

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Интерпретация экспериментальных данных на основе кусочно-линейной аппроксимации модели измеренийТ. А. Копит^{1,a}, А. И. Чуличков^{1,b}, Д. М. Устинин²¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра компьютерных методов физики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, биологический факультет, кафедра биофизики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12.E-mail: ^akopit_tanya@mail.ru, ^bachulichkov@gmail.com

Статья поступила 16.12.2009, подписана в печать 14.03.2010

Рассматриваются методы оценивания входного сигнала измерительного прибора. Информация о приборе содержится в результатах измерений набора известных тестовых сигналов, измерения получены в натурном или в вычислительном эксперименте. Предлагается метод аппроксимации модели измерения кусочно-линейной моделью, согласующейся с результатом измерений, и метод вычисления оценки входного сигнала и ее точности. Приводится пример решения задачи интерпретации измерений на основе аппроксимации модели фотосинтетической системы, в которой измеряемыми параметрами являются значения насыщения ΔpH и скорости синтеза АТФ, а оцениваемыми параметрами — концентрация фотосистем-2 и интенсивности света.

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

УДК: 519.95. PACS: 02.60.Gf.

Введение

Рассмотрим нелинейную схему измерительного эксперимента

$$\xi = A(f) + \nu, \quad (1)$$

где ξ — результат измерения искаженного аддитивным шумом ν выходного сигнала $A(f)$ измерительного прибора $A(\cdot)$, на вход которого подан сигнал f от изучаемого объекта.

В теории измерительно-вычислительных систем [1–3] рассматриваются задачи интерпретации измерения (1), состоящие в наиболее точном оценивании параметров u изучаемого объекта, непосредственно не наблюдаемых, но связанных с сигналом f равенством $u = Uf$, где оператор U известен. Эта задача решается путем сведения (редукции) измерения (1) к виду, свойственному измерению сигнала f с помощью «идеального измерительного прибора» U . Оценка сигнала Uf строится на основании математической модели, связывающей результат ξ измерения (1) с состоянием объекта, характеризующегося сигналом f , а также модели «идеального измерительного прибора» U .

Если модель измерительного прибора $A(\cdot)$ неизвестна и, возможно, нелинейна, то задача интерпретации измерения (1) может быть решена на основе тестовых экспериментов [4, 5], которые проводятся с конечной точностью. В настоящей статье считается, что модель измерительного прибора $A(\cdot)$ на конечных подмножествах области определения может быть аппроксимирована линейным оператором с некоторой точностью. На основе тестовых сигналов определяются участки линейности и оцениваются сигналы Uf из измерений, проведенных по схеме (1) после тестирования.

1. Модель измерения. Решаемые задачи

Будем считать, что в (1) сигналы $f \in \mathcal{R}_N$, Af , ξ , $\nu \in \mathcal{R}_n$ — векторы конечномерных евклидовых пространств \mathcal{R}_N и \mathcal{R}_n соответственно. О входном сигнале f известно множество его возможных значений \mathcal{F} , вектор ν погрешности измерений имеет ограниченную норму. Область \mathcal{F} ограничена и существует ее конечное покрытие симплексами \mathcal{F}_k так, что для вершин симплексов $f_1, \dots, f_{N+1} \in \mathcal{F}_k$ и чисел $\alpha_j \geq 0, \dots, \alpha_{N+1} \geq 0$, таких, что $\sum_{j=1}^{N+1} \alpha_j = 1$, выполнено неравенство

$$\left\| A \left(\sum_{j=1}^{N+1} \alpha_j f_j \right) - \sum_{j=1}^{N+1} \alpha_j A(f_j) \right\| \leq \varepsilon. \quad (2)$$

Иными словами, значение оператора $A(\cdot)$ на любом элементе f симплекса \mathcal{F}_k с погрешностью ε аппроксимируется линейной комбинацией значений $A(f_1), \dots, A(f_{N+1}) \in \mathcal{R}_n$; величина погрешности ε характеризует отличие оператора $A(\cdot)$ от линейного на множестве \mathcal{F}_k .

Оператор $A(\cdot)$ заранее неизвестен и информация о нем содержится в результатах ξ_j , $j = 1, \dots, M$, измерений тестовых сигналов. Эти измерения проводятся по схеме

$$\xi_j = A(f_j) + \nu_j, \quad (3)$$

где f_j — известный входной тестовый сигнал, ν_j — погрешность j -го тестового измерения, $j = 1, \dots, M$, причем $\|\nu_j\|^2 \leq \delta^2$.

Первая из рассмотренных в настоящей работе задач состоит в том, чтобы по заданным результатам тестово-

вых измерений построить покрытие $\{\mathcal{F}'_k, k = 1, \dots, K\}$ области \mathcal{F} и множество линейных операторов, аппроксимирующих $A(\cdot)$ на каждой области \mathcal{F}'_k с гарантированной точностью.

Во второй задаче наряду с тестовыми проводится еще одно измерение по схеме (1), и на основании его результата ξ требуется построить оценку \widehat{Uf} сигнала Uf гарантированной точности. Для этого используется аппроксимация модели оператора $A(\cdot)$, полученная при решении первой задачи.

