

Научная статья
УДК 517.983:519.6:544.4
doi: 10.34822/1999-7604-2022-4-49-58

МЕТОД РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ТИХОНОВА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ В МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ КИНЕТИКИ ПРОЦЕССА НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ

Ван Хуен Лэ^{1✉}, Андрей Николаевич Фирсов²

^{1,2} Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

¹ huyenlevan120193@gmail.com ✉, <https://orcid.org/0000-0002-8645-821X>

² anfirs@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4483-3381>

Аннотация. Представлено решение обратной задачи приближенного определения констант скорости реакций по заданным концентрациям исходного вещества и продуктов в рамках математической модели кинетики процесса нефтепереработки с использованием методов конечных разностей, интерполировании данных (кубического сплайна) и метода регуляризации Тихонова. Найдены приближительные константы скорости реакций, которые являются единственными и непрерывно зависят от исходных данных, а также необходимы для прогнозирования концентрации исходного вещества и продуктов в любой момент времени и определения показателей в реакциях процесса нефтепереработки – энергии активации, температуры и других внешних условий.

Ключевые слова: обратная задача, некорректно поставленная задача, математическая модель, химическая кинетика, процесс нефтепереработки, метод конечных разностей, метод кубического сплайна, метод регуляризации Тихонова

Для цитирования: Лэ В. Х., Фирсов А. Н. Метод регуляризации Тихонова для решения обратной задачи в математической модели кинетики процесса нефтепереработки // Вестник кибернетики. 2022. № 4 (48). С. 49–58. DOI 10.34822/1999-7604-2022-4-49-58.

Original article

TIKHONOV'S REGULARIZATION METHOD FOR SOLVING THE INVERSE PROBLEM IN A MATHEMATICAL MODEL OF THE KINETICS OF OIL REFINING PROCESS

Van Huyen Le^{1✉}, Andrey N. Firsov²

^{1,2} Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Saint Petersburg, Russia

¹ huyenlevan120193@gmail.com ✉, <https://orcid.org/0000-0002-8645-821X>

² anfirs@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4483-3381>

Abstract. The study presents a solution to the inverse problem of approximate constants determination of response rate according to the given concentrations of initial substance and products in the framework of mathematical model of kinetics of oil refining process. In the course of the study, the finite difference method, the data interpolation method (the cubic spline), and the Tikhonov regularization method were used. Response rate approximate constants are identified. They are unique and depend on the initial data. Response rate approximate constants aid in forecasting concentrations of the initial substance and products at any moment and determining indicators in oil refining process reactions, such as energy activation, temperature, and other external conditions.

Keywords: inverse problem, ill-posed problem, mathematical modeling, chemical kinetics, oil refining process, finite difference method, cubic spline method, Tikhonov's regularization method

For citation: Le V. H., Firsov A. N. Tikhonov's Regularization Method for Solving the Inverse Problem in a Mathematical Model of the Kinetics of Oil Refining Process // Proceedings in Cybernetics. 2022. No. 4 (48). P. 49–58. DOI 10.34822/1999-7604-2022-4-49-58.

ВВЕДЕНИЕ

В химической науке в целом и в физической химии, в частности, есть особая область – химическая кинетика, изучающая механизмы и закономерности протекания химических процессов во времени. Химическая кинетика рассматривает и устанавливает зависимости скорости химических реакций от концентраций реагентов, температуры и других внешних условий. С момента появления химическая кинетика всегда была краеугольным камнем, на котором стоит химическая промышленность – нефтехимия, нефтепереработка и производство полимеров [1].

Современный этап развития областей нефтехимии и нефтепереработки характеризуется внедрением методов математического моделирования для описания процессов подготовки и переработки нефтяного сырья с целью улучшений технологий. Надежная информация о параметрах моделей и закономерности их изменения является основой правильного математического описания нефтяных систем и процессов и гарантией верных технологических решений [2].

Процесс гидрокрекинга используется с целью увеличения количества вырабатываемых светлых продуктов нефти. В процессе гидрокрекинга могут перерабатываться легкие и тяжелые дистилляты первичной переработки в смеси с водородсодержащим газом на комплексных катализаторах. В современной промышленности гидрокрекинг является процессом получения ценного топлива – керосинового и дизельного [3].

Для процессов нефтепереработки и нефтехимии характерен сложный состав реагирующей смеси, большое количество одновременно протекающих реакций и взаимных превращений реагентов. Структура кинетических уравнений реакций зависит от физико-химических представлений состава реагирующей смеси и получаемых продуктов. На основе реакции гидрокрекинга были построены математические модели одного из процессов нефтепереработки с использованием системы обыкновенных дифференциальных уравнений для описания математической модели кинетики [4–6]. Для этого взята гипотетическая гомогенная химическая реакция превращения

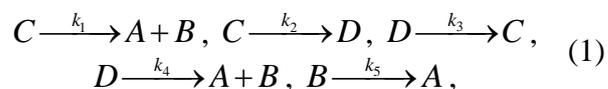
углеводородов парафинового ряда в процессе каталитического крекинга [4].

Решение данной системы уравнений позволило бы прогнозировать и управлять превращением концентраций исходного вещества и продуктов и решать проблемы масштабного перехода от лабораторных исследований к работе промышленных агрегатов [5].

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Математическая модель кинетики процесса нефтепереработки. Задача математического моделирования каталитического крекинга рассмотрена в [2, 4–7]. В рамках данной работы будем рассматривать математическую модель кинетики процесса нефтепереработки, которая представляет систему однородных дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами [4]. Пусть исходная смесь состоит из одного тяжелого углеводорода C . Под действием температуры и соударений углеводород C распадается на углеводороды A , B , а также превращается в изомер D с тем же количеством атомов углерода, что и в исходной молекуле. Вещество D также распадается на A и B , либо обратно превращается в C . Пусть продукты реакции A , B – это более легкие углеводороды, и с ними никаких превращений далее не происходит [4].

