

УДК 519.95

ЭМПИРИЧЕСКОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ НЕЧЕТКОЙ МОДЕЛИ ЭКСПЕРИМЕНТА И РЕДУКЦИЯ ИЗМЕРЕНИЙ В РАВНОМЕРНОЙ МЕТРИКЕ

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

Для линейной схемы измерений, в которой результат измерения интерпретируется как искаженный аддитивной погрешностью выходной сигнал измерительного прибора, на вход которого подан сигнал от измеряемого объекта, предложен новый метод редукции измерений к виду, свойственному измерению параметров объекта идеальным измерительным прибором. Математическая модель измерительного прибора, связывающая результат измерения с его входным сигналом, не известна и извлекается из результатов тестовых измерений. Погрешность измерений описывается в терминах теории возможностей. Поставлена задача редукции как задача на максимум апостериорной возможности, предложен вычислительный алгоритм ее решения. Работа алгоритма иллюстрируется на примере анализа данных биофизического вычислительного эксперимента, моделирующего работу фотосинтетической системы, в котором по количеству синтезированного аденозинтрифосфата оценивается время синтеза. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (коды проектов 11-07-00338 и 09-07-00505-а).

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

1. Введение. Пусть результат измерения — вектор $\xi \in \mathcal{R}_n$ — получен по схеме

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

в которой считается, что на вход измерительного прибора $\Lambda \in \mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n$ поступает сигнал $\varphi \in \mathcal{R}_N$ от измеряемого объекта. Измерение его выходного сигнала $\Lambda\varphi \in \mathcal{R}_n$ сопровождается аддитивной погрешностью $\nu \in \mathcal{R}_n$. Векторы ξ , φ и ν являются нечеткими векторами [1] линейных нормированных пространств \mathcal{R}_n , \mathcal{R}_N и \mathcal{R}_n размерности n , N и n соответственно. Моделью измерительного прибора является нечеткий элемент Λ пространства $(\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n)$ линейных операторов. Его выходной сигнал является нечетким вектором $\Lambda\varphi$.

Требуется получить оценку параметров η изучаемого объекта, непосредственно не наблюдаемых, но связанных с сигналом φ известным соотношением

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

Нечеткий элемент $\varphi \in \mathcal{R}$ определяется распределением возможностей $\pi^\varphi(\cdot) : R \rightarrow [0, 1]$, значение $\pi^\varphi(f)$ определяет возможность равенства $\varphi = f$, при этом если $\pi^\varphi(f) = 0$, то равенство $\varphi = f$ невозможно, а при $\pi^\varphi(f) = 1$ равенство $\varphi = f$ вполне возможно. В работе [1] значения возможности используются лишь для определения шансов реализации того или иного события в сравнении с шансами другого, поэтому содержательный смысл имеет лишь высказывания “более возможно”, “менее возможно” и “равновозможно”, в то время как конкретное значение возможности не имеет содержательного смысла. Тем самым, все результаты теории возможностей инвариантны к изотонным изменениям шкалы возможностей, оставляющим неподвижными точки 0 и 1 отрезка $[0, 1]$.

В [1] разработаны методы редукции нечетких измерений, в которых модель измерительного прибора задана точно известным линейным оператором $A \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n)$. В настоящей статье модель измерительного прибора A не известна и информация о ней извлекается из результатов тестовых экспериментов по измерению точно известных входных тестовых сигналов [2, 3]; измерения проводятся с конечной точностью. Под редукцией измерений понимается математический формализм, позволяющий по результатам

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

измерений получать наиболее точное описание измеряемого объекта, не возмущенного измерением; при этом оцениваются параметры объекта и сопутствующие погрешности.

2. Редукция измерения при известной нечеткой модели измерительного прибора Λ . Получим оценку нечеткого вектора η при условии, что в результате измерения (1) получено значение $\xi = x$, как оценку максимальной апостериорной возможности. Оптимальные свойства оценок максимальной возможности изучены в [1].

