

ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ПРИКЛАДНОЙ БИОФИЗИКИ. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

С.В. Ермаков, В.И. Заляпин

В работе отражены результаты численного исследования системы нелинейных интегральных уравнений Вольтерра первого рода. Прямой условной регуляризацией получено решение системы, восстанавливающее динамику радионуклидов в организме человека с течением времени по современным измерениям содержания ^{90}Sr в эмали зубов. Работа поддержана грантом РФФИ-УРАЛ 04-01-96073.

Известно, что в результате техногенных катастроф, а также отсутствия надежных технологий переработки и хранения радиоактивных отходов, как среда обитания (бассейн реки Теча, Чел. область), так и жители прибрежных населенных пунктов подверглись радиоактивному загрязнению – внешнему (за счет повышенного вблизи реки гамма-фона) и внутреннему (от смеси радионуклидов, поступающих в организм с водой и продуктами питания местного производства) облучению [1]. Основной вклад в дозу внутреннего облучения вносит ^{90}Sr . Знание уровней и динамики его поступления, позволяет рассчитать накопленную дозу облучения на органы и ткани. Традиционно [2, 3] для восстановления динамики поступления ^{90}Sr используются результаты прижизненных измерений его содержания в эмали передних зубов у лиц, проживавших весь период сбросов на загрязненной территории, и в местах, где река была основным источником питьевой воды.

Анализ основных биологических и физических закономерностей динамики процесса вывода радионуклидов из организма человека позволил установить [4, 5], что задача нахождения функций $u_1(\tau)$ – коэффициента перехода ^{90}Sr из желудочно-кишечного тракта в эмаль передних зубов, и $u_2(t)$ – модифицированной скорости поступления ^{90}Sr в момент времени t , при некоторых дополнительных предположениях, может быть сведена к задаче решения системы интегральных уравнений:

$$\begin{cases} \int_0^s \alpha(t-s+10, t) u_1(t-s+10) u_2(t) dt = \varphi_1(s), & 0 \leq s \leq 10 \\ \int_0^s \alpha(t, t-s+10) u_1(t) u_2(t-s+10) dt = \varphi_2(s), & 0 \leq s \leq 10 \\ u_1(0) = 1, \end{cases} \quad (1)$$

где правая часть системы, векторная функция $\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$, описывает прижизненные модифицированные измерения зубного датчика, а ядро – $\alpha(t, \tau)$ получено в результате экспертного оценивания определенных биофизических процедур и имеет вид, изображенный на рис. 1.

Примененные в работах [4, 5] соображения – линеаризация с последующей регуляризацией методом невязки получающейся системы линейных интегральных уравнений, позволили получить предварительные результаты в рассматриваемой задаче.

Однако значительный интерес представляет прямое решение поставленной задачи с одновременным исследованием вопроса о необходимости регуляризации – известно (например [6]), что для скалярных уравнений Вольтерра наблюдается так называемая «саморегуляризация» численных процедур, обусловленная диагональной структурой уравнения и реализуемая за счет специального выбора шага дискретизации.

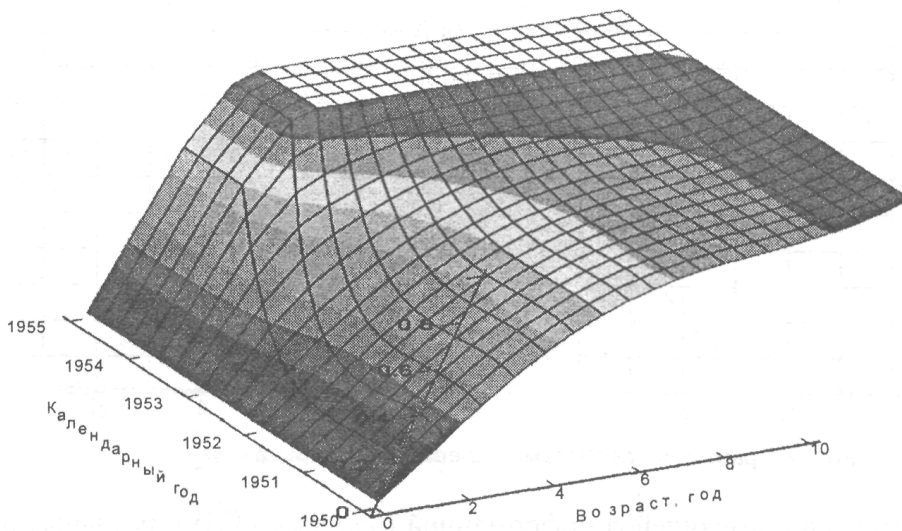


Рис. 1. Рельеф поверхности $\alpha(t, \tau)$

1. Модельная система

Рассмотрим $u^0(t) = \begin{pmatrix} u_1^0(t) \\ u_2^0(t) \end{pmatrix}$ – пробную функцию, качественно воспроизводящую характерные особенности решения системы (1) в соответствии с соображениями, приведенными в [4], и рассмотрим модельную систему

рассмотрим модельную систему

$$\begin{cases} \int_0^s \alpha(t-s+10, t) u_1^0(t-s+10) u_2^0(t) dt = \varphi_1^0(s), & 0 \leq s \leq 10 \\ \int_0^s \alpha(t, t-s+10) u_1^0(t) u_2^0(t-s+10) dt = \varphi_2^0(s), & 0 \leq s \leq 10 \\ u_1^0(0) = 1, \end{cases} \quad (2)$$

правые части которой получены подстановкой пробной функции $u^0(t)$ в систему (1).

