

УДК 519.95

ЭМПИРИЧЕСКОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ НЕЧЕТКОЙ МОДЕЛИ ЭКСПЕРИМЕНТА И РЕДУКЦИЯ ИЗМЕРЕНИЙ В ЕВКЛИДОВОЙ МЕТРИКЕ

Т. А. Копит¹, А. И. Чуличков¹, Д. М. Устинин²

В рамках нечеткой модели, уточняемой по результатам тестовых измерений, вычисляется редукция экспериментальных данных к виду, свойственному измерению параметров изучаемого объекта с помощью заданного “идеального” прибора. Используется модель погрешности измерений виде нечетких ограничений на ее евклидову норму. Приведен пример решения задачи редукции измерений для модели фотосинтетической системы, где измеряемыми параметрами является количество единиц аденозинтрифосфата и средняя концентрация протонов, а оцениваемым параметром — время, при котором получены редуцируемые измерения. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (коды проектов 11-07-00338, 09-01-96508 и 09-07-00505).

Ключевые слова: математическое моделирование, принятие решений, анализ и интерпретация данных, измерительно-вычислительные системы, теория возможностей, нечеткий элемент.

1. Введение. В настоящей статье, продолжающей исследования, начатые в [1], рассмотрен эксперимент, проводимый по схеме

$$\xi = \Lambda\varphi + \nu. \quad (1)$$

Здесь вектор ξ евклидова пространства \mathcal{R}_n является результатом измерения выходного сигнала $\Lambda\varphi$ измерительного прибора Λ , на вход которого подан сигнал $\varphi \in \mathcal{R}_N$. Результат измерения сопровождается аддитивным шумом ν . По результату ξ измерения (1) требуется оценить значение вектора параметров

$$\eta = U\varphi, \quad (2)$$

где $U \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_M)$ — заданный линейный оператор, трактуемый как модель “идеального” измерительного прибора.

В работе [1] показано, что если в (1) вектор $\varphi \in \mathcal{R}_N$ и линейный оператор Λ априори произвольны, а $\nu \in \mathcal{R}_n$ — нечеткий вектор \mathcal{R}_n с распределением возможностей $\pi^\nu(\cdot)$, и для определения модели измерительного прибора Λ привлекаются результаты измерений $\xi_j = \Lambda f_j + \nu_j$, $j = 1, \dots, m$, известных тестовых сигналов f_1, \dots, f_m , где погрешности $\nu_1, \dots, \nu_m \in \mathcal{R}_n$ тестовых измерений есть нечеткие элементы пространства \mathcal{R}_n с заданными распределениями возможностей, то оценки максимальной возможности \hat{A} и \hat{f} значений нечетких элементов Λ и φ соответственно являются решением задачи на максимум

$$(\hat{A}, \hat{f}) = \arg \max_{A, f} \min (\pi^\nu(x - Af), \pi^N(X - AF)), \quad (3)$$

а оценка \hat{u} значения нечеткого элемента η дается равенством $\hat{u} = U\hat{f}$. Здесь x, A, f, X — реализации нечетких элементов $\xi, \Lambda, \varphi, \Xi$ соответственно. При этом использована запись схемы тестовых измерений:

$$\Xi = \Lambda F + N. \quad (4)$$

Линейный оператор $F \in (\mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_N)$ и нечеткие линейные операторы $\Xi \in (\mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_n)$, $N \in (\mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_n)$ определены для любого вектора $t = (t_1, \dots, t_m) \in \mathcal{R}_m$ как $Ft = \sum_{j=1}^m f_j t_j$, $\Xi t = \sum_{j=1}^m \xi_j t_j$, $Nt = \sum_{j=1}^m \nu_j t_j$ [1].

