УДК 519.25, 519.65

В. А. Русанов, С. В. Агафонов,
С. Н. Думнов, А. Г. Рудых

РЕГРЕССИОННО-ТЕНЗОРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОФАКТОРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО СУЛЬФОХРОМИРОВАНИЯ. Ч. I

Развит универсальный способ регрессионно-тензорного моделирования оптимальных параметров многофакторного химико-технологического процесса обработки сложных механических деталей. Способ основан на представлении многомерной регрессионной математической моделью исследуемого химико-технологического процесса в виде заданной суммы ковариантных тензоров фиксированной валентности и предъявляет минимальные требования как к объему экспериментальных данных, необходимых для параметрической идентификации тензорной модели, так и к количеству вычислений для определения (согласно этой модели) оптимальных функциональных характеристик химико-технологического процесса.

E-mail: V.Rusanov@mail.ru

Ключевые слова: *регрессионно-тензорное моделирование, химико-технологический процесс.*

Первоначально теоретико-прикладной интерес к регрессионному анализу появился в задачах оптимизации параметров линейных стационарных статических систем типа “черный ящик”. В большинстве случаев исследования ограничивались анализом конечномерных систем [1, 2]. Как правило, задача идентификации регрессии формулировалась в терминах вычисления квадратично-оптимальной оценки параметров модели с использованием метода наименьших квадратов (МНК) и применением [2, с. 60] алгоритма построения псевдообратной матрицы [3, с. 186].

В настоящей работе многомерный регрессионный анализ отличается от традиционного изложения [1–3], поскольку одной из главных целей было рассмотреть геометрическую, качественную [4–6] сторону нелинейного регрессионного моделирования в конструкциях [6] при снижении размерности используемой псевдообратной матрицы. В соответствии с этим далее детально изучена прикладная трактовка теоретических результатов работы [6]. Это представляет интерес в связи с другими прикладными задачами МНК-интерполирования, где могут проявиться обобщения аналитических решений, предложенных алгоритмами из работы [6].

Постановка задачи моделирования оптимального химико-технологического процесса (ХТП). Пусть R — поле вещественных чисел, R^n — n-мерное векторное пространство над R с евклидовой нормой $||\cdot||_{R^n}$, $\mathrm{col}(y_1, \ldots, y_n) \in R^n$ — вектор-столбец с элементами $y_1, \ldots, y_n \in R$ и пусть $M_{n,m}(R)$ — пространство всех матриц размера $n \times m$ с элементами из R и фробениусовой матричной нормой $||D||_F = \left(\sum d_{ij}^2\right)^{1/2}$, $D = [d_{ij}]$. Далее, через T_m^k обозначим пространство всех ковариантных тензоров k-й валентности (вещественных полилинейных форм $f^{k,m}\colon R^m \times \ldots \times R^m \to R$) с тензорной нормой $||f^{k,m}||_T = \left(\sum t_{i\ldots j}^2\right)^{1/2}$, где $t_{i\ldots j}$ — коэффициенты [4, с. 61] тензора $f^{k,m}$, значения которых заданы относительно стандартного алгебраического базиса [7, с. 15] в евклидовом пространстве R^m.

Пусть $\omega \in R^m$ — некоторый опорный режим заданного ХТП. Далее будем рассматривать класс многомерных статических стационарных нелинейных систем "вход–выход", описываемых векторно-тензорным уравнением регрессии вида

$$\begin{aligned} w(\omega + v) &= c + Av + \\ &+ \mathrm{col}\Big(\sum_{j=2,\ldots,k} f_1^{j,m}(v, \ldots, v), \ldots, \sum_{j=2,\ldots,k} f_n^{j,m}(v, \ldots, v)\Big) + \varepsilon(\omega, v), \end{aligned} \tag{1}$$

где $w(\omega + v) \in R^n$, $v \in R^m$, $c \in R^n$, $A \in M_{n,m}(R)$, $f_i^{j,m} \in T_m^j$, вектор-функция $\varepsilon(\omega, \cdot)\colon R^m \to R^n$ класса $||\varepsilon(\omega, v)||_{R^n} = o((v_1^2 + \ldots + v_m^2)^{k/2})$, $v = \mathrm{col}(v_1, \ldots, v_m)$.

Постановка задачи: а) для заданного значения $\omega \in R^m$ аргумента исследуемой вектор-функции ХТП $w(\,\cdot\,)\colon \Omega \to R^n$, где Ω — открытая область в R^m, и фиксированного индекса k определить аналитические условия, при которых отображение $w(\,\cdot\,)$ удовлетворяет системе (1) с некоторыми c, A, $f_i^{j,m}$, $1 \leqslant i \leqslant n$, $1 \leqslant j \leqslant k$;