В качестве пробных функций были взяты функции

$$u_1^0(t) = e^{-t}, \quad u_2^0(t) = \frac{4000}{1+t^3},$$

воспроизводящие характерные особенности поведения настоящих решений системы (1).

Соответствующие правые части приведены на рис. 2.

Полученная система анализировалась следующими вычислительными процедурами:

- нелинейная система уравнений, полученная из (2) дискретизацией интегральных соотношений, решалась итерационным методом Ньютона–Рафсона;
- квазирешение системы (2) отыскивалось методом наименьших квадратов с исследованием системы необходимых условий итерационным методом Ньютона–Рафсона;
- квазирешение системы отыскивалось МНК. При этом был реализован алгоритм прямого поиска экстремума (метод Хука–Дживса, градиентные методы);
- для решения системы использовался алгоритм регуляризации методом невязки. Минимизация сглаживающего функционала осуществлялась с помощью прямых процедур.

С целью исследования устойчивости вычислительных алгоритмов одновременно теми же методами решалась возмущенная система, правые части которой получались из точных правых частей случайным «зашумлением»: $\hat{\varphi}(s) = \varphi(s) + \varepsilon(s)$, $\varepsilon(s) = \begin{pmatrix} \varepsilon_1(s) \\ \varepsilon_2(s) \end{pmatrix}$. Порядок зашумления исход-

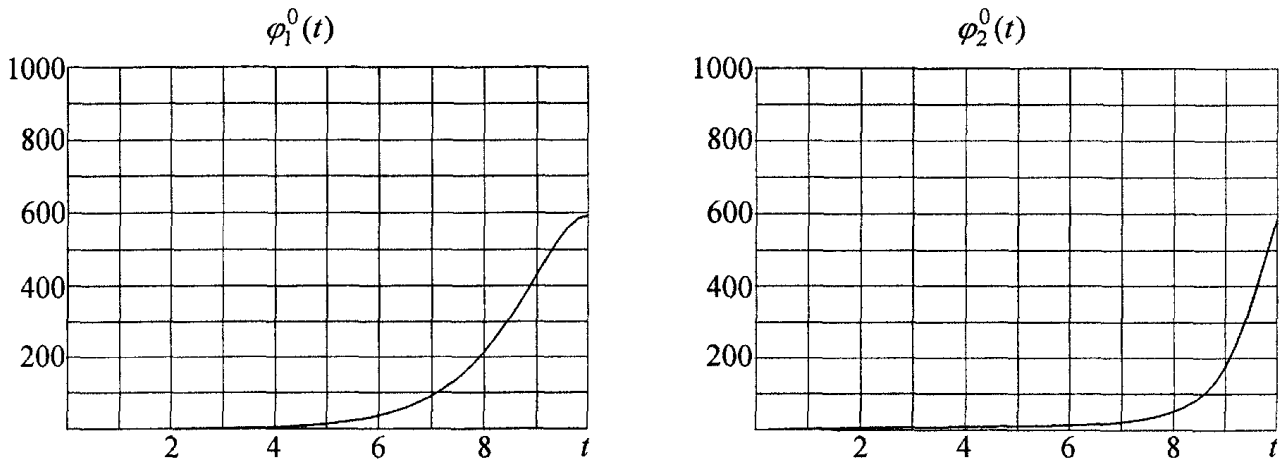


Рис. 2. Первые части системы: слева – φ_1^0 , справа – φ_2^0

ных данных, в соответствии с имеющейся информацией (например [3]) о реальных экспериментальных данных, был принят на уровне 5–10 % от измеряемого значения.

2. Дискретизация

Эффективным с вычислительной точки зрения методом дискретизации рассматриваемой системы является дискретизация, полученная кусочно-линейной аппроксимацией входящих в уравнения функций.

На промежутке $[0, 10]$ зададим равномерную сетку $0 = s_0 < s_1 < \dots < s_n = 10, s_i = ih, h = \frac{10}{n}$ и пусть $\Lambda_i(s), i = 0, 1, \dots, n$ – базис Лагранжа кусочно-линейных на промежутке $[0, 10]$ функций, определяемый условиями $\Lambda_i(s_j) = \delta_{ij}$. Здесь $\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$ – символ Кронекера. Кусочно-линейные аппроксимации функций $u_i(t)$ в этом случае могут быть представлены в виде

$$u_i(t) = \sum_{p=0}^n u_{i,p} \Lambda_p(t), \quad u_{i,p} = u_i(ph), \quad i = 1, 2, p = 0, 1, \dots, n. \quad (3)$$

В силу равномерности разбиения, тождественно выполняется

$$\Lambda_p(t - qh) = \Lambda_{p+q}(t), \quad t \in [0, 10], \quad 0 \leq p + q \leq n.$$

Поэтому на сетке $\forall k = 0, 1, \dots, n$ при $s = s_k = kh$ получаем

$$\Lambda_i(t - s + 10) = \Lambda_i(t - s_k + s_n) = \Lambda_i(t - kh + nh) = \Lambda_{i+k-n}(t).$$

