

# Primjena algoritamske diferencijacije u određivanju rubova mnogostrukosti za model kemijske kinetike alfa-pinena

Marko Imbrišak

Fizički odsjek, PMF, Bijenička c. 32, 10 000 Zagreb

11. siječnja 2019.

## Sažetak

Većinu prirodnih pojava opisujemo modelima, od kojih mnogi imaju velik broj slobodnih parametara. Parametre modela možemo odrediti postupkom prilagodbe teorijskih predviđanja modela empirijskim podacima, ali često ne možemo razlučiti sve stupnjeve slobode modela te će stoga neke kombinacije parametara modela biti slabo određene. Aproksimacijska metoda mnogostrukosti s rubom (MBAM) koristi metode diferencijalne geometrije kako bi eliminirala slabo određene stupnjeve slobode modela. Problem u proračunima MBAM metodom je u tome da zahtijeva numeričke derivacije po parametrima sustava, čiji je izračun kompliciran u slučajevima kada su funkcije koje trebamo derivirati rješenja diferencijalnih jednadžbi. Implementirali smo metodu algoritamske diferencijacije u generalizirani Eulerov integrator kako bismo smanjili broj koraka integratora kemijske kinetike  $\alpha$ -pinena. Kako bismo ocijenili pouzdanost metode, koristili smo Markov Chain Monte Carlo algoritam. Razlike u derivacijama u odnosu na klasični *odeint* paket pripisujemo osjetljivosti inverza metrike na male perturbacije.

## 1 Uvod

Opis većine prirodnih pojava temelji se na modelima koji uključuju određeni broj slobodnih parametara. Parametre modela možemo odrediti postupkom prilagodbe teorijskih predviđanja modela empirijskim podacima. Pritom najčešće nemamo na raspolaganju dovoljno podataka da bismo mogli razlučiti sve stupnjeve slobode modela te će stoga neke kombinacije parametara modela biti slabo određene. Modele koji pokazuju eksponencijalni raspon osjetljivosti predviđanja na promjene parametara zovemo aljkavi modeli<sup>1</sup>. Unatrag nekoliko godina pokrenuta su sustavna istraživanja mogućnost eliminiranja slabo određenih stupnjeva slobode modela, ali uz zadržavanje odgovarajuće kvalitete opisa promatrane pojave. Ukoliko bi se ovakav postupak pokazao uspješnim, imao bi izrazito velik potencijal za primjene u raznim područjima, od prirodnih preko biomedicinskih pa sve do društvenih znanosti [1, 2, 3, 4].

Aproksimacijska metoda mnogostrukosti s rubom<sup>2</sup> (MBAM) [4] koristi se za razdvajanje onih parametara koji su doista potrebni u modelu<sup>3</sup> od onih parametara koji ne utječu bitno na konačne rezultate<sup>4</sup>. Model s manjim brojem parametara općenito će biti pogodniji za numeričke proračune, a dat će nam i bolji uvid u danu problematiku.

Problem u proračunima MBAM metodom je u tome da zahtijeva prvu i drugu numeričku derivaciju po parametrima sustava. Problem nalaženja derivacija po parametrima je kompliciran u slučajevima kada su funkcije koje trebamo derivirati rješenja diferencijalnih jednadžbi. Numeričke metode integracije diferencijalnih jednadžbi zahtijevaju vrlo male korake integracije te višestruka evaluacija u svrhu računanja derivacija po parametrima nije praktična za velike sustave. Razvili smo proširenje Eulerovog integratora primjenom algoritamske diferencijacije kako bi zaobišli problem višestrukih rješavanja diferencijalnih jednadžbi za MBAM metodu.

<sup>2</sup>The Manifold Boundary Approximation Method.

<sup>3</sup>tkv. *stiff* parameters.

<sup>4</sup>tkv. *soft* parameters.

<sup>1</sup>eng. sloppy models

## 2 Preciznije rješavanje ODJ

Kako bismo povećali preciznost postupka rješavanja sustava običnih diferencijalnih jednadžbi, implementirali smo metodu algoritamske diferencijacije, opisanu u poglavlju 2.1. Kod određivanja Fisherove metrike i Christoffelovih simbola, opisanih u poglavlju 2.3, primijenili smo generaliziranu Eulerovu metodu, opisanu u poglavlju 2.2.

### 2.1 Algoritamska diferencijacija

Svaku složenu funkciju možemo predstaviti kao kompoziciju jednostavnih funkcija. Algoritamska diferencijacija primjenjuje računanje derivacija jednostavnih funkcija kako bi se izračunala derivacija kompozicija. Algoritam dekomponira funkciju  $f : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^N$  u niz funkcija  $\mathbf{a}_i : \mathbb{R}^{N_{i-1}} \rightarrow \mathbb{R}^{N_i}$ ,  $i \in \{1, \dots, k\}$  kao

$$f = \bigcirc_{i=1}^k a_i = a_k \circ \dots \circ a_1. \quad (1)$$

Svakoj funkciji  $a_i$  je poznat njezin Jacobijan, tako da je derivaciju funkcije  $f(x)$ ,  $x \in \mathbb{R}^M$ , jednostavno odrediti primjenjujući pravilo derivacije kompozicije. Koristeći zapis po komponentama Jacobijan  $\alpha$ -te komponente funkcije  $f$ , po  $\beta$ -toj komponenti,  $x^\beta$ , je

$$\frac{\partial f^\alpha}{\partial x^\beta} = \frac{\partial f^\alpha}{\partial a_k^{\alpha_k}} \prod_{i=2}^k \frac{\partial a_i^{\alpha_i}}{\partial a_{i-1}^{\alpha_{i-1}}} \frac{\partial a_1^{\alpha_1}}{\partial x^\beta}. \quad (2)$$

Iako je matematički postupak kojime računamo produkt irelevantan, postoji razlika u kompleksnosti. Ako je  $M > N$ , računajući unaprijed ( $N_1 \times M$ ,  $N_2 \times (N_1 \times M)$ , ...) računalo mora više uzastopnih operacija izvršiti s matricama većih dimenzija nego u slučaju računanja unatrag ( $N \times N_k$ ,  $(N \times N_k) \times N_{k-1}$ , ...).