Схема химических превращений в описанном выше процессе каталитического крекинга будет иметь следующий вид:



где k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 – константы скорости реакций, c^{-1} [4].

Скорость реакций в схеме превращений (1) определяется следующими формулами:

$$\begin{aligned} v_1 &= -\frac{dC}{dt} = \frac{dA}{dt} = \frac{dB}{dt} = k_1[C], \\ v_2 &= -\frac{dC}{dt} = \frac{dD}{dt} = k_2[C], \\ v_3 &= -\frac{dD}{dt} = \frac{dC}{dt} = k_3[D], \end{aligned} \quad (2)$$

$$v_4 = -\frac{dD}{dt} = \frac{dA}{dt} = \frac{dB}{dt} = k_4 [D],$$

$$v_5 = -\frac{dB}{dt} = \frac{dA}{dt} = k_5 [B],$$

где v_1, v_2, v_3, v_4, v_5 – скорость реакций, $\frac{\text{моль}}{\text{л.с}}$;

$\frac{dA}{dt}, \frac{dB}{dt}, \frac{dC}{dt}, \frac{dD}{dt}$ – изменение концентрации веществ A, B, C, D за малое время, $\frac{\text{моль}}{\text{л.с}}$; $[B], [C], [D]$ – концентрация ве-

ществ $B, C, D, \frac{\text{моль}}{\text{л}}$. Из (2) следует, что изменение концентрации веществ A, B, C, D за малое время определяются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= k_1 [C] + k_4 [D] + k_5 [B], \\ \frac{dB}{dt} &= k_1 [C] + k_4 [D] - k_5 [B], \\ \frac{dC}{dt} &= -k_1 [C] - k_2 [C] + k_3 [D], \\ \frac{dD}{dt} &= k_2 [C] - k_3 [D] - k_4 [D]. \end{aligned} \quad (3)$$

Математическая модель кинетики реакции каталитического крекинга, описанная схемой превращений (1) и (3), представляет собой систему дифференциальных уравнений [5]:

$$\begin{cases} \frac{dy_1(t)}{dt} = k_5 y_2(t) + k_1 y_3(t) + k_4 y_4(t); \\ \frac{dy_2(t)}{dt} = -k_5 y_2(t) + k_1 y_3(t) + k_4 y_4(t); \\ \frac{dy_3(t)}{dt} = -(k_1 + k_2) y_3(t) + k_3 y_4(t); \\ \frac{dy_4(t)}{dt} = k_2 y_3(t) - (k_2 + k_4) y_4(t), \end{cases} \quad (4)$$

где $y_1(t), y_2(t), y_3(t), y_4(t)$ – концентрация веществ A, B, C, D в момент времени t [5]. Предположим, что в начальный момент времени $t=0$ концентрация веществ A, B, C, D равна $y_1(0), y_2(0), y_3(0), y_4(0)$ [5].

Рассмотрим две следующие задачи, построенные в рамках математической модели кинетики реакции каталитического крекинга (4).

Задача 1. По заданным константам скорости реакций $k_1 = k_{10}, k_2 = k_{20}, k_3 = k_{30}, k_4 = k_{40}, k_5 = k_{50}$ и концентрациям исходного вещества продуктов A, B, C, D в начальный момент времени $t=0$ определить $y_1(t), y_2(t), y_3(t), y_4(t)$.

Введенные условия представляет собой задачу построения решения линейной системы дифференциальных уравнений с заданными начальными условиями (задачу Коши). Эту задачу будем называть прямой задачей в рамках математической модели (4). Решение задачи 1 позволяет определить концентрацию веществ A, B, C, D в любой момент времени. Можно переписать (4)

в матрично-векторном виде: $\frac{dY(t)}{dt} = AY(t)$, где

$A = (a_{ij})_{i,j=1}^4$ – матрица с элементами k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 ; $Y(t) = (y_1(t), y_2(t), y_3(t), y_4(t))^T$. Не-

трудно доказать, что прямая задача корректно поставлена по Адамару (см. определение корректной задачи в [7–10]). Действительно, существование и единственность решения задачи 1 можно вывести из теоремы существования и единственности решения задачи Коши. Решение задачи 1 имеет следующий вид: $Y(t) = e^{At} Y(0)$, где

$Y(0) = (y_1(0), y_2(0), y_3(0), y_4(0))^T$ – вектор начальных условий; e^{At} определяется соотно-

шением: $e^{At} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(At)^k}{k!}$. В данной работе рас-

смотрим случай, когда начальное условие $Y(0)$ не изменяется. Будем доказывать, что при малом изменении матрицы A решение $Y(t)$ задачи 1 тоже мало изменяется.

То есть, $\|Y_1(t) - Y_0(t)\| \rightarrow 0$ при $\|A_1 - A_0\| \rightarrow 0$,

где $Y_1(t) = e^{A_1 t} Y_0(0), Y_0(t) = e^{A_0 t} Y_0(0)$ – решение задачи 1 при $A = A_1, A = A_0$. Разность между $Y_1(t)$ и $Y_0(t)$ определяется неравен-

ством: $\|Y_1(t) - Y_0(t)\| \leq \|(e^{A_1 t} - e^{A_0 t})\| \|Y_0(0)\|$.

