

BUDAPESTI MUSZAKI EGYETEM
Folyamatszabályozási Tanszék

dr. Benyó Zoltán

KOMPARTMENT MODELLEK
ADAPTÍV SZABÁLYOZÁSOK

Oktatási anyag a muszer- és irányítástechnika
szakos hallgatók részére

Folyamatszabályozás
és
Folyamatszimuláció című tárgyakhoz

Budapest, 1990.

Szakmailag ellenőrizte:

Lakatos Gábor
okleveles villamosmérnök

TARTALOM

KOMPARTMENT (REKESZ) MODELLEK

1. BEVEZETÉS	4
2. DEFINÍCIÓK, ALAPFOGALMAK.....	6
3. ALKALMAZOTT JELÖLÉSRENDSZER.....	9
4. KOMPARTMENT (REKESZ) MODELLEK ELMÉLETE.....	10
4.1 Kompartment- (rekesz) modellek leírása állandósult állapotban levő rendszerek esetén	10
4.1.1 Zárt rendszerek	11
4.1.2 Nyitott rendszerek.....	14
4.1.3 Speciális esetek.....	15
4.1.3.1 Lánc rendszer	16
4.1.3.2 Mammillary (anya) rendszer	18
4.2 Néhány gyakorlati eset vizsgálata	19
4.2.1 Egy-kompartment rendszer.....	19
4.2.2 Két-kompartment lánc rendszer.....	20
4.2.3 Egy-kompartment rendszer, melynek bemenete állandó forrás	21
4.2.4 Többszörös dózis	22
4.2.5 Két-kompartment zárt rendszer	23
4.2.6 Két-kompartment nyitott rendszer.....	24
4.2.7 Kompartmentcsatolások	25
4.2.7.1 Előrecsatolás	25
4.2.7.2 Visszacsatolás	26
4.2.8 Három-kompartment rendszerek	27
4.2.8.1 Zárt rendszer	28
4.2.8.2 Nyitott rendszer.....	28
4.2.8.3 Lánc rendszer	28
4.2.8.4 Mammillary (anya) rendszer	28
4.2.9 Inhomogenitás.....	28
4.3 Tranziens állapotban lévő rendszerek	29
4.3.1 Tranziens rendszer fogalma.....	29
4.3.2 Idegen anyagok kinetikája	30
4.3.3 Nyomjelzővel jelölt rendszerek	31

4.4 Nemlineáris rendszerek	32
4.4.1 Általános modell	32
4.4.2 Perturbációs és relaxációs módszerek	33
4.4.2.1 Relaxáció	33
4.4.2.2 Perturbáció	34
5. SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓ	35
5.1 Lánc rendszer modellje	35
5.2 Enterohepatikus keringés modellezése	38
5.3 Oldott állapotú anyagok tárolása polietilén konténerekben	41
5.4 A pajzsmirigy jódfelvételi folyamatának modellezése	42
5.5 Többszörös dózis (Atkins kísérlete)	44
6. INVERZ FELADAT MEGOLDÁSA	46
6.1 Inverz feladat megoldásának grafikus módszerei	46
6.1.1 Bleehan-Fisher módszer	47
6.1.2 Cohn-Brues módszer	47
6.1.3 A módszerek pontossága	48
6.2 Számítógépes paramétermeghatározás	48
6.2.1 Clearance-vizsgálatok mérési adatainak számítógépes kiértékelése	48
6.2.2 ^{198}Au kolloiddal végzett májáramlás vizsgálatok kiértékelése	49
1. BEVEZETÉS	52
2. ADAPTÍV SZABÁLYOZÁS	53
2.1 Modell-referenciás adaptív szabályozók (MRASZ) Ljapunov tervezése	53
2.2 Paraméter identifikáció MRASZ használatával	56
2.3 MRASZ tervezése hiperstabilitással	57
2.4 Adaptív megfigyelés	64
3. ÖNHANGOLÓ (SELF-TUNING) SZABÁLYOZÁS	72
3.1 Minimális varianciájú szabályozás	72
3.2 Minimális varianciájú önhangoló szabályozó	74
3.3 Általánosított legkisebb variancia	76
4. IRODALOMJEGYZÉK	81

KOMPARTMENT (REKESZ) MODELLEK

1. BEVEZETÉS

Az orvosi - élettani kutatásoknál és vizsgálatoknál mind gyakrabban merül fel valamely kvantitatív vizsgálati kiértékelési módszer kidolgozásának igénye, ok - okozati összefüggések feltárása, azok matematikai megfogalmazása. Mivel az élő szervezetek és a bennük lejátszódó folyamatok általában bonyolultak, ezért a vizsgálatukhoz a teljes rendszert részekre (alrendszerekre) kell bontanunk, majd ezen alrendszerek statikus és dinamikus tulajdonságainak megismerése után vállalkozhatunk a teljes rendszer, vagy folyamat analízisére.

Az életműködés során - főleg a fejlettebb élőlényeknél - kiemelkedő szerepet játszanak a különböző nedvkeringések (pl. vérkeringés). Ezek transzport jelenségek, melyeket extenzív fizikai mennyiségek (tömeg, térfogat, energia, stb.) által meghatározott szubsztancia áramlása jellemez. Ezen jelenségek vizsgálatára nyújt jó lehetőséget a különböző nyomjelző anyagok transzportjának számítógépes kompartment analízise.

Tekintve, hogy az említett extenzív mennyiségek az anyaghoz kötött sajátosságok, transzportjuk szükségképpen az anyag részecskéinek (molekuláinak, atomoknak, stb.) mozgásával kapcsolatos, így a transzport jelenségek az anyag specifikus mozgásformáinak tekinthetők.

Miután a transzport eloszlásbeli egyenlőtlenségek kiegyenlítéseként jön létre, a transzportált szubsztancia árama annál intenzívebb, minél nagyobb az inhomogenitás a rendszerben.

Az olyan folyamatokat, amelyek valamely extenzív mennyiség transzportjára irányulnak, transzport folyamatoknak nevezzük. A transzport folyamatok alapjelenségeit a molekuláris fizika tárgyalja. A transzport folyamatok gyakorlati számítása olyan fenomenologikus jellemzőkkel és összefüggésekkel történik, amelyek legtöbbje hasonlóság elméletén alapszik.

Az ún. fenomenologikus szemléletű leírásmód nyilván nem tükrözi az anyag molekuláris, atomos felépítését, stb., ezért csak akkor alkalmazhatjuk, ha az ún. "mikroszkópikus" viselkedés nem képezi a vizsgálat tárgyát.

Az élettani transzport folyamatok megismeréséhez és tanulmányozásához meg kell teremtenünk a megfelelő méro- és kiértékelő rendszert. Ezek általában modell-referenciás intelligens mérőrendszerek. Segítségükkel egyre bonyolultabb élettani folyamatok tanulmányozhatók.

Továbbiakban tetszőleges élettani transzport folyamatot olyan rendszernek tekintjük, amely véges számú makroszkópikus alrendszerből vagy elemből épül fel. Ezeket homogén egyenletes eloszlású elemeknek, kompartmenteknek (vagy rekeszeknek) nevezzük. A kompartmentek anyagcserén keresztül kerülnek egymással (esetleg a környezettel) kölcsönhatásba.

Mi a jelentősége a kompartment rendszereknek? Eloszor is igen eredményesen felhasználhatók a biológia, kémia stb. számos területén végzett kísérletek elemzésénél, kvantitatív összefüggések feltárására a fiziológiában és a farmakológiában. A lineáris kompartment rendszereknek viszonylag bonyolult analitikus elmélete van, nem is szólva az ún. inverz problémáról, a rendszer identifikáció és paraméter meghatározás feladatáról. A kutató számára fontos feladat, hogy a kísérleti adatokból a vizsgált rendszer plauzibilis leírásához eljusson. Ehhez nagy segítséget nyújt a kompartment analízis. Még ennél is bonyolultabb feladat a nemlineáris rendszerek és azon rendszerek vizsgálata, melyekben a kompartmentek közti kicserélődési folyamatokra ciklikus, valamint véletlen perturbációk hatnak.

A kompartment (rekesz) analízis hasonló jelentőséggel bír az élettani folyamatok vizsgálatánál, mint a klasszikus szabályozástechnikában jól ismert frekvenciatartománybeli vizsgálati módszerek, vagy a modern szabályozás elméletben alkalmazott állapotegyenletes rendszerleírás.

A kompartment analízis elméletét és alkalmazásait három fő részre oszthatjuk:

1. Plauzibilis modell készítése bármely biológiai rendszerhez. Ehhez szükséges a folyamat hátterének alapos ismerete, ehhez rengeteg kísérletet, mérési sorozatot kell elvégezni és kiértékelni. Az így szerzett tudás és felhalmozott ismeretek birtokában kritikával viselkedünk minden kompartment modellel szemben. A modell szerkezetének és paramétereinek meg kell egyeznie a valóságos rendszer vagy folyamat megfelelő jellemzőivel. Ellenkező esetben a kompartment rendszerrel való leírásnak nagyon kis köze lesz a valósághoz.
2. Adott egy specifikált kompartment modell, feladat a rendszer analitikus elméletének kidolgozása. Ez matematikailag a legjobban definiálható feladat.
3. A legnehezebb feladat egy ún. inverz feladat. Adott egy rendszer egy vagy több plauzibilis modellje, milyen adatokra van szükségünk és hogyan használjuk fel azokat, hogy a modellparamétereket megkapjuk, és hogyan döntsük el, hogy melyik a legjobb modell. Az inverz feladat elméletének és megoldásának kidolgozása általában azért nehezebb, mert eleve bonyolultabb feladatról van szó, mint pl. egy jól specifikált kompartment rendszer analitikus megoldásakor.

A téma interdiszciplinális jellegű művelői között egyaránt megtalálhatók orvosok, biofizikusok, élettanászok, programozó matematikusok és természetesen mérnökök. Tekintettel a téma határterület jellegére fontos a közös nyelv, fogalomrendszer, stb. megalkotása, az azokhoz való következetes ragaszkodás és különös gondot kell fordítani arra, hogy a téma kifejtése mind a mérnök, mind pedig a nem muszáziak számára jól érthető legyen.

2. DEFINÍCIÓK, ALAPFOGALMAK

Rendszer: biokémiai, vagy fiziológiai elrendezés, melyben valamely anyag viselkedését tanulmányozzuk. A rendszeren kísérletek sorozatát végezzük, valamilyen előre meghatározott céllal. Rendszer lehet pl. egy állat, növény, élő szerv, élő sejt, vagy sejtek mitochondrium összetevői (mitochondrium: sejtplazma-területek, amelyekben a legfontosabb és legintenzívebb anyagcsere-folyamatok zajlanak le). A vizsgálat lehet pl. a ^{131}I kiürülése egy állat plazmájából. Ebben az esetben a megfigyelt rendszer a jódt transzport folyamata a vérbe és a vérből. A rendszer lehet: zárt vagy nyitott.

Zárt rendszer: rendszer, melybe nem lép be és nem is hagy el anyag.

Nyitott rendszer: olyan rendszer, mely anyagcserét folytat környezetével. Egy állat (szerv, vagy sejt) anyagcseréjének alkotói (metabolic pool) olyan vegyületek összessége, melyek a szövetek építéséből, vagy lebomlásából származnak, melyeket az állat (szerv, vagy sejt) a szövet alkotóinak szintézisére használ.

A **kompartment** kinetikailag elhatárolható, homogén, egyenletes eloszlású anyagmennyiség, melyet transzformációjának, vagy transzportjának kinetikája jellemez. A kompartmentet meg kell különböztetni a fizikai térfogattól és fiziológiai tértől, bár néhány vegyület ilyen esetben is lehet kompartment. Egy anyagnak az egyik kompartmentből a másikba történő átvitele lehet az illető anyagnak az egyik fiziológias helyről a másikra való átvitele, vagy az illető anyagnak ugyanazon fiziológias határokon belül történő átalakulása. A kompartment méretét a benne lévő anyag mennyisége határozza meg, mértékegysége tömeg egység (mol, gramm).

Elméleti modell egy biológiai rendszer valamely anyaga kinetikájának leírása.

Matematikai modell az elméleti modellből származtatott egyenletek rendszere, mely a vizsgált anyag koncentrációjának és mennyiségének a változását írja le az idő függvényében.

A **kompartment analízis** azon eljárások összessége, melyek lehetővé teszik, hogy egy biológiai rendszer viselkedését leírassuk elméleti, vagy matematikai modellel.

A kompartment rendszerek szimbolikus jelölése háromféleképpen történhet:

- Egymástól elválasztott dobozok, köztük nyilak
 - Körök, köztük nyilak
 - Hálók (gráfok)
- segítségével.

Az anyag körforgása (turnover):

Egy több vegyületből álló rendszer **állandósult állapotban** van, ha e vegyületek a rendszerben mozognak, egymásba átalakulnak, és **koncentrációjuk** minden kompartmentben **állandó** a megfigyelés ideje alatt. Zárt rendszer esetén az állandósult állapot **dinamikus egyensúly** de mielőtt a rendszer nyitottá válik, az egyensúly megszűnik. A dinamikus egyensúly fogalma csak zárt rendszerre használható, az állandósult állapotot pedig nyitott rendszerre szokták használni.

A **turnover mérésére** a **felezési időt** használjuk. Használata azon alapszik, hogy hasonló elsorendű differenciál egyenleteket használunk radioaktív bomlásoknál, kémiai kinetikánál és állandósult állapotú rendszerek kompartment analízisének. Azokra a rendszerekre, melyek leírhatók a $\frac{dQ}{dt} = -kQ$ egyenlettel, a felezési idő $T_{1/2}$ kiszámítható a sebesség konstansból (k) a következőképpen:

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0.693}{k}$$

Bonyolultabb rendszereknél, ahol az exponenciális kitevőt kísérleti adatokból határozzuk meg, a $0,693/k$ -nak nincs fiziológiai jelentése.

A **turnover idő** az az idő, amelyben kicserélődik egy kompartment anyagtartalma és a kompartmentben lévő anyag molekulájának átlagos élettartama. A fentiek alapján a turnover idő (T_i):

$$T_i = \frac{1}{k}$$

A turnover idő alatt nem minden molekula cserélődik ki. Minél tovább tart a megújulási folyamat, annál kevesebb "régi" molekula lesz az "újak" között és annál kisebb lesz a valószínűsége annak, hogy egy "régi" molekula átalakul, vagy eltávozik a rendszerből. A turnover idő alatt a "régi" molekulák 63%-a pótlódik.

Nyomjelzők

Egy rendszer kémiai analízise csak annak statikus állapotáról ad információt. Általában a rendszer különböző részeiben lévő anyagok koncentrációját, vagy a rendszer által felvett, vagy kiválasztott anyagok mennyiségét mérjük. Azért, hogy a rendszer kinetikáját is megvizsgálhassuk, meg kell jelölnünk anyagát. Ezt egy **nyomjelzővel** vihetjük végbe. A nyomjelzőnek jól mérhetőnek kell lennie, ugyanúgy kell viselkednie, mint a megfigyelt anyagnak és kinetikájuknak sem szabad különbözni.

A nyomjelző lehet egy elem izotópja, lehet radioaktív, vagy stabil. Ma már leggyakrabban izotópot használnak, ezért vizsgálatainkat elsősorban izotópusos nyomjelzős hígításra koncentrálnak. Természetesen eredményeink más nyomjelző vizsgálatok esetén is alkalmazhatók.

A nyomjelzővel szemben támasztott követelmények a következők:

1. A biológia rendszer ne tehesen különbséget a vizsgált anyag és nyomjelzője között, vagyis ugyanazon a metabolikus változásokon menjenek keresztül.
2. A nyomjelzőt olyan kis mennyiségben adhatjuk a rendszerhez, hogy annak állandósult állapotát ne zavarja meg. Ehhez megfelelően nagy koncentráció kell.
3. Kezdetben a rendszerhez adott nyomjelző nincs egyensúlyi állapotban és mennyiségi változásait matematikailag analizálhatjuk, az idő függvényében leírhatjuk. Ezek a változások tükrözzék a megfigyelt anyag transzfer és transzformációs sebességét.

4. Ha a nyomjelzo izotóp, ne cserélődjön ki a jelzett anyag és más anyagok között.
5. Az izotóp felezési ideje olyan hosszú legyen, hogy az állandó csökkenés ellenére a mérési értékek mindig elég nagyok legyenek.
6. A nyomjelzo nem okozhat a szervezetben abnormális anyagcsere reakciókat (sugáreffektus, koncentrációtartalom változás).

A nyomjelző mennyiségi változásait a vizsgált anyagon belüli koncentrációjával mérjük. Festékanyagoknál és a biológiai rendszerekben elő nem forduló anyagoknál ez közvetlenül történik. Rádioaktív nyomjezők rádióaktivitását mérjük.

Egy jelzett anyag **relatív specifikus aktivitása** az anyag egy adott időpontban mért specifikus aktivitásának aránya ugyanazon anyag egy más időpontban mért specifikus aktivitásához, vagy egy másik anyag ugyanazon időpontban mért specifikus aktivitásához. A stabil izotópok koncentrációját a nyomjelzo izotóp atomjai számának és a legnagyobb többségben lévő természetes izotóp atomjai számának arányával fejezzük ki. Ezért ezt **többségi arány**nak nevezzük. Ha ezt százalékosan írjuk le, akkor **atomszázalék** a neve. Néha a nyomjelzo lehet a vizsgált rendszerben eleve előforduló természetes izotóp. Ekkor a természetes koncentrációt kivonjuk a kísérleti koncentrációból és az eredményt **atomszázalék emelkedésben** írjuk le. Ezen eljárás jogosságát kísérleti tények igazolják. A természetben előforduló izotópok majdnem mindig állandó többségi arányban vannak jelen, tekintet nélkül a forrásra. A legtöbb rendszerben a gyógyszerek a nyomjelzőkhöz hasonlóan a lineáris kinetikát követik, ezért a nyomjelzo kinetika közvetlenül használható gyógyszerekre és bármilyen idegen anyagokra.

3. ALKALMAZOTT JELÖLÉSRENDSZER

A hasonló témával foglalkozó nemzetközi szakirodalommal összhangban egysége jelölésrendszert alkalmaztunk, ez a következő:

t	idő (független változó)
n	a rendszer kompartmentjeinek száma
Q_j	a j-edik kompartment anyagának mennyisége (tömeg)
q_j	a j-edik kompartment nyomjelzőjének mennyisége (tömeg)
$a_j = q_j / c_j$	a j-edik kompartmentben levő stabil izotópok többségi aránya, vagy a radioaktív nyomjelző specifikus aktivitása
$a_j / a_j(0)$	a j-edik kompartmentben lévő nyomjelző relatív specifikus aktivitása
k_{ij}	a j-edik kompartmentből az i-edikbe történő mozgás sebességi állandója (idő ⁻¹)
R_{ij}	a jelöletlen anyag transzportjának sebessége a j-edik kompartmentből az i-edikbe (tömeg x idő ⁻¹)
$q_j(0)$	a j-edik kompartment kezdeti nyomjelző mennyisége
$a_j(0)$	a j-edik kompartmentben lévő nyomjelző kezdeti specifikus aktivitása. A nyomjelző többségi arányát kifejezhetjük $a_j = q_j / Q_j$ alakban. Ha a nyomjelző radioaktív, akkor a specifikus aktivitás=(számlálási hatásfok)x(többségi arány), $a_j = E \frac{q_j}{Q_j}$.
X_i	az i-edik exponenciális kifejezés együtthatója
λ_i	az i-edik exponenciális kifejezés kitevője (idő ⁻¹)
s	Laplace-operátor
m	a mérési adatok száma
K	a becsült paraméterek száma
t_1, \dots, t_m	mintavételi időpontok (független változó)
y_1, \dots, y_m	mért adatok a t_1, \dots, t_m mintavételi időpontokban
$\hat{y}_1, \dots, \hat{y}_m$	becsült értékek a t_1, \dots, t_m mintavételi időpontokban
b_{10}, \dots, b_{k0}	a becsülni kívánt paraméterek kezdeti értékei

4. KOMPARTMENT (REKESZ) MODELLEK ELMÉLETE

Ebben a fejezetben a lineáris és nemlineáris kompartment rendszerek matematikai leírásával és azok analitikus megoldásával foglalkozunk.

4.1 Kompartment- (rekesz) modellek leírása állandósult állapotban levő rendszerek esetén

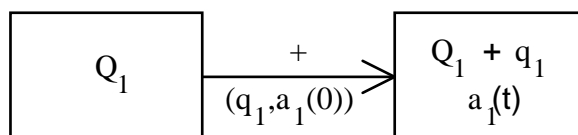
Az állandósult állapotban levő rendszerek lineárisak, a bennük zajló mozgásokat és átalakulásokat elsőrendű lineáris differenciál egyenletek írják le. A kompartmentekben lévő anyagmennyiség és turnover (forgási) sebesség állandó és a sebesség konstans teremt közöttük lineáris kapcsolatot. Állandósult állapotú kompartment rendszerek analízisének a következő feltételezésekkel élünk:

- a kinetikai folyamatok irreverzibilisek,
- a kompartment "régi" és "új" molekulái között nem teszünk különbséget,
- a kompartmentekben minden pillanatban homogén a molekulák eloszlása.

Feltételezzük, hogy a keveredési idő sokkal kisebb, mint a turnover idő, a nyomjelzők ideálisak, a rendszer viselkedésének leírásához a legkisebb számú kompartmentet használtuk fel, vagyis kevesebb kompartmenttel már nem lehet modellezni a rendszert. Ha egy rendszert nyomjelzővel vizsgálunk, akkor a következő lépéseket kell végrehajtanunk:

1. Ismert mennyiségű jelzőanyagot juttatunk a rendszer egy kompartmentjébe.
2. Megfelelő időnként mintát veszünk ebből és/vagy egy másik kompartmentből és meghatározzuk a specifikus aktivitást.
3. A rendszer elméleti és matematikai modelljének felhasználásával a kísérleti adatokból meghatározzuk a modell paramétereit.
4. Ha a modell nem megfelelő, egy újat választunk.

A nyomjelzős hígítási módszer elvét a 4.1. ábra mutatja.



4.1. ábra

A 4.1. ábrán látható kompartment Q_1 jelöletlen anyagot tartalmaz. Adjunk hozzá $a_1(0)$ specifikus aktivitású q_1 mennyiségű nyomjelzőt és várjuk meg, amíg elkeveredik. Ezután meghatározzuk a kompartment specifikus aktivitását. A nyomjelző kezdeti aktivitásának egyenlőnek kell lennie a kompartment keveredés utáni aktivitásával:

$$q_1 a_1(0) = (Q_1 + q_1) a_1(t) \quad (4.1)$$

Átrendezve:

$$Q_1 = q_1 \left(\frac{a_1(0)}{a_1(t)} - 1 \right) \quad (4.2)$$

Ha

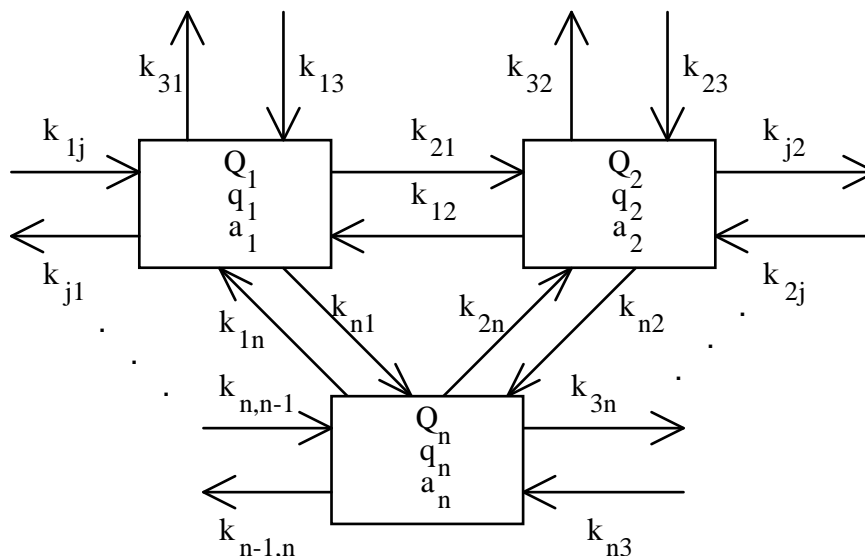
$$Q_1 \gg q_1$$

$$Q_1 = q_1 \frac{a_1(0)}{a_1(t)} \quad (4.3)$$

A (4.3) alapján a kompartment mennyisége vagy specifikus aktivitása számolható.

4.1.1 Zárt rendszerek

Vizsgáljunk meg egy n kompartmentből álló, dinamikus egyensúlyban lévő zárt rendszert. Az általánosság kedvéért feltételezzük, hogy minden kompartment minden kompartmenthez kapcsolódik és a rendszer nincs kapcsolatban a környezetével. Egy ilyen rendszert mutat a 4.2. ábra.



4.2. ábra

A rendszert a következő matematikai modellel tudjuk leírni:

$$\frac{dQ_1}{dt} = k_{12}Q_2 + k_{13}Q_3 + \dots + k_{1n}Q_n - k_{21}Q_1 - k_{31}Q_1 - \dots - k_{n1}Q_1$$

$$\vdots$$

$$\frac{dQ_n}{dt} = k_{n1}Q_1 + k_{n2}Q_2 + \dots + k_{n,n-1}Q_{n-1} - k_{1n}Q_n - k_{2n}Q_n - \dots - k_{n-1,n}Q_n \quad (4.4)$$

Itt k_{jj} természetesen nincs értelmezve, mert egy kompartment önmagával nem folytat anyagátvitelt.