Отсюда, учитывая локальность функций Лагранжа, получаем

$$u_1(t - s + 10) = \sum_{p=n-k}^n u_{1,p} \Lambda_{p+k-n}(t) = \sum_{p=0}^k u_{1,n-k+p} \Lambda_p(t), \quad u_2(t) = \sum_{q=0}^k u_{2,q} \Lambda_q(t), \quad s = kh, \quad 0 \leq t \leq s. \quad (4)$$

Подставляя разложения (4) в систему (1)–(2), получим

$$\begin{cases} \sum_{p=0}^k \sum_{q=0}^k W_{pq}^k u_{1,n-k+p} u_{2,q} = \varphi_{1,k}; \\ \sum_{p=0}^k \sum_{q=0}^k V_{pq}^k u_1 u_{2,n-k+q} = \varphi_{2,k}; \\ k = 0, 1, \dots, n; \\ u_{1,0} = 1. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь $\varphi_{i,k} = \varphi_i(s_k) = \varphi_i(kh)$, а веса W_{pq}^k, V_{pq}^k даются равенствами

$$W_{pq}^k = \int_0^{kh} \alpha(t - kh + nh, t) \Lambda_p(t) \Lambda_q(t) dt, \quad V_{pq}^k = \int_0^{kh} \alpha(t, t - kh + nh) \Lambda_p(t) \Lambda_q(t) dt.$$

Отметим некоторые особенности полученной нелинейной системы (5). Во-первых, в силу уже упомянутой выше локальности функций Лагранжа, ненулевыми будут только те веса W_{pq}^k, V_{pq}^k , для индексов которых выполняется неравенство $|p - q| \leq 1$. Во-вторых, фактически система (5) содержит $2n + 1$ уравнение относительно $2n + 1$ неизвестного – при $k = n$ уравнение первой группы тождественно совпадает с аналогичным уравнением второй группы. В-третьих, уравнения первой и второй группы, отвечающие значению $k = 0$

$$W_{00}^0 u_{1,n} u_{2,0} = \varphi_{1,0}, \quad V_{00}^0 u_{1,0} u_{2,n} = \varphi_{2,0}$$

тождественно выполняются для любых значений $u_{1,n}, u_{2,n}, u_{2,0}$ в силу $W_{00}^0 = V_{00}^0 = \varphi_{10} = \varphi_{20} = 0$.

При численном исследовании системы (5) для снятия этой неопределенности использовалась априорная информация о поведении решений в конечной точке отрезка $[0, 10]$: полагалось $u_{1,n} = u_{2,n} = 0$.

3. Метод Ньютона–Рафсона

Для значений параметра дискретизации $n = 10, 25, 50, 100$ полученная выше система (5) решалась итерационным методом Ньютона с коррекцией шага итерации τ в соответствии со следующим правилом – τ полагалось равным последовательно $1 \rightarrow \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{4} \rightarrow \dots \rightarrow \frac{1}{2^r} \rightarrow \dots$ до тех пор,

пока не достигалось заданное критериальное соотношение между значениями итерируемой функции на смежных шагах. Если такое значение шага не находилось (коррекция шага осуществлялась до тех пор, пока выполнялось условие $\tau > 10^{-8}$), τ полагалось равным 0.1 и алгоритм продолжал свою работу. На рис. 3–5 приведены результаты – пунктирной линией показано начальное приближение, точками – точное модельное решение, сплошной линией – расчетные значения. На всех рисунках слева изображен эскиз функции $u_1(t)$, справа – функции $u_2(t)$.

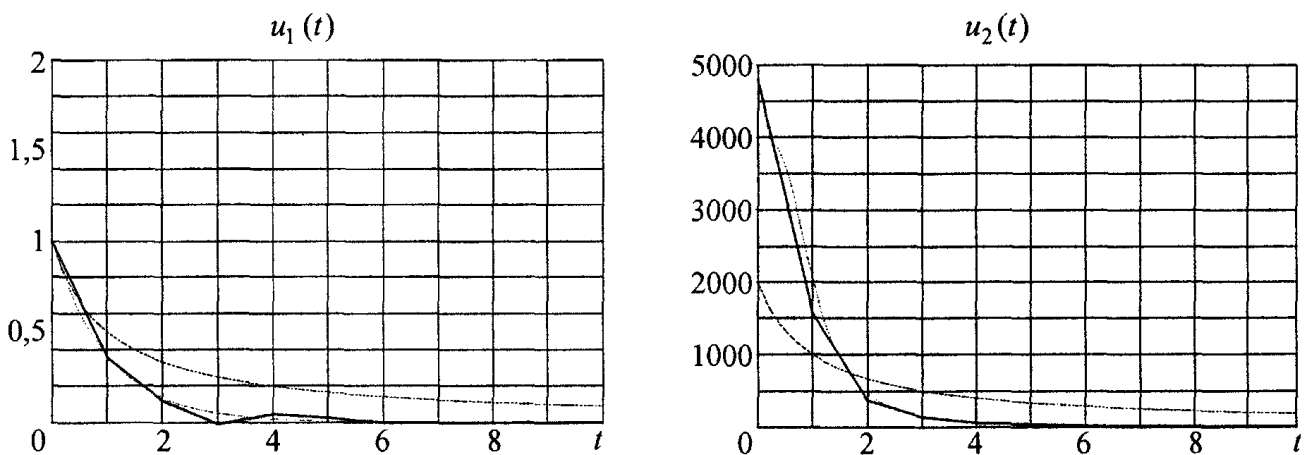


Рис. 3. Метод Ньютона–Рафсона, невозмущенные данные, $n = 10$, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