б) построить векторные матрично-тензорные апостериорные оценки для c, A, $f_i^{j,m}$, $1 \leqslant i \leqslant n$, $1 \leqslant j \leqslant k$ из решения двухкритериальной задачи параметрической оптимизации (параметрическая идентификация нелинейной регрессионной модели ХТП):

$$\begin{cases} \min\Big(\sum\limits_{1 \leqslant l \leqslant q}\Big(||w_{(l)} - c - Av_{(l)} - \\ \quad - \mathrm{col}\Big(\sum\limits_{j=2,\ldots,k} f_1^{j,m}(v_{(l)}, \ldots, v_{(l)}), \ldots, \sum\limits_{j=2,\ldots,k} f_n^{j,m}(v_{(l)}, \ldots, v_{(l)})\Big)||_{R^n}\Big)^2\Big)^{1/2}, \\ \min\Big(||c||_{R^n}^2 + ||A||_{F^2}^2 + \sum\limits_{i=1,\ldots,n}\sum\limits_{j=2,\ldots,k} ||f_i^{j,m}||_T^2\Big)^{1/2}; \end{cases} \tag{2}$$

здесь $w_{(l)} \in R^n$, $v_{(l)} \in R^m$, $1 \leqslant l \leqslant q$ — векторы экспериментальных данных ($w_{(l)}$ — реакция на вариацию $v_{(l)}$ относительно точки опорного режима ХТП $\omega \in R^m$); q — общее число проведенных экспериментов ХТП (при этом ограничений на q не накладываем), это число должно быть достаточным, чтобы посредством решения задачи параметрической идентификации тензорная структура уравнения (1) была определена однозначно (см. также далее замечание 2);

в) для $\varepsilon(\omega, v) \equiv 0$ и фиксированных $\omega \in R^m,\ k$ определить вектор входных переменных ХТП $v* \in R^m$ из решения задачи v-оптимизации (построение взвешенно-усредненных оптимальных характеристик выходных переменных ХТП):

$$\max\{F(v)\colon v \in R^m\}, \quad F(v) = \sum_{i=1,\ldots,n} r_i w_i(\omega + v), \tag{3}$$

где r_i — заданные весовые коэффициенты взвешенно-усредненной оценки ХТП, а переменные вектор-функции $\mathrm{col}(w_1(\omega+v), \ldots, w_n(\omega+ + v)) = w(\omega + v) \in R^n$ имеют аналитические представления в силу идентифицированной модели (1), т.е. согласно пункту б).

Существование модели многомерной регрессии ХТП со стационарными параметрами в тензорных классах $\boldsymbol{T^j_m}$, $\boldsymbol{j \leqslant k}$. В этом разделе исследуем аналитические свойства нелинейных векторных регрессий многих переменных, которые внешне похожи на поведение голоморфных функций (задача а)). В связи с этим изложение будет основываться на понятии производной Фреше [5, с. 481]. Последнее ставит задачу определения остальных понятий, в частности дифференциалов высших порядков, через конструкции данных производных; известно [5, с. 490], что k-производные Фреше можно (и удобно) трактовать как математические конструкции с полилинейной (k-линейной) структурой, что отражает следующее:

Утверждение 1. *Пусть Ω — открытая область в R^m, $w(\,\cdot\,)$ — отображение множества Ω в R^n и ω — некоторая точка из Ω. Если существует производная Фреше $w^{(k)}(\omega)$ порядка k, то дифференциал Фреше k-го порядка $d^k w$ для отображения $w(\,\cdot\,)$ в точке $\omega \in \Omega$ при приращении $v \in R^m$ имеет представление*

$$\begin{gathered} d^k w = w^{(k)}(\omega)(v, \ldots, v) = \\ = \mathrm{col}(f_1^{k,m}(v, \ldots, v), \ldots, f_n^{k,m}(v, \ldots, v)), \quad f_i^{k,m} \in T^k_m, \quad i = 1, \ldots, n. \end{gathered} \tag{4}$$

Доказательство. Каждой производной $w^{(k)}(\omega)$ можно поставить в соответствие элемент пространства k-линейных отображений из $R^m \times \times \ldots \times R^m$ в R^n [5, с. 490]. С другой стороны, ковалентный тензор k-й валентности есть [4, с. 58] полилинейный функционал на $R^m \times \ldots \times \times R^m$, что делает справедливым (4). #

Здесь и далее # означает конец доказательства.

Перед тем как сделать следующий шаг, отметим, что формулировка утверждения 1 по существу накладывает на отображение $w(\cdot)$ еще одно дополнительное требование, а именно — положение аналитического представления вектор-функции $w(\cdot)$. В случае апостериорного моделирования $w(\cdot)$ это требование не выполнимо, поэтому выше ограничились анализом согласно задаче а) — менее реалистической, но более логически выверенной задачей анализа свойств отображения $w(\cdot)$.

В следующем утверждении установим важное аналитическое свойство, которым должна обладать вектор-функция $w(\cdot)$, в целях прояснения вопроса: когда отображение $w(\cdot)$ удовлетворяет, по крайней мере при некоторых разумных дополнительных предположениях о нем, одному из тех специальных конкретных законов, от которых произошло понятие тензорной регрессии (1) как естественного продукта непрерывного процесса консолидации, абстрагирования и обобщения.