A (4.4) egyenlet felírható:

$$\frac{dQ_i}{dt} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ij}Q_j - Q_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ji} \quad (4.5)$$

Mivel a rendszer állandósult állapotban van, a kompartmentekbe belépő és kilépő anyagok egyenlők, így

$$\frac{dQ_i}{dt} = 0$$

A nyomjelzőkre (4.5)-höz hasonló egyenlet írható fel:

$$\begin{aligned} \frac{dq_i}{dt} &= \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ij} q_j - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ji} q_i \\ \frac{dq_i}{dt} &= Q_i \frac{da_i}{dt} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Ez a (4.1) egyenletből és Q_i állandóságából következik. A (4.6) egyenlet tovább alakítva:

$$\frac{da_i}{dt} = \frac{1}{Q_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ij} a_j Q_j - a_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ji} \quad (4.7)$$

Mivel nyomjelzőt csak egy kompartmentbe juttattunk, ezért koncentrációja nincs állandósult állapotban

$$\frac{da_i}{dt} \neq 0$$

viszont a nyomjelző mennyisége a rendszer zártsága miatt állandó, ezért

$$\sum_{j=1}^n \frac{dq_j}{dt} = 0 \quad (4.8)$$

Tehát a rendszert leíró n egyenletből csak (n-1) független.

Legyen A_i Laplace-transzformáltja a_i -nek ($A_i = \mathcal{L}(a_i)$). Így a (4.7) egyenlet:

$$\begin{aligned} sA_1 - a_1(0) &= k_{12} \frac{Q_2}{Q_1} A_2 + k_{13} \frac{Q_3}{Q_1} A_3 + \dots + k_{1n} \frac{Q_n}{Q_1} A_n - A_1 \sum_{j=2}^n k_{j1} \\ &\vdots \\ sA_n - a_n(0) &= k_{n1} \frac{Q_1}{Q_n} A_1 + k_{n2} \frac{Q_2}{Q_n} A_2 + \dots + k_{n,n-1} \frac{Q_{n-1}}{Q_n} A_{n-1} - A_n \sum_{j=1}^{n-1} k_{jn} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Rendezve az egyenletet:

$$\begin{aligned} \left(s + \sum_{j=2}^n k_{j1} \right) A_1 - k_{12} \frac{Q_2}{Q_1} A_2 - \dots - k_{1n} \frac{Q_n}{Q_1} A_n &= a_1(0) \\ -k_{21} \frac{Q_1}{Q_2} A_1 + \left(s + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n k_{j2} \right) A_2 - \dots - k_{2n} \frac{Q_n}{Q_2} A_n &= a_2(0) \\ &\vdots \\ -k_{n1} \frac{Q_1}{Q_n} A_1 - k_{n2} \frac{Q_2}{Q_n} A_2 - \dots + \left(s + \sum_{j=1}^{n-1} k_{jn} \right) A_n &= a_n(0) \end{aligned} \quad (4.10)$$

Ezt az eredményt mátrixos alakban is leírhatjuk, ami egy sajátérték problémát eredményez.

$$\underline{\underline{I}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix} \quad \underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} \quad \underline{\underline{a}}(0) = \begin{bmatrix} a_1(0) \\ a_2(0) \\ \vdots \\ a_n(0) \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{Q}} = \begin{bmatrix} Q_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & Q_2 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & Q_n \end{bmatrix} \quad \underline{\underline{k}} = \begin{bmatrix} -k_{11} & k_{12} & \dots & k_{1n} \\ k_{21} & -k_{22} & \dots & k_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{n1} & k_{n2} & \dots & -k_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{\lambda}} = \begin{bmatrix} -\lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\lambda_2 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & -\lambda_n \end{bmatrix} \quad \underline{\underline{X}} = \begin{bmatrix} X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1n} \\ X_{21} & X_{22} & \dots & X_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n1} & X_{n2} & \dots & X_{nn} \end{bmatrix}$$

Mivel k_{ii} diagonál elemek nincsenek definiálva, legyen

$$k_{ii} = \sum_{j=1}^n k_{ji}$$

$$\Delta = \det(\underline{\underline{sI}} - \underline{\underline{k}})$$

$\Delta_{ij}(\underline{\underline{sI}} - \underline{\underline{k}})$ mátrix aldeterminánsának $(-1)^{i+j}$ -szerese $\Delta_{ij}^T = \text{adj}(\underline{\underline{sI}} - \underline{\underline{k}})$.

Tehát az ismert matematikai tétel alapján:

$$(\underline{\underline{sI}} - \underline{\underline{k}})^{-1} = \frac{\Delta_{ij}^T}{\Delta} \quad (4.11)$$

Így a (4.10) egyenlet felírható:

$$\underline{\underline{Q}}^{-1}(\underline{\underline{sI}} - \underline{\underline{k}})\underline{\underline{Q}}\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{a}}(0)$$

Tovább alakítva:

$$(\underline{\underline{sI}} - \underline{\underline{k}})\underline{\underline{Q}}\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{Q}}\underline{\underline{a}}(0)$$

$$\underline{\underline{Q}}\underline{\underline{A}} = (\underline{\underline{sI}} - \underline{\underline{k}})^{-1}\underline{\underline{Q}}\underline{\underline{a}}(0) \quad (4.12)$$

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{Q}}^{-1}(\underline{\underline{sI}} - \underline{\underline{k}})^{-1}\underline{\underline{Q}}\underline{\underline{a}}(0)$$

(4.11)-et behelyettesítve $\underline{\underline{A}}$ egy eleme

$$A_j = \sum_{i=1}^n \frac{\Delta_{ij}}{\Delta} \frac{Q_i}{Q_j} a_i(0) \quad (4.13)$$

Bebizonyítható, hogy $\Delta = 0$ egyenletnek n valós negatív gyöke van és $-\lambda_1 > -\lambda_2 > \dots > -\lambda_n$ sorba állíthatók, ahol $-\lambda_1 = 0$.

Így (4.13)-at felbonthatjuk

$$A_j = \sum_{i=1}^n \frac{X_{ji}}{(s + \lambda_i)} \quad (4.14)$$

alakban. Ennek inverz Laplace-transzformáltja adja

$$a_j = \sum_{i=1}^n X_{ji} e^{-\lambda_i t} \quad (4.15)$$

$\underline{\underline{X}}$ és $\underline{\underline{\lambda}}$ a kísérleti adatokból számítható valamelyik később ismerttetett görbeillesztő eljárással. Éppen ez az eljárás az oka, hogy többszörös gyök általában nem fordul elő, mert az eljárás ilyen gyököket nem tud szétválasztani. Ha (4.15)-öt (4.17)-be helyettesítjük, n2 egyenletet kapunk.

$$\begin{aligned} X_{1i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ji} - \frac{Q_2}{Q_1} k_{12} X_{2i} - \frac{Q_3}{Q_1} k_{13} X_{3i} - \dots - \frac{Q_n}{Q_1} k_{1n} X_{ni} &= \lambda_i X_{1i} \\ \vdots & \\ -\frac{Q_1}{Q_n} k_{n1} X_{1i} - \frac{Q_2}{Q_n} k_{n2} X_{2i} - \frac{Q_3}{Q_n} k_{n3} X_{3i} - \dots + X_{ni} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{jn} &= \lambda_i X_{ni} \end{aligned} \quad (4.16)$$

ahol $i = 1, 2 \dots n$. (Tulajdonképpen nem tettünk mást, mint behelyettesítettük a sajátértéket és sajátvektort a sajátérték feladatba.) A (4.16) mátrixos alakban

$$\underline{\underline{Q}}^{-1} \underline{\underline{k}} \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{X}} = \underline{\underline{X}} \underline{\underline{\lambda}}$$

$\underline{\underline{k}}$ -ra megoldva

$$\begin{aligned} \underline{\underline{k}} \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{X}} &= \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{X}} \underline{\underline{\lambda}} \\ \underline{\underline{k}} \underline{\underline{Q}} &= \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{X}} \underline{\underline{\lambda}} \underline{\underline{X}}^{-1} \\ \underline{\underline{k}} &= \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{X}} \underline{\underline{\lambda}} \underline{\underline{X}}^{-1} \underline{\underline{Q}}^{-1} \end{aligned}$$

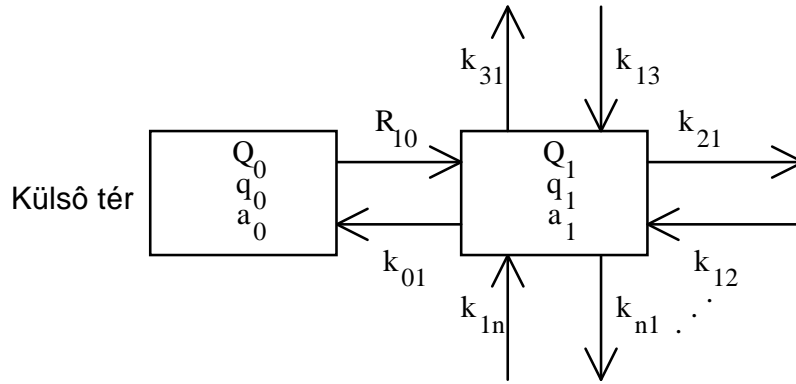
Legyen $\Delta_x = \det(\underline{\underline{X}})$, Δ_{ji}^x pedig $\underline{\underline{X}}$ aldeterminánsának $(-1)^{j+i}$ -szerese. Így $\underline{\underline{k}}$ egy eleme:

$$k_{ij} = \frac{Q_i}{Q_j} \sum_{l=1}^n X_{il} \lambda_l \frac{\Delta_{jl}^x}{\Delta_x} \quad (4.17)$$

Mivel $\underline{\underline{X}}$ és $\underline{\underline{\lambda}}$ a kísérletek kiértékelésénél, $\underline{\underline{Q}}$ pedig az izotóphígításnál látott (4.3) egyenletből adódik, így $\underline{\underline{k}}$ meghatározható (4.17)-ből.

4.1.2 Nyitott rendszerek

Ebben az esetben a rendszert a 4.3. ábrán látható modell jellemzi. Minden kompartment kapcsolatban van a külső térrel. Az anyag R_{i0} ($i = 1, 2 \dots n$) áramlási sebességgel lép be és nyomjelzőt nem tartalmaz. A nyomjelzőt valamelyik kompartmenthez kezdetben adtuk és most k_{0i} sebességi állandóval hagyja el a rendszert.



4.3. ábra

A matematikai modell:

$$\frac{dQ_i}{dt} = R_{i0} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ij} Q_j + Q_i \sum_{\substack{l=0 \\ l \neq i}}^n k_{li} \quad (4.18)$$

(4.6)-hoz hasonlóan:

$$\frac{dq_i}{dt} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ij} q_j - q_i \sum_{\substack{l=0 \\ l \neq i}}^n k_{li} \quad (4.19)$$

(4.7) pedig ez alapján

$$\frac{da_i}{dt} = \frac{1}{Q_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ij} a_j Q_j - a_i \sum_{\substack{l=0 \\ l \neq i}}^n k_{li} \quad (4.20)$$

Mivel a nyomjelző most elhagyhatja a rendszert, (4.8) már nem igaz

$$\sum_{j=1}^n \frac{dq_j}{dt} \neq 0 \quad (4.21)$$

Ezután a megoldás megegyezik az előző fejezetével, azzal a módosítással, hogy

$$k_{ii} = \sum_{\substack{l=0 \\ l \neq i}}^n k_{li} \quad (4.22)$$

és ezért λ_i nem lesz nullával egyenlő.

Néha előfordul, hogy csak a rendszer teljes anyagára vonatkozó méréseket tudunk végrehajtani. Ilyenkor a nyomjelző teljes anyagára a $\sum_{i=1}^n q_i$ függvényt kapjuk ,melyet a *rendszer kimosási függvényének* nevezünk. A függvény idő szerinti deriváltja a *rendszer kimeneti jelgörbéje*.

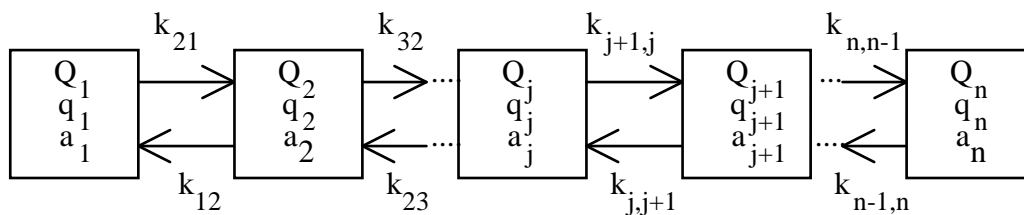
4.1.3 Speciális esetek

A fentiekben ismertettük, hogy miképpen határozzuk meg \underline{k} -t zárt és nyitott rendszer esetén. A gyakorlatban a \underline{k} mátrix sokszor egyszerűbb alakú lesz. Ilyenkor a megoldás leegyszerűsödik.

1. Állhat a rendszer több egymástól elkülönült alrendszerből. Ezek a modellből felismerhetők és a kompartmentek úgy számozhatók, hogy a \underline{k} mátrix a főátlójamenti négyzetes mátrixokból álljon. Ilyenkor a differenciál egyenlet több alrendszerre esik szét.
2. *Szeparálható rendszernek* nevezzük a rendszert, ha $/1/$, $/2/$... $/k/$ alrendszerre bontható úgy, hogy $/1/$ -nek nincs bemenete $/2/$, $/3/$... $/k/$ -ből, $/2/$ -nek $/3/$, $/4/$... $/k/$ -ből, de $/1/$ -ből lehet bemenet, $/3/$ -nak csak $/1/$ és $/2/$ -ből lehet bemenete és így tovább.
Így $/1/$ önálló alrendszer lesz, önállóan megoldható, megoldásai a többi alrendszerre bemenetként hatnak. Így $/2/$ is megoldható most már a többitől függetlenül és így tovább.
3. A *gyűjtő rendszer* olyan kompartment alrendszer, amelynek a rendszer többi részéből van bemenete, de egyetlen kompartmentjének sincs kimenete külső kompartmenthez.
Ez természetesen egyetlen kompartmentből is állhat, melynek *gyűjtő kompartment* a neve. Ha egy rendszerben van egy gyűjtő, akkor van egy zérus sajátértéke. Az állítás fordítva is igaz. Ha van egy zérus sajátérték, akkor a rendszernek van gyűjtője, vagy az egész rendszer gyűjtő, tehát zárt. A zérus sajátérték és a gyűjtő kapcsolata szemléletből is belátható. Ha egy sajátérték kicsi, az azt jelenti, hogy az alrendszer tároló jellegű, kimeneti átvitele a rendszer többi részéhez viszonyítva lassú. A továbbiakban két esettel - gyakorlati jelentősége miatt - részletesebben foglalkozunk.

4.1.3.1 Lánc rendszer

Ha egy rendszert úgy rendezünk el, hogy minden kompartmentnek csak a szomszédjával van kapcsolata, lánc rendszert kapunk. Ilyet ábrázol a 4.4. ábra.



4.4. ábra

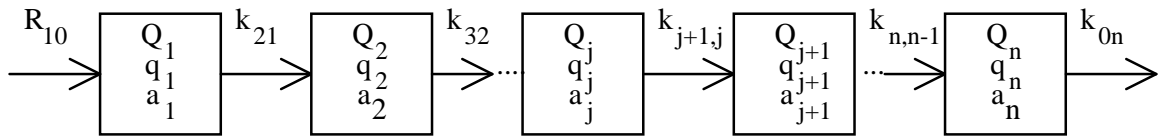
A \underline{k} mátrix ilyenkor a következő alakú lesz:

$$\underline{k} = \begin{bmatrix} -k_{21} & k_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ -k_{21} & -(k_{12} + k_{32}) & k_{23} & \cdots & 0 \\ 0 & k_{32} & -(k_{23} + k_{43}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -(k_{n-1,n} + k_{0n}) \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

(4.16) így alakul ebben az esetben:

$$\begin{aligned}
 k_{21}X_{1i} - \frac{Q_2}{Q_1}k_{12}X_{2i} &= \lambda_i X_{1i} \\
 -\frac{Q_1}{Q_2}k_{21}X_{1i} + (k_{12} + k_{32})X_{2i} - \frac{Q_3}{Q_2}k_{23}X_{3i} &= \lambda_i X_{2i} \\
 -\frac{Q_2}{Q_3}k_{32}X_{2i} + (k_{23} + k_{43})X_{3i} - \frac{Q_4}{Q_3}k_{34}X_{4i} &= \lambda_i X_{3i} \\
 &\vdots \\
 -\frac{Q_{n-1}}{Q_n}k_{n,n-1}X_{n-1,i} + (k_{0n} + k_{n-1,n})X_{ni} &= \lambda_i X_{ni}
 \end{aligned} \tag{ 4.24 }$$

Látható, hogy bár az egyenletrendszer egyszerűbb lett, az ismeretlenek meghatározása most sem könnyű feladat. Sokkal egyszerűbb a megoldás arra az esetre, mikor egy kompartment csak az őt követőnek szállít anyagot, mint a 4.5. ábrán, tehát $k_{11} = k_{21}$, $k_{22} = k_{32}$, ... $k_{nn} = k_{0n}$.



4.5. ábra

Ilyenkor az első kompartmentbe szokták a nyomjelzőt fecskendezni, ezért $a_1(0) \neq 0$ és $a_2(0) = a_3(0) = \dots = a_n(0) = 0$.

$sI - k$ leegyszerűsödik:

$$sI - k = \begin{bmatrix} (s + k_{21}) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -k_{21} & (s + k_{32}) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -k_{32} & (s + k_{43}) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & (s + k_{0n}) \end{bmatrix} \tag{ 4.25 }$$

$$\Delta = (s + k_{21})(s + k_{32})(s + k_{43}) \dots (s + k_{0n})$$

$$\Delta_{11} = (s + k_{32})(s + k_{43}) \dots (s + k_{0n})$$

$$\Delta_{12} = -[-k_{21}(s + k_{43}) \dots (s + k_{0n})]$$

$$\Delta_{13} = k_{21}k_{32}(s + k_{43}) \dots (s + k_{0n})$$

M

$$\Delta_{1n} = (-1)^{1+n}(-k_{21})(-k_{32})(-k_{43}) \dots (-k_{0n})$$

Így A_i (4.13) kifejezésébe helyettesítve:

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \frac{1}{(s + k_{21})} a_1(0) \\
 A_2 &= \frac{k_{21}}{(s + k_{21})(s + k_{32})} \frac{Q_1}{Q_2} a_1(0)
 \end{aligned} \tag{ 4.26 }$$

Az első kompartmentból mintát véve Q_1 és k_{21} számítható. A második kompartment még ismeretlen k_{32} , Q_2 -je ezek után szintén meghatározható és az eljárást így folytathatjuk tovább.

4.1.3.2 Mammillary (anya) rendszer

Ez a rendszer egy központi kompartmentet tartalmaz, melyet a többi körülvesz. Anyagcsere csak a központi és szélső kompartmentek között folyik.

A 4.6. ábrán látható az n kompartmentből álló zárt mamillary rendszer elméleti modellje. Ezt a rendszert gyakran használják a csak szövetközi térbe és nem a szervek sejt-terébe bejutó anyag eloszlása kinetikájának vizsgálatára.

A nyomjelzőt csak a központi kompartmentbe szokták fecskendezni. $a_1(0) \neq 0$ és $a_2(0) = a_3(0) = \dots = a_n(0) = 0$.

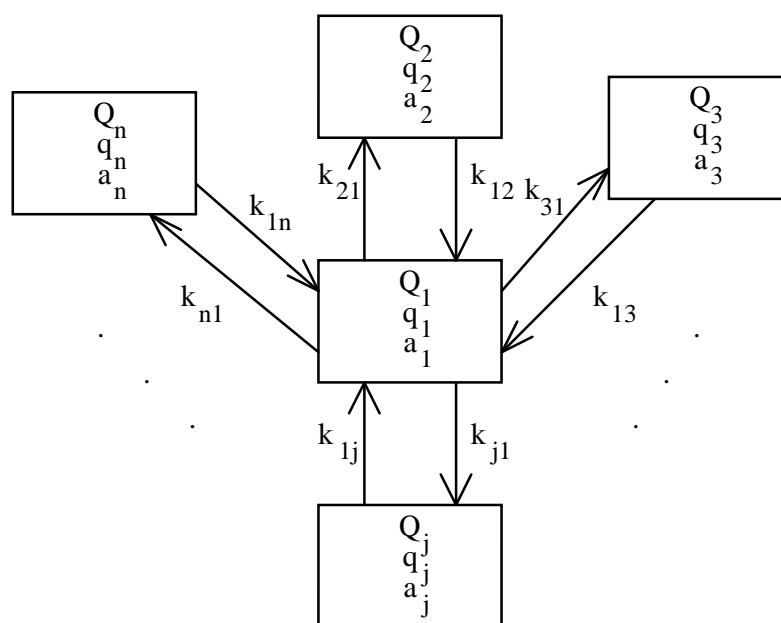
Így a (4.13) egyenlet:

$$A_j = \frac{\Delta_{1j}}{\Delta} \frac{Q_1}{Q_j} a_1(0) \quad (4.27)$$

Ebben az esetben mind a központi, mind az n körülvevő kompartmentek egy konstans és $(n-1)$ exponenciális kifejezést tartalmaznak.

A rendszert leíró \underline{A} , $\underline{a}(0)$, \underline{Q} és $\underline{\lambda}$ mátrixok nem változnak, viszont \underline{k} egyszerűbb lesz.

$$\underline{k} = \begin{bmatrix} -k_{21} & k_{12} & k_{13} & \dots & k_{1n} \\ k_{21} & -k_{12} & 0 & \dots & 0 \\ k_{31} & 0 & -k_{13} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{n1} & 0 & 0 & \dots & -k_{1n} \end{bmatrix} \quad (4.28)$$



4.6. ábra

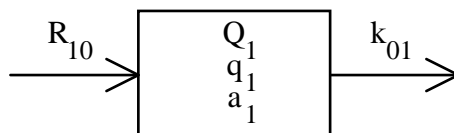
Ezek után vizsgáljuk meg a gyakorlatban leginkább előforduló eseteket.

4.2 Néhány gyakorlati eset vizsgálata

Következőekben olyan kompartment-rendszereket mutatunk be, amelyek viszonylag egyszerűek, gyakorlati jelentőségük nagy. Ezek az egy-, két- és három-kompartment rendszerek és azok speciális esetei. Foglalkozunk továbbá az inhomogenitás kérdésével is.

4.2.1 Egy-kompartment rendszer

Az elméleti modell a 4.7. ábrán látható:



4.7. ábra

A rendszer viselkedését a

$$\frac{dQ_1}{dt} = R_{10} - k_{01}Q_1 \quad (4.29)$$

differenciál egyenlet írja le.

A rendszer állandósult állapotban van, ezért:

$$\frac{dQ_1}{dt} = 0 \quad \text{és} \quad R_{10} = k_{01}Q_1 \quad (4.30)$$

A rendszerbe $t = 0$ -ban fecskendezett jelzőanyag viselkedését a következő egyenletek írják le:

$$\begin{aligned} \frac{dq_1}{dt} &= -k_{01}q_1 \\ Q_1 \frac{da_1}{dt} &= -k_{01}a_1Q_1 \end{aligned} \quad (4.31)$$

Átrendezve és integrálva:

$$\begin{aligned} -k_{01} \int_0^t dt &= \int_{a_1(0)}^{a_1} \frac{da_1}{a_1} \\ -k_{01}t &= \ln a_1 - \ln a_1(0) = \ln \left(\frac{a_1}{a_1(0)} \right) \\ a_1 &= a_1(0)e^{-k_{01}t} \end{aligned} \quad (4.32)$$

Vegyük ennek tízes alapú logaritmusát:

$$\lg a_1 = \lg a_1(0) - 0,4343k_{01}t$$

Tehát, ha adatokat féllogaritmikus papíron ábrázoljuk, egyenest kapunk, melynek meredeksége:

$$\frac{-(\lg a_1(t_1) - \lg a_1(t_2))}{(t_2 - t_1)} \quad (4.33)$$

Ezek után a keresett értékek könnyen számíthatók:

$$k_{01} = \frac{-\text{meredekség}}{0,4343}$$

az y tengellyel való metszéspontja adja a kezdeti specifikus aktivitás értéket ($a_1(0)$).

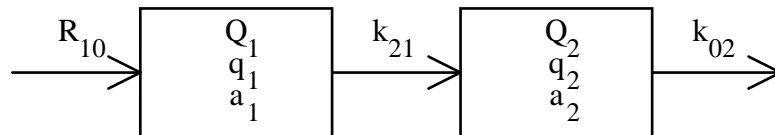
Az izotóphígítás elve alapján

$$Q_1 = \frac{a_T q_T}{a_1(0)} \quad (4.34)$$

ahol q_T a nyomjelző mennyisége és a_T a specifikus aktivitása volt a befecskendezés előtt.

