На правах рукописи

Копит Татьяна Александровна

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ИНТЕРПРЕТАЦИИ ДАННЫХ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ТЕСТОВЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

05.13.18 — Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2012

Работа выполнена на кафедре компьютерных методов физики физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Научный руководитель	доктор физико-математических наук, профессор Чуличков Алексей Иванович
Официальные оппоненты	Голубцов Петр Викторович доктор физико-математических наук, доцент, кафедра математики физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова, профессор Лепский Александр Евгеньевич доктор физико-математических наук, доцент, кафедра высшей математики факультета экономики Национального исследовательского университета "Высшая Школа Экономики", профессор
Ведущая организация	Институт математических проблем биологии РАН

Защита состоится «5» октября 2012 г. в 16 часов 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 501.002.09 при Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова по адресу: 119991, г. Москва, Ленинские горы, дом 1, стр. 4, НИВЦ МГУ, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке МГУ имени М.В.Ломоносова (Ломоносовский просп., 27).

Автореферат разослан «____» ____________ 2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета — Суворов В.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. В современных научных исследованиях часто приходится решать задачи, в которых из имеющегося массива данных требуется извлечь некоторую скрытую в них информацию. Такие задачи называют задачами интерпретации данных. К ним, в частности, относятся задачи оценивания параметров исследуемых объектов по поступающим от них сигналам, задачи прогноза состояния систем в будущем или в условиях, отличных от тех, при которых получены данные, по наблюдению их текущих состояний, и др.

Для извлечения из данных полезной информации необходима математическая модель, связывающая данные с содержащейся в них информацией (прямая модель формирования данных). Задача интерпретации данных может рассматриваться как обратная задача математического моделирования, методы решения которых широко известны. Однако если модель задана неточно, то точность решения обратной задачи может оказаться неудовлетворительной. В этом случае необходимо уточнение модели.

Одним из способов уточнения модели является проведение тестовых экспериментов — натурных или вычислительных, результатом которых являются отклики модели на известные ситуации. По этим данным на первом этапе производится уточнение модели, и на следующем эта уточненная модель используется для решения обратной задачи: из данных, полученных независимо от тестов, извлекается информация о той ситуации, в которой эти данные получены.

Математическая процедура уточнения модели по тестам зависит от того, как поставлена задача уточнения модели. Поскольку для рассматриваемой задачи чрезвычайно важна именно точность интерпретации данных, то актуальной является задача разработки таких математических методов уточнения модели, которые обеспечивали бы максимальную точность интерпретации данных на втором этапе, или, по крайней мере, в которых погрешность уточненной модели была бы согласована с точностью интерпретации.

Решение задачи интерпретации зависит от используемых модельных предположений о том, как получены данные тестов и интерпретируемые данные, поэтому актуальной является разработка математических методов контроля адекватности этих предположений. Модельные предположения считаются адекватными, если они не противоречат всем известным данным о моделируемой реальности.

Решению этих задач и посвящена настоящая работа.

Кроме того, заметим, что под результатами тестов можно понимать расчеты прямой задачи для некоторых известных ситуаций. Если прямая модель построена как сложный комплекс программ, требующих большого времени расчета, то вся доступная информация о модели формирования данных фактически содержится в вычислениях, выполненных с некоторой точностью для набора тестовых ситуаций. Тем самым развиваемые в диссертации методы актуальны для решения задач интерпретации данных, модель формирования которых задана в виде сложных компьютерных моделей.

Цель работы. Целью работы является решение задач интерпретации экспериментальных данных для случая, когда модель эксперимента задана в виде результатов тестовых измерений, и исследование свойств решений.

Задачами исследования являются:

- разработка новых математических методов и алгоритмов интерпретации данных, модель формирования которых построена по результатам ее откликов на тестовые ситуации с точностью, обеспечивающую максимальную или заданную точность решения задачи интерпретации данных;

- разработка новых математических методов и алгоритмов проверки адекватности используемых при этом математических моделей;

- реализация эффективных численных алгоритмов решения задачи интерпретации данных в виде комплексов программ для проведения вычислительного эксперимента.

Научные результаты, выносимые на защиту.

1. Разработан метод и численный алгоритм решения задачи интерпретации данных, где модель формирования данных строится путем кусочно-линейной аппроксимации на основе тестов, погрешность измерения ограничена по норме, при этом контролируется точность интерпретации данных и адекватность используемых математических моделей.

2. Разработан метод и численный алгоритм решения задачи интерпретации данных, где модель формирования данных задана в виде распределения возможностей на множестве линейных операторов и уточняется по тестам, погрешности измерений являются нечеткими векторами с заданными распределениями возможностей, при этом максимизируется апостериорная возможность интерпретации данных и контролируется адекватность используемых математических моделей.

3. Создан комплекс программ для прямого моделирования процессов протонного транспорта и синтеза АТФ на фотосинтетической

мембране сложной пространственной структуры. В вычислительном эксперименте получены оценки входных параметров системы.