2. Кусочно-линейная аппроксимация оператора $A(\cdot)$ по тестам

2.1. Определения и обозначения

Введем обозначения: $A_0 \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n)$ — линейный оператор, действующий из \mathcal{R}_N в \mathcal{R}_n ; \mathbf{a}_0 — вектор из \mathcal{R}_n , и для любого $\mathbf{f} \in \mathcal{R}_N$ запишем

$$A_0 \mathbf{f} + \mathbf{a}_0 = (A_0 \ \mathbf{a}_0) \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Далее будем использовать обозначения $\bar{\mathbf{f}} = (\mathbf{f} \ 1)^* \in \mathcal{R}_{N+1}$ и $\bar{A}_0 = (A_0 \ \mathbf{a}_0) \in (\mathcal{R}_{N+1} \rightarrow \mathcal{R}_n)$, символ $*$ означает транспонирование (сопряжение).

Определение. Линейный оператор $\bar{A}_0 \in (\mathcal{R}_{N+1} \rightarrow \mathcal{R}_n)$ аппроксимирует оператор $A(\cdot)$ на множестве \mathcal{F}_0 с погрешностью Δ , если для любого $\mathbf{f} \in \mathcal{F}_0$ выполнено $\|A(\mathbf{f}) - \bar{A}_0 \bar{\mathbf{f}}\|^2 \leq \Delta^2$.

Для любого фиксированного набора тестовых сигналов $\bar{\mathbf{f}}_1, \dots, \bar{\mathbf{f}}_m$ введем линейные операторы $F \in (\mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_{N+1})$ и $A(F), \Xi, N \in (\mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_n)$, определенные для любого вектора $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_m)$ евклидова пространства \mathcal{R}_m равенствами

$$\begin{aligned} F\mathbf{t} &= \sum_{j=1}^m \bar{\mathbf{f}}_j t_j, & A(F)\mathbf{t} &= \sum_{j=1}^m A(\mathbf{f}_j) t_j \in \mathcal{R}_n, \\ \Xi\mathbf{t} &= \sum_{j=1}^m \xi_j t_j, & N\mathbf{t} &= \sum_{j=1}^m \nu_j t_j; \end{aligned} \quad (4)$$

столбцами матриц этих операторов в базисе, в котором заданы координаты вектора \mathbf{t} , служат векторы $\bar{\mathbf{f}}_j, A(\mathbf{f}_j), \xi_j$ и ν_j соответственно, $j = 1, \dots, m$.

Пользуясь обозначениями (4), запишем схему тестовых измерений (3) в виде

$$\Xi = A(F) + N; \quad (5)$$

здесь столбцы оператора N в естественном базисе пространства \mathcal{R}_m ограничены по норме числом δ .

Обозначим $F^- \in (\mathcal{R}_{N+1} \rightarrow \mathcal{R}_m)$ линейный оператор, псевдообратный линейному оператору $F \in (\mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_{N+1})$ [1–3].

Заметим, что максимальное число линейно независимых элементов множества $\{\bar{\mathbf{f}}_1, \dots, \bar{\mathbf{f}}_m\} \subset \mathcal{R}_{N+1}$ в силу определения (4) равно рангу линейного оператора F .

В следующем пункте этого раздела построим линейную аппроксимацию оператора $A(\cdot)$ на выпуклой оболочке некоторого подмножества $\bar{\mathbf{f}}_1, \dots, \bar{\mathbf{f}}_m$ тестовых сигналов. Для этого сначала сформулируем достаточные условия такой аппроксимации и укажем линейный оператор, удовлетворяющий этим условиям.

Далее, пользуясь этими условиями, разобьем множество \mathcal{F} на подмножества, на каждом из которых существует такая линейная аппроксимация — тем самым будет построена кусочно-линейная аппроксимация $A(\cdot)$ на \mathcal{F} .

2.2. Линейная аппроксимация оператора $A(\cdot)$ по тестам

Лемма 1. Пусть даны два набора векторов: $\{\xi_1, \dots, \xi_m\} \subset \mathcal{R}_n$ и $\{\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_m\} \subset \mathcal{R}_N$, $\bar{\mathbf{f}} = (\mathbf{f} \ 1)^* \in \mathcal{R}_{N+1}$. Справедливы следующие утверждения.

1. Равенство

$$\xi_j = \bar{A}_0 \bar{\mathbf{f}}_j, \quad j = 1, \dots, m, \quad (6)$$

выполнено для некоторого линейного оператора $\bar{A}_0 = (A_0 \ \mathbf{a}_0) \in (\mathcal{R}_{N+1} \rightarrow \mathcal{R}_n)$, $A_0 \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n)$, $\mathbf{a}_0 \in \mathcal{R}_n$, тогда и только тогда, когда

$$\Xi(I - FF^-) = 0, \quad (7)$$

где операторы $\Xi \in (\mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_n)$ и $F \in (\mathcal{R}_m \rightarrow \mathcal{R}_{N+1})$ определены в (4).