4.2.2 Két-kompartment lánc rendszer

Az elméleti modell:



4.8. ábra

A rendszert leíró differenciál egyenletek:

$$\begin{aligned} \frac{dq_1}{dt} &= -k_{21}q_1 \\ \frac{dq_2}{dt} &= -k_{21}q_1 - k_{02}q_2 \end{aligned} \quad (4.35)$$

illetve

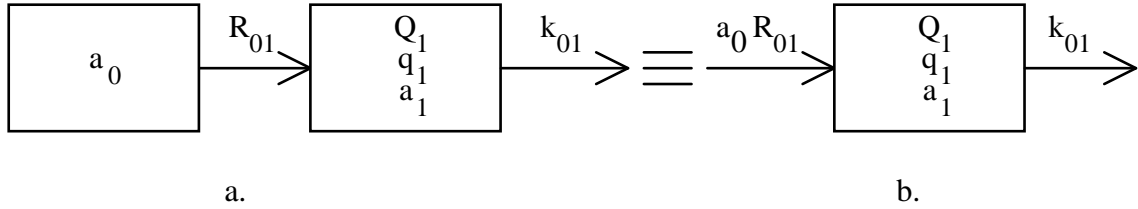
$$\begin{aligned} \frac{da_1}{dt} &= -k_{21}a_1 \\ \frac{da_2}{dt} &= -k_{21} \frac{Q_1}{Q_2} a_1 - k_{02}a_2 \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} a_1 &= a_1(0)e^{-k_{21}t} \\ a_2 &= \frac{k_{21}a_1(0)Q_1}{(k_{21} - k_{02})Q_2} (e^{-k_{02}t} - e^{-k_{21}t}) \end{aligned} \quad (4.37)$$

$a_1(0)$, Q_1 és k_{21} az előző fejezet eljárásával számítható. k_{02} és k_{21} egy később ismertetett görbe analízis eljárással nyerhető. Q_2 -t ezek után könnyen megkaphatjuk a_2 kifejezéséből.

4.2.3 Egy-kompartment rendszer, melynek bemenete állandó forrás

A 4.9.a. ábrán látható az elméleti modell:



4.9. ábra

A differenciál egyenlet, mely ezt a rendszert jellemzi, leírja az állandó infúzió esetét is. Az állandó infúziót a 4.9.b. ábra mutatja.

Tehát a két rendszert leírhatjuk a következő egyenletekkel:

$$\frac{dQ_1}{dt} = R_{10} - k_{01}Q_1 \quad (4.38)$$

Állandósult állapotban: $R_{10} = k_{01}Q_1$.

Jelzőanyagra:
$$\frac{dq_1}{dt} = R_{10}a_0 - q_1k_{01} \quad (4.39)$$

Átírva:
$$\frac{da_1}{dt} = k_{01}(a_0 - a_1) \quad (4.40)$$

A (4.40) egyenletet megkaphatjuk Laplace-transzformációval, de egyszerűbb, ha az előző fejezet speciális esetének tekintjük. Ekkor a rendszer olyan két-kompartment rendszer, ahol a 0. kompartment végtelen.

Ez alapján:

$$a_1 = \frac{k_{10}Q_0a_0}{(k_{10} - k_{01})}(e^{-k_{01}t} - e^{-k_{10}t}) \quad (4.41)$$

Az első kompartment állandósult állapota miatt:

$$k_{10}Q_0 = k_{01}Q_1$$

Így

$$a_1 = \frac{k_{01}a_0}{(k_{10} - k_{01})}(e^{-k_{01}t} - e^{-k_{10}t}) \quad (4.42)$$

Ha $Q_0 \rightarrow \infty$ és $k_{10} \rightarrow 0$

$$a_1 = a_0(1 - e^{-k_{01}t}) \quad (4.43)$$

$$\left(1 - \frac{a_1}{a_0}\right) = e^{-k_{01}t}$$

$\lim_{t \rightarrow \infty} a_1(t) = a_0$. Tehát ha $\left(1 - \frac{a_1}{a_1(\infty)}\right)$ kifejezést ábrázoljuk féllogaritmikus papíron, akkor

a paramétereket az előző módszerrel megállapíthatjuk. Használhatóbb módszer később kerül ismertetésre.

4.2.4 Többszörös dózis

A nyomjelzőt n egyenlő dózisban t egyenlő időközönként adjuk egy egy-kompartment rendszerbe. Egy-egy dózis nem zavarhatja meg az egyensúlyi állapotot.

A rendszerre, a nyomjelzők beadása közötti időtartamban, igaz az egy-kompartmentre korábban felírt differenciál egyenlet, vagyis

$$\frac{dq_1}{dt} = -k_{01}q_1 \quad (4.44)$$

$t = 0$ -ban $a_1(0)$ specifikus aktivitású nyomjelzőt juttatunk a rendszerbe. t_1 -ben a specifikus aktivitása a következő:

$$a_1(t_1) = a_1(0)e^{-k_{01}t} \quad (4.45)$$

Ekkor újabb dózist adunk be. A specifikus aktivitás nagyon kis idő (δt) múlva:

$$a_1(t_1 + \delta t) = a_1(0)(1 + e^{-k_{01}t}) \quad (4.46)$$

Egy újabb intervallum elteltével:

$$a_1(t_2) = a_1(0)(1 + e^{-k_{01}t})e^{-k_{01}t} \quad (4.47)$$

A harmadik befecskendezés után:

$$\begin{aligned} a_1(t_2 + \delta t) &= a_1(0)(1 + e^{-k_{01}t})e^{-k_{01}t} + a_1(0) = \\ &= a_1(0)(1 + e^{-k_{01}t} + e^{-2k_{01}t}) \end{aligned} \quad (4.48)$$

Az n -edik befecskendezés után:

$$\begin{aligned} a_1(t_{n-1} + \delta t) &= a_1(0)(1 + e^{-k_{01}t} + e^{-2k_{01}t} + \dots + e^{-(n-1)k_{01}t}) = \\ &= \frac{a_1(0)(1 - e^{-nk_{01}t})}{(1 - e^{-k_{01}t})} \end{aligned} \quad (4.49)$$

Ha $n \rightarrow \infty$ befecskendezés után:

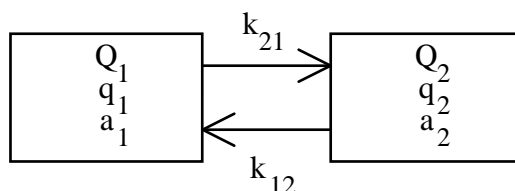
$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_1(t) = \frac{a_1(0)}{(1 - e^{-k_{01}t})} \quad (4.50)$$

A hatásmechanizmus a 4.10. ábrán jól követhető.

4.10. ábra

4.2.5 Két-kompartment zárt rendszer

Az elméleti modell a 4.11. ábrán látható:



4.11. ábra

A matematikai modell:

$$\begin{aligned}\frac{dQ_1}{dt} &= k_{12}Q_2 - k_{21}Q_1 = 0 \\ \frac{dQ_2}{dt} &= k_{21}Q_1 - k_{12}Q_2 = 0\end{aligned}\quad (4.51)$$

A nyomjelzőkre ($q_1 + q_2 = \text{állandó}$):

$$\begin{aligned}\frac{dq_1}{dt} &= k_{12}q_2 - k_{21}q_1 \\ \frac{dq_2}{dt} &= k_{21}q_1 - k_{12}q_2\end{aligned}\quad (4.52)$$

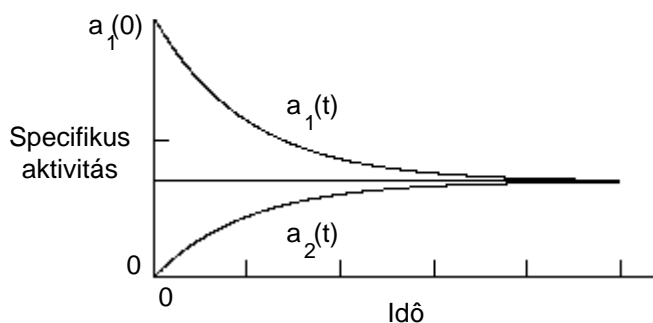
A specifikus aktivitásokra:

$$\begin{aligned}\frac{da_1}{dt} &= k_{12}a_2 \frac{Q_2}{Q_1} - k_{21}a_1 \\ \frac{da_2}{dt} &= k_{21}a_1 \frac{Q_1}{Q_2} - k_{12}a_2\end{aligned}\quad (4.53)$$

A megoldás például Laplace-transzformációval történhet. Ha Q_1 -be fecskendezünk $t = 0$ -ban nyomjelzőt, a (4.53) egyenletek megoldása a következő:

$$\begin{aligned}a_1 &= \frac{k_{12}a_1(0)}{(k_{21} + k_{12})} + \frac{k_{21}a_1(0)}{(k_{21} + k_{12})} e^{-(k_{21} + k_{12})t} = X_0 + X_1 e^{-\lambda t} \\ a_2 &= \frac{k_{12}a_1(0)}{(k_{21} + k_{12})} (1 - e^{-(k_{21} + k_{12})t}) = X_0 (1 - e^{-\lambda t})\end{aligned}\quad (4.54)$$

a_1 és a_2 képét a 4.12. ábra mutatja.



4.12. ábra

Q_1 , Q_2 , k_{12} és k_{21} -et többféle módon határozhatjuk meg: vagy az ún. Bleehan-Fisher módszerével, vagy X_0 -át és X_1 -et valamilyen görbeillesztéssel meghatározzuk és Q_1 -re felírjuk az izotóphígítás alapegyenletét. Egy harmadik módszert is ismertetünk, e szerint:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} a_1(t) = X_0$$

Ezért (4.54)-et átrendezve:

$$\frac{a_1}{a_1(\infty)} - 1 = \frac{X_1}{X_0} e^{-\lambda t} \quad (4.55)$$

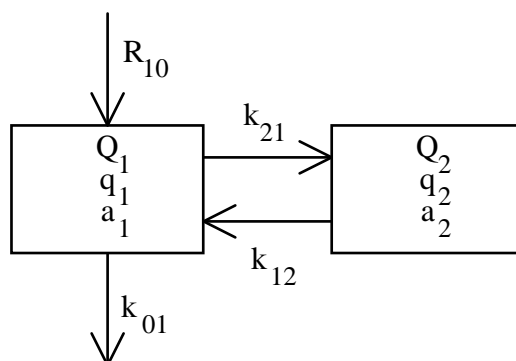
A (4.55) egyenletet féllogaritmikus papíron ábrázoljuk és a paramétereket az egyenesből meghatározzuk. Ez azonban egy hosszabb kísérletsorozatnál rendkívül bonyodalmass, fáradságos kiértékelési módszer.

4.2.6 Két-kompartment nyitott rendszer

A rendszer elméleti modellje a 4.13. ábrán látható.

A rendszer differenciál egyenlete:

$$\begin{aligned} \frac{dq_1}{dt} &= k_{12}q_2 - k_{21}q_1 - k_{01}a_1 \\ \frac{dq_2}{dt} &= k_{21}q_1 - k_{12}q_2 \end{aligned} \quad (4.56)$$



4.13. ábra

A specifikus aktivitásokkal felírva:

$$\begin{aligned} \frac{da_1}{dt} &= k_{12}a_2 \frac{Q_2}{Q_1} - k_{21}a_1 - k_{01}a_1 \\ \frac{da_2}{dt} &= k_{21}a_1 \frac{Q_1}{Q_2} - k_{12}a_2 \end{aligned} \quad (4.57)$$

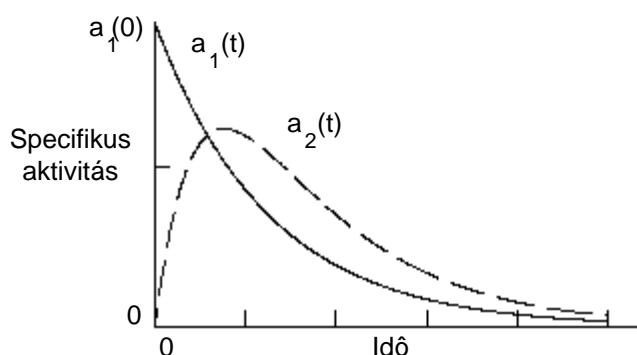
Ha az 1. kompartmentbe juttattuk a nyomjelzőt, a fenti egyenletek megoldása a következő lesz:

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{a_1(0)}{(\lambda_1 - \lambda_2)} \left((\lambda_1 - k_{12})e^{-\lambda_1 t} + (k_{12} - \lambda_2)e^{-\lambda_2 t} \right) \\ a_2 &= \frac{a_1(0)k_{21}Q_1}{(\lambda_1 - \lambda_2)Q_2} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}) \\ -\lambda_{1,2} &= \frac{-(k_{12} + k_{21} + k_{01}) \pm \sqrt{(k_{12} + k_{21} + k_{01})^2 - 4k_{01}k_{12}}}{2} \end{aligned} \quad (4.58)$$

Az egyenleteket leírhatjuk

$$\begin{aligned} a_1 &= X_1 e^{-\lambda_1 t} + X_2 e^{-\lambda_2 t} \\ a_2 &= X_3 e^{-\lambda_1 t} + X_4 e^{-\lambda_2 t} \end{aligned} \quad (4.59)$$

formában is. A specifikus aktivitás-idő függvényt a 4.14. ábrán követhetjük. A paramétereket a görbe analízis segítségével határozhatjuk meg.

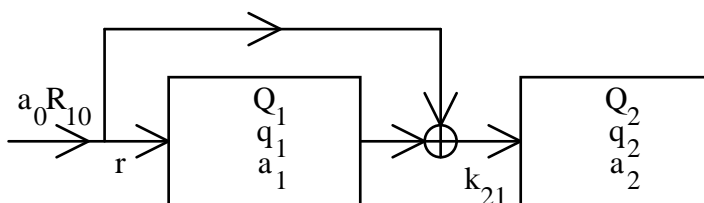


4.14. ábra

4.2.7 Kompartmentcsatolások

4.2.7.1 Előreccsatolás

Elképzelhetô, hogy egy kompartmentbe nem kerül be a felé irányuló összes anyag, hanem egy része kikerüli, és a kompartment után egyesül ismét a kiáramló anyaggal. Ilyenkor előreccsatolásról beszélünk, mint azt a 4.15. ábra is mutatja.



4.15. ábra

Vizsgáljuk meg, hogy egy előreccsatolt tag hogyan változtatja meg az ô követô - például egy gyújtó kompartment - bemenetét. A bemenet legyen állandó infúzió és ennek r -szerese jut az elsô kompartmentbe.

Így

$$\frac{dq_1}{dt} = rR_{10}a_0 - q_1k_{21} \quad (4.60)$$

Megoldva a (4.60) egyenletet:

$$q_1 = \frac{rR_{10}a_0}{k_{21}}(1 - e^{-k_{21}t}) \quad (4.61)$$

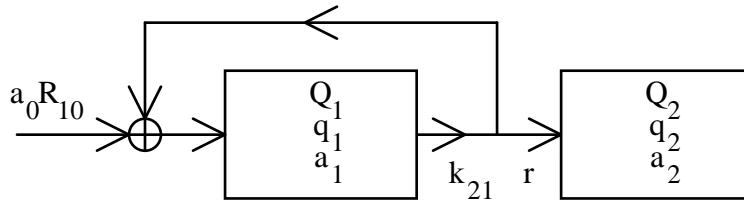
A másik ágon az előrecsatolás nem változtatja meg az anyag menetét. Így a következő kompartment bemenete:

$$\frac{dq_1}{dt} = k_{21} \frac{rR_{10}a_0}{k_{21}}(1 - e^{-k_{21}t}) + (1-r)R_{10}a_0 \quad (4.62)$$

$$\frac{dq_1}{dt} = R_{10}a_0 - rR_{10}a_0e^{-k_{21}t} \quad (4.63)$$

4.2.7.2 Visszacsatolás

Az elméleti modellt a 4.16. ábrán láthatjuk:



4.16. ábra

Az első kompartmentet a következő differenciál egyenlet írja le:

$$\frac{dq_1}{dt} = a_0 R_{10} + (1-r)k_{21}q_1 - k_{21}q_1 \quad (4.64)$$

$$\frac{dq_1}{dt} = a_0 R_{10} - rk_{21}q_1 \quad (4.65)$$

Ennek megoldása az előzőkhöz hasonlóan:

$$q_1 = \frac{R_{10}a_0}{rk_{21}}(1 - e^{-rk_{21}t}) \quad (4.66)$$

Kérdés: milyen hatással van ez a következő kompartmentre? Írjuk fel ennek a differenciál egyenletét.

$$\frac{dq_2}{dt} = rk_{21} \frac{R_{10}a_0}{rk_{21}}(1 - e^{-rk_{21}t}) \quad (4.67)$$

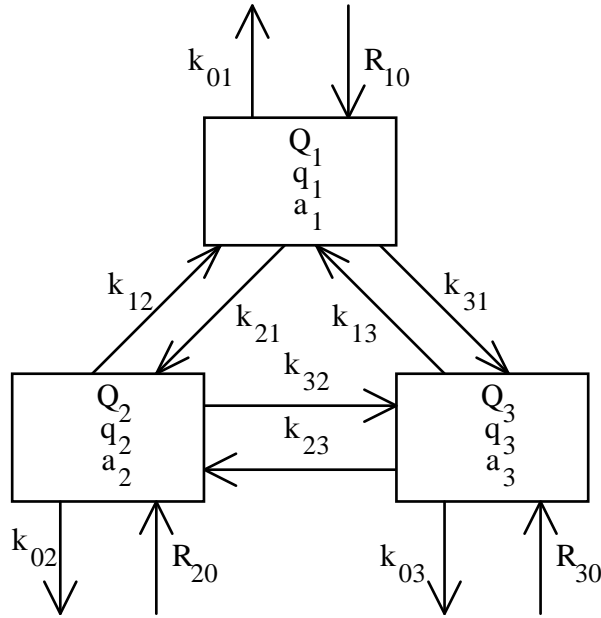
$$\frac{dq_2}{dt} = R_{10}a_0(1 - e^{-rk_{21}t}) \quad (4.68)$$

A visszacsatolás tehát megváltoztatja a görbe időállandóját is. A visszacsatolás miatt az anyag jobban keveredik a kompartmentben. Lényegében úgy képzelhetjük el az egész folyamatot, mintha egy belső "keverő készülék" adtunk volna a rendszerhez.

Kompartmenteket párhuzamosan is csatolhatunk. Ekkor kimenetük összeadódik és két exponenciális görbe összege lesz.

4.2.8 Három-kompartment rendszerek

Vizsgáljuk meg a 4.17. ábrán látható három-kompartment rendszert.



4.17. ábra

$$\begin{aligned}\frac{dq_1}{dt} &= -(k_{01} + k_{21} + k_{31})q_1 + k_{12}q_2 + k_{13}q_3 \\ \frac{dq_2}{dt} &= k_{21}q_1 - (k_{02} + k_{12} + k_{32})q_2 + k_{23}q_3 \\ \frac{dq_3}{dt} &= k_{31}q_1 + k_{32}q_2 - (k_{03} + k_{13} + k_{23})q_3\end{aligned}\quad (4.69)$$

Illetve:

$$\begin{aligned}\frac{da_1}{dt} &= -(k_{01} + k_{21} + k_{31})a_1 + k_{12}\frac{Q_2}{Q_1}a_2 + k_{13}\frac{Q_3}{Q_1}a_3 \\ \frac{da_2}{dt} &= k_{21}\frac{Q_1}{Q_2}a_1 - (k_{02} + k_{12} + k_{32})a_2 + k_{23}\frac{Q_3}{Q_2}a_3 \\ \frac{da_3}{dt} &= k_{31}\frac{Q_1}{Q_3}a_1 + k_{32}\frac{Q_2}{Q_3}a_2 - (k_{03} + k_{13} + k_{23})a_3\end{aligned}\quad (4.70)$$

A karakterisztikus polinom:

$$0 = \begin{bmatrix} (k_{01} + k_{21} + k_{31} + s) & -k_{12} & -k_{13} \\ -k_{21} & (k_{02} + k_{12} + k_{32} + s) & -k_{23} \\ -k_{31} & -k_{32} & (k_{03} + k_{13} + k_{23} + s) \end{bmatrix}\quad (4.71)$$

Ennek gyökei a rendszer sajátértékei.

Vizsgáljuk meg a legfontosabb speciális eseteket.

4.2.8.1 Zárt rendszer

Ha $k_{01} = k_{02} = k_{03} = 0$, a (4.71) egyenlet a következő alakra egyszerűsödik:

$$s^3 + s^2(k_{12} + k_{13} + k_{21} + k_{23} + k_{31} + k_{32}) + s[k_{13}(k_{21} + k_{12} + k_{32}) + k_{21}(k_{23} + k_{32}) + k_{31}(k_{23} + k_{12} + k_{32}) + k_{12}k_{23}] = 0 \quad (4.72)$$

A sajátértékek: zérus és a (4.72) megmaradó másodfokú kifejezésének gyökei.

4.2.8.2 Nyitott rendszer

Tételezzük fel, hogy a (4.71) egyenletben minden $k_{ij} = 1$. Ekkor a karakterisztikus polinom a következő:

$$s^3 + 9s^2 + 24s + 16 = 0 \quad (4.73)$$

A sajátértékek $-\lambda_1 = -1$, $-\lambda_2 = -4$ és $-\lambda_3 = -4$, vagyis $-\lambda = -4$ gyök multiplicitása kettő. Annak ellenére, hogy ez egy három-kompartment rendszer, csak két különböző bomlási konstans van.

4.2.8.3 Lánc rendszer

Lánc rendszernél $k_{13} = k_{31} = k_{01} = k_{02} = 0$. Újra megvizsgáljuk azt a speciális esetet, amikor $k_{12} = k_{21} = k_{23} = k_{32} = k_{03} = 1$. A sajátértékek a következő egyenlet gyökei:

$$s^3 + 4s^2 + 3s + 1 = 0 \quad (4.74)$$

Ennek az egyenletnek három különböző negatív valós gyöke van.

4.2.8.4 Mammillary (anya) rendszer

A három-kompartmentu mammillary rendszerben $k_{23} = k_{32} = k_{02} = k_{03} = 0$. Ha $k_{12} = k_{21} = k_{13} = k_{31} = k_{01} = 1$, a sajátértékek az alábbi karakterisztikus polinom gyökei:

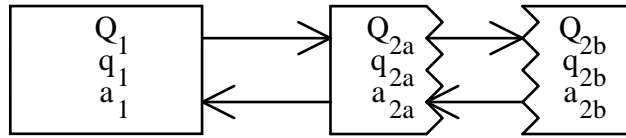
$$s^3 + 6s^2 + 9s + 3 = 0 \quad (4.75)$$

Újra három különböző valós gyököt kapunk.

4.2.9 Inhomogenitás

Idáig a kompartmenteket mindig homogéneknek feltételeztük. Ha egy inhomogén kompartment is jelen van, akkor azt két al-kompartmenttel helyettesítjük. Az egyik gyors anyagcserében van a rendszer többi részével, a másik pedig lassú forgalmat bonyolít az előzővel.

Egy ilyen példa a 4.18. ábrán látható:



4.18. ábra

A nyomjelző mennyisége az első kompartmentben:

$$q_1 = a_1 Q_1 \quad (4.76)$$

A nyomjelző teljes mennyisége a második kompartmentben:

$$q_2 = q_{2a} + q_{2b} = a_{2a} Q_{2a} + a_{2b} Q_{2b} = \bar{a}_2 Q_2 \quad (4.77)$$

ahol \bar{a}_2 a 2. kompartment specifikus aktivitásának átlaga.

Mivel Q_1 és Q_2 között gyors a kicserélődés, ezért a_{2a} majdnem egyenlő a_1 -gyel:

$$\begin{aligned} \bar{a}_2 Q_2 &\cong a_1 Q_{2a} + a_{2b} Q_{2b} \\ a_{2b} Q_{2b} &\cong \bar{a}_2 Q_2 - a_1 Q_{2a} \end{aligned} \quad (4.78)$$

Tételezzük fel, hogy a nyomjelzőt az első kompartmenthez adjuk, $a_{2b}(0) = 0$. Így $t = 0$ -ban:

$$\begin{aligned} \bar{a}_2(0) Q_2 - a_1(0) Q_{2a} &= a_{2b}(0) Q_{2b} = 0 \\ \frac{Q_{2a}}{Q_2} &= \frac{\bar{a}_2(0)}{a_1(0)} \end{aligned} \quad (4.79)$$

Az al-kompartmentek nagysága tehát meghatározható. Más úton is megközelíthetjük az inhomogenitást. Feltételezhetünk az inhomogén kompartmentben egy koncentráció gradienst. Ekkor az inhomogén kompartmentet végtelen számú al-kompartmenttel helyettesítjük.

4.3 Tranziens állapotban lévő rendszerek

A gyakorlatban sokszor merül fel a tranziens állapotú fiziológiai folyamatok leírásának igénye.

4.3.1 Tranziens rendszer fogalma

A 4.7. ábrán látható modellt leíró egyenlet:

$$\frac{dQ_1}{dt} = R_{10} - k_{01} Q_1 \quad (4.80)$$

Ha R_{10} és k_{01} állandó, de $R_{10} \neq k_{01} Q_1$, akkor Q_1 , vagyis a kompartment mérete változik az idő függvényében. Ha nincs nyomjelző a rendszerben, akkor (4.80) lineáris differenciál egyenletet - melynek függő változója Q_1 - oldjuk meg. Ha van nyomjelző a rendszerben, akkor

$$\frac{dq_1}{dt} = -k_{01} q_1 \quad (4.81)$$

illetve

$$\frac{d(Q_1 a_1)}{dt} = -k_{01} Q_1 a_1 \quad (4.82)$$

függvényt kell megoldanunk, ahol Q_1 és a_1 is változik az idő függvényében.