Утверждение 2. *Пусть Ω — открытая область в R^m, $w(\cdot)$ — отображение множества Ω в R^n и ω — некоторая точка из Ω. Если существует производная Фреше $w^{(k)}(\omega)$, которая равномерно непрерывная функция от ω в Ω, то векторное отображение $w(\cdot)\colon \Omega \to R^n$ удовлетворяет системе* (1) *с некоторыми тензорами $f_i^{j,m} \in T_m^j$, $1 \leqslant i \leqslant n$, $1 \leqslant j \leqslant k$, вектором $c = w(\omega) \in R^n$ и матрицей $A = w^{(1)}(\omega) \in M_{n,m}(R)$.*

Доказательство. В силу теоремы 2 [5, с. 491] равномерная непрерывность сильной производной $w^{(k)}(\cdot)$ отображения $w(\cdot)\colon \Omega \to R^n$ означает, что векторная разность $w(\omega+v) - w(\omega)$ может быть представлена в виде суммы конечного векторного ряда, выраженного формулой (21) [5, с. 491] (аналогичной канонической формуле Тейлора для разложения в степенной ряд вещественнозначной функции):

$$w(\omega + v) = w(\omega) + w^{(1)}(\omega)v + w^{(2)}(\omega)(v, v)/2 + \ldots +$$
$$+ w^{(k)}(\omega)(v, \ldots, v)/k! + \varepsilon(\omega, v),$$

где $\varepsilon(\omega, \cdot)$ — вектор-функция класса

$$||\varepsilon(\omega, v)||_{R^n} = o((v_1^2 + \ldots + v_m^2)^{k/2}), v = \mathrm{col}(v_1, \ldots, v_m).$$

Таким образом, компиляция этого положения с формулой (4) приводит к

$$w(\omega + v) = c + Av +$$
$$+ \mathrm{col}\Big(\sum_{j=2,\ldots,k} f_1^{j,m}(v, \ldots, v), \ldots, \sum_{j=2,\ldots,k} f_n^{j,m}(v, \ldots, v)\Big) + \varepsilon(\omega, v),$$

где $c \in R^n$, $A \in M_{n,m}(R)$, $f_i^{j,m} \in T_m^j$, $j = 2, \ldots, k$. #

Замечание 1. Везде далее полагаем априори, что моделируемый ХТП удовлетворяет при некотором индексе $k \geqslant 2$ утверждению 2.

Утверждение 2 дает наиболее непосредственный способ интерпретации понятия *сложности модели*, поскольку демонстрирует прямую связь между приближенной моделью и тем, как следует оценивать эту модель по экспериментальным данным, которые в строгом смысле ее опровергают; когда задается максимально допустимая несогласованность $\varepsilon(\omega, v)$ и в соответствующем классе регрессионных моделей (1) ищется наименее сложный объект (с минимальной степенью тензорной валентности k). При этом утверждение 2 по существу формулирует качественный факт для существования регрессии (1), если не накладывать чрезмерно жестких требований на аналитическую конструкцию вектор-функции $w(\,\cdot\,)$.

Параметрическая идентификация билинейно-тензорной структуры нелинейной векторной регрессии модели ХТП. Начнем с уточнения тензорной конструкции уравнения (1); это уточнение имеет довольно специальный характер, но его использование в потенциале позволяет не привлекать сложных вычислительных алгоритмов для расчета оптимального вектора переменных ХТП.

Рассмотрим (с учетом замечания 1) случай $k = 2$. Условимся также, что координаты t_{ij} каждого тензора $f_i^{2,m} \in T_m^2$ $(1 \leqslant i \leqslant n)$ априори удовлетворяют условию $t_{ij} = 0$, $i \geqslant j$. В такой постановке уравнение (1) примет вид

$$w(\omega + v) = c + Av + \mathrm{col}(v^{\mathrm{т}} B_i v, \ldots, v^{\mathrm{т}} B_n v) + \varepsilon(\omega, v), \tag{5}$$

где $B_i \in M_{m,m}(R)$, $i = 1, \ldots, n$, при этом каждая B_i — верхняя треугольная матрица [7, с. 38]; здесь и далее символ "т" — операция векторно-матричного транспонирования. В силу утверждения 2 имеем следующие очевидные интерпретации:

$$c = w(\omega) \in R^n,$$

$$A = w^{(1)}(\omega) \in M_{n,m}(R);$$

здесь $w^{(1)}(\omega)$ — производная Фреше (в точке ω) вектор-функции $w(\,\cdot\,)\colon \Omega \to R^n$.

Параметрическую идентификацию в многокритериальной векторно-матрично-тензорной постановке (2) для многосвязной стационарной статической нелинейной модели типа "черный ящик" в классе регрессий (5) методологически свяжем с понятием *нормального псевдорешения* (канонического МНК-решения) для конечномерной системы линейных алгебраических уравнений.