2. Пусть равенство (6) выполнено для некоторого линейного оператора $\bar{A}_0 \in (\mathcal{R}_{N+1} \rightarrow \mathcal{R}_n)$, и ранг оператора F равен m' . Тогда

а) если $m' < N + 1$, то равенство $\Xi F^- \bar{\mathbf{f}} = \bar{A}_0 \bar{\mathbf{f}}$ выполнено для любого $\bar{\mathbf{f}}$ из линейной оболочки $\mathcal{L}(\bar{\mathbf{f}}_1, \dots, \bar{\mathbf{f}}_m)$ тестовых сигналов $\bar{\mathbf{f}}_1, \dots, \bar{\mathbf{f}}_m$; если же $\bar{\mathbf{f}} \perp \mathcal{L}(\bar{\mathbf{f}}_1, \dots, \bar{\mathbf{f}}_m)$ и $\bar{A}_0 \bar{\mathbf{f}} \neq 0$, то $\bar{A}_0 \bar{\mathbf{f}} \neq \Xi F^- \bar{\mathbf{f}} = 0$;

б) если $m' = N + 1 \leq m$, то равенство $\Xi F^- \bar{\mathbf{f}} = \bar{A}_0 \bar{\mathbf{f}}$ выполнено для любого $\bar{\mathbf{f}} \in \mathcal{R}_n$.

3. Если $m' = N + 1 = m$, то $\bar{A}_0 = \Xi F^-$ при любых Ξ и F .

Доказательство. Система уравнений (6) в принятых обозначениях эквивалентна уравнению $\Xi = \bar{A}_0 F$, необходимое и достаточное условие разрешимости которого дается равенством (7) и любое его решение можно записать в виде $\bar{A}_0 = \Xi F^- + Z(I - FF^-)$ при некотором $Z \in (\mathcal{R}_{N+1} \rightarrow \mathcal{R}_n)$ [1, 3]. Неоднозначность решения возникает при $FF^- \neq I$, что эквивалентно неравенству $m' < N + 1$. При $m' = m = N + 1$ выполнено $F^- = F^{-1}$, что влечет $FF^- = F^-F = I$. \square

Из утверждений леммы 1 следует, что при аппроксимации оператора $A(\cdot)$ имеет смысл выбирать $m' = N + 1 < m$, так как при этом имеется возможность проверки существования линейной связи между тестовыми сигналами и результатами их измерений (в идеальном случае отсутствия погрешности измерений) и исключена неоднозначность в ее определении.

Рассмотрим модель тестовых измерений, описанную в п. 2.1. Для этой модели справедливо следующее утверждение.

Лемма 2. Если для некоторого числа $\sigma^2 \geq 0$ выполнено неравенство

$$\max_{j=1, \dots, m} \|\xi_j - \Xi F^- \bar{\mathbf{f}}_j\|^2 \leq \sigma^2, \quad (8)$$

то линейный оператор $\Xi F^- \in (\mathcal{R}_{N+1} \rightarrow \mathcal{R}_n)$ на множестве $\bar{\mathbf{f}}_1, \dots, \bar{\mathbf{f}}_m$ тестовых сигналов аппроксимирует оператор $A(\cdot)$ с погрешностью $(\delta^2 + \sigma^2)^{1/2}$.

Доказательство. Рассмотрим вариационную задачу

$$\inf_{\substack{Q \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n), \\ \mathbf{b} \in \mathcal{R}_n}} \sum_{j=1}^m \{ \|\xi_j - Qf_j - \mathbf{b}\|^2 \mid \|\xi_i - Qf_i - \mathbf{b}\|^2 \leq \sigma^2, \\ i = 1, \dots, m \}. \quad (9)$$

Если в точке (Q_0, \mathbf{b}_0) безусловного минимума функционала

$$\sum_{j=1}^m \|\xi_j - Qf_j - \mathbf{b}\|^2 \quad (10)$$

выполнены все ограничения

$$\|\xi_i - Q_0f_i - \mathbf{b}_0\|^2 \leq \sigma^2, \quad i = 1, \dots, m, \quad (11)$$

то решением задачи (9) на условный минимум является точка безусловного минимума функционала (8).

Обозначив $\bar{Q} = (Q \ \mathbf{b})$ и используя (4), запишем задачу безусловной минимизации функционала (10) в виде

$$\inf_{\bar{Q} \in (\mathcal{R}_{N+1} \rightarrow \mathcal{R}_n)} \|\Xi - \bar{Q}F\|_2^2. \quad (12)$$

В работе [2] показано, что точная нижняя грань в (12) достигается на любом операторе \bar{Q}_0 вида

$$\bar{Q}_0 = (Q_0 \ \mathbf{b}_0) = \Xi F^{-1} + Z(I - FF^{-1}) \in (\mathcal{R}_{N+1} \rightarrow \mathcal{R}_n),$$

где $Z \in (\mathcal{R}_{N+1} \rightarrow \mathcal{R}_n)$ — произвольный линейный оператор.

