

Rekeszrendszerek strukturális identifikálhatósági problémájának egy algebrai megközelítése

Győri István, Lehoczky András és Eller József

A matematikai rekeszmodelleket egyre gyakrabban és egyre szélesebb körben használják kutatási problémákban, - az élő szervezetben bizonyos anyagok eloszlásának vizsgálatában, kémiai, biokémiai kutatásokban - , illetve a klinikai diagnózis felállításánál és a klinikai farmakológiában.

A rekeszmodellek alkalmazása számos matematikai és számítástechnikai problémát vet fel, melyek közül az un. strukturális identifikálhatóság kérdéssel foglalkozunk. Ezt a fogalmat 1970-ben Bellman és Åström vezette be (1), és az eltelt tíz év alatt dolgozotok tömege /lásd pl.(2), (3) / foglalkozott ezzel a kérdéssel. Négy évvel ezelőtt a kollokviumon is elhangzott egy előadás(6), amelyben Vajda Sándor tárgyalta a strukturális identifikálhatóság néhány kérdését.

A rekeszmodellek szokásos ábrázolását az intravénás gyógyszerkinetikai modellen mutatjuk be / 1. ábra /.

A vérbe / X_1 rekesz / juttatott gyógyszer / I / egyik része eljut a vizsgált szervbe / X_2 rekesz /, másik része pedig távozik a szervezetből. A nyílak mentén áramlik az anyag az ugynevezett relatív transzport-együtthatók által meghatározott sebesség szerint.

A rendszer alkalmazása szempontjából alapvető probléma a transzport-együtthatók numerikus értékének meghatározása a mérési eredmények alapján. Ahhoz, hogy mérési hibákkal terhelt adatokból a kérdéses paramétereket becsülni tudjunk, alkalmasan kell megtervezni a mérés-elrendezést.

Ennek illusztrálására tekintsük a két osztott inputtal rendelkező kétrekeszes modellt / 2. ábra /, melynek egyenletei a következők:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -(a_{01} + a_{21})x_1 + a_{12}x_2 + b_{11}I_1 + b_{12}I_2 \\ \dot{x}_2 &= a_{21}x_1 - (a_{02} + a_{12})x_2 + (1 - b_{11})I_1 + (1 - b_{12})I_2 \\ y_1 &= c_{11}x_1 + c_{12}x_2 \\ y_2 &= c_{21}x_1 + c_{22}x_2 \end{aligned} \quad [1]$$

A 2. ábrán látható, két inputtal / I_1 és I_2 / és két outputtal / Y_1 és Y_2 / rendelkező rekeszrendszer ekvivalens egy lineáris szabályozási rendszerrel / 3. ábra /, melynek átviteli függvényei az alábbiak: [2]

$$H_{ij}(s) = \frac{(c_{i1}b_{1j} + c_{i2}(1 - b_{1j}))s + c_{i1}(b_{1j}a_{02} + a_{12}) + c_{i2}((1 - b_{1j})a_{01} + a_{21})}{s^2 + (a_{01} + a_{02} + a_{12} + a_{21})s + a_{01}a_{02} + a_{01}a_{12} + a_{02}a_{21}} \quad (1 \leq i, j \leq 2)$$

Itt a $H_{ij}(s)$ átviteli függvényt úgy nyertük, hogy az [1] differenciál-egyenletrendszer mindkét oldalát Laplace-transzformáltuk, és kifejeztük belőle az x_1 és x_2 , ill. y_1 és y_2 Laplace-transzformáltját I_1 és I_2 Laplace-transzformáltja függvényében. A feladat ilyen módon történő átfogalmazása azt jelenti, hogy a 3. ábrán felrajzolt

$$\begin{bmatrix} \mathcal{L}[y_1](s) \\ \mathcal{L}[y_2](s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H_{11}(s) & H_{12}(s) \\ H_{21}(s) & H_{22}(s) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathcal{L}[I_1](s) \\ \mathcal{L}[I_2](s) \end{bmatrix} \quad [3]$$

szabályozási rendszert, és a vele ekvivalens rekeszrendszert a $H_{ij}(s)$ függvények egyértelműen meghatározzák.

Igy Bellman és Aström nyomán a következőképpen fogalmazhatjuk meg a strukturális identifikálhatóság fogalmát.

Tegyük fel, hogy ismert inputhoz pontosan ismerjük az outputot is, azaz meg tudjuk határozni a $H_{ij}(s)$ függvényeket, melyek alakja:

$$H_{ij}(s) = \frac{\alpha_{ij}s + \beta_{ij}}{s^2 + \gamma_1s + \gamma_0} \quad (1 \leq i, j \leq 2) \quad [4]$$

A rekeszrendszer együtthatóira az eddigiek alapján teljesülni kell a következő egyenleteknek: $(1 \leq i, j \leq 2)$

$$c_{i1} b_{ij} + c_{i2} (1 - b_{ij}) = d_{ij}$$

$$c_{i1} (b_{ij} a_{02} + a_{12}) + c_{i2} ((1 - b_{ij}) a_{01} + a_{21}) = \beta_{ij} \quad [5]$$

$$a_{01} + a_{02} + a_{12} + a_{21} = \gamma_1$$

$$a_{01} a_{02} + a_{01} a_{12} + a_{02} a_{21} = \gamma_0$$

Definíció: Ha az [5] egyenleteknek tetszőlegesen ismert d_{ij} , β_{ij} , γ_1 , γ_0 esetén csak véges sok megoldása van, akkor a rendszert strukturálisan identifikálhatónak nevezzük.