Как обычно [7, с. 501], *нормальным псевдорешением* системы алгебраических уравнений $Dx = d$, $D \in M_{q,p}(R)$, $d \in R^q$, назовем вектор $x \in R^p$, имеющий наименьшую норму $||v||_{R^p}$ среди всех векторов, обеспечивающих минимум $||Dx - d||_{R^q}$. Далее обозначим через E_q — единичную $q \times q$-матрицу и пусть $D \in M_{q,p}(R)$, при этом через D^+ обозначим обобщенную обратную (псевдообратную) матрицу Мура–Пенроуза [7, с. 500] матрицы D; асимптотическая конструкция псевдообратной матрицы имеет следующий аналитический вид: $D^+ = \lim\{D^{\text{т}}(DD^{\text{т}} + \tau E_q)^{-1}\colon \tau \to 0 \in R\}$. Тогда (см. формулу (50) [8, с. 35]) вектор $x = D^+d$ — нормальное псевдорешение системы линейных алгебраических уравнений $Dx = d$; условимся везде далее знаком “+” обозначать операцию псевдообращения соответствующей матрицы.

Допустим теперь, что в процессе функционирования ХТП проведено q экспериментов типа вход–выход. Для взаимоувязывания стационарных параметров билинейно-тензорной регрессионной системы (5) и q-данных (генеральной выборки) проведенных экспериментов обозначим через $\hat{u}_{(l)} \in R^{m(m+3)/2}$, $1 \leqslant l \leqslant q$, вектор входных переменных, имеющий с учетом верхней треугольной структуры у каждой матрицы $B_i \in M_{m,m}(R)$, $1 \leqslant i \leqslant n$, следующее координатное представление:

$$\hat{u}_{(l)} = \text{col}(v_{1(l)}, \ldots, v_{m(l)}, v_{1(l)}v_{1(l)}, \ldots, v_{r(l)}v_{s(l)}, \ldots, v_{m(l)}v_{m(l)}) \in$$

$$\in R^{m(m+3)/2}, \quad 1 \leqslant r \leqslant s \leqslant m, \quad (6)$$

$$\text{col}(v_{1(l)}, \ldots, v_{m(l)}) = v_{(l)} \in R^m, \quad 1 \leqslant l \leqslant q.$$

Назовем *полной матрицей экспериментальных данных* входных переменных ХТП (6) $q \times m(m+3)/2$-матрицу вида

$$U = [\hat{u}_{(1)}, \ldots, \hat{u}_{(l)}, \ldots, \hat{u}_{(q)}]^{\text{т}} \in M_{q,m(m+3)/2}(R),$$

соответственно, вектор

$$w_i = \text{col}(w_{i(1)} - w_i(\omega), \ldots, w_{i(l)} - w_i(\omega), \ldots, w_{i(q)} - w_i(\omega)) \in R^q$$

назовем *полным вектором экспериментальных данных* i-й выходной переменной.

Далее, с учетом того, что в системе (5) каждая матрица B_i является верхней треугольной, структура i-го уравнения ($i = 1, \ldots, n$) данной системы примет вид:

$$w_i(\omega + v) = c_i + \sum_{1 \leqslant j \leqslant m} a_{ij}v_j + \sum_{1 \leqslant r \leqslant s \leqslant m} b_{irs}v_r v_s + \varepsilon_i(\omega, v). \quad (7)$$

Ясно, что в силу алгебраической структуры уравнения (7) задача параметрической идентификации (2) должна решаться на некоторой базе q экспериментов относительно следующей группы векторов (размерности $m(m+3)/2$):

$$\begin{cases} z_1 = \mathrm{col}(a_{11}, \ldots, a_{1m}, b_{111}, \ldots, b_{1rs}, \ldots, b_{1mm}) \in R^{m(m+3)/2}, \\ \qquad\qquad 1 \leqslant r \leqslant s \leqslant m, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ z_i = \mathrm{col}(a_{i1}, \ldots, a_{im}, b_{i11}, \ldots, b_{irs}, \ldots, b_{imm}) \in R^{m(m+3)/2}, \\ \qquad\qquad 1 \leqslant r \leqslant s \leqslant m, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ z_n = \mathrm{col}(a_{n1}, \ldots, a_{nm}, b_{n11}, \ldots, b_{nrs}, \ldots, b_{nmm}) \in R^{m(m+3)/2}, \\ \qquad\qquad 1 \leqslant r \leqslant s \leqslant m; \end{cases} \tag{8}$$

очевидно, что данная группа векторов полностью определяет (задает) элементы матрицы $A = w(\omega)^{(1)} \in M_{n,m}(R)$ и матриц $B_i \in M_{m,m}(R)$, $i = 1, \ldots, n$ в структуре регрессионных уравнений системы (5); ясно, что вектор c задает опорный режим

$$c = w(\omega) \in R^n.$$

Теперь можно привести аналитическое решение задачи параметрической идентификации модели билинейно-тензорной регрессии ХТП только за счет апостериорной информации на базе предварительных q экспериментов.

Утверждение 3. *Задача идентификации* (2) *в терминах параметров* (8) *регрессионной модели* (5) *имеет решение*

$$z_i^* = U^+ w_i, \;\; 1 \leqslant i \leqslant n,$$

где U — полная матрица экспериментальных данных входных воздействий (6), *w_i — полный вектор экспериментальных данных i-й выходной переменной ХТП* ($i = 1, \ldots, n$), *индуцированной переменными* (6).