Теперь для любого f_j , $j = 1, \dots, m$, получим требуемое неравенство:

$$\|A(f_j) - \Xi F^{-1} \bar{f}_j\|^2 = \|A(f_j) - Q_0f_j - \mathbf{b}_0\|^2 \leq \\ \leq \|\xi_j - Q_0f_j - \mathbf{b}_0\|^2 + \|\nu_j\|^2 \leq \sigma^2 + \delta^2,$$

справедливое в силу (11) и неравенства $\|\nu_j\| \leq \delta$. Неравенство (11) при $(Q_0 \ \mathbf{b}_0) = \Xi F^{-1}$ превращается в (8). \square

Теорема 1. Пусть для $m \geq N+1$ тестовых сигналов f_1, \dots, f_m и результатов ξ_1, \dots, ξ_m их измерений выполнено неравенство (8), ранг m' линейного оператора F , построенного в соответствии с (4), равен $N+1$, и для любого элемента выпуклой оболочки $\mathcal{F}_F = \left\{ f = \sum_{i=1}^m \alpha_i f_i, \alpha_i \geq 0, i = 1, \dots, m; \sum_{i=1}^m \alpha_i = 1 \right\}$ тестовых сигналов справедлива оценка

$$\left\| A \left(\sum_{j=1}^m \alpha_j f_j \right) - \sum_{j=1}^{N+1} \alpha_j A(f_j) \right\| \leq \varepsilon.$$

Тогда оператор $\Xi F^{-1} \in (\mathcal{R}_{N+1} \rightarrow \mathcal{R}_n)$ аппроксимирует оператор $A(\cdot)$ на множестве \mathcal{F}_F с погрешностью $(\delta^2 + \sigma^2 + \varepsilon^2)^{1/2}$.

Доказательство. Запишем для $f \in \mathcal{F}_F$ его представление через тестовые сигналы $f = \sum_{i=1}^m \alpha_i f_i$ и соответственно $\bar{f} = \sum_{i=1}^m \alpha_i \bar{f}_i$, где $\alpha_i \geq 0$, $i = 1, \dots, m$, а $\sum_{i=1}^m \alpha_i = 1$, и рассмотрим

$$\|A(f) - \Xi F^{-1} \bar{f}\|^2 \leq \\ \leq \left\| A \left(\sum_{i=1}^m \alpha_i f_i \right) - \sum_{i=1}^m \alpha_i A(f_i) \right\|^2 + \left\| \sum_{i=1}^m \alpha_i (A(f_i) - \Xi F^{-1} \bar{f}_i) \right\|^2 \leq$$

$$\leq \varepsilon^2 + (\delta^2 + \sigma^2) \sum_{i=1}^m \alpha_i^2 \leq \varepsilon^2 + \delta^2 + \sigma^2,$$

так как выполнены условия лемм 1 и 2. \square

Замечание. Достаточное условие (8) линейной аппроксимации оператора $A(\cdot)$ можно ослабить, рассматривая вместо оператора ΞF^{-1} точное решение задачи (9), однако его получение возможно только численно и требует значительных вычислительных затрат.

2.3. О выборе кусочно-линейной аппроксимации оператора $A(\cdot)$

Если оператор $A(\cdot)$ нелинеен и априори неизвестны его свойства, то очевидно, что построить его аппроксимацию по конечному числу тестовых измерений невозможно.

Если априори известно, что для любого симплекса диаметра ρ выполнено свойство (2) для некоторого $\varepsilon = \varepsilon(\rho)$, то, выбрав произвольное покрытие множества \mathcal{F} симплексами диаметра ρ и построив в каждом из них линейную аппроксимацию по тестовым измерениям в соответствии с утверждениями теоремы 1, получим кусочно-линейную аппроксимацию $A(\cdot)$ на всем множестве \mathcal{F} . Однако такое построение может оказаться слишком подробным. Кроме того, на практике указать значения ρ и $\varepsilon(\rho)$ априори достаточно сложно. Предложим метод, в котором покрытие \mathcal{F} симплексами диаметра ρ и кусочно-линейная аппроксимация оператора $A(\cdot)$ строится на основании оценки величины $\varepsilon(\rho)$ в (2), построенной на тестовых сигналах.

Пусть множество \mathcal{F} — симплекс диаметра ρ_1 . Оценим сначала величину $\varepsilon(\rho_1)$. Для этого выберем тестовые сигналы $\{f_1^1, \dots, f_{m_1}^1\} \subset \mathcal{R}_N$ так, что $m_1 > N+1$, первые $N+1$ векторы f_1^1, \dots, f_{N+1}^1 являются вершинами симплекса \mathcal{F} , а остальные f_k^1 с номерами $k = N+2, \dots, m$ являются выпуклыми комбинациями этих вершин:

$$f_k^1 = \sum_{j=1}^{N+1} \alpha_{k,j} f_j^1; \quad (13)$$

здесь $\alpha_{k,j} \geq 0$, $j = 1, \dots, N+1$, и $\sum_{j=1}^{N+1} \alpha_{k,j} = 1$, $k = N+2, \dots, m$.

