Автоматика и телемеханика, № 12, 2022

© 2022 г. **В.И. ЕРОХИН**, д-р физ.-мат. наук (erohin_v_i@mail.ru),
А.П. КАДОЧНИКОВ, канд. техн. наук (kado162@mail.ru),
С.В. СОТНИКОВ, канд. техн. наук (svsotnikov66@gmail.com),
(Военно-космическая академия им. А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург)

ДОСТАТОЧНЫЕ УСЛОВИЯ ЗНАЧИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ ЛИНЕЙНЫХ МОДЕЛЕЙ И ПОЛИНОМИАЛЬНОЙ СЛОЖНОСТИ ИХ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПО ДАННЫМ С ИНТЕРВАЛЬНОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЬЮ

Интервальные системы линейных алгебраических уравнений (ИСЛАУ) рассматриваются как инструмент построения линейных моделей по данным с интервальной неопределенностью. Предложены проверяемые за полиномиальное время методами вычислительной линейной алгебры достаточные условия ограниченности и выпуклости допустимой области (ДО) ИСЛАУ и ее принадлежности только одному ортанту n-мерного пространства. При этом ДО ИСЛАУ оказывается выпуклым ограниченным многогранником, целиком лежащим в некотором ортанте. Указанные свойства ДО ИСЛАУ позволяют, во-первых, находить решения соответствующих ИСЛАУ за полиномиальное время методами линейного программирования (в то время как поиск решений ИСЛАУ общего вида является NP-трудной задачей). Во-вторых, коэффициенты линейной модели, полученные с помощью решения соответствующей ИСЛАУ, обладают аналогом свойства *значимости* коэффициента линейной модели, поскольку в пределах ДО ИСЛАУ коэффициенты линейной модели не меняют свой знак. Представлены формулировка и доказательство соответствующей теоремы и иллюстративный численный пример.

Ключевые слова: интервальные системы, полиномиальная разрешимость, аналог свойства статистической значимости.

DOI: 10.31857/S0005231022120030, **EDN:** KRQXIP

1. Введение

Интервальные системы линейных алгебраических уравнений (как правило — переопределенные) являются естественным инструментом создания моделей и алгоритмов обработки данных с интервальной неопределенностью [1–6]. В общем случае поиск решений ИСЛАУ является NP-трудной задачей [7], что сдерживает их широкое внедрение в практику моделирования и анализа данных. В то же время, как показывает решение практических (инженерных) задач построения линейных зависимостей по экспериментальным данным с интервальной неопределенностью, допустимое множество переопределенной ИСЛАУ часто оказывается 1) выпуклым многогранником, целиком лежащим в некотором ортанте n-мерного пространства и 2) с ростом числа экспериментов стягивающимся в точку, совпадающую с истинным вектором коэффициентов линейной модели. Свойство 2) является аналогом свойства *состоятельности* (см., например, [8, 9]) статистической модели, в то время как свойство 1) во-первых, гарантирует *полиномиальную трудоемкость* поиска решений ИСЛАУ (с использованием методов линейного программирования, см., например, [10]), и, во-вторых, является аналогом свойства *статистической значимости* коэффициентов (статистической) линейной модели [9]. В статье будут предложены неизвестные ранее легко проверяемые достаточные условия принадлежности допустимого множества конкретной ИСЛАУ множеству выпуклых многогранников, целиком лежащих в некотором ортанте, которые одновременно являются достаточными условиями полиномиальной сложности решения данной ИСЛАУ и аналогом свойства статистической значимости коэффициентов.

Пусть ИСЛАУ задана совокупностью условий

$$Ax = b,\ \underline{A} \leqslant A \leqslant \bar{A},\ \underline{b} \leqslant b \leqslant \bar{b}, \tag{1}$$

где $\underline{A}, \bar{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ — заданные матрицы; $\underline{b}, \bar{b} \in \mathbb{R}^m$ — заданные векторы, такие что $\underline{A} \leqslant \bar{A}$, $\underline{b} \leqslant \bar{b}$; $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $x = (x_j) \in \mathbb{R}^n$, $b = (b_j) \in \mathbb{R}^m$ — неизвестные (подлежащие определению) матрица и векторы, $\underline{A} \neq \bar{A}$, $\underline{b} \neq \bar{b}$, $m > n$. Заметим, что в большинстве прикладных исследований в центре внимания оказывается только *объединенное множество решений* ИСЛАУ [6], определяемое как

$$\mathbf{X} = \left\{ x \,\middle|\, \left(\exists A, b \,\middle|\, \underline{A} \leqslant A \leqslant \bar{A}, \underline{b} \leqslant b \leqslant \bar{b}, Ax = b \right) \right\}.$$