Доказательство. Далее приведем лишь схему доказательства. Как следует из стандартных рассуждений регрессия (5) для каждого l-го эксперимента согласно соотношениям (6), (7) приобретает следующий компактный вид:

$$w_{i(l)} - w_i(\omega) = \hat{u}_{(l)} z_i + \varepsilon_{i(l)}, \;\; i = 1, \ldots, n.$$

Таким образом, если переформулировать согласно последней системе оптимизационную задачу параметрической идентификации (2) применительно к уравнениям регрессии в тензорной структуре (5), то приходим к следующей многокритериальной постановке относительно векторов z_i, $i = 1, \ldots, n$:

$$\begin{cases} \min ||\hat{w}_1 - Uz_1||_{R^q}, \\ \min ||z_1||_{R^{m(m+3)/2}}, \end{cases}$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$\begin{cases} \min ||\hat{w}_i - Uz_i||_{R^q}, \\ \min ||z_i||_{R^{m(m+3)/2}}, \end{cases}$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$\begin{cases} \min ||\hat{w}_n - Uz_n||_{R^q}, \\ \min ||z_n||_{R^{m(m+3)/2}}. \end{cases}$$

Несложно установить, что данная многокритериальная постановка имеет (согласно формуле (50) [8, с. 35]) единственное нормальное псевдорешение решение $U^+\hat{w}_i$, $1 \leqslant i \leqslant n$, относительно векторов z_i, $1 \leqslant i \leqslant n$.

Следствие 1 [9, с. 263]. *Пусть $z_i^* = U^+\hat{w}_i$, $1 \leqslant i \leqslant n$, тогда каждый вектор $z \in R^{1+m(m+3)/2}$ параметров регрессионной модели* (5), *характеризующей поведение ХТП, такой, что $z \neq z_i^*$ удовлетворяет следующему условию:*

$$а)\ \min ||\hat{w}_i - Uz||_{R^q} > \min ||\hat{w}_i - Uz_i^*||_{R^q},$$

или, в противном случае, получаем важное соответствие

$$б)\ \min ||\hat{w}_i - Uz||_{R^q} = \min ||\hat{w}_i - Uz_i^*||_{R^q},$$

при этом

$$||z||_{R^{m(m+3)/2}} > ||z_i||_{R^{m(m+3)/2}}.$$

Замечание 2. Оценки а), б) главным образом зависят от объема апостериорной информации при формировании матрицы U и векторов $\hat{w}_i$, а именно, если $q > m(m+3)/2$, то, скорее всего, имеет место вариант а), если $q \leqslant m(m+3)/2$, то весьма вероятно, что в математическом моделировании ХТП присутствует позиция б).

Оптимизация режима ХТП на базе билинейно-тензорной интерполяции его функциональной модели. Заманчивая идея создать инженерные проекты и алгоритмы, адаптирующиеся к изменяющимся условиям исследуемых (в рамках этих проектов) ХТП, требует использования нелинейных регрессионных моделей класса (5), оптимально гибких (перестраиваемых) в ходе варьирования экспериментальных данных. Поэтому параметрическая идентификация функциональной модели ХТП класса регрессий (5), исследованная в предыдущем разделе, являлась по существу необходимым "технологическим" требованием при решении задачи синтеза управления $v \in R^m$. Однако вариантов подобного управления, очевидно, много, и необходимо выбрать среди них тот, который был бы оптимален с точки зрения некоторого формального критерия, характеризующего определенное физико-техническое качество данного управления. Далее рассмотрим задачу оптимизации в постановке в) (с приоритетным выбором весовых коэффициентов r_i, $1 \leqslant i \leqslant n$ [10]) и обсудим алгоритмическую технику построения режима *оптимального* управления $v^* \in R^m$. Но прежде рассмотрим данную задачу в варианте оптимизации *отдельной* переменной ХТП-вектора $w(\omega + v) \in R^n$.

Утверждение 4. *Пусть* $D_i = (B_i + B_i^{\text{т}}) \in M_{m,m}(R)$, $(i = 1, \ldots, n)$, *где* B_i *— матрица идентифицированной билинейно-тензорной регрессионной системы* (5). *Тогда при варьировании координат вектора управляющих воздействий* $v \in R^m$ *показатель функционального качества ХТП вида*

$$J_i(v) = w_i(\omega + v) \quad (i = 1, \ldots, n)$$

может иметь внутренний экстремум (*при* $\varepsilon(\omega, v) = 0$) *только в точке* (*режиме*)

$$v^* = -D_i^{-1} A^{\text{т}} e_i \in R^m, \tag{9}$$

где $\{e_1, \ldots, e_n\}$ *— стандартный базис в* R^n, *при этом справедливы положения*:

- *если* $v^{\text{т}} D_i v$ *— отрицательно определенная квадратичная форма, то функционал качества* $J_i(v)$ *имеет в режиме* v^* *максимум*;
- *если* $v^{\text{т}} D_i v$ *— положительно определенная квадратичная форма, то функционал качества* $J_i(v)$ *имеет в режиме* v^* *минимум*;
- *если* $v^{\text{т}} D_i v$ *— квадратичная форма, принимающая как положительные, так и отрицательные значения, то функционал качества* $J_i(v)$ *не имеет в режиме* v^* *ни максимум, ни минимума.*

Замечание 3. В двух первых случаях знакоопределенности квадратичной формы $v^{\text{т}} D_i v$ экстремальная точка (9) — точка эллиптического типа, в третьем случае данная точка имеет гиперболический тип (седловая точка).