Имеем:

$$\begin{aligned} \|(e^{A_1 t} - e^{A_0 t})\| &= \left\| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(A_1 t)^k}{k!} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(A_0 t)^k}{k!} \right\| = \\ &= \left\| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} (A_1^k - A_0^k) \right\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \|A_1^k - A_0^k\|. \end{aligned} \quad (5)$$

Проанализируем (5): при $k = 1$ имеем $\|A_1 - A_0\| \rightarrow 0$. Пусть $A_1 = A_0 + \Delta$. Из $\|A_1 - A_0\| \rightarrow 0$ следует, что $\|\Delta\| \rightarrow 0$. При $k = 2$ имеем $\|A_1^2 - A_0^2\| \leq \|\Delta\| (2\|A_0\| + \|\Delta\|) \rightarrow 0$ при $\|\Delta\| \rightarrow 0$. При $k = 3$ имеем $\|A_1^3 - A_0^3\| \leq \|\Delta\| (3\|A_0\|^2 + 3\|A_0\|\|\Delta\| + \|\Delta\|^2)$ при $\|\Delta\| \rightarrow 0$. Делая то же самое для $k = 4, 5, 6, \dots$, получаем $\|A_1^k - A_0^k\| \rightarrow 0$ при $\|\Delta\| \rightarrow 0$. Отсюда $\|(e^{A_1 t} - e^{A_0 t})\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \|A_1^k - A_0^k\| \rightarrow 0$ при $\|\Delta\| \rightarrow 0$. В итоге получаем $\|Y_1(t) - Y_0(t)\| \rightarrow 0$ при $\|A_1 - A_0\| \rightarrow 0$, т. е. решение задачи 1 непрерывно зависит от матричного оператора A .

Задача 2. По заданным концентрациям исходного вещества и продуктов A, B, C, D в моменты времени $t_i, i = 1, 2, \dots$ определить k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 (т. е. $k_{10}, k_{20}, k_{30}, k_{40}, k_{50}$).

Задачу 2 будем называть обратной задачей по отношению к задаче 1 в рамках математической модели (4). В прикладных исследованиях, как правило, концентрацию веществ A, B, C, D можно измерить в любой момент времени t , т. е. нам известны $y_1(t), y_2(t), y_3(t), y_4(t)$. Для решения обратной задачи 2 будем использовать следующие методы: метод конечных разностей, метод кубического сплайна, метод регуляризации Тихонова. В результате проведенных расчетов будут найдены приближенные константы скорости реакций.

Метод конечных разностей. Применяя метод конечных разностей, из (4) получаем систему алгебраических уравнений относительно k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 :

$$\begin{cases} \frac{y_1(t+h) - y_1(t-h) - o(h^3)}{2h} = y_3(t)k_1 + y_4(t)k_4 + y_2(t)k_5, \\ \frac{y_2(t+h) - y_2(t-h) - o(h^3)}{2h} = y_3(t)k_1 + y_4(t)k_4 - y_2(t)k_5, \\ \frac{y_3(t+h) - y_3(t-h) - o(h^3)}{2h} = -y_3(t)k_1 - y_3(t)k_2 + y_4(t)k_3, \\ \frac{y_4(t+h) - y_4(t-h) - o(h^3)}{2h} = [y_3(t) - y_4(t)]k_2 - y_4(t)k_4. \end{cases} \quad (6)$$

Система (6) содержит пять неизвестных k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 . Подставляя $t = t_1, t = t_2$ в (6), получаем систему восьми алгебраических уравнений. Из них выбираем любых пять уравнений и имеем следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{y_1(t_1+h) - y_1(t_1-h) - o(h^3)}{2h} = y_3(t_1)k_1 + y_4(t_1)k_4 + y_2(t_1)k_5, \\ \frac{y_2(t_1+h) - y_2(t_1-h) - o(h^3)}{2h} = y_3(t_1)k_1 + y_4(t_1)k_4 - y_2(t_1)k_5, \\ \frac{y_3(t_1+h) - y_3(t_1-h) - o(h^3)}{2h} = -y_3(t_1)k_1 - y_3(t_1)k_2 + y_4(t_1)k_3, \\ \frac{y_4(t_1+h) - y_4(t_1-h) - o(h^3)}{2h} = [y_3(t_1) - y_4(t_1)]k_2 - y_4(t_1)k_4, \\ \frac{y_1(t_2+h) - y_1(t_2-h) - o(h^3)}{2h} = y_3(t_2)k_1 + y_4(t_2)k_4 + y_2(t_2)k_5. \end{cases} \quad (7)$$

Систему (7) можно представить в векторно-матричном виде $AK = B$, где $A = (a_{ij})_{i,j=1}^5$ – матрица с элементами $y_2(t_1), y_3(t_1), y_4(t_1), y_2(t_2), y_3(t_2), y_4(t_2)$; $K = (k_1, k_2, k_3, k_4, k_5)^T$; B – вектор левой части. Отметим, что процесс кинетики реакции каталитического крекинга произошел, поэтому система (7) всегда имеет хотя бы одно решение. Искомое решение $K_0 = (k_{10}, k_{20}, k_{30}, k_{40}, k_{50})^T$ задачи 2 является точным решением системы (7).

