

# Алгоритм оценки отклонения между регуляризованным и точным решениями в обратных задачах

Лэ Ван Хуен, Л. В. Черненкокая

**Аннотация** — Данная работа посвящена построению алгоритма для проверки существования линейной корреляции 1:1 между измеренными и расчетными данными неизвестных функций математической модели. Рассмотрена обратная задача: по значениям неизвестных функций математической модели, измеренным в разный момент времени, определить значения её параметров. Прямая задача решена со значениями параметров, являющимися элементами вектора регуляризованного решения. Решения прямой задачи – функции, зависящие от времени. Расчетные данные определены как значения этих функций в соответствующие моменты времени. Для определения существования линейной корреляции 1:1 между измеренными и расчетными данными использованы показатель эффективности Нэша–Сатклиффа и коэффициент корреляции Пирсона. В качестве численного примера рассмотрена обратная задача восстановления параметров математической модели, описывающей кинетику процесса нефтепереработки. В результате расчетов определено существование линейной корреляции 1:1 между измеренными и расчетными концентрациями веществ. Данная работа рассмотрена как дополнительный шаг для перепроверки приближения регуляризованного к точному решению обратной задачи. В дальнейшем разработанный алгоритм включен в нашу методику решения обратных задач для более достоверного подтверждения возможности использования регуляризованного решения вместо точного.

**Ключевые слова** — обратная задача, математическая модель, отклонение, регуляризованное решение, линейная корреляция 1:1, показатель эффективности Нэша–Сатклиффа, коэффициент корреляции Пирсона.

## I. ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия с развитием мощных ЭВМ обратная задача стала популярным направлением исследований в области вычислительной и прикладной математики. Под обратной задачей понимается процесс идентификации неизвестных параметров прямой задачи на основе информации, полученной из ряда наблюдений. В зависимости от того, какие функции неизвестны, обратные задачи разделяют на

ретроспективные задачи, граничные задачи, задачи продолжения, задачи об источнике и коэффициентной задачи [1]–[5]. Обратная задача имеет тесную связь с математическими моделями, описывающими изменение поведения и свойств объектов исследования во времени. В процессе построения математических моделей параметры часто задаются исследователями в виде численных примеров. Определение значений параметров (коэффициентов) математической модели играет большую роль при применении математической модели к решению практических задач. Один из эффективных способов определения значений этих параметров основан на теории обратной задачи.

Решить обратные задачи непросто. Практически невозможно узнать точные исходные данные обратных задач. Эти данные экспериментально измеряются и обрабатываются, поэтому погрешностей измерения и округления не избежать. Малые изменения исходных данных могут сделать обратные задачи бессмысленными, т.е. они станут задачами без решения, задачами со многими решениями или задачами с неустойчивыми решениями. Существует несколько методов решения обратных задач в зависимости от искомым функций, дополнительной информации и уравнений (уравнения акустики, уравнения теплопроводности, уравнения переноса излучения, уравнения Лапласа и т.д.) [1]–[5]. Одним из наиболее широко используемых и популярных методов решения обратных задач является метод регуляризации Тихонова. Данный метод исходит из задачи двухкритериальной оптимизации и метода множителей Лагранжа решения этой задачи. Первый критерий определяется как минимизация отклонения между левой и правой частями операторного уравнения (в общем операторном виде) обратной задачи. Вторым критерий – минимизация нормы решения. Преимущество метода регуляризации Тихонова состоит в том, что не нужно добавлять дополнительные условия для того, что обратные задачи становятся корректными. Решение, полученное этим методом, всегда единственно и непрерывно зависит от исходных данных. Однако самым большим недостатком этого метода является нахождение параметра регуляризации так, чтобы регуляризованное решение аппроксимировало точное решение обратной задачи. Здесь следует отметить, что мы не можем знать точное решение обратной задачи,

Статья получена 7 июня 2023.

Лэ Ван Хуен, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, аспирант высшей школы киберфизических систем и управления (huyenlevan120193@gmail.com).

Черненкокая Людмила Васильевна, д-р техн. наук, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, профессор высшей школы киберфизических систем и управления (ludmila@qmd.spbstu.ru).

потому что мы не можем знать точные входные данные [1]–[5].

Существует несколько способов найти подходящее значение параметра регуляризации в зависимости от типа обратной задачи или дополнительных условий, таких как дополнительная информация об погрешности исходных данных обратных задач. В случае наличия дополнительной информации об ошибке входных данных можно использовать метод обобщенной невязки для нахождения параметра регуляризации [1]–[5]. В противном случае, если мы не знаем больше информации об ошибке данных, то будет использован метод выбора квазиоптимального значения параметра регуляризации. Проверка на совпадение измеренных и расчетных данных выполняется как дополнительный шаг для перепроверки приближения регуляризованного к искомому точному решению обратной задачи (оценка степени отклонения между регуляризованным и точным решениями в обратных задачах восстановления параметров). Из результата проверки можно оценить степень отклонения между регуляризованным и точным решениями в обратных задачах восстановления параметров. Отсюда, можно сделать вывод о возможности принятия параметра регуляризации, а также использования найденного регуляризованного решения вместо точного решения обратной задачи.

Один из способов проверки совпадения между измеренными данными и расчетом выполняется графически. Именно, решена прямая задача (задачи Коши) с значениями параметров, являющимися элементами регуляризованного решения обратной задачи. Полученные решения прямой задачи представляют собой зависящие от времени функции, отражающие изменение поведения и свойств моделируемого объекта. На основе графика этих функций можно визуально сравнить, близки ли измеренные данные к этим кривым. Полученные результаты сравнения позволят оценить приемлемость регуляризованного решения вместо точного решения. В данной работе мы рассмотрим еще один способ проверки совпадения расчетных данных с измеренными данными обратной задачи с позиций статистической математики. В частности, коэффициент корреляции Пирсона и показатель эффективности Нэша–Сатклифа будут использованы для проверки наличия соотношения 1:1 между измеренными данными и расчетными данными. Существование линейной корреляции 1:1 между измеренными и расчетными данными показывает, что имеется совпадение расчетных данных с измеренными.

## II. ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

В [6]–[12] была поставлена и решена обратная задача восстановления параметров математической модели:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = a_{11}x_1(t) + a_{12}x_2(t) + \dots + a_{1n}x_n(t), \\ \frac{dx_2}{dt} = a_{21}x_1(t) + a_{22}x_2(t) + \dots + a_{2n}x_n(t), \\ \dots, \\ \frac{dx_n}{dt} = a_{n1}x_1(t) + a_{n2}x_2(t) + \dots + a_{nn}x_n(t), \end{cases} \quad (1)$$

где  $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1n}, a_{21}, a_{22}, \dots, a_{2n}, \dots, a_{n1}, a_{n2}, \dots, a_{nn}$  – параметры математической модели;  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$  – неизвестные функции, зависящие от времени  $t$  [6]–[12].

Предположим, что известны значения функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$  в начальный момент времени  $t=0$ :  $x_1(t)_{t=0} = x_1(0), x_2(t)_{t=0} = x_2(0), \dots, x_n(t)_{t=0} = x_n(0)$ .

В рамках математической модели (1) будут сформированы две задачи [6]–[12].

**Прямая задача.** По заданным значениям параметров  $a_{ij} = a_{ij}^0$ , где  $i, j = 1, 2, \dots, n$  и значениям  $x_1(0), x_2(0), \dots, x_n(0)$ , определить неизвестные функции  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$ .

Прямая задача представляет собой задачу построения решения системы дифференциальных уравнений с заданными начальными условиями (задачу Коши). Решение прямой задачи показывает, как изменяются поведения или свойства моделируемого объекта с течением времени.

**Обратная задача.** По заданным (измеренным) значениям функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$  в разные моменты времени  $t_k$ , где  $k = 1, 2, \dots, m$ , определить значения параметров  $a_{ij} = a_{ij}^0$ , где  $i, j = 1, 2, \dots, n$ .

Решение обратной задачи будет обозначено вектором  $\mathbf{K}^0 = (a_{11}^0, a_{12}^0, \dots, a_{1n}^0, \dots, a_{n1}^0, a_{n2}^0, \dots, a_{nn}^0)^T$ . В данной работе  $\mathbf{K}^0$  будет рассматриваться как искомое (точное) решение обратной задачи.

Пусть заданы (измеренные) значения функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$  в разные моменты времени  $t_k$ , где  $k = 1, 2, \dots, m$  (таблица I). Для удобства будем называть эти значения измеренными данными функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$ .

Таблица I. Заданные (измеренные) данные функций

$k$	$t$	$x_1(t)$	$x_2(t)$	...	$x_n(t)$
1	$t_1$	$x_1(t_1)$	$x_2(t_1)$	...	$x_n(t_1)$
2	$t_2$	$x_1(t_2)$	$x_2(t_2)$	...	$x_n(t_2)$
3	$t_3$	$x_1(t_3)$	$x_3(t_3)$	...	$x_n(t_3)$
...	...	...	...	...	...
$m$	$t_m$	$x_1(t_m)$	$x_2(t_m)$	...	$x_n(t_m)$

Значения  $x_1(t_k), x_2(t_k), \dots, x_n(t_k)$ , где  $k = 1, 2, \dots, m$ , измерены экспериментально, поэтому они всегда содержат погрешность измерения и погрешность округления. Из-за погрешности исходных данных обратная задача может быть некорректной. Для решения обратной задачи будет использована методика, разработанная в [1]. Данная методика построена на основе таких методов, как метод конечных разностей, метод интерполяции, метод регуляризации Тихонова [1]–[5], метод обобщенной невязки и метод выбора квазиоптимальных значений параметра регуляризации [13]–[15]. Основная идея методики состоит в том, что сначала система (1) преобразована в систему алгебраических уравнений с помощью метода конечных разностей и метода интерполяции. Потом метод регуляризации Тихонова использован для нахождения регуляризованного решения обратной задачи в зависимости от параметра регуляризации. Наконец метод обобщенной невязки или метод выбора квазиоптимальных значений параметра регуляризации использован для нахождения подходящего значения параметра регуляризации. В результате применения данной методики при решении обратной задачи будет получено регуляризованное решение, которое обозначается  $\mathbf{K}^\alpha = (a_{11}^\alpha, a_{12}^\alpha, \dots, a_{1n}^\alpha, \dots, a_{m1}^\alpha, a_{m2}^\alpha, \dots, a_{mn}^\alpha)^T$ . Решение  $\mathbf{K}^\alpha$  единственно и непрерывно зависит от исходных данных обратной задачи. Здесь важно, чтобы решение  $\mathbf{K}^\alpha$  было приближенным к точному решению  $\mathbf{K}^0$ . Результаты применения данной методики можно найти в [6]–[12].

### III. КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ ПИРСОНА И ПОКАЗАТЕЛЬ ЭФФЕКТИВНОСТИ НЭША–САТКЛИФФА

Пусть нам известны дополнительные измеренные данные в дополнение к тем, которые использовались для решения обратной задачи. На основе построенного графика можно проверить совпадение между этими новыми измеренными и расчетными данными. Чем больше данных измерено и сопоставлено, тем надежнее выводы о приемлемости регуляризованного решения для замены точному решению. Однако это вызывает множество неудобств и затрат с точки зрения времени, усилий и затрат при исследовании сложных моделируемых объектов. В данной работе будут рассмотрены два набора измеренных и расчетных данных с точки зрения математической статистики. Коэффициент корреляции Пирсона и показатель эффективности Нэша–Сатклиффа будут использоваться для проверки наличия линейной корреляции 1:1 между измеренными данными и расчетными данными. Линейная корреляция 1:1 позволяет узнать совпадение между измеренными и расчетными данными, а также между новыми данными, добавленными к двум наборам измеренных и расчетных данных. Отсюда вместо измерения и сравнения данных в несколько моментов времени, можно сделать выводы о совпадении новых дополнительных измеренных данных с расчетными

данными.

Будет определено, существует ли линейная корреляция 1:1 (совпадение) между измеренными и расчетными данными функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$ . Для этого будут использованы коэффициент корреляции Пирсона и показатель эффективности Нэша–Сатклиффа (Nash–Sutcliffe efficiency,  $NSE$ ) [16]–[20]. Рассмотрим вектор  $\mathbf{M}$  измеренных данных (measured data) и вектор  $\mathbf{E}$  расчетных данных (estimated data), каждый из которых содержит  $m$  элементов.

Показатель эффективности Нэша–Сатклиффа  $NSE$  ( $-\infty < NSE \leq 1$ ) помогает предсказать, насколько хорошо график измеренных и расчетных данных соответствует линии 1:1. Формула расчета показателя эффективности Нэша–Сатклиффа для вектора  $\mathbf{M}$  измеренных данных и вектора  $\mathbf{E}$  расчетных данных имеет вид:

$$NSE = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (\mathbf{M}_i - \mathbf{E}_i)^2}{\sum_{i=1}^m (\mathbf{M}_i - \bar{\mathbf{M}})^2},$$

где  $\mathbf{M}_i$  –  $i$ -й элемент вектора  $\mathbf{M}$  измеренных данных;  $\mathbf{E}_i$  –  $i$ -й элемент вектора  $\mathbf{E}$  расчетных данных;  $\bar{\mathbf{M}}$  – среднее значение измеренных данных;  $m$  – количество элементов вектора данных.

Если  $NSE = 0$ , то полностью отсутствует совпадение между измеренными и расчетными данными. Если  $NSE = 1$ , то существует идеальное совпадение между измеренными и расчетными данными [16]–[20]. Шкала для оценки того, насколько график измеренных и рассчитанных данных соответствует линии 1:1 (шкала показателя эффективности Нэша–Сатклиффа) можно рассмотреть в [20], [23]. В данной работе будут рассмотрены и приняты только значения  $NSE$ , удовлетворяющие условию  $NSE > 0.75$ . Потому что, если  $NSE > 0.75$ , то существует хорошее совпадение между измеренными и расчетными данными.

Коэффициент корреляции Пирсона  $R$  ( $-1 \leq R \leq 1$ ) позволяет предсказать, существует ли линейная корреляция (линейная связь) между измеренными и расчетными данными. Формула расчета коэффициента корреляции Пирсона для вектора измеренных данных и вектора расчетных данных имеет вид:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^m (\mathbf{M}_i - \bar{\mathbf{M}})(\mathbf{E}_i - \bar{\mathbf{E}})}{\sqrt{\sum_{i=1}^m (\mathbf{M}_i - \bar{\mathbf{M}})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^m (\mathbf{E}_i - \bar{\mathbf{E}})^2}},$$

где  $\bar{\mathbf{E}}$  – среднее значение расчетных данных.

Если  $R = 0$ , то полностью отсутствует линейная корреляция между измеренными и расчетными данными. Если  $R = 1$ , то существует идеальная линейная корреляция между измеренными и расчетными данными

[16]–[20]. Шкала оценки линейной корреляции между измеренными и расчетными данными (шкала коэффициента корреляции Пирсона) можно рассмотреть в [20]–[22]. В данной работе будут рассмотрены и приняты только значения  $R$ , удовлетворяющие условию  $R > 0.8$ . Потому что, если  $R > 0.8$ , то существует очень сильная линейная корреляция между измеренными и расчетными данными.

**IV. АЛГОРИТМ ОЦЕНКИ ОТКЛОНЕНИЯ МЕЖДУ РЕГУЛЯРИЗОВАННЫМ И ТОЧНЫМ РЕШЕНИЯМИ В ОБРАТНЫХ ЗАДАЧАХ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ**

Будет определено, существует ли линейная корреляция 1:1 между измеренными и расчетными данными функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$ . Для этого мы будем использовать статистические параметры: коэффициент корреляции Пирсона и показатель эффективности Нэша–Сатклиффа.

Пусть при некотором значении параметра регуляризации  $\alpha$  имеется регуляризованное решение  $\mathbf{K}^\alpha = (a_{11}^\alpha, a_{12}^\alpha, \dots, a_{1n}^\alpha, \dots, a_{n1}^\alpha, a_{n2}^\alpha, \dots, a_{nm}^\alpha)^T$ . Алгоритм включает в себя четыре шага:

**Шаг 1.** Решение прямой задачи с найденным регуляризованным решением, т.е. найденными значениями параметров математической модели (1):  $a_{11} = a_{11}^\alpha, a_{12} = a_{12}^\alpha, \dots, a_{1n} = a_{1n}^\alpha, \dots, a_{n1} = a_{n1}^\alpha, a_{n2} = a_{n2}^\alpha, \dots, a_{nm} = a_{nm}^\alpha$ . В результате будут найдены функции  $x_1^\alpha(t), x_2^\alpha(t), \dots, x_n^\alpha(t)$ .

**Шаг 2.** Вычисление значений функций  $x_1^\alpha(t), x_2^\alpha(t), \dots, x_n^\alpha(t)$  в разные моменты времени  $t_k$ , где  $k = 1, 2, \dots, m$ .

Значения  $x_1^\alpha(t_k), x_2^\alpha(t_k), \dots, x_n^\alpha(t_k)$  будем рассматривать как расчетные значения функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$  в разные моменты времени  $t_k$ . Для простоты будем называть эти значения расчетными данными функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$  (таблица II).

Таблица II. Расчетные данные функций

$k$	$t$	$x_1(t)$	$x_2(t)$	...	$x_n(t)$
1	$t_1$	$x_1^\alpha(t_1)$	$x_2^\alpha(t_1)$	...	$x_n^\alpha(t_1)$
2	$t_2$	$x_1^\alpha(t_2)$	$x_2^\alpha(t_2)$	...	$x_n^\alpha(t_2)$
3	$t_3$	$x_1^\alpha(t_3)$	$x_2^\alpha(t_3)$	...	$x_n^\alpha(t_3)$
...	...	...	...	...	...
$m$	$t_m$	$x_1^\alpha(t_m)$	$x_2^\alpha(t_m)$	...	$x_n^\alpha(t_m)$

**Шаг 3.** Проверка совпадения между измеренными и расчетными данными функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$ .

В таблице III символы  $NSE_1, NSE_2, \dots, NSE_n$  выражают показатель эффективности Нэша–Сатклиффа для измеренных и расчетных данных функций  $x_1(t),$

$x_2(t), \dots, x_n(t)$ .

Таблица III. Показатель эффективности Нэша–Сатклиффа для измеренных и расчетных данных функций

$k$	$x_1(t)$		$x_2(t)$		...	$x_n(t)$	
1	$x_1(t_1)$	$x_1^\alpha(t_1)$	$x_2(t_1)$	$x_2^\alpha(t_1)$	...	$x_n(t_1)$	$x_n^\alpha(t_1)$
2	$x_1(t_2)$	$x_1^\alpha(t_2)$	$x_2(t_2)$	$x_2^\alpha(t_2)$	...	$x_n(t_2)$	$x_n^\alpha(t_2)$
3	$x_1(t_3)$	$x_1^\alpha(t_3)$	$x_3(t_3)$	$x_2^\alpha(t_3)$	...	$x_n(t_3)$	$x_n^\alpha(t_3)$
...	...	...	...	...	...	...	...
$m$	$x_1(t_m)$	$x_1^\alpha(t_m)$	$x_2(t_m)$	$x_2^\alpha(t_m)$	...	$x_n(t_m)$	$x_n^\alpha(t_m)$
	$NSE_1$		$NSE_2$		...	$NSE_n$	

**Шаг 4.** Проверка существования линейной корреляции между измеренными и расчетными данными функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$ .

В таблице IV символы  $R_1, R_2, \dots, R_n$  выражают коэффициенты корреляции Пирсона для измеренных и расчетных данных функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$ .

Таблица IV. Коэффициент корреляции Пирсона для измеренных и расчетных данных функций

$k$	$x_1(t)$		$x_2(t)$		...	$x_n(t)$	
1	$x_1(t_1)$	$x_1^\alpha(t_1)$	$x_2(t_1)$	$x_2^\alpha(t_1)$	...	$x_n(t_1)$	$x_n^\alpha(t_1)$
2	$x_1(t_2)$	$x_1^\alpha(t_2)$	$x_2(t_2)$	$x_2^\alpha(t_2)$	...	$x_n(t_2)$	$x_n^\alpha(t_2)$
3	$x_1(t_3)$	$x_1^\alpha(t_3)$	$x_3(t_3)$	$x_2^\alpha(t_3)$	...	$x_n(t_3)$	$x_n^\alpha(t_3)$
...	...	...	...	...	...	...	...
$m$	$x_1(t_m)$	$x_1^\alpha(t_m)$	$x_2(t_m)$	$x_2^\alpha(t_m)$	...	$x_n(t_m)$	$x_n^\alpha(t_m)$
	$R_1$		$R_2$		...	$R_n$	

По шкале показателя эффективности Нэша–Сатклиффа и шкале коэффициента корреляции Пирсона будет оцениваться совпадение измеренных и расчетных данных каждой из функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$ . Если  $NSE_1, NSE_2, \dots, NSE_n, R_1, R_2, \dots, R_n$  примерно равны единицы, то можно сделать вывод, что существует сильная линейная корреляция 1:1 (совпадение) между измеренными и расчетными данными функций  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$ . Отсюда также можно сделать вывод, что отклонение между регуляризованным и точным решениями обратной задачи восстановления параметров очень мало. В этом случае, регуляризованное решение можно рассматривать как приближение к точному решению обратной задачи. Приблизительные значения можно использовать вместо точных значений параметров при решении прямой задачи или исследовании математической модели (1).

**V. ЧИСЛЕННЫЙ ПРИМЕР**

Рассмотрим математическую модель кинетики

процесса нефтепереработки в случае, когда исходная смесь состоит из одного тяжелого углеводорода **C**. Под действием температуры и соударений углеводород **C** распадается на углеводороды **A**, **B** и 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 но **B** превращается в **A**, с углеводородом **A** далее никаких превращений не происходит [7], [8], [24], [25].

Математическая модель кинетики вышеуказанного процесса нефтепереработки имеет следующий вид [7]:

$$\begin{cases} \frac{dx_1(t)}{dt} = k_5x_2(t) + k_1x_3(t) + k_4x_4(t), \\ \frac{dx_2(t)}{dt} = -k_5x_2(t) + k_1x_3(t) + k_4x_4(t), \\ \frac{dx_3(t)}{dt} = -(k_1 + k_2)x_3(t) + k_3x_4(t), \\ \frac{dx_4(t)}{dt} = k_2x_3(t) - (k_2 + k_4)x_4(t), \end{cases}$$

где  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$ ,  $x_3(t)$ ,  $x_4(t)$  – концентрация веществ **A**, **B**, **C**, **D** в момент времени  $t$ ,  $\frac{\text{моль}}{\text{л}}$ ;  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$ ,  $k_4$ ,  $k_5$  – константы скорости реакций,  $c^{-1}$ . Предположим, что в начальный момент времени  $t=0$  концентрация веществ **A**, **B**, **C**, **D** равна  $x_1(0)$ ,  $x_2(0)$ ,  $x_3(0)$ ,  $x_4(0)$ .

**Прямая задача.** По заданным значениям параметров  $k_1 = k_{10}$ ,  $k_2 = k_{20}$ ,  $k_3 = k_{30}$ ,  $k_4 = k_{40}$ ,  $k_5 = k_{50}$  и концентрациям исходного вещества, продуктов **A**, **B**, **C**, **D** в начальный момент времени  $t=0$ , определить функции  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$ ,  $x_3(t)$ ,  $x_4(t)$ .

**Обратная задача.** По заданным (измеренным) концентрациям исходного вещества и продуктов **A**, **B**, **C**, **D** в разные моменты времени  $t = \{0, 30, 60, 90, 120, 150, 180, 210\}$  секунд, определить значения параметров  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$ ,  $k_4$ ,  $k_5$  (т.е.  $k_{10}$ ,  $k_{20}$ ,  $k_{30}$ ,  $k_{40}$ ,  $k_{50}$ ).

Пусть, нам известны концентрации веществ **A**, **B**, **C**, **D** в разные моменты времени (таблица V).

Таблица V. Измеренные концентрации веществ

$k$	$t$	$x_1(t)$	$x_2(t)$	$x_3(t)$	$x_n(t)$
1	0	0	0	90	10
2	30	77.7621	12.4756	48.1146	6.7665
3	60	132.2933	7.4679	25.7451	4.3743
4	90	162.8108	4.1294	13.7877	2.7422
5	120	179.5886	2.2678	7.3903	1.6815
6	150	188.7979	1.2447	3.9647	1.0140
7	180	193.8521	0.6831	2.1287	0.6037
8	210	196.6260	0.3749	1.1439	0.3557

Для каждого значения параметра регуляризации будет

найдено соответствующее регуляризованное решение  $\mathbf{K}^\alpha = (k_1^\alpha, k_2^\alpha, k_3^\alpha, k_4^\alpha, k_5^\alpha)^T$  обратной задачи, которое единственно и непрерывно зависят от исходных данных. Пусть нам известно, что при  $\alpha = \{0.01, 0.001\}$  регуляризованное решение  $\mathbf{K}^\alpha$  обратной задачи аппроксимирует искомое точное решение  $\mathbf{K}^0$ .

Рассмотрим первый случай:  $\alpha = 0.01$ . При этом имеется  $\mathbf{K}^\alpha = (0.02054, 0.00056, 0.00086, 0.01736, 0.09429)^T$ .

**Шаг 1.** Решение прямой задачи с значениями параметров  $k_1 = 0.02054$ ,  $k_2 = 0.00056$ ,  $k_3 = 0.00086$ ,  $k_4 = 0.01736$ ,  $k_5 = 0.09429$  и начальными условием:  $x_1(t)|_{t=0} = 0$ ,  $x_2(t)|_{t=0} = 0$ ,  $x_3(t)|_{t=0} = 90$ ,  $x_4(t)|_{t=0} = 10$ . Будут найдены функции  $x_1^\alpha(t)$ ,  $x_2^\alpha(t)$ ,  $x_3^\alpha(t)$ ,  $x_4^\alpha(t)$ , выражающие зависимости концентрации веществ **A**, **B**, **C**, **D** от времени.

**Шаг 2.** Вычисление значений функций  $x_1^\alpha(t)$ ,  $x_2^\alpha(t)$ ,  $x_3^\alpha(t)$ ,  $x_4^\alpha(t)$  в разные моменты времени  $t = \{0, 30, 60, 90, 120, 150, 180, 210\}$ . Будет получено множество расчетных концентраций веществ, т.е. расчетных данных функций  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$ ,  $x_3(t)$ ,  $x_4(t)$  (таблица VI).

Таблица VI. Расчетные концентрации веществ

$k$	$t$	$x_1(t)$	$x_2(t)$	$x_3(t)$	$x_n(t)$
1	0	0	0	90	10
2	30	77.6392	13.2560	47.9435	6.6826
3	60	132.4128	8.0098	25.5591	4.3519
4	90	163.0488	4.4219	13.6371	2.7812
5	120	179.8534	2.4240	7.2827	1.7522
6	150	189.0719	1.3307	3.8930	1.0917
7	180	194.1404	0.7323	2.0833	0.6742
8	210	196.9342	0.4040	1.1161	0.4133

**Шаг 3.** Проверка совпадения между измеренными и расчетными данными функций  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$ ,  $x_3(t)$ ,  $x_4(t)$ .

Таблица VII показывает показатели эффективности Нэша–Сатклиффа для измеренных и расчетных концентраций веществ **A**, **B**, **C**, **D**.

Таблица VII. Показатель эффективности Нэша–Сатклиффа для измеренных и расчетных концентраций веществ

$x_1(t)$		$x_2(t)$		$x_3(t)$		$x_4(t)$	
0	0	0	0	90	90	10	10
77.7621	77.6392	12.4756	13.2560	48.1146	47.9435	6.7665	6.6826
132.2933	132.4128	7.4679	8.0098	25.7451	25.5591	4.3743	4.3519
162.8108	163.0488	4.1294	4.4219	13.7877	13.6371	2.7422	2.7812
179.5886	179.8534	2.2678	2.4240	7.3903	7.2827	1.6815	1.7522
188.7979	189.0719	1.2447	1.3307	3.9647	3.8930	1.0140	1.0917
193.8521	194.1404	0.6831	0.7323	2.1287	2.0833	0.6037	0.6742
196.6260	196.9342	0.3749	0.4040	1.1439	1.1161	0.3557	0.4133
$NSE_1 = 0.99963$		$NSE_2 = 0.99482$		$NSE_3 = 0.99992$		$NSE_4 = 0.99779$	

Из таблицы VII видно, что  $NSE_1, NSE_2, NSE_3, NSE_4$  примерно равны единицы. Можно сказать, что существует отношение 1:1 между измеренными и расчетными данными.

**Шаг 4.** Проверка существования линейной корреляции между измеренными и расчетными данными функций  $x_1(t), x_2(t), x_3(t), x_4(t)$ .

Таблица VIII показывает коэффициенты корреляции Пирсона для измеренных и расчетных значений функций  $x_1(t), x_2(t), x_3(t), x_4(t)$ .

Таблица VIII. Коэффициент корреляции Пирсона для измеренных и расчетных концентраций веществ

$x_1(t)$		$x_2(t)$		$x_3(t)$		$x_4(t)$	
0	0	0	0	90	90	10	10
77.7621	77.6392	12.4756	13.2560	48.1146	47.9435	6.7665	6.6826
132.2933	132.4128	7.4679	8.0098	25.7451	25.5591	4.3743	4.3519
162.8108	163.0488	4.1294	4.4219	13.7877	13.6371	2.7422	2.7812
179.5886	179.8534	2.2678	2.4240	7.3903	7.2827	1.6815	1.7522
188.7979	189.0719	1.2447	1.3307	3.9647	3.8930	1.0140	1.0917
193.8521	194.1404	0.6831	0.7323	2.1287	2.0833	0.6037	0.6742
196.6260	196.9342	0.3749	0.4040	1.1439	1.1161	0.3557	0.4133
$R_1 = 0.99998$		$R_2 = 0.99990$		$R_3 = 0.99998$		$R_4 = 0.99971$	

Из таблицы VIII видно, что  $R_1, R_2, R_3, R_4$  примерно равны единицы. Можно сказать, что существует линейная корреляция между измеренными и расчетными данными.

Будут построены диаграммы рассеивания, чтобы показать, что существует линейная корреляция 1:1 между измеренными и рассчитанными концентрациями веществ (см. рис. 1–4). На этих диаграммах координата каждой точки по горизонтальной оси выражает измеренную концентрацию, а по вертикальной оси – расчетную концентрацию.

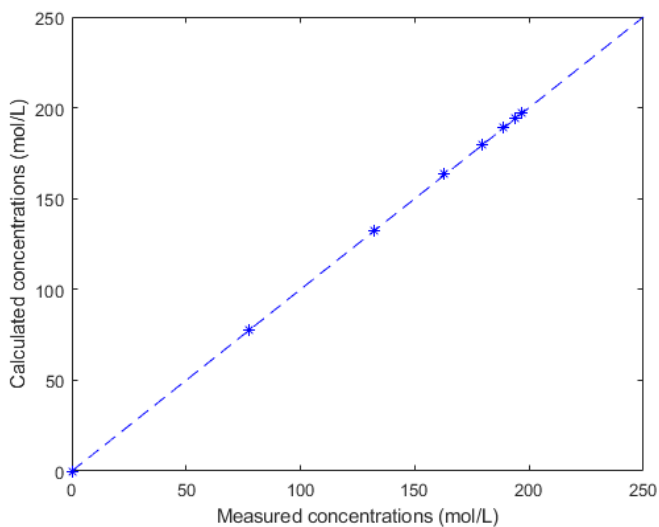


Рис. 1. Диаграмма рассеивания измеренных и расчетных концентраций вещества А

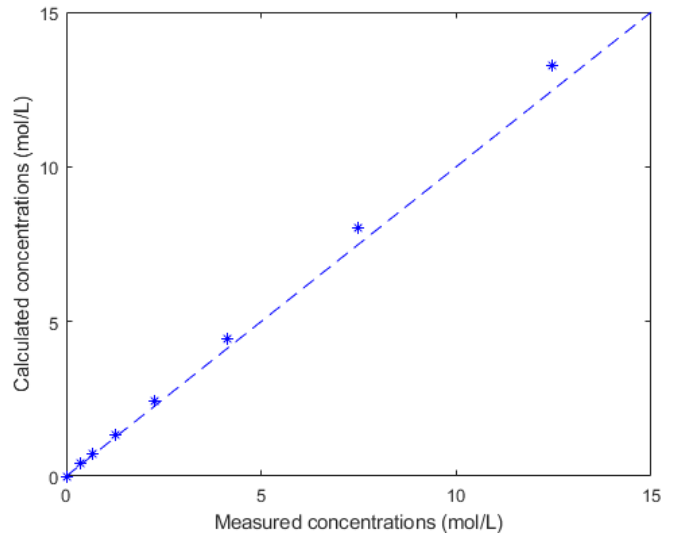


Рис. 2. Диаграмма рассеивания измеренных и расчетных концентраций вещества В

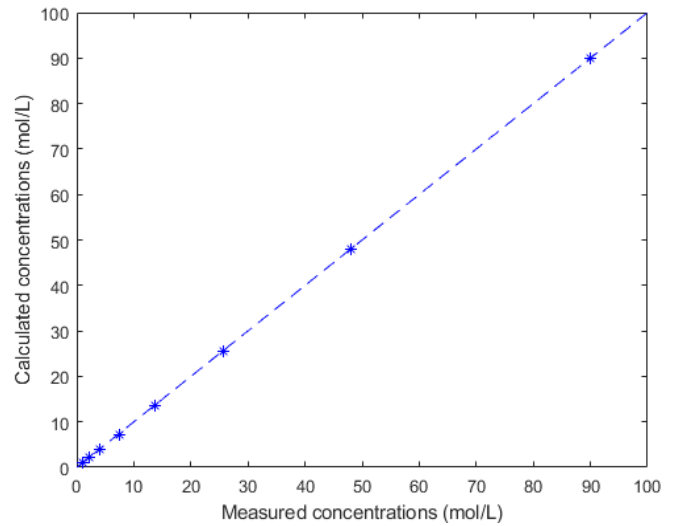


Рис. 3. Диаграмма рассеивания измеренных и расчетных концентраций вещества С

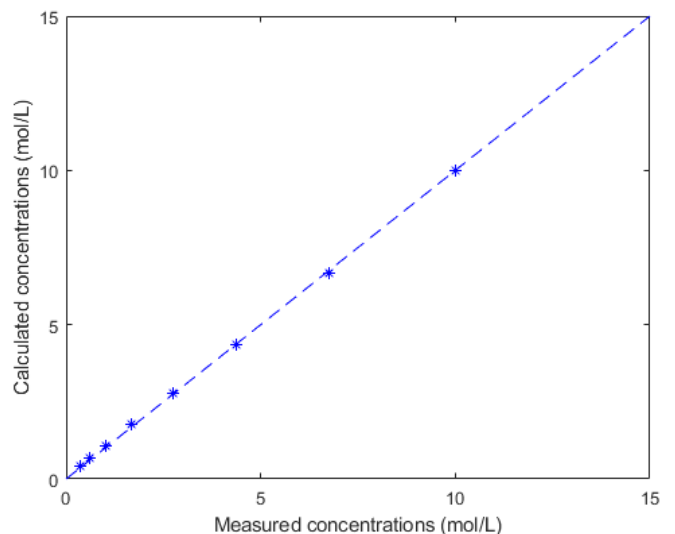


Рис. 4. Диаграмма рассеивания измеренных и расчетных концентраций вещества D

На рис. 1–4 видно, что точки, выражающие измеренные и расчетные концентрации веществ,

распределяются близко к линейной кривой 1:1.

Можно сделать вывод, что существует линейная корреляция 1:1 между измеренными и расчетными данными функций  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$ ,  $x_3(t)$ ,  $x_4(t)$ . Одновременно, можно сказать, что отклонение между регуляризованным и точным решениями обратной задачи очень мало. Приблизительные значения параметров  $k_1^\alpha = 0.02054$ ,  $k_2^\alpha = 0.00056$ ,  $k_3^\alpha = 0.00086$ ,  $k_4^\alpha = 0.01736$ ,  $k_5^\alpha = 0.09429$  можно использовать вместо точных значений при решении прямой задачи и исследовании процесса нефтепереработки.

В данной статье мы рассматриваем только простой численный пример, поскольку наша основная работа сосредоточена на изучении обратной задачи в области системного анализа прикладной математики. На практике вполне возможно построить математическую модель, описывающую кинетику процесса нефтепереработки с конкретными исходными веществами; построить обратную задачу восстановления параметров; применить результаты данной работы для проверки приемлемости найденных значений параметров математической модели.

## VI. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе был построен алгоритм оценки степени отклонения между регуляризованным и точным решениями в коэффициентных обратных задачах путем проверки существования линейной корреляции 1:1 между измеренными и расчетными данными. Для этого были использованы статистические параметры: коэффициент корреляции Пирсона и индекс эффективности Нэша-Сатклиффа. В качестве численного примера была рассмотрена кинетика простого процесса нефтепереработки. Была решена обратная задача восстановления параметров в математической модели процесса нефтепереработки. С найденными параметрами была решена прямая задача, позволяющая рассчитывать и прогнозировать изменение концентрации веществ во времени. Была подтверждена линейная корреляция 1:1 между измеренными концентрациями и расчетными концентрациями веществ. Отсюда, можно оценить степень отклонения между точным и регуляризованным решениями обратной задачи восстановления параметров в математической модели процесса нефтепереработки. Результаты расчетов показывают эффективность и применимость встроенного алгоритма в реальных задачах. В дальнейшем наша работа будет использована для решения коэффициентных обратных задач в разных областях в зависимости от объекта исследования, например, в химической промышленности, нефтехимии, образовании и т.д. для оценки приемлемости регуляризованное решение в обратных задачах восстановления параметров на замену точных решений.

## БИБЛИОГРАФИЯ

- [1] Кabanikhin S.I. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сибирское научное издательство. – 2009. – 457 с.
- [2] Kabanikhin S.I. Inverse and Ill-Posed Problems. Berlin: DE GRUYTER. – 2011. – 476 с.
- [3] Иванов В.К., Васин В.В., Танана В.П. Теория линейных некорректных задач и её приложения. М.: Наука. – 1978. – 206 с.
- [4] Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы. – 1979. – 285 с.
- [5] Севастьянов Л.А., Ловецкий К.П., Ланеев Е.Б. Регулярные методы и алгоритмы расчета обратных задач в моделях оптических структур. М.: Российский университет дружбы народов. – 2008. – 135 с.
- [6] Лэ В.Х., Черненькая Л.В. Методика нахождения приближенного решения для коэффициентной обратной задачи // Известия ТулГУ. Технические науки. – 2022. – № 10. – С. 274–282.
- [7] Лэ В.Х. Коэффициентная обратная задача в математической модели кинетики процесса нефтепереработки // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2022. – Т. 18. – № 5. – С. 64–72.
- [8] Лэ В.Х., Фирсов А.Н. Метод регуляризации Тихонова для решения обратной задачи в математической модели кинетики процесса нефтепереработки // Вестник кибернетики. – 2022. – Т. 48. – № 4. – С. 49–58.
- [9] Лэ В.Х., Черненькая Л.В. Исследование устойчивости регуляризованных решений коэффициентной обратной задачи. Часть 1 // Известия ТулГУ. Технические науки. – 2023. – № 1. – С. 8–14.
- [10] Лэ В.Х., Черненькая Л.В. Исследование устойчивости регуляризованных решений коэффициентной обратной задачи. Часть 2 // Известия ТулГУ. Технические науки. – 2023. – № 1. – С. 239–247.
- [11] Le Van Huyen, Chernenkaya L. V. Optimization of the Set of Regularized Solutions in the Coefficient Inverse Problem // 2023 International Conference for Advancement in Technology (ICONAT). – Goa, India: IEEE. – 2023. – С. 1–6.
- [12] Лэ В.Х. Устойчивость динамической системы с приближенными параметрами, найденными методом регуляризации Тихонова // Известия ТулГУ. Технические науки. – 2022. – № 12. – С. 429–435.
- [13] Тихонов А.Н., Гласко В.Б., Криксин Ю.А. К вопросу о квазиоптимальном выборе регуляризованного приближения // Докл. АН СССР. – 1979. – Т. 248. – № 3. – С. 531–535.
- [14] Морозов В.А. Методы регуляризации неустойчивых задач. М.: Изд-во МГУ. – 1987. – 216 с.
- [15] Лисковец О.А. Теория и методы решения некорректных задач // Итоги науки и техн. Сер. Мат. анализ. – 1982. – Т. 20. – С. 116–178.
- [16] Krause P., Boyle D.P., Båse F. Comparison of different efficiency criteria for hydrological model assessment // Adv. Geosci. – 2005. – Т. 5. – С. 89–97.
- [17] Xiaohui Zhong, Utpal Dutta. 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. – Т. 3. – № 5. – С. 255–265.
- [18] Schober P., Boer C., Schwarte L.A. Correlation Coefficients: Appropriate Use and Interpretation // Anesth. Analg. 2018. Т. 126, № 5. С. 1763–1768.
- [19] Ratner B. The correlation coefficient: Its values range between +1/–1, or do they? // J. Targeting, Meas. Anal. Mark. 2009. Т. 17, № 2. С. 139–142.
- [20] Lufi S., Ery S., Rispiningtati R. Hydrological Analysis of TRMM (Tropical Rainfall Measuring Mission) Data in Lesti Sub Watershed // Civ. Environ. Sci. 2020. – Т. 3. – № 1. – С. 18–30.
- [21] Mukaka M.M. Statistics corner: A guide to appropriate use of correlation coefficient in medical research. // Malawi Med. J. – 2012. – Т. 24. – № 3. – С. 69–71.
- [22] Hinkle D.E., Wiersma W., Jurs S.G. Applied Statistics for the Behavioral Sciences. Boston: Houghton Mifflin. – 2003. – 756 с.
- [23] D. N. Moriasi и др. Model Evaluation Guidelines for Systematic Quantification of Accuracy in Watershed Simulations // Trans. ASABE. – 2007. – Т. 50. – № 3. – С. 885–900.
- [24] Лысенкова С.А. О математическом моделировании каталитического крекинга // Вестник кибернетики. – 2018. – № 4. – С. 107–110.
- [25] Микшина В.С. и др. О математическом моделировании каталитического крекинга: монография. СПб.: Научное издание. – 2021. – 120 с.

# An algorithm for estimating the deviation between regularized and exact solutions in inverse problems

Le Van Huyen, L. V. Chernenkaya

**Abstract** — This work is devoted to the construction of an algorithm for checking the existence of a 1:1 linear correlation between the measured and calculated data of unknown functions of a mathematical model. The inverse problem is considered: by the values of the unknown functions of the mathematical model, measured at different times, to determine the values of its parameters. The direct problem is solved with parameter values that are elements of the regularized solution vector. Solutions of the direct problem are functions that depend on time. The calculated data are defined as the values of these functions at the corresponding time points. The Nash-Sutcliffe efficiency and the Pearson correlation coefficient were used to determine the existence of a 1:1 linear correlation between the measured and calculated data. As a numerical example, the inverse problem of restoring the parameters of a mathematical model describing the kinetics of the oil refining process is considered. As a result of the calculations, the existence of a 1:1 linear correlation between the measured and calculated concentrations of substances was determined. This work is considered as an additional step to recheck the regularized approximation to the exact solution of the inverse problem. In the future, the developed algorithm was included in our method for solving inverse problems for more reliable confirmation of the possibility of using a controlled solution instead of an exact one.

**Keywords** — inverse problem, mathematical model, deviation, regularized solution, 1:1 linear correlation, Nash-Sutcliffe efficiency, Pearson correlation coefficient.

## REFERENCES

- [1] Kabanikhin S.I. Obratnyye i nekorrektnyye zadachi [Inverse and ill-posed problems]. Novosibirsk: Siberian Federal University. – 2009. – 457 p.
- [2] Kabanikhin S.I. Inverse and Ill-Posed Problems. Berlin: DE GRUYTER. – 2011. – 476 p.
- [3] Ivanov V.K., Vasin V.V., Tanana V.P. Teoriya lineynykh nekorrektnykh zadach i ejo prilozheniya [Theory of linear ill-posed problems and its applications]. M.: Nauka [M.: Science]. – 1978. – 206 p.
- [4] Tikhonov A.N., Arsenin V.Ya. Metody resheniya nekorrektnykh zadach [Methods for solving ill-posed problems]. M.: Nauka, Glavnaya redaktsiya fiziko-matematicheskoy literatury [The main edition of physical and mathematical literature]. – 1979. – 285 p.
- [5] Sevastyanov L.A., Lovetsky K.P., Laneev E.B. Reguljarnyye metody i algoritmy rascheta obratnykh zadach v modeljah opticheskikh struktur [Regular methods and algorithms for calculating inverse problems in models of optical structures]. M.: Rossijskij universitet druzhby narodov [Moscow: Peoples' Friendship University of Russia]. – 2008. – 135 p.
- [6] Le V.H., Chernenkaya L.V. Method for finding an approximate solution for the coefficient inverse ill-posed problem // News of the Tula State University. Technical Sciences. – 2022. – No. 10. – P. 274–282.
- [7] Le V.H. Coefficient inverse problem in the mathematical model of the refining process kinetics // Bulletin of the Voronezh State Technical University. – 2022. – Vol. 18. – No. 5. – P. 64–72.
- [8] 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. – Vol. 48. – No. 4. – P. 49–58.
- [9] Le V.H., Chernenkaya L.V. Investigation of the stability of regularized solutions of the coefficient inverse problem. Part 1 // News of the Tula State University. Technical Sciences. – 2023. – No. 1. – P. 8–14.
- [10] Le V.H., Chernenkaya L.V. Investigation of the stability of regularized solutions of the coefficient inverse problem. Part 2 // News of the Tula State University. Technical Sciences. – 2023. – No. 1. – P. 239–247.
- [11] Le V.H., Chernenkaya L. V. Optimization of the Set of Regularized Solutions in the Coefficient Inverse Problem // 2023 International Conference for Advancement in Technology (ICONAT). – Goa, India: IEEE. – 2023. – C. 1–6.
- [12] Le V.H. Stability of a dynamical system with approximate parameters found by the Tikhonov regularization method // News of the Tula State University. Technical Sciences. – 2022. – No. 12. – P. 429–435.
- [13] Tikhonov A.N., Glasko V.B., Kriksin Yu.A. K voprosu o kvaziopital'nom vybore reguljарizovannogo priblizheniya [On the question of the quasi-optimal choice of the regularized approximation] // Dokl. AN SSSR [Dokl. Academy of Sciences of the USSR]. – 1979. – Vol. 248. – No. 3. – P. 531–535.
- [14] Morozov V.A. Metody reguljарizacii neustojchivyykh zadach [Regularization Methods for Unstable Problems]. M.: Izd-vo MGU [M.: Publishing House of Moscow State University]. – 1987. – 216 p.
- [15] Liskovets O.A. Teoriya i metody resheniya nekorrektnykh zadach [Theory and methods for solving ill-posed problems] // Itogi nauki i tehn. Ser. Mat. anal. [Results of science and technology. Series "Mathematical Analysis"]. – 1982. – Vol. 248. – P. 116–178.
- [16] Krause P., Boyle D.P., Båse F. Comparison of different efficiency criteria for hydrological model assessment // Adv. Geosci. – 2005. – T. 5. – C. 89–97.
- [17] Xiaohui Zhong, Utpal Dutta. 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. – T. 3. – № 5. – C. 255–265.
- [18] Schober P., Boer C., Schwarte L.A. Correlation Coefficients: Appropriate Use and Interpretation // Anesth. Analg. 2018. T. 126, № 5. C. 1763–1768.
- [19] Ratner B. The correlation coefficient: Its values range between +1/–1, or do they? // J. Targeting, Meas. Anal. Mark. 2009. T. 17, № 2. C. 139–142.
- [20] Lufi S., Ery S., Rispiningtati R. Hydrological Analysis of TRMM (Tropical Rainfall Measuring Mission) Data in Lesti Sub Watershed // Civ. Environ. Sci. 2020. – T. 3. – № 1. – C. 18–30.
- [21] Mukaka M.M. Statistics corner: A guide to appropriate use of correlation coefficient in medical research. // Malawi Med. J. – 2012. – T. 24. – № 3. – C. 69–71.
- [22] Hinkle D.E., Wiersma W., Jurs