Для операторов $F_1 \in (\mathcal{R}_{m_1} \rightarrow \mathcal{R}_{N+1})$ и $\Xi_1 \in (\mathcal{R}_{m_1} \rightarrow \mathcal{R}_n)$, построенных по наборам $\{f_1^1, \dots, f_{m_1}^1\} \subset \mathcal{R}_{N+1}$ и результатам их измерений в соответствии с (4), вычислим величину $\sigma_1^2 = \max_{j=1, \dots, m} \|\xi_j^1 - \Xi_1 F_1^{-1} \bar{f}_j^1\|^2$. Тогда для всех тестовых сигналов f_k^1 с номерами $k = N+2, \dots, m$ в силу условий (13) и леммы 2 выполнено

$$\left\| A \left(\sum_{j=1}^{N+1} \alpha_{k,j} f_j^1 \right) - \sum_{j=1}^{N+1} \alpha_{k,j} A(f_j^1) \right\|^2 = \\ = \left\| (A(f_k^1) - \Xi_1 F_1^{-1} \bar{f}_k^1) - \sum_{j=1}^{N+1} \alpha_{k,j} (A(f_j^1) - \Xi_1 F_1^{-1} \bar{f}_j^1) \right\|^2 \leq \\ \leq 2(\sigma_1^2 + \delta^2).$$

Таким образом, на тестовых сигналах получена оценка $\varepsilon(\rho_1) \leq (2(\sigma_1^2 + \delta^2))^{1/2}$, и погрешность линейной аппрок-

симации оператора $A(\cdot)$ линейным оператором $\Xi_1 \mathcal{F}_1^-$ на симплексе \mathcal{F} , согласно теореме 1, равна $(3(\sigma_1^2 + \delta^2))^{1/2}$. Если эта оценка приемлема, то аппроксимация закончена. В противном случае можно множество \mathcal{F} разбить на несколько подмножеств, являющихся симплексами, и на каждом из них провести описанную выше операцию. Эти действия следует повторять до тех пор, пока не будет достигнута приемлемая точность аппроксимации.

3. Задача оценивания входного сигнала на основе кусочно-линейной аппроксимации модели измерения

Рассмотрим схему измерения входного сигнала $f_0 \in \mathcal{F} \subset \mathcal{R}_N$:

$$\xi_0 = A(f_0) + \nu_0, \quad (14)$$

причем известно, что погрешность ν_0 измерения (14) ограничена, $\|\nu_0\| \leq \delta_0$. Требуется оценить значение вектора $u_0 = Uf_0$, если $U \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_M)$ — заданный линейный оператор, если известно покрытие множества \mathcal{F} симплексами \mathcal{F}_k , $k = 1, \dots, K$, и на каждом \mathcal{F}_k оператор $A(\cdot)$ аппроксимируется линейным оператором $\Xi_k F_k^-$ с известной погрешностью Δ .

Существование кусочно-линейной аппроксимации оператора $A(\cdot)$ позволяет утверждать, что если $f_0 \in \mathcal{F}_k$, то

$$\xi_0 = \Xi_k F_k^- \bar{f}_0 + \mu_k, \quad \|\mu_k\|^2 \leq \Delta^2 + \delta_0^2; \quad (15)$$

здесь $\bar{f}_0 = (f_0 \ 1)^* \in \mathcal{R}_{N+1}$.

Для построения оценки сигнала $u_0 = Uf_0$ для каждого $k = 1, \dots, K$ найдем подмножество $\mathcal{F}_k(\xi_0) = \{f \in \mathcal{F}_k: \Xi_k F_k^- f + \mu_k = \xi_0 \text{ для некоторого } \mu_k, \|\mu_k\|^2 \leq \Delta^2 + \delta_0^2\}$ сигналов из \mathcal{F}_k , измерение которых по схеме (15) может привести к результату ξ_0 . Обозначим $\mathcal{F}(\xi_0) = \bigcup_{k=1}^K \mathcal{F}_k(\xi_0)$ и определим оценку $\hat{u}_0 \in \mathcal{R}_M$ как решение задачи

$$\sup_{f \in \mathcal{F}(\xi_0)} \|\hat{u}_0 - Uf\| = \inf_{\hat{u} \in \mathcal{R}_M} \sup_{f \in \mathcal{F}(\xi_0)} \|\hat{u} - Uf\|. \quad (16)$$

При заданном $\mathcal{F}(\xi_0)$ решением задачи (16) является центр шара минимального радиуса, содержащего образ множества $\mathcal{F}(\xi_0)$ при отображении $U \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_M)$; радиус этого шара дает точность оценки \hat{u}_0 , минимаксной на множестве $U\mathcal{F}(\xi_0)$.

Приведем свойства множеств $\mathcal{F}_k(\xi_0)$, $k = 1, \dots, K$.

Лемма 3. 1. Для того чтобы множество $\mathcal{F}_k(\xi_0)$ было непусто, необходимо выполнение следующих двух условий:

$$\|(I - \Xi_k F_k^- (\Xi_k F_k^-)^-)\xi_0\|^2 \leq \Delta^2 + \delta_0^2; \quad (17)$$

$$\sup_{z \in \mathcal{V}(\Xi_k)} \|\xi_0 - z\|^2 \leq \delta_0^2, \quad (18)$$

где $\mathcal{V}(\Xi_k)$ — выпуклая оболочка элементов $\xi_1^k, \dots, \xi_{N+1}^k$ — результатов измерений по схеме (3) тестовых сигналов f_1^k, \dots, f_{N+1}^k , расположенных в вершинах симплекса \mathcal{F}_k .