Доказательство утверждения 4. Поскольку

$$J_i(v) = c_i + e_i^{\text{т}} A v + v^{\text{т}} B_i v,$$

то необходимые условия локального экстремума имеют [11, с. 334] вид

$$\partial(c_i + e_i^{\text{т}} A v + v^{\text{т}} B_i v)/\partial v_1 = 0,$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$\partial(c_i + e_i^{\text{т}} A v + v^{\text{т}} B_i v)/\partial v_n = 0,$$

что эквивалентно системе алгебраических уравнений

$$e_i^{\text{т}} A e_1 + e_1^{\text{т}} B_i v + e_1^{\text{т}} B_i^{\text{т}} v = 0,$$

. . . .

$$e_i^{\text{т}} A e_n + e_n^{\text{т}} B_i v + e_n^{\text{т}} B_i^{\text{т}} v = 0,$$

которые (как несложно убедиться) определяют в пространстве R^m геометрические координаты (9) для стационарной точки функционала $J_i(v)$.

Вместе с тем знакоопределенность второго дифференциала

$$d^2 J_i(v^*) = \sum_{1\leqslant g\leqslant m} \sum_{1\leqslant p\leqslant m} \partial^2 J_i(v)/\partial v_g v_p|_{v^* v_g v_p} = 2^{-1} v^{\text{т}} D_i v$$

определяет достаточные условия [11, с. 335] для локального экстремума в критической точке (9).

Координаты стационарной точки (9) позволяют ответить на вопрос о значении функционала $J_i(v)$, когда данная точка является точкой относительного минимума (или максимума), что констатирует следующее предложение:

Следствие 2. *Если D_i является отрицательно определенной (положительно определенной) матрицей, то максимальное (соответственно минимальное) значение функционала $J_i(v^*)$ равно $J_i(v^*) = c_i - e_i^{\text{т}} A D_i^{-1} A^{\text{т}} e_i/2$, где c_i — i-я координата вектора $c \in R^n$ системы* (5).

Доказательство строится подстановкой (9) в (1).

Переходим теперь к исследованию более сложного (задача в) варианта задачи оптимизации характеристик ХТП, который играет фундаментальную роль в более реалистических и одновременно более трудных задачах при расчете оптимальных технологических параметров режима функционирования ХТП. Его основой является методологическое положение — каждый функционал $J_i(v)$, $1 \leqslant i \leqslant n$, при соответствующем истолковании может быть обобщен на случай целевого функционала (3). Таким образом, утверждение 4 и формула (9) позволяют за конечную последовательность алгоритмических действий найти *точные* геометрические координаты стационарной точки задачи оптимизации (3).

Утверждение 5. *Пусть $D_i = (B_i + B_i^{\text{т}}) \in M_{m,m}(R)$, $1 \leqslant i \leqslant n$, где каждая B_i — матрица регрессионной системы* (5) *и diag*[...] — *диагональная $n\times n$-матрица. Тогда вектор $v^* \in R^m$ стационарной точки задачи оптимизации* (3) (*задача максимизации взвешенно-усредненной оценки качества ХТП*) *имеет вид*

$$v^* = -(r_1 D_1 + \ldots + r_n D_n)^{-1}((e_1 + \ldots + e_n)^{\text{т}} diag[r_1, \ldots, r_n] A)^{\text{т}} \in R^m, \tag{10}$$

при этом достаточным условием, что v^* обеспечивает для ХТП качество

$$\max\{F(v) :\ v \in R^m\},$$

$$F(v) = \sum_{i=1,\ldots,n} r_i J_i(v),$$

является следующее требование: стационарная точка v^* *имеет эллиптический тип, что равносильно положению*

$$\det[d_{ij}]_p < 0, \quad p = 1, \ldots, m, \tag{11}$$

где $[d_{ij}]_p \in M_{p,p}(R)$, $p = 1, \ldots, m$, *— главные подматрицы* [7, *с.* 30] *матрицы*

$$D = (r_1 D_1 + \ldots + r_n D_n) \in M_{m,m}(R),$$

эквивалентно тому, что собственные числа λ_p *матрицы* D *отвечают неравенствам*

$$\lambda_p < 0, \quad p = 1, \ldots, m. \tag{12}$$

Доказательство. Основные положения доказательства повторяют вывод утверждения 4, поэтому ограничимся схемой доказательства. Необходимые условия локального экстремума имеют [5, с. 500] вид n уравнений:

$$r_1 \partial(c_1 + e_1^{\text{т}} A v + v^{\text{т}} B_1 v)/\partial v_1 + \ldots + r_i \partial(c_i + e_i^{\text{т}} A v + v^{\text{т}} B_i v)/\partial v_n + \ldots +$$
$$+ r_n \partial(c_n + e_n^{\text{т}} A v + v^{\text{т}} B_n v)/\partial v_1 = 0,$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$
$$r_1 \partial(c_1 + e_1^{\text{т}} A v + v^{\text{т}} B_1 v)/\partial v_n + \ldots + r_i \partial(c_i + e_i^{\text{т}} A v + v^{\text{т}} B_i v)/\partial v_1 + \ldots +$$
$$+ r_n \partial(c_n + e_n^{\text{т}} A v + v^{\text{т}} B_n v)/\partial v_n = 0,$$