В настоящей работе задача (3) решена для случая, когда оператор Λ и элемент φ априори произвольны, а распределения возможностей погрешности измерений заданы в виде $\pi^\nu(z) = \mu_0(\|z\|^2)$, $z \in \mathcal{R}_n$;

¹ Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, Ленинские горы, 119991, Москва; Т. А. Копит, аспирант, e-mail: kopit_tanya@mail.ru; А. И. Чуличков, профессор, e-mail: achulichkov@gmail.com

² Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, биологический факультет, Ленинские горы, 119991, Москва; науч. сотр., e-mail: ustinin@mail.ru

$\pi^N(Z) = \mu_0(\|Z\|_2^2)$, $Z \in (\mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_n)$. Здесь, как и в [1], $\mu_0(\cdot) : [0, \infty) \rightarrow [0, 1]$ — строго монотонно убывающая функция, $\mu_0(0) = 1$, $\lim_{z \rightarrow \infty} \mu_0(z) = 0$.

2. Редукция измерений при априорных нечетких ограничениях на евклидовы нормы сигналов и оператора Λ . Пусть линейный оператор $\Lambda \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n)$ и входной сигнал φ редуцируемого измерения априори произвольны, так что $\pi^\Lambda(A) = 1$ для любого $A \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n)$ и $\pi^\varphi(f) = 1$ для любого $f \in \mathcal{R}_N$.

Тогда задача (3) приводится к следующей задаче на минимакс:

$$\min_{A, f} \max(\|x - Af\|^2, \|X - AF\|_2^2). \tag{5}$$

Обозначим $J_1(A, f) = \|x - Af\|^2$ и $J_2(A) = \|X - AF\|_2^2$; тогда $J(A, f) = \max(J_1(A, f), J_2(A))$ и задача (5) может быть переписана в виде

$$J(A, f) = \max(J_1(A, f), J_2(A)) \sim \min_{A, f}. \tag{6}$$

Замечание 1. Если число $\rho(f_1, \dots, f_m)$ линейно независимых тестовых сигналов f_1, \dots, f_m меньше N , то оператор A по тестам не может быть полностью определен. Это, в частности, приводит к неоднозначности решения задачи на минимум $\inf_{A \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n)} J_2(A)$. Поэтому далее будем полагать, что выполнено равенство $\rho(f_1, \dots, f_m) = N$. При этом $(I - FF^-) = 0$ и минимум $\inf_{f \in \mathcal{R}_N} J_2(\hat{A}_0, f)$ достигается при $f_* = \hat{f}_0(\hat{A}_0) = (XF^-)^-x + (I - (XF^-)^-XF^-)y$, где элемент $y \in \mathcal{R}_N$ произволен.

В зависимости от того, какое из минимальных значений $J_1(\hat{A}_0, \hat{f}(\hat{A}_0))$ или $J_2(\hat{A}_0)$ меньше, выбираются различные методы решения задачи (5).

2.1. Редукция при условии $J_1(\hat{A}_0, \hat{f}(\hat{A}_0)) \leq J_2(\hat{A}_0)$.

Лемма 1. Если

$$\|(I - \hat{A}_0\hat{A}_0^-)x\|^2 \leq \|X(I - F^-F)\|_2^2, \tag{7}$$

то минимум в (5) достигается в точке $(A_*, f_*) = (\hat{A}_0, \hat{f}(\hat{A}_0))$.

Замечание 2. Условие (7) выполнено, если уравнение $\hat{A}_0z = y$ разрешимо для любого y , т.е. если пространство значений оператора \hat{A}_0 совпадает со всем \mathcal{R}_n , что эквивалентно равенству $I - \hat{A}_0\hat{A}_0^- = 0$.

2.2. Редукция при условии $J_1(\hat{A}_0, \hat{f}(\hat{A}_0)) > J_2(\hat{A}_0)$. Пусть теперь не выполнено условие (7). В этом случае оценку оператора Λ будем искать в виде разложения P_*A_* , где P_* — ортогональный проектор на пространство значений оператора P_*A_* и $A_* \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n)$ — линейный оператор. Тогда решение задачи (5) может быть получено в два этапа. На первом этапе фиксируем ортогональный проектор P и, считая, что выполнено соглашение, принятое в замечании 1, найдем точную оценку оператора A_P : $A_P = PXF^-$.

