_2). Мономерные молекулы димеризуются (x_3). Димеризованные молекулы проникают в ядро (x_4) и активируют транскрипцию целевого гена, в результате чего производится некоторый белок. После этого димеризованные молекулы распа-

даются на мономерные. Последние согласно одной гипотезе деградируют в ядре (уравнения (1) с $k_4 = 0$), а согласно другой – возвращаются из ядра в цитоплазму клетки с некоторой задержкой τ ($k_4 \neq 0$).

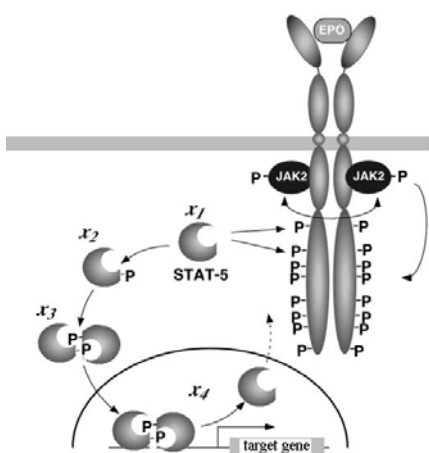


Рис. 1. Схема биохимического сигнального процесса в клетке [9].

Из-за трудностей эксперимента авторы измеряли лишь суммарную массу STAT5 (η_1) и фосфорилированного STAT5 (η_2) в цитоплазме:

$$\begin{aligned} \eta_1 &= k_5(x_2 + 2x_3), \\ \eta_2 &= k_6(x_1 + x_2 + 2x_3), \end{aligned} \quad (2)$$

где k_5, k_6 – неизвестные коэффициенты пропорциональности. Кроме этих двух наблюдаемых измерялась величина $E(t)$ (рис.2,а). Итак, все переменные модели (1) – скрытые, есть лишь две наблюдаемых, которые связаны с четырьмя переменными известным образом (2).

При оценке параметров моделей по временным рядам [9] была показана неадекватность первой гипотезы и хорошее соответствие с экспериментом – второй. Один из экспериментов представлен на рис.2. Модель с $k_4 = 0$ оказалась не способной воспроизвести сигнал (рис.2,б). Модель, допускающая возврат STAT5 в цитоплазму, адекватна (рис.2,в), а оценка времени запаздывания $\tau \approx 6$ минут согласуется по порядку величины с результатами других авторов для схожих объектов. Таким образом, авторы [9] смогли сделать нетривиальный вывод о том, что возврат молекул STAT5 в цитоплазму играет существенную роль в изучаемом процессе. Выявлены и некоторые детали процесса, которые нельзя наблюдать непосредственно, например, пребывание молекул STAT5 в ядре в среднем около 6 минут.

5

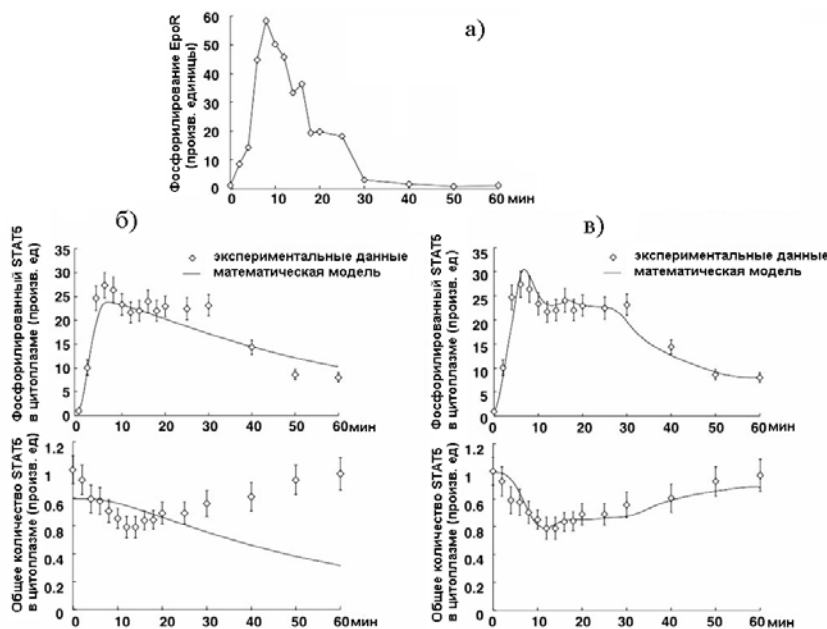


Рис. 2. Экспериментальные и модельные временные ряды для сигнального процесса в клетке [9]: а) изменение концентрации эритропоэтина; б) результаты построения модели в виде (1) с $k_4 = 0$; в) в виде (1) со свободным параметром k_4 .