Koristili smo računalnu implementaciju algoritamske derivacije u paketu `autograd`<sup>5</sup>. `Autograd` je python implementacija reverzne algoritamske diferencijacije koristeći `overload` operatora poput zbrajanja i množenja po elementima kako bi omogućio deriviranje funkcija prisutnih u paketu `numpy`.

<sup>5</sup><https://github.com/HIPS/autograd>

### 2.2 Generalizacija Eulerove metode

Eulerova metoda rješava problem sustava običnih diferencijalnih jednadžbi oblika

$$\frac{dy^\alpha}{dt} = f^\alpha(\{y^\beta\}_{\beta=1}^N, t) \quad (3)$$

razvijajući funkciju  $f$  u Taylorov red do prvog člana. Eulerov algoritam dijeli vremenski interval  $[t_0, T]$  na diskretne dijelove dužine  $\Delta t$  i računa vrijednost funkcije  $y^\alpha$  za svaki pomak  $\Delta t$  na sljedeći način

$$y_i^\alpha = y_{i-1} + \Delta t \frac{dy^\alpha}{dt}(t_{i-1}) = y_{i-1} + \Delta t f^\alpha(t_{i-1}), \quad (4)$$

uz početni uvjet  $y_0^\alpha = y^\alpha(t = t_0)$ . Eulerovu metodu generaliziramo računanjem  $N$  derivacija funkcije  $f$

$$y_i^\alpha = y_{i-1} + \Delta t f^\alpha(t_{i-1}) + \sum_{k=1}^N \frac{1}{k!} (\Delta t)^k \frac{d^k f^\alpha}{dt^k}(t_{i-1}), \quad (5)$$

gdje su derivacije funkcije  $f$  izračunate algoritamskom diferencijacijom. Generalizirana Eulerova metoda omogućava korištenje dužih vremenskih intervala te time olakšava računanje u slučajevima kada je izvršavanje funkcije  $f$  dugotrajno.

### 2.3 Fisherova metrika i MBAM metoda

Uz sama rješenja sustava, kako bismo implementirali generaliziranu Eulerovu metodu na MBAM problem, rješavamo sustav diferencijalnih jednadžbi čija su rješenja ovisna o parametrima. Potrebne veličine su Fisherova informacijska metrika te pripadni Christoffelovi simboli. U ovom potpoglavlju dan je kratak opis Fisherove metrike i metoda računanja Christoffelovih simbola

Za dati model koji ima  $N_p$  parametara promatra se  $N_p$ -dimenzionalni vektorski prostor pri čemu svaki parametar  $p^\alpha$  predstavlja jednu dimenziju tog vektorskog prostora. Taj prostor općenito nije ravan, već je snabdjeven metrikom koja uključuje i parametre modela i rezultate korištenih mjerenja.

Označimo li sa  $N_d$  broj mjerenja, a vrijednosti izmjerenih opservabli sa  $\mathcal{O}_i$ , možemo konstruirati funkciju procjene kvalitete modela:

$$\chi^2 = \sum_i^{N_d} \frac{(\mathcal{O}_i(p) - \mathcal{O}_i^{exp})^2}{\Delta \mathcal{O}_i^2}, \quad (6)$$

pri čemu je  $\mathcal{O}_i$  teorijski predviđena vrijednost,  $\mathcal{O}_i^{exp}$  eksperimentalno određena vrijednost, a  $\Delta \mathcal{O}_i^2 = (\Delta \mathcal{O}_i^{exp})^2 +$

$(\Delta\mathcal{O}_i^{num})^2 + (\Delta\mathcal{O}_i^{the})^2$  je rezultatna nepouzdanost uzrokovana eksperimentalnom, numeričkom i teorijskom nepouzdanosti. Kako bi prostoru parametara pridijelili metriku, koja je simetrični tenzor reda dva, koristimo Taylorov razvoj  $\chi^2$  oko njezinog minimuma, odnosno točke najbolje prilagodbe (*best-fit* točke). Okolina u kojoj funkcija procjene ima prihvatljivu vrijednost određuje se uvjetom  $\chi^2(p) \leq \chi^2(p_0) + 1$ . Potom razvijemo  $\chi^2$  do drugog reda, koristeći Einsteinovu konvenciju o sumaciji:

$$\chi^2(p) - \chi^2(p_0) = \partial_\alpha \chi^2(p_0)(p^\alpha - p_0^\alpha) + \quad (7)$$

$$\frac{1}{2} \partial_{\alpha\beta} \chi^2(p_0)(p^\alpha - p_0^\alpha)(p^\beta - p_0^\beta) + \dots, \quad (8)$$

iz čega dobivamo Hessijan od  $\chi$  u točki najbolje prilagodbe

$$g_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \partial_{\alpha\beta} \chi^2(p_0). \quad (9)$$

Metriku možemo pojednostaviti ako  $\chi^2$  zapišemo pomoću reziduala

$$f_i(p) = \frac{\mathcal{O}_i(p) - \mathcal{O}_i^{exp}}{\Delta\mathcal{O}_i}. \quad (10)$$

U tom je slučaju metrika dana s

$$g_{\alpha\beta} = \sum_i^{N_d} (\partial_\alpha f_i \partial_\beta f_i + f_i \partial_{\alpha\beta} f_i), \quad (11)$$

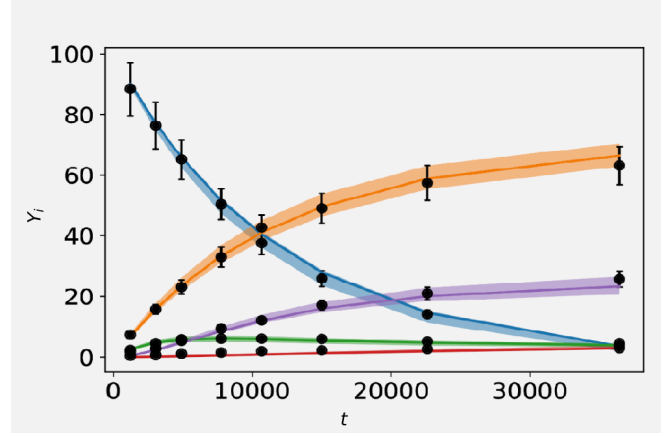
gdje su parcijalne derivacije derivacije po parametrima,  $\partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial p^\alpha}$ . Uzimajući u obzir da  $f_i$  izvrjednujemo u  $p_0$ , dobivamo izraz

$$g_{\alpha\beta} = \sum_i^{N_d} \partial_\alpha f_i \partial_\beta f_i. \quad (12)$$

Vidimo da smo dobili simetrični tenzor reda 2 koji je određen mjerenjima i teorijskim predviđanjima opservabili. Pomoću nje možemo odrediti udaljenost između dviju infinitezimalno bliskih točaka u prostoru parametara

$$ds^2 = g_{\alpha\beta} dp^\alpha dp^\beta, \quad (13)$$

iz čega vidimo da prostor parametara možemo snabdjeti Fisherovom metrikom.