Лемма 1. Пусть в (1) $\xi = x$ и задано совместное распределение возможностей значений нечетких элементов: нечеткого вектора $\xi \in \mathcal{R}_n$, нечеткого оператора $\Lambda \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n)$, нечеткого вектора $\varphi \in \mathcal{R}_N$ и нечеткого вектора $\eta \in \mathcal{R}_M$ параметров исследуемого объекта:

$$\pi^{\xi, \Lambda, \varphi, \eta}(x, A, f, u), \quad (x, A, f, u) \in \mathcal{R}_n \times (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n) \times \mathcal{R}_N \times \mathcal{R}_M; \quad (3)$$

тогда оценка максимальной возможности $\hat{u}(x)$ нечеткого вектора η определяется как решение вариационной задачи $\hat{u}(x) = \sup_{u \in \mathcal{R}_M} \pi^{\xi, \eta}(x, u)$, $x \in \mathcal{R}_n$, где

$$\pi^{\xi, \eta}(x, u) = \sup_{\substack{f \in \mathcal{R}_N, \\ A \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n)}} \pi^{\xi, \Lambda, \varphi, \eta}(x, A, f, u), \quad (x, u) \in \mathcal{R}_n \times \mathcal{R}_M. \quad (4)$$

Доказательство. Многие результаты теории возможностей формально совпадают с результатами теории вероятностей при замене бинарных операций суммы и произведения на “max” и “min” соответственно, при этом интегрирование превращается в операцию вычисления точной верхней грани. Формула (4) в этом случае является аналогом определения маргинального распределения в теории вероятностей: $p_{\xi, \eta}(x, u) = \int p_{\xi, \Lambda, \varphi, \eta}(x, A, f, u) dA df$. Следовательно, распределение (4) является маргинальным распределением нечетких векторов ξ и η . При известном ξ формула (4) эквивалентна условной возможности равенства $\eta = u$ при условии $\xi = x$ [1].

Замечание 1. Маргинальное распределение

$$\pi^{\xi}(x) = \sup_{u \in \mathcal{U}} \pi^{\xi, \eta}(x, u), \quad x \in \mathcal{R}_n, \quad (5)$$

позволяет получить оценку состоятельности модели эксперимента. Действительно, согласно определению, значение $\alpha(x) = \pi^{\xi}(x)$ есть возможность получения результата $\xi = x$, поэтому если, например, $\pi^{\xi}(x) = 0$, то модель (3) следует признать неадекватной.

В работе [1] задача редукции решена для случая, когда модель измерительного прибора точно известна. В этом случае считается, что $\Lambda = A$. Получим решение задачи (5) для ситуации, когда линейный оператор Λ задан своим распределением возможностей.

Теорема 1. Пусть заданы распределения $\pi^{\varphi}(\cdot)$ и $\pi^{\nu}(\cdot)$ нечетких векторов $\varphi \in \mathcal{R}_N$ и $\nu \in \mathcal{R}_n$, распределение $\pi^{\Lambda}(\cdot)$ нечеткого линейного оператора Λ , φ , ν и Λ независимы и $\xi = x$ — результат измерения (1). Тогда оценка \hat{u} максимальной возможности вектора η имеет вид $\hat{u} = U\hat{f}$, где \hat{f} — решение вариационной задачи

$$(\hat{A}, \hat{f}) = \arg \max_{A, f} \min(\pi^{\nu}(x - Af), \pi^{\varphi}(f), \pi^{\Lambda}(A)). \quad (6)$$

Состоятельность модели измерения будет определяться априорным распределением возможностей $\pi^{\xi}(x) = \max_{A, f} \min(\pi^{\nu}(x - Af), \pi^{\varphi}(f), \pi^{\Lambda}(A))$.