Эквивалентное (1) представление ИСЛАУ может быть записано с помощью *средней матрицы* $A_c = (a_{ij}^c) = \frac{1}{2}(\underline{A} + \bar{A})$, *матрицы радиусов* $A_r = (a_{ij}^r) = \frac{1}{2}(\bar{A} - \underline{A})$, *среднего вектора* $b_c = (b_i^c) = \frac{1}{2}(\underline{b} + \bar{b})$ и *вектора радиусов* $b_r = (b_i^c) = \frac{1}{2}(\bar{b} - \underline{b})$:

$$Ax = b, \quad A_c - A_r \leqslant A \leqslant A_c + A_r, \quad b_c - b_r \leqslant b \leqslant b_c + b_r.$$

В терминах указанных векторов и матриц обычно формулируется важный «инструментальный» результат, характеризующий множество $\mathbf{X}$. Для этого рассмотрим (нелинейную) систему неравенств

$$|A_c x - b_c| \leqslant A_r\,|x| + b_r, \tag{2}$$

где $|\cdot|$ — поэлементная операция взятия абсолютной величины. Обозначим символом $\widehat{\mathbf{X}}$ множество решений системы (2).

Теорема 1 (теорема Оеттли–Прагера [11]).

$$\mathbf{X} \equiv \widehat{\mathbf{X}}. \tag{3}$$

При этом если x — решение системы неравенств (2), матрица A и вектор b могут быть построены по формулам

$$
\begin{gathered}
a_{ij} = a_{ij}^c + \Delta a_{ij}, \quad b_i = b_i^c + \Delta b_i, \\
\Delta a_{ij} = -d_i a_{ij}^r \mathrm{sign}(x_j)/\gamma_i, \quad \Delta b_i = d_i b_i^r/\gamma_i, \\
d = (d_i) = A_c x - b_c, \quad \gamma_i = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}^r \, |x_j| + b_i^r.
\end{gathered}
$$

Заметим, что при «наивном» использовании теоремы 1 система неравенств (2) (в зависимости от выбора ортанта, в котором ищется решение) может быть сведена к совокупности 2^n систем линейных неравенств. Это конечно не является доказательством NP-сложности поиска решений ИСЛАУ (в общем случае), но может считаться хорошей иллюстрацией указанного факта.

2. Подготовительная работа

Пусть $\hat{x} = (\hat{x}_j) = A_c^+ b_c$ — нормальное псевдорешение по методу наименьших квадратов (МНК-решение) несовместной переопределенной системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) $A_c x \cong b_c$, $\Delta b_c = b_c - A_c \hat{x}$ — ее невязка с минимальной евклидовой нормой, A_c^+ — соответствующая псевдообратная матрица, и выполняются условия $A_c^1 \hat{x} \leqslant b_c^1$, $-A_c^2 \hat{x} \leqslant -b_c^2$, где с точностью до некоторой перестановки строк A_c и элементов b_c

$$
A_c = \begin{bmatrix} A_c^1 \\ A_c^2 \end{bmatrix}, \quad b_c = \begin{bmatrix} b_c^1 \\ b_c^2 \end{bmatrix}.
$$

Введем обозначения:

$$
\tilde{A}_c = \begin{bmatrix} A_c^1 \\ -A_c^2 \end{bmatrix}, \quad \tilde{b}_c = \begin{bmatrix} b_c^1 \\ -b_c^2 \end{bmatrix}, \quad S = \mathrm{diag}\left(\mathrm{sign}\left(\hat{x}\right)\right),
$$

$\widehat{x} = (\tilde{A}_c - A_r S)^+ (\tilde{b}_c + b_r), \quad \Delta \widehat{b} = (\tilde{b}_c + b_r) - (\tilde{A}_c - A_r S)\widehat{x},$

$\tilde{\mathbf{X}} = \left\{ x \,|(A_c - A_r S)x \leqslant b_c + b_r, \; (-A_c - A_r S)x \leqslant -b_c + b_r \right\},$

$\mathbf{1}$ — n-мерный вектор, состоящий из единиц,

0_n — нулевая матрица порядка n,

I_n — единичная матрица порядка n,

$\sigma_{\min}^{A_c}$ — минимальное сингулярное число матрицы A_c,

$\sigma_{\max}^{A_r}$ — максимальное сингулярное число матрицы A_r,

$||\cdot||$ — в зависимости от контекста евклидова векторная или спектральная матричная норма, функция $\mathrm{sign}(\cdot)$ применяется к векторному аргументу $\hat{x}$ поэлементно, возвращая n-мерный вектор, составленный из чисел $\{-1, 0, +1\}$ в соответствии со знаками элементов $\hat{x}_j$.

