многообразия P^0 следует его замкнутость. Факторизуем пространство C по P^0 [2,3] и рассмотрим задачу идентификации в факторизованном пространстве. Фактор-пространство $F = C/P^0$ состоит из классов смежности $\widetilde{\psi} = \{\varphi + z\}, \varphi \in P^0, z \in C$. Два класса $\widetilde{\psi}$ и $\widetilde{\xi}$ равны, если $\widetilde{\psi} - \widetilde{\xi} \in P^0$. Отметим, что фактор-пространство F банахово относительно нормы $\|\widetilde{\psi}\|_F = \inf\limits_{\varphi \in P^0} \|\varphi + z\|_C$.

Определим линейный оператор $\widetilde{L}_{t_1} : L_2 \to F$ по формуле: $\widetilde{L}_{t_1} y = L_{t_1} y$.

О п р е д е л е н и е 2. *Систему* Σ *назовем с- идентифицируемой (class-идентифицируемой)* [2], *если многообразие* P^0 *конечномерно.*

Пусть $k(\lambda) = \begin{bmatrix} D(\lambda)A_1 & D(\lambda)A_2 & \dots & D(\lambda)A_{m-1} & D(\lambda)A_m \\ \Delta(\lambda)E & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \Delta(\lambda)E & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \Delta(\lambda)E & 0 \end{bmatrix}$ -$(mn \times mn)$-матрица,

$C(\lambda) = [GD(\lambda)A_1 + G_1\Delta(\lambda),\ GD(\lambda)A_2 + G_2\Delta(\lambda), \dots, GD(\lambda)A_m + G_m\Delta(\lambda)]$ - $(l \times mn)$ -матрица.

Определим матрицы $C^0(\lambda) = \mathrm{col}[C(\lambda),\ C(\lambda)k(\lambda), \dots, C(\lambda)k^{m-1}(\lambda)]$, $K(\lambda) = k^m(\lambda)$, $L_n(\lambda) = \mathrm{col}[C^0(\lambda), C^0(\lambda)K(\lambda), \dots, C^0(\lambda)K^{n-1}(\lambda)]$.

Параметрический критерий c-идентифицируемости системы Σ доставляет следующая

Т е о р е м а 2. *Условие*

$$\mathrm{rank}\begin{bmatrix} L_n(\lambda) \\ K^n(\lambda) \end{bmatrix} = \mathrm{rank}L_n(\lambda),\ \textit{для почти всех}\ \lambda \in K, \tag{5}$$

является необходимым и достаточным для того, чтобы система Σ *была с-идентифицируемой.*

Далее в докладе приводится граничная задача для восстановления текущего состояния в предположении, что система Σ является c-идентифицируемой.

Литература 1. Хейл Дж. Теория функционально-дифференциальных уравнений. М., 1984. 2. Метельский А. В. // Дифференциальные уравнения. 1992. Т.28, №11. С. 1969-1976. 3. Метельский А. В. // Дифференциальные уравнения. 1995. Т.31, №8. С.1353-1360.

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ САМОДИФФУЗИИ И ЯМР-РЕЛАКСАЦИИ

В БИОЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ

Хиревич С.И., БГУ, Минск

Метод пульсирующего градиента магнитного поля широко применяется для изучения диффузионного движения и времени ЯМР-релаксации молекул жидкости в биологической среде [1, 2]. Создание математической модели для изучения результатов, полученных при ЯМР-измерениях важно для дальнейшего развития данных методов измерений и обработки экспериментально полученных данных. Существуют различные подходы к этой проблеме. Например, модели, основанные на методе Монте-Карло [3, 4, 5]. Также существуют аналитические модели, основанные на так называемом приближении дельта-импульсного градиента [6, 7, 8] и, наконец, численные модели, основанные на решении 2-го закона Фика для диффузии [9, 10]. В русле последнего подхода ведётся достаточно много исследований. Не так давно была реализована одномерная модель многоячеистой системы и двумерная в полярных координатах [10, 12]. Эти программы предназначены для решения численных задач с помощью конечно-разностной схемы. Известно, что этот метод даёт хорошую точность решения. Однако, постоянство шага сетки – особенность конечно-разностного метода. Отсюда вытекает необходимость решать неоправданно большую систему уравнений для моделирования биологических объектов, части которых имеют широко варьируемые размеры. Метод конечных элементов устраняет этот недостаток – вычислительная область может быть покрыта сеткой с нерегулярным шагом. Этот метод уже реализован в среде FEMLAB (развитие PDE toolbox MATLAB).