3. Восстановление нелинейных характеристик

Если в модельные уравнения $dx/dt = f(x, c)$ входят неизвестные функции, то задача усложняется. Эти функции могут представлять собой физические характеристики объекта, прямое измерение которых невозможно. Однако при построении модели они восстанавливаются как побочный продукт процедуры, что повышает ценность результатов моделирования. Рассмотрим задачу на примере автогенератора с одной степенью свободы:

$$\begin{aligned} dx_1/dt &= x_2, \\ dx_2/dt &= -F_1(x_1, x_2)x_2 + F_2(x_1), \end{aligned} \quad (3)$$

где x_1 – переменная состояния, функция F_1 характеризует диссипацию (область отрицательных значений соответствует вводу энергии в систему), F_2 – «возвращающую силу». Пусть вид F_1 и F_2 неизвестен, а наблюдается лишь временной ряд переменной x_1 . Восстановить функции F_1 и F_2 можно при построении модели с учетом частично известной структуры (3). А именно, модель можно строить в виде

$$\begin{aligned} dx_1/dt &= x_2, \\ dx_2/dt &= f(x_1, x_2, \mathbf{c}), \end{aligned} \quad (4)$$

где f – универсальная функция, например, алгебраический многочлен. Его коэффициенты можно оценить с помощью метода наименьших квадратов: $S(\mathbf{c}) = \sum_i (d\hat{x}_2(t_i)/dt - f(\hat{x}_1(t_i), \hat{x}_2(t_i), \mathbf{c}))^2 \rightarrow \min$, где значения $\hat{x}_1(t_i)$, $\hat{x}_2(t_i)$, $d\hat{x}_2(t_i)/dt$ получают численным дифференцированием. Для адекватной модели разложение $f(x_1, x_2, \hat{\mathbf{c}}) = -f_1(x_1, x_2, \hat{\mathbf{c}}_1)x_2 + f_2(x_1, \hat{\mathbf{c}}_2)$ дает аппроксимации характеристик F_1 и F_2 в виде $f_1(x_1, x_2, \hat{\mathbf{c}}_1)$ и $f_2(x_1, \hat{\mathbf{c}}_2)$.

Существенная трудность состоит в том, что в случае достаточно высокого порядка нелинейности многочлен f может содержать много лишних слагаемых, которых нет в исходной системе (3). Вклад таких слагаемых может привести к тому, что модель окажется неадекватной, а характеристики будут восстановлены с большими ошибками. В работе [10] предложен метод оптимизации функции f , основанный на исключении лишних слагаемых, которые идентифицируются по вариациям оценок коэффициентов при реконструкции по различным участкам временного ряда.

3.1. Биофизический пример

Слуховой аппарат, по крайней мере, некоторых насекомых представляет собой не пассивный приемник звуковых сигналов, а систему, способную активно усиливать принимаемые сигналы и даже совершать автоколебания [11]. Этот факт интересен и потому, что подобное усиление существует в улитке уха позвоночных [12]. Однако изучение таких процессов у позвоночных затруднено большой сложностью и ограниченной доступностью слуховой системы. У некоторых насекомых колеблющиеся части представляют собой длинные выросты, доступные прямому наблюдению. Ниже представлены результаты моделирования автоколебаний в органе слуха *Drosophila melanogaster*, полученные нами в работе [13].

От аристы – удаленной части антенны, которая образует приемник звука, – слуховой сигнал передается с помощью непосредственно с ней связанных механорецепторных нейронов [11]. Эти нейроны активно модулируют механику приемника и иногда вызывают его автоколебания. Автоколебания возникают после инъекции диметилсульфоксида (ДМСО) примерно через 10 минут на частоте около 130 Гц (рис.3,а). С течением времени частота уменьшается. Уже через несколько минут (при частоте около 100 Гц) автоколебания приобретают полностью развитую релаксационную форму (рис.3,б). В течение достаточно длительного периода эта форма колебаний сохраняется. Далее автоколебания резко переходят в длительное состояние с уменьшенной амплитудой (рис.3,в), после чего

7

вновь достаточно резко – в финальную стадию синусоидальной волны (рис.3,г). Автоколебания могут продолжаться до 1-1.5 часов, пока не прекратятся со смертью насекомого. Данные представлены группой из университетов Цюриха и Кельна (М.С. Goepfert, R. Stoop, A. Kern).