Доказательство. Запишем $\pi^{\xi, \varphi, \Lambda}(x, f, A) = \min(\pi^{\xi | \varphi, \Lambda}(x | f, A), \pi^{\varphi, \Lambda}(f, A))$, где переходная возможность $\pi^{\xi | \varphi, \Lambda}(x | f, A) = \pi^{\nu}(x - Af)$, а в силу независимости φ и Λ имеем $\pi^{\varphi, \Lambda}(f, A) = \pi^{\varphi}(f)\pi^{\Lambda}(A)$. Далее заметим, что распределение переходных возможностей $\pi^{\eta | \xi, \varphi, \Lambda}(u | x, f, A)$ при фиксированном φ не зависит от ξ и Λ , поэтому $\pi^{\xi, \varphi, \Lambda, \eta}(x, f, A, u) = \min(\pi^{\eta | \varphi}(u | f), \pi^{\xi, \varphi, \Lambda}(x, f, A))$. Поскольку

$$\pi^{\eta | \varphi}(u | f) = \begin{cases} 1, & \text{если } u = Uf, \\ 0, & \text{если } u \neq Uf, f \in \mathcal{R}_N \text{ и } u \in \mathcal{R}_M, \end{cases} \quad (7)$$

то получим

$$\pi^{\xi, \varphi, \Lambda, \eta}(x, f, A, u) = \begin{cases} \min(\pi^{\nu}(x - Af), \pi^{\varphi}(f), \pi^{\Lambda}(A)), & \text{если } u = Uf, \\ 0, & \text{если } u \neq Uf. \end{cases} \quad (8)$$

Отсюда, согласно лемме 1, оценка \hat{u} максимальной возможности вектора η имеет вид $\hat{u} = U\hat{f}$, где \hat{f} — решение задачи на максимин (6). Априорное распределение нечеткого вектора ξ получается из (7) и (8).

3. Редукция измерения при наличии тестов, уточняющих модель измерительного прибора Λ . Пусть теперь дополнительная информация о модели Λ измерительного прибора может быть извлечена из измерений известных тестовых сигналов f_1, \dots, f_m , выполненных по схеме

$$\xi_j = \Lambda f_j + \nu_j, \quad j = 1, \dots, m; \quad (9)$$

здесь $\nu_j \in R_n$ — нечеткий элемент, моделирующий погрешность j -го тестового измерения.

Для набора тестовых сигналов f_1, \dots, f_m , набора результатов их регистрации ξ_1, \dots, ξ_m и набора погрешностей измерений ν_1, \dots, ν_m введем линейный оператор $F \in (R_m \rightarrow R_n)$ и нечеткие линейные операторы $\Xi \in (R_m \rightarrow R_n)$, $N \in (R_m \rightarrow R_n)$, определенные для любого вектора $t = (t_1, \dots, t_m) \in R_m$ равенствами

$$Ft = \sum_{j=1}^m f_j t_j, \quad \Xi t = \sum_{j=1}^m x_j t_j, \quad Nt = \sum_{j=1}^m \nu_j t_j. \quad (10)$$

Пользуясь обозначениями (10), запишем схему тестовых измерений (9) в форме

$$\Xi = \Lambda F + N. \quad (11)$$

С помощью соотношения (11) переходная возможность $\pi^{\Xi|\Lambda}(\cdot | \cdot)$ может быть представлена в виде $\pi^{\Xi|\Lambda}(X | A) = \pi^N(X - AF)$.

Рассмотрим теперь схему (1) измерения нечеткого вектора $\varphi \in R_n$, результат которого требуется редуцировать к виду, свойственному измерению f по схеме (2). Пусть заданы распределения $\pi^\varphi(\cdot)$ и $\pi^\nu(\cdot)$ нечетких векторов $\varphi \in R_n$ и $\nu \in R_n$. Тогда, учитывая, что переходные возможности приобретают вид $\pi^{\xi|\varphi, \Lambda}(x | f, A) = \pi^\nu(x - Af)$, где $x \in R_n$ — результат измерения нечеткого элемента ξ в (1), получим совместное распределение $\pi^{\xi, \varphi, \Lambda, \Xi}(x, f, A, X)$ из следующих соотношений:

$$\begin{aligned} \pi^{\xi, \varphi, \Lambda, \Xi}(x, f, A, X) &= \min(\pi^{\xi|\varphi, \Lambda, \Xi}(x | f, A, X), \pi^{\varphi, \Lambda, \Xi}(f, A, X)) = \\ &= \min(\pi^\nu(x - Af), \pi^{\xi|\varphi, \Lambda}(X | f, A), \pi^{\varphi, \Lambda}(f, A)) = \\ &= \min(\pi^\nu(x - Af), \pi^N(X - AF), \pi^\varphi(f), \pi^\Lambda(A)). \end{aligned}$$

Здесь учтено, что распределение ξ при фиксированных Λ и φ не зависит от Ξ , а распределение Ξ при фиксированном Λ не зависит от φ .

Рассуждая далее так же, как и при доказательстве теоремы 1, получим следующий результат.

Теорема 1*. Пусть заданы распределения $\pi^\varphi(\cdot)$ и $\pi^\nu(\cdot)$ нечетких векторов $\varphi \in R_n$ и $\nu \in R_n$ и распределения $\pi^\Lambda(\cdot)$ и $\pi^N(\cdot)$ нечетких линейных операторов Λ и N , причем φ , ν , Λ и N независимы. Пусть $\xi = x$ — результат измерения (1), а $\Xi = X$ — результат тестового измерения (11). Тогда оценка \hat{u} максимальной возможности вектора η имеет вид $\hat{u} = U\hat{f}$, где \hat{f} — решение вариационной задачи

$$(\hat{A}, \hat{f}) = \arg \max_{A, f} \min(\pi^\nu(x - Af), \pi^N(X - AF), \pi^\varphi(f), \pi^\Lambda(A)). \quad (12)$$

Состоятельность модели измерения может быть определена априорным распределением возможностей $\pi^\xi(x) = \max_{A, f} \min(\pi^\nu(x - Af), \pi^N(X - AF), \pi^\varphi(f), \pi^\Lambda(A))$.

4. Редукция измерений при априорных нечетких ограничениях на координаты сигналов и матричные элементы оператора Λ . Пусть векторы пространств R_N , R_n и R_M заданы своими координатами, операторы из $(R_N \rightarrow R_n)$ — своими матрицами. Априорные распределения возможностей нечетких векторов и оператора Λ заданы в виде нечетких ограничений на координаты и матричные элементы следующими соотношениями:

1) для векторов $\nu = (\nu_1, \dots, \nu_n) \in R_n$ и $\varphi = (\varphi_1, \dots, \varphi_N) \in R_N$ из (1) имеем

$$\pi^\nu(x_1, \dots, x_n) = \mu_0 \left(\min_{i=1, \dots, n} \frac{|x_i|}{\sigma_i} \right), \quad (13)$$

$$\pi^\varphi(f_1, \dots, f_N) = \mu_0 \left(\min_{i=1, \dots, N} \left(\frac{|f_i - f_{0,i}|}{\sigma_i^{(\varphi)}} \right) \right) \quad (14)$$

соответственно;

2) для векторов $\nu_j = (\nu_{j1}, \dots, \nu_{jn}) \in \mathcal{R}_n, j = 1, \dots, m$, из (9), образующих матрицу $N_{ij} = (n_{ji})$:

$$\pi^N(x_{11}, \dots, x_{mn}) = \mu_0 \left(\min_{\substack{i=1, \dots, n; \\ j=1, \dots, m}} \left(\frac{|x_{ji}|}{\sigma_{ij}} \right) \right); \quad (15)$$

3) для матрицы $(\Lambda_{ij}), i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, N$, линейного оператора Λ :

$$\pi^\Lambda(A_{11}, \dots, A_{nN}) = \mu_0 \left(\min_{\substack{i=1, \dots, n; \\ j=1, \dots, N}} \left(\frac{|A_{ij} - A_{0,ij}|}{\sigma_{ij}^{(A)}} \right) \right). \quad (16)$$

Здесь $\mu_0(\cdot) : [0, \infty) \rightarrow [0, 1]$ — строго монотонно убывающая функция, $\mu_0(0) = 1, \lim_{z \rightarrow \infty} \mu_0(z) = 0$, константы, стоящие в знаменателях формул (13)–(16), — заданные числа, определяющие величину “нечеткости” соответствующих величин, а константы $f_{0,i}$ и $A_{0,ij}, i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, N$, определяют наиболее возможные значения вектора $\varphi \in \mathcal{R}_N$ и матрицы оператора Λ .