Для того, чтобы оценить возможность использования пакета FEMLAB для изучения результатов ЯМР измерений в пористой и биологической среде, мы выполнили большое количество вычислительных экспериментов. Сначала мы проверили соответствие решений, полученных при помощи пакета FEMLAB с широко известной аналитической моделью Бронштейна [9]. Последняя описывает затухание магнетизации во времени, происходящее только за счёт диффузии частиц через частично проницаемую мембрану (без учёта импульсов градиента магнитного поля). Этот процесс математически можно описать следующим образом:

$$\frac{\partial C(\vec{r},t)}{\partial t}=\vec{\nabla}(D\vec{\nabla}C(\vec{r},t))$$
$$(\hat{n}D\vec{\nabla}C(\vec{r},t)+\rho C(\vec{r},t))|_S=0,\ C(\vec{r},0)=1 \qquad (1)$$

Согласно нашим результатам, модель показала практически полное соответствие с моделью Бронштейна.

Следующим шагом в наших исследованиях являлся более сложный случай – пульсирующий градиент магнитного поля для цилиндрических ячеек. Аналитическое решение для этого случая изложено в работах [6]. Для получения результатов мы решили численно уравнение (2) для одноячеистой цилиндрической системы с частично проницаемой мембраной:

$$\frac{\partial C(\vec{r},t)}{\partial t}=\vec{\nabla}(D\vec{\nabla}C(\vec{r},t))+ig(t)\gamma r_X C(\vec{r},t),$$
$$(\hat{n}D\vec{\nabla}C(\vec{r},t)+\rho C(\vec{r},t))|_S=0, C(\vec{r},0)=1 \qquad (2)$$

где $g(t)$ – это функция, учитывающая влияние градиента магнитного поля, γ - гиромагнитное соотношение, и r_X - компонент радиус вектора, который направлен вдоль градиента поля. Аналогично [8], мы решали уравнение, считая, что градиент магнитного поля отсутствует, а затем учитывали его влияние (умножая на коэффициент, характеризующий влияние градиента):

$$\frac{\partial C^*(\vec{r},t)}{\partial t}=\vec{\nabla}(D\vec{\nabla}C^*(\vec{r},t))-R(\vec{r})C^*(\vec{r},t),$$
$$C(\vec{r},t)=C^*(\vec{r},t)*\exp(i\gamma g(t)r_X). \qquad (3)$$

В результате решения, мы получили следующее: разработанная численная модель дала хорошее согласование с результатами работы [6]. При этом было получено меньшее отклонение от аналитического решения, чем при использовании цилиндрической модели [10].

После изучения возможностей пакета FEMLAB, мы попробовали применить разработанный численный алгоритм для моделирования достаточно реалистичной системы – двумерная структура, представляющая собой четверть биологической клетки (вакуоль, цитоплазма, клеточная стенка) и дополнительное межклеточное пространство.

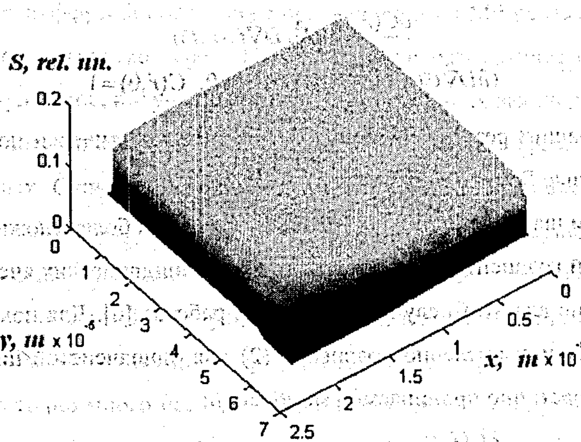

Рис. 1. Пространственное распределение магнетизации для системы 'четверть-клетки-плюс-окрестность.' при величине градиента, равной 1 T/m и времени наблюдения 0,6 с.