Методы исследования. В диссертации применяются методы теории измерительно-вычислительных систем[1], методы теории возможности[2], методы математического программирования. Численные эксперименты реализованы с использованием программ, написанных на языке C/C++, а также программ на базе платформы Matlab.

Научная новизна. Исследовано решение задачи интерпретации данных, позволяющее получать оценки погрешности интерпретации данных на основе кусочно-линейной аппроксимации нелинейного оператора модели их формирования, построенного по тестам. Дан метод выбора областей линейности из условий согласования точности интерпретации, точности аппроксимации и точности задания данных и результатов тестов. Построен метод проверки адекватности используемых математических моделей.

Впервые получено решение задачи интерпретации данных, где оценки строятся при максимизации апостериорной возможности на основе данных о параметрах объекта, искаженных нечеткой погрешностью. В данной задаче прямая модель данных задана в виде результатов тестов, выполненных также с нечеткой погрешностью, даны методы проверки адекватности математических моделей.

Разработаны методы вычисления оценок и характеристик адекватности моделей, методы реализованы в виде комплекса программ. Методы применялись при интерпретации данных модели фотосинтетической системы.

Научная и практическая значимость. Практическая ценность разработанных в диссертации новых методов решения обратных задач интерпретации данных состоит в том, что разработан новый инструмент для научных исследований и решения прикладных задач, который

- позволяет уточнять погрешность решения задачи интерпретации данных, модель формирования которых неизвестна или известна неточно, путем уточнения модели проведением экспериментов, тестирующих модель;

- позволяет уточнять достоверность результатов и выводов благодаря возможности проверки адекватности математических моделей, используемых при решении задачи интерпретации.

[1] Пытьев Ю.П. «Методы математического моделирования измерительно-вычислительных систем». М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.

[2] Пытьев Ю.П. «Возможность как альтернатива вероятности». М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007.

Ценность работы. Разработанные в диссертации методы существенно расширяют класс решаемых задач интерпретации данных, позволяя получать оценки параметров контролируемой точности для случая, когда модель данных определяется или уточняется по результатам тестов. В частности, становится возможным решать задачи интерпретации данных эксперимента, математическая модель которого реализована в виде комплекса программ, требующего значительного времени расчета. Разработанные методы контроля адекватности используемых математических моделей позволяет повысить достоверность получаемых результатов.

Научная обоснованность и достоверность. Полученные автором теоретические результаты подтверждены строгими доказательствами и вычислительными экспериментами. Результаты решения задач интерпретации данных фотосинтеза, помимо оценок контролируемой точности, содержат параметры, характеризующие согласие используемых моделей с реальными данными и результатами тестов. Результаты решения задач интерпретации данных фотосинтеза согласуются с теоретическими представлениями.

Апробация результатов работы. Результаты, представленные в работе, докладывались на научных семинарах кафедры компьютерных методов физики, кафедры математики физического факультета МГУ, НИВЦ МГУ и кафедре биофизики биологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, а также на следующих конференциях: Международной конференции "Математика. Компьютер. Образование." (Дубна, Пущино, январь 2006, 2007, 2009, 2010 гг.); Международной мультиконференции "Актуальные проблемы информационно-компьютерных технологий, мехатроники и робототехники." (Дивноморское, октябрь 2009 г.); Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных "Ломоносов" (Москва, апрель 2006 и 2010 гг.). Всероссийской конференции "Математические методы распознавания образов" (Петрозаводск, 2011 г.); Международной конференции "Rough Sets, Fuzzy Sets, Data Mining and Granular Computing" (Москва, 2011 г.).

Работа была выполнена при поддержке грантов РФФИ 08-07-00120, 09-01-96508, 09-07-00505-а, 11-07-00338-а.

Личный вклад автора. Все исследования, результаты которых изложены в диссертационной работе, проведены лично соискателем в процессе научной деятельности. Из совместных публикаций в диссертацию включен лишь тот материал, который непосредственно принадлежит соискателю.

Публикации. По теме диссертации имеется 14 публикаций, список которых приводится в конце автореферата.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и библиографии. Объём работы — 141 страница, содержит 22 иллюстрации. Библиография включает в себя 91 печатную работу.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы.

ВВЕДЕНИЕ включает в себя краткое описание решаемых проблем, дается обоснование актуальности данных исследований. Содержит постановку целей и оценку полученных результатов. Также введение содержит краткое содержание глав.