Тогда задача (12) приводится к виду

$$\begin{aligned} (\hat{A}, \hat{f}) = \arg \inf_{A, f} \left(\max \left(\max_{i=1, \dots, n} \left(\frac{1}{\sigma_i} \left| x_i - \sum_{k=1}^N A_{ik} f_k \right| \right), \max_{\substack{s=1, \dots, n; \\ t=1, \dots, m}} \left(\frac{1}{\sigma_{st}} \left| \sum_{k=1}^N A_{sk} F_{kt} - X_{st} \right| \right) \right), \right. \\ \left. \max_{q=1, \dots, N} \left(\frac{|f_q - f_{0,q}|}{\sigma_q^{(\varphi)}} \right), \max_{\substack{p=1, \dots, n; \\ l=1, \dots, N}} \left(\frac{|A_{pl} - A_{0,pl}|}{\sigma_{pl}^{(A)}} \right) \right). \end{aligned} \quad (17)$$

Если оператор Λ и входной сигнал f редуцируемого измерения априори произвольны, то $\pi^\Lambda(A) = 1$ для любого $A \in (\mathcal{R}_N \rightarrow \mathcal{R}_n)$ и $\pi^\varphi(f) = 1$ для любого $f \in \mathcal{R}_N$, и задача (12) примет более простой вид:

$$(\hat{A}, \hat{f}) = \arg \inf_{A, f} \left(\max \left(\max_{i=1, \dots, n} \left(\frac{1}{\sigma_i} \left| x_i - \sum_{k=1}^N A_{ik} f_k \right| \right), \max_{\substack{s=1, \dots, n; \\ t=1, \dots, m}} \left(\frac{1}{\sigma_{st}} \left| \sum_{k=1}^N A_{sk} F_{kt} - X_{st} \right| \right) \right) \right). \quad (18)$$

Суммируем полученные результаты.

Теорема 2. Если (\hat{A}, \hat{f}) — решение задачи (17) (или (18) при отсутствии априорных ограничений на возможные значения оператора Λ и вектора f), то редукция измерения ξ , полученного по схеме (1), к виду (2) имеет вид $\hat{u} = U\hat{f}$. Возможность согласия модели измерений (11) и (1) с результатами измерения $\xi = x$ и $\Xi = X$ равна $\mu_0(z)$, где z — значение минимакса, полученного при решении задачи (17) (или (18)).

5. Метод вычисления оценки максимальной апостериорной возможности. Для получения решения задачи (17) (или (18) при отсутствии априорных знаний о возможных значениях оператора Λ) на первом этапе для каждого фиксированного вектора $f \in \mathcal{R}_N$ определим значение функции $q(f)$ как значение минимакса, полученного при решении задачи (17) (или (18)) относительно матричных элементов \hat{A}_{ij} матрицы оператора \hat{A} . Эта минимаксная задача при фиксированном f сводится к задаче линейного программирования [4]. На втором этапе минимизация функции $q(\cdot)$ по $f \in \mathcal{R}_N$ проводится численно. Если минимум функции $q(\cdot)$ по $f \in \mathcal{R}_N$ достигается в точке $f = \hat{f}$, то искомая оценка имеет вид $\hat{u} = U\hat{f}$.