Справедливы следующие леммы.

Лемма 1. *Системы линейных неравенств*

$$(4)\qquad (\tilde{A}_c - A_r S)x \leqslant \tilde{b}_c + b_r, \quad Sx \geqslant 0 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} \tilde{A}_c - A_r S \\ -S \end{bmatrix} x \leqslant \begin{bmatrix} \tilde{b}_c + b_r \\ 0 \end{bmatrix}$$

и

$$(5)\qquad (A_c - A_r S)x \leqslant b_c + b_r$$

совместны.

Доказательство. Принимая во внимание приведенные выше определения объектов $\hat{x}$, $\tilde{A}_c$, $\tilde{b}_c$, S и учитывая условия $A_r \geqslant 0$, $b_r \geqslant 0$, несложно убедиться, что вектор $\hat{x}$ принадлежит множеству допустимых решений систем (4) и (5).

Лемма 2. *Если система линейных неравенств*

$$Ax \leqslant b, \quad Sx \geqslant 0,$$

где $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $x \in \mathbb{R}^{mn}$, совместна, и выполняется условие

$$(6)\qquad \forall x \,|Ax \leqslant b, \quad Sx \geqslant 0 \Rightarrow Sx \geqslant 1\delta,$$

где S — диагональная матрица порядка n с элементами $s_j = \pm 1$ на диагонали, $\delta > 0$ — некоторый скаляр, то справедливо соотношение

$$(7)\qquad \forall x \,|Ax \leqslant b \Rightarrow Sx \geqslant 1\delta.$$

Доказательство. Предположим противное: пусть существует вектор $y \in \mathbb{R}^n$ такой, что $Ay \leqslant b$, $s_j y_j \leqslant 0$, $s_k y_k \geqslant 0$, где $j \in \{1, \ldots, n\}$ — некоторый индекс, $k = 1, 2, \ldots, j-1, j+1, \ldots, n$. Кроме того, пусть z — вектор, такой что $Az \leqslant b$, $Sz \geqslant 1\delta$. Рассмотрим также $x(\alpha) = \alpha y + (1-\alpha)z$. В силу выпуклости допустимой области любой системы линейных неравенств вектор $x(\alpha)$ принадлежит допустимой области системы $Ax \leqslant b$ при любом $0 \leqslant \alpha \leqslant 1$. Несложно показать, что указанным ограничениям удовлетворяет параметр $\tilde{\alpha}$ такой, что $x_j(\tilde{\alpha}) = 0$. При этом выполняются условия $Ax(\tilde{\alpha}) \leqslant b$, $Sx(\tilde{\alpha}) \geqslant 0$. Следовательно, в силу (6), $Sx(\tilde{\alpha}) \geqslant 1\delta$, что противоречит условию $x_j(\tilde{\alpha}) = 0$.

Лемма 3. *Если система неравенств $Ax \leqslant b$ совместна и выполняется условие* (7)*, то для любой совместной системы линейных неравенств вида $Ax \leqslant b$, $Cx \leqslant d$, где C и d — произвольные матрица и вектор с согласованными между собой и вектором x размерностями, справедливо следствие*

$$\forall x \,|Ax \leqslant b, Cx \leqslant d \Rightarrow Sx \geqslant 1\delta \,.$$

Доказательство. Утверждение леммы непосредственно вытекает из леммы Минковского–Фаркаша о следствиях [12, Теорема 4.7].

3. Основной результат

Теорема 2. Пусть выполняются условия

$$\operatorname{rank} A_c = n, \quad \sigma_{\min}^{A_c} > \sigma_{\max}^{A_r}, \tag{8}$$

$$A_r S \hat{x} \leqslant b_r, \tag{9}$$

$$\min_{j=1,\ldots,n} |\hat{x}_j| > \gamma > 0, \tag{10}$$

где

$$\gamma = \frac{1}{\sigma_{\min}^{A_c} - \sigma_{\max}^{A_r}} \left(\sigma_{\max}^{A_r} \left(||\hat{x}|| + \frac{||\Delta b_c||}{\sigma_{\min}^{A_c}} \right) + ||b_r|| \right),$$

$$\Delta \widehat{b} > 0, \tag{11}$$

$$||\Delta \widehat{b}||^2 \max_{i,j} q_{ij} < 1, \tag{12}$$

где q_{ij} — элемент матрицы

$$Q = (q_{ij}) = \operatorname{diag}(S\widehat{x})^{-1} (\tilde{A}_c - A_r S)^{+} \operatorname{diag}(\Delta \widehat{b})^{-1}. \tag{13}$$