Пренебрегая $o(h^3)$, из (7) получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{y_1(t_1+h) - y_1(t_1-h)}{2h} = y_3(t_1)k_1 + y_4(t_1)k_4 + y_2(t_1)k_5, \\ \frac{y_2(t_1+h) - y_2(t_1-h)}{2h} = y_3(t_1)k_1 + y_4(t_1)k_4 - y_2(t_1)k_5, \\ \frac{y_3(t_1+h) - y_3(t_1-h)}{2h} = -y_3(t_1)k_1 - y_3(t_1)k_2 + y_4(t_1)k_3, \\ \frac{y_4(t_1+h) - y_4(t_1-h)}{2h} = [y_3(t_1) - y_4(t_1)]k_2 - y_4(t_1)k_4, \\ \frac{y_1(t_2+h) - y_1(t_2-h)}{2h} = y_3(t_2)k_1 + y_4(t_2)k_4 + y_2(t_2)k_5. \end{cases} \quad (8)$$

Метод кубического сплайна. Значения $y_2(t_1), y_3(t_1), y_4(t_1), y_2(t_2), y_3(t_2), y_4(t_2)$ получаются из эксперимента, а $y_1(t_1+h), y_1(t_1-h), y_2(t_1+h), y_2(t_1-h), y_3(t_1+h), y_3(t_1-h), y_4(t_1+h), y_4(t_1-h), y_1(t_2+h), y_1(t_2-h)$ получаются методом кубического сплайна.

Метод регуляризации Тихонова. Поскольку $y_2(t_1), y_3(t_1), y_4(t_1), y_2(t_2), y_3(t_2), y_4(t_2)$ измеряются экспериментально, то они могут содержать ошибки измерения и округления. Значения $y_1(t_1+h), y_1(t_1-h), y_2(t_1+h), y_2(t_1-h), y_3(t_1+h), y_3(t_1-h), y_4(t_1+h), y_4(t_1-h), y_1(t_2+h), y_1(t_2-h)$ найдены интерполированием, поэтому они также могут содержать не только ошибки округления, но и ошибки интерполяции. Можно переписать (8) в виде: $A_h K = B_b$, где A_h – приближение к матрице A , а B_b – приближение к вектору B . Задача решения системы (8) некорректно поставлена, потому что при малом изменении A_h и B_b ее решение может сильно измениться. В этом случае для решения системы (8) будем использовать метод регуляризации Тихонова [7–10]. Необходимо найти приближение к искомому решению K_0 , которое является единственным и непрерывно зависит от A_h, B_b .

Будут найдены приближенные константы скорости реакций по следующему условию:

$$\|A_h K - B_b\|^2 + \alpha \|K\|^2 \rightarrow \min_{\alpha} \min_K, \quad (9)$$

где $\alpha = const > 0$ – параметр регуляризации.

Из (2) вытекает регуляризирующее уравнение:

$$A_h^* A_h K + \alpha K = A_h^* B_b, \quad (10)$$

где A_h^* – сопряженный к матрице A_h . Решение системы (10), обозначаемое $K_\alpha = (k_{1\alpha}, k_{2\alpha}, k_{3\alpha}, k_{4\alpha}, k_{5\alpha})^T$, является регуляризованным решением уравнения $A_h K = B_b$ [7–10].

В методе регуляризации Тихонова необходимо найти параметр регуляризации α так, что K_α стремится к искомому решению K_0 , т. е. $\|K_\alpha - K_0\| \rightarrow 0$.

Проанализируем условие (9) и уравнение (10). С увеличением же параметра α регуляризованное решение K_α становится глаже и устойчивей, т. е. уменьшается норма решения $\|K_\alpha\|^2$, но увеличивается невязка $\|A_h K_\alpha - B_b\|^2$. Истина – посередине, т. е. при некотором умеренном параметре α регуляризованное решение K_α будет иметь и умеренную гладкость, и умеренную невязку. Существует несколько способов выбора параметра регуляризации [7–10]. В данной работе параметр α будет выбран исходя из непрерывности решения задачи 1.

Рассмотрим задачу 1. Матричный оператор A с элементами $k_1 = k_{1\alpha}, k_2 = k_{2\alpha}, k_3 = k_{3\alpha}, k_4 = k_{4\alpha}, k_5 = k_{5\alpha}$ обозначаем A_α , а с элементами $k_1 = k_{10}, k_2 = k_{20}, k_3 = k_{30}, k_4 = k_{40}, k_5 = k_{50}$ обозначаем A_0 . Решение задачи 1 с операторами $A = A_\alpha$ и $A = A_0$ обозначаем $Y_\alpha(t)$ и $Y_0(t)$. При малом изменении оператора A_α решение $Y_\alpha(t)$ тоже мало изменяется. Из $\|K_\alpha - K_0\| \rightarrow 0$ следует, что $\|A_\alpha - A_0\| \rightarrow 0$. Из свойства непрерывности решения задачи 1 следует, что $\|Y_\alpha(t) - Y_0(t)\| \rightarrow 0$ при $\|A_\alpha - A_0\| \rightarrow 0$. Отсюда $Y_\alpha(t)$ непрерывно зависит от K_α . При этом будет выбран параметр α так, что $\|Y_\alpha(t) - Y_0(t)\|$ достигает минимума. Для этого будем подставлять найденные приближенные константы скорости реакций $k_{1\alpha}, k_{2\alpha}, k_{3\alpha}, k_{4\alpha}, k_{5\alpha}$ в (4) и решать прямую задачу. Из решения прямой задачи рассчитываются концентрации веществ A, B, C, D в разные моменты времени, т. е. $Y_\alpha(t)$. Расчетные концентрации веществ A, B, C, D будут сравниваться с измеренными значениями.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим пример. Пусть нам известны концентрации веществ A, B, C, D в разные

моменты времени, т. е. $y_1(t), y_2(t), y_3(t), y_4(t)$ (табл. 1).