Пример. Пусть нечеткая величина $\varphi \in \mathcal{R}_1$ измеряется в эксперименте по схеме

$$\xi = kx + b + \nu, \quad (19)$$

а информация о линейной зависимости $y = kx + b$, где k и $b \in \mathcal{R}_1$, содержится в тестовых измерениях

$$\xi_j = kx_j + b + \nu_j, \quad j = 1, \dots, m. \quad (20)$$

Пусть нечеткие погрешности измерений ν и ν_j характеризуются следующими распределениями возможностей:

$$\pi^\nu(z) = \mu_0(z), \quad \pi^{\nu_j}(z_j) = \mu_0(z_j), \quad j = 1, \dots, m.$$

Требуется оценить значение аргумента x по результату $\xi = y$ измерения (19) и результатам $\xi_j = y_j$ тестовых измерений (20). Константы k и b линейной зависимости в (20) и значение x в (19) априори произвольны.

Введем линейный оператор $A(k, b) \in (R_2 \rightarrow R_1)$ и вектор $f = \begin{pmatrix} x \\ 1 \end{pmatrix} \in R^2$; для них запишем схемы измерений (19) и (20) в следующем виде: $\xi = Af + \nu$, $\xi_j = Af_j + \nu_j$, $j = 1, \dots, m$.

Согласно теореме 1, для получения редукции измерения (19) следует решить задачу на минимум:

$$\inf_{k, b, x} \min \left(|y - kx - b|, \min_{j=1, \dots, m} (|y_j - kx_j - b|) \right). \quad (21)$$

Минимум по k, b для фиксированного x вычисляется решением задачи линейного программирования, в которой требуется найти минимум линейной функции $q = (l, g)$, $l = (1, 0, 0)$, $g = (q, k, b)$, на подмножестве R_2 , выделенном линейными неравенствами

$$(b, g) \geq y, \quad (d, g) \geq -y, \quad (b_j, g) \geq y_j, \quad (d_j, g) \geq -y_j, \quad j = 1, \dots, m. \quad (22)$$

Здесь $b = (1, x, 1)$, $d = (1, -x, -1)$, $b_j = (1, x_j, 1)$, $d_j = (1, -x_j, -1)$, $j = 1, \dots, m$.

Если $g(x) = (q(x), k(x), b(x))$ — решение этой задачи линейного программирования, то решение задачи (21) получается из условия минимизации $q(x)$ по $x \in R_1$: $q(\hat{x}) = \min_x q(x)$.

Значение \hat{x} является оценкой максимальной возможности искомого аргумента линейной функции в (19), а сопутствующая ей восстановленная модель линейной зависимости задается коэффициентами $k_* = k(\hat{x})$, $b_* = b(\hat{x})$. Что касается адекватности, то если $\mu_0(q(\hat{x})) = 0$, то модель эксперимента следует признать противоречащей результатам измерений и найденные оценки следует считать неадекватными.

6. Результаты вычислительного эксперимента. Рассмотрим реализацию примера, в котором на основе данных измерений восстанавливается модель и на ее основе строятся оценки параметров. Проведена серия тестирующих измерений на основе имитационной модели фотосинтетической системы [5], представляющей собой программный комплекс, реализующий процесс сопряжения электронного транспорта в многобелковых комплексах, протонного транспорта и синтеза АТФ (нуклеотидного кофермента аденозинтрифосфата) комплексом АТФ-синтазой. Параметрами модели являются следующие характеристики системы: 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.

Система первичных процессов фотосинтеза представляет собой сложную систему процессов электронного транспорта, происходящих на фотосинтетической тилакоидной мембране хлоропластов зеленых растений и водорослей и осуществляемых трансмембранными белковыми комплексами, периферическими белками и подвижными переносчиками электрона. Одной из основных целей функционирования цепи переноса заряда в фотосинтетической мембране является создание протонного градиента между внешней и внутренней областями двойной мембраны. Данная разность концентраций протонов является необходимой для синтеза АТФ, который является наиболее важной формой сохранения химической энергии в клетках. Моделирование синтеза АТФ представляет огромный интерес, так как это один из важнейших процессов, обуславливающих жизнедеятельность клетки в целом. Ввиду малых размеров исследуемых областей экспериментальное наблюдение латеральных профилей протонного потенциала и процесса синтеза АТФ затруднено. Таким образом, для анализа этих явлений имитационное моделирование представляет особый интерес.