Тогда

1. *Допустимые области систем линейных неравенств* (4) *и* (5) *не пусты и являются ограниченными выпуклыми многогранниками.*

2. *Существует такое число $\delta > 0$, что справедливо условие*

$$\forall x \left| (\tilde{A}_c - A_r S) x \leqslant \tilde{b}_c + b_r \Rightarrow Sx \geqslant 1\delta. \right. \tag{14}$$

3. *Все 2^n систем линейных неравенств*

$$(\tilde{A}_c - A_r \tilde{S}) x \leqslant \tilde{b}_c + b_r, \tag{15}$$

где $\tilde{S}$ — диагональная матрица порядка n с элементами ± 1 на диагонали, совместны. При этом система линейных неравенств $Sx \geqslant 1\delta$ является следствием любой из них.

4. *Множество $\mathbf{X}$ совпадает с множеством $\tilde{\mathbf{X}}$ и, в случае непустоты, представляет собой выпуклый ограниченный многогранник, лежащий строго внутри ортанта, определяемого знаками диагональных элементов матрицы S или, что эквивалентно, знаками элементов вектора $\hat{x}$ МНК-решения СЛАУ $A_c x \cong b_c$.*

Доказательство теоремы 2.

1. В силу леммы 1 системы линейных неравенств (4) и (5) совместны (соответствующие допустимые области *не пусты*).

В силу условия (10), в формулировке которого γ — это верхняя оценка $||\Delta x|| = ||\hat{x} - \widehat{x}||$ — погрешности МНК-решения возмущенной СЛАУ $(\tilde{A}_c - A_r S)(\hat{x} + \Delta x) \cong \tilde{b}_c + b_r$ [13, Теорема 9.12], выполняются условия $S\hat{x} > 0$, $S\widehat{x} > 0$. В силу последнего условия и предположения (11) справедливо условие $S\widehat{x}\widehat{\Delta b}^\top > 0$. Построим две $(n \times (m+n))$-матрицы следующим образом:

$$
\begin{aligned}
P = \left[\, P_1 \;\; P_2 \,\right] &= \left[\, -(\tilde{A}_c - A_r S)^+ + \alpha S\widehat{x}\Delta\widehat{b}^\top \;\; 0_n \,\right],\\
Q = \left[\, Q_1 \;\; Q_2 \,\right] &= \left[\, (\tilde{A}_c - A_r S)^+ + \beta S\widehat{x}\Delta\widehat{b}^\top \;\; 0_n \,\right],
\end{aligned}
$$

где $\alpha, \beta > 0$ — некоторые скалярные параметры. Выберем значения указанных параметров таким образом, чтобы выполнялись условия

$$P, Q \geqslant 0. \tag{16}$$

Поскольку S — ортогональная матрица, в силу свойств спектральной матричной нормы (см., например [14]) выполняются условия $||A_r S|| = ||A_r|| = \sigma_{\max}^{A_r}$. Учитывая этот факт, а также условия (8), получаем $\operatorname{rank}(\tilde{A}_c - A_r S) = n$ (см., например [13, Теорема 9.12]), и поэтому в силу известных свойств псевдообратных матриц полного столбцевого ранга и невязок псевдорешений [13] имеют место равенства

$$(\tilde{A}_c - A_r S)^+(\tilde{A}_c - A_r S) = I_n, \quad \Delta\widehat{b}^\top(\tilde{A}_c - A_r S) = 0. \tag{17}$$

Следовательно, выполняются условия

$$
\begin{aligned}
P \begin{bmatrix} \tilde{A}_c - A_r S \\ -S \end{bmatrix} &= P_1(\tilde{A}_c - A_r S) = -I_n,\\
Q \begin{bmatrix} \tilde{A}_c - A_r S \\ -S \end{bmatrix} &= Q_1(\tilde{A}_c - A_r S) = I_n.
\end{aligned} \tag{18}
$$

В то же время

$$(P + Q)\begin{bmatrix} \tilde{b}_c + b_r \\ 0 \end{bmatrix} = (P_1 + Q_1)(\tilde{b}_c + b_r) = (\alpha + \beta)\,||\Delta\widehat{b}||^2 S\widehat{x} > 0. \tag{19}$$

Теперь остается заметить, что условия (16)–(19) являются необходимыми и достаточными условиями *ограниченности* не пустых допустимых областей систем линейных неравенств (4) и (5) [12, Задача 4.117], которые в этом случае оказываются не просто выпуклыми многогранными множествами, а выпуклыми ограниченными многогранниками [12].