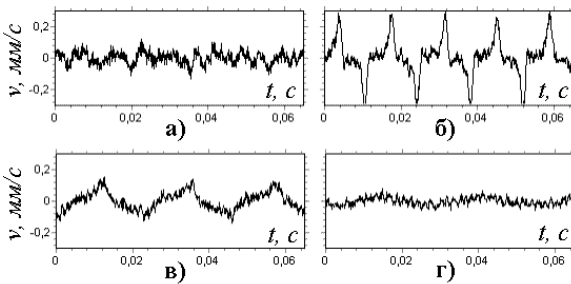


Рис. 3. Автоколебания аристы дрозофилы: а) 10 минут после введения ДМСО; б) 20 минут; в) 30 минут; г) 34 минуты [13].

Модели строились нами в виде (4) при использовании различных величин в качестве x_1 – скорости колебаний аристы v , ее координаты, ускорения и др. Адекватные модели получены только при выборе в качестве x_1 координаты аристы. Траектория на плоскости «координата – скорость» в режиме развитых автоколебаний представлена на рис.4 серыми точками. Оптимальна модель с $f(x_1, x_2, \hat{\mathbf{c}}) = -f_1(x_1, \hat{\mathbf{c}}_1)x_2 + f_2(x_1, \hat{\mathbf{c}}_2)$, где f_1 и f_2 – многочлены порядков 2 и 5, соответственно. Сравнение экспериментальной и модельной траекторий подтверждает адекватность модели (рис.4). Графики f_1 и f_2 представлены на рис.5. В окрестности нуля функция f_1 имеет отрицательные значения (рис.5,а), что соответствует режиму автоколебаний. Заметна асимметрия графиков f_1 и f_2 . Асимметрия f_2 оказывается особенно действенной при больших смещениях и может быть обусловлена структурно-механическими свойствами антенны.

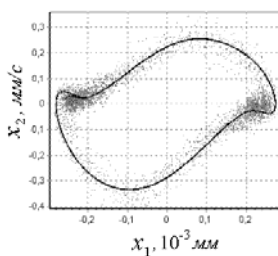


Рис. 4. Развитые автоколебания аристы: экспериментальная траектория на плоскости координата – скорость (серые точки) и траектория оптимальной модели (4) (сплошная линия).

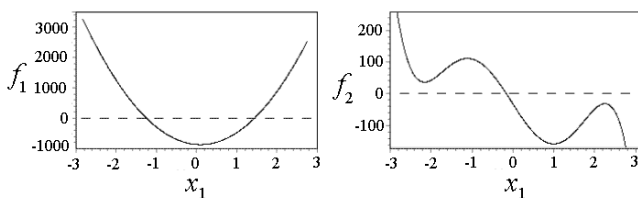


Рис. 5. Восстановленные характеристики для режима полностью развитых автоколебаний (единицы измерения $x_1 - 10^{-4}$ мм): а) характеристика диссипации (ед. измерения $1/c$), б) возвращающая сила (ед. измерения mm/c^2).

При моделировании по другим фрагментам данных оказывается, что модель в виде (4) тоже адекватна, но со временем меняются коэффициенты многочленов и вид их графиков. Это интересно в отношении f_2 , т.к. показывает, что эта функция включает в себя не только механические свойства антенны. Через 30 минут после введения ДМСО (рис.3,в,г) нелинейные составляющие трения и возвращающей силы исчезают. Область отрицательного трения также уменьшается (для сегмента на рис.3,в) и исчезает (для сегмента на рис.3,г) в соответствии с наблюдаемым уменьшением амплитуды колебаний. Таким образом, при моделировании по временным рядам показано, что форма автоколебаний аристы *Drosophila melanogaster* удовлетворительно описывается уравнением автогенератора (4). Активное усиление обусловлено комбинацией отрицательного трения, которое квадратично по смещению, и нелинейной возвращающей силы.

4. Диагностика взаимодействия систем

Когда структура уравнений полностью неизвестна, задача эмпирического моделирования наиболее сложна. В этой постановке в последние годы все большее внимание в самых различных областях, включая нейрофизиологию и климатологию, привлекает такое полезное приложение как диагностика взаимодействия исследуемых систем. Задача ставится так: есть два или более наблюдаемых процесса, необходимо выявить и охарактеризовать их воздействия друг на друга (направленные связи).