**Slika 1:** Rješenja modela kemijske kinetike  $\alpha$ -pinena dobivena generaliziranim Eulerovim integratorom. Crne točke prikazuju mjerenja, pune linije rješenja dobivena integratorom za parametre najbolje prilagodbe, a obojani intervali procjenu pogrešaka dobivenu MCMC metodom.

**Tablica 1:** Popis funkcija proširenog problema s derivacijama po parametrima.

|                           |                                      |                                      |                                      |                                       |
|---------------------------|--------------------------------------|--------------------------------------|--------------------------------------|---------------------------------------|
| $Y_0 = Y_0$               | $Y_{22} = \partial_2 Y_3$            | $Y_{44} = \partial_4 \partial_4 Y_0$ | $Y_{66} = \partial_1 \partial_2 Y_2$ | $Y_{88} = \partial_3 \partial_4 Y_3$  |
| $Y_1 = Y_1$               | $Y_{23} = \partial_3 Y_3$            | $Y_{45} = \partial_0 \partial_0 Y_1$ | $Y_{67} = \partial_1 \partial_3 Y_2$ | $Y_{89} = \partial_4 \partial_4 Y_3$  |
| $Y_2 = Y_2$               | $Y_{24} = \partial_4 Y_3$            | $Y_{46} = \partial_0 \partial_1 Y_1$ | $Y_{68} = \partial_1 \partial_4 Y_2$ | $Y_{90} = \partial_0 \partial_0 Y_4$  |
| $Y_3 = Y_3$               | $Y_{25} = \partial_0 Y_4$            | $Y_{47} = \partial_0 \partial_2 Y_1$ | $Y_{69} = \partial_2 \partial_2 Y_2$ | $Y_{91} = \partial_0 \partial_1 Y_4$  |
| $Y_4 = Y_4$               | $Y_{26} = \partial_1 Y_4$            | $Y_{48} = \partial_0 \partial_3 Y_1$ | $Y_{70} = \partial_2 \partial_3 Y_2$ | $Y_{92} = \partial_0 \partial_2 Y_4$  |
| $Y_5 = \partial_0 Y_0$    | $Y_{27} = \partial_2 Y_4$            | $Y_{49} = \partial_0 \partial_4 Y_1$ | $Y_{71} = \partial_2 \partial_4 Y_2$ | $Y_{93} = \partial_0 \partial_3 Y_4$  |
| $Y_6 = \partial_1 Y_0$    | $Y_{28} = \partial_3 Y_4$            | $Y_{50} = \partial_1 \partial_1 Y_1$ | $Y_{72} = \partial_3 \partial_3 Y_2$ | $Y_{94} = \partial_0 \partial_4 Y_4$  |
| $Y_7 = \partial_2 Y_0$    | $Y_{29} = \partial_4 Y_4$            | $Y_{51} = \partial_1 \partial_2 Y_1$ | $Y_{73} = \partial_3 \partial_4 Y_2$ | $Y_{95} = \partial_1 \partial_1 Y_4$  |
| $Y_8 = \partial_3 Y_0$    | $Y_{30} = \partial_0 \partial_0 Y_0$ | $Y_{52} = \partial_1 \partial_3 Y_1$ | $Y_{74} = \partial_4 \partial_4 Y_2$ | $Y_{96} = \partial_1 \partial_2 Y_4$  |
| $Y_9 = \partial_4 Y_0$    | $Y_{31} = \partial_0 \partial_1 Y_0$ | $Y_{53} = \partial_1 \partial_4 Y_1$ | $Y_{75} = \partial_0 \partial_0 Y_3$ | $Y_{97} = \partial_1 \partial_3 Y_4$  |
| $Y_{10} = \partial_0 Y_1$ | $Y_{32} = \partial_0 \partial_2 Y_0$ | $Y_{54} = \partial_2 \partial_2 Y_1$ | $Y_{76} = \partial_0 \partial_1 Y_3$ | $Y_{98} = \partial_1 \partial_4 Y_4$  |
| $Y_{11} = \partial_1 Y_1$ | $Y_{33} = \partial_0 \partial_3 Y_0$ | $Y_{55} = \partial_2 \partial_3 Y_1$ | $Y_{77} = \partial_0 \partial_2 Y_3$ | $Y_{99} = \partial_2 \partial_2 Y_4$  |
| $Y_{12} = \partial_2 Y_1$ | $Y_{34} = \partial_0 \partial_4 Y_0$ | $Y_{56} = \partial_2 \partial_4 Y_1$ | $Y_{78} = \partial_0 \partial_3 Y_3$ | $Y_{100} = \partial_2 \partial_3 Y_4$ |
| $Y_{13} = \partial_3 Y_1$ | $Y_{35} = \partial_1 \partial_1 Y_0$ | $Y_{57} = \partial_3 \partial_3 Y_1$ | $Y_{79} = \partial_0 \partial_4 Y_3$ | $Y_{101} = \partial_2 \partial_4 Y_4$ |
| $Y_{14} = \partial_4 Y_1$ | $Y_{36} = \partial_1 \partial_2 Y_0$ | $Y_{58} = \partial_3 \partial_4 Y_1$ | $Y_{80} = \partial_1 \partial_1 Y_3$ | $Y_{102} = \partial_3 \partial_3 Y_4$ |
| $Y_{15} = \partial_0 Y_2$ | $Y_{37} = \partial_1 \partial_3 Y_0$ | $Y_{59} = \partial_4 \partial_4 Y_1$ | $Y_{81} = \partial_1 \partial_2 Y_3$ | $Y_{103} = \partial_3 \partial_4 Y_4$ |
| $Y_{16} = \partial_1 Y_2$ | $Y_{38} = \partial_1 \partial_4 Y_0$ | $Y_{60} = \partial_0 \partial_0 Y_2$ | $Y_{82} = \partial_1 \partial_3 Y_3$ | $Y_{104} = \partial_4 \partial_4 Y_4$ |
| $Y_{17} = \partial_2 Y_2$ | $Y_{39} = \partial_2 \partial_2 Y_0$ | $Y_{61} = \partial_0 \partial_1 Y_2$ | $Y_{83} = \partial_1 \partial_4 Y_3$ | $Y_{105} = \theta_0$                  |
| $Y_{18} = \partial_3 Y_2$ | $Y_{40} = \partial_2 \partial_3 Y_0$ | $Y_{62} = \partial_0 \partial_2 Y_2$ | $Y_{84} = \partial_2 \partial_2 Y_3$ | $Y_{106} = \theta_1$                  |
| $Y_{19} = \partial_4 Y_2$ | $Y_{41} = \partial_2 \partial_4 Y_0$ | $Y_{63} = \partial_0 \partial_3 Y_2$ | $Y_{85} = \partial_2 \partial_3 Y_3$ | $Y_{107} = \theta_2$                  |
| $Y_{20} = \partial_0 Y_3$ | $Y_{42} = \partial_3 \partial_3 Y_0$ | $Y_{64} = \partial_0 \partial_4 Y_2$ | $Y_{86} = \partial_2 \partial_4 Y_3$ | $Y_{108} = \theta_3$                  |
| $Y_{21} = \partial_1 Y_3$ | $Y_{43} = \partial_3 \partial_4 Y_0$ | $Y_{65} = \partial_1 \partial_1 Y_2$ | $Y_{87} = \partial_3 \partial_3 Y_3$ | $Y_{109} = \theta_4$                  |