Результаты вычислений, полученные для такой структуры, представлены на рис. 1. Сетка, покрывающая область вычислений, состоит приблизительно из 30 тыс. треугольников и 15 тыс. узлов. Внешние границы модели закрыты. Вычисления пространственного распределения магнетизации в 5 градиентных и 24 временных точках заняли порядка 12 часов на Pentium III, 866 МГц, 256 Мб ОЗУ. Адекватность построенной модели проверялась путем сравнения с результатами ранее опубликованных работ [5-11], а также качественно - с данными экспериментов над простейшими реальными системами, полученными в Вагенингенском университете (Нидерланды).

В рамках данного проекта была проведена большая работа с целью исследования применимости пакета FEMLAB при моделировании самодиффузии и времени затухания в ЯМР-измерениях. В действительности, FEMLAB позволяет проводить моделирование поведения магнетизации в многоячеистой системе с произвольной геометрией. Метод конечных элементов – это основной метод численного решения ДУ в частных производных в среде FEMLAB. Главное свойство этого приближения с точки зрения моделирования ЯМР измерений в биологической среде – это возможность построения нерегулярной сетки, в результате чего мы получаем отсутствие неопределённости в представлении мембраны. Пользовательский интерфейс FEMLAB предоставляет широкую функциональность. Но на пути оптимизации времени вычислений появляется необходимость разработки отдельного программного модуля для применения метода конечных элементов для моделирования ЯМР-измерений. В настоящее время ведется его разработка. В рамках этой задачи создана подпрограмма, выполняющая триангуляцию Делоне произвольной двумерной области.

Предложенная численная модель позволяет описывать поведение магнетизации в двумерном пространстве для систем произвольной конфигурации, что является шагом вперёд по сравнению с ранее опубликованными результатами. Разработанные алгоритмы будут использованы для обобщения модели на трёхмерное пространство.

Литература. 1. J.E.M.Snaar and h. Van As, *Biophys. J.*, 63, P. 1654. 1992. **2.** H. Van As and D. van Dusschoten, *Geoderma*, 80, P. 389. 1997. **3.** B.Balinov, B.Jonsson. P.Linse, Olle Soderman, *J.Magn.Res.* A 104, P. 17. 1993. **4.** H.Gudbjartsson, S.Patz, *IEEE Transactions on medical imaging*, 14, No. 4, 1995, P. 636. **5.** R.Valiulin, V. Skirda, *J. Chem. Phys.* 114, No. 1, P. 452. 2001. **6.** J.E.M.Snaar, H.Van As, *J.Magn.Res.* A 102, P. 318. 1993. **7.** P.Linse, O.Soderman, *J.Magn.Res.* A 116, P. 77. 1995. **8.** P.T.Callaghan, *J.Magn.Res.* A 113, P. 53. 1995. **9.** T.A.Zawodzinski, T.E. Springer, M.Neeman, and L.O. Sillerud, *Israel J. Chem.* 32, P. 281. 1992. **10.** E.G.Novikov, D.van Dusschoten, H. Van As, *J.Magn.Res.* A **135**, P. 522. 1998. **11.** K.R.Brownstein and C.E.Tarr, *Phys. Rev.* **19**, P. 2446. 1979. **12.** L. van der Weerd, S.M. Melnikov, F.J. Vergeldt et al. *J.Magn.Res. A*, **156**, P. 213. 2002.

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ С ПАРАМЕТРАМИ

Хомицкая Т.Г., БГУ, Минск

Функция $u(t)$, $t \in T = [t_*, t^*]$, $t_* < t^* < +\infty$, называется дискретным управлением с периодом квантования h $(h = (t_* - t^*)/N$, N – натуральное число), если $u(t) = u(t_k)$, $t \in [t_k, t_{k+1}[$, $t_k = t_* + kh$, $k = \overline{0, N-1}$.

В классе дискретных управлений рассматривается линейная задача терми-