После этого функционал в (6) запишется в виде

$$J(P_*A_*, \hat{f}(P_*A_*)) = \|(I - P_*)x\|^2 = \|(I - P_*)X\|_2^2 + \|P_*X(I - F^-F)\|_2^2,$$

а ортогональный проектор P_* определится как решение задачи на условный минимум:

$$\min_{P_*} \left(\|(I - P_*)X\|_2^2 \mid \|(I - P_*)x\|^2 = \|(I - P_*)X\|_2^2 + \|P_*X(I - F^-F)\|_2^2 \right). \tag{8}$$

Вообще говоря, пространство значений оператора P_*A_* , на котором достигается искомый минимум, занимает некоторое промежуточное положение между пространствами значений оператора $A = XF^-$ и оператора, являющегося решением задачи

$$\min_P \left(\|(I - P)X\|_2^2 \mid \|(I - P)x\|^2 = \|(I - P)X\|_2^2 \right), \tag{9}$$

где минимум ищется по всем ортогональным проекторам $P \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_n)$. Для решения задачи (9) выберем ортонормированную систему векторов $\{e_\mu, \mu = 1, \dots, k\}$, где $k \geq n - N$, и запишем

$$\|(I - P)x\|^2 = \sum_{\mu=1}^k (x, e_\mu)^2 = \sum_{\mu=1}^k (e_\mu, De_\mu), \quad \|(I - P)X\|_2^2 = \sum_{\mu=1}^k \sum_{j=1}^m (x_j, e_\mu)^2 = \sum_{\mu=1}^k (e_\mu, Qe_\mu), \tag{10}$$

где самосопряженные линейные операторы $Q, D \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_n)$ действуют на любой вектор $y \in \mathcal{R}_n$ по формулам $Qy = \sum_{j=1}^m x_j(x_j, y)$, $Dy = x(x, y)$. Тогда задача (9) примет вид

$$\inf_P \left(\sum_{\mu=1}^k (Qe_\mu, e_\mu) \mid \sum_{\mu=1}^k ((Q-D)e_\mu, e_\mu) = 0 \right). \quad (11)$$

Справедливы следующие утверждения.

Лемма 2. *Решением задачи (9) является ортогональный проектор $P = P_\omega$ на линейную оболочку N собственных векторов оператора $(1 + \omega)Q - \omega D$, отвечающих максимальным собственным значениям. Значение параметра ω определяется из условий*

$$\|(I - P_\omega)x\|^2 = \|(I - P_\omega)X\|_2^2. \quad (12)$$

Теорема. *Пусть ранг тестовых сигналов равен N . Тогда*

- 1) *если $\|(I - XF^-(XF^-)^-)x\|^2 \leq \|X(I - F^-F)\|_2^2$, то редукция измерения ξ вида (1) к виду (2) равна $\hat{u} = Uf_*$ для любого $f_* = (XF^-)^-x + (I - (XF^-)^-XF^-)y$, где элемент $y \in \mathcal{R}_N$ произволен, а возможность согласия модели измерений (4) и (1) с результатами измерения $\xi = x$ и $\Xi = X$ равна $\mu_0(\|X(I - F^-F)\|_2^2)$;*
- 2) *если $\|(I - XF^-(XF^-)^-)x\|^2 > \|X(I - F^-F)\|_2^2$, то*
 - а) *при $X(I - F^-F) = 0$ редукция измерения ξ вида (1) к виду (2) для $f_* = A_0^-x + (I - A_0^-A_0)y$ равна $\hat{u} = Uf_*$, где элемент $y \in \mathcal{R}_N$ произволен, при $A_0 = P_\omega XF^-$, где $P_\omega \in (\mathcal{R}_n \rightarrow \mathcal{R}_n)$ — ортогональный проектор на собственные векторы $\{e_\mu\}$, $\mu = 1, \dots, \min(n, N)$, оператора $(1 + \omega)Q - \omega D$, соответствующие максимальным собственным значениям; значение ω выбрано из условия (12), а операторы Q и D определены в (10);*
 - б) *при $X(I - F^-F) \neq 0$ редукция измерения ξ вида (1) к виду (2) для $f_* = A_*^-x + (I - A_*^-A_*)y$ равна $\hat{u} = Uf_*$, где элемент $y \in \mathcal{R}_N$ произволен, при $A_* = P_*XF^-$, где ортогональный проектор P_* — решение задачи (8).*