Имитационная модель полной фотосинтетической системы дает возможность “прямого” моделирования процесса электронного транспорта в многобелковых комплексах и протонного транспорта, сопряженного с синтезом АТФ; процесс диффузии ограничен в различных частях системы (строме, люмен, межмембранное пространство).

Характеристики модели:

- 1) изучаются структурные и пространственные свойства системы;
- 2) диффузия реагентов происходит в гетерогенной среде не в однородном случае, что позволяет моделировать процессы нелинейной диффузии;
- 3) детальная информация о таких событиях, как привязка переносчика электрона к комплексу, различные конформационные изменения;
- 4) принимается во внимание размер частиц; в рассматриваемой системе размер реагентов сопоставим с толщиной мембраны и люмена.

Характеристики, которые могут быть получены из прямой модели:

- 1) кинетические кривые для всех участников процесса;

- 2) зависимость кинетических кривых от размера системы, числа частиц и структуры системы;
- 3) пространственные характеристики (распределение заряда и частиц) в каждый момент времени;
- 4) трехмерная картина системы для каждого компонента в каждый момент времени;
- 5) динамическое поведение системы;
- 6) траектория каждой частицы.

При проектировании программы особое внимание уделялось возможности понятного и удобного представления процессов, происходящих в тилакоидной мембране, с использованием современных методов трехмерного отображения объектов.

Модель работает с отдельными комплексами и переносчиками электронов дискретно. Это позволяет описывать выделение протонов в люмен также дискретно. В люмене протоны описываются через концентрацию и коэффициент диффузии, так что при каждом вбросе протонов в люмен (через фотосистему 2 или цитохромный комплекс) происходит пересчет концентрации протонов в окрестности данного комплекса. При расчете скорости диффузии протонов учитывается влияние буферных групп. Утечка протонов осуществляется через АТФ-синтазы, которые моделируются как отдельные объекты, встроенные в фотосинтетическую мембрану. В каждый момент времени рассчитывается вероятность утечки протона через каждую АТФ-синтазу, при этом моделируется поворот “ротора” на 120 градусов. После полного оборота моделируется выделение АТФ.

В численном эксперименте измерялось количество синтезированных АТФ во времени при постоянном излучении. На рисунке показана полученная кривая синтеза, которая характеризуется двумя состояниями (фазами):

- 1) начальная фаза синтеза, когда недостаточна концентрация протонов для выработки АТФ комплексом АТФ-синтазой,
- 2) когда АТФ вырабатывается с постоянной скоростью.

Рассматривалась вторая фаза синтеза, когда АТФ вырабатывается с постоянной скоростью. Требовалось получить оценку времени, которое прошло с начала второй фазы, когда было синтезировано определенное количество единиц АТФ.

В данном случае измерения не обладают стохастической составляющей и рассматриваемая система является сложной, многокомпонентной и развивающейся во времени. К интерпретации такого рода измерений вероятностный подход не применим, поэтому был применен нечеткий метод оценки параметров модели.

Модель измерения соответствует линейному уравнению (19). Информация о линейной зависимости $y = kx + b$, где $k, b \in \mathcal{R}_1$, содержится в тестовых измерениях, y — количество синтезированного АТФ, k — скорость синтеза АТФ комплексом АТФ-синтазой и x — время, мс. Требуется восстановить нечеткую модель измерений и затем оценить значение аргумента x (т.е. время t , прошедшее после выхода на постоянную скорость синтеза АТФ) по результату $\xi = y$ измерения (19).

Модель измерения соответствует линейному уравнению (19); выше показано, что в этом случае решение сводится к решению задачи на минимум (21). Приведем алгоритм нечеткой редукции измерений при априорных нечетких ограничениях на координаты сигналов и матричные элементы оператора измерительного прибора.