Kako bismo napravili paralelni transport u zakrivljenom prostoru, potrebni su nam Christoffelovi simboli, objekti po formi slični tenzoru sačinjeni od prvih derivacija metriki. Po geodeziku se gibamo sve dok metrika izvrjednena u točkama geodezika ne postane singularna. Singularnost metriki nam ukazuje na to da je geodezik došao do ruba mnogostrukosti. Budući da rješavanje geodezija

**Tablica 2:** Sustav diferencijalnih jednadžbi

|  |  |   |   |  |
|--|--|---|---|--|
| $dy_0/dt = -(\theta_0 + \theta_1)Y_0$  | $dy_{22}/dt = Y_2 + \theta_2Y_{17}$                  | $dy_{44}/dt = -(\theta_1 + \theta_0)Y_{44}$   | $dy_{60}/dt = Y_7 + \theta_1Y_{36} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{66} + \theta_4Y_{96}$              | $dy_{88}/dt = \theta_2Y_{73}$                                      |
| $dy_1/dt = \theta_0Y_0$  | $dy_{23}/dt = \theta_2Y_{18}$                        | $dy_{45}/dt = 2Y_5 + \theta_0Y_{30}$  | $dy_{67}/dt = Y_8 + \theta_1Y_{37} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{67} + \theta_4Y_{97}$              | $dy_{90}/dt = \theta_2Y_{74}$                                      |
| $dy_2/dt = \theta_1Y_0 - (\theta_2 + \theta_3)Y_2 + \theta_4Y_4$                 | $dy_{24}/dt = \theta_2Y_{19}$                        | $dy_{46}/dt = Y_6 + \theta_0Y_{31}$   | $dy_{68}/dt = Y_9 + \theta_1Y_{38} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{68} + \theta_4Y_{98}$              | $dy_{90}/dt = \theta_3Y_{60} - \theta_4Y_{90}$                     |
| $dy_3/dt = \theta_2Y_2$  | $dy_{25}/dt = \theta_3Y_{35} - \theta_4Y_{25}$       | $dy_{47}/dt = Y_7 + \theta_0Y_{32}$   | $dy_{69}/dt = -2Y_{17} + \theta_1Y_{39} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{69} + \theta_4Y_{99}$         | $dy_{91}/dt = \theta_3Y_{61} - \theta_4Y_{91}$                     |
| $dy_4/dt = \theta_3Y_2 - \theta_4Y_4$  | $dy_{26}/dt = \theta_3Y_{16} - \theta_4Y_{26}$       | $dy_{48}/dt = Y_8 + \theta_0Y_{33}$   | $dy_{70}/dt = \theta_1Y_{40} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{70} + \theta_4Y_{100} - Y_{17} - Y_{18}$ | $dy_{92}/dt = \theta_3Y_{62} - \theta_4Y_{92}$                     |
| $dy_5/dt = -Y_0 - (\theta_0 + \theta_1)Y_5$                                      | $dy_{27}/dt = \theta_3Y_{17} - \theta_4Y_{27}$       | $dy_{49}/dt = Y_9 + \theta_0Y_{34}$   | $dy_{71}/dt = \theta_1Y_{41} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{71} + \theta_4Y_{101} - Y_{19} + Y_{27}$ | $dy_{93}/dt = \theta_3Y_{63} - \theta_4Y_{93} + Y_{15}$            |
| $dy_6/dt = -Y_0 - (\theta_0 + \theta_1)Y_6$                                      | $dy_{28}/dt = \theta_3Y_{18} - \theta_4Y_{28} + Y_2$ | $dy_{50}/dt = \theta_0Y_{35}$   | $dy_{72}/dt = \theta_1Y_{42} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{72} + \theta_4Y_{102} - 2Y_{18}$         | $dy_{94}/dt = \theta_3Y_{64} - \theta_4Y_{94} - Y_{25}$            |
| $dy_7/dt = -(\theta_0 + \theta_1)Y_7$  | $dy_{29}/dt = \theta_3Y_{19} - \theta_4Y_{29} - Y_4$ | $dy_{51}/dt = \theta_0Y_{36}$   | $dy_{73}/dt = \theta_1Y_{43} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{73} + \theta_4Y_{103} + Y_{19} + Y_{28}$ | $dy_{95}/dt = \theta_3Y_{65} - \theta_4Y_{95}$                     |
| $dy_8/dt = -(\theta_0 + \theta_1)Y_8$  | $dy_{30}/dt = -2Y_5 - (\theta_1 + \theta_0)Y_{30}$   | $dy_{52}/dt = \theta_0Y_{37}$   | $dy_{74}/dt = \theta_1Y_{44} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{74} + \theta_4Y_{104} + 2Y_{29}$         | $dy_{96}/dt = \theta_3Y_{66} - \theta_4Y_{96}$                     |
| $dy_9/dt = -(\theta_0 + \theta_1)Y_9$  | $dy_{31}/dt = -2Y_6 - (\theta_1 + \theta_0)Y_{31}$   | $dy_{53}/dt = \theta_0Y_{38}$   | $dy_{75}/dt = \theta_2Y_{60}$   | $dy_{97}/dt = \theta_3Y_{67} - \theta_4Y_{97} + Y_{16}$            |