Возможность согласия модели измерений (4) и (1) с результатами измерения $\xi = x$ и $\Xi = X$ равна $\mu_0(d)$, где d — минимальное значение функционала в задаче (8).

Заметим, что в формулировке теоремы пункты 1 и 2а дают точное решение сформулированной задачи, а решение, описанное в пункте 2б, может быть получено численно путем последовательной минимизации задачи (8) по углам поворота искомого пространства значений оператора A с начальным положением $A = \hat{A}_0$. Заметим, что точное значение минимакса $J(A_*, f_*)$ в (5) удовлетворяет неравенству

$$\|X(I - F^-F)\|_2^2 \leq J(A_*, f_*) \leq \|(I - P_\omega)x\|^2,$$

где P_ω — решение задачи (9). Это неравенство позволяет выбрать условие остановки алгоритма последовательной минимизации.

3. Применение метода редукции измерений к анализу данных имитационной модели фотосинтеза. Предложенные методы применялись для оценки параметров имитационной модели фотосинтетической системы [2]. Описание модели и ее основных характеристик приводится также в работе [1]. Модель представляет собой сложный программный комплекс, реализующий процесс сопряжения электронного транспорта в многобелковых комплексах, протонного транспорта и синтеза АТФ (нуклеотидного кофермента аденозинтрифосфата) комплексом АТФ-синтазой. Параметрами модели являются толщина мембраны, размеры области моделирования, интенсивность излучения, начальная концентрация протонов, концентрация буферных групп, коэффициент диффузии протонов, концентрация протонов в строме, количество белков пластоцианина, ферредоксина, пластохинона, фотосистем 1 и фотосистем 2, а также их коэффициенты диффузии, количество цитохромных b_6f комплексов и комплексов АТФ-синтаз.

Изучаются зависимости количества синтезированных АТФ и средней концентрации протонов в люмене от времени при постоянном излучении. Зависимость АТФ от времени, полученная методом “прямого” моделирования, приведена на рис. 1. Процесс синтеза АТФ характеризуется двумя состояниями (фазами): на первой начальной фазе синтеза, когда концентрация протонов для выработки АТФ комплексом АТФ-синтазой недостаточна, эта зависимость нелинейна; на второй же фазе АТФ вырабатывается с постоянной скоростью. Оценка времени, прошедшего с начала второй фазы, до момента, когда было синтезировано определенное количество единиц АТФ, была проведена в работе [1].

В настоящей статье описывается обработка данных численного эксперимента, в котором вычисляется количество синтезированных единиц АТФ и средняя концентрация протонов в стромальной части тилакоида, при этом требуется построить оценку момента времени t , при котором достигаются эти значения. Применяется метод нечеткой редукции модели измерений, учитывающий как значения тестирующих измерений, так и редуцируемые измерения. Используется модель погрешности, о свойствах которой для данной сложной имитационной модели можно лишь утверждать, что большие величины нормы погрешности вычислений менее возможны, чем малые. В этом случае для моделирования погрешности измерений входных параметров модели избирается нечеткий подход, где погрешность будет задаваться в виде нечетких ограничений на ее евклидову норму.

Проиллюстрируем решение задачи редукции на следующих двух примерах, где измеряется двумерный вектор. Далее приведем алгоритм реализации решения задачи и результаты интерпретации в случае обработки данных модели фотосинтетической системы.