Таблица 1

Измеренные концентрации веществ A, B, C, D

$t(c)$	$y_1(t)$	$y_2(t)$	$y_3(t)$	$y_4(t)$
0	0	0	90	10
30	77,76206	12,47561	48,11464	6,76653
60	132,29327	7,46789	25,74512	4,37430
90	162,81084	4,12939	13,78771	2,74217
120	179,58861	2,26780	7,39035	1,68145
150	188,79792	1,24467	3,96468	1,01403
180	193,85216	0,68309	2,12871	0,60366
210	196,62600	0,37489	1,14389	0,35567
240	198,14831	0,20574	0,61518	0,20779
270	198,98377	0,11291	0,33111	0,12055

Примечание: составлено авторами на основании данных, полученных в ходе расчета: $t(c)$ – время, измеряемое в секундах; $y_1(t), y_2(t), y_3(t), y_4(t)$ – концентрация веществ A, B, C, D в момент времени t .

Используя метод кубического сплайна, вычислим $y_1(t_1+h), y_1(t_1-h), y_2(t_1+h), y_2(t_1-h), y_3(t_1+h), y_3(t_1-h), y_4(t_1+h), y_4(t_1-h), y_1(t_2+h), y_1(t_2-h)$ и построим систему (8) при $t_1 = 200, t_2 = 220, h = 0,001$. Решение системы (8) будет найдено методом регуляризации Тихонова. В результате проведенных расчетов находим приближенные константы скорости реакций $k_{1\alpha}, k_{2\alpha}, k_{3\alpha}, k_{4\alpha}, k_{5\alpha}$. Как указано выше, будет выбран параметр α так, что $\|Y_\alpha(t) - Y_0(t)\|$ достигает минимума, т. е. отклонение между расчетными и измеренными данными достигает минимума. Чтобы проверить совпадение между расчетными и измеренными значениями, будем использовать статистические параметры: коэффициент корреляции Пирсона R^2 и показатель эффективности Нэша – Сатклиффа (Nash–Sutcliffe efficiency, NSE) [11–13].

Коэффициент R^2 ($0 \leq R^2 \leq 1$) помогает предсказать, существует ли линейная корреляция между измеренными и расчетными концентрациями веществ A, B, C, D . Если $R^2 = 0$, то полно отсутствует линейная корреляция между измеренными и расчетными

концентрациями веществ A, B, C, D . Если $R^2 = 1$, то существует идеальная линейная корреляция между измеренными и расчетными концентрациями веществ A, B, C, D [11–13].

Показатель NSE ($-\infty < NSE \leq 1$) указывает, насколько хорошо график измеренных и расчетных данных соответствует линии 1:1. Если $NSE = 0$, то полностью отсутствует совпадение между измеренными и расчетными концентрациями веществ A, B, C, D . Если $NSE = 1$, то существует идеальное совпадение между расчетными и измеренными концентрациями веществ A, B, C, D [11–13].

Рис. 1 показывает зависимость от параметра регуляризации α суммы показателей NSE , рассчитанной формулой: $\sum NSE = NSE(y_1) + NSE(y_2) + NSE(y_3) + NSE(y_4)$, где $NSE(y_1), NSE(y_2), NSE(y_3), NSE(y_4)$ – показатели NSE при оценке совпадения между измеренными и расчетными концентрациями веществ A, B, C, D . Чем выше $\sum NSE$, тем лучше. Будем искать параметр α так, чтобы $\sum NSE = NSE(y_1) + NSE(y_2) + NSE(y_3) + NSE(y_4) \rightarrow 4$.

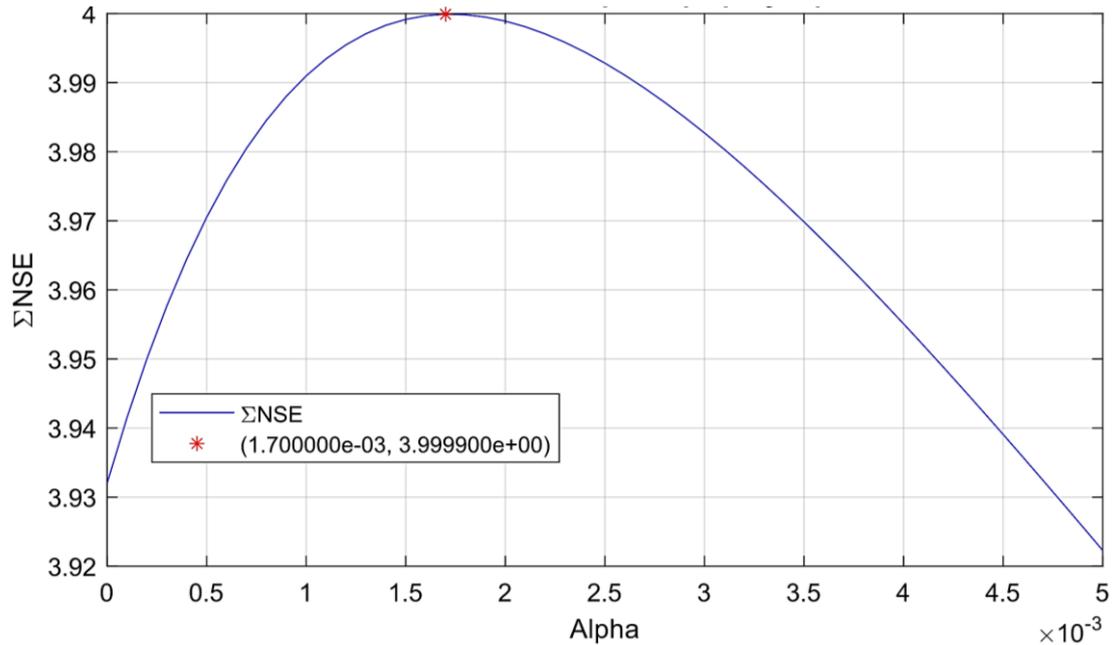


Рис. 1. Зависимость суммы показателей эффективности Нэша – Сатклиффа от параметра регуляризации
 Примечание: составлено авторами.