2. Построим $(n \times m)$-матрицу G по формуле

$$G = -S(\tilde{A}_c - A_r S)^{+} + \chi S\widehat{x}\Delta\widehat{b}^{\top}. \tag{20}$$

В силу (12) скалярный параметр χ возможно выбрать таким образом, чтобы он удовлетворял условиям

$$\max\left\{\max_{i,j} q_{ij}, 0\right\} \leqslant \chi < \frac{1}{||\Delta\widehat{b}||^2}. \tag{21}$$

Покажем, что выполняется условие $G \geqslant 0$. В силу допущения (11) и установленного выше условия $S\widehat{x} > 0$ элементы матрицы $H = (h_{ij}) = \operatorname{diag}(S\widehat{x})^{-1} G \operatorname{diag}(\Delta\widehat{b})^{-1}$ имеют те же знаки, что и элементы матрицы G. Но в силу (13) и (20) $h_{ij} = -q_{ij} + \chi$, откуда в силу (21) $H, G \geqslant 0$.

Заметим теперь, что в силу (17) и (21)

$$G(\tilde{A}_c - A_r S) = -S, \quad G(\tilde{b}_c + b_r) = S\widehat{x}(-1 + \chi||\Delta\widehat{b}||^2) < 0,$$

откуда в силу теоремы Минковского–Фаркаша о следствиях [12, Теорема 4.7] найдется такое число $\delta > 0$, что будет выполнено условие (14).

3. Заметим, что если выполняется условие (9), то система линейных неравенств

$$(\tilde{A}_c + A_r S)x \leqslant \tilde{b}_c + b_r, \quad Sx \geqslant 0 \tag{22}$$

совместна. Это действительно так, поскольку вектор $\hat{x}$ принадлежит множеству допустимых решений системы (22). Теперь заметим, что система линейных неравенств (4) совместна в силу леммы 1. Кроме того,

$$\forall x \,|\, Sx \geqslant 0\ ,\ \forall \tilde{S} \neq S \Rightarrow -A_r Sx \leqslant -A_r \tilde{S}x \leqslant A_r Sx. \tag{23}$$

С учетом совместности систем линейных неравенств (4) и (22), соотношения (23), лемм 2, 3 и условия (14), приведенные ниже системы, *совместны*, справедлива цепочка следствий (в которой каждая последующая система линейных неравенств является следствием предыдущей):

$$\begin{cases} (\tilde{A}_c + A_r S)x \leqslant \tilde{b}_c + b_r \\ Sx \geqslant 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} (\tilde{A}_c - A_r \tilde{S})x \leqslant \tilde{b}_c + b_r \\ Sx \geqslant 0 \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} (\tilde{A}_c - A_r S)x \leqslant \tilde{b}_c + b_r \\ Sx \geqslant 0 \end{cases} \Rightarrow Sx \geqslant 1\delta,$$

и, окончательно, все системы линейных неравенств вида (15) совместны и система $Sx \geqslant 1\delta$ является следствием любой из них.

4. Заметим, что

$$\forall x \Rightarrow |A_c x - b_c| = \left|\tilde{A}_c x - \tilde{b}_c\right|. \tag{24}$$

В силу (24) систему неравенств (2) можно записать в виде

$$|A_c x - b_c| \leqslant A_r |x| + b_r \Leftrightarrow \begin{cases} A_c x - b_c \leqslant A_r |x| + b_r \\ b_c - A_c x \leqslant A_r |x| + b_r. \end{cases}$$

В свою очередь,

$$A_c x - b_c \leqslant A_r |x| + b_r \Leftrightarrow (\tilde{A}_c - A_r \tilde{S}_j)x \leqslant \tilde{b}_c + b_r,$$
$$A_c x - b_c \leqslant A_r |x| + b_r \Leftrightarrow (-\tilde{A}_c - A_r \tilde{S}_j)x \leqslant -\tilde{b}_c + b_r,$$
$$j = 1, \dots, 2^n,$$

где $\tilde{S}_j$ — одна из 2^n диагональных матриц порядка n с элементами ± 1 на диагонали.