что эквивалентно системе n уравнений:

$$r_1(e_1^{\text{т}} A e_1 + e_1^{\text{т}} B_1 v + e_1^{\text{т}} B_1^{\text{т}} v) + \ldots + r_i(e_i^{\text{т}} A e_1 + e_1^{\text{т}} B_i v + e_1^{\text{т}} B_i^{\text{т}} v) + \ldots +$$
$$+ r_n(e_n^{\text{т}} A e_1 + e_1^{\text{т}} B_n v + e_1^{\text{т}} B_n^{\text{т}} v) = 0,$$
$$r_1(e_1^{\text{т}} A e_n + e_n^{\text{т}} B_1 v + e_n^{\text{т}} B_1^{\text{т}} v) + \ldots + r_i(e_i^{\text{т}} A e_n + e_n B_i v + e_n^{\text{т}} B_i^{\text{т}} v) + \ldots +$$
$$+ r_n(e_n^{\text{т}} A e_n + e_n^{\text{т}} B_n v + e_n^{\text{т}} B_n^{\text{т}} v) = 0.$$

Последняя система приводит к решению (10).

Если алгебраические условия (11) (равносильно (12)) не выполняются, то критическая точка (10) функционального качества ХТП является либо [11, с. 528] гиперболической (т.е. седловой точкой), либо параболической точкой и, следовательно, требуется дополнительный геометрический анализ критических регулируемых переменных ХТП, выраженных формулой (10); говоря более формально, можно констатировать: наличие седловой точки гарантирует смена хотя бы в одном (но не во всех) неравенстве “$<$” из (11) (или (12)) на неравенство “$>$”, при этом аналогичная смена отношения “$<$” на “$\leqslant$”, возможно, вызывает в аналитическом решении задачи оптимизации структуру параболической точки.

Изложенный подход методологически расширяет стандартную процедуру планирования эксперимента ХТП [1]. При этом если расчетные (прогнозируемые) координаты стационарной точки (10) по каким-либо химико-техническим параметрам выходят за область адекватности идентифицированной модели (5), то необходимо провести дополнительный натурный эксперимент, т.е. осуществить ХТП с вектором $v \in R^m$, максимально близким к критическим регулируемым переменным ХТП (10), с последующим внесением полученного результата в расширенную (таким образом) матрицу экспериментальных данных U. После чего необходимо сделать пересчет [12] всех изложенных ранее этапов процесса оптимизации регулируемых переменных ХТП; при необходимости подобный дополнительный эксперимент, параметрическую идентификацию ХТП вида (2) и квадратичную оптимизацию (3) необходимо повторить.

Заключение. Задача аналитического описания апостериорного множества данных возникает во многих разделах науки и техники и связана с моделированием и/или идентификацией когнитивных систем. В этом контексте обсуждены теоретические вопросы регрессионно-тензорного моделирования многофакторного ХТП в классе (1) и на его базе даны строгие аналитические интерпретации многосвязных технических условий, налагаемых как нелинейными ограничениями теоретического характера, так и обеспечивающих при восстановлении прецизионной плунжерной пары оптимальный режим низкотемпературного химического нанесения сульфохромированного слоя.

Проведено детальное математическое изучение вопроса существования означенной регрессионной модели, при этом особое внимание уделено роли дифференциального исчисления (в конструкциях сильных производных Фреше) в конечномерных евклидовых пространствах для получения качественных условий (утверждение 2) в решении задачи удовлетворительного моделирования.

С общих позиций, формализованных критерием (2), рассмотрена задача МНК-идентификации координат ковариантных тензоров как линейных, так и билинейных. Получено в терминах утверждения 3 подтверждение алгоритмической теории нелинейного регрессионно-тензорного моделирования ХТП с точки зрения задания конструктивных правил расчета параметров (8) с учетом условий, приемлемых для применения оптимальной оценки (2) операторов модели регрессии (1).

Важность изложенной теории математического моделирования ХТП подтверждена тем, что она является не только аналитической (приводит к эффективным алгоритмам для синтеза оптимальной (максимальной) толщины сульфохромированного слоя); предложена конкретная формула (9) расчета геометрических координат стационарной точки оптимального режима ХТП согласно целевому критерию (3). Приведены достаточные условия, гарантирующие на практике заданное качество прецизионной плунжерной пары.