ПЕРВАЯ ГЛАВА представляет обзор существующих методов анализа и интерпретации экспериментальных данных. Первый параграф содержит основные подходы при заданной модели измерений. Описаны методы оценивания параметров модели, основанные на методе наименьших квадратов, методы теории регуляризации, методы точечного оценивания параметров распределений вероятностей. Рассмотрены фундаментальные основы теории измерительно-вычислительных систем, вводятся основные понятия и термины. Второй параграф содержит основные подходы к решению задачи интерпретации экспериментальных данных при неизвестной модели измерений или заданной частично. Рассмотрен принцип максимальной надежности модели, характеризующий соответствие математической модели и данных эксперимента. Рассмотрены методы оценки модели и ее уточнения на основании тестовых измерений. Приведено описание класса задач интерпретации данных посвященных задачам оценивания по прецедентам. Рассмотрены методы нечеткой интерпретации. Приведены основы теории возможностей. Вводятся понятия нечеткого элемента, распределения возможностей.

В диссертации используется подход теории измерительно-вычислительных систем, остановимся на ее основных терминах и задачах. Считается, что данные, которые следует интерпретировать, получены в результате эксперимента, проведенного по схеме

$$\xi = A(f) + \nu. \tag{1}$$

Здесь ν моделирует погрешность данных. Считается, что f — элемент евклидова пространства $\mathcal{R}_N$, ξ, $A(f)$ и ν — элементы евклидова пространства $\mathcal{R}_n$, $N, n < \infty$. Данные ξ используются для оценки вектора

$$u = Uf \tag{2}$$

евклидова пространства $\mathcal{R}_m$, $m < \infty$. Оператор $U \in (\mathcal{R}_N \to \mathcal{R}_m)$ — известный линейный оператор.

В терминах теории измерительно-вычислительных систем векторы ξ, $A(f)$, f, u и ν рассматриваются как математические модели сигналов, а операторы A и U — как математические модели измерительных приборов, так, что ξ интерпретируется как результат измерения искаженного аддитивным шумом ν выходного сигнала $A(f)$ измерительного прибора $A(\cdot)$, на вход которого подан (неизвестный) сигнал f от изучаемого объекта. Задача интерпретации измерения ставится как задача поиска такого преобразования R сигнала ξ, результатом $R\xi$ которого является наиболее точная версия выходного сигнала $u = Uf$ «идеального измерительного прибора» U, на вход которого подан сигнал f, тот же, что и при измерении (1). Если математическая модель измерительного прибора $A(\cdot)$ уточняется в эксперименте, то преобразование R зависит от результатов тестовых измерений (3).

В диссертации используется два подхода к решению задачи интерпретации данных на основании модели, уточняемой по тестам. В первом из них об операторе $A(\cdot)$ известно, что он может быть любым из заданного класса нелинейных операторов, и измеряются его значения в серии тестовых экспериментов

$$\xi_j = A(f_j) + \nu_j, \quad j = 1, \ldots, M. \tag{3}$$

Погрешности измерений ν и ν_j, $j = 1, \ldots, M$, ограничены по норме.

Во втором подходе считается, что на множестве линейных операторов A, сигналов f и погрешностей измерений ν и ν_j, $j = 1, \ldots, M$, задана возможность, которая, как и вероятность, является мерой. Эта мера полностью упорядочивает предопределенности, шансы на то, что именно эти значения указанных математических величин реализовались в данном эксперименте. Метод решения задачи интерпретации данных построен как метод оценок вектора u, максимизирующих апостериорную возможность.

Заметим, что для линейного оператора $A \in (\mathcal{R}_N \to \mathcal{R}_n)$ и погрешностей ν и ν_j, $j = 1, \ldots, M$, как случайных векторов задача интерпретации измерений на основе модели, построенной по тестам, решена в работах Ю.П. Пытьева, А.И.Чуличкова, П.В. Голубцова, Е.А. Черемухина[3]. Решаемые в диссертации задачи отличаются предположениями о нелинейности оператора $A(\cdot)$ и иными математическими моделями погрешности измерений.

Во **ВТОРОЙ ГЛАВЕ** поставлена, решена и исследована задача интерпретации данных на основе кусочно-линейной аппроксимации модели измерений, построенной по тестам.

[3] Голубцов П.В, Пытьев Ю.П., Чуличков А.И. «Построение оператора редукции по тестовым измерениям». В сб. "Дискретные системы обработки сигналов Устинов: 1986. С.68-71. Черемухин Е.А., Чуличков А.И. «О редукции к идеальному прибору по данным тестирующих измерений» — Вестник Моск. ун-та. Сер.3 Физ. Астрон. Т. 3. 2004. – С.15-18.

Рассматривается нелинейная схема (1) измерительного эксперимента, в которой ξ интерпретируется как результат измерения искаженного аддитивным шумом ν выходного сигнала $A(f)$ измерительного прибора $A(\cdot)$, на вход которого подан сигнал f от изучаемого объекта. Задача интерпретации измерения (1), решаемая в этой главе, состоит в наиболее точном оценивании параметров u изучаемого объекта, непосредственно не наблюдаемых, но связанных с сигналом f равенством (2), где оператор U известен.