4.1. Метод диагностики взаимодействия колебательных систем

В случае узкополосных колебательных процессов x_1 и x_2 плодотворной идеей оказывается моделирование фазовой динамики [14], поскольку для таких процессов можно корректно определить фазы ϕ_1 и ϕ_2 [15], например, с помощью построения аналитического сигнала. Фазы – это переменные, которые наиболее подвержены изменениям при воздействии на автоколебательную систему, поэтому и методы, основанные на их анализе, оказываются высоко чувствительными к слабой связи между источни-

9

ками сигналов. Для широкого класса колебательных процессов адекватно описание в виде системы стохастических уравнений:

$$\phi_{1,2}(t + \tau) - \phi_{1,2}(t) = f_{1,2}(\phi_{1,2}(t), \phi_{2,1}(t - \Delta_{1,2})) + \xi_{1,2}, \quad (5)$$

где $f_{1,2}$ – тригонометрические многочлены, τ – временной интервал, обычно принимаемый равным характерному периоду колебаний, $\Delta_{1,2}$ – времена запаздывания воздействий, $\xi_{1,2}$ – независимые источники белого шума. Коэффициенты многочленов оценивают по временным рядам методом наименьших квадратов. По полученным оценкам рассчитывают силы воздействия систем друг на друга: степень влияния c_1^2 системы 2 на систему 1 определяется крутизной зависимости f_1 от ϕ_2 , все аналогично для

$$c_2^2. \text{ Таким образом, имеем } c_{1,2}^2 = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} (\partial f_{1,2}(\phi_{1,2}, \phi_{2,1}) / \partial \phi_{2,1})^2 d\phi_1 d\phi_2.$$

Условием применимости метода при умеренных уровнях динамического шума является длина временного ряда порядка 1000 характерных периодов. Его применение на практике сталкивается с трудностями, когда исследуемые временные ряды нестационарны. Так, для электроэнцефалограмм интервал квазистационарного поведения составляет, как правило, не более 100 характерных периодов для любых выделяемых физиологических «ритмов». Поэтому необходимо делить ряды на относительно короткие сегменты и рассчитывать оценки связи отдельно для каждого сегмента. Применение описанного метода без модификаций приводит тогда к получению смещенных оценок [16]. С учетом этого нами введены новые оценки $\gamma_{1,2} = c_{1,2}^2 + r_{1,2}$ [16], где $r_{1,2}$ – поправки, зависящие от уровня шума, частот колебаний и длины временного ряда. Получены и формулы для 95%-ных доверительных интервалов, которые позволяют оценивать статистическую значимость выводов о наличии направленных связей.

4.2. Пример из нейрофизиологии

Многие заболевания нервной системы, включая эпилепсию и болезнь Паркинсона, связаны с патологической синхронизацией больших групп нейронов головного мозга. Признаком болезни Паркинсона является синхронизация нейронов в ядрах таламуса и базальных ганглий [17]. Однако функциональная роль этой синхронизации при генерации паркинсоновского тремора (непроизвольных регулярных колебаний конечностей с частотами от 4 до 7 Гц) остается предметом обсуждений. Гипотеза о том, что синхронизация нейронов вызывает тремор, еще не получила убедительного эмпирического подтверждения. Стандартная терапия при отсутствии эффекта от лекарств – это глубокая электрическая стимуляция мозга

(ГЭСМ) на высоких частотах (больше 100 Гц). Стандартная ГЭСМ была найдена эмпирически, механизм ее влияния до сих пор не ясен, и она имеет побочные эффекты. Подтверждение того, что тремор вызывается синхронной активностью нейронов в ядрах таламуса и базальных ганглий, могло бы, предположительно, повести к созданию более мягких способов терапии с меньшими побочными эффектами. В связи с этим актуальна задача определения характера связей между активностью различных структур мозга и колебаниями конечностей пациентов.

В работе [18] нами исследовались ансамбли интервалов спонтанного паркинсоновского тремора от трех пациентов. Колебания конечностей были представлены сигналами акселерометра, записанными с частотой выборки 200 Гц, а активность мозга – записями локальных потенциалов (ЛП) с четырех глубинных электродов, вживленных в таламус или базальные ганглии. Данные получены на факультете стереотаксической и функциональной нейрохирургии Университета г. Кельн и в Институте нейронауки и биофизики Исследовательского центра Юлих (Германия).

Сигналы акселерометра и ЛП с одного из электродов во время спонтанного тремора представлены на рис.6. В сигнале акселерометра видны колебания, которым соответствует четкий пик в спектре мощности на частоте 5 Гц. В спектре ЛП тоже виден пик на частоте тремора, хотя несколько более широкий. Фаза может быть корректно введена для обоих сигналов. С помощью моделирования фазовой динамики зафиксировано статистически значимое воздействие колебаний конечности на активность мозга с запаздыванием не более нескольких десятков миллисекунд. Обратное воздействие также присутствует и характеризуется временем запаздывания в интервале 200-400 мс (1-2 характерных периода колебаний). Результаты качественно воспроизводятся для трех пациентов (рис.7).