Но в силу леммы 3 справедливо следствие

$$\forall x \left| \begin{cases} (\tilde{A}_c - A_r \tilde{S}_j)x \leqslant \tilde{b}_c + b_r \\ (-\tilde{A}_c - A_r \tilde{S}_j)x \leqslant -\tilde{b}_c + b_r \\ j = 1, \dots, 2^n \end{cases} \right. \Rightarrow Sx \geqslant 1\delta.$$

Объединяя приведенные выше выкладки, получаем

$$\forall x \,\Big|\; |A_c x - b_c| \leqslant A_r |x| + b_r \Rightarrow Sx \geqslant 1\delta. \tag{25}$$

В свою очередь, в силу (25) и (3),

$$|A_c x - b_c| \leqslant A_r |x| + b_r \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow \begin{cases} (A_c - A_r S)x \leqslant b_c + b_r \\ (-A_c - A_r S)x \leqslant -b_c + b_r \end{cases} \Leftrightarrow \tilde{\mathbf{X}} \equiv \widehat{\mathbf{X}} \equiv \mathbf{X}.$$

Но, как было показано в п. 1 доказательства, допустимая область системы неравенств $(\tilde{A}_c - A_r S)x \leqslant (\tilde{b}_c + b_r)$ не пуста и представляет собой выпуклый ограниченный многогранник. Следовательно, в силу всего вышесказанного, если допустимая область исследуемой ИСЛАУ не пуста, она является выпуклым ограниченным многогранником, лежащим строго внутри ортанта, определяемого знаками диагональных элементов матрицы S, или, что эквивалентно, знаками элементов вектора $\hat{x}$ МНК-решения СЛАУ $A_c x \cong b_c$.

4. Численный пример

В качестве численного примера рассмотрим обратную задачу химической кинетики для необратимой реакции 1-го порядка, которая заключается в определении по экспериментальным данным двух неизвестных параметров: c_0 (начальной концентрации вещества) и k (константы скорости реакции) в кинетической модели вида

$$c(t) = c_0 \exp(-kt), \tag{26}$$

где $c(t)$ — концентрация вещества в момент времени t. Экспериментальные данные, которые будут подвергнуты обработке, взяты из [15] и касаются необратимой реакции распада молекул гексафенилэтана на две молекулы свободного радикала трифенилметила:

$$(C_6H_5)_3C - C(C_6H_5)_3 \to 2(C_6H_5)_3C,$$

протекающей при 0 °C в смеси 95% толуола и 5% анилина. Соответствующие числовые значения представлены в таблице.

Экспериментальная кинетика разложения гексафенилэтана

$t^{\text{ эксп}}$, мин	0	0,50	1,05	2,20	3,65	5,5	7,85	9,45	14,75
$c^{\text{ эксп}}(t)$, моль/л	0,1000	0,0934	0,0867	0,0733	0,0600	0,0465	0,0334	0,0265	0,0134

Следуя логике работы [2], будем считать, что исследуемые экспериментальные данные обладают интервальной неопределенностью следующего вида:

$$\begin{gathered} t_1 = 0, \quad t_i = t_i^{\text{эксп}} \pm \varepsilon_t, \quad i = 2, 3, \ldots, 9, \quad \varepsilon_t = 0,005, \\ c(t_i) = c^{\text{ эксп}}(t_i) \pm \varepsilon_c, \quad i = 1, 2, \ldots, 9, \quad \varepsilon_c = 0,0005. \end{gathered}$$

Переход от (26) к линеаризованной модели $\ln(c(t)) = \ln(c_0) - kt$ позволяет сформировать ИСЛАУ с 9 интервальными уравнениями и 2 неизвестными, матрицы коэффициентов A_c, A_r и векторы правой части b_c, b_r которой имеют следующий вид:

$$A_c = \begin{pmatrix} 1 & t_1^{\text{эксп}} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_9^{\text{эксп}} \end{pmatrix}, \quad A_r = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_t \\ \vdots & \vdots \\ 0 & \varepsilon_t \end{pmatrix}, \quad b_c = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_9 \end{pmatrix}, \quad b_r = \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \vdots \\ \zeta_9 \end{pmatrix},$$

где

$$\xi_i = \frac{\ln\left(c(t_i^{\text{эксп}}) - \varepsilon_c\right) + \ln\left(c(t_i^{\text{эксп}}) + \varepsilon_c\right)}{2},$$

$$\zeta_i = \frac{\ln\left(c(t_i^{\text{эксп}}) + \varepsilon_c\right) - \ln\left(c(t_i^{\text{эксп}}) - \varepsilon_c\right)}{2}.$$