Считается, что в (1) сигналы $f \in \mathcal{R}_N$, $Af, \xi, \nu \in \mathcal{R}_n$ — 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 $\alpha_1 \geq 0, \dots, \alpha_{N+1} \geq 0$, таких, что $\sum\limits_{j=1}^{N+1} \alpha_j = 1$, выполнено неравенство

$$\left\|A\Big(\sum_{j=1}^{N+1} \alpha_j f_j\Big) - \sum_{j=1}^{N+1} \alpha_j A(f_j)\right\| \leq \varepsilon. \tag{4}$$

Таким образом, 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 (3), в которой f_j — известный входной тестовый сигнал, ν_j — погрешность j-го тестового измерения, $j = 1, \dots, M$, причем $\|\nu_j\|^2 \leq \delta^2$.

Выполняется замена переменных, сводящая аффинное преобразование $g = Af + a$, $A \in (\mathcal{R}_N \to \mathcal{R}_n)$, $a \in \mathcal{R}_N$, к линейному $g = \widetilde{A}\widetilde{f}$: $\widetilde{A} = (A\ a) \in (\mathcal{R}_{N+1} \to \mathcal{R}_n)$, $\widetilde{f} = \begin{pmatrix} f \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathcal{R}_{N+1}$.

Определение. Линейный оператор $\widetilde{A_0} \in (\mathcal{R}_{N+1} \to \mathcal{R}_n)$ аппроксимирует оператор $A(\cdot)$ на множестве $\mathcal{F}_0$ с погрешностью Δ, если для любого $f \in \mathcal{F}_0$ выполнено $\|A(f) - \widetilde{A_0}\widetilde{f}\|^2 \leq \Delta^2$.

Перепишем схему тестовых измерений (3) в матричном виде

$$\Xi = A(F) + N; \tag{5}$$

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

Для решения задачи интерпретации строится линейная аппроксимация оператора $A(\cdot)$ на выпуклой оболочке некоторого подмножества $\widetilde{f}_1, \ldots, \widetilde{f}_m$ тестовых сигналов. В разд. 2.2 формулируются необходимые и достаточные условия такой аппроксимации и указывается линейный оператор, удовлетворяющий этим условиям, оператор ΞF^-, где оператор F^-, псевдообратный F.

Проводится оценка погрешности аппроксимации оператора $A(\cdot)$ линейным оператором. Показано что:

- *если для некоторого числа* $\sigma^2 \geq 0$ *выполнено неравенство*

$$\max_{j=1,\ldots,m} \|\xi_j - \Xi F^- \widetilde{f}_j\|^2 \leq \sigma^2, \tag{6}$$

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

- *пусть для* $m \geq N+1$ *тестовых сигналов* $f_1, \ldots, f_m$ *и результатов* $\xi_1, \ldots, \xi_m$ *их измерений выполнено неравенство* (6), *ранг* m' *линейного оператора* F *равен* $N+1$, *и для любого элемента выпуклой оболочки* $\mathcal{F}_F = \{f = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i f_i,\ \alpha_i \geq 0,\ i = 1, \ldots, m;\ \sum_{i=1}^{m} \alpha_i = 1\}$ *тестовых сигналов справедлива оценка*

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

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

В диссертации приводится метод построения и выбора кусочно-линейных аппроксимаций оператора $A(\cdot)$ и решение задачи интерпретации на основе кусочно-линейной аппроксимации модели измерения.

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

$$\xi_0 = \Xi_k F_k^- \widetilde{f}_0 + \mu_k, \quad \|\mu_k\|^2 \leq \Delta^2 + \delta_0^2; \tag{7}$$

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

Для построения оценки сигнала $u_0 = Uf_0$ для каждого $k = 1, \ldots, K$ найдем подмножество $\mathcal{F}_k(\xi_0) = \{f \in \mathcal{F}_k : \Xi_k F_k^- f + \mu_k = \xi_0$ для некоторого $\mu_k,\ \|\mu_k\|^2 \leq \Delta^2 + \delta_0^2\}$ сигналов из $\mathcal{F}_k$, измерение которых по схеме (7) может привести к результату ξ_0. Обозначим $\mathcal{F}(\xi_0) = \bigcup\limits_{k=1}^{K} \mathcal{F}_k(\xi_0)$ и определим оценку $\widehat{u}_0 \in \mathcal{R}_M$ как решение задачи

$$\sup_{f \in \mathcal{F}(\xi_0)} \|\widehat{u}_0 - Uf\| = \inf_{\widehat{u} \in \mathcal{R}_M} \sup_{f \in \mathcal{F}(\xi_0)} \|\widehat{u} - Uf\|. \quad (8)$$

При заданном $\mathcal{F}(\xi_0)$ решением задачи (8) является центр шара минимального радиуса, содержащего образ множества $\mathcal{F}(\xi_0)$ при отображении $U \in (\mathcal{R}_N \to \mathcal{R}_M)$; радиус этого шара дает точность оценки $\widehat{u}_0$, минимаксной на множестве $U\mathcal{F}(\xi_0)$.