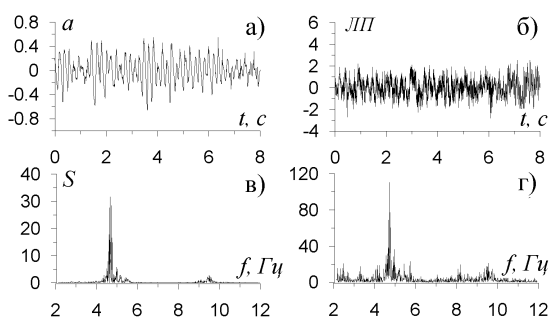


Рис. 6. Интервал спонтанного паркинсоновского тремора [18]: а),в) сигнал акселерометра и запись ЛП с одного из электродов в произвольных единицах измерения (показаны только первые 8 из 80 сек); б),г) спектры мощности.

11

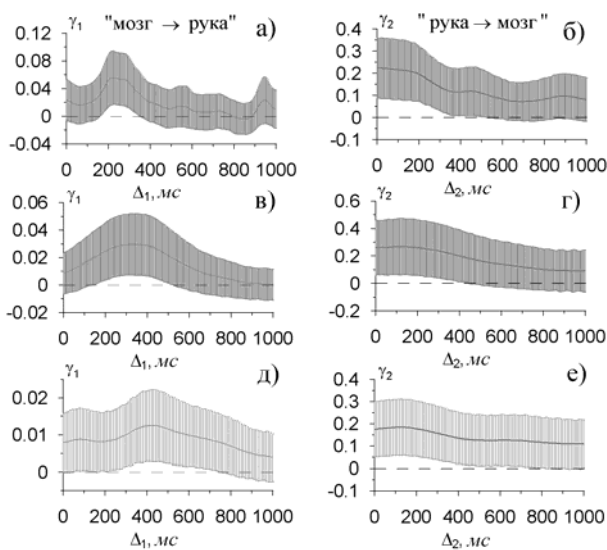


Рис. 7. Оценки воздействия подкорковых структур мозга на колебания руки (слева) и наоборот (справа) для трех пациентов (три ряда) в зависимости от пробного времени запаздывания [18]. Представлены усредненные по ансамблю из 10-15 интервалов сильного тремора оценки и их усредненные 95% доверительные интервалы (безразмерные величины).

Воздействие активности подкорковых структур мозга на тремор не выявлялось ранее по данным наблюдений. Запаздывание этого воздействия велико по сравнению со временем прохождения сигнала по нервным волокнам, что было интерпретировано [18] как признак опосредованного влияния активности таламуса и базальных ганглий на колебания конечностей (после обработки сигналов в коре головного мозга). Кроме того, это означает, что ядра таламуса и базальных ганглий являются звеньями «кольца обратной связи», определяющей колебания конечности, а не просто пассивными приемниками сигналов. Дальнейшим полезным применением метода может стать определение более эффективного расположения стимулирующих электродов.

4.3. Причинность по Грейнджеру и оценка динамического эффекта

Наиболее общей идеей для выявления направленных связей в ансамбле из M процессов является оценка причинности по Грейнджеру. Согласно ей определяют улучшение прогноза одного процесса при учете в модели данных для другого [19]. Так, для оценки воздействия x_j на x_k ($j \rightarrow k$) сначала строится авторегрессионная (АР) модель процесса $x_k(t)$ с учетом всех M процессов. В линейном варианте она имеет вид

$$x_k(t) = a_{k,k,0} + \sum_{l=1}^M \sum_{i=1}^{d_l} a_{k,l,i} x_i(t-i-\Delta_l) + \xi_k(t), \quad (6)$$

где d_l – количество предыдущих значений каждого процесса, Δ_l – пробное время запаздывания, ξ_k – нормальный белый шум. Коэффициенты $a_{k,l,i}$ определяются путем минимизации среднего квадрата ошибки прогноза $\hat{\sigma}_k^2$. Затем строится АР-модель без учета процесса $x_j(t)$:

$$x_k(t) = b_{k,k,0} + \sum_{l=1, l \neq j}^M \sum_{i=1}^{d_l} b_{k,l,i} x_i(t-i-\Delta_l) + \eta_k(t), \quad (7)$$