При $\alpha = 0,0017$ имеем $k_{1\alpha} = 0,02001$, $k_{2\alpha} = 0,00103$, $k_{3\alpha} = 0,00114$, $k_{4\alpha} = 0,02008$, $k_{5\alpha} = 0,09936$. Расчетные концентрации веществ A, B, C, D в разные моменты времени представлены в табл. 2.

Таблица 2

Расчетные концентрации веществ A, B, C, D при $\alpha = 0,0017$

$t(c)$	$y_1(t)$	$y_2(t)$	$y_3(t)$	$y_4(t)$
0	0	0	90	10
30	77,74094	12,56051	48,08937	6,78712
60	132,32963	7,53090	25,72160	4,39339
90	162,89439	4,16552	13,77158	2,75522
120	179,70009	2,28784	7,38073	1,68919
150	188,92534	1,25575	3,95948	1,01819
180	193,98870	0,68923	2,12614	0,60571
210	196,76777	0,37829	1,14276	0,35657
240	198,29311	0,20763	0,61477	0,20812
270	199,13032	0,11396	0,33102	0,12062

Примечание: составлено авторами на основании данных, полученных в ходе расчета: $t(c)$ – время, измеряемое в секундах; $y_1(t), y_2(t), y_3(t), y_4(t)$ – концентрация веществ A, B, C, D в момент времени t .

Для вещества A , коэффициент $R^2 = 0,9999998401 \approx 1$ показывает, что существует линейная корреляция между измеренными и расчетными концентрациями; $NSE = 0,9999969829 \approx 1$ показывает, что существует совпадение между расчетными и измеренными концентрациями.

Для вещества B имеем, что $R^2 = 0,9999991314 \approx 1$, $NSE = 0,9999140278 \approx 1$ для вещества C : $R^2 = 0,9999998897 \approx 1$, $NSE = 0,9999997925 \approx 1$, а для вещества D : $R^2 = 0,9999949606 \approx 1$, $NSE = 0,9999895044 \approx 1$. Это показывает, что существует линей-

ная корреляция 1:1 между расчетными и измеренными концентрациями веществ A , B , C , D , т. е. расчетная концентрация в любой момент времени немного отличается от измеренной. Найденные приближенные константы $k_{1\alpha} = 0,02001$, $k_{2\alpha} = 0,00103$, $k_{3\alpha} = 0,00114$, $k_{4\alpha} = 0,02008$, $k_{5\alpha} = 0,09936$ можно принять как решение обратной задачи 2.

Рис. 2 показывает, как меняется концентрация веществ A , B , C , D с течением времени при $k_1 = 0,02001$, $k_2 = 0,00103$, $k_3 = 0,00114$, $k_4 = 0,02008$, $k_5 = 0,09936$.

На рис. 2 звездочками обозначены измеренные концентрации A , B , C , D . Кривые $y_1(t)$, $y_2(t)$, $y_3(t)$, $y_4(t)$ выражают изменение расчетной концентрации вещества A , B , C , D с течением времени. Видно, что измеренные значения очень близки к кривым. Это означает, что отклонение между измеренными и расчетными значениями очень малое, и согласуется с тем, что показатель $NSE(y_1) \approx 1$, $NSE(y_2) \approx 1$, $NSE(y_3) \approx 1$, $NSE(y_4) \approx 1$.

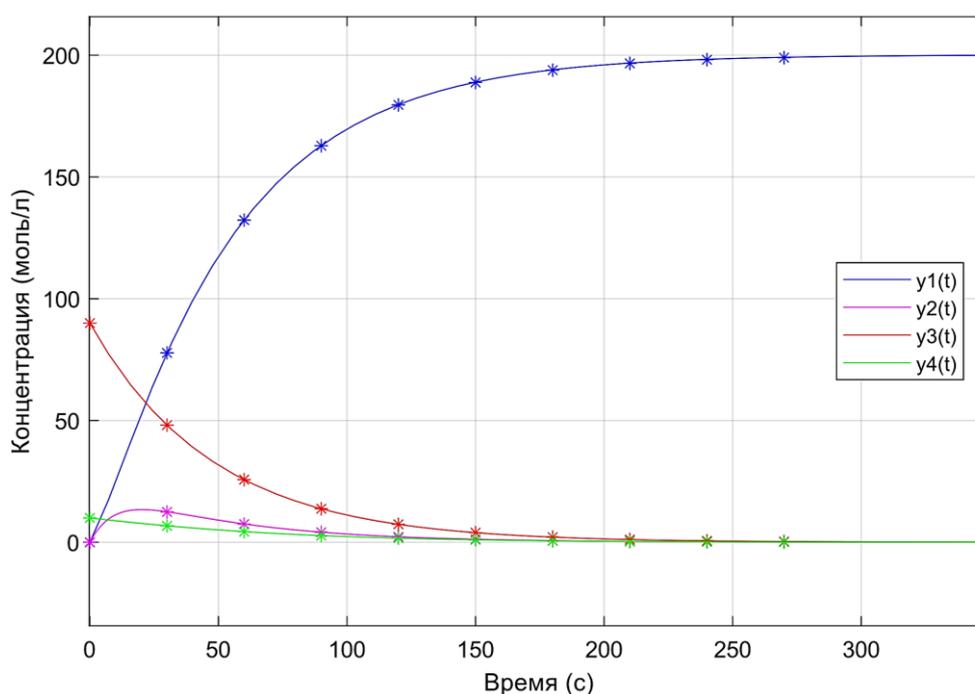


Рис. 2. Изменение концентрации вещества A , B , C , D при $k_1 = 0,02001$, $k_2 = 0,00103$, $k_3 = 0,00114$, $k_4 = 0,02008$, $k_5 = 0,09936$

Примечание: составлено авторами.