A szerzők olyan rendszereket is tanulmányoztak, melyekben a normál körülmények között állandósult állapotban lévő anyagok egyensúlyi koncentrációja megbombolt, és/vagy új egyensúlyi állapotba került, vagy visszatért az előző állandósult állapotba. Feltételezték, hogy a változás nem nagy, a kinetika lineáris.

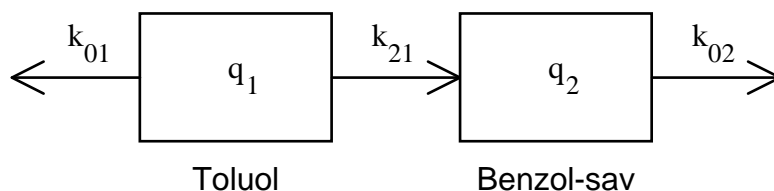
4.3.2 Idegen anyagok kinetikája

Általában az idegen anyag kinetikájának vizsgálatánál az előzőhöz hasonló nem állandósult modellt használnak. Az anyagcsere vizsgálatában már a radióktív nyomjelzők előtt eredményesen használták az idegen anyagokat.

1920-ban Widmark acetont fecskendezett a nyulak bőre alá és mérte a vérben az aceton koncentrációját. Kimutatta, hogy az adatokra illesztett görbe exponenciális. Gehlen 1933-ban már néhány olyan elméleti következtetésre jutott, ami már a két-kompartment rendszerre utal.

Teorell 1937-ben magadta egy állat szervei és szövetei közti gyógyszer mozgásának (átalakulásának) kinetikai leírását. A legtöbb rendszerben a gyógyszerek kiáramlási sebessége a kompartmentből egyenesen arányos a kompartmentben lévő gyógyszer koncentrációjával.

Bray, Thorpe, White olyan idegen anyagot fecskendezett a kísérleti állatba, mely részben változatlanul, részben kevésbé toxikus anyagként válik ki. A toluol kinetikáját a 4.19. ábra mutatja.



4.19. ábra

Az 1. kompartmentben lévő toluol egy része változatlanul vált ki (k_{01}), más része oxidálódott (k_{21}). Így a 2. kompartmentben benzol keletkezett, mely elhagyta a rendszert (k_{02}). Ennek a kivált benzolnak mérték a teljes mennyiségét. A 2. kompartmentet gyűjtő kompartmentnek tekintették.

Egyenleteik:

$$\frac{dq_1}{dt} = -(k_{21} + k_{01})q_1 \quad (4.83)$$

$$\frac{dq_2}{dt} = k_{21}q_1 \quad (4.84)$$

Egy adott pillanatban a kivált benzol teljes mennyisége $q_2(t)$, a végső összes kivált benzol mennyisége $q_2(\infty)$. A t időpontban visszamaradó toluol $q_1(t)$, a beadott toluol $q_1(0)$.

Így a két egyenletet elosztva egymással:

$$\frac{dq_2}{dq_1} = - \frac{k_{21}}{k_{21} + k_{01}} \quad (4.85)$$

A (4.85) egyenletet megoldva:

$$\frac{q_2(\infty) - q_2}{q_1} = \frac{k_{21}}{k_{21} + k_{01}} \quad (4.86)$$

$t = 0$ -ban

$$\frac{q_2(\infty)}{q_1(0)} = \frac{k_{21}}{k_{21} + k_{01}} \quad (4.87)$$

Legyen $q_2(\infty) - q_2(t) = B$. Ekkor

$$k_{21} = \frac{(k_{21} + k_{01})B}{q_1} \quad (4.88)$$

Ezt (4.84)-be helyettesítve:

$$\frac{dq_2}{dt} = (k_{21} + k_{01})B \quad (4.89)$$

Tehát, ha lg B-t idő grafikonon ábrázoljuk, az egyenes meredeksége $(k_{21} + k_{01})$ -t adja. $q_2(\infty)$ és $q_1(0)$ ismeretében (4.87) felhasználásával k_{21} és k_{01} kiszámítható. Ez azt jelenti, hogy a nyúlból kiváló tuluol sebesség konstansa felbontható a benzollá válás oxidálódásának és a változatlanul kiváló anyagnak a sebesség konstansára.

4.3.3 Nyomjelzővel jelölt rendszerek

Vizsgáljuk meg azt az esetet, amikor nem csak a nyomjelző mennyisége (q_i), hanem a kompartment anyagának a mennyisége (Q_i) is változik az idő függvényében. A modell az általános n-kompartiment rendszer. Az i-edik kompartmentbe áramló anyag teljes mennyisége:

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n R_{ij} \quad (4.90)$$

A kompartmentből való kiáramlás sebessége:

$$\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n R_{ji} \quad (4.91)$$

Az eredő sebesség, mellyel az anyag az i-edik kompartmentben felhalmozódik, e sebesség különbsége:

$$\frac{dQ_i}{dt} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n R_{ij} - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n R_{ji} \quad (4.92)$$

A nyomjelző mozgását leírja a következő egyenlet:

$$\frac{d(a_i Q_i)}{dt} = \frac{dq_i}{dt} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_j R_{ij} - a_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n R_{ji} \quad (4.93)$$

Míg (4.92)-t a_i -vel megszorozva:

$$a_i \frac{dQ_i}{dt} = a_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n R_{ij} - a_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n R_{ji} \quad (4.94)$$

(4.94) egyenletet (4.93)-ba helyettesítve:

$$\frac{dq_i}{dt} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_j R_{ij} - a_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n R_{ij} + a_i \frac{dQ_i}{dt} \quad (4.95)$$

Mivel $q_i = a_i Q_i$, ezért:

$$\frac{dq_i}{dt} = a_i \frac{dQ_i}{dt} + Q_i \frac{da_i}{dt} \quad (4.96)$$

(4.95) és (4.96) egyenletekből:

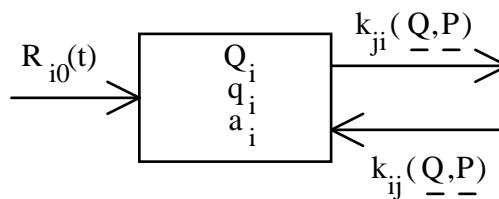
$$Q_i \frac{da_i}{dt} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_j R_{ij} - a_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n R_{ij} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n R_{ij} (a_j - a_i) \quad (4.97)$$

4.4 Nemlineáris rendszerek

Nagyon sok, számunkra fontos rendszer nemlineáris. A következőkben a nemlineáris rendszerek egy általános megfogalmazásával, valamint a perturbációs és relaxációs módszerek ismertetésével foglalkozunk.

4.4.1 Általános modell

Általános nemlineáris kompartment rendszerben az i -edik kompartmentből a j -edikbe történő anyagátvitel sebessége az összes Q_1, Q_2, K, Q_n mennyiségek és több p_1, p_2, K, p_n paraméter függvénye. Így a sebesség konstansok \underline{Q} és \underline{P} vektorok függvényei. Egy ilyen rendszer i -edik kompartmentjét mutatja a 4.20. ábra.



4.20. ábra

Sok esetben k_{ij} , Q_i , Q_j és még egy vagy több paraméter függvénye. $R_{i0}(t)$ jelentheti a rendszerben szintetizált anyagot éppúgy, mint a környezetből belépőt. A rendszer matematikai modellje:

$$\frac{dQ_i}{dt} = - \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n k_{ji} Q_i + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ij} Q_j + R_{i0}(t) \quad (4.98)$$

Legyen $k_{ii} = \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n k_{ji}$.

Ekkor:

$$\frac{dQ_i}{dt} = -k_{ii} Q_i + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ij} Q_j + R_{i0}(t) \quad (4.99)$$

Általában keveset mondhatunk a megoldásról az állandósult állapot kivételével. Ilyenkor Q_i állandó és $\frac{dQ_i}{dt} = 0$, minden $R_{i0}(t)$ bemenet állandó R_{i0} . Így:

$$Q_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{k_{ij}}{k_{ii}} Q_j + \frac{1}{k_{ii}} R_{i0} \quad (4.100)$$

4.4.2 Perturbációs és relaxációs módszerek

Csak az állandósult állapotú rendszereket vizsgáljuk. *Perturbáción* az állandósult állapotban lévő rendszer *kis változását* értjük, mely egy vagy több kompartmentbe fecskendezett kis anyagmennyiség hatására jön létre. Ezután a rendszer visszatér ugyanabba az állandósult állapotba. A *relaxáció az állapotváltozók hirtelen kis megváltozása* (ezek az állapotváltozók nem a különböző kompartmentek mennyiségei), ilyen állapotváltozók például a hőmérséklet és a nyomás. Az állandósult állapot megszűnik és egy új állapot felé tart a rendszer, mely nem egyezik meg az eredetivel.

4.4.2.1 Relaxáció

Viszsgáljuk meg a (4.100) egyenlettel megadott rendszerrel mi történik, ha például a hőmérséklet kissé megváltozik. Q_j^0 az új állandósult állapotbeli érték, mely felé a rendszer tart. ΔQ_j legyen Q_j -nek az állandósult állapotbeli értéktől való pillanatnyi elmozdulása.

$$Q_j = Q_j^0 + \Delta Q_j \quad (4.101)$$

A rendszert, mint láttuk a (4.109) differenciál egyenlet írja le. A bemenetek megváltoztathatók az állapotváltozó (hőmérséklet) eltolásával. Feltételezzük, hogy így új állandó értékekhez tartanak és ekkor R_{i0} is egy új állandó lesz. \underline{P} paraméter vektor is új \underline{P}^x -re változhat. k_{ij} így $k_{ij}(\underline{Q}, \underline{P}^x)$ és az új állandósult állapot $k_{ij}^0 = k_{ij}(\underline{Q}^0, \underline{P}^x)$ sebességi állandókkal jellemezhető.

Ha az eltérések már elég kicsik (10%-nál kisebbek), k_{ij} -t Taylor-sorba fejthetjük k_{ij}^o körül és az első deriváltaknál magasabbrendű kifejezéseket elhanyagolhatjuk. Ekkor így alakul a (4.109) egyenlet:

$$\begin{aligned} \frac{dQ_i}{dt} = & - \left(k_{ii}^o + \sum_{k=1}^n \frac{\partial k_{ii}^o}{\partial Q_k} \Delta Q_k \right) (Q_i^o + \Delta Q_i) + \\ & + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left[\left(k_{ij}^o + \sum_{k=1}^n \frac{\partial k_{ij}^o}{\partial Q_k} \Delta Q_k \right) (Q_j^o + \Delta Q_j) \right] + R_{i0} \end{aligned} \quad (4.102)$$

ahol $\frac{\partial k_{ij}^o}{\partial Q_k}$ az állandósult állapotra kiszámított parciális deriváltat jelenti. Állandósult állapotra:

$$0 = -k_{ii}^o Q_i^o + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n k_{ij}^o Q_j^o + R_{i0}(t) \quad (4.103)$$

Ezt felhasználva és a magasabbrendű tagokat elhagyva:

$$\frac{dQ_i}{dt} = - \left(k_{ii}^o + \frac{\partial k_{ii}^o}{\partial Q_k} Q_i^o - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{\partial k_{ii}^o}{\partial Q_i} \Delta Q_j^o \right) \Delta Q_i + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \left[- \frac{\partial k_{ii}^o}{\partial Q_k} Q_i^o + k_{ik}^o + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{\partial k_{ij}^o}{\partial Q_k} Q_j^o \right] \Delta Q_k \quad (4.104)$$

ΔQ_i és ΔQ_k együtthatói konstansok, így az új állandósult állapothoz tartozó relaxáció egy állandó együtthatójú lineáris differenciál egyenletrendszer.

4.4.2.2 Perturbáció

A rendszer egy Q_i kompartmentjébe fecskendezett kis $\Delta Q_i(0)$ anyagmennyiséggel kimozdítható az állandósult állapotból. Ezután magára hagyjuk, hogy visszatérhessen eredeti állandósult állapotába. ΔQ_i most se legyen nagyobb az állandósult állapotbeli ΔQ_i^o érték 10 %-ánál.

A (4.104) egyenletet most is tudjuk használni azzal az eltéréssel, hogy most P paraméterek nem változnak meg és kezdeti eltérés csak Q_i kompartmentben van. Gyakran még jobban leegyszerűsíthetők az egyenletek. Ha a (4.104) egyenletek együttható mátrixa diagonálisan domináns, akkor egy kompartmentben bekövetkező kis változás bármely más kompartmentben csak magasabbrendű változásra vezet. Ilyenkor már a következő egyenlet is jó közelítést ad:

$$\frac{d\Delta Q_i}{dt} = - \left(k_{ii}^o + \frac{\partial k_{ii}^o}{\partial Q_i} Q_i^o - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{\partial k_{ij}^o}{\partial Q_i} Q_j^o \right) \Delta Q_i = -K_i \Delta Q_i \quad (4.105)$$

ahol K_i a (4.104) egyenlet főátlóbeli együtthatója. Így:

$$\Delta Q_i = Q_i - Q_i^o = \Delta Q_i(0) e^{-K_i t} \quad (4.106)$$

Ekkor az első megközelítésben Q_i az állandósult állapotba exponenciálisan tér vissza és a többi kompartmentben csak másodrendű hullámmászás (lüktetés) van.

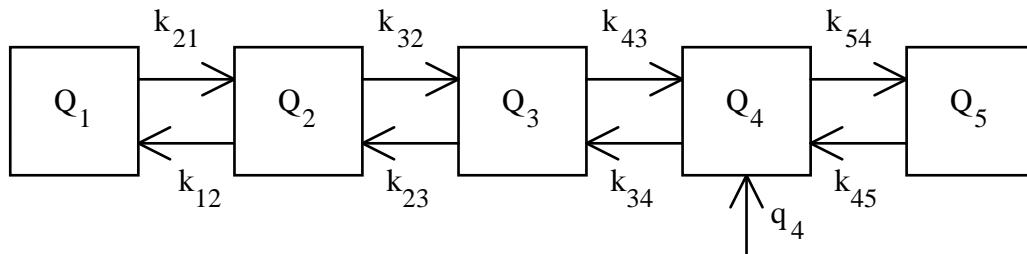
5. SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓ

Az előző fejezetekben tárgyalt, elsősorban élettani folyamatok (rendszerek) leírására alkalmas matematikai modellek megoldásával sokan foglalkoztak, de még napjainkban is számos új közlemény jelenik meg, főleg egy új feladat vagy speciális alkalmazás esetén. Tény azonban, hogy kompartment analízissel leírt élettani folyamatok analitikus megoldása *három* kompartmentszámig áttekinthető. Ha ennél több kompartmentel írható csak le a vizsgálni kívánt folyamatok, akkor számítógépes megoldási módszereket kell alkalmazni.

A fentiek figyelembevételével a Budapesti Muszaki Egyetem Folyamatszabályozási Tanszékén folyó tudományos kutatások eredményeként több számítógépes szimulációs program rendszer került kifejlesztésre és a gyakorlatba való bevezetésre. Ezen programrendszerek segítségével tetszőleges felépítésű élettani rendszer vagy folyamat számítógépes vizsgálata elvégezhető, a kompartmentek száma nincs korlátozva. A rendszer lehet **zárt** vagy **nyitott**. A kezdeti paraméterek megadásakor a program automatikusan dönt abban a kérdésben, hogy milyen redszerről (lánc rendszer, Mamillary rendszer, stb.) van szó. A program menü-vezérelt, IBM PC kompatibilis számítógépeken futtatható, az eredményeket táblázatosan és grafikusan is szolgáltatja, ezzel is segítve a gyakorlati használhatóságot.

A következőkben - a teljesség igénye nélkül - bemutatunk néhány példát a KOMPART számítógépes szimulációs program alkalmazására.

5.1 Lánc rendszer modellje



5.1. ábra

A viszonylag nagy tömegű 1-es kompartmentből nagy sebességgel áramlik a 2-es kompartment felé. A nyomjelzőt a 4-es kompartmentbe adjuk, mely a 3-as és az 5-ös kompartment felé ürül ki.

A rendszer a következő matematikai modellel írható le:

$$\begin{aligned}
 \frac{dQ_1}{dt} &= -k_{21}Q_1 + k_{12}Q_2 \\
 \frac{dQ_2}{dt} &= k_{21}Q_1 - (k_{12} + k_{32})Q_2 + k_{23}Q_3 \\
 \frac{dQ_3}{dt} &= k_{32}Q_2 - (k_{23} + k_{43})Q_3 + k_{34}Q_4 \\
 \frac{dQ_4}{dt} &= k_{43}Q_3 - (k_{34} + k_{54})Q_4 + k_{45}Q_5 + q_4 \\
 \frac{dQ_5}{dt} &= k_{54}Q_4 - k_{45}Q_5
 \end{aligned}
 \tag{5.1}$$

A számítógépes kiértékeléshez a következő adatokat használtuk:

$$\begin{aligned} Q_1 &= 500; \quad Q_2 = 100; \quad Q_3 = 100; \quad Q_4 = 100; \quad Q_5 = 100 \\ k_{12} &= 5; \quad k_{21} = 20; \quad k_{23} = 10; \quad k_{32} = 15; \quad k_{34} = 10; \quad k_{43} = 10 \\ k_{45} &= 5; \quad k_{54} = 10; \quad q_4 = 30 \end{aligned}$$

Az egyes kompartmentek anyagának és nyomjelzőinek időbeli változását az 5.2-5.5 ábrák szemléltetik.

5.2 ábra

5.3 ábra

5.4 ábra

5.5 ábra

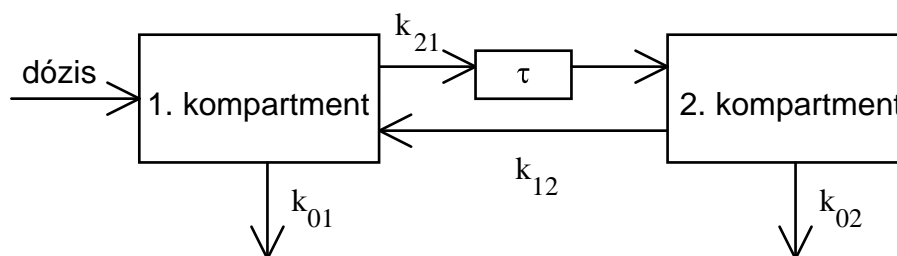
Ahogy várható volt, a nyomjelző mennyisége leggyorsabban a 3-as és az 5-ös kompartmentben kezd változni, s csak ez után a 2-es és az 1-es kompartmentben.

Látható tehát, hogy egy tetszőleges fiziológiai folyamat egyszerűen értékelhető, hatásmechanizmusa pontról-pontra nyomonkövethető.

5.2 Enterohepatikus keringés modellezése

A máj a szervezet fontos kiválasztó szerve, amely nélkülözhetetlen szerepet játszik abban, hogy a szervezet a felesleges anyagcseretermékektől megszabaduljon. Az eliminációs működés érinthet kívülről bejutó anyagokat (pl. gyógyszerek, mérgek) és a szervezetben keletkező anyagcseretermékeket. Rendszerint inkább lipofil vegyületekről van szó, melyek eliminációja a vesében korlátozott. A májsejtekben lejátszódó átalakulások következtében a kérdéses molekula polárisabb, hidrofilebb természetűvé válik, és így az epébe, vérbe kiválasztódhat. Az eliminációs működés szempontjából a bélcsatorna mintegy a "külvilág" folytatásaként fogható fel: az epével történő kiválasztás tehát azt jelentené, hogy a szervezet az illető anyagtól megszabadult. A valóságban azonban ez a "külvilág" rendkívül szoros kapcsolatban van szervezettel, és a kiválasztott, a bélumenbe jutott vegyületek a hámsejtek és a baktériumok hatására átalakulhatnak, a bélhámon keresztül visszakerülhetnek a keringésbe. Számos olyan vegyületet ismerünk, ami ezen *"enterohepatikus körforgalom"* révén újból és újból visszajut a szervezetbe, és így az endogén szintézisét a szervezet részben megtakaríthatja. Természetesen ennek biológiai célszerűsége csak olyan anyagok esetében van, amelyek a szervezet számára fontosak lehetnek (epesavak, koleszterin), és a körforgalom rendkívül hátrányosnak bizonyul olyan anyagok esetében, melyek károsak ebben a vonatkozásban.

Az enterohepatikus keringés modellezhető a két kompartmentes holtidős taggal rendelkező modellel, mely az 5.6. ábrán látható.



5.6. ábra

Az 1. kompartment a testet (pontosabban a májat), a 2. kompartment pedig az emésztési csatornát jelenti. A gyógyszer (nyomjelző) intavénás befecskendezés útján kerül a szervezetbe $t = 0$ időpillanatban az 1. kompartmentbe (D dózisban). Mind a két kompartment tömege kezdetben 0. A nyomjelző molekulák a t időpillanatban elhagyva az 1. kompartmentet csak $(t + \tau)$ időben érik el a 2. kompartmentet. Az áramlás nagyságát a k_{ij} együtthatók szabják meg (k_{01} a nem epével kiválasztott anyagelimináció mértékét, k_{02} a belekből eltávolított anyag mennyiségét, k_{21} az epével történő kiürítés nagyságát, k_{12} pedig a reabszorpció mértékét jelöli).

A modell leírható a következő differenciál egyenletrendszerrel:

$$\begin{aligned} \frac{dq_1(t)}{dt} &= -(k_{01} + k_{21})q_1(t) + k_{12}q_2(t) + D\delta(t) \\ \frac{dq_2(t)}{dt} &= -(k_{02} + k_{12})q_2(t) + k_{21}U(t - \tau)q_1(t - \tau) \end{aligned} \quad (5.2)$$

ahol

$$U(t - \tau) = \begin{cases} 0 & \text{ha } 0 \leq t < \tau \\ 1 & \text{ha } t \geq \tau \end{cases}$$

$\delta(t)$ pedig a Dirac-delta függvény.

A differenciál egyenletrendszer megoldható valamelyik numerikus módszerrel (Euler algoritmus, Runge-Kutta módszer). Az inverz Laplace-transzformációt használva ki tudjuk fejezni a $q_1(t)$ -t az idő függvényében a holtidő (τ) figyelembevételével.

Pl.:

$$\begin{aligned} \text{ha } 0 \leq t < \tau: q_1(t) &= De^{-bt} \\ \text{ha } \tau \leq t \leq 2\tau: q_1(t) &= De^{-bt} + \frac{Dc}{a-b} \left[\frac{e^{-a(t-\tau)}}{a-b} + \left(t - \tau - \frac{1}{a-b} \right) e^{-b(t-\tau)} \right] \quad (5.3) \end{aligned}$$

A fenti modell számítógépes szimulációját az alábbi három számszerű példa szemlélteti. (A k_{02} értékét célszerű minél kisebbre választani, mert az enterohepatikus keringés mértéke $k_{02} = 0$ esetén maximális.)

Az ábrák világosan mutatják, hogy mind a holt idő, mind a k_{ij} értékek erősen befolyásolják a nyomjelző (gyógyszer) időbeli eloszlásának a jellegét is. Így a kísérleti adatok alapján könnyen modellezhetővé és elemezhetővé válik a gyógyszer szétterjedése a szervezetben.

$$-k_{01} = 0.9 \quad k_{21} = 0.5 \quad k_{02} = 0.1 \quad k_{12} = 0.8 \quad \tau = 1 \quad D = 40$$

5.7 ábra

$$-k_{01} = 0.9 \quad k_{21} = 0.5 \quad k_{02} = 0.1 \quad k_{12} = 0.8 \quad \tau = 3 \quad D = 40$$

5.8 ábra

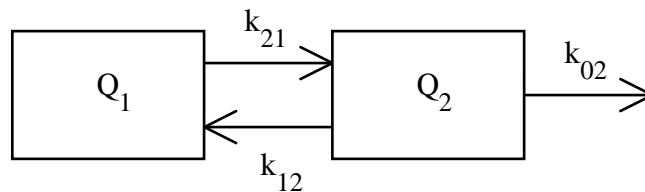
$$-k_{01} = 0.9 \quad k_{21} = 4 \quad k_{02} = 0.1 \quad k_{12} = 1.9 \quad \tau = 1 \quad D = 40$$

5.9 ábra

5.3 Oldott állapotú anyagok tárolása polietilén konténerekben

Amikor valamilyen anyagot raktározunk (muanyag csomagolásban, fém dobozban, konténerekben), akkor az idő múlásával az anyag kölcsönhatásba lép a doboz, illetve a konténer falával, és ezen keresztül a környezetével is. Számos kutatói munka folyik ezen a területen választ keresve arra a kérdésre, hogy milyen mértéku ez a kölcsönhatás, hogyan függ a külső tényezőktől, és mely elemek hajlamosak a leginkább az áramlásra. E jelenségek vizsgálata rendkívül fontos technológiai, fizikai, vegyi és egészségügyi szempontból.

Ezen folyamatok vizsgálatára, az anyagáramlások megfigyelésére az 5.10. ábrán látható két kompartmentes modell használható.



5.10. ábra

Az ábrán az 1. kompartment az anyagot, a 2. pedig a konténer falát jelenti. A 0-ás kompartment a környezet.