Вычисления, выполненные в среде Mathcad 15.0, дают следующие результаты:

$$\hat{x} \approx \begin{pmatrix} -2,3088695 \\ -0,1374258 \end{pmatrix}, \quad \widehat{x} \approx \begin{pmatrix} -2,3146126 \\ -0,1364464 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\tilde{A}_c = \begin{pmatrix} 1 & 0,00 \\ 1 & 0,50 \\ 1 & 1,05 \\ -1 & -2,20 \\ -1 & -3,65 \\ -1 & -5,50 \\ -1 & -7,85 \\ -1 & -9,45 \\ 1 & 14,75 \end{pmatrix}, \quad \tilde{b}_c \approx \begin{pmatrix} -2,302598 \\ -2,370878 \\ -2,445318 \\ 2,613218 \\ 2,813445 \\ 3,068360 \\ 3,399311 \\ 3,630789 \\ -4,313197 \end{pmatrix}, \quad b_r \approx \begin{pmatrix} 0,005000 \\ 0,005353 \\ 0,005767 \\ 0,006821 \\ 0,008334 \\ 0,010753 \\ 0,014971 \\ 0,018870 \\ 0,037331 \end{pmatrix},$$

$$\Delta\widehat{b} \approx \begin{pmatrix} 0,017015 \\ 0,017993 \\ 0,019013 \\ 0,005927 \\ 0,009819 \\ 0,014728 \\ 0,029248 \\ 0,046310 \\ 0,052012 \end{pmatrix}, \quad A_r S \hat{x} \approx \begin{pmatrix} 0,000000 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_{\min}^{A_c} \approx 2,030051 > \sigma_{\max}^{A_r} \approx 0,014142, \quad \operatorname{rank} A_c = \operatorname{rank}(\tilde{A}_c - A_r S) = 2,$$

$$\gamma \approx 0,040104, \quad ||\Delta\widehat{b}||^2 \max_{i,j} q_{ij} \approx 0,125540.$$

Представленные численные значения свидетельствуют о выполнении условий (8)–(12) теоремы 2. Справедливость основных утверждений теоремы (вид и взаимное расположение допустимых областей соответствующих систем неравенств) продемонстрирована графически на приведенном рисунке.

5. Заключение

В статье предпринята попытка сблизить теорию и методы интервальных систем линейных алгебраических уравнений с инженерной практикой построения линейных моделей по экспериментальным данным с интервальной неопределенностью. Полученные (в форме соответствующих достаточных условий) результаты не противоречат интуитивно понятному требованию к исходным данным, которое неформально можно сформулировать как требование относительной «малости» интервальных ошибок по сравнению

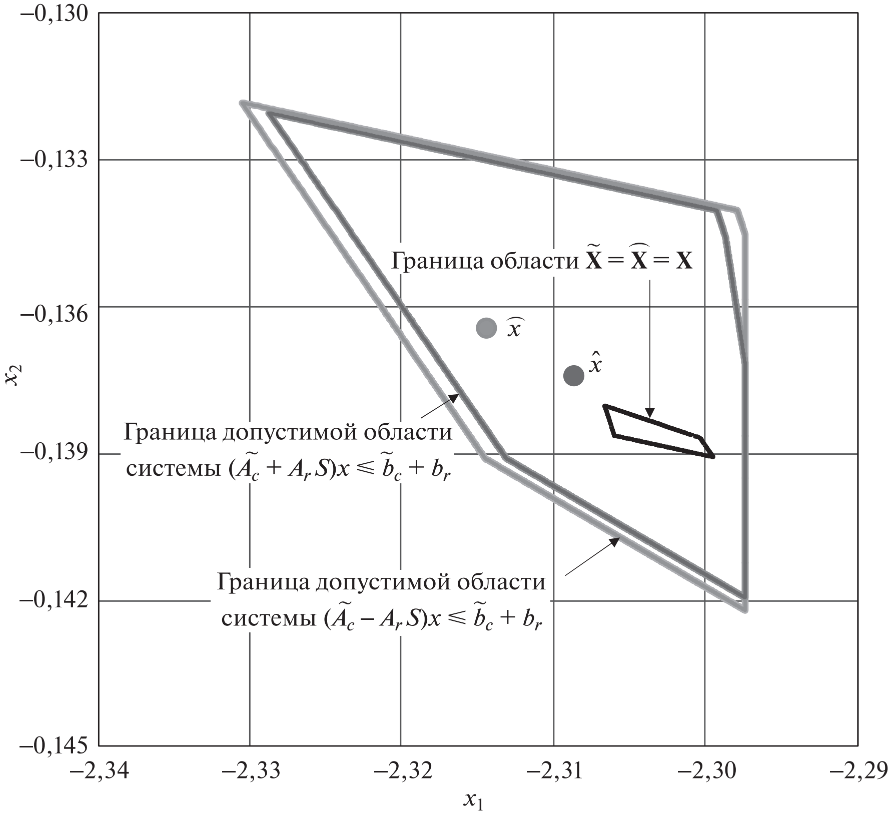

Иллюстрация выполнения условий теоремы 2.