Из данных табл. 1 и 2 будем строить диаграммы рассеивания, чтобы показать, что существует линейная корреляция 1:1 между измеренными и рассчитанными концентрациями веществ A , B , C , D (рис. 3). На этих диаграммах координат каждые точки по горизонтальной оси выражают измеренную концентрацию, а по вертикальной оси – расчетную концентрацию. Видно, что точки, выражающие концентрацию веществ A , B , C , D ,

распределяются близко к линейной кривой 1:1. Это согласуется с тем, что существует линейная корреляция 1:1 между измеренными и расчетными концентрациями. Отсюда найденные приближенные константы скорости реакций $K_\alpha = (0,02001, 0,00103, 0,00114, 0,02008, 0,09936)^T$ можно принять как решение обратной задачи 2.

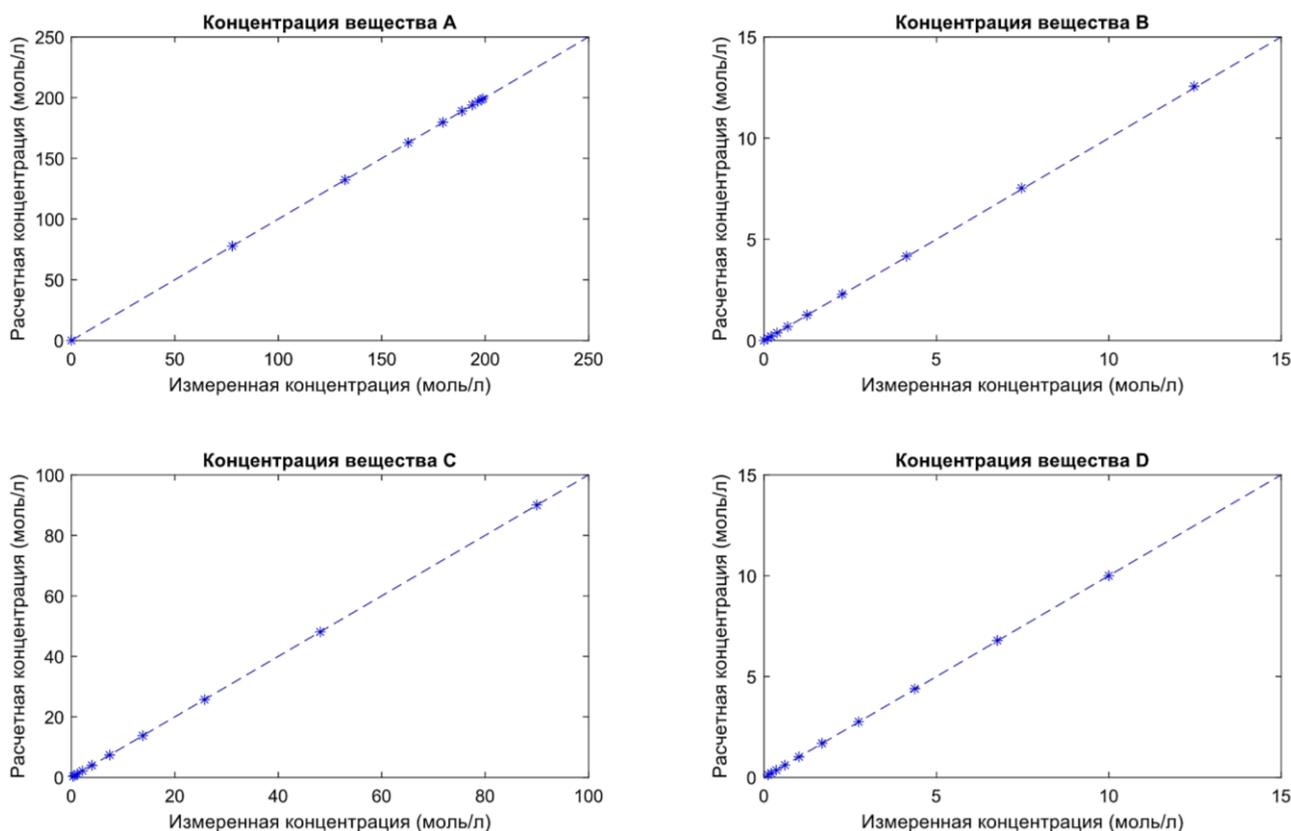


Рис. 3. Линейная корреляция 1:1 между измеренными и расчетными концентрациями вещества A, B, C, D при $k_1 = 0,02001$, $k_2 = 0,00103$, $k_3 = 0,00114$, $k_4 = 0,02008$, $k_5 = 0,09936$

Примечание: составлено авторами.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе была рассмотрена математическая модель кинетики процесса нефтепереработки, описанная линейной системой дифференциальных уравнений с заданными начальными условиями (задача Коши). В рамках этой математической модели была поставлена обратная задача: по заданным концентрациям исходного вещества и продуктов определить константы скорости реакций. В результате проведенных расчетов найдены методом регуляризации Тихонова приближенные константы скорости реакций в про-

цессе нефтепереработки. Для проверки совпадения между измеренными и расчетными концентрациями исходного вещества и продуктов были использованы коэффициент корреляции Пирсона R^2 и показатель эффективности Нэша – Сатклиффа NSE . Установлено, что существует линейная корреляция и совпадение (т. е. линейная корреляция 1:1) между измеренными и расчетными концентрациями веществ A, C, D. В этом случае были приняты найденные приближенные константы скорости реакций в процессе нефтепереработки.

Список источников

1. Колинко П. А., Козлов Д. В. Химическая кинетика в курсе физической химии. Новосибирск : НГУ, 2013. 99 с.
2. Погореловский М. А., Микшина В. С., Назина Н. Б. К вопросу математического моделирования кинетики реакций процессов нефтепереработки // Вестник кибернетики. 2017. № 4. С. 92–99.
3. Абдуллин А. И., Сираев И. Р. Гидрокрекинг как процесс получения дизельного топлива //

References

1. Kolinko P. A., Kozlov D. V. Khimicheskaja kinetika v kurse fizicheskoj khimii. Novosibirsk : Novosibirsk State University, 2013. 99 p. (In Russian).
2. Pogorelovsky M. A., Mikshina V. S., Nazina N. B. Mathematical Modeling Issue of Reaction Kinetics of Refining Processes // Proceedings in Cybernetics. 2017. No. 4. P. 92–99. (In Russian).
3. Abdullin A. I., Siraev I. R. Hidrokreking kak protsess polucheniia dizelnogo topliva // Bulletin of

- Вестник технолог. ун-та. 2016. Т. 19, № 10. С. 41–43.
4. Лысенкова С. А. О математическом моделировании каталитического крекинга // Вестник кибернетики. 2018. № 4. С. 107–110.
 5. Заикин П. В., Лысенкова С. А., Микшина В. С. Аналитическое решение системы дифференциальных уравнений математической модели кинетики процесса нефтепереработки // Вестник кибернетики. 2018. № 2. С. 120–126.
 6. Микшина В. С. О математическом моделировании каталитического крекинга : моногр. СПб. : Научно-технические технологии, 2021. 120 с.
 7. Ольховой А. Ф. Введение в теорию обратных и некорректных задач : моногр. 2012. 116 с.
 8. Colton D., Kress R. Ill-Posed Problems // Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory. 2019. P. 111–136.
 9. Kabanikhin S. I. Inverse Problems of Natural Science // Comput Math Math Phys. 2020. Vol. 60, Is. 6. P. 911–914.
 10. Kirsch A. An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems. 2021. 400 p.
 11. Борщ С. В., Симонов Ю. А., Христофоров А. В. Эффективность моделирования и прогнозирования речного стока // Гидрометеоролог. исслед. и прогнозы. 2020. Т. 375, № 1. С. 176–189.
 12. Suryaningtyas L. S., Ery S., Rispiningtati R. Hydrological Analysis of TRMM (Tropical Rainfall Measuring Mission) Data in Lesti Sub Watershed // Civ Environ Sci. 2020. Vol. 3, No. 1. P. 18–30.
 13. Zhong X., Dutta U. Engaging Nash-Sutcliffe Efficiency and Model Efficiency Factor Indicators in Selecting and Validating Effective Light Rail System Operation and Maintenance Cost Models // J Traffic Transp Eng. 2015. Vol. 3, No. 5. P. 255–265.
- the Technological University. 2016. Vol. 19, No. 10. P. 41–43. (In Russian).
4. Lysenkova S. A. On Mathematical Modeling of Catalytic Cracking // Proceedings in Cybernetics. 2018. No. 4. P. 107–110. (In Russian).
 5. Zaikin P. V., Lysenkova S. A., Mikshina V. S. Analytical Solution of Differential Equation System of Mathematical Model of Refining Process Kinetics // Proceedings in Cybernetics. 2018. No. 2. P. 120–126. (In Russian).
 6. Mikshina V. S. O matematicheskom modelirovanii kataliticheskogo krekinga : Monograph. St. Petersburg : Naukoemkie tekhnologii, 2021. 120 p. (In Russian).
 7. Olkhovoi A. F. Vvedenie v teoriu obratnykh i nekorrektnykh zadach : Monograph. 2012. 116 p. (In Russian).
 8. Colton D., Kress R. Ill-Posed Problems // Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory. 2019. P. 111–136.
 9. Kabanikhin S. I. Inverse Problems of Natural Science // Comput Math Math Phys. 2020. Vol. 60, Is. 6. P. 911–914.
 10. Kirsch A. An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems. 2021. 400 p.
 11. Borshch S. V., Simonov Yu. A., Khristoforov A. V. Efficiency of Streamflow Modeling and Forecasting // Hydrometeorological Research and Forecasting. 2020. Vol. 375, No. 1. P. 176–189. (In Russian).
 12. Suryaningtyas L. S., Ery S., Rispiningtati R. Hydrological Analysis of TRMM (Tropical Rainfall Measuring Mission) Data in Lesti Sub Watershed // Civ Environ Sci. 2020. Vol. 3, No. 1. P. 18–30.
 13. Zhong X., Dutta U. Engaging Nash-Sutcliffe Efficiency and Model Efficiency Factor Indicators in Selecting and Validating Effective Light Rail System Operation and Maintenance Cost Models // J Traffic Transp Eng. 2015. Vol. 3, No. 5. P. 255–265.

Информация об авторах

В. Х. Ля – аспирант.

А. Н. Фирсов – доктор технических наук, профессор.

Information about the authors

V. H. Le – Postgraduate.

A. N. Firsov – Doctor of Sciences (Engineering), Professor.