где $\eta_k(t)$ – нормальный белый шум, $\hat{\sigma}_{k \setminus j}^2$ – средний квадрат ошибки прогноза. Влияние $j \rightarrow k$ характеризуется как $PI_{j \rightarrow k} = \hat{\sigma}_{k \setminus j}^2 - \hat{\sigma}_k^2$, что представляет собой улучшение прогноза x_k при учете x_j . Если результат « $PI_{j \rightarrow k} > 0$ » статистически значим (уровень значимости p , т.е. вероятность случайной ошибки, оценивается с помощью F -теста), то делается вывод о наличии воздействия $j \rightarrow k$. Величины d_l желательно задать как можно меньшими, чтобы уменьшить число оцениваемых коэффициентов и увеличить вероятность выявления связей по коротким рядам. При этом d_l должны быть достаточно велики, чтобы обеспечить адекватность моделей. Ниже они подбирались как точки насыщения зависимостей $\hat{\sigma}_k^2(d_l)$.

Следует отметить, что величины $PI_{j \rightarrow k}$ лишь косвенно характеризуют “важность” влияния того или иного фактора. Например, для ответа на вопрос, чем вызван наблюдаемый в последнее столетие рост температуры Земли (п.4.4), в работе [20] использовались оценки долгосрочного эффекта воздействий [21]. Идея состоит в оценке влияния $j \rightarrow k$ по изменениям, которые согласно полной АР-модели (6) произошли бы в динамике x_k при определенной эволюции процесса, характеризуемого переменной x_j .

6.4. Пример применения в климатологии

Одна из ключевых глобальных проблем современности связана с климатическими изменениями, в частности, с определением относительной роли естественных и антропогенных факторов. В работе [20] количественно оценено влияние двух естественных (солнечной и вулканической активности) и одного антропогенного (содержания углекислого газа в атмосфере) факторов на глобальную приповерхностную температуру Земли

13

(ГПТ). При анализе использовались среднегодовые данные для ГПТ T , межгодовых вариаций потока солнечного излучения I , оптической толщины вулканического аэрозоля в атмосфере V и содержания углекислого газа в атмосфере n (рис.8).

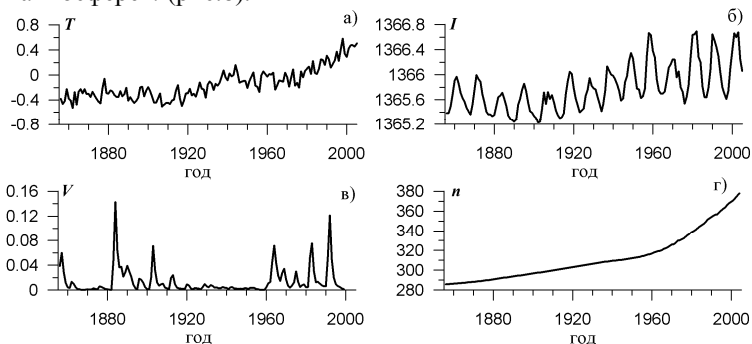


Рис. 8. Используемые данные: а) ГПТ (отклонение от среднего значения за период 1961–1990 гг., К), б) солнечная постоянная (плотность мощности излучения в диапазоне от ИК до УФ, Вт/м²), в) вулканическая активность (оптическая толщина вулканического аэрозоля, безразм.), г) содержание CO₂ в атмосфере (ед. измерения ppm – число частиц на миллион).

По использованным $M = 4$ временным рядам оценивалось воздействие различных переменных на ГПТ. Модели строились по данным за период 1856–1985 гг. Индивидуальная АР-модель вариаций ГПТ ($M = 1$) оптимальна при $d_T = 4$. Анализ воздействий проводился с помощью построения моделей (6) с $M > 1$ при $d_T = 4$. Параметры $d_{I \rightarrow T}, d_{n \rightarrow T}, d_{V \rightarrow T}$ и $\Delta_{I \rightarrow T}, \Delta_{n \rightarrow T}, \Delta_{V \rightarrow T}$ подбирались при $M = 2$. При учете солнечной активности оптимальна модель с $d_{I \rightarrow T} = 1$ и $\Delta_{I \rightarrow T} = 0$. Улучшение прогноза $PI_{I \rightarrow T} / \sigma_\xi^2 = 0.028$ значимо отлично от нуля на уровне $p < 0.035$. Влияние вулканической активности – того же порядка, что и солнечной. Оптимальна модель с $d_{V \rightarrow T} = 1$ и $\Delta_{V \rightarrow T} = -1$: $PI_{V \rightarrow T} / \sigma_\xi^2 = 0.029$ отлично от нуля на уровне $p < 0.03$. Влияние концентрации CO₂ на ГПТ оказывается значительно более существенным. Оптимальна модель с $d_{n \rightarrow T} = 1$ и $\Delta_{n \rightarrow T} = 0$: $PI_{n \rightarrow T} / \sigma_\xi^2 = 0.087$ отлично от нуля на уровне $p < 0.0002$.