Работа поддержана грант-контрактами: Программа фундаментальных исследований № 15 Отделения энергетики, машиностроения, механики и процессов управления РАН, Грант Президента Российской Федерации по государственной поддержке научных школ Российской Федерации (№ НШ-1676.2008.1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А д л е р Ю. П., М а р к о в а Е. В., Г р а н о в с к и й Ю. В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1976. – 255 с.
2. Б е р н ш т е й н А. В., К у л е ш о в А. П., Б у р н а е в Е. В. Об одной методологии построения аппроксимаций многомерных зависимостей // Пленарные и избранные докл. IV Междунар. конф. "Параллельные вычисления и задачи управления" PACO'2008. – Москва, 27–29 октября 2008. – М.: Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН. – 2009. – С. 56–62.
3. А н д р и е в с к и й Б. Р., Ф р а д к о в А. Л. Элементы математического моделирования в программных средах MATLAB и SCILAB. – СПб.: Наука, 2001. – 288 с.
4. А к и в и с М. А., Г о л ь д б е р г В. В. Тензорное исчисление. – М.: Наука, 1972. – 352 с.
5. К о л м о г о р о в А. Н., Ф о м и н С. В. Элементы теории функций и функционального анализа. – М.: Наука, 1988. – 544 с.
6. Д у м н о в С. Н., К у м е н к о А. Е., Р у д ы х А. Г., Р у с а н о в В. А. Регрессионно-тензорный анализ задачи оптимизации параметров физико-технического процесса // Современные технологии. Системный анализ. Моделирование. – 2009. – № 1. – С. 102–108.
7. Х о р н Р., Д ж о н с о н Ч. Матричный анализ. – М.: Мир, 1988. – 656 с.
8. Г а н т м а х е р Ф. Р. Теория матриц. – М.: Наука, 1988. – 552 с.
9. Л а н к а с т е р П. Теория матриц. – М.: Наука, 1982. – 328 с.
10. М а к а р о в И. М., В и н о г р а д с к а я Т. М., Р у б ч и н с к и й А. А., С о к о л о в В. Б. Теория выбора и принятия решений. – М.: Наука, 1982. – 328 с.
11. К о р н Г., К о р н Т. Справочник по математике. – М.: Наука, 1974. – 832 с.
12. А г а ф о н о в С. В., Ш а р п и н с к и й Д. Ю., Р у с а н о в В. А., У д и л о в Т. В. Гибридный регрессионный комплекс "ГРЕК" // Свидетельство Федеральной службы по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам о регистрации программы для ЭВМ, № 2008614737 от 2.10.2008 г.

Статья поступила в редакцию 30.04.2009

Вячеслав Анатольевич Русанов родился в 1955 г., окончил в 1978 г. Казанский авиационный институт им. А.Н. Туполева. Д-р. физ.-мат. наук, главный научный сотрудник Института динамики систем и теории управления СО РАН. Автор 133 научных работ в области математической теории систем, математического моделирования, теории идентификации сложных систем.

V.A. Rusanov (b. 1955) graduated from the Kazan' Aviation Institute n. a. A.N. Tupolev in 1978. D. Sc. (Phys.-Math.), chief researcher of the Institute for Systems Dynamics and Control Theory of Siberian Branch of RAS. Author of 133 publications in the field of mathematical theory of systems, mathematical simulation, theory of identification of complex systems.

Сергей Викторович Агафонов родился в 1959 г., окончил в 1981 г. Иркутский сельскохозяйственный институт. Канд. техн. наук, старший преподаватель кафедры “Ремонт машин и технология металлов” Ордена Дружбы народов Иркутской государственной сельскохозяйственной академии. Автор 14 научных работ в области химико-термической обработки.

S.V. Agafonov (b. 1959) graduated from the Irkutsk Agricultural Institute in 1981. Ph. D. (Eng.), senior teacher of "Repair of Machines and Technology of Metals" department of The Order of Friendship of Peoples Irkutsk State Agricultural Academy. Author of 14 publications in the field of chemical and thermal treatment.

Сергей Николаевич Думнов родился 1983 г., в 2005 г. окончил ФГОУ ВПО Восточно-Сибирский институт МВД РФ (ВСИ МВД РФ). Канд. техн. наук, старший преподаватель кафедры “Автотехническая экспертиза” ВСИ МВД РФ. Автор девяти научных работ в области технологий металлообработки.

S.N. Dumnov (b. 1983) graduated from the East-Siberian Institute of RF Ministry for Domestic Affairs in 2005. Ph. D. (Eng.), senior teacher of "Auto Technical Expertise" department of the East-Siberian Institute of RF Ministry for Domestic Affairs. Author of 9 publications in the field of technologies of metal treatment.

Алексей Геннадьевич Рудых родился 1983 г., окончил в 2005 г. Иркутское высшее военное авиационное инженерное училище. Аспирант Иркутского высшего военного авиационного инженерного училища. Автор четырех научных работ в области компьютерного моделирования сложных технических систем.

A.G. Rudykh (b. 1983) graduated from the Irkutsk Higher Military Aviation Engineering School in 2005. Post-graduate of the Irkutsk Higher Military Aviation Engineering School. Author of 4 publications in the field of computer simulation of complex systems.