Пример 1. Пусть неизвестный оператор A задан матрицей второго порядка: $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{22} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$; пусть задано m тестовых сигналов $f_1 = \begin{pmatrix} f_{11} \\ f_{21} \end{pmatrix}, \dots, f_m = \begin{pmatrix} f_{1m} \\ f_{2m} \end{pmatrix}$, образующих столбцы матрицы $F \in (\mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_2)$, и результаты тестовых испытаний заданы в виде векторов $x_1 = \begin{pmatrix} x_{11} \\ x_{21} \end{pmatrix}, \dots, x_m = \begin{pmatrix} x_{1m} \\ x_{2m} \end{pmatrix}$, образующих столбцы матрицы $X \in (\mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_2)$. Схема тестовых испытаний имеет вид $\Xi = AF + N$, где j -й столбец матрицы N задает погрешность j -го тестового измерения, $j = 1, \dots, m$. Для матрицы ошибок N задано распределение возможностей ее значений в виде $\pi^N(X) = \mu_0(\|Z\|_2^2)$, где $\mu_0(\cdot) : \mathcal{R}_+ \rightarrow [0, 1]$ — монотонно убывающая функция, $\mu_0(0) = 1, \mu_0(+\infty) = 0$.

Пусть ранг матрицы F равен двум. Измерен сигнал f по схеме $\xi = Af + \nu$, результат $x \in \mathcal{R}_2$ этого измерения известен, и задано распределение $\pi^\nu(z) = \mu_0(\|z\|^2)$ возможности нечеткого вектора $\nu \in \mathcal{R}_2$ погрешности измерения Af . Требуется определить редукцию вектора ξ к виду, какое имело бы измерение сигнала f с помощью идеального прибора $I \in (\mathcal{R}_2 \rightarrow \mathcal{R}_2)$.

Запишем задачу вычисления редукции как задачу на минимакс $\min_{A,f} (\max \|Af - x\|^2, \|AF - X\|_2^2)$.

Минимум функции $J_2(A) = \|A_*F - X\|_2^2$ достигается на единственной матрице $\hat{A}_0 = XF^-$, так как ранг матрицы F равен двум и, следовательно, выполнено $(I - FF^-) = 0$. Если эта матрица не вырождена, то $J_1(\hat{A}_0, \hat{f}(\hat{A}_0)) = 0 \leq J_2(\hat{A}_0)$ и $(A_*, f_*) = (XF^-, (XF^-)^{-1}x)$, а результатом редукции является $f_* = (XF^-)^{-1}x$.

Геометрически задача сводится к построению двумерного подпространства в четырехмерном евклидовом пространстве, являющемся прямым произведением двух двумерных евклидовых пространств, одно из которых содержит тестовые сигналы $f_j, j = 1, \dots, m$, и f , а второе — результаты их измерений $x_j, j = 1, \dots, m$, и x , так, чтобы эта плоскость была как можно ближе в \mathcal{R}_4 ко всем точкам $(f_j, x_j), j = 1, \dots, m$. Эта плоскость является графиком линейного оператора \hat{A} . Если она определяет невырожденный оператор, то для любого $x \in \mathcal{R}_2$ найдется $f \in \mathcal{R}_2$, такое, что $x = \hat{A}f$.

Таким образом, рассмотренный пример дает тривиальное решение в том смысле, что для нахождения редукции следует сначала по тестам построить наилучшую в среднем квадратичном оценку оператора A ,