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

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

$$\|(I - \Xi_k F_k^-(\Xi_k F_k^-)^-)\xi_0\|^2 \le \Delta^2 + \delta_0^2; \quad (9)$$

$$\sup_{z \in \mathcal{V}(\Xi_k)} \|\xi_0 - z\|^2 \le \delta_0^2, \quad (10)$$

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

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

$$\begin{gathered} \{z : \|\Xi_k F_k^- z - \xi_0\| \le \rho_k(\xi_0)\} \subset \mathcal{R}_N, \text{ где} \\ \rho_k(\xi_0) = (\Delta^2 + \delta_0^2 - \|(I - \Xi_k F_k^-(\Xi_k F_k^-)^-)\xi_0\|^2)^{1/2}. \end{gathered} \quad (11)$$

3. *Множество (11) неограничено, если оно не пусто и существует хотя бы один вектор $z \in \mathcal{R}_{N+1}$, $z \ne 0$, для которого $\Xi_k F_k^- z = 0$.*

4. *Если соотношения* (9)-(10) *не выполнены ни для каких $k = 1, \ldots, K$, то модели измерения и тестирования не согласуются между собой.*

5. *Если соотношения* (9)-(10) *выполнены только для единственного значения k_0 и выполнено условие $U(I - (\Xi_k F_k^-)^-(\Xi_k F_k^-)) = 0$, то вектор $\widehat{u}' = U(\Xi_{k_0} F_{k_0}^-)^- \xi_0$ является оценкой вектора $u = Uf$ с погрешностью $h'(\xi_0) = \rho(\xi_0)\|U(\Xi_{k_0} F_{k_0}^-)^-\|$, где $\|Q\| = \sup\limits_{z \ne 0} \|Qz\|/\|z\|$ — норма линейного оператора Q.*

6. *Если соотношения* (9)-(10) *выполнены только для чисел k_i, $i = 1, \ldots, q > 1$, и для них выполнены равенства $U(I - (\Xi_{k_i} F_{k_i}^-)^-(\Xi_{k_i} F_{k_i}^-)) =$*

0, *то центр* $\widehat{u}''$ *шара минимального радиуса, содержащего все векторы* $U(\Xi_{k_i}F^-_{k_i})^-\xi_0$, $i = 1, \ldots, q$, *является оценкой вектора* $u = Uf$ *с погрешностью* $h''(\xi_0)$, *равной сумме радиуса этого шара с величиной* $\max\limits_{i=1,\ldots,q} \rho_{k_i}(\xi_0)\|U(\Xi_{k_i}F^-_{k_i})^-\|$.

В **ТРЕТЬЕЙ ГЛАВЕ** поставлена, решена и исследована задача интерпретации данных на основе эмпирического восстановления нечеткой модели измерения.

Рассматривается возможностная модель измерительного эксперимента, в котором на вход измерительного прибора A поступает сигнал f от измеряемого объекта. Измерение его выходного сигнала Af сопровождается аддитивной погрешностью z, и результатом измерения является вектор x. Считается, что сигналы x, f и z являются реализациями нечетких векторов $\xi \in \mathcal{R}_n$, $\varphi \in \mathcal{R}_N$, $\nu \in \mathcal{R}_n$, где $\mathcal{R}_N$ и $\mathcal{R}_n$ — линейные пространства. Моделью измерительного прибора является нечеткий элемент Λ пространства $(\mathcal{R}_N \to \mathcal{R}_n)$ линейных операторов. Его выходной сигнал является нечетким вектором $\Lambda\varphi$. Таким образом, схема измерительного эксперимента запишется в виде

$$\xi = \Lambda\varphi + \nu. \tag{12}$$

Возможностная модель эксперимента по изучению параметров объекта задается совместным распределением возможностей значений следующих нечетких элементов: нечеткого вектора $\xi \in \mathcal{R}_n$, моделирующего выходной сигнал измерительного прибора, нечеткого оператора $\Lambda \in (\mathcal{R}_N \to \mathcal{R}_n)$, служащего моделью измерительного прибора, нечеткого вектора $\varphi \in \mathcal{R}_N$, моделирующего входной сигнал и нечеткого вектора $\eta \in \mathcal{R}_M$ параметров исследуемого объекта:

$$\pi^{\xi,\Lambda,\varphi,\eta}(x, A, f, u), \quad (x, A, f, u) \in \mathcal{R}_n \times (\mathcal{R}_N \to \mathcal{R}_n) \times \mathcal{R}_N \times \mathcal{R}_M. \tag{13}$$

Значение $\pi^{\xi,\Lambda,\varphi,\eta}(x, A, f, u)$ равно возможности равенств $\xi = x$, $\Lambda = A$, $\varphi = f$, $\eta = u$. Маргинальное распределение

$$\pi^{\xi,\eta}(x, u) = \sup_{f \in \mathcal{R}_N, A \in (\mathcal{R}_N \to \mathcal{R}_n)} \pi^{\xi,\Lambda,\varphi,\eta}(x, A, f, u), \quad (x, u) \in \mathcal{R}_n \times \mathcal{R}_M, \tag{14}$$