A modell leírható a következő egyenletrendszerrel:

$$\begin{aligned}\frac{dQ_1}{dt} &= -k_{21}Q_1 + k_{12}Q_2 \\ \frac{dQ_2}{dt} &= k_{21}Q_1 - (k_{12} + k_{02})Q_2\end{aligned}\quad (5.4)$$

Illetve a specifikus aktivitásokra felírva:

$$\begin{aligned}\frac{da_1}{dt} &= -k_{21}a_1 + k_{12}a_2 \frac{Q_2}{Q_1} \\ \frac{da_2}{dt} &= k_{21}a_1 \frac{Q_1}{Q_2} - (k_{12} + k_{02})Q_2\end{aligned}\quad (5.5)$$

A megoldás pl. Laplace-transzformációval történhet, a k és Q paraméterek többféle módon meghatározhatók (pl. a görbeanalízis segítségével).

A Taszániai Egyetemen a Gyógyszertan Tanszéken végzett kísérletsorozat sok hasznos információt adott a polietilén konténerek szivárgásának mértékéről és a konténerekben tárolt oldott állapotú anyag áramlásáról. A kísérleteket különféle vegyületekkel és oldószerekkel végezték: nitrobenzollal, acetofenonnal, klorokrezollal, benzil alkohollal, fenil etanollal. A polietilén típusú anyagok esetében az áramlás (szivárgás) biexponenciális jellegű, míg a polietiléntől távolabb álló anyagoknál monoexponenciális.

Példaként vizsgáljuk meg a KOMPART program segítségével a nitrobenzol áramlását a konténer falán keresztül.

$$Q_1 = 1 (100\% \text{ } t = 0); Q_2 = 0$$

$$k_{21} = 0.577; k_{12} = 0.885; k_{02} = 0.154$$

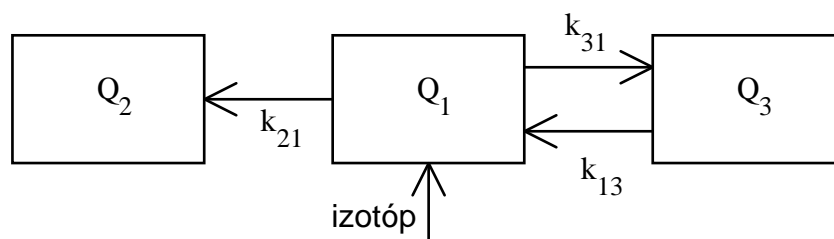
5.11 ábra

A nitrobenzol polietilén típusú anyag, az áramlási görbéje erősen exponenciális jellegű. A szivárgás szintén exponenciális, s a mértéke erősen függ a külső tényezőktől (pl. a levegő hőmérséklete, nedvességtartalma, stb.).

A szivárgás vizsgálatának jelentősége a gyakorlatban is bebizonyosodott. Így például a gyógyszergyártók - felhasználva a kísérletek eredményeit - a gyógyszer hatóanyagával előzetesen impregnált anyagba csomagolják a gyógyszert, és így csökkentik a gyógyszer minőségi és mennyiségi változását.

5.4 A pajzsmirigy jódfelvételi folyamatának modellezése

A folyamat a következő három-kompartmentes modellel írható le:



5.12. ábra

Az ábrán az 1. kompartment a vért, a 2. a vizeletet, míg a 3. a pajzsmirigyet jelöli. Q_i a megfelelő kompartmentek jódtartalmát adja, k_{ij} a j-edik kompartmentből az i-edik be való átmenet sebességi állandóját jelenti.

A folyamat a következő differenciál egyenletekkel írható le:

$$\begin{aligned}\frac{dQ_1}{dt} &= -k_{21}Q_1 - k_{31}Q_1 + k_{13}Q_3 \\ \frac{dQ_3}{dt} &= k_{31}Q_1 - k_{13}Q_3\end{aligned}\tag{ 5.6 }$$

Az összes jódtartalom megmaradása miatt pedig minden időpontban:

$$Q_1(0) = Q_1 + Q_2 + Q_3$$

5.13 ábra

5.14 ábra

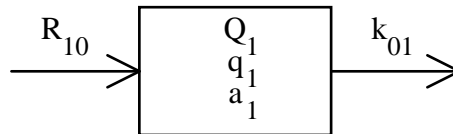
A kezdeti feltételek:

$$Q_2(0) = Q_3(0) = 0$$

A megfelelő kompartmentek (vér, vizelet és pajzsmirigy) jódtartalmának változását az alábbi ábrák mutatják. Látható, hogy a vérbe injektált jódmennyiség végül a vizeletben halmozódik fel, míg a pajzsmirigy jódtartalma a kezdeti zérus értékről indulva egy rövid ideig növekszik, majd újra zérusra csökken.

5.5 Többszörös dózis (Atkins kísérlete)

Ebben az esetben egy egyetlen kompartmentből álló rendszert vizsgálunk, melynek elméleti modellje az 5.15. ábrán látható.



5.15. ábra

A rendszer viselkedését a

$$\frac{dQ_1}{dt} = R_{10} - k_{01}Q_1 \quad (5.7)$$

differenciál egyenlet írja le.

A rendszerbe $t = 0$ -ban befecskendezett jelzőanyag viselkedését a következő egyenletek írják le:

$$\begin{aligned} \frac{dq_1}{dt} &= -k_{01}q_1 \\ Q_1 \frac{da_1}{dt} &= -k_{01}a_1Q_1 \end{aligned} \quad (5.8)$$

Az egyenlet megoldása:

$$a_1 = a_1(0)e^{-k_{01}t} \quad (5.9)$$

A rendszerbe n egyenlő dózisban t egyenlő időközönként nyomjelzőt adunk. (Atkins a kísérletében nagy mennyiségű aszkorbint adott, ^{13}C oxálsavval jelölte a vizsgált személy aszkorbinsavát, és több héten át figyelte a kiürülést.) A rendszerre a nyomjelzők beadása közötti időtartamban a következő differenciálegyenlet írható fel:

$$\frac{dq_1}{dt} = -k_{01}q_1$$

A $t = 0$ időpillanatban $a_1(0)$ specifikus aktivitású nyomjelzőt juttatunk a rendszerbe, akkor t_1 -ben a specifikus aktivitás:

$$a_1(t_1) = a_1(0)e^{-k_{01}t}$$

Ekkor újabb dózist adunk be. Egy nagyon kis idő után, $(t_1 + \delta t)$ -ben a specifikus aktivitás:

$$a_1(t_1 + \delta t) = a_1(0)(1 + e^{-k_{01}t})$$

Egy újabb intervallum elteltével:

$$a_1(t_2) = a_1(0)(1 + e^{-k_{01}t})e^{-k_{01}t}$$

A harmadik befecskendezés után:

$$a_1(t_2 + \delta t) = a_1(0)(1 + e^{-k_{01}t} + e^{-2k_{01}t})$$

Az n -edik befecskendezés után:

$$a_1(t_n + \delta t) = a_1(0)(1 + e^{-k_{01}t} + e^{-2k_{01}t} + \dots + e^{-(n-1)k_{01}t}) =$$

$$\frac{a_1(0)(1 - e^{-nk_{01}t})}{(1 - e^{-k_{01}t})}$$

Az $n \rightarrow \infty$ befecskendezés után:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_1(t_n) = \frac{a_1(0)}{(1 - e^{-k_{01}t})}$$

A hatásmechanizmus az ábrán jól követhető.

5.16 ábra

6. INVERZ FELADAT MEGOLDÁSA

Inverz feladatnak nevezzük a kompartment analízisben a megfelelő modell, illetve paraméterek meghatározását a rendelkezésünkre álló adatok (mérések, információk stb.) alapján. Van, amikor nehezen kaphatók meg az analitikus megoldások, ilyenkor numerikus módszereket használunk. A mérendő adatok megválasztása a kísérletező korábbi ismereteitől is függ.

Előfordulhat az, hogy nagyon keveset tudunk a rendszer szerkezetéről, illetve a rendszert leíró matematikai modellről. Ilyenkor a feladatot *rendszer identifikációnak*, vagy *specifikációnak* nevezzük.

A másik véglet, hogy van olyan információnk, mely specifikálja a modellt. Ekkor a modell *paramétereinek meghatározása* a feladat.

Lehet, hogy e két szélső eset között van a probléma, tudunk valamit a rendszer szerkezetéről, de az nem teljesen specifikált. Az inverz feladat ekkor paraméter meghatározás és rendszer specifikáció keveréke.

A fentiekből látszik, hogy az inverz feladat több szinten jelenhet meg. Az inverz feladat megoldásához kísérleti tervek, becslésméletre és statisztikus analízisre van szükség.

A rendszer identifikációs feladatoknál fontos az egyértékűség. Általában ritkán van lehetőség arra, hogy megmondjuk, a rendszer identifikációt is tartalmazó feladat megoldása mennyire jó, mivel nem áll rendelkezésünkre az összes lehetőség, hogy összehasonlítást tehessünk.

Gyakran találhatunk egy rendszerre kompartment leírást. Hogy célszerű-e és használható-e a kompartmenttel történő leírás, az csak a rendszerről kapott más információk segítségével dönthető el.

6.1 Inverz feladat megoldásának grafikus módszerei

Az inverz feladat megoldásának nagyon sok módszerét ismerjük. Jelen esetben a feladat fontos része az exponenciális kiürülési görbék paramétereinek meghatározása. A paramétereket legpontosabban digitális számítógéppel lehet meghatározni, de más módszerek is elterjedtek.

Modellezhetjük a rendszert analóg számítógéppel, és a paramétereket a modell alapján kaphatjuk meg az eredeti rendszer és az analóg modell értékeinek összehasonlításával.

Az orvosi gyakorlatban ma még nagyon elterjedtek a grafikus eljárások. Ezek közül most két módszert röviden ismertetünk.

6.1.1 Bleeahan-Fisher módszer

A módszerrel $y = p + e^{-kt}$ alakú kifejezések paramétereit lehet meghatározni, ha egyenlő időközönként kaptuk az adatokat. (y Δt időközönként mért értéke legyen y_1, y_2, \dots, y_n .) Az egymást követő differenciák:

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= y_1 - y_2 \\ \Delta_2 &= y_2 - y_3 \\ &\vdots \\ \Delta_{n-1} &= y_{n-1} - y_n\end{aligned}\quad (6.1)$$

Ezért általánosan:

$$\begin{aligned}\Delta_j &= y_j - y_{j+1} \\ \Delta_j &= q(e^{-kj\Delta t} - e^{-k(j+1)\Delta t}) = q(1 - e^{-k\Delta t})e^{-kj\Delta t}\end{aligned}\quad (6.2)$$

Logaritmusát véve:

$$\lg \Delta_j = \lg(q(1 - e^{-k\Delta t})) - 0,4343k\Delta t j \quad (6.3)$$

Tehát ha a különbségek logaritmusát ábrázoljuk az idő függvényében, egyenest kapunk, melynek meredeksége $-0,4343k$ és az ordinátát $\lg(q(1 - e^{-k\Delta t}))$ -ben metszi. Ezekből k és q kiszámítható.

6.1.2 Cohn-Brues módszer

Az eljárással $y = \sum_{j=1}^n X_j e^{-\lambda_j t}$ alakú függvényt lehet közelíteni. Legyen $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n$. Ekkor $\sum_{j=1}^{n-1} X_j e^{-\lambda_j t}$ összeg elhanyagolható $X_n e^{-\lambda_n t}$ mellett, ha t elég nagy. Így az utolsó adatpontokra:

$$y_i \cong X_n e^{-\lambda_n t} \quad (6.4)$$

Logaritmizálva:

$$\lg y_i = \lg X_n - 0,4343\lambda_n t \quad (6.5)$$

Ha a kísérleti adatok logaritmusát ábrázoljuk t függvényében, akkor (6.5) egyenese illeszthető az utolsó adatokra. X_n a $t = 0$ -ban lévő metszéspontból, λ_n a meredekségből meghatározható. Ezután $X_n e^{-\lambda_n t}$ értékét kivonjuk minden adatból, és a még fel nem használtakra folytatjuk az eljárást. Most $y'_i = \sum_{j=1}^{n-1} X_j e^{-\lambda_j t}$ görbének keressük λ_{n-1} paraméterét. Az egyenesek illesztését addig folytatjuk, míg a kifejezéseket szét nem választottuk.

Az eljárás meglehetősen pontatlan és hosszú időt vesz igénybe, ezért törekednünk kell, hogy felmentsük az orvosokat a hosszadalmas és pontatlan eljárás alkalmazása alól. Ez a megállapítás az összes grafikus eljárásra érvényes.

6.1.3 A módszerek pontossága

Az inverz feladat megoldási módszereinek pontosságát leginkább befolyásoló tényezők a következők:

1. exponenciális kitevők egymáshoz való viszonya,
2. mérési eredmények pontossága,
3. mérési adatok száma.

Az 1.- 3. pontban felsorolt tényezők más-más hatást fejtenek ki a pontosságra. Ezen tényezők részletes analízisével most nem foglalkozunk.

6.2 Számítógépes paramétermeghatározás

Élettani folyamatok dinamikus tulajdonságainak matematikai leírása időtartományban differenciálegyenlet, vagy differenciálegyenlet-rendszer segítségével történik. A rendszert leíró differenciálegyenlet, illetve differenciálegyenlet-rendszer felírását célzó eljárást identifikációnak nevezzük. A rendszerről szerzett előzetes ismeretek alapján az identifikáció két szélsőséges esetét különböztetjük meg. Ha a matematikai modell struktúráját ismerjük, tehát tudjuk, hogy a fiziológiai rendszert hány kompartmenttel modellezhetjük és ezek milyen kapcsolatban állnak egymással, akkor paraméterbecslésről beszélünk. Ha a vizsgált rendszer struktúrája ismeretlen, akkor a megoldandó feladatot rendszer-identifikációnak nevezzük. A gyakorlatban előforduló feladatok általában e két szélső eset közé esnek.

Diagnosztikai vizsgálatok esetén például az előzetes orvosi kutatások tisztázzák a modell struktúráját, így a mérési eredmények kiértékelése paraméterbecslésre egyszerűsödik. Ez természetesen nem jelenti azt, hogy a mérési és kiértékelési módszerek fejlődése nem vonhatja maga után a modell struktúrájának finomítását.

Az identifikációs feladatok megoldására többféle matematikai módszer létezik. Ezek közül az adott feladat megoldásához előnyeik, hátrányaik figyelembevételével kell kiválasztani a legmegfelelőbbet.

6.2.1 Clearance-vizsgálatok mérési adatainak számítógépes kiértékelése

A Clearance vizsgálatok kompartment modelljének matematikai leírása általában lineáris elsőrendű differenciálegyenlet-rendszer. A vizsgálat kiértékelése tulajdonképpen az ilyen differenciálegyenlet-rendszer megoldását adó

$$y = \sum_{i=1}^n X_i e^{\lambda_i t} \quad \lambda_1 = 0 \quad (6.6)$$

egyenletben szereplő X_i és λ_i paraméterek meghatározásából áll.

A feladat ezek után az, hogy a vizsgálati eredményeket hordozó mérési pontsorozatra egy exponenciális tagok összegéből álló görbét illesszünk, és miután az illesztés jósága (pontossága) egy adott értéket elért, kiírassuk az X_i együtthatók és λ_i kitevők értékét.

Legyenek adottak:

- m a mérési adatok száma,
- k a becsült paraméterek száma,
- t_1, t_2, \dots, t_m mintavételi időpontok (független változó),
- y_1, y_2, \dots, y_m a mért adatok a fenti időpontokban,
- $\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_m$ becsült értékek a fenti időpontokban,
- b_1, b_2, \dots, b_k a becsülni kívánt paraméterek kezdeti értéke

Feladat: meg kell határozni azokat a b_1, \dots, b_k paraméter értékeket, melyekre teljesül, hogy a mért y_i adatok és a kiszámított \hat{y}_i becsült értékek különbségének négyzetösszege minimális, azaz

$$\Phi = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (6.7)$$

minimalizálása.

Az \hat{y}_i becsült érték meghatározásához írjuk át a fenti egyenletet a következő alakra:

$$\hat{y}_i = b_1 + \sum_{l=2,4,\dots}^{k-1} b_l \exp(b_{l+1} \cdot t_i) \quad (6.8)$$

A (6.7) minimalizálásához valamilyen alkalmas stratégia szerint lépésenként változtatnunk kell a \underline{b} paramétervektort.

Iterációs számítást alkalmazunk, a számítás leállításának feltételét megadhatjuk egyrészt úgy, hogy a Φ minimumra előírunk egy meghatározott értéket és ennek elérése után állunk le, másrészt figyelhetjük a konvergencia sebességét és ha ez egy bizonyos érték alá csökken, az eredményt elfogadjuk. Az algoritmus konvergenciájának sebessége ugyanis a kezdeti igen nagy értékről meredeken csökken.

Ha a konvergencia sebessége egy bizonyos érték alá csökken, akkor a kiértékelés pontosságának a növekedése nem áll arányban a ráfordított futási idővel. Mivel a diagnosztikai vizsgálatokból származó mérési eredmények között sok a jelentős hibával terhelt (már aránylag nagy hibanégyzet összegnél erősen csökken a konvergencia sebessége), ezért célszerűbb a konvergencia sebesség adott értékének elérésével leállítani az iterációt.

6.2.2 ^{198}Au kolloiddal végzett májáramlás vizsgálatok kiértékelése

Az IBM PC személyi számítógépen Turbo Pascalban írt programot többek között radioaktív ^{198}Au kolloiddal végzett májáramlás vizsgálatok kiértékelésére használtuk.

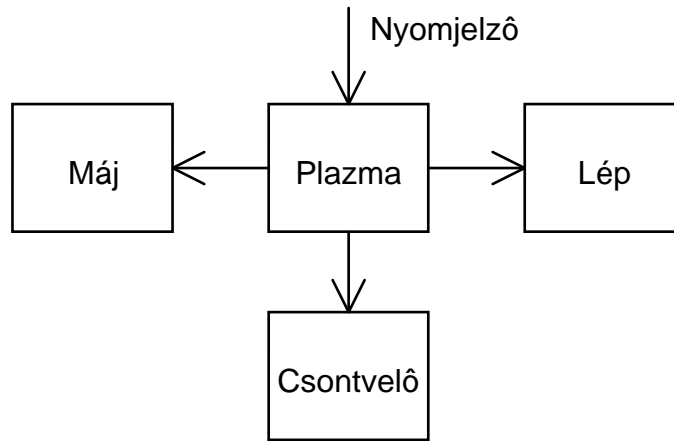
A vizsgálat alapja, hogy a bizonyos szemcsenagyságú kolloidokat a plazmából a szervezet RES (reticuloendothelialis rendszer) sejtjei szurik ki. Ezen sejtek legnagyobb számban a májban találhatók, de előfordulnak a lépben és a csontvelőben is.

A mérés menete:

A betegnek beadják a ^{198}Au kolloidot. A jelzett anyag elkeveredése után mérik az agy felett a plazma aktivitását (percenkénti beütésszámot).

A mérési pontok elméletileg egy multiexponenciális jelleggel csökkenő görbén helyezkednek el.

A vizsgálatnak megfelelő matematikai modell stuktúrája 4 kompartmentből álló ún. anya-rendszer.



6.1 ábra

A ^{198}Au kolloid oldatot (nyomjelző) a plazmába adjuk be intravénás injekció formájában.

A program a mért adatok beadása után kiszámítja a matematikai modell paramétereit, majd ezekből az orvos számára sokkal informatívabb fiziológiás adatokat (májra, lépre, csontvelőre vonatkozó biológiai felezési időket és a máj véráramlását a keringő perctérfogat százalékában).

ADAPTÍV SZABÁLYOZÁSOK

1. BEVEZETÉS

Adaptáció, az alkalmazkodás, az élő szervezetek alapvető tulajdonsága. Adaptációnak nevezzük a változó külső és belső körülményekhez való igazodást, áthangolódást.

Köztudott, hogy az emberi szervezet egy olyan komplex szabályozási rendszert tartalmaz, amely képes biztosítani a belső környezeti jellemzők (testhőmérséklet, vérnyomás, anyagcsere, stb.) állandóságát a különböző behatásokkal (zavarásokkal) szemben. Ezt a komplex irányítási feladatot nagyrészt a központi idegrendszer látja el. A mérési érzékelők, az ún. receptorok a környezeti jellemzőkről (fény, hang, stb.), valamint a szervezet saját állapotjellemzőiről (vérnyomás, vércukor-koncentráció, stb.) szolgáltatnak információt. A receptorok idegszálakon keresztül kapcsolatba kerülnek a gerincvelővel, illetve az agyvelővel. Az itt feldolgozott információ alapján a központi idegrendszer egyrészt közvetlen szabályozási feladatot lát el, másrészt a szervezetben levő "helyi" szabályozók számára alapjelet ("vezetőjelet") állít elő. Szervezetünk legtöbbször optimálisan képes reagálni a környezeti behatásokra, igénybevételekre. Ez csak úgy lehetséges, hogy a szervezetünkben levő szabályozók nem állandó átviteli tulajdonságú komponensekből épülnek fel, hanem alkalmazkodó, adaptív tulajdonságú szabályozási körökből. Ezen "osztott intelligenciájú" adaptív szabályozási rendszer működési mechanizmusának jobb megismerése az ipari irányító rendszereink tökéletesítését is eredményezheti.

Az adaptáció, az adaptivitás fogalma a szabályozástechnikai irodalomban az ötvenes évek közepe körül jelent meg először, amikor Tsien (1955.) könyvében ismertette Ashby-féle emberi agy modelljét. Körülbelül ugyanebben az időben Benner és Drenick adaptív jellegű szabályozó tervezését mutatta be.

Az ún. modell-referenciás adaptív szabályozási rendszerek (MRASZ) Ljapunov tervezéséről szóló első eredmények egyike Parkstól származik (1966.), és Hang és Parks (1973.) mutatta meg a más módszerekhez viszonyított magasabbrendűségét.

A MRASZ rendszerek globális stabilitási eredményei bizonytalannak tunkak, míg Morse (1980.) és Narendra és munkatársai (1980.) egymástól függetlenül kidolgozták a stabilitási bizonyításokat. Azok a feltételezések, amelyeket az ismeretlen szabályozott szakaszra vonatkozóan meg kell tennünk, nagyon szigorúak, és valószínűtlen, hogy ezek a gyakorlatban teljesülnének. Ezért Petersen és Narendra (1982.) és Kreisselmeier és Narendra (1982.) tanulmányozták a MRASZ rendszerek tervezését korlátos zavarások esetén, megengedve, hogy a modell és a rendszer közötti hiha korlátos legyen, aszimptotikusan csökkenő jelleg helyett.

A MRASZ-ok gyakorlati alkalmazásaival Narendra és Monopoli (1980.), valamint Harris és Billings (1981.) foglalkozott.

A következő fejezetekben - elsősorban irodalomra való hivatkozással - a MRASZ rendszer tervezésével, paraméter identifikáció, valamint adaptív megfigyelés kérdésével foglalkozunk.

2. ADAPTÍV SZABÁLYOZÁS

2.1 Modell-referenciás adaptív szabályozók (MRASZ) Ljapunov tervezése

Alapvető gondolat a modell-referenciás szabályozóknál (MRASZ) az, hogy a szabályozó u' jelét (2.1.ábra) az

$$\dot{x}_p = A_p x_p + B_p u' \quad (x_p \in R^n, u' \in R^m) \quad (2.1)$$

egyenlettel leírható valódi rendszerben

$$u' = Q(u + Fx_p)$$

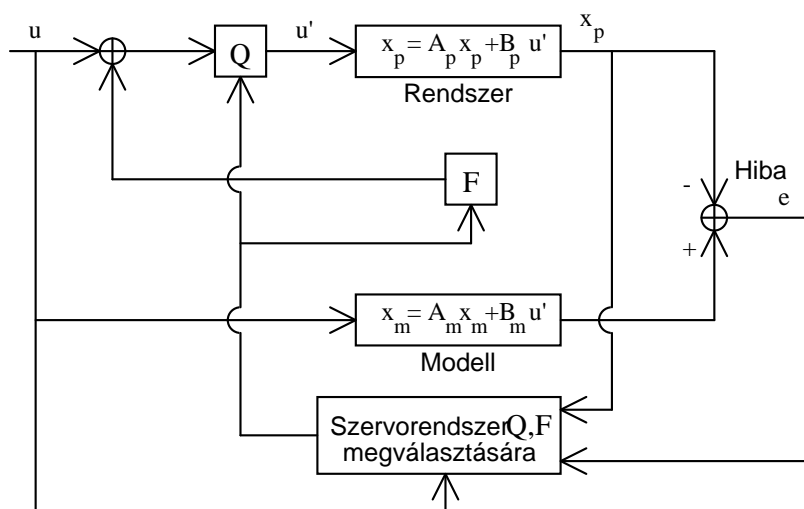
alakúra választjuk, így a kapott rendszer

$$\dot{x}_p = (A_p + B_p QF)x_p + (B_p Q)u \quad (2.2)$$

alakú lesz, amely a lehető legjobban követi a

$$\dot{x}_m = A_m x_m + B_m u \quad (2.3)$$

egyenlettel leírt modellt (ld. Narendra és Kudva, 1974.).



2.1.ábra

Modell-referenciás adaptív rendszer

A "lehető legjobban követő" alatt azt értjük, hogy az $e = x_m - x_p$ hibavektor aszimptotikusan 0-hoz tart. A modell-referenciás adaptív rendszer bloksémája a 2.1.ábrán látható. Mint látható, a cél a Q és F szabályozó mátrixok paramétereinek változtatása úgy, hogy

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|e(t)\| = 0$$

legyen.