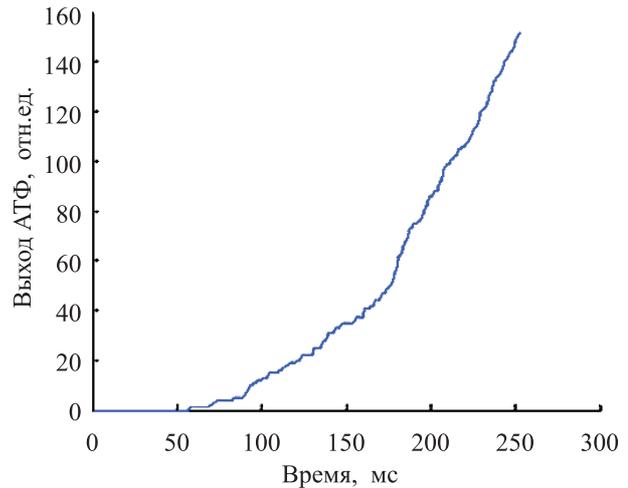


Рис. 1. Зависимость выработки АТФ от времени

а затем полученный оператор использовать для вычисления редукции.

Пример 2. Пусть неизвестный оператор A каждому числу f ставит в соответствие двумерный вектор $Af = \begin{pmatrix} a_1 f \\ a_2 f \end{pmatrix}$, т.е. A задан матрицей размера 1×2 , $A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$; задано m тестовых скалярных сигналов f_1, \dots, f_m , образующих матрицу $F \in \mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_1$, состоящую из единственной строки, и результаты тестовых испытаний заданы в виде векторов $x_1 = \begin{pmatrix} x_{11} \\ x_{21} \end{pmatrix}, \dots, x_m = \begin{pmatrix} x_{1m} \\ x_{2m} \end{pmatrix}$, образующих столбцы матрицы $X \in \mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_2$. Схема и модель тестовых и редуцируемых измерений такие же, как и в примере 1.

Рассмотрим задачу на минимакс:

$$\min_{A, f} (\max \|Af - x\|^2, \|AF - X\|_2^2). \tag{13}$$

В этом случае оператор A таков, что его пространство значений — одномерное линейное подпространство в пространстве \mathcal{R}_2 , содержащем результаты тестовых и редуцируемого измерений. Пусть расположение точек x и x_1, \dots, x_m таково, что неравенство (7) не выполнено и точка (\hat{A}_0, \hat{f}_0) не является точкой, в которой достигается минимакс в (13). Рассмотрим задачу (13) геометрически.

На рис. 2 приведено расположение векторов x, x_1 и x_2 для случая $m = 2$. Сплошной жирной наклонной линией показано расположение пространства значений оператора $\hat{A} = XF^{-1}$, на котором достигается минимум функционала $J_2(A) = \|AF - X\|_2^2$ — эта прямая построена таким образом, чтобы сумма квадратов расстояний от точек x_1 и x_2 до точек af_1 и af_2 соответственно была минимальна. Это сумма квадратов расстояний складывается из сумм квадратов катетов соответствующих прямоугольных треугольников; катеты, направленные вдоль вектора a , дают вклад в эту сумму, равный $\|AA^{-1}X(I - F^{-1}F)\|_2^2$, а катеты, ортогональные a — вклад $\|(I - AA^{-1})X\|_2^2$.

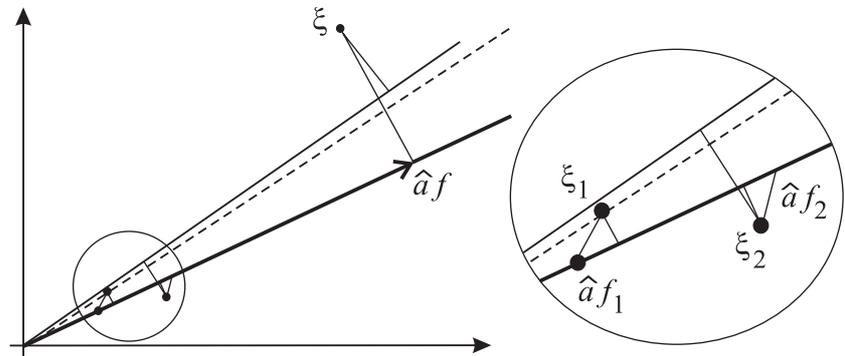


Рис. 2. Геометрическая интерпретация решения задачи редукции в примере 2

Сплошная тонкая наклонная линия на рис. 2 показывает расположение пространства значений оператора A в случае, когда минимизируется сумма квадратов расстояний от всех точек — x, x_1 и x_2 — до пространства значений оператора A .