| $dy_{10}/dt = Y_0 + \theta_0Y_5$   | $dy_{32}/dt = -Y_7 - (\theta_1 + \theta_0)Y_{32}$    | $dy_{54}/dt = \theta_0Y_{39}$   | $dy_{76}/dt = \theta_2Y_{61}$   | $dy_{98}/dt = \theta_3Y_{68} - \theta_4Y_{98} - Y_{26}$            |
| $dy_{11}/dt = \theta_0Y_6$   | $dy_{33}/dt = -Y_8 - (\theta_1 + \theta_0)Y_{33}$    | $dy_{55}/dt = \theta_0Y_{40}$   | $dy_{77}/dt = \theta_2Y_{62} + Y_{15}$  | $dy_{99}/dt = \theta_3Y_{69} - \theta_4Y_{99}$                     |
| $dy_{12}/dt = \theta_0Y_7$   | $dy_{34}/dt = -Y_9 - (\theta_1 + \theta_0)Y_{34}$    | $dy_{56}/dt = \theta_0Y_{41}$   | $dy_{78}/dt = \theta_2Y_{63}$   | $dy_{100}/dt = \theta_3Y_{70} - \theta_4Y_{100} + Y_{17}$          |
| $dy_{13}/dt = \theta_0Y_8$   | $dy_{35}/dt = -2Y_6 - (\theta_0 + \theta_1)Y_{35}$   | $dy_{57}/dt = \theta_0Y_{42}$   | $dy_{79}/dt = \theta_2Y_{64}$   | $dy_{101}/dt = \theta_3Y_{71} - \theta_4Y_{101} - Y_{27}$          |
| $dy_{14}/dt = \theta_0Y_9$   | $dy_{36}/dt = -Y_7 - (\theta_1 + \theta_0)Y_{36}$    | $dy_{58}/dt = \theta_0Y_{43}$   | $dy_{80}/dt = \theta_2Y_{65}$   | $dy_{102}/dt = \theta_3Y_{72} - \theta_4Y_{102} + 2Y_{18}$         |
| $dy_{15}/dt = \theta_1Y_5 - (\theta_2 + \theta_3)Y_{15} + \theta_4Y_{25}$        | $dy_{37}/dt = -Y_8 - (\theta_1 + \theta_0)Y_{37}$    | $dy_{59}/dt = \theta_0Y_{44}$   | $dy_{81}/dt = \theta_2Y_{66} + Y_{16}$  | $dy_{103}/dt = \theta_3Y_{73} - \theta_4Y_{103} + Y_{18} - Y_{28}$ |
| $dy_{16}/dt = Y_0 + \theta_1Y_6 - (\theta_2 + \theta_3)Y_{16} + \theta_4Y_{26}$  | $dy_{38}/dt = -Y_9 - (\theta_1 + \theta_0)Y_{38}$    | $dy_{60}/dt = \theta_1Y_{30} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{60} + \theta_4Y_{90}$          | $dy_{82}/dt = \theta_2Y_{67}$   | $dy_{104}/dt = \theta_3Y_{74} - \theta_4Y_{104} + 2Y_{29}$         |
| $dy_{17}/dt = -Y_2 + \theta_1Y_7 - (\theta_2 + \theta_3)Y_{17} + \theta_4Y_{27}$ | $dy_{39}/dt = -(\theta_1 + \theta_0)Y_{39}$          | $dy_{61}/dt = \theta_1Y_{31} + Y_5 - (\theta_2 + \theta_3)Y_{61} + \theta_4Y_{91}$    | $dy_{83}/dt = \theta_2Y_{68}$   | $dy_{105}/dt = 0$  |
| $dy_{18}/dt = -Y_2 + \theta_1Y_8 - (\theta_2 + \theta_3)Y_{18} + \theta_4Y_{28}$ | $dy_{40}/dt = -(\theta_1 + \theta_0)Y_{40}$          | $dy_{62}/dt = \theta_1Y_{32} - Y_{15} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{62} + \theta_4Y_{92}$ | $dy_{84}/dt = 2Y_{17} + \theta_2Y_{69}$   | $dy_{106}/dt = 0$  |
| $dy_{19}/dt = Y_4 + \theta_1Y_9 - (\theta_2 + \theta_3)Y_{19} + \theta_4Y_{29}$  | $dy_{41}/dt = -(\theta_1 + \theta_0)Y_{41}$          | $dy_{63}/dt = \theta_1Y_{33} - Y_{15} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{63} + \theta_4Y_{93}$ | $dy_{85}/dt = Y_{17} + \theta_2Y_{70}$  | $dy_{107}/dt = 0$  |
| $dy_{20}/dt = \theta_2Y_{75}$  | $dy_{42}/dt = -(\theta_1 + \theta_0)Y_{42}$          | $dy_{64}/dt = \theta_1Y_{34} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{64} + \theta_4Y_{94}$          | $dy_{86}/dt = \theta_2Y_{71}$   | $dy_{108}/dt = 0$  |
| $dy_{21}/dt = \theta_2Y_{16}$  | $dy_{43}/dt = -(\theta_1 + \theta_0)Y_{43}$          | $dy_{65}/dt = 2Y_6 + \theta_1Y_{35} - (\theta_2 + \theta_3)Y_{65} + \theta_4Y_{95}$   | $dy_{87}/dt = \theta_2Y_{72}$   | $dy_{109}/dt = 0$  |

ske jednadžbe značajno opterećuje računalne resurse, prvo moramo naći optimalni način računanja Christoffelovih simbola,  $\Gamma_{\mu\nu}^\beta$ , za metriku danu jednadžbom (12). Definijski izraz za Christoffelove simbole glasi

$$\Gamma_{\mu\nu}^\beta = \frac{1}{2}g^{\alpha\beta}(\partial_\nu g_{\mu\alpha} + \partial_\mu g_{\nu\alpha} - \partial_\alpha g_{\mu\nu}). \quad (14)$$