A legegyszerűbb feltételezés - amit tehetünk annak érdekében, hogy a fenti, aszimptotikusan csökkenő hiba adaptív tulajdonságú legyen - az, hogy a szabályozott berendezés szabályozóit úgy lehet megválasztani, hogy a kapott zárt hurkú rendszer

pontosan megfelelljen a modellnek. Ebben az esetben egyértelmuen találhatunk olyan Q^* és F^* mátrixokat, hogy

$$\left. \begin{aligned} B_p Q^* &= B_m \\ A_p + B_m F^* &= A_m \end{aligned} \right\} \quad (2.4)$$

Pontos megfelelés feltételezése mellett a hibavektor kielégíti a következő egyenletet:

$$\begin{aligned} \dot{e} &= A_m e + (A_m - A_p - B_p Q F) x_p + (B_m - B_p Q) u = \\ &= A_m e + B_m \Phi x_p + B_m \Psi Q (u + F x_p) \end{aligned} \quad (2.5)$$

ahol:

$$\begin{aligned} \Phi &\stackrel{def}{=} F^* - F(t) \\ \Psi &\stackrel{def}{=} (Q^{-1}(t) - Q^{*-1}) \end{aligned}$$

(Megjegyezzük, hogy B_p és B_m nulla elem nélküli mátrix, így Q^* nem szinguláris.)

A (2.5) aszimptotikus stabilitásának megmutatására megfelelő Φ és Ψ választással tekintsük először a következő rendszert

$$\left. \begin{aligned} \dot{e} &= Ae + D \Xi z(t) \\ \dot{\Xi} &= -\Gamma D^T P e z^T(t) \end{aligned} \right\} \quad (2.6)$$

ahol $z(t)$ korlátos vektorértéku függvény, $\Gamma = \Gamma^T > 0$, D egy $n \times m$ -es nulla elem nélküli mátrix és P pozitív definit mátrix, amely kielégíti a Ljapunov egyenletet valamely R mátrixra:

$$A^T P + P A = -R \quad R = R^T > 0$$

Ez a rendszer aszimptotikusan stabil (azaz $\|e(t)\| \rightarrow 0$, ha $t \rightarrow \infty$), mint az a következőkből látható. Legyen

$$V = \frac{1}{2} [e^T P e + \text{tr}(\Xi^T \Gamma^{-1} \Xi)]$$

ekkor V pozitív definit és

$$\begin{aligned} \dot{V} &= \frac{1}{2} e^T R e + e^T P D \Xi z + \text{tr}(\dot{\Xi} \Gamma^{-1} \Xi) \\ &= -\frac{1}{2} e^T R e + \text{tr} \left[(D^T P e z^T + \Gamma^{-1} \dot{\Xi})^T \Xi \right] \\ &= -\frac{1}{2} e^T R e \end{aligned} \quad (2.7)$$

és így \dot{V} negatív definit.

Visszatérve a (2.5) egyenletre, a hibaegyenletet a következő formába írhatjuk:

$$\dot{e} = A_m e + B_m [\Phi \Psi] \begin{bmatrix} x_p \\ Q(u + Fx_p) \end{bmatrix}$$

és ha így definiáljuk a $\Xi = [\Phi \Psi]$ és $\Gamma = \text{diag}[\Gamma_1 \Gamma_2]$ mátrixokat, akkor

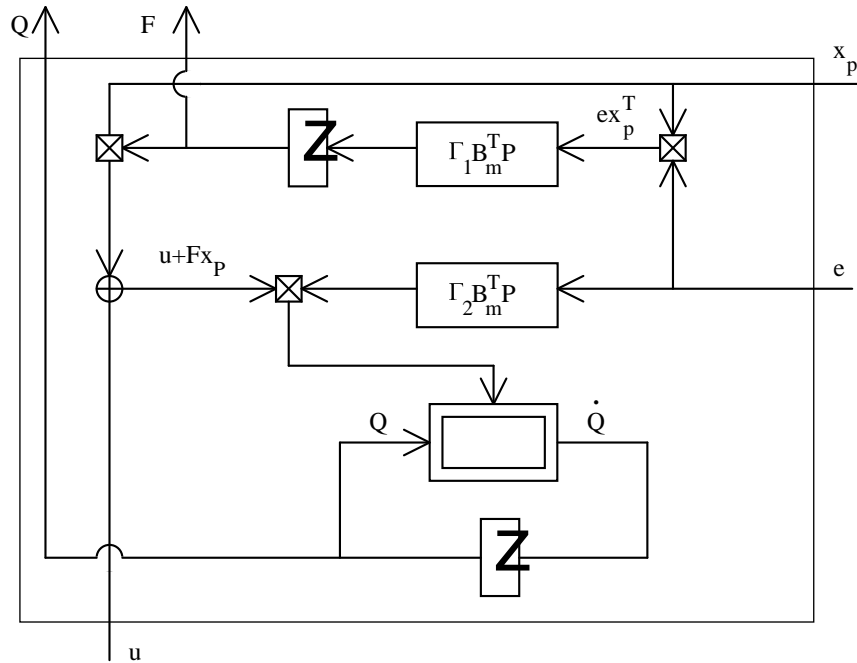
$$\dot{\Xi} = [\dot{\Phi} \dot{\Psi}] = -\Gamma B_m^T P e \begin{bmatrix} x_p^T (u + Fx_p) \end{bmatrix}^T Q^T Q$$

a fenti megállapítások alapján: $\|e(t)\| \rightarrow 0$.

A fenti jelölésekkel az adaptív irányítás törvénye a következő alakba írható:

$$\begin{aligned} e &= x_m - x_p \\ \dot{F} &= \Gamma_1 B_m^T P e x_p^T \\ \dot{Q} &= Q \Gamma_2 B_m^T P e (u + Fx_p)^T Q^T Q \end{aligned} \quad (2.8)$$

valamely $\Gamma_1, \Gamma_2 > 0$ és $A_m^T P + P A_m = -R$ -et kielégítő P -re. A gyakorlati megvalósítás blokksémája a 2.2. ábrán látható.



2.2. ábra
F, Q előállítás

Megjegyezzük, hogy csak a (2.6) összefüggés alapján vizsgáltuk $e(t)$ aszimptotikus stabilitását. A Ξ globális aszimptotikus stabilitása (2.6)-ban (és ugyan így F -é és Q -é (2.8)-ban) nem következik (2.7)-ből.

2.2 Paraméter identifikáció MRASZ használatával

A MRASZ eljárásait felhasználhatjuk szakaszok ismeretlen paramétereinek meghatározására. A szakasz egyenlete:

$$\dot{x}_p = A_p x_p + B_p u$$

Ebben az esetben a szakasz és a modell (2.1)-beli szerepe felcserélődik és a következő modellt választjuk:

$$\dot{x}_m = C x_m + [A_m(t) - C] x_p + B_m(t) u$$

Az egyenletben szereplő C egy állandó elemű mátrix, A_m , B_m elemei változtathatók. Ha tudunk olyan rendszert tervezni, melyre

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} A_m(t) &= A_p \\ \lim_{t \rightarrow \infty} B_m(t) &= B_p \\ \lim_{t \rightarrow \infty} [x_m(t) - x_p(t)] &= \lim_{t \rightarrow \infty} e(t) = 0 \end{aligned}$$

akkor a modellparaméterek aszimptotikusan megközelítik a valódi rendszer paramétereit, így azokra becslést adnak. Most ugyanúgy, mint előzőleg

$$\dot{e}(t) = C e(t) + \Phi x_p + \Psi u$$

ahol

$$\begin{aligned} \Phi &= A_m - A_p \\ \Psi &= B_m - B_p \end{aligned}$$

Az előzőekkel megegyező módon láthatjuk, hogy az adaptációs törvény a következő:

$$\begin{aligned} \dot{\Phi} &= -\Gamma_1 P e x_p^T \\ \dot{\Psi} &= -\Gamma_2 P e u^T \end{aligned} \quad (2.9)$$

ahol P pozitív definit és kielégíti a következő összefüggést:

$$\begin{aligned} C^T P + P C &= -Q \quad Q = Q^T > 0 \\ \Gamma_1 &= \Gamma_1^T > 0 \quad \Gamma_2 = \Gamma_2^T > 0 \end{aligned} \quad (2.10)$$

Így a végeredmény:

$$\begin{aligned} \dot{A}_m(t) &= -\Gamma_1 P e x_p^T \\ \dot{B}_m(t) &= -\Gamma_2 P e u^T \end{aligned}$$

(2.11)

Mint az előzőekben is, ennek az adaptív elképzelésnek (sémának) a stabilitását a (2.6) rendszer használatával vizsgálhatjuk. Most szükség van arra, hogy e -en túl Φ és Ψ is aszimptotikusan stabil legyen. Így a (2.6)-ot a (e, Ξ) térben kell vizsgálnunk. Ebben az esetben a (2.7)-ből kapott \dot{V} csak negatív szemidefinit, de az aszimptotikus stabilitás bizonyítására alkalmazhatjuk a La Salle invariancia elvét. Tulajdonképpen az

invariancia elv szerint a (2.6) megoldásai a többszörös $M = \{(e, \Xi) : e = 0\}$ -hoz tartoznak $t \rightarrow \infty$ esetén. Így

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \dot{\Xi} = \lim_{t \rightarrow \infty} (-\Gamma D^T P e z^T) = 0 \quad (2.12)$$

Mivel $V > 0$ és $\dot{V} \leq 0$ korlátos. Tegyük fel, hogy z r darab elemből áll, amelyek mindegyike egymástól eltérő frekvenciajelet tartalmaz. Így mivel Ξ korlátos, és (2.6) periódikus együtthatójú differenciálegyenlet, (2.12) szerint $\Phi(t)$ $t \rightarrow \infty$ esetén konstans mátrixhoz tart. M -en

$$D\Xi z \equiv 0 (e \equiv 0)$$

és mivel D invertálható

$$\sum_{i=1}^r \xi_i z_i(t) \equiv 0$$

ahol ξ_i a Ξ oszlopai. Mivel z_i lineárisan független frekvenciaösszetevőket tartalmaz, $\xi_i \equiv 0$ és $\Xi \equiv 0$. Az aszimptotikus stabilitás most következik az invariancia elvből. Ezt az eredményt a (2.11) rendszerre alkalmazva $z^T = (x_p^T u^T)$ -t kapjuk, így még ha u periódikus is, x_p nem feltétlenül az. De ha a rendszer egységesen aszimptotikusan stabilis, akkor x_p a következő alakú:

$$x_p = \tilde{x}_p + \varepsilon(t)$$

ahol x_p periódikus és $\varepsilon \rightarrow 0$, ha $t \rightarrow \infty$.

Megmutatható (ld. Narendra és Kudva, 1974.), hogy ha $u_q \geq (n+1)/2$ különböző frekvenciát tartalmaz, akkor $\Xi [x_p^T u^T] = 0 \Xi = 0$ -t jelent és ismét aszimptotikus stabilitást kapunk. Így azt mondhatjuk, hogy a rendszer adaptívan identifikálható, ha a bemeneti gerjesztések megfelelőek a rendszerben.

2.3 MRASZ tervezése hiperstabilitással

Adaptív rendszereket tervezhatunk a hiperstabilitás-elmélet alapján is (Landau és Courtiol, 1974.). Szorítkozzunk az alaprendszerre:

$$\dot{x}_m = A_m x_m + B_m u_m \quad (2.13)$$

$$\dot{x}_p = A_p x_p + B_p u_p \quad (2.14)$$

ahol $x_m \in \mathbb{R}^n$ a modell, $x_p \in \mathbb{R}^m$ a rendszer egyenlete, és a valódi rendszer bemenetét

$$u_p = -K_p x_p + K_m x_m + K_u u_m \quad (2.15)$$

formában határozzuk meg, ahol K_p, K_m, K_u változó, a tervezés során meghatározandó mátri2. Mint a 2.1 fejezetben, itt is tökéletes modell megfeleltetést feltételezünk. A (2.13)-(2.15) összefüggések alapján írhatjuk:

$$0 = [A_m - A_p + B_p (K_p - K_m)] x_p + (B_m - B_p K_u) u_m$$

ha $x_m = x_p$. Mivel ennek minden x_p és u_m -re igaznak kell lennie, fenn kell állnia a következő összefüggéseknek:

$$A_m - A_p + B_p(K_p - K_m) = 0 \quad (2.16)$$

$$B_m - B_p K_u = 0 \quad (2.17)$$

A tökéletes modell megfeleltetés miatt kell, hogy a fenti egyenleteknek $(K_p - K_m)$ -re és K_u -ra legyen megoldása. Tekintsük (2.17)-et és definiáljuk B_p Moore-Penrose-féle pszeudoinverzét B_p^+ -t (ld. Boulljon, 1971.) a következő módon:

$$B_p^+ = (B_p^T B_p)^{-1} B_p^T$$

feltéve, hogy $(B_p^T B_p)^{-1}$ létezik. Ekkor a (2.17)-ből következik, hogy $K_u = B_p^+ B_m$. Az így kapott K_u azonban csak akkor elégíti ki a (2.17) összefüggést, ha $(I - B_p B_p^+) B_m = 0$. Hasonlóan ugyanez vonatkozik a (2.16)-ra és a pontos modell megfeleltetés feltétele a következő:

$$\begin{aligned} (I - B_p B_p^+) B_m &= 0 \\ (I - B_p B_p^+) (A_m - A_p) &= 0 \end{aligned} \quad (2.18)$$

Tudomásul vesszük, hogy a pontos modell azonosság megfelel annak, hogy az eredeti rendszer dinamikájának szerkezetét (azaz a differenciáloperátorok fokszámát) ismerjük. Abban az esetben, ha a (2.18) feltételek nem teljesülnek, Curran megmutatta, hogy a modellt hogyan kell megválasztani, hogy kielégítse ezeket az egyenleteket.

Tegyük fel, hogy (2.15)-ben $K_p = K_p(t, e)$ és $K_u = K_u(t, e)$ az $e = x_m - x_p$ hibától (és az időtől) függőnek vannak választva. A K_p és K_u névleges értéktől való kis eltérésre írható:

$$\begin{aligned} K_p(t, e) &= K_p - \Delta K_p(t, e) \\ K_u(t, e) &= K_u + \Delta K_u(t, e) \end{aligned}$$

Ezután a rendszer bemenete a következő alakban írható fel:

$$u_p = u_{p1} + u_{p2}$$

ahol:

$$\begin{aligned} u_{p1} &= -K_p x_p + K_m x_m + K_u u_m \\ u_{p2} &= \Delta K_p(t, e) x_p + \Delta K_u(t, e) u_m \end{aligned}$$

Most a (2.13) és (2.14)-ből a következôt kapjuk:

$$\begin{aligned}
\dot{e} &= A_m x_m - A_p x_p + B_m u_m - B_p u_p = \\
&= A_m x_m - A_p x_p + A_m x_p - A_m x_p + B_m u_m - B_p (-K_p x_p + K_m x_m + K_u u_m) - \\
&\quad - B_p [\Delta K_p(t, e) x_p + \Delta K_u(t, e) u_m] = \\
&= A_m e + (A_m - A_p) x_p + B_m u_m - B_p K_u u_m - B_p \Delta K_u(t, e) u_m + \\
&\quad + B_p K_p x_p - B_p \Delta K_p(t, e) x_p - B_p K_m x_p + B_p K_m x_p - B_p K_m x_m = \\
&= (A_m - B_p K_m) e + B_p [B_p^+ (A_m - A_p) - K_m + K_p - \Delta K_p(t, e)] x_p + \\
&\quad + B_p [B_p^+ B_m - K_u - \Delta K_u(t, e)] u_m
\end{aligned}$$

felhasználva a (2.18)-at.

A hibaegyenletet ezért a következô alakba írhatjuk:

$$\boxed{\dot{e} = (A_m - B_p K_m) e + B_p w_1} \quad (2.19)$$

ahol

$$\begin{aligned}
-w_1 &= [\Delta K_p(t, e) - B_p^+ (A_m - A_p) + K_m - K_p] x_p \\
&\quad + [\Delta K_u(t, e) - B_p^+ B_m + K_u] u_m
\end{aligned}$$

Bevezethetjük a v transzformált hiba függvényt is:

$$\boxed{v = De} \quad (2.20)$$

A hiperstabilitáshoz a következôkre van szükség:

$$\int_0^{t_1} v^T(t) w(t) dt \geq -\gamma_0^2 t_1 \geq 0 \quad (2.21)$$

valamely γ_0^2 konstansra, ahol $w = -w_1$. Könnyű belátni, hogy a (2.21) teljesül a következô választás esetén:

$$\Delta K_p(t, v) = \int_0^t \tilde{L} v(Q x_p)^T d\tau + L v(Q x_p)^T + \Delta K_p(0) \quad (2.22)$$

$$\Delta K_u(t, v) = \int_0^t \tilde{M} v(R u_m)^T d\tau + M v(R u_m)^T + \Delta K_u(0) \quad (2.23)$$

ahol \tilde{L}, Q, \tilde{M} és R pozitív definit mátrixok, L és M pedig nem negatív definit mátrixok.

Továbbiakban az alábbi általános lineáris rendszert vizsgáljuk:

$$\dot{x} = Ax + Bu$$

$$y = Cx$$

ahol (A, B) irányítható pár, és (C, A) megfigyelhető pár. Megmutatható (Anderson, 1976.), hogy a rendszer $C(sI - A)^{-1}B$ átviteli függvénye akkor és csak akkor valós, ha bármely pozitív H mátrixra létezik olyan P pozitív definit mátrix, melyre

$$PA + A^T P = -H$$

$$B^T P = C$$

A (2.20) és (2.21)-re alkalmazva ezt és alkalmazva Popov tételét, miszerint egy rendszer akkor, és csak akkor hiperstabilis, ha a lineáris rész pozitív valós, látjuk, hogy D -t a

$$D = B_p^T P \quad (2.24)$$

előírás szerint kell választanunk, ahol P a Ljapunov egyenletnek a megoldása:

$$(A_m - B_p K_m)^T P + P(A_m - B_p K_m) = -H \quad (2.25)$$

tetszőleges pozitív definit szimmetrikus H -ra.

(Megjegyezzük, hogy $(A_m - B_p K_m)$ -nek stabilis mátrixnak kell lennie.

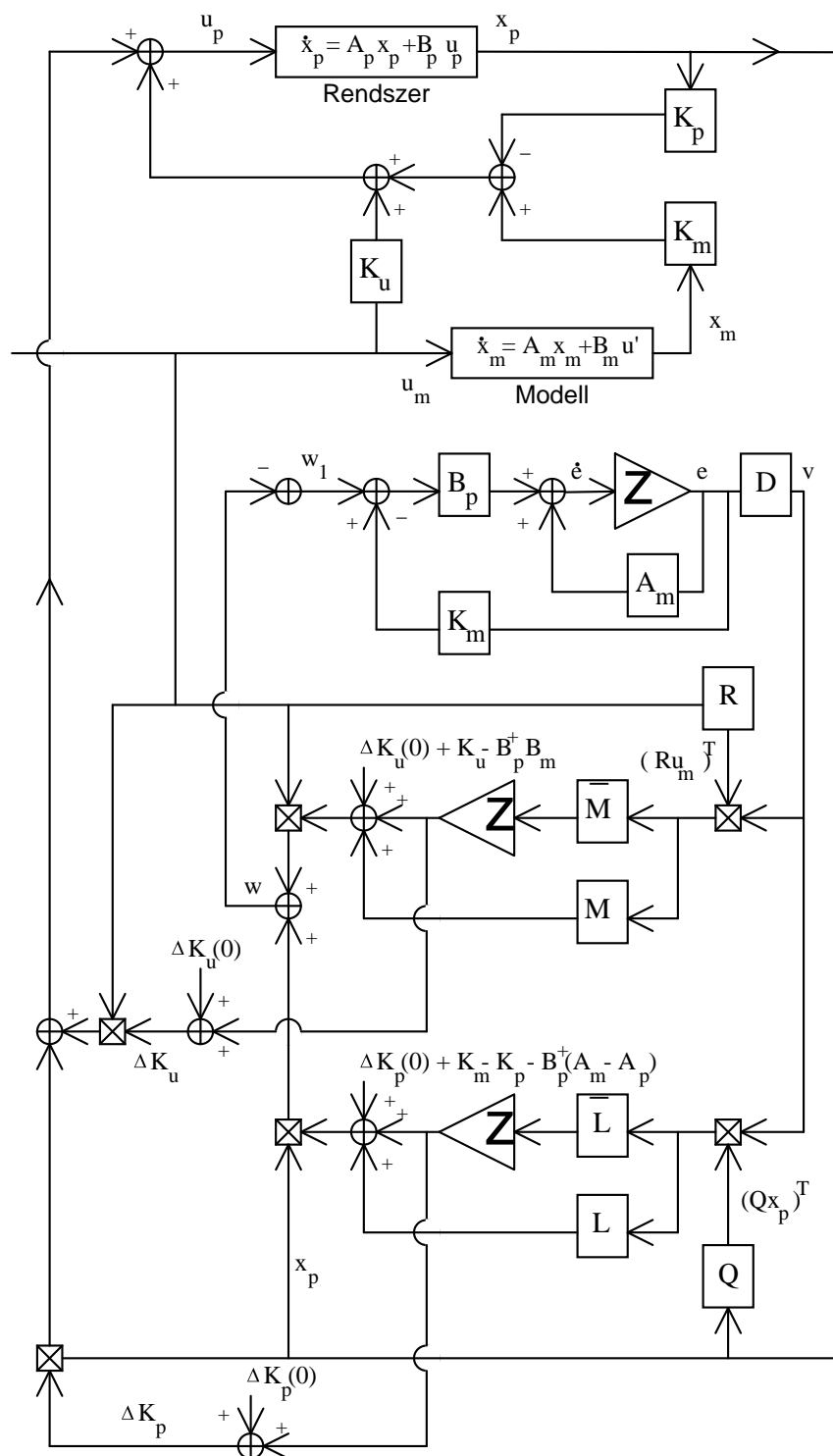
Világos, hogy (2.22) és (2.23) adaptív szabályozók PI típusúak. A teljes MRASZ (másképpen modellkövető rendszer) a 2.3. ábrán látható. Meg kell továbbá jegyezni, hogy ha (2.24) és (2.25) egyenletek teljesülnek, tetszőleges ΔK_p , ΔK_n választás, melyre a (2.21) feltétel igaz, garantálni fogja a stabilitást. Másik ilyen választás a relé+integráló szabályozás, melyet a

$$\Delta K_p(t, v) = \int_0^t \tilde{L} v (Q x_p)^T d\tau + \text{sgn } v (Q x_p)^T + \Delta K_p(0) \quad (2.26)$$

$$\Delta K_u(t, v) = \int_0^t \tilde{M} v (R u_m)^T d\tau + \text{sgn } v (R u_m)^T + \Delta K_u(0) \quad (2.27)$$

egyenletek határoznak meg, ahol

$$\text{sgn } v = (\text{sgn } v_1, \text{sgn } v_2, \dots, \text{sgn } v_m)$$



2.3. ábra
Hiperstabilitás elvén működő szabályozás

A fentiek alapján az MRASZ rendszer tervezéséhez szükséges lépéseket a következőképpen foglalhatjuk össze:

- Meghatározzuk A_m , B_m -et úgy, hogy a (2.18) teljesüljön.
- Megválasztjuk K_m -et és K_p -t úgy, hogy

$$K_p - K_m = B_p^+ (A_p - A_m)$$

és $A_m - B_p K_m$ stabil. Megválasztjuk a $K_u = B_p B_m$ -et. Ha ezek a feltételek nem állnak fenn, változtassuk meg az A_m , B_m modellparamétereket.

- Válasszuk meg $K_p(0)$ -t, $K_v(0)$ -t és H -t (tetszőlegesen) és oldjuk meg (2.25)-öt. Természetesen

$$P = \int_0^{\infty} [\exp(A_m - B_p K_m)^T t] H [\exp(A_m - B_p K_m) t] dt$$

- Ellenőrizzük azt, hogy $((A_m - B_p K_m), B_p)$ irányítható pár és $(D, A_m - B_p K_m)$ megfigyelhető pár.

Az elmondottakat jól nyomonkövethetjük a következő példán.

Példa:

Tegyük fel, hogy másodrendű rendszert vizsgálunk:

$$\ddot{x} + a_p \dot{x} + b_p x = u_p$$

ahol a_p és b_p az ismeretlen paraméterek. Legyen $x_1 = x$, $x_2 = \dot{x}$, ezzel a rendszer:

$$\dot{x}_p = \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -b_p & -a_p \end{pmatrix} x_p + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} u_p$$

Most kézenfekvő a következő modell választása:

$$\dot{x}_m = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -b_m & -a_m \end{pmatrix} x_m + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} u_m$$

ahol a_m és b_m a fenti a.- d. feltételek alapján határozható meg.

Mivel $B_p = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}^T$, ezért $B_p^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}$ és így

$$I - B_p B_p^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Innen:

$$(I - B_p B_p^+) B_m = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} (I - B_p B_p^+) (A_m - A_p) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -b_m + b_p & -a_m + a_p \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

és így a (2.18) feltétel teljesül és lehetséges a pontos modell megfeleltetés (mint természetesen, intuitíve is nyilvánvaló).