2. Множество $\mathcal{F}_k(\xi_0)$ есть пересечение \mathcal{F}_k с множеством

$$\{z: \|\Xi_k F_k^- z - \xi_0\| \leq \rho_k(\xi_0)\} \subset \mathcal{R}_N, \quad (19)$$

где $\rho_k(\xi_0) = (\Delta^2 + \delta_0^2 - \|(I - \Xi_k F_k^- (\Xi_k F_k^-)^-)\xi_0\|^2)^{1/2}$.

3. Множество (19) неограниченно, если оно не пусто и существует хотя бы один вектор $z \in \mathcal{R}_{N+1}$, $z \neq 0$, для которого $\Xi_k F_k^- z = 0$.

Доказательство. Поскольку $(\Xi_k F_k^- (\Xi_k F_k^-)^-)\xi_0$ — ортогональная проекция ξ_0 на $\mathcal{R}(\Xi_k F_k^-)^1$, то неравенство (17) эквивалентно выполнению равенства (15) для некоторого вектора $f \in \mathcal{R}_{N+1}$ и вектора μ_k , $\|\mu_k\|^2 \leq \Delta^2 + \delta_0^2$.

Так как линейное преобразование $\Xi_k F_k^-$ переводит вершины симплекса \mathcal{F}_k в вершины выпуклого множества $\Xi_k F_k^- \mathcal{F}_k$, то неравенство (18) означает, что найдется вектор $f \in \mathcal{F}_k$, для которого норма разности $\|\Xi_k F_k^- f - \xi_0\|$ не превосходит величину погрешности измерения (14).

Второе утверждение леммы 3 следует из того, что указанный эллипсоид есть полный прообраз «круга», полученного при пересечении шара с центром в точке ξ радиуса $\Delta^2 + \delta_0^2$ с линейным подпространством $\mathcal{R}(\Xi_k F_k^-)$. Радиус «круга» получен из прямоугольного треугольника с гипотенузой, равной радиусу $\Delta^2 + \delta_0^2$ шара, и одним из катетов, длина которого равна норме разности вектора ξ и его проекции на $\mathcal{R}(\Xi_k F_k^-)$.

Третье утверждение леммы 3 следует из того, что сумма элемента множества (19) с любым ненулевым элементом нуль-пространства оператора $\Xi_k F_k^-$ также принадлежит (19). \square

Поскольку точное вычисление оценки \hat{u}_0 весьма громоздко, приведем приближенный способ вычисления оценки вектора $u_0 = Uf_0$.

Теорема 2. 1. Если соотношения (17)–(18) не выполнены ни для каких $k = 1, \dots, K$, то модели измерения и тестирования не согласуются между собой.

2. Если соотношения (17)–(18) выполнены только для единственного значения k_0 и выполнено условие $U(I - (\Xi_{k_0} F_{k_0}^-)^- (\Xi_{k_0} F_{k_0}^-)) = 0$, то вектор $\hat{u}' = U(\Xi_{k_0} F_{k_0}^-)^- \xi_0$ является оценкой вектора $u = Uf$ с погрешностью $h'(\xi_0) = \rho(\xi_0) \|U(\Xi_{k_0} F_{k_0}^-)^-\|$, где $\|Q\| = \sup_{z \neq 0} \|Qz\|/\|z\|$ — норма линейного оператора Q .

3. Если соотношения (17)–(18) выполнены только для чисел k_i , $i = 1, \dots, q > 1$, и для них выполнены равенства $U(I - (\Xi_{k_i} F_{k_i}^-)^- (\Xi_{k_i} F_{k_i}^-)) = 0$, то центр \hat{u}'' шара минимального радиуса, содержащего все векторы $U(\Xi_{k_i} F_{k_i}^-)^- \xi_0$, $i = 1, \dots, q$, является оценкой вектора $u = Uf$ с погрешностью $h''(\xi_0)$, равной сумме радиуса этого шара с величиной $\max_{i=1, \dots, q} \rho_{k_i}(\xi_0) \|U(\Xi_{k_i} F_{k_i}^-)^-\|$.

Доказательство. Условия (17)–(18) достаточны, для того чтобы множество $\mathcal{F}_k(\xi_0)$ было пусто. Если для всех $k = 1, \dots, K$ эти множества пусты, модели измерений (3) и (14) несогласованны.

¹ $\mathcal{R}(Q)$ — пространство значений линейного оператора Q .

Если непустым окажется лишь единственное множество $\mathcal{F}_{k_0}(\xi_0)$, то множество (19) содержит множество $\mathcal{F}_{k_0}(\xi_0)$, его образ при отображении U есть эллипсоид в \mathcal{R}_M с центром в точке $\hat{u}' = U(\Xi_{k_0} F_{k_0}^-) - \xi_0$ и длиной максимальной полуоси, равной $h'(\xi_0)$. Условие $U(I - (\Xi_k F_k^-) - (\Xi_k F_k^-)) = 0$ означает, что если $Uz = 0$, то и $\Xi_k F_k^- z = 0$, что гарантирует, несмотря на неограниченность множества (19), ограниченность его образа при отображении U .