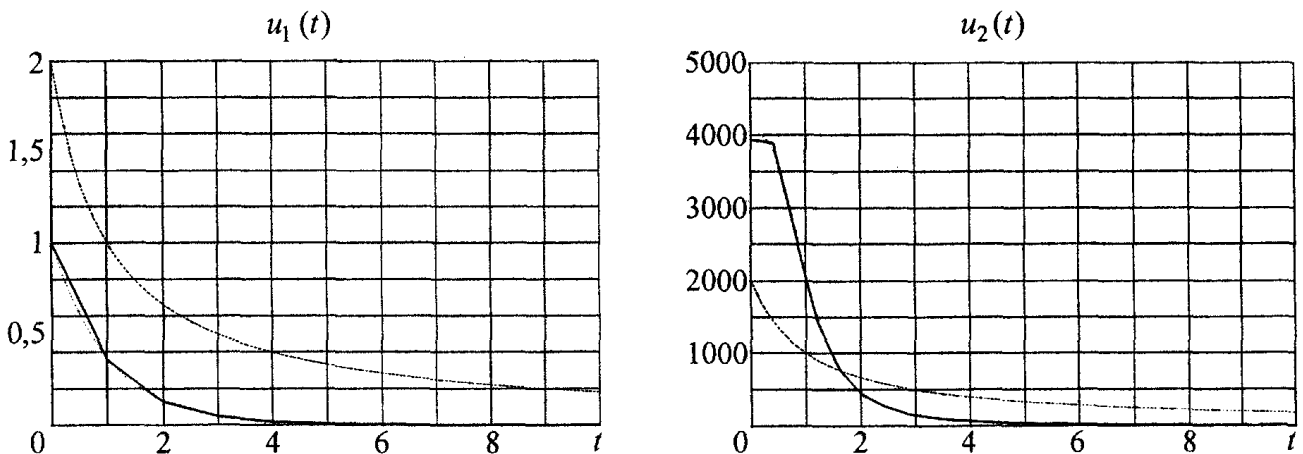


Рис. 4. Метод Ньютона–Рафсона, невозмущенные данные, $n = 50$, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

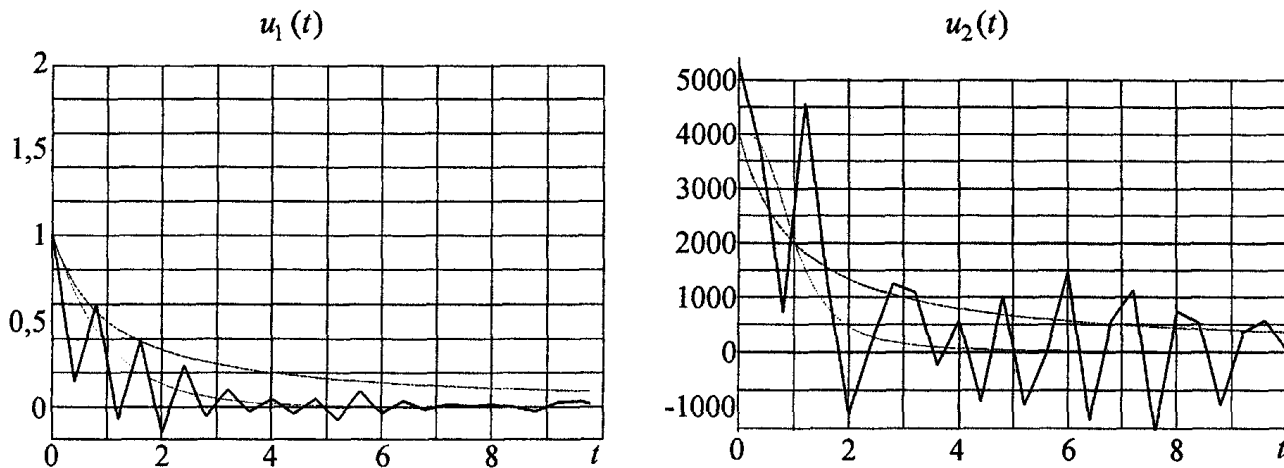


Рис. 5. Метод Ньютона–Рафсона, возмущенные данные, $n = 25$, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

Метод хорошо сходится к точному модельному решению при точно заданных правых частях, однако возмущение правых частей приводит к резкому ухудшению сходимости и потере точности, особенно при расчетах значений второй ($u_2(t)$) компоненты отыскиваемого решения.

Попытки получения решения на реальных данных оказались безуспешными. Качественно верный характер решений получался только при $n = 10$, но и в этом случае количественная сторона полученных решений оставляла желать лучшего. При бóльших значениях параметра дискретизации ситуация резко ухудшалась. Скорее всего, это связано с тем обстоятельством, что значение $n = 10$ является «естественным» в рассматриваемой задаче – правые части системы (1) экспериментально наблюдались с шагом 1 год на протяжении 10 лет.