позволяет получить оценку значения параметра η, основанную на результате измерения $\xi = x$ как оценку максимальной возможности

$$\widehat{u}(x) = \sup_{u \in \mathcal{R}_M} \pi^{\xi,\eta}(x, u), \quad x \in \mathcal{R}_n. \tag{15}$$

В диссертации решается задача интерпретации измерений в случае, когда модель измерительного прибора неизвестна и информация о ней может быть извлечена из измерений известных тестовых сигналов $f_1, \ldots, f_m$, проведенных по схеме

$$\xi_j = \Lambda f_j + \nu_j, \quad j = 1, \ldots, m; \tag{16}$$

здесь $\nu_j \in R_n$ — нечеткий элемент, характеризующий погрешность измерения.

Перепишем схему тестовых измерений (16) в матричном виде

$$\Xi = \Lambda F + N. \tag{17}$$

Основной результат третьей главы формулируется в следующем виде.

Пусть заданы распределения $\pi^\varphi(\cdot)$, $\pi^\nu(\cdot)$ нечетких векторов $\varphi \in \mathcal{R}_N$ и $\nu \in \mathcal{R}_n$ и распределения $\pi^\Lambda(\cdot)$ и $\pi^N(\cdot)$ нечетких линейных операторов Λ и N, и φ, ν, Λ и N независимы; $\xi = x$ — результат измерения (12), *а $\Xi = X$ — результат тестового измерения* (17) *. Тогда оценка $\widehat{u}$ максимальной возможности вектора η равна $\widehat{u} = U\widehat{f}$, где $\widehat{f}$ — решение вариационной задачи*

$$(\widehat{A}, \widehat{f}) = \arg \max_{A,f} \min(\pi^\nu(x - Af), \pi^{\mathcal{N}}(X - AF), \pi^\varphi(f), \pi^\Lambda(A)). \tag{18}$$

Состоятельность модели измерения определяется априорным распределением возможностей

$$\pi^\xi(x) = \max_{A,f} \min(\pi^\nu(x - Af), \pi^{\mathcal{N}}(X - AF), \pi^\varphi(f), \pi^\Lambda(A)).$$

В разд. 3.3. и 3.4. диссертации рассмотрено решение задач интерпретации измерений для нескольких конкретных моделей распределений нечетких элементов φ, Λ, N и ν.

Рассмотрен случай, когда векторы пространств $\mathcal{R}_N$, $\mathcal{R}_n$ и $\mathcal{R}_M$ заданы своими координатами, операторы из $(\mathcal{R}_N \to \mathcal{R}_n)$ — своими матрицами и априорные распределение возможностей нечетких векторов и оператора Λ заданы в виде нечетких ограничений на координаты и матричные элементы следующими соотношениями: для векторов $\nu = (\nu_1, \ldots, \nu_n) \in \mathcal{R}_n$ и $\varphi = (\varphi_1, \ldots, \varphi_N) \in \mathcal{R}_N$ из (12) —

$$\pi^\nu(x_1, \ldots, x_n) = \mu_0 \left(\min_{i=1,\ldots,n} \frac{|x_i|}{\sigma_i} \right) \tag{19}$$

и

$$\pi^\varphi(f_1, \ldots, f_N) = \mu_0 \left(\min_{i=1,\ldots,N} \left(\frac{|f_i - f_{0,i}|}{\sigma_i^{(\varphi)}} \right) \right) \tag{20}$$

соответственно, для векторов $\nu_j = (\nu_{j_1}, \ldots, \nu_{j_n}) \in \mathcal{R}_n$, $j = 1, \ldots, m$ из (16), образующих матрицу $N_{ij} = (n_{j_i})$, —

$$\pi^N(x_{11}, \ldots, x_{mn}) = \mu_0 \left(\min_{i=1,\ldots,n;\, j=1,\ldots,m} \left(\frac{|x_{j_i}|}{\sigma_{ij}} \right) \right), \tag{21}$$

для матрицы (Λ_{ij}), $i = 1, \ldots, n$, $j = 1, \ldots, N$, линейного оператора Λ —

$$\pi^\Lambda(A_{11}, \ldots, A_{nN}) = \mu_0 \left(\min_{i=1,\ldots,n;\, j=1,\ldots,N} \left(\frac{|A_{ij} - A_{0,ij}|}{\sigma_{ij}^{(A)}} \right) \right). \tag{22}$$

Здесь $\mu_0(\cdot) : [0, \infty) \to [0, 1]$ — строго монотонно убывающая функция, $\mu_0(0) = 1$, $\lim\limits_{z\to\infty} \mu_0(z) = 0$, константы, стоящие в знаменателях формул (19)–(22) — заданные числа, определяющие величину "нечеткости" соответствующих величин, а константы $f_{0,i}$ и $A_{0,ij}$, $i = 1, \ldots, n$, $j = 1, \ldots, N$ определяют наиболее возможные значения вектора $\varphi \in \mathcal{R}_N$ и матрицы оператора Λ.