При многокомпонентном анализе оптимальной оказалась модель

$$T_t = a_0 + a_1 T_{t-1} + a_4 T_{t-4} + b_I I_{t-1} + b_V V_t + b_n n_{t-1} + \eta_t, \quad (8)$$

где из коэффициентов b_I, b_V, b_n , характеризующих влияние различных факторов, значимо отличны от нуля на уровне $p < 0.05$ только b_V, b_n . Ма-

лость b_i свидетельствует о том, что влияние солнечной активности на ГПТ может учитываться через вариации $n(t)$.

Чтобы оценить воздействие различных факторов на тренд ГПТ в последние годы, сначала с помощью модели (8) генерировался ансамбль временных реализаций $T(t)$ на интервале 1856-2005 гг. при “реальных” условиях C_0 , т.е. когда “на вход” модели в качестве реализаций остальных процессов подаются наблюдаемые временные ряды (рис.9,а). По каждой реализации оценивались значения $\alpha_{1985-2005}$ – углового коэффициента прямой, аппроксимирующей ряд $T(t)$ на интервале 1985-2005 гг. Это характеристика тренда $T(t)$ в последние 20 лет. Модель дает среднее значение $\langle \alpha_{1985-2005} | C_0 \rangle = 0.015 K/год$, что близко к наблюдаемому значению $0.02 K/год$. Затем генерировался ансамбль реализаций модели при альтернативном условии C , состоящем в том, что величина $n(t)$ остается на том же уровне, что и в 1856 г. (рис.9,б). Для этого на вход модели (8) вместо наблюдаемого ряда $n(t)$ подавался “искусственный” ряд $n(t) = const$, а два другие ряда – настоящие. При этом оказывается $\langle \alpha_{1985-2005} | C \rangle = 0$.

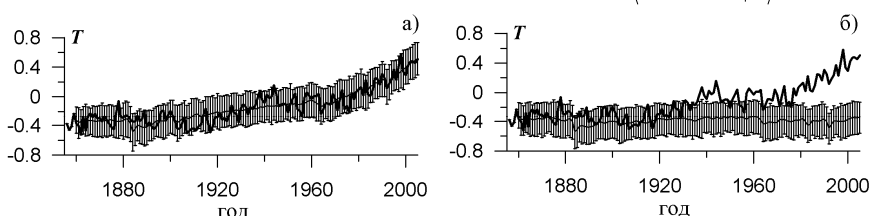


Рис. 9. Исходный ряд ГПТ (жирная линия) и 95%-ный интервал для ансамбля реализаций модели (12), построенной по данным за период 1856-1985 гг.: а) при реальных условиях C_0 , б) при условии $n_t = n_{1856}$ и прочих, как в C_0 .

Вариации двух других факторов не приводят к существенному изменению тренда $T(t)$ в реализациях модели. Таким образом, согласно построенным эмпирическим моделям и оценке долгосрочного эффекта рост ГПТ в последние двадцать лет, по меньшей мере, на 75% обусловлен ростом $n(t)$: при неизменном содержании CO_2 в атмосфере на уровне 1856 г. отмеченного роста ГПТ за последнее столетие не наблюдалось бы.

Заключение

Развиваемые в последние годы методы построения нелинейных моделей по временным рядам существенно опираются на учет априорной информации об объекте исследования и специфики задачи, для решения ко-

15

торой предполагается использовать построенную модель. Это повышает шансы на успех моделирования на практике и отличает современный этап развития данной дисциплины от прежних попыток разработки универсальных методов. В работе проиллюстрированы приложения новых методов реконструкции на примерах моделирования реальных сложных процессов из биофизики, нейрофизиологии, климатологии в условиях детальной, частичной, отсутствующей априорной информации об объекте. Эти приложения включают в себя проверку адекватности модельных предположений об объекте, оценку физически интерпретируемых параметров, скрытых переменных и нелинейных характеристик, выявление и количественную оценку взаимодействия между наблюдаемыми процессами.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, программ РАН и Министерства образования и науки РФ.