4. Метод наименьших квадратов

Решение системы интегральных уравнений (1)–(2) сводилось к задаче минимизации функционала

$$F(u_1, u_2) = \int_0^{10} \left[\left(\int_0^s \alpha(t-s+10, t) u_1(t-s+10) u_2(t) dt - \varphi_1(t) \right)^2 + \left(\int_0^s \alpha(t, t-s+10) u_1(t) u_2(t-s+10) dt - \varphi_2(t) \right)^2 \right] ds.$$

Минимизация последнего осуществлялась двумя способами – дискретизацией функционала $F(u_1, u_2) = F_n(u_{1,p}, u_{2,q})$ на сетке $0 \leq t, s \leq 10$, получаемой разложением искомых функций по системе функций (3) Лагранжа, и применением итерационного метода Ньютона–Рафсона к системе необходимых условий экстремума

$$\frac{\partial F_n(u_{1,p}, u_{2,q})}{\partial u_{1,p}} = 0, p = 1, 2, \dots, n-1, \quad \frac{\partial F_n(u_{1,p}, u_{2,q})}{\partial u_{2,q}} = 0, q = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

Корректировка шага τ в методе Ньютона осуществлялась, как описано выше. Этот подход (по крайней мере, в данной задаче) оказался неэффективным. Вычислительный процесс даже при точных исходных данных вел себя нерегулярно, полученные решения качественно и количественно отличались от модельных (рис. 6).

Другим способом минимизации упомянутого функционала был прямой метод минимизации – метод Ритца, использующий кусочно-линейные базисы Лагранжа (3). В этом случае прямая минимизация осуществлялась методом Хука–Дживса.

При значении параметра дискретизации $n = 10$ (рис. 7) используемый алгоритм быстро и точно восстановил модельные функции по точным правым частям. С увеличением же значения параметра дискретизации вычислительная процедура становилась неустойчивой и даже в случае сходимости минимизирующей последовательности, полученные решения, качественно описывая правильную динамику, значительно отличались от модельных (рис. 8).

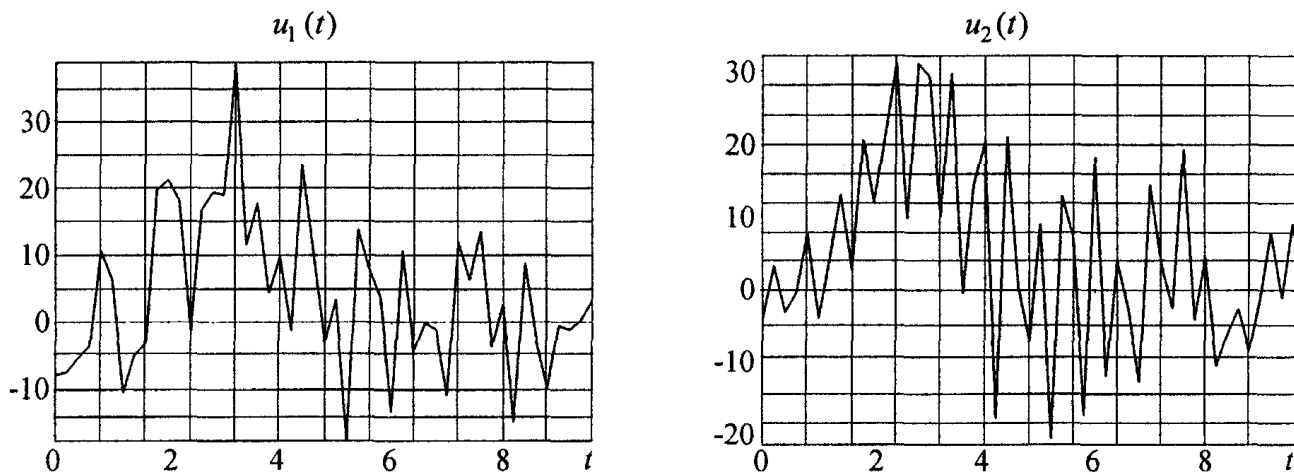


Рис. 6. Метод наименьших квадратов – необходимое условие, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

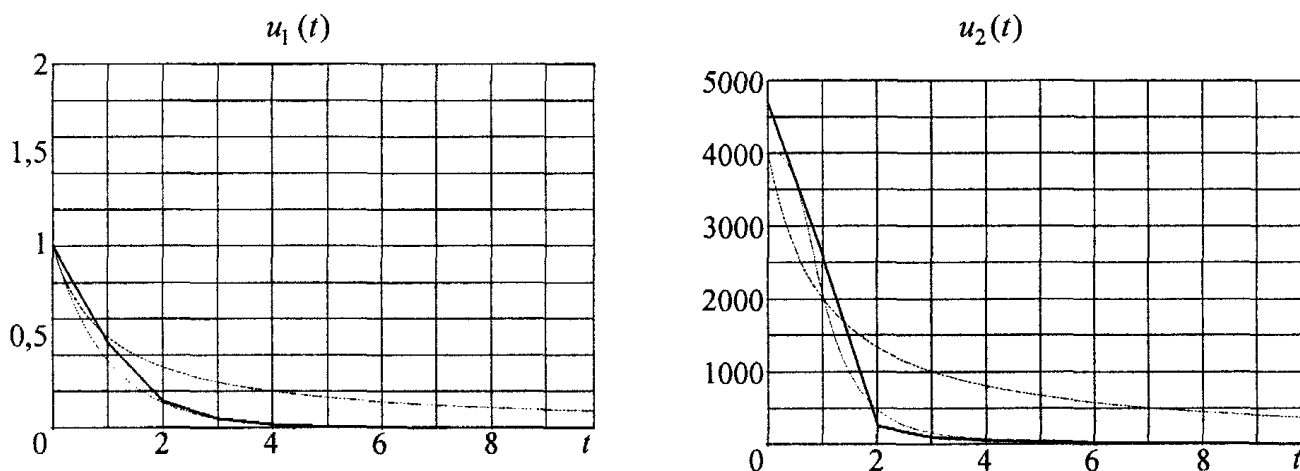


Рис. 7. Метод наименьших квадратов – прямая минимизация, $n = 10$, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