Most

$$K_u = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 1$$

és

$$\begin{aligned} K_p - K_m &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -b_p + b_m & -a_p + a_m \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} -b_p + b_m & -a_p + a_m \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Ezért természetes a $K_p = \begin{pmatrix} -b_p & -a_p \end{pmatrix}, K_m = \begin{pmatrix} -b_m & -a_m \end{pmatrix}$ választás, és

$$A_m - B_p K_m = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -b_m & -a_m \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -b_m & -a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

De ilyen K_p és K_m választással nem kapunk stabilis $A_m - B_p K_m$ mátrixot, ezért K_p -t és K_m -et úgy módosítjuk, hogy

$$\begin{aligned} K_m &= \begin{pmatrix} -b_m - \beta & -a_m - \alpha \end{pmatrix} \\ K_p &= \begin{pmatrix} -b_p - \beta & -a_p - \alpha \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Ekkor

$$\tilde{A} \stackrel{def}{=} A_m - B_p K_m = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

Ez bármely $\alpha, \beta < 0$ mátrixra stabil. Ezenkívül

$$(B_p \tilde{A}^T B_p) = \begin{pmatrix} 0 & \beta \\ 1 & \alpha \end{pmatrix}$$

és így (\tilde{A}, B_p) irányítható pár bármely $\beta \neq 0$ esetén. Végül, ha az egyszerűség kedvéért $H = I$, $\alpha = -3$, $\beta = -2$ -t választunk, akkor

$$P = \int_0^\infty \exp(\tilde{A}^T t) \exp(\tilde{A} t) dt$$

ahol:

$$\exp(\tilde{A} t) = Q \begin{pmatrix} \exp(\lambda_1 t) & 0 \\ 0 & \exp(\lambda_2 t) \end{pmatrix} Q^{-1}$$

és

$$\lambda_1 = \frac{\alpha + (\alpha^2 + 4\beta)^{\frac{1}{2}}}{2} = -1$$

$$\lambda_2 = \frac{\alpha - (\alpha^2 + 4\beta)^{\frac{1}{2}}}{2} = -2$$

$$Q = \begin{pmatrix} \beta/\lambda_1 & \beta/\lambda_2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$Q^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\lambda_1\lambda_2}{\beta(\lambda_2 - \lambda_1)} & \frac{-\lambda_1}{(\lambda_2 - \lambda_1)} \\ \frac{-\lambda_1\lambda_2}{\beta(\lambda_2 - \lambda_1)} & \frac{\lambda_2}{(\lambda_2 - \lambda_1)} \end{pmatrix}$$

Egy egyszerű állítás szerint:

$$P = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

és akkor $D = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$.

(\tilde{A}^T, D^T) irányítható pár és a tervezést ezzel elvégeztük.

Végezetül megjegyezzük, hogy az MRASZ rendszerek Ljapunov- és hiperstabilitás tervezési módszereinek összehasonlítását Narendra és Kudva elvégezték, és azt találták, hogy egyenletesen korlátos valóságos jelek esetén a két módszer azonos eredményt ad. Ez persze nem jelenti azt, hogy a gyakorlati alkalmazásoknál adott esetben az egyik módszer ne lehetne kényelmesebb a másiknál.

2.4 Adaptív megfigyelés

A fenti MRASZ tervezésnél feltételeztük, hogy minden x_p rendszerállapotváltozó rendelkezésre áll az adaptív szabályozó számára. Ez nem teljesül, ha csak bemenet-kimenet méréseink vannak, és ekkor az adaptív tervezést valamilyen megfigyelésből származó állapotváltozó-bebecslésekre kell alapoznunk.

Az irodalomban ma előforduló ilyen tervezések Carrol és Lindorff (1973.) Carrol (1974.), Kundra és Narendra (1973.) és Lüders és Narendra (1974.) révén adóttak. Bemenet-kimeneti adatok alapján végzett identifikációs módszerek szintén ismertek Lion (1967.) és Anderson (1974.) révén. Mi most Kreisselmeier (1977.) módszerét fogjuk követni, amely Luenberger-féle megfigyelések egy struktúrájában másfajta, adaptív megfigyelésre alkalmas formába írása.

Vizsgáljuk ismét a szokásos SISO rendszert

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}(t) &= Ax(t) + bu(t), x(0) = x_0 \\ y(t) &= c^T x(t) \end{aligned} \right\} \quad (2.28)$$

ahol a rendszer minimális leírását jelentő "n" állapotváltozót ismertnek feltételezzük.

Mivel A , b és c ismeretlen és a minimális leírást alkalmazzuk, A -t, b -t, és c -t a következő alakra hozhatjuk

$$A = \begin{pmatrix} -a_1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -a_2 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ -a_{n-1} & 0 & 0 & \dots & 1 \\ -a_n & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} c = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

Megjegyezzük, hogy az ún. Luenberger-féle megfigyelő szabvány alakja a következő:

$$\dot{\hat{x}} = F\hat{x}(t) + gy(t) + hu(t), \hat{x}(0) = \hat{x}_0 \quad (2.30)$$

ahol

$$F = \begin{pmatrix} -f_1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -f_2 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ -f_{n-1} & 0 & 0 & \dots & 1 \\ -f_n & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} g = \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_n \end{pmatrix} h = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_n \end{pmatrix}$$

ahol f_i -ket úgy választják, hogy F sajátértékei kívánt negatív valós részek legyenek, $-\sigma$ ($\sigma > 0$). Szokás szerint az állapotmegfigyelési hibát

$$e(t) = \hat{x}(t) - x(t) \text{-vel}$$

definiáljuk. Ekkor e exponenciálisan csökken, ha g és h kielégíti a következő összefüggést:

$$gc^T = A - F, h = b \quad (2.31)$$

Ebben az esetben

$$e(t) = \exp(Ft)e_0$$

A (2.31) egyenlet alapján g -t és h -t az alábbiaknak megfelelően kellene választanunk:

$$g_i = f_i - a_i, h_i = b_i \quad (2.32)$$

Mivel a_i és b_i ismeretlen, adaptív megfigyelő meghatározására van szükségünk, úgy, hogy g és h paraméterek exponenciálisan konvergáljanak a (2.32) összefüggések által meghatározott értékekhez. A g és h valódi (ismeretlen) értékét, amely a (2.32)-t kielégíti, g^* és h^* -gal fogjuk jelölni.

A megfigyelő más formába írásához definiáljuk a $2n$ változós rendszert

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_i(t) &= F\xi_i(t) + e_i y(t), \xi_i(0) = 0 \\ \dot{\xi}_{i+n}(t) &= F\xi_{i+n}(t) + e_i u(t), \xi_{i+n}(0) = 0 \end{aligned} \quad (2.33)$$

ahol $e_i = (0 \ 0 \ \dots \ 1 \ 0 \ \dots \ 0)$ i -edik egységvektor.

A (2.30) és (2.33)-ból következik:

$$\hat{x}(t) = [\xi_1(t) \quad \xi_2(t) \quad \dots \quad \xi_{2n}(t)]p + \exp(Ft)\hat{x}_0 \quad (2.34)$$

ahol $p = (g^T h^T)^T$.

Most

$$(sI - F^T)^{-1} e_1 = \det^{-1}(sI - F) [s^{n-1} \quad s^{n-2} \quad \dots \quad s \quad 1]^T$$

Viszont

$$(sI - F^T)^{-1} e_i = \det^{-1}(sI - F) P_i(s)$$

valamely n -nél alacsonyabb rendű P_i polinom mátrixra.

Mivel

$$P_i(s) = T_i [s^{n-1} \quad s^{n-2} \quad \dots \quad s \quad 1]^T$$

valamely konstans T_i mátrixra, és

$$(sI - F^T)^{-1} e_i = T_i (sI - F^T)^{-1} e_1, 1 \leq i \leq n$$

A (2.33) egyenletek így egy egyenlet párba egyszerűsödnek:

$$\begin{cases} \dot{\zeta}_1(t) = F^T \zeta_1(t) + e_1 y(t), \zeta_1(0) = 0 \\ \dot{\zeta}_2(t) = F^T \zeta_2(t) + e_1 u(t), \zeta_2(0) = 0 \end{cases} \quad (2.35)$$

ahol

$$\xi_i(t) = T_i \zeta_1(t), \xi_{i+n}(t) = T_i \zeta_2(t), 1 \leq i \leq n$$

Vegyük észre, hogy pontos p^* paraméterekkel (2.34)-ből

$$x(t) = [\xi_1(t) \quad \dots \quad \xi_{2n}(t)]p^* + \exp(Ft)x_0 \quad (2.36)$$

adódik, mert ekkor $x(t) = \hat{x}(t) - \exp(Ft)e_0$.

Így (2.34)-ből és (2.36)-ból

$$e(t) = [\xi_1(t) \quad \dots \quad \xi_{2n}(t)](p - p^*) + \exp(Ft)e_0 \quad (2.37)$$

kapjuk.

A (2.37) egyenlet azt mutatja, hogy a megfigyelési hiba egy paramétere meg nem feleléséből és egy kezdeti feltétel meg nem feleléséből adódó részre osztható.

Most definiáljuk a következő függvényt:

$$z(t) = [\zeta_1^T(t) \quad \zeta_2^T(t)]^T$$

A

$$c^T (sI - F)^{-1} e_i = e_i^T (sI - F^T)^{-1} e_1$$

azonosságból és a (2.33) és (2.35)-ből következik, hogy

$$c^T [\xi_1(t) \quad \dots \quad \xi_{2n}(t)] = z^T(t)$$

és így (2.34)-ből a megfigyelő kimenete

$$\hat{y}(t) = \hat{z}(t)p + c^T \exp(Ft)\hat{x}_0$$

és a (2.37)-ből a megfigyelési hiba

$$\eta(t) \stackrel{def}{=} \hat{y}(t) - y(t) = z^T(t)(p - p^*) + c^T \exp(Ft)e_0$$

Most p -re adaptációs törvényt (szabályt) kell választanunk, melynél $p(t) \rightarrow p^*$, ha $t \rightarrow \infty$. Kézenfekvő gondolat a $\eta^2(t)$ -nek $p(t)$ szerinti minimalizálására kell törekedni. η^2 -nek p szerinti deriváltja

$$2z(t)\eta(t)$$

így ha kielégítjük a

$$\dot{p}(t) = -Gz(t)[\hat{y}(t) - y(t)] \quad (2.38)$$

egyenletet, ahol G pozitív definit szimmetrikus erősítés mátrix, akkor \dot{p} az η^2 minimalizálására vezető legmeredekebb lejtés felé mutat.

Megmutatható (Kreisselmeier, 1977.), hogy ha

$$0 \leq k_1 I \leq \int_t^{t+T} z(\tau)z^T(\tau)d\tau \leq k_2 I \quad (2.39)$$

minden $t \geq 0$ -ra valamely k_1 , k_2 , T konstansra, akkor az adaptív szabályozó globálisan exponenciálisan stabil, azaz $\tilde{p}(t) \rightarrow p^*$ és $e(t) \rightarrow 0$ exponenciális gyorsasággal. Ezenkívül a stabilitás exponenciális foka nem kisebb, mint

$$\min \left\{ \sigma, \frac{k_1 \lambda_{\min}(G)}{[1 + nk_2 \lambda_{\max}(G)]^2} \right\}$$

ahol $\lambda_{\min}(G)$ és $\lambda_{\max}(G)$ a G legkisebb és legnagyobb sajátértékei. Vegyük észre, hogy z -re (k_1 -gyel kapcsolatban) tett (2.39) feltétel tulajdonképpen a $z(t)$ elemeinek lineáris függetlenségét biztosítja. Látható, hogy $z_1(t), \dots, z_{2n}(t)$ lineárisan függetlenek (mint "t" függvényei), ha az $u(t)$ bemenet legalább n különböző frekvenciát tartalmaz. Itt ismét látható, hogy adaptív rendszer gerjesztési foka döntő jelentőségű.

Másfajta adaptációs szabályt kaphatunk a költségfüggvény minimalizálásával.

$$\begin{aligned} J(t) &= \int_0^t [z^T(\tau)p(\tau) + c^T \exp(F\tau)\hat{x}_0 - y(\tau)]^2 \exp[-q(t-\tau)]d\tau = \\ &= \int_0^t [z^T(\tau)\Delta p(\tau) + c^T \exp(F\tau)e_0]^2 \exp[-q(t-\tau)]d\tau \end{aligned}$$

a (2.36)-ból, ahol $\Delta p = p - p^*$. Akkor

$$\frac{\partial J}{\partial p} = 2[R(t)p(t) + r(t)]$$

ahol

$$R(t) = \int_0^t z(\tau) z^T(\tau) \exp[-q(t-\tau)] d\tau \quad (2.40)$$

és

$$r(t) = \int_0^t z(\tau) [c^T \exp(F\tau) \hat{x}_0 - y(\tau)] \exp[-q(t-\tau)] d\tau \quad (2.41)$$

Mint fent, az adaptációs szabályt a következőképpen választjuk:

$$\dot{p}(t) = -G[R(t)p(t) + r(t)] \quad (2.42)$$

valamely pozitív definit szimmetrikus erősítés G -re. Vegyük észre, hogy R -et és r -et megkapjuk a

$$\begin{aligned} \dot{R}(t) &= -qR(t) + z(t)z^T(t), R(0) = 0 \\ \dot{r}(t) &= -qr(t) + z(t)[c^T \exp(Ft) \hat{x}_0 - y(t)], r(0) = 0 \end{aligned} \quad (2.43)$$

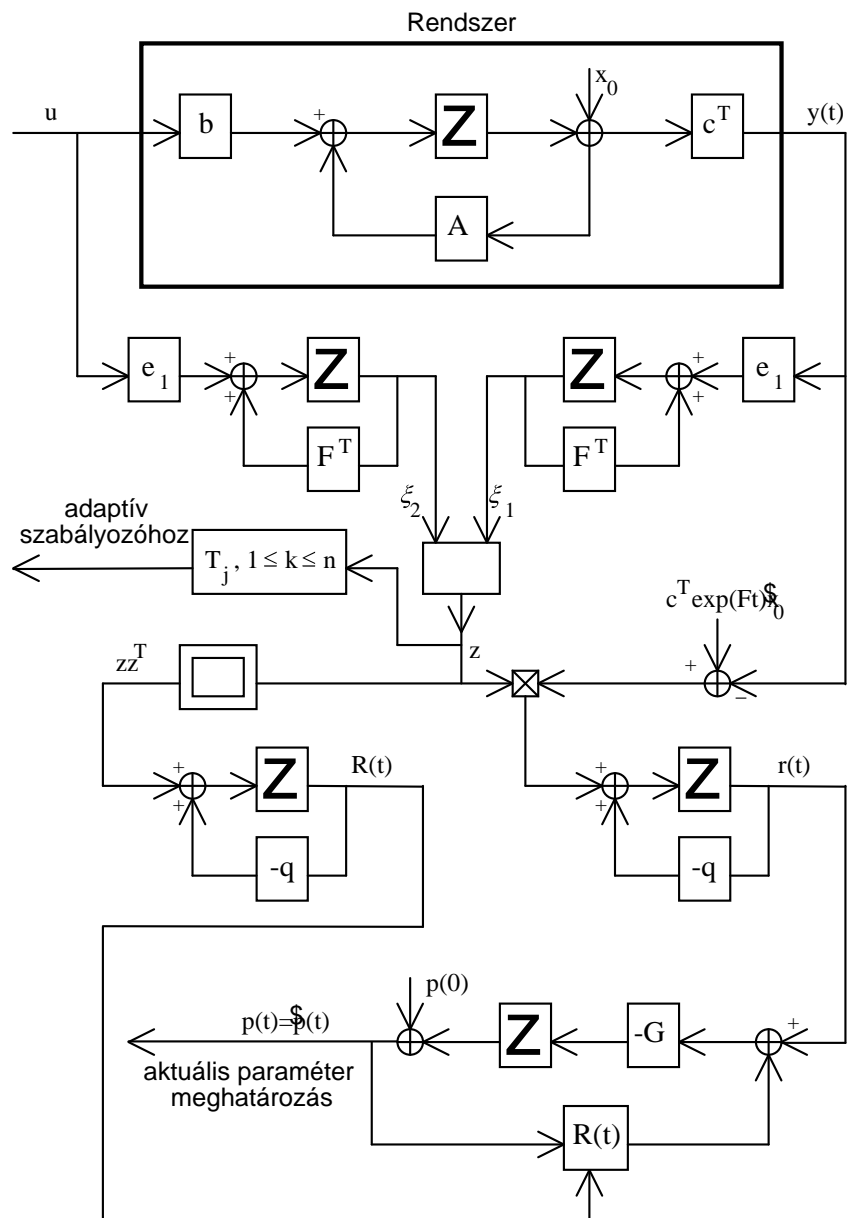
differenciálegyenletekből. Kimutatható, hogy ha $z(t)$ korlátos, és létezik olyan k, T , hogy

$$\int_t^{t+T} z(\tau) z^T(\tau) d\tau \geq kI > 0, t \geq 0$$

minden $t \geq 0$ -ra, akkor az adaptív megfigyelő globálisan exponenciálisan stabil, legalább

$$\min[\sigma, q, k\lambda_{\min}(G)\exp(-qT)] \quad (2.44)$$

gyorsan. A (2.42) adaptív megfigyelő hatásvázlata a 2.4.ábrán látható.



2.4.ábra
Adaptív megfigyelő

A fenti adaptív megfigyelőt a következő módon használhatjuk adaptív szabályozás esetén (Kreisselmeier, 1982.). A pillanatnyi paramétert (nevezzük \hat{p} -nak) $\hat{p} = [\hat{g}^T \hat{h}^T]^T$ adja meg, és definiáljuk

$$\hat{A} = F + \hat{g}c^T, \hat{b} = \hat{h}$$

és $\hat{Q} = [\hat{b}\hat{A}\hat{b}\dots\hat{A}^{n-1}\hat{b}]$

Legyen $P(s)$ tetszőleges n -edrendű polinom baloldali félsíkra eső zérushelyekkel (azaz Hurwitz polinom). Definiáljuk

$$\begin{cases} \dot{\hat{\eta}} = -\hat{Q}[\hat{Q}\hat{\eta} - e_n]\hat{\eta}(0) = \hat{\eta}_0 \\ \hat{k} = -P(\hat{A}^T)\hat{\eta} \end{cases} \quad (2.45)$$

Itt $P(\hat{A}^T)$ egyszerűen az a mátrix, melyet $P(s)$ -be \hat{A}^T -nek "s" helyébe helyettesítéssel kapunk. Most az adaptív irányítás törvénye:

$$u = \hat{k}^T \hat{x} + u_t \quad (2.46)$$

ahol u_t egy külső jel, amelynek megfelelő gerjesztést (végrehajtást) kell biztosítani a rendszerre, hogy a megfelelő adaptáció létrejöhessen. Ha x_0 -t zérusnak választjuk a (2.34)-ből

$$\hat{x}(t) = M\hat{p}$$

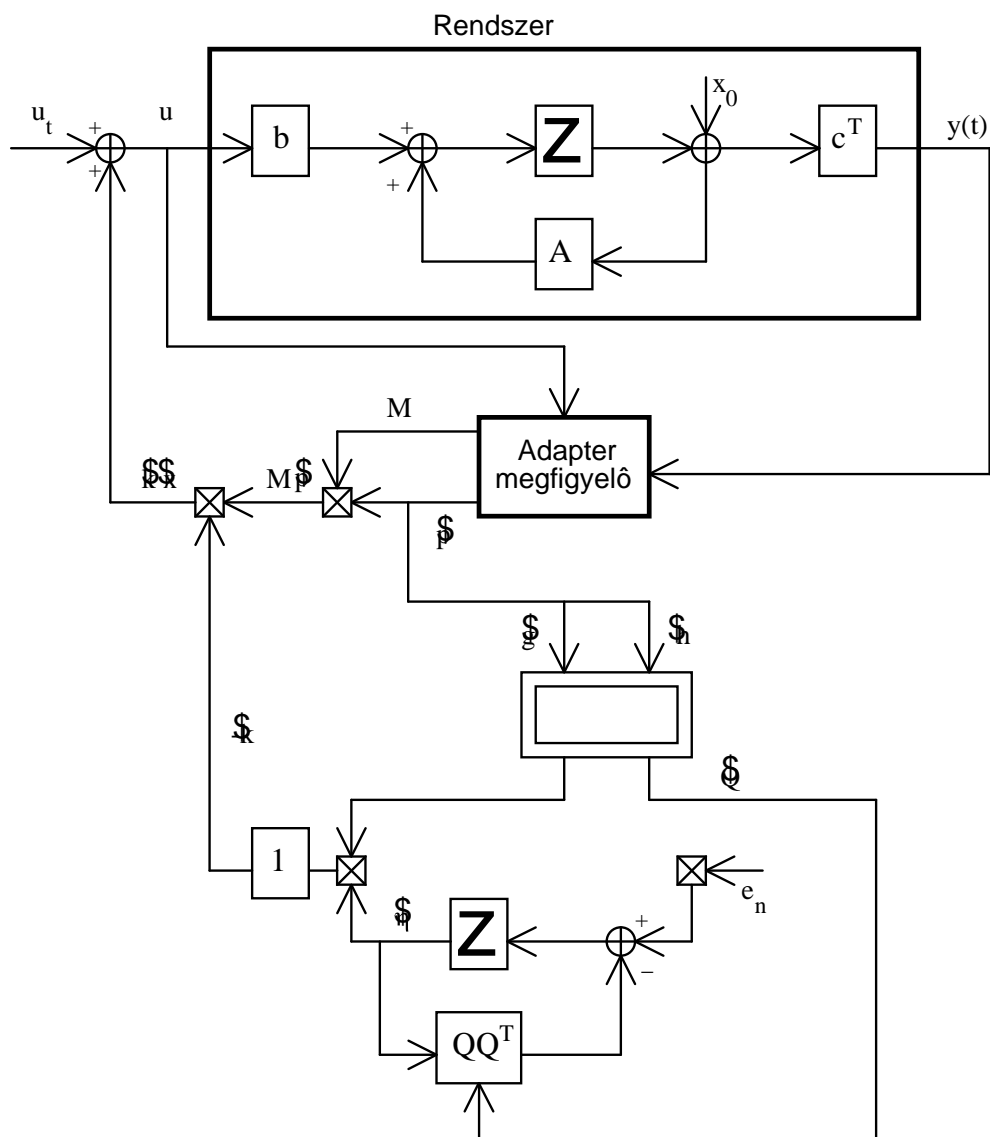
ahol

$$M = [\xi_1(t), \dots, \xi_{2n}(t)]$$

és így a (2.46) a következő alakú:

$$u = \hat{k}^T M\hat{p} + u_t \quad (2.47)$$

Erről az irányítási törvényről belátható, hogy lokálisan stabil, ha $u_t = 0$ és globálisan stabil (azaz $\hat{p} \rightarrow p^*, x \rightarrow 0$) ha u_t elegendő gerjesztést jelent. Sőt Kreisselmeier (1982.) kimutatja, hogy ez a szabályozás eredményes bizonyos időinvariáns (változó paraméterű) rendszereknél és külső zavarások esetén is. A teljes adaptív szabályozási rendszer a 2.5.ábrán látható.

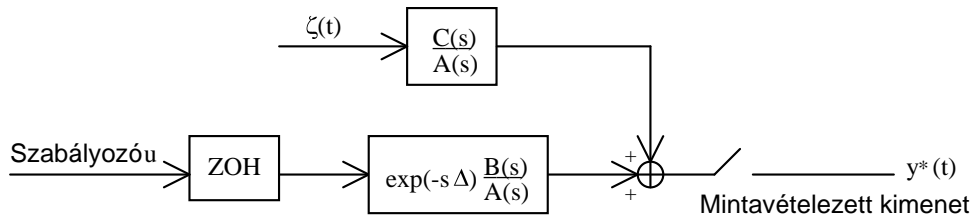


2.5.ábra
Adaptív szabályozás megfigyelővel

3. ÖNHANGOLÓ (SELF-TUNING) SZABÁLYOZÁS

3.1 Minimális varianciájú szabályozás

Az önhangoló (self-tuning) szabályozás fogalmát Aström és Wittenmark (1973.) vezette be, és a MRASZ-tól az különbözteti meg, hogy a rendszer paramétereit most állandónak, de ismeretlennek tételezzük fel. Az önhangoló szabályozás célja olyan szabályozási stratégia létrehozása és tervezése, amely konvergál ahhoz az optimális stratégiához, amelyet akkor kapnánk, ha ismernénk a rendszer paramétereit. A legegyszerűbb optimálkritérium az, hogy az u szabályozást úgy választjuk, hogy a rendszer $E(y^2)$ varianciája minimális legyen. Ennek a minőségszabályozásnál van nagy gyakorlati jelentősége, ahol kívánalom a termék azonos jellemzőinek biztosítása.



3.1.ábra

Zajos mintavételezett rendszer

Tekintsük a 3.1.ábrán látható rendszert, ahol a zavarást szurt fehér zajnak vesszük és feltesszük, hogy $C(z)$ minden gyöke az egységkörön belül van. Z-transzformációval a szabályozott szakasz impulzus-átviteli függvénye:

$$G(z^{-1}) = z^{-k} \frac{(b_0 + b_1 z^{-1} + \dots + b_n z^{-n})}{1 + a_1 z^{-1} + \dots + a_n z^{-n}} = z^{-k} \frac{B(z^{-1})}{A(z^{-1})} \quad (3.1)$$

A zajszűrő impulzus-átviteli függvénye:

$$H(z^{-1}) = z^{-k} \frac{1 + c_1 z^{-1} + \dots + c_n z^{-n}}{1 + a_1 z^{-1} + \dots + a_n z^{-n}} = z^{-k} \frac{C(z^{-1})}{A(z^{-1})} \quad (3.2)$$

ahol $k \geq 1$ és $b_0 \neq 0$. Legyen a zajszekvencia varianciája σ^2 (állandó).