с коэффициентами матрицы A_c и вектора b_c «центральной» СЛАУ в сочетании с требованием не «не слишком высокого» числа обусловленности матрицы A_c.

Некоторые важные вопросы остались за рамками данной работы. Например, обсуждение численных алгоритмов нахождения МНК-решений и их невязок, определения ранга матриц, вычисления сингулярных чисел матриц. Этот вопрос может быть предметом отдельного исследования, и в то же время ему посвящена обширная литература. В контексте данной статьи отметим только, что построение МНК-решений и соответствующих невязок может быть осуществлено эффективными, полиномиальными по трудоемкости конечношаговыми или итерационными методами, а сингулярные числа могут быть вычислены с помощью эффективных итерационных алгоритмов, обладающих полиномиальной трудоемкостью. Обзор соответствующих алгоритмов с оценкой их трудоемкости можно найти, например, в монографии [16].

То же самое можно сказать о проблеме выбора эффективного численного метода для поиска решений системы линейных неравенств, к которой свелась проблема поиска решения ИСЛАУ. Численные методы линейного программирования продолжают интенсивно развиваться, поэтому затронутый вопрос может быть предметом дальнейшего исследования.

В качестве еще одного направления дальнейшего исследования, по-видимому, можно указать на поиск достаточных условий «значимости» коэффициентов интервальных линейных моделей, основанных не на МНК-решении «центральной» СЛАУ, а ее псевдорешениях в других нормах (ℓ_1, ℓ_∞).

Вполне возможно, что проведенная в статье аналогия между свойством статистической значимости некоторого отдельно взятого коэффициента статистической модели и свойством сохранения знака (внутри соответствующей допустимой области) некоторого отдельно взятого коэффициента модели с интервальной неопределенностью данных может оказаться дискуссионной, что хорошо осознается авторами. Возможно, на этот вопрос ответит практика.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Вощинин А.П.*, *Боков А.Ф.*, *Сотиров Г.Р.* Метод анализа данных при интервальной нестатистической ошибке // Завод. лаб. 1990. Т. 56. № 7. С. 76–81.
2. *Белов В.М.*, *Суханов В.А.*, *Лагуткина Е.В.* Интервальный подход при решении задач кинетики простых химических реакций // Вычисл. технологии. 1997. Т. 2. № 1. С. 10–18.
3. *Поляк Б.Т., Назин С.А.* Оценивание параметров в линейных многомерных системах с интервальной неопределенностью // Проблемы управления и информатики. 2006. № 1. С. 103–116.
4. *Zhilin S.I.* Simple method for outlier detection in fitting experimental data under interval error // Chemometrics and Intellectual Laboratory Systems. 2007. V. 88. No. 1. P. 60–68.
5. *Мадияров М.Н.*, *Оскорбин Н.М.*, *Суханов С.И.* Примеры интервального анализа данных в задачах моделирования процессов // Изв. Алт. гос. ун-та. 2018. № 1(99). С. 113–118.
6. *Шарый С.П.* Задача восстановления зависимостей по данным с интервальной неопределенностью // Завод. лаб. Диагностика материалов. 2020. Т. 86. № 1. С. 62–74.
7. *Фидлер М., Недома Й., Рамик Я., Рон И.*, *Циммерман К.* Задачи линейной оптимизации с неточными данными. М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». Институт компьютерных исследований, 2008.
8. *Ибрагимов И.А., Хасьминский Р.З.* Асимптотическая теория оценивания. М.: Наука, 1979.
9. *Себер Дж.* Линейный регрессионный анализ. М.: Мир, 1980.
10. *Схрейвер А.* Теория линейного и целочисленного программирования: В 2-х т. Т. 1. М.: Мир, 1991.
11. *Oettli W., Prager W.* Compatibility of Approximate Solution of Linear Equations with Given Error Bounds for Coefficients and Right-Hand Sides // Numerische Mathematik. 1964. No. 6. P. 405–409.
12. *Ашманов С.А., Тимохов А.В.* Теория оптимизации в задачах и упражнениях. СПб.: Изд-во «Лань», 2012.

13. *Лоусон Ч., Хенсон Р.* Численное решение задач метода наименьших квадратов. М.: Наука, 1986.
14. *Хорн Р., Джонсон Ч.* Матричный анализ. М.: Мир, 1989.
15. *Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г.* Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1984.
16. *Голуб Дж., Ван Лоун Ч.* Матричные вычисления. М.: Мир, 1999.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.А. Лазаревым.

Поступила в редакцию 31.01.2022

После доработки 21.06.2022

Принята к публикации 29.06.2022