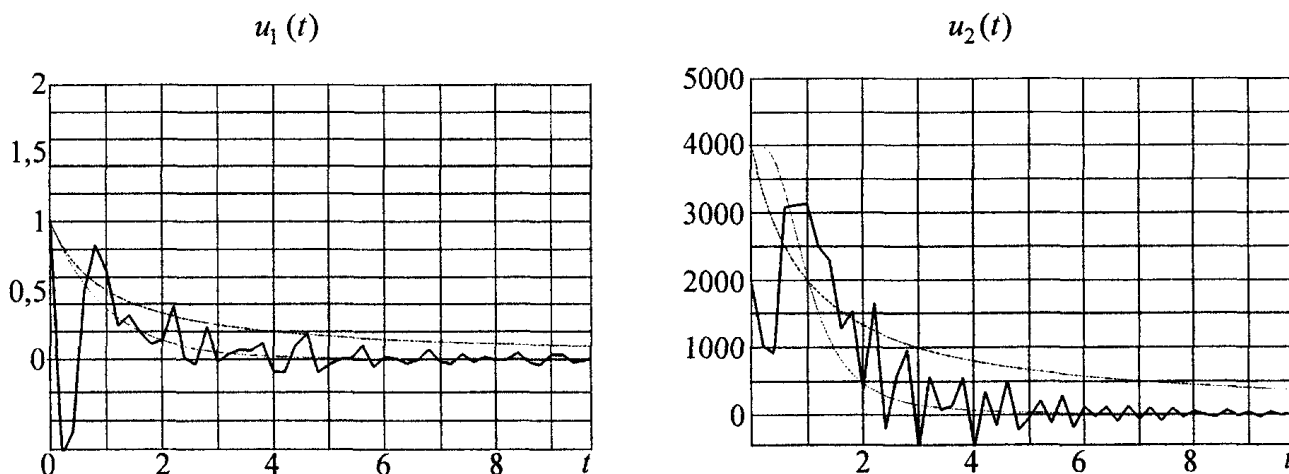


Рис. 8. Метод наименьших квадратов – прямая минимизация, $n = 50$: слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

5. Метод невязки

В этом случае задача решения системы интегральных уравнений заменялась минимизацией сглаживающего функционала

$$M^\lambda(u_1, u_2) = F(u_1, u_2) + \lambda \cdot \Omega(u_1, u_2).$$

Параметр регуляризации λ отыскивался итерационно, стабилизатор Ω был взят в виде

$$\Omega(u_1, u_2) = \int_0^{10} (\mu_1(t)u_1^2(t) + \mu_2(t)u_2^2(t) + \nu_1(t)u_1'(t) + \nu_2(t)u_2'(t))dt .$$

Минимизация функционала $M^\lambda(u_1, u_2)$ осуществлялась на основе метода Ритца прямыми методами (Хука–Дживса, градиентными) на базе кусочно-линейной интерполяции отыскиваемых функций.

Как и выше, в случае «естественной» дискретизации задачи – при $n = 10$ – результат оказался приемлемым. Хорошо и быстро восстанавливаются искомые решения как в случае точных (рис. 9), так и «зашумленных» (рис. 10) правых частей системы.

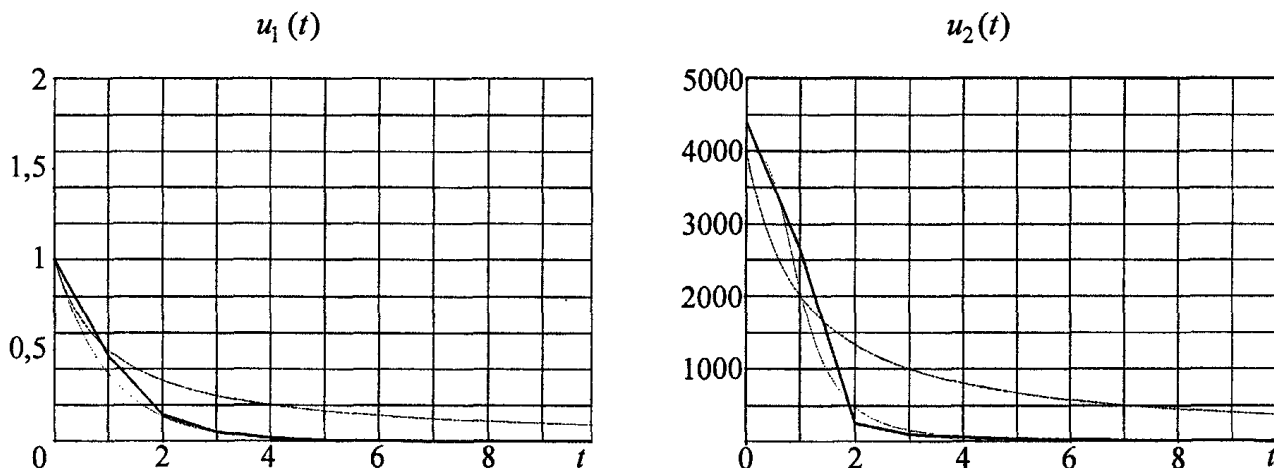


Рис. 9. Метод невязки – прямая минимизация, $n = 10$, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