Задать пространство значений оператора A с геометрической точки зрения означает задать прямую, проходящую через начало координат. Для любой такой прямой значение вектора a , определяющего действие оператора A с заданным пространством значений, задается длиной вектора a вдоль заданной прямой. Эта длина вычисляется из соображений минимума функционала $\|AF - AA^{-1}X\|_2^2$. В изображенном на рис. 2 случае для нахождения этой длины следует построить проекции Px_1 и Px_2 векторов x_1 и x_2 на прямую с направляющим вектором a и подобрать длину a так, чтобы $\frac{\|Px_1\|}{\|Px_2\|} = \frac{f_1}{f_2}$. Значение $J_2(A)$ при заданном направлении вектора a и его длине, вычисленной описанным способом, равно сумме квадратов катетов треугольников с вершинами в точках x_j, Px_j и $af_j, j = 1, 2$.

Для достижения минимакса надо изменять направление вектора a , задающего искомое пространство значений оператора A , в углу между этими двумя прямыми. Вычисляя $J_1(A, f)$ как квадрат расстояния от x до прямой с направляющим вектором a и $J_2(A)$ способом, описанным в предыдущем абзаце, добиваемся такого расположения пространства значений A , при котором достигается равенство $J_1(A, f) = J_2(A)$. На рис. 2 это пространство значений A изображено пунктиром. Длина проекции вектора x на это одномерное подпространство, деленное на длину вектора a , дает значение редукции измерения x . При этом достигается компромисс между возможностью тестовых измерений и редуцируемого измерения.

Заметим, что если бы вектор x был достаточно близок к прямой, изображенной на рис. 2 сплошной жирной линией, так, что выполнялось бы неравенство (7), то ответ был бы тривиален — нужно было бы построить наиболее надежную оценку оператора a , доставляющего минимум функционалу $\|AF - X\|_2^2$, и для этого оператора найти минимум функционала $\|Af - x\|^2$. В этом случае возможность редуцируемого измерения, определяемая значением J_1 в точке минимакса, выше, чем возможность тестового измерения

для $A = \hat{A}_0$, доставляющего минимум функционалу $\|AF - X\|_2^2$. В рассмотренном же на рис. 2 случае при A , доставляющем минимум функционалу $\|AF - X\|_2^2$, возможность редуцируемого измерения значительно меньше, чем возможность тестового измерения, поэтому возникает необходимость выбора A , отличного от \hat{A}_0 . В этом варианте задачи редукции на основе тестовых измерений для выбора A учитывается как информация тестовых измерений, так и информация, касающаяся возможных значений A , содержащаяся в редуцируемом измерении.

Приведенные примеры описывают решение задачи нечеткой редукции при двумерном отклике, который в случае интерпретации данных модели фотосинтетической системы определяется измеряемыми значениями количества синтезированного АТФ и средней концентрацией протонов в стромальной части тилакоида.

Численная реализация данных методов осуществлена в следующем алгоритме нечеткой редукции измерений при априорных ограничениях на евклидовы нормы сигналов и оператора нечеткой модели измерения, который обеспечивает решение задачи на минимакс $\min_{A, f} (\max \|Af - x\|^2, \|AF - X\|_2^2)$.

1. Производится нормировка тестовых измерений x_1, \dots, x_m , редуцируемого измерения $\xi = x$ и значений входных параметров модели; получаем матрицу откликов X и параметров F .

2. По проведенным тестовым измерениям вычисляется оценка оператора $\hat{A} = XF^{-}$, на котором достигается минимум функционала $J_2(A) = \|AF - X\|_2^2$.

3. Проверяется условие $J_1(\hat{A}, \hat{f}(\hat{A})) \leq J_2(\hat{A})$; если это условие выполнено, то в качестве оценки оператора берется \hat{A} и редукция принимает вид $\hat{f} = \hat{A}^{-}x$.