Тогда при априорных нечетких ограничениях на координаты сигналов и матричные элементы оператора Λ решение задачи (18) приводится к виду:

$$(\widehat{A}, \widehat{f}) = \arg \inf_{A,f} \left(\max \left(\max_{i=1,\ldots,n} \left(\frac{|x_i - \sum\limits_{k=1}^{N} A_{ik} f_k|}{\sigma_i} \right), \max_{s=1,\ldots,n; t=1,\ldots,m} \left(\frac{|\sum\limits_{k=1}^{N} A_{sk} F_{kt} - X_{st}|}{\sigma_{st}} \right), \right.\right.$$

$$\left.\left. \max_{q=1,\ldots,N} \left(\frac{|f_q - f_{0,q}|}{\sigma_q^{(\varphi)}} \right), \max_{p=1,\ldots,n;\, l=1,\ldots,N} \left(\frac{|A_{pl} - A_{0,pl}|}{\sigma_{pl}^{(A)}} \right) \right) \right). \tag{23}$$

При фиксированном векторе $f \in \mathcal{R}_N$ задача на минимакс определения матричных элементов $\widehat{A}_{ij}$ матрицы оператора $\widehat{A}$ (23) сводится к задаче линейного программирования. Затем численно проводится минимизация по $f \in \mathcal{R}_N$.

В случае решения задачи интерпретации измерений при априорных нечетких ограничениях на евклидовы нормы сигналов и оператора Λ показано, что задача сводится к следующей задаче.

Пусть теперь пространства $\mathcal{R}_N$, $\mathcal{R}_n$ и $\mathcal{R}_M$ евклидовы, пространство линейных операторов $(\mathcal{R}_m \to \mathcal{R}_n)$ — евклидово со скалярным произведением $(A, B)_2 = \operatorname{tr} AB^* = \sum_{i=1}^m (Ae_i, Be_i)$, $A, B \in (\mathcal{R}_m \to \mathcal{R}_n)$, где $\{e_i\}$ — любой ортонормированный базис евклидова пространства $\mathcal{R}_m$. Априорное распределение возможностей нечетких векторов и оператора Λ заданы в виде нечетких ограничений на их нормы следующими соотношениями:

$$\pi^\nu(z) = \mu_0(\|z\|^2), \quad z \in \mathcal{R}_n,$$

для нечеткого оператора N —

$$\pi^N(Z) = \mu_0(\|Z\|_2^2), \quad Z \in (\mathcal{R}_m \to \mathcal{R}_n).$$

Здесь, как и прежде, $\mu_0(\cdot) : [0, \infty) \to [0, 1]$ — строго монотонно убывающая функция, $\mu_0(0) = 1$, $\lim\limits_{z\to\infty} \mu_0(z) = 0$. Линейный оператор $\Lambda \in (\mathcal{R}_N \to R_n)$ и входной сигнал f редуцируемого измерения априори произвольны, так, что $\pi^\Lambda(A) = 1$ для любого $A \in (\mathcal{R}_N \to \mathcal{R}_n)$ и $\pi^\varphi(f) = 1$ для любого $f \in \mathcal{R}_N$. Тогда задача (18) приводится к следующей задаче на минимакс:

$$\min_{A,f} \max(\|x - Af\|^2, \|X - AF\|_2^2). \tag{24}$$

В диссертации получены и исследованы численные методы решения задачи (24).

ЧЕТВЕРТАЯ ГЛАВА посвящена практической реализации предложенных численных методов при анализе и интерпретации данных модели фотосинтетической системы. Приведено описание моделируемой системы, подходов в моделировании процессов и результатов численных экспериментов.

В качестве платформы для программной реализации имитационной модели фотосинтетической системы были выбраны C++, как удобный объектно-ориентированный язык программирования. Комплекс программ, осуществляющий реализацию модели системы многоточечно-сетевым методом и интерпретацию данных осуществлен на платформе Matlab. При этом реализовано три алгоритма интерпретации измерений:

1. интерпретация на основе кусочно-линейной аппроксимации модели, согласующейся с точностью измерений;

2. интерпретация нечетких измерений при априорных нечетких ограничениях на координаты сигналов и матричные элементы оператора модели измерений;

3. интерпретация нечетких измерений при априорных нечетких ограничениях на евклидовы нормы сигналов и оператора модели измерений;

При реализации данных алгоритмов использовались функции численной оптимизации пакета прикладных программ Matlab.

Приведены результаты решения задачи интерпретации измерений на основе аппроксимации модели, в которой измеряемыми параметрами являются значения насыщения ΔpH и скорости синтеза АТФ, а оцениваемыми параметрами — концентрация фотосистем-2 и интенсивности света. 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.