Если непустыми являются множества $\mathcal{F}_{k_i}(\xi_0)$, $i = 1, \dots, q$, то шар минимального радиуса, содержащий все точки Uf , когда f пробегает все точки $\mathcal{F}(\xi_0)$, содержит все эллипсоиды, построенные для каждого множества $\mathcal{F}_{k_i}(\xi_0)$, $i = 1, \dots, q$, и значит, содержит шар с центром в точке \hat{u}'' радиуса $h''(\xi_0)$. \square

4. Вычислительный эксперимент

Проводится анализ нелинейной фотосинтетической системы, образованной взаимосвязанными и взаимодействующими компонентами, результатом функционирования которых является осуществление протонного транспорта и синтеза аденозинтрифосфата (АТФ). Рассматриваемая система представляет собой тилакоид, образованный фотосинтетической мембраной, включающий стромальную и гранальную части. Учитывается, что выделение протонов в люмен происходит при разложении воды фотосистемой 2 (ФС2) и работе цитохромного комплекса (Ц) в электронно-транспортной

цепи, где участвуют такие переносчики электронов, как пластоцианин (ПЦ) и пластохинон (ПХ).

В качестве базы для моделирования системы протонного транспорта и сопряженного с ним синтеза АТФ на фотосинтетической мембране был выбран многоточечный сетевой метод. Данный подход позволяет учесть структуру системы с помощью узлов графа, соединяющих активные центры системы, и произвести качественное моделирование интересующих нас процессов с учетом различных механизмов переноса вещества, а также геометрии исследуемого объекта.

Моделирование производится при учете изменяющейся интенсивности излучения. Рассматриваются различные конфигурации системы, величины концентрации ФС2 на фотосинтетической мембране.

Полученная модель представляет собой модель измерительного прибора в схеме (1), на вход которого подается сигнал f . Таким образом, в схеме измерительного эксперимента вектор f состоит из двух компонент: интенсивности излучения и концентрации ФС2 на фотосинтетической мембране. При этом на выходе мы получаем вектор ξ , который состоит из двух компонент,

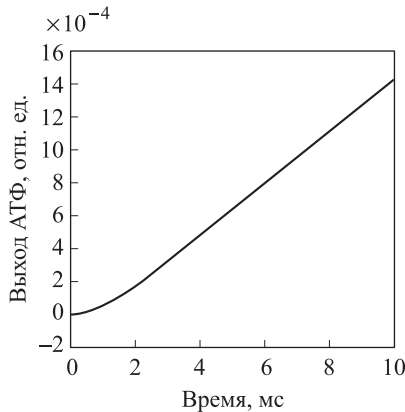


Рис. 1. Выход АТФ во времени. Снимаемым сигналом является скорость синтеза в его стационарной части

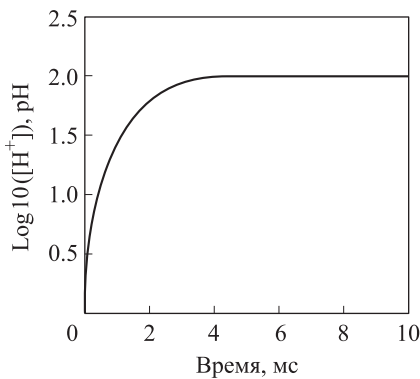


Рис. 2. Динамика роста концентрации протонов. Снимаемым сигналом является Δ рН насыщения

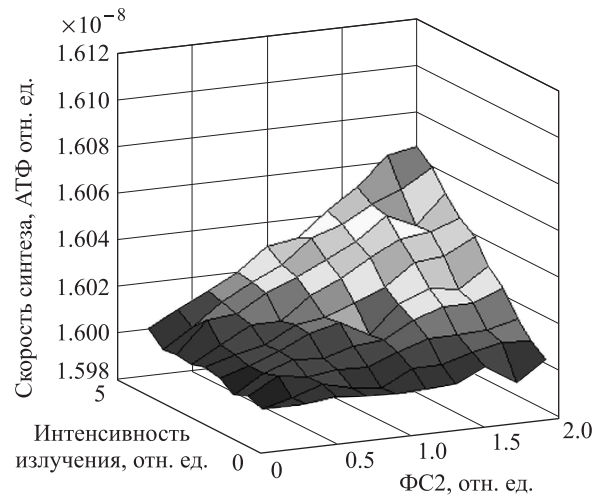


Рис. 3. Значения тестовых сигналов скорости синтеза АТФ при различной интенсивности излучения и концентрации фотосистем 2