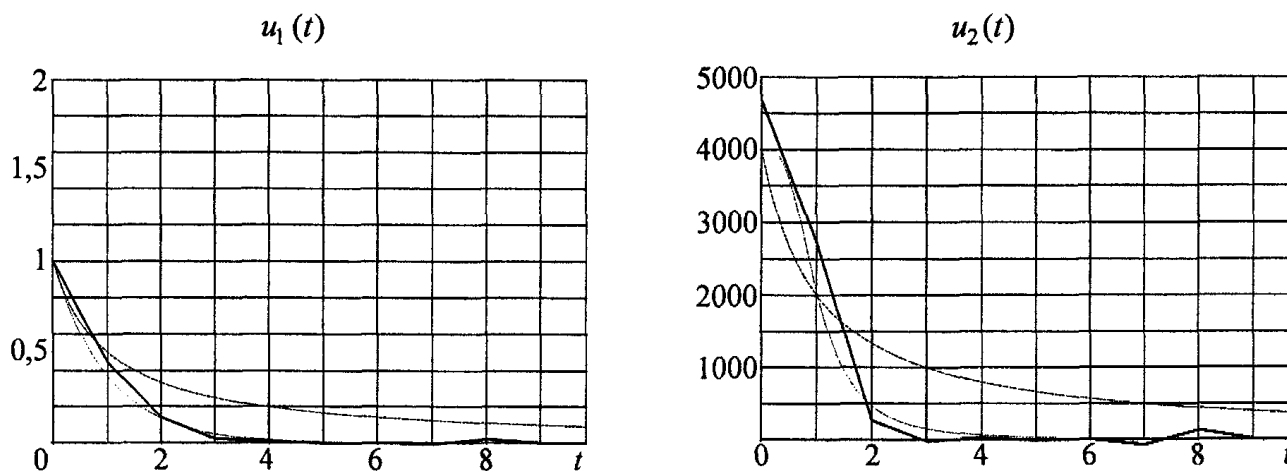


Рис. 10. Метод невязки – прямая минимизация, $n = 10$. Зашумленные данные

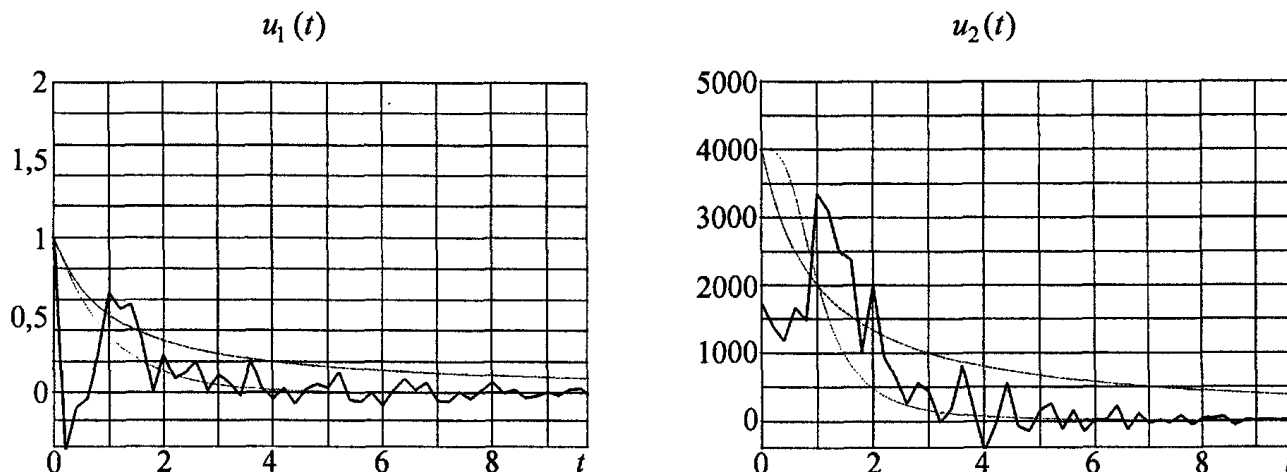


Рис. 11. Метод невязки – прямая минимизация, $n = 50$

Увеличение параметра дискретизации приводит к неустойчивости вычислительной процедуры. Если еще при $n = 25$ точность получаемых таким способом решений вполне удовлетворительна, то уже при $n = 50$ наблюдаются характерные для неустойчивых процедур «биения» (рис. 11) и решения значительно отличаются от модельных.

6. Метод невязки. Реальные данные

Метод невязки с $n = 10$ был применен для решения системы (1) с реальными правыми частями (рис. 12). Результаты расчетов приведены на рис. 13.