4. В противном случае редуцируемое измерение слишком далеко от прямой, определяемой \hat{A} ; тогда численно поворачиваем прямую пространства значений оператора A вокруг начала координат, пока не будет обеспечено равенство $J_1(A_*, \hat{f}(A_*)) = J_2(A_*)$; в результате редукция принимает вид $\hat{f} = (A_*A_*^{-}XF^{-})^{-}x$.

При реализации данного алгоритма использовались функции численной оптимизации пакета прикладных программ Matlab.

Перед применением алгоритма результаты измерений синтеза АТФ разделены на две части. При редукции использовались измерения первой фазы, когда синтез АТФ еще не вышел на постоянную скорость и редуцируемое измерение может далеко отстоять от пространства значений эмпирически восстановленного по тестовым измерениям оператора модели измерений. В этом случае редукция при согласованном использовании информации о тестовых и редуцируемых измерениях представляет особый интерес.

В математической модели измерительного эксперимента по схеме (1) считается, что на вход “измерительного прибора” Λ подается сигнал φ — время измерения, на выходе имеется двумерный отклик ξ — средняя концентрация протонов в стромальной части тилакоида и количество синтезированных АТФ. Эта модель рассмотрена в примере 2.

Проводится серия тестирующих измерений, результаты измерений, редуцируемое измерение и значения входных параметров модели нормируются. В численном эксперименте использовалось три тестовых измерения. В результате получаем матрицу откликов $X \in (\mathcal{R}_3 \rightarrow \mathcal{R}_2)$ и матрицу входных параметров $F \in (\mathcal{R}_3 \rightarrow \mathcal{R}_1)$ для трех тестовых измерений.

Результатом редукции должна быть оптимальная оценка времени, которое потребовалось на синтез определенного количества единиц АТФ. Линейный оператор Λ и входной сигнал φ редуцируемого измерения априори произвольны, так что $\pi^\Lambda(A) = 1$ для любого $A \in (\mathcal{R}_1 \rightarrow \mathcal{R}_2)$ и $\pi^\varphi(f) = 1$ для любого $f \in \mathcal{R}_1$.

По тестовым измерениям получена оценка оператора $\hat{A}_0 = XF^{-} = [0.0114, 0.0076]$.

Для получения редукции измерения фиксируем первую составляющую \hat{A} и численно “поворачиваем” пространство значений оператора A , пока не будет достигнуто равенство (11). Итоговое значение имеет вид $\hat{A} = [0.0114, 0.0094]$.

Оценка $(AA^{-}XF^{-})^{-}\xi = 103.15$ мс является оценкой параметра, максимизирующей апостериорную возможность. Оценкой параметра времени без поворота пространства значений оператора A является величина 100.99 мс. Реально редуцируемое измерение было получено при значении 106 мс. Таким образом, оценки, полученные при минимизации возможности ошибки редукции, согласуются с результатами наблюдений.

4. Заключение. В работе предложен метод эмпирического восстановления и редукции при ограничениях на евклидовы нормы сигналов и оператора нечеткой модели измерений, информация о которой содержится в серии тестовых экспериментов. Рассмотрен пример интерпретации измерений для модели фотосинтетической системы. Осуществлена редукция измерений при двумерном отклике и получена

оценка параметра модели, согласующаяся с экспериментом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Копит Т.А., Чуличков А.И., Устинин Д.М.* Эмпирическое восстановление нечеткой модели эксперимента и редукция измерений в равномерной метрике // Вычислительные методы и программирование. 2011. **12**. 90–96.
2. *Устинин Д.М., Коваленко И.Б., Грачев Е.А., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.* Метод прямого многочастичного компьютерного моделирования фотосинтетической электронно-транспортной цепи // Динамические модели процессов в клетках и субклеточных наноструктурах. Москва–Ижевск: РХД, 2010. 242–263.

Поступила в редакцию
24.02.2011