Tekintsünk két egyszerű példát. A 4.a. ábrán látható rekeszrendszer ismeretlen c , a_{21} paramétereire általános esetben két, független egyenletből álló egyenletrendszert kapunk, mely egyértelműen megoldható, ezért a rendszer identifikálható. Ezzel szemben a 4.b ábrán felrajzolt rekeszrendszer strukturálisan nem identifikálható, mivel a két egyenletből álló egyenletrendszere három ismeretlent tartalmaz, s így végtelen sok megoldása van.

Az identifikálhatóság kérdésének tanulmányozására több számítógépes program készült / pl.(2) /, amelyekben a szerzők valamilyen numerikus eljárás felhasználásával állapítják meg, hogy a rendszer identifikálható-e.

A mi elképzelésünk az volt, hogy egy, az általános alakban felírt polinomokkal formálisan számoló program kialakításában és használatában szerezzünk tapasztalatot. A nemlineáris algebrai egyenletrendszerek elméletéből ismert, hogy egy algebrai egyenletrendszernek biztosan nincs végtelen sok különböző megoldása, ha a rendszerhez tartozó Jacobi mátrix rangja nem kisebb, mint az ismeretlenek száma. Így az identifikálhatóság kérdését visszavezettük az [5] bal oldalán álló polinomrendszerhez tartozó Jacobi mátrix rangjának kiszámítására.

Az általunk kifejlesztett program a polinomokkal történő formális számolás útján, Gauss-elimináció segítségével határozza meg a Jacobi mátrix rangját. A program R-10 számítógépre készült CDL nyelven. Jelenleg tetszőleges számú osztott inputtal rendelkező kétrekeszes modellek strukturális identifikálhatóságának eldöntésére nyújt lehetőséget úgy, hogy a rendszerben található bizonyos paramétereknek előre rögzített számértéke is lehet.

Tapasztalataink szerint a program általánosítását több rekesz esetére nehezíti, hogy a memóriaterület korlátozott. Ugyanis a Gauss-eliminációt formálisan végezve több változó esetén a polinomokban szereplő tagok száma rohamosan nő. Így a jelenlegi program nagyobb rekeszszámok esetén csak egyszerűbb konfigurációk / pl. körök / vizsgálatánál alkalmazható.

Programunkat lefuttattuk azokra a kétrekeszes, maximum két inputot és két mérést tartalmazó modellekre, melyekre az alábbi kikötések teljesülnek:

$$b_{11} = 1, \quad b_{12} = 0, \quad c_{12} = 0, \quad c_{21} = 0. \quad [6]$$

A [6] - ban nem szereplő paraméterek értéke egymástól függetlenül vagy 0, vagy ismeretlen.

Az így kapott, szimmetriától eltekintve 80 különböző mérési elrendezés közül 31 identifikálható. Az utóbbiakat megpróbáltuk valamilyen könnyen áttekinthető módon csoportosítani. Ehhez felhasználtuk a rendelkezésünkre álló AQVAL nevű programot (5), amely alakfelismerési feladatok matematikai logikai úton való megoldására készült. Az identifikálható mérési elrendezések az 5. ábrán látható 7 csoport valamelyikébe sorolhatók.

Az 5. ábrán folytonos vonal jelöli azokat a paramétereket, amelyek értéke ismeretlen, a / 2.ábrához képest/ hiányzó nyílaknak megfelelő paraméterek értéke 0, a szaggatott vonallal jelzett paraméterek értéke pedig közömbös.

Az 5. ábrán az a) - g) esetek mindegyike egy logikai szabályal jellemezhető. Pl. az f) típus azt jelenti, hogy ha $b_{11} = 1$, $b_{12} = 0$, $c_{21} = 0$, valamint c_{22} és a_{21} értéke ismeretlen / nem 0 /, akkor a rendszer identifikálható.

Irodalom

- 1 Bellman, R., Aström, K. J.: On structural identifiability.
Math. Biosci. 7 : 329-339 /1970/
- 2 Cobelli, C., Polo, A., Romanin-Jacur, G., : A computer program for the analysis of controllability, observability and structural identifiability of biological compartmental systems.
Computer Programs in Biomedicine 7 : 21-36 /1977/
- 3 Cobelli, C., Romanin-Jacur, G. : On the structural identifiability of biological compartmental systems in a general input-output configuration.
Math. Biosci. 30: 139-151 /1976/
- 4 Jacquez, J.A. : Compartmental Analysis in Biology and Medicine.
Elsevier, Amsterdam, 1972.
- 5 Michalski, R. S.: AQVAL/1 - Computer implementation of a variable-valued logic system and the application to pattern recognition.
Proc.1st Internat. Joint Conf. on Pattern Recognition, Washington, D. C., Oct. 30-Nov.1,1973.
- 6 Vajda Sándor, Deutsch Tibor : Farmakokinetikai modellek identifikálhatóságának egy szükséges feltétele. Számítástechnikai és kibernetikai módszerek alkalmazása az orvostudományban és a biológiában. 7. Kollokvium, Szeged, 1976, 63-74.