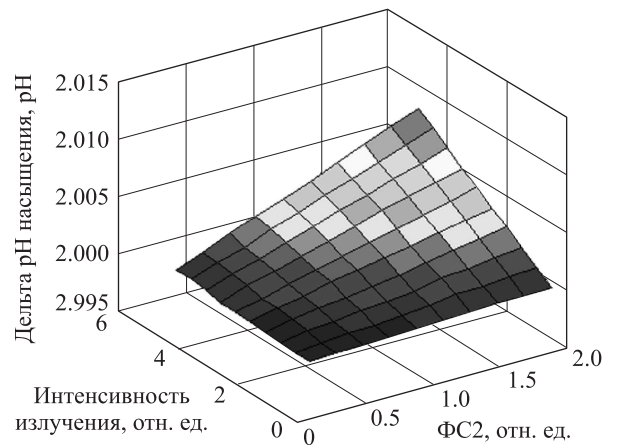


Рис. 4. Значения тестовых сигналов Δ рН насыщения при различной интенсивности излучения и концентрации фотосистем 2

	Модельные значения	Оценка МНК	Оценка линеаризации
ΔpH	2.0040 ± 0.002	2.0080 ± 0.004	2.0025 ± 0.002
АТФ	$1.6030 \cdot 10^{-8} \pm 0.002 \cdot 10^{-8}$	$1.6066 \cdot 10^{-8} \pm 0.004 \cdot 10^{-4}$	$1.6022 \cdot 10^{-8} \pm 0.002 \cdot 10^{-4}$

измеряются величины ΔpH насыщения и скорость синтеза АТФ (рис. 1, 2).

Далее, после того как модель сформирована, на основе априорной информации о диапазоне изменения параметров системы, границ изменения интенсивности излучения и величин концентраций ФС2, проводится серия тестирующих измерений при условии, что остальные характеристики системы не изменяются (рис. 3, 4).

На основе данных измерений формируются матрицы входных F и выходных параметров Ξ . Схема измерения преобращает вид (5). По полученным тестовым сигналам строится линейное приближение модели измерения $A(f)$.

На первом этапе решения задачи анализируется погрешность δ для измеряемых параметров. Для определения данной величины проводится серия тестовых экспериментов и вычисляется средняя невязка между полученными значениями. Затем на основе данной погрешности производится разбиение множества тестовых сигналов на области, где возможно построение линейной аппроксимации модели.

На следующем этапе с помощью полученной кусочно-линейной аппроксимации модели строятся линейные оценки параметров системы.

Таким образом, нами выбирается подпространство такое, что проекция входных параметров f на него может быть оценена по измерению $\xi = A(f) + \nu$ с приемлемой точностью в соответствии с уровнем случайности, присущей данному измерению.

В результате были получены оценки входящих параметров, которые сравниваются в таблице с оценками МНК.

Заключение

Предложенный подход, основанный на линейном приближении модели измерения, построенном по результатам тестов, позволяет получить оценки параметров нелинейной системы. При этом в результате вычислительного эксперимента были получены оценки входных параметров, превосходящие по точности результаты анализа методом наименьших квадратов. Полученная погрешность оценок, обусловленная отличием приближенной модели от точной, согласуется с погрешностью, возникающей из-за неточности измерений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 08-07-00120, 09-01-96508 и 09-07-00505-а).

Список литературы

1. *Пытьев Ю.П.* Методы математического моделирования измерительно-вычислительных систем. М., 2004.
2. *Пытьев Ю.П.* Математические методы интерпретации эксперимента: Учеб. пособие. М., 1989.
3. *Чуличков А.И.* Основы теории измерительно-вычислительных систем. Тамбов, 2000.
4. *Черемухин Е.А., Чуличков А.И.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2004. № 3. С. 15.
5. *Голубцов П.В., Пытьев Ю.П., Чуличков А.И.* // Дискретные системы обработки сигналов. Устинов, 1986. С. 68.

Interpretation of experimental data on the basis of piece-wise linear approximation of the model of measurements

T. A. Kopit^{1,a}, A. I. Chulichkov^{1,b}, D. M. Ustinin²

¹Department of Computer Methods in Physics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

²Department of Biophysics, Faculty of Biology, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

E-mail: ^a kopit_tanya@mail.ru, ^b achulichkov@gmail.com.

Methods for estimating the input signal of measuring device are discussed. Information about the device is contained in measurements of a known set of test signals. Measurements are obtained in natural or in the computational experiment. The method for the approximation of the measuring model by the piece-wise linear model that is consistent with the result of measurements is proposed. Also the method of calculating the estimation of input signal and its accuracy is offered. The solution of the problem of the measurements interpretation is considered on the base of the approximation of the model of the photosynthetic system. In this system the measured parameters are the values of ΔpH saturation and the velocity of ATP synthesis, and evaluated parameters are concentration of photosystem-2 and light intensity.

Keywords: mathematical modeling, decision making, analysis and interpretation of data, measurement and computing system.

PACS: 02.60.Gf.

Received 16 December 2009.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 5(2010).

Сведения об авторах

1. Копит Татьяна Александровна — аспирант; тел.: (495) 939-13-32, e-mail: kopit_tanya@mail.ru.

2. Чуличков Алексей Иванович — докт. физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-13-32, e-mail: achulichkov@gmail.com.

3. Устинин Дмитрий Михайлович — канд. физ.-мат. наук, науч. сотр.; тел.: (495) 939-02-89, e-mail: ustinin@mail.ru.