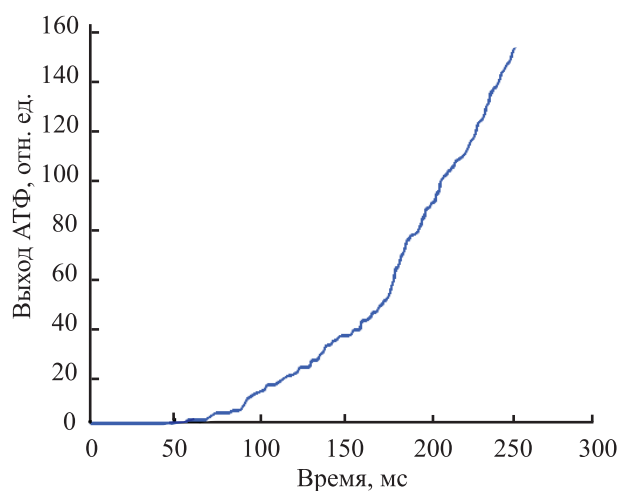
1. Выделяется подмножество в R_2 , заданное линейными неравенствами (22); задается целевая функция $q = (l, g)$, $l = (1, 0, 0)$, $g = (q, k, b)$, на подмножестве R_2 , выделенном линейными неравенствами.

2. Решается задача линейного программирования, в которой вычисляется минимум по k, b для фиксированного x . Ищется минимум линейной функции $q = (l, g)$.

3. Проводится численная минимизация $q(x)$ по $x \in R_1 : q(\hat{x}) = \min_x q(x)$ для решения задачи на шаге 2, где $g(x) = (q(x), k(x), b(x))$.

4. Восстановленная на шаге 3 эмпирически модель измерений $y = k_*x + b_*$ используется для вычисления оценки параметра модели \hat{x} по результату $\xi = y$ измерения (19).

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



Зависимость выработки АТФ от времени

Перед применением алгоритма результаты измерений синтеза АТФ разделены на две части. При редукции использовались измерения второй фазы, отвечающие за режим синтеза АТФ с постоянной скоростью.

Произведено 253 измерения, из которых 179 измерений — фаза 1 и 74 измерения — фаза 2; эти измерения использовались для восстановления модели.

При решении соответствующей задачи линейного программирования была восстановлена модель измерений, которая задается коэффициентами $k_* = 3.1738$ и $b_* = 0.0031$ в $y = kx + b$. Для количества синтезированного АТФ $y = 99$ получены оценки времени $x = 31.1919$ мс. В численном эксперименте количество АТФ, равное 99, наблюдалось на 31 и 32 мс. Таким образом, оценки, полученные при минимизации возможности ошибки редукции, согласуются с результатами наблюдений.

7. Заключение. В работе рассмотрен подход эмпирического восстановления и редукции при ограничениях на координаты сигналов и матричные элементы оператора нечеткой модели измерений, информация о которой содержится в серии тестовых экспериментов. Рассмотрен пример интерпретации измерений для модели фотосинтетической системы. Осуществлена редукция измерений и получена оценка параметра модели, согласующаяся с экспериментом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Пытьев Ю.П.* Возможность как альтернатива вероятности. М.: Физматлит, 2007.
2. *Черемухин Е.А., Чулчиков А.И.* О редукции к идеальному прибору по данным тестирующих измерений // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физика. Астрон. 2004. № 3. 15–18.
3. *Голубцов П.В., Пытьев Ю.П., Чулчиков А.И.* Построение оператора редукции по тестовым измерениям // Дискретные системы обработки сигналов. Устинов: Удмуртский гос. ун-т. 1986. 68–72.
4. *Кириллов К.В., Чулчиков А.И.* Редукция измерений в нечеткой модели эксперимента как решение задачи линейного программирования // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физика. Астрон. 1999. № 2. 65–67.
5. *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
25.01.2011