A rendszer bemenete és kimenete közötti összefüggés ekkor:

$$y(t) = \frac{B(z^{-1})}{A(z^{-1})} u(t-k) + \frac{C(z^{-1})}{A(z^{-1})} \zeta(t)$$

vagy

$$Ay(t+k) = Bu(t) + C\zeta(t+k) \quad (3.3)$$

ahol elhagytuk a z^{-1} inverz differenciál operátorra való utalást. A szabályozó u -vektorát a "költség" minimalizálásához választjuk.

Így

$$I = E[y^2(t+k)]$$

ahol t diszkrét időt jelöl.

A (3.3)-ból látható, hogy

$$\begin{aligned} \frac{C(z^{-1})}{A(z^{-1})} \zeta(t+k) &= [\zeta(t+k) + n_1 \zeta(t+k-1) + \dots + n_{k-1} \zeta(t+1)] + \\ &+ [n_k \zeta(t) + n_{k+1} \zeta(t-1) + \dots] \\ &\stackrel{def}{=} \tilde{n}(t+k) + \hat{n}(t+k) \end{aligned} \quad (3.4)$$

ahol n_i konstansokat C/A polinomosztással kapjuk. Ezért

$$I = E \left\{ \left[\frac{B}{A} u(t) + \hat{n}(t+k) + \tilde{n}(t+k) \right]^2 \right\} = E \left\{ \left[\frac{B}{A} u(t) + \hat{n}(t+k) \right]^2 + \tilde{n}^2(t+k) \right\}$$

mivel $\tilde{n}(t+k)$ és $[u(t), \hat{n}(t+k)]$ korrelálatlanok. Most

$$\frac{dI}{du(t)} = 2E \left\{ \left[\frac{B}{A} u(t) + \hat{n}(t+k) \right] b_0 \right\} = 0$$

és így a minimális varianciájú szabályozás

$$u(t) = -\frac{A}{B} \hat{n}(t+k) \quad (3.5)$$

Felhasználva a (3.3)-(3.5) összefüggéseket, látható, hogy ezt a szabályozást használva, a kimenet

$$y(t+k) = \tilde{n}(t+k)$$

Megjegyezzük, hogy \tilde{n} a jósolt zavarás, és a szabályozó kiszűri ezt a zavarást $\tilde{n}(t+k)$ hibát hagyva. A zajról nyerhető információ felbontható a t időpillanatig meglévő és a t és $t+k$ időpont között predikálható részre az E és F bevezetésével.

A (3.5) szabályozás használható formába írásához definiáljuk a z^{-1} -beli E és F polinomokat

$$\frac{C}{A} = E + z^{-k} \frac{F}{A} \quad (3.6)$$

azonossággal, ahol

$$\begin{aligned} E(z^{-1}) &= 1 + e_1 z^{-1} + \dots + e_{k-1} z^{-k+1} \\ F(z^{-1}) &= f_0 + f_1 z^{-1} + \dots + f_{n-1} z^{-n+1} \end{aligned}$$

Ekkor

$$\hat{n}(t+k) = \frac{F}{A} \zeta(t) = \frac{F}{A} \left[\frac{A y(t) - z^{-k} B u(t)}{C} \right]$$

és így (3.5) szerint

$$u(t) = -\frac{F}{B} \left[\frac{Ay(t) - z^{-k} Bu(t)}{C} \right]$$

vagy

$$u(t) \left(\frac{C - z^{-k} F}{C} \right) = -\frac{FA}{BC} y(t)$$

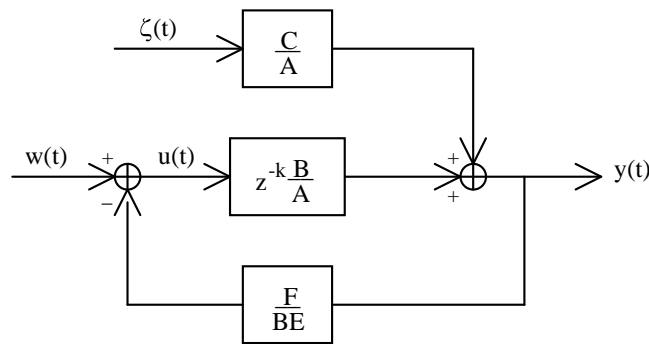
A (3.6)-ból

$$C - z^{-k} F = AE$$

így a végeredmény a következő:

$$u(t) = -\frac{F}{BE} y(t) \quad (3.7)$$

A (3.7) a minimális varianciájú visszacsatolás értékét adja. Egy adott $w(t)$ alapjel esetén létrehozhatjuk a 3.2.ábrán látható visszacsatolt rendszert.



3.2.ábra

Minimális varianciájú visszacsatolt szabályozási rendszer

A zárthurkú átviteli függvény

$$y(t) = z^{-k} \frac{B}{A} \left[w(t) - \frac{F}{BE} y(t) \right] + \frac{C}{A} \zeta(t) = z^{-k} \frac{BE}{C} w(t) + E \zeta(t)$$

a (3.6)-ból. Megjegyezzük, hogy a rendszer minimálfázisú és a szabályozás struktúráját pontosan ismerjük. Ha a rendszer paraméterek ismeretlenek, először identifikálnunk kell a folyamat modellt a legkisebb négyzetek módszerének alkalmazásával. Ez egy önhangoló szabályozóhoz vezet.

3.2 Minimális varianciájú önhangoló szabályozó

Vizsgáljuk ismét a (3.3) folyamatot, ahol kezdetben feltételezzük, hogy $C = 1$, azaz

$$Ay(t) = Bu(t - k) + \zeta(t) \quad (3.8)$$

Ha $a_1 \dots a_n, b_0 \dots b_n$ paraméterek ismeretlenek, meg kell becsülni őket, például az előző fejezetben megadott rekurzív legkisebb négyzet módszerével. Legyen

$$\beta(t) = [\hat{a}_1(t), \dots, \hat{a}_n(t), \hat{b}_0(t), \dots, \hat{b}_n(t)]^T$$

a becsült paramétervektor a t időpillanatban. Ekkor a hiba

$$\varepsilon(t) = y(t) - z^T(t)\beta(t-1)$$

ahol

$$z^T(t) = [-y(t-1), \dots, -y(t-n), u(t-k), \dots, u(t-k-n)]$$

az ún. szituációvektor, amely a bemenő jelről és a kimenő jelről tárolt információkat tartalmazza.

$E(\varepsilon^2)$ minimalizálása elvezet a rekurzív legkisebb négyzetek módszeréhez. Minden lépésnél meg tudjuk oldani a következő egyenletet (ld. (3.6)-t)

$$1 = \hat{A}E + z^{-k}F \quad (3.9)$$

E-re és F-re, amelyeket a szabályozás (3.7) összefüggésébe kell behelyettesítenünk. Ez vezet az explicit önhangoló (self-tuning) algoritmushoz, ahol a szabályozás a becsült folyamat modell paramétereken alapszik.

Az explici algoritmusnak megvan az a hátránya, hogy minden lépésnél meg kell oldani a (3.9) egyenletet. Létrehozhatunk implicit algoritmust is, amely közvetlenül becsüli meg a szabályozási paramétereket a következőképpen. A (3.8)-ból

$$EAy(t) = EBu(t-k) + E\zeta(t)$$

és az

$$1 = EA + z^{-k}F$$

egyenlet felhasználásával

$$y(t) = Fy(t-k) + Gu(t-k) + E\zeta(t)$$

ahol

$$G(z^{-1}) = E(z^{-1})B(z^{-1})$$

Innen:

$$\begin{aligned} y(t) &= (f_0 + f_1 z^{-1} + \dots + f_{n-1} z^{-n+1})y(t-k) + \\ &+ (g_0 + g_1 z^{-1} + \dots + g_{n+k-1} z^{-n-k+1})u(t-k) + E(z^{-1})\zeta(t) = \\ &= z^T(t)\beta(t-1) + \tilde{n}(t) \end{aligned}$$

ahol

$$\begin{aligned} z^T(t) &= [y(t-k), y(t-k-1), \dots, y(t-k-n+1), u(t-k), \dots, u(t-k-n+1)] \\ \beta(t-1) &= (f_0, f_1, \dots, f_{n-1}, g_0, g_1, \dots, g_{n+k-1})^T \\ \tilde{n}(t) &= \varepsilon(t) = \zeta(t) + e_1 \zeta(t-1) + \dots + e_{k-1} \zeta(t-k+1) \end{aligned}$$

Az $e(t)$ folyamat független $z(t)$ szituációvektortól és így a rekurzív legkisebb négyzetek módszere (algoritmus) torzítatlan becslést ad F-re és G-re, amelyeket minden lépésnél a (3.7) szabályozásnál használhatunk fel. Így

$$u(t) = -\frac{F}{BE} y(t) = -\frac{F}{G} y(t)$$

azaz

$$Gu(t) + Fy(t) = 0 \quad (3.10)$$

Ha $C \neq 1$, akkor az derül ki, hogy a rekurzív legkisebb négyzetek algoritmusára még mindig torzítatlan becslést ad és a fentiekkel megegyező levezetés vezet a (3.10) implicit algoritmusra. Fontos megjegyezni, hogy a fenti algoritmusokban a paraméterbecslők nem egyszeresek. Például tekintsünk egy első rendű rendszert

$$\begin{aligned} y(t) &= ay(t-1) + bu(t-1) + \varepsilon(t) \\ u(t) &= ky(t) \end{aligned}$$

visszacstolással. Ekkor tetszőleges λ -ra

$$y(t) = (a - k\lambda)y(t-1) + (b + \lambda)u(t-1) + \varepsilon(t)$$

és így tetszőleges λ -ra az

$$(a - k\lambda, b + \lambda)$$

paraméterek ugyanazt az értéket adják a

$$\sum \varepsilon^2(t)$$

veszteségfüggvényre. Mint a MRASZ-ről szóló fejtegetéseinkben is, egyszeres paraméterbecslőket akkor kapunk, ha a rendszer bemenete állandóan gerjesztett állapotban van.

3.3 Általánosított legkisebb variancia

Az előző fejezetbe tárgyalt minimális varianciájú szabályozóban nem vettük figyelembe a $w(t)$ bemenő jelet, s az $u(t)$ szabályozó jelet sem súlyoztuk az I költségfüggvényben. Ez könnyen megoldható, ha a költségfüggvényt a következőképpen írjuk fel:

$$I = E \{ [Py(t+k) - Rw(t)]^2 + [Qu(t)]^2 \} \quad (3.11)$$

ahol P , Q és R z^{-1} -ben átviteli függvények és a konstruktör (tervező) által szabhatók meg, p_0 pedig 1-nek vehető. Mint fentebb feltételezzük, hogy a rendszer modellünk

$$Ay(t) = Bu(t-k) + C\zeta(t)$$

Ekkor a

$$C = EA + z^{-k}F$$

összefüggést is felhasználva, kapjuk:

$$Cy(t) - Fy(t-k) = Gu(t-k) + EC\zeta(t)$$

ugyanazzal a megjegyzéssel, mint fent. Így

$$y(t) = \frac{Fy(t-k) + Gu(t-k)}{C} + E\zeta(t) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{y}(t) + \tilde{n}(t)$$

Behelyettesítve $y(t)$ -t a (3.11) költségfüggvénybe, kapjuk:

$$\begin{aligned} I &= E\left\{\left[P\left[\hat{y}(t+k) + \tilde{n}(t+k)\right] - Rw(t)\right]^2 + [Qu(t)]^2\right\} = \\ &= [P\hat{y}(t+k) - Rw(t)]^2 + [Qu(t)]^2 + \alpha^2 \end{aligned}$$

ahol

$$\alpha^2 = E\left\{[P\tilde{n}(t+k)]^2\right\}$$

mivel $\hat{y}(t+k)$, $w(t)$ és $u(t)$ ismertek és determinisztikusak és $P\tilde{n}(t+k)$ ezekkel a mennyiségekkel korrelálatlan.

Most

$$\frac{dI}{du(t)} = 2[p\hat{y}(t+k) - Rw(t)]b_0 + 2q_0Qu(t) = 0 \quad (3.12)$$

ahol

$$Q = q_0 + q_1z^{-1} + \dots$$

Vegyük észre, hogy $\hat{y}(t+k)$ -nak $u(t)$ -től való függését

$$\frac{G}{C}u(t) = \frac{BE}{C}u(t) = (b_0 + \alpha_1z^{-1} + \alpha_2z^{-2} + \dots)u(t)$$

adja meg valamely α_i -re. Definiáljuk

$$\boxed{\Phi^*(t+k) \stackrel{\text{def}}{=} P\hat{y}(t+k) + \frac{q_0Q}{b_0}u(t) - Rw(t)} \quad (3.13)$$

Ekkor a (3.12) által adott szabályozási törvény:

$$\Phi^*(t+k) = 0$$

Ha szintén definiáljuk

$$\Phi(t+k) = Py(t+k) + \frac{q_0Q}{b_0}u(t) - Rw(t)$$

akkor

$$\begin{aligned} \Phi(t+k) &= P(\hat{y}(t+k) + \tilde{n}(t+k)) + \frac{q_0Q}{b_0}u(t) - Rw(t) = \\ &= \Phi^*(t+k) + \varepsilon(t+k) \end{aligned}$$

ahol

$$\varepsilon(t) = P\tilde{n}(t).$$

Világos, hogy $\varepsilon(t+k)$ korrelálatlan $\Phi^*(t+k)$ -val, ami $\Phi(t+k)$ legkisebb négyzetek optimális becslője.

A szabályozó alkalmazásához figyeljük meg, hogy

$$\Phi^*(t+k) = P \left[\frac{Fy(t) + Gu(t)}{C} \right] + \frac{q_0 Q}{b_0} u(t) - Rw(t) = 0$$

vagy

$$C\Phi^*(t+k) = F'y(t) + G'u(t) + H'w(t) = 0$$

ahol

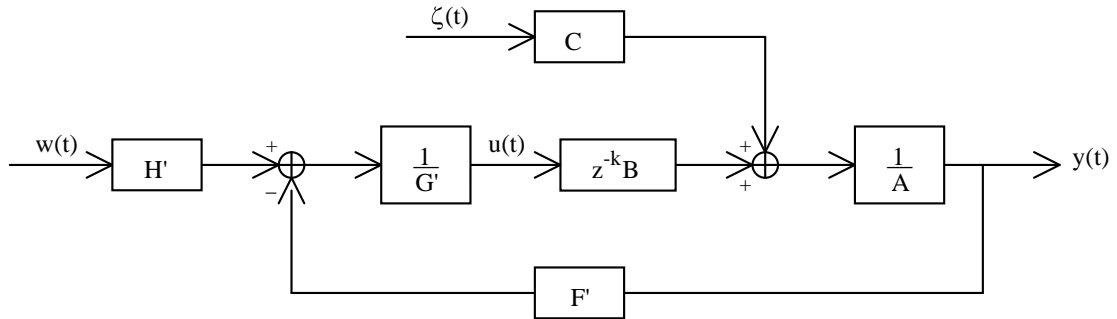
$$F' = PF$$

$$G' = PG + CQ'$$

$$H' = -CR$$

$$Q' = \frac{q_0 Q}{b_0}$$

Az általánosított legkisebb varianciájú szabályozási rendszer hatásvázlata a 3.3.ábrán látható.



3.3.ábra

Általánosított minimális varianciájú szabályozási rendszer

Könnyű belátni, hogy a zárt szabályozási kör átviteli függvénye:

$$y(t) = z^{-k} \frac{B}{PB + Q'A} Rw(t) + \frac{PEB + Q'C}{PB + Q'A} \zeta(t)$$

A rendszer karakterisztikus egyenlete:

$$PB + Q'A = 0 \quad (3.14)$$

Ezt az egyenletet P és Q' megfelelő választása módosíthatja, ami különböző szabályozásokra vezet, mivel u kifejezése:

$$u(t) = \frac{CR}{PBE + CQ'} w(t) - \frac{PF}{PBE + CQ'} y(t) \quad (3.15)$$

Három esetet vizsgálunk:

1. Ha $P = 1$, $R = Q = 0$, akkor (3.15) a minimális varianciájú szabályozásra (3.7) redukálódik.
2. Ha $P = 1$, $R = 1$, $Q' = \lambda$, akkor az átviteli függvény

$$y(t) = \frac{EB + \lambda C}{B + \lambda A} \zeta(t) + \frac{z^{-1}B}{B + \lambda A} w(t)$$

$\lambda = 0$ -nál a szabályozó megpróbálja "lengetni" a szabályozott szakaszt, ami instabil rendszerhez vezet, ha a nyílthurkú rendszer nem minimálfázisú. Ha azonban a nyílthurkú rendszer stabilis (azaz a $A(z^{-1}) = 0$ gyökei az egységsugarú körön belül vannak), akkor megfelelő értéket választva (tuningolva=hangolva) a zárthurkú pólusokat a nyílthurkúhoz tetszőlegesen közel hozhatjuk. Megjegyzendő, hogy a nagy λ értékek a költségfüggvénybeli szabályozást a "set point tracking" minőségének rovására súlyozza.

3. Ha $Q = 0$, a következő bemenet-kimenet összefüggést kapjuk a zárt körre:

$$y(t) = E\zeta(t) + z^{-k} \frac{R}{P} w(t)$$

Így a rendszer jól követi R/P -t, késleltetett bemenettel, így ez egyfajta modell-referenciás szabályozás. A (3.15)-ből világos, hogy a karakterisztikus polinom PBE, amelynek gyökei vannak az egységsugarú körön kívül nem-minimálfázisú rendszerek esetén.

A kibővített minimális varianciájú algoritmus használható önhangoló szabályozó kiterjesztésére (ld. Clarke és Gawthrop, 1975., 1979.). Mint fentebb, u -t megkaphatjuk az

$$F'y(t) + G'u(t) + H'w(t) = 0$$

egyenletből. De az F' , G' és H' ismeretlen paraméterek és ezért, mint az egyszerű minimális varianciájú esetben, rekurzív legkisebb négyzetes becslést használhatunk ezeknek a paramétereknek a megbecsülésére. Ha $C = 1$, akkor

$$\begin{aligned} \Phi(t+k) &= \Phi^*(t+k) + \varepsilon(t+k) = \\ &= F'y(t) + G'u(t) + H'w(t) + \varepsilon(t+k) = \\ &= z^T(t)\beta(t-1) + \varepsilon(t+k) \end{aligned}$$

ahol

$$z^T(t) = \{y(t), y(t-1), \dots, u(t), u(t-1), \dots, w(t), w(t-1), \dots\}$$

és

$$\beta^T(t-1) = \{f'_0, f'_1, \dots, g'_0, g'_1, \dots, h'_0, h'_1, \dots\}$$

Ezután $\varepsilon^2(t+k)$ minimalizálásával megkapjuk a β rekurzív legkisebb négyzetes becslését (ahol f'_i , g'_i , h'_i az F' , G' , H' polinomok együtthatói). Ha $C \neq 1$, akkor ugyanezt az algoritmust használhatjuk az önhangolás előállítására abban az esetben, ha a β paraméterbecslő a β igazi értékéhez konvergál. (ld. Ljung, 1977.)

Ezt az önhangoló szabályozásról szóló rövid bevezetőt azzal zárjuk, hogy megemlítjük, hogy önhangoló szabályozót lehet tervezni "pólusáthelyező regulátor"

alapján is, ahol a szabályozást úgy választják, hogy a zárthurkú átviteli függvénynek adott póluskészlete legyen. Vizsgáljuk például az

$$Ay(t) = z^{-k} Bu(t) + C\zeta(t)$$

modellre, ahol A , B és C z^{-1} -ben n_A , n_B és n_C -ed rendű polinomok és explicite k lépésnyi késést foglal magába. Ekkor, visszacsatolt szabályozást használva

$$G(z^{-1})u(t) = -F(z^{-1})y(t)$$

Ezért

$$(AG + z^{-k}BF)y(t) = CG\zeta(t)$$

és így, ha F -et és G -t úgy választjuk, hogy kielégítsék

$$AG + z^{-k}BF = CT$$

egyenletet, ahol T valamilyen kívánt (vagy adott) polinom, akkor

$$y(t) = \frac{G}{T}\zeta(t)$$

úgyhogy a zárthurkú pólusok a T gyökei.

Ha

$$G = 1 + g_1 z^{-1} + \dots + g_{n_G} z^{-n_G}$$

$$F = f_0 + f_1 z^{-1} + \dots + f_{n_F} z^{-n_F}$$

és

$$T = 1 + t_1 z^{-1} + \dots + t_{n_T} z^{-n_T}$$

akkor egyértelműen megoldható a (3.16), ha

$$n_G = n_B + k - 1$$

$$n_F = n_A - 1$$

$$n_T = n_A + n_B + k - 1 - n_C$$

ahol az utolsó feltétel annak biztosítására szükséges, hogy a minták számának növekedésével a szabályozás ahhoz konvergáljon, amit a folyamat dinamikájának ismeretében terveztünk volna.

A póluskijelölés önhangoló (self-tuning) szabályozó tervezéséhez ($C = 1$) rekurzív legkisebb négyzetek becslési módszerét alkalmazzuk az

$$Ay(t) - z^{-k}Bu(t) = \zeta(t)$$

modellre, az A és B paraméterek becslésére, és a (3.16) megoldására adott T mintavételi időközökre, G -re és F -re, és létrehozunk a

$$u = -\frac{F}{G}y$$

szabályozást. A kibővített önhangoló szabályozás $C \neq 1$ esetében hasonló módon követhető (ld. Wellstead és Sanoff, 1981.).

4. IRODALOMJEGYZÉK

1. Landau, I. D. (1974.) A survey of model reference adaptive techniques-theory and applications, *Automatica*, 10, 353-79.
2. Landau, I. D. (1979.) Adaptive Control: The Model Reference Approach, *Marcel Dekker*.
3. Landau, I. D. and Courtiol, B. (1974.) Design of multivariable adaptive model following control systems, *Automatica*, 10, 483-94.
4. Lion, P. M. (1967.) Rapid identification of linear and nonlinear systems, *AIAA J.*, 5, 1835-42.
5. Ljung, L. (1977.) Analysis of recursive stochastic algorithms, *IEEE Trans. Aut. Control*, 22, 551-75.
6. Longchamp, R. (1980.) Stable feedback control of bilinear systems, *IEEE Trans. Aut. Control*, 25, 302-6.
7. Luders, G. and Narendra, K. S. (1974.) A new canonical form for an adaptive observer, *IEEE Trans. Aut. Control*, 19, 117-19.
8. Monopoli, R. V. (1974.) Model reference adaptive control with an augmented error signal, *IEEE Trans. Aut. Control* 19, 474-84.
9. Morse, A. S. (1980.) Global stability of parameter-adaptive control systems, *IEEE Trans. Aut. Control*, 25, 433-9.
10. Narendra, K. S. and Kudva, P. (1974.) Stable adaptive schemes for system identification and control, *IEEE Trans. Systems, Man and Cyb.*, 4, Part I, 542-51; Part II, 552-60.
11. Narendra, K. S. and Monopoli, R. V. (1980.) Applications of Adaptive Control, *Academic Press*.
12. Narendra, K. S. and Valavani, L. S. (1980.) A comparison of Lyapunov and hyperstability approaches to adaptive control of continuous systems, *IEEE Trans. Aut. Control* 25, 243-47.
13. Narendra, K. S., Lin, Y-H. and Valavani L. S. (1980.) Stable adaptive controller design, Part II: proof of stability, *IEEE Trans. Aut. Control*, 25, 440-8.
14. Parks, P. C. (1966.) Lyapunov redesign of model reference adaptive control systems, *IEEE Trans. Aut. Control*, 11 362-7.
15. Peterson, B. B. and Narendra, K. S. (1982.) Bounded error adaptive control, *IEEE Trans. Aut. Control*, 27, 1161-8.
16. Utkin, V. I. (1977.) Variable structure systems with sliding modes, *IEEE Trans. Aut. Control*, 22, 212-22.
17. Van Amerongen, J. and Udink ten Cate, A. J. (1973.) Adaptive autopilots for ships, *Proc. IFAC/IFIP Symp. Ship Operation Automation*, Oslo, Norway.
18. Weissenberger, S. (1966.) Stability-boundary approximations for relay-control systems via a steepest ascent construction of Lyapunov functions, *J. Basic Eng.*, *ASME*, 88, 419-28.
19. Wellstead, P. E. and Sanoff, S. P. (1981.) Extended self-tuning algorithm, *Int. J. Control*, 34, 433-55.
20. Banks, S. P. (1986.) Control Systems Engineering, *Prentice-Hall Int.*
21. Tsien, H. S. - Serdengecti, S.: Analysis of Peak-Holding, *Optimilizing Control. J. Aeronaut. Sci.*, 22/1955 pp. 561-570
22. Benner, A. H. - Drenick, R.: An Adaptive Servo System, *1955 IRE Convention Record* Pt. 4, pp. 8-14