Ovaj generalni izraz možemo pojednostaviti koristeći izraz (12)

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mu\nu}^\beta &= \frac{1}{2} \sum_i^{N_d} g^{\alpha\beta} [\partial_\nu (\partial_\alpha f_i \partial_\mu f_i) \\ &\quad + \partial_\mu (\partial_\alpha f_i \partial_\nu f_i) \\ &\quad - \partial_\alpha (\partial_\mu f_i \partial_\nu f_i)] \\ &= \frac{1}{2} \sum_i^{N_d} g^{\alpha\beta} [\partial_{\alpha\nu} f_i \partial_\mu f_i \\ &\quad + \partial_{\mu\nu} f_i \partial_\alpha f_i \\ &\quad + \partial_{\alpha\mu} f_i \partial_\nu f_i + \partial_{\mu\nu} f_i \partial_\alpha f_i \\ &\quad - \partial_{\alpha\mu} f_i \partial_\nu f_i - \partial_{\alpha\nu} f_i \partial_\mu f_i], \end{aligned} \quad (15)$$

iz čega slijedi

$$\Gamma_{\mu\nu}^\beta = \sum_i^{N_d} g^{\alpha\beta} \partial_\alpha f_i \partial_{\mu\nu} f_i \quad (17)$$

Budući da ovdje izvedeni oblik Fisherove metrike sadrži Jacobijan,  $\partial_\alpha f_i$ , i Hessijan,  $\partial_{\mu\nu} f_i$ , valja primijetiti da je on jednostavniji za računalnu implementaciju od sekvencijalne primjene prvih derivacija koje bi se računale ako bismo koristili definijski oblik Christoffelovih simbola dan izrazom (14).

### 3 Testni model

Generaliziranu Eulerovu metodu testiramo na modelu kemijske kinematike  $\alpha$ -pinena. Molekula  $\alpha$ -pinena se termalno izomerizira u dipenten i alo-ocimen,  $\alpha$  i  $\beta$ -pironen te dimer  $\alpha$ -pinena [5]. Nazovimo koncentraciju  $\alpha$ -pinena  $y_1$ , dipentena  $y_2$ , alo-ocimena  $y_3$ , oba pironena  $y_4$  te dimera  $y_5$ . Model možemo opisati sustavom od pet vezanih običnih diferencijalnih jednadžbi koje uključuju pet parametara modela ( $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$  i  $\theta_5$ ):

$$\frac{dy_1}{dt} = (\theta_1 + \theta_2)y_1 \quad (18)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = \theta_1 y_1 \quad (19)$$

$$\frac{dy_3}{dt} = \theta_2 y_1 - (\theta_3 + \theta_4)y_3 + \theta_5 y_5 \quad (20)$$

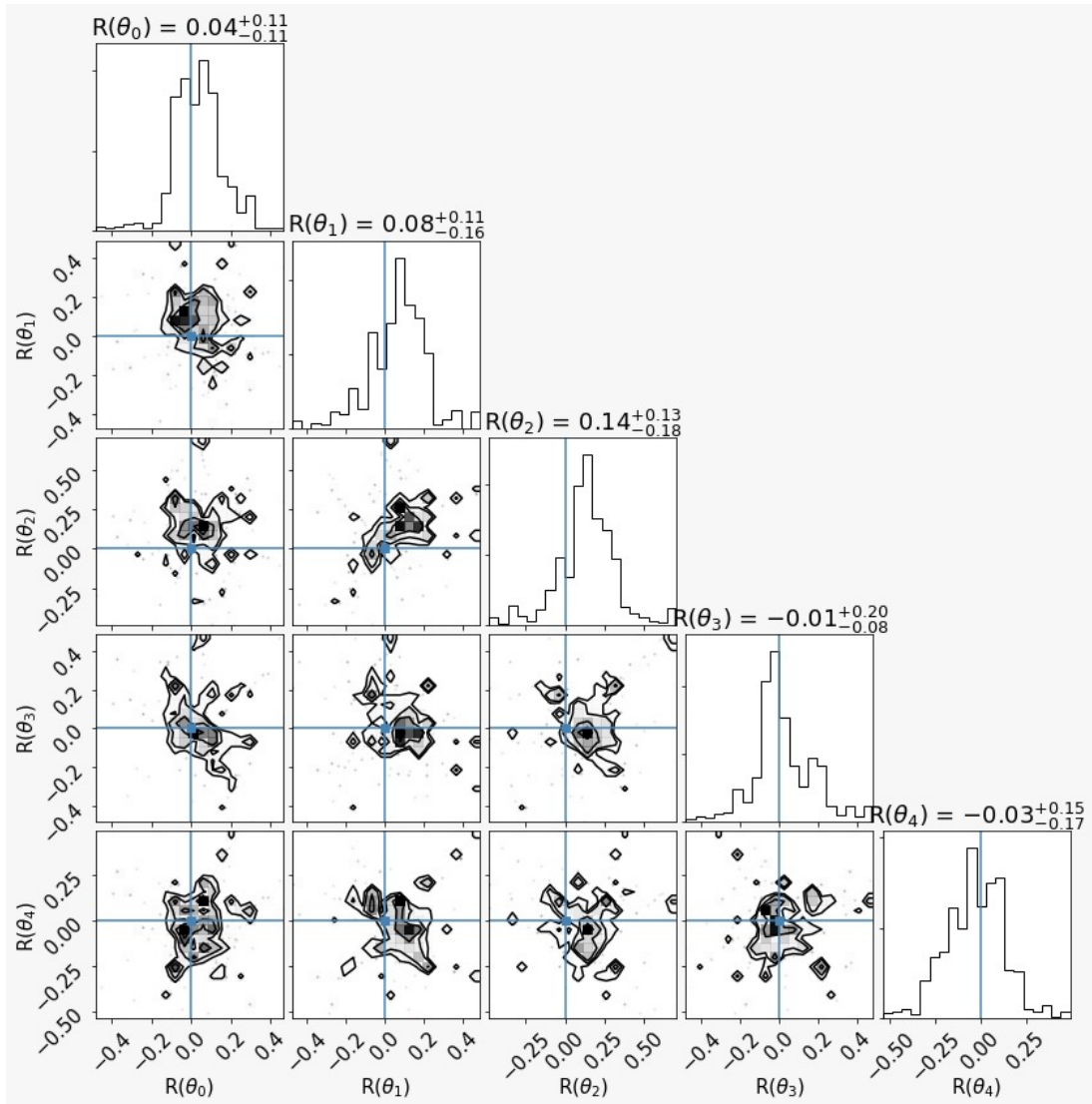
$$\frac{dy_4}{dt} = \theta_3 y_3 \quad (21)$$