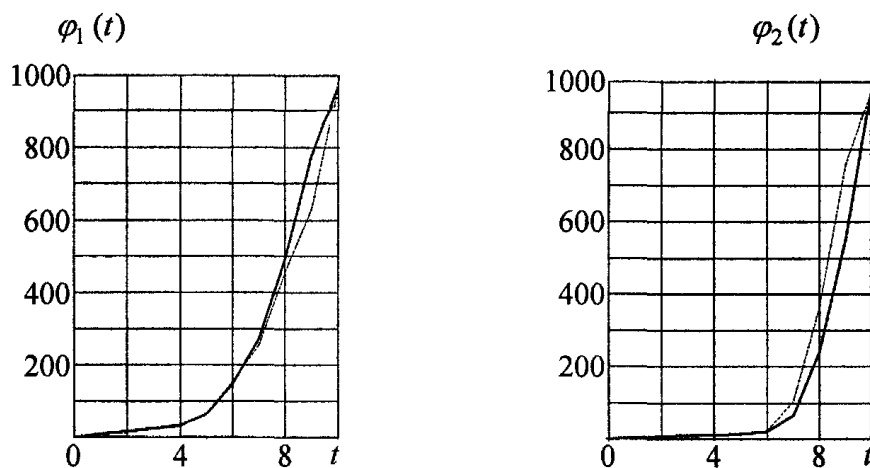


Рис. 12. Реальные данные – показания зубного датчика. Слева – φ_1 , справа – φ_2

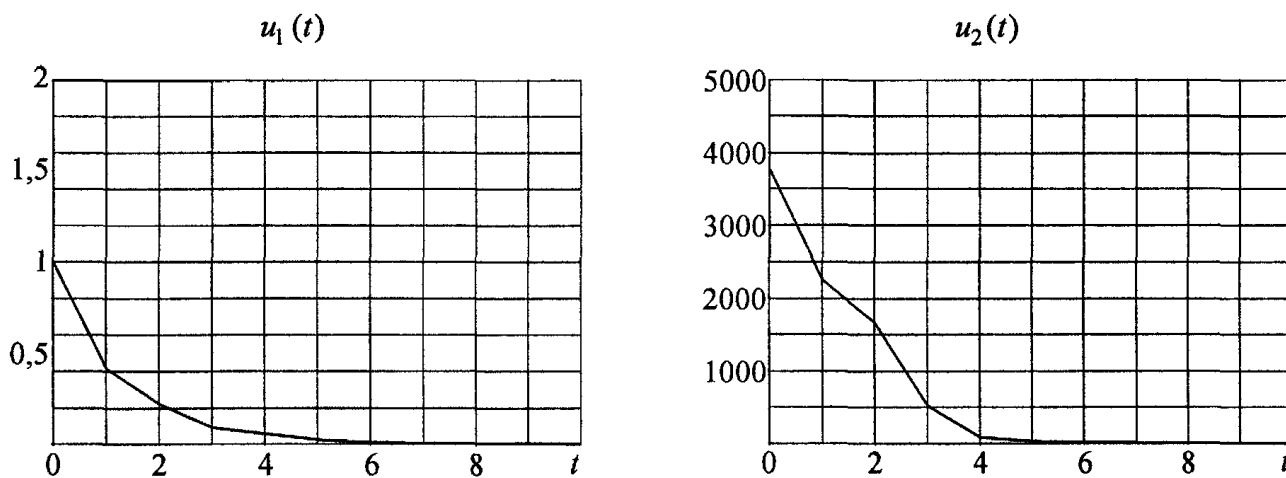


Рис. 13. Функции: слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

Полученный результат хорошо описывает реально наблюдаемую динамику [3] и качественно и количественно согласуется с ранее полученными [5] результатами.

7. Заключение

Установлена сильная неустойчивость рассмотренных численных процедур решения системы (1). Частично подтверждено наличие эффекта «саморегуляризации» при специальном подборе параметра дискретизации задачи. Установлено, что классические регуляризующие процедуры оказываются ограниченно эффективными в случае, когда параметр дискретизации не является естественным. Полученные экспериментальные результаты требуют теоретического осмысления.

Литература

1. Медико-биологические и экологические последствия радиоактивного загрязнения реки Теча// Под ред. А.В. Акеева, М.Ф. Киселева. – М.: Вторая типография ФУ «Медбиоэкстрем», 2000.
2. Расин И.М. Кинетика накопления стронция-90 и формирование тканевых доз в растущем организме: Дисс. ... канд. биол. наук. – М.: ИБФ, 1970.
3. Degteva M.O., Kozheurov V.P., Tolstykh E.I. et al. The Techa River Dosimetry System: Methods for the reconstruction of internal dose// Health Phys. – 2000. – V. 79. – № 1. – P. 24–35.
4. Заляпин В.И., Кривошапов В.А. Численный анализ одной обратной задачи прикладной биофизики// Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2002. – Вып.2. – № 3(12). – С. 3–11.
5. Zalyapin V.I., Krivoschapov V.A., Degteva M.O. Numerical solution of an applied biophysics inverse problem// Inverse problem in science & Engineering. – 2004. – V. 12. – № 4. – P. 379–393.
6. Apartsin A.S., Markova E.V. On numerical solution of the multilinear Volterra equations of the first kind// Proc. of the Intern. conf. on computational mathematics, Pt.2. – Novosibirsk. – 2002. – P. 322–326.

Поступила в редакцию 6 декабря 2004 г.