Также рассматриваются примеры интерпретации нечетких измерений при эмпирическом восстановлении модели, в которых по измерению количества единиц синтезированного АТФ и концентрации протонов оценивается время, которое требуется для его получения. При этом оценки времени, полученные при минимизациии возможности ошибки интерпретации, согласуются с результатами наблюдений в вычислительном эксперименте.

В **ЗАКЛЮЧЕНИИ** сформулированы основные результаты и выводы работы.

Проведенные исследования позволяют сделать следующие выводы:

1. Метод, решающий задачи интерпретации данных на основе кусочно-линейной аппроксимации модели измерений позволяет получать априорные оценки погрешности решения задач интерпретации и проверять адекватность используемой модели.

2. Метод решения задач интерпретации данных на основе теоретико-возможностной модели измерений позволяет получать оценки максимальной апостериорной возможности и контролировать адекватность используемых математических моделей. При этом оценки параметров изучаемого объекта и модель измерений восстанавливаются в единой оптимизационной задаче.

3. Проведение интерпретации данных для ряда конкретных задач показало эффективность предложенных методов.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих изданиях

Публикации в журналах из Перечня ВАК:

1. Копит Т.А., Чуличков А.И., Устинин Д.М. Интерпретация экспериментальных данных на основе кусочно-линейной аппроксимации модели измерений // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 2010. №5. С. 3–8.

2. Копит Т.А., Чуличков А.И., Устинин Д.М. Эмпирическое восстановление нечеткой модели эксперимента и редукция измерений в равномерной метрике // Журнал Вычислительные методы и программирование. 2011. Т.12. С. 90–96.

3. Копит Т.А., Чуличков А.И., Устинин Д.М. Эмпирическое восстановление нечеткой модели эксперимента и редукция измерений в евклидовой метрике // Журнал Вычислительные методы и программирование. 2011. Т.12. С. 220–226.

Публикации в других научных изданиях:

4. Копит Т.А., Устинин Д.М., Грачев Е.А. Моделирование трансмембранного переноса и диффузии протонов в рамках имитационной модели фотосинтетической мембраны // Тезисы 13 международной конференции "Математика. Компьютер. Образование". Дубна, 2006, С. 153.

5. Копит Т.А. Имитационное моделирование протонного транспорта в цепи переноса заряда фотосинтетической мембраны // Тезисы докладов 13 международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов-2006". 2006. С. 31.

6. Копит Т.А., Устинин Д.М., Грачев Е.А. Имитационное моделирование протонного транспорта и его влияния на синтез АТФ в цепи переноса заряда фотосинтетической мембраны. // Тезисы докладов 14 международной конференции "Математика. Компьютер. Образование". Пущино, 2007. С. 69.

7. Копит Т.А., Устинин Д.М., Чуличков А.И. Методы моделирования и анализа нелинейной стохастической фотосинтетической системы. // Тезисы 16 международной конференции "Математика. Компьютер. Образование". Пущино, 2009. С. 264.

8. Копит Т.А., Устинин Д.М., Чуличков А.И. Анализ и интерпретация данных нелинейных моделей измерений // Тезисы докладов международной мультиконференции конференции "Актуальные проблемы информационно-компьютерных технологий, мехатроники и робототехники" локальной конференции "Мехатроника, Автоматизация, Управление". Дивноморское, 2009. С. 151-153.

9. Копит Т.А., Устинин Д.М., Чуличков А.И. О методе получения оценок параметров нелинейной модели измерения на основе её кусочно-линейной аппроксимации. // Тезисы 17 международной конференции "Математика. Компьютер. Образование". Дубна, 2010. С. 136.

10. Копит Т.А. Задачи и реализация анализа и интерпретации данных нелинейных моделей измерений // Тезисы докладов 17 международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов-2010". 2010. С. 187.

11. Kopit T.A., Chulichkov A.I. Estimation of parameters of the empirically reconstructed fuzzy model of measurements // "Thirteenth International Conference on Rough Sets, Fuzzy Sets, Data Mining and Granular Computing". Moscow, 2011. C. 211-218.

12. Kopit T.A., Chulichkov A.I. Empirical reconstruction of fuzzy model of experiment in the Euclidean metric // "International Workshop on Soft Computing, Applications and Knowledge Discovery". Moscow, 2011. C. 48-50.

13. Копит Т.А., Чуличков А.И. Методы интерпретации экспериментальных данных нечеткой модели измерений, восстановленной по тестам // Тезисы докладов 15 всероссийской конференции "Математические методы распознавания образов". Петрозаводск, 2011. С. 21-24.

14. Копит Т.А., Чуличков А.И. Методы редукции измерений на основе эмпирически восстановленной нечеткой модели измерений // Сложные системы, 2012. №1(2). С. 7-24.