Литература

1. Бокс, Дж. Анализ временных рядов. Прогноз и управление / Дж. Бокс, Г. Дженкинс. – М.: Мир, 1974.
2. Kantz, H. Nonlinear time series analysis / H. Kantz, T. Schreiber. – Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
3. Павлов, А.Н. Реконструкция динамических систем / А.Н. Павлов, Н.Б. Янсон, В.С. Анищенко // Радиотехника и электроника. 1999. Т. 44, вып. 9. С. 1075–1092.
4. Chaos and Its Reconstructions / G. Gouesbet, S. Meunier-Guttin-Cluzel, O. Ménard (eds). – New York: Nova Science Publ., 2003.
5. Безручко, Б.П. Математическое моделирование и хаотические временные ряды / Б.П. Безручко, Д.А. Смирнов. – Саратов: ГосУНЦ "Колледж", 2005. – 320 с.
6. Льюнг, Л. Идентификация систем. Теория для пользователя. – М.: Наука, 1991.
7. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – М.: Наука, 1974.
8. Baake, E. Fitting ordinary differential equations to chaotic data / E. Baake, M. Baake, H.J. Bock, K.M. Briggs // Phys. Rev. A. 1992. V. 45. P. 5524–5529.
9. Swameye, I. Identification of nucleocytoplasmic cycling as a remote sensor in cellular signaling by databased modeling / I. Swameye, T.G. Muller, J. Timmer, O. Sandra, U. Klingmuller // Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2003. V. 100. P. 1028–1033.
10. Bezruchko, B. Role of transient processes for reconstruction of model equations from time series / B. Bezruchko, T. Dikanev, D. Smirnov // Phys. Rev. E. 2001. V. 64. 036210.
11. Goepfert, M.C. Motion generation by *Drosophila* mechanosensory neurons / M.C. Goepfert, D. Robert // Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2003. V. 100. P. 5514–5519.
12. Gold, T. Hearing II: The physical basis of the action of the cochlea // Proc. R. Soc. Lond. B. 1948. V. 135. P. 492–498.
13. Stoop, R. A generalization of the van-der-Pol oscillator underlies active signal amplification in *Drosophila* hearing / R. Stoop, A. Kern, M.C. Gopfert, D.A. Smirnov, T.V. Dikanev, B.P. Bezruchko., Eur. Biophys. J. 2006. V. 35. P. 511–516.

14. *Rosenblum, M.G.* Detecting direction of coupling in interacting oscillator / M.G. Rosenblum, A.S. Pikovsky // *Phys. Rev. E.* 2001. V. 64. 045202(R).
15. *Пиковский, А.С.* Синхронизация. Фундаментальное нелинейное явление / А.С. Пиковский, М.Г. Розенблум, Ю. Куртс. – М.: Техносфера, 2003.
16. *Smirnov, D.A.* Estimation of interaction strength and direction from short and noisy time series / D.A. Smirnov, B.P. Bezruchko // *Phys. Rev. E.* 2003. V. 68. 046209.
17. *Nini, A.* Neurons in the globus pallidus do not show correlated activity in the normal monkey, but phase-locked oscillations appear in the MPTP model of parkinsonism / A. Nini, A. Feingold, H. Slovín, H. Bergman // *J. Neurophysiol.* 1995. V. 74. P. 1800–1805.
18. *Smirnov, D.* The generation of Parkinsonian tremor as revealed by directional coupling analysis / D. Smirnov, U.B. Barníkol, T.T. Barníkol, B.P. Bezruchko, C. Hauptmann, C. Buehrle, M. Maarouf, V. Sturm, H.-J. Freund, P.A. Tass // *Europhys. Lett.* 2008. V. 83. 20003.
19. *Granger, C.W.J.* Investigating causal relations by econometric models and cross-spectral methods // *Econometrica.* 1969. V.37. P.424–438.
20. *Мохов, И.И.* Эмпирические оценки воздействия естественных и антропогенных факторов на глобальную приповерхностную температуру / И.И. Мохов, Д.А. Смирнов // *ДАН.* 2009. Т. 426, № 5. С. 1–6.
21. *Smirnov, D.A.* From Granger causality to long-term causality: Application to climatic data / D.A. Smirnov, I.I. Mokhov // *Phys. Rev. E.* 2009. V. 80. 016208.

RECONSTRUCTION OF DYNAMICAL SYSTEMS: APPLICATIONS TO BIOPHYSICS, NEUROPHYSIOLOGY, CLIMATOLOGY

D. A. Smirnov, B. P. Bezruchko

The works presents a discussion of some general questions in the field of reconstruction of dynamical systems, including a systematization of problem settings in respect of the amount of *a priori* information about an object. We describe methods of construction and possibilities of application of empirical models under the conditions of complete, partial, and lacking *a priori* information. As well, we present examples of modeling of complex real-world processes from the fields of biophysics, neurophysiology, and climatology.