$$\frac{dy_5}{dt} = \theta_4 y_3 - \theta_5 y_5. \quad (22)$$

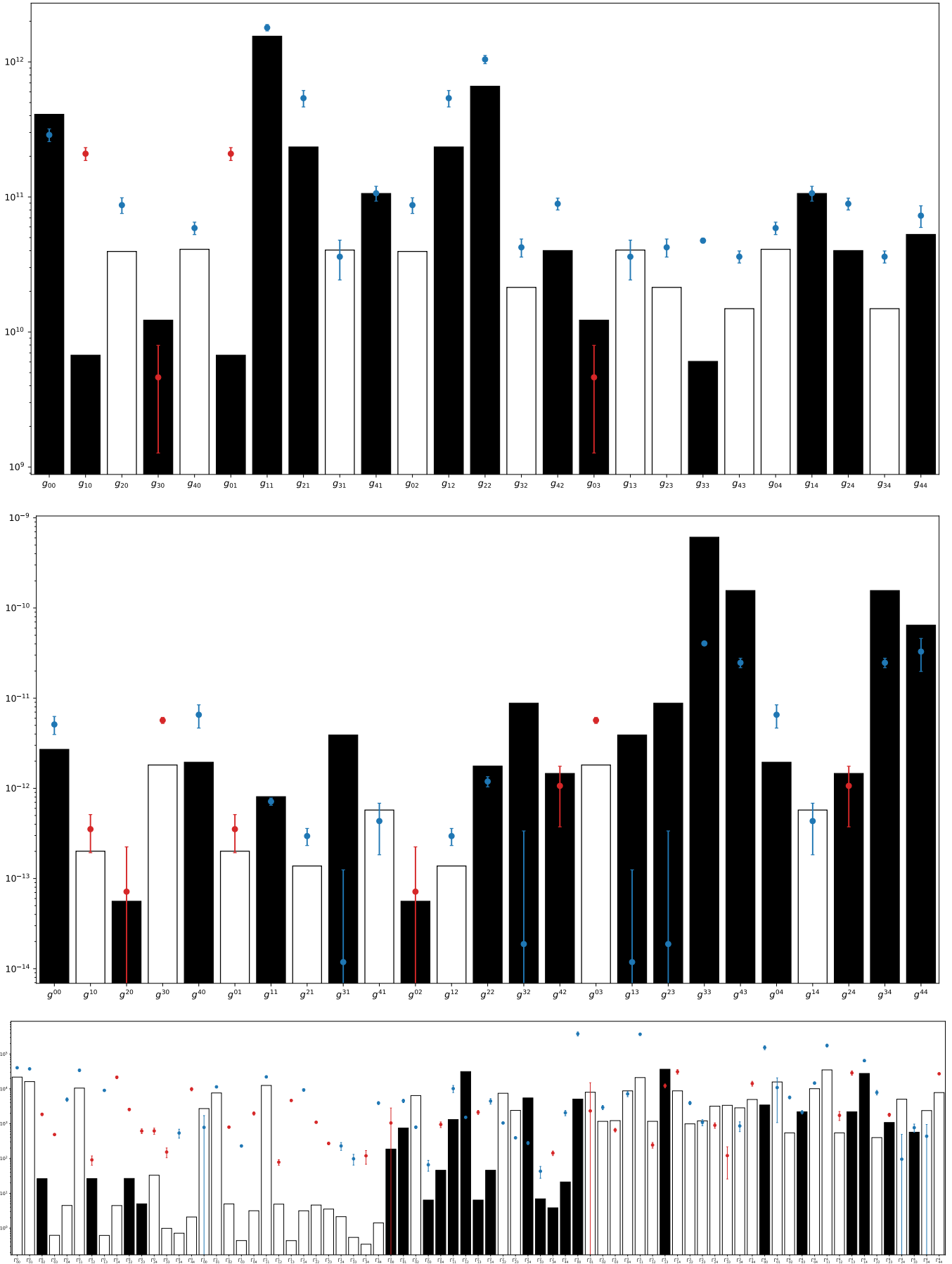
Budući da nam za računanje Christoffelovih simbola trebaju derivacije po parametrima, sustav proširujemo prvim ( $Y_5 - Y_{29}$ ) i drugim derivacijama ( $Y_{30} - Y_{104}$ ) po parametrima (vidi tablicu (1)). Također, zbog poziva unutar MCMC algoritma, dodajemo jednadžbe  $d\theta_i/dt$  ( $Y_{105} - Y_{109}$ ). Cjelokupni sustav jednadžbi nalazi se u tablici (2).

### 4 Diskusija

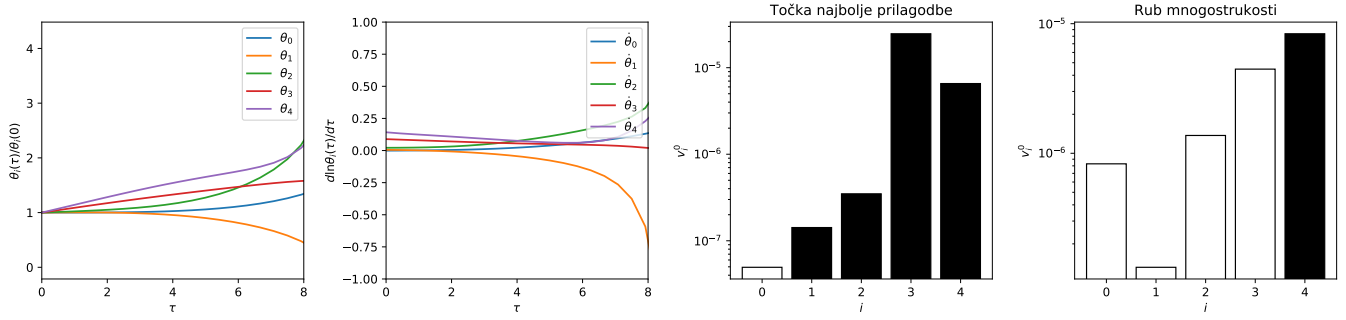
Koristili smo generaliziranu Eulerovu metodu kako bismo smanjili broj koraka integratora kemijske kinetike



Slika 2: MCMC procjena relativnog odstupanja parametara  $\theta_0 - \theta_4$  od vrijednosti najbolje prilagodbe poznatih iz literature.



**Slika 3:** Usporedba vrijednosti metričkog tenzora, njegovog inverza i Christoffelovih simbola dobivenih *odeint* metodom (pravokutnici) i vrijednosti dobivene MCMC lancima pomoću generalizirane Eulerove metode. Crni pravokutnici označavaju pozitivan, a bijeli negativan predznak. Plave (crvene) točke su one u kojima se MCMC predznak poklapa (ne poklapa) s onim iz točke najbolje prilagodbe.



**Slika 4:** Ponašanje parametara i njihovih logaritamskih derivacija kao funkciju parametra geodezijske jednadžbe,  $\tau$ . Desni okviri prikazuju komponentne normiranog svojstvenog vektora koji odgovara najmanjoj svojstvenoj vrijednosti u točkama najbolje prilagodbe (lijevo) i ruba mnogostrukosti (desno).

$\alpha$ -pinena. Na slici (1) punim linijama prikazano je rješenje integratora koji je izvrijednjen samo u vremenskim točkama koje odgovaraju vremenima mjerenja uz zadane parametre najbolje prilagodbe (poznate iz literature), bez ikakvih međukoraka, s preciznošću do druge derivacije. Kako bismo ocijenili pouzdanost metode, koristili smo Markov Chain Monte Carlo algoritam (MCMC)<sup>6</sup>.

Na slici (1) ocjene 16. i 84. percentila fita označene su obojanim intervalima. Na slici (3) prikazano je relativno odstupanje procjena parametara  $\theta$  dobivenih MCMC lancima u odnosu na vrijednosti najbolje prilagodbe iz literature. Odstupanja su unutar disperzije u samim lancima. Na slici (3) uspoređujemo vrijednosti najbolje prilagodbe metričkog tenzora i Christoffelovih simbola (pravokutnici) i vrijednosti dobivene MCMC lancima.

Iz slike (3) vidimo da dio odstupanja dolazi zbog same nesigurnosti u izboru parametara najbolje prilagodbe, no najveća razlika dolazi zbog toga što su za manji set parametara ocjene Christoffelovih simbola suprotnog predznaka u odnosu na vrijednosti dobivene klasičnom *odeint* metodom. Ova razlika dolazi zbog toga što je za dobivanje Christoffelovih simbola potreban inverz metrike (srednji okvir slike 3), koji je osjetljiv na male perturbacije koje su dovele do promjene predznaka prilikom računanja inverza metrika u MCMC lancu.

Proveli smo proračun geodezijske jednadžbe za testni model, prikazan na slici (4). Generalizirana Eulerova metoda s algoritamskom diferencijacijom daje kvalitativno isti oblik ponašanja svojstvenog vektora koji odgovara

najmanjoj svojstvenoj vrijednosti na rubu mnogostrukosti kao i obična *odeint* metoda.

## 5 Zaključak

MBAM metoda koristi metode diferencijalne geometrije kako bi eliminirala slabo određene stupnjeve slobode modela, no pritom zahtijeva numeričke derivacije po parametrima modela. Nalaženje numeričkih derivacija postaje numerički zahtjevno ako je model zadan kao rješenje sustava diferencijalnih jednadžbi. Kako bismo smanjili broj koraka potrebnih za određivanje prve i druge derivacije po parametrima, razvili smo računalnu implementaciju algoritamske diferencijacije na generalizirani Eulerov integrator u svrhu preciznijeg određivanja derivacija rješenja sustava diferencijalnih jednadžbi po parametrima. Generaliziranu Eulerovu metodu testirali smo na 5-dimenzionalnom modelu kemijske kinematike  $\alpha$ -pinena. Generalizirana Eulerova metoda ne pokazuje sistematska odstupanja u određenim vrijednostima parametara modela, dok odstupanja u predznaku Christoffelovih simbola pripisujemo osjetljivosti inverza metrike na perturbacije.

## Literatura

- [1] B. B. Machta, R. Chachra, M. K. Transtrum, and J. P. Sethna. Parameter Space Compression Underlies Emergent Theories and Predictive Models. *Science*, 342:604–607, November 2013.
- [2] M. K. Transtrum, B. B. Machta, K. S. Brown, B. C. Daniels, C. R. Myers, and J. P. Sethna. Perspective:

<sup>6</sup>Implementiran u paketu *emcee*, <http://dfm.io/emcee/current/>.

Sloppiness and emergent theories in physics, biology, and beyond. *J. Chem. Phys.*, 143(1), July 2015.

[3] M. Buchanan. Wheat from the chaff. *Nature Physics*, 11:296, April 2015.

[4] Mark K. Transtrum and Peng Qiu. Model reduction by manifold boundaries. *Phys. Rev. Lett.*, 113:098701, Aug 2014.

[5] G. E. P. Box, W. G. Hunter, J. F. MacGregor, and J. Erjavec. Some problems associated with the analysis of multiresponse data. *Technometrics*, 15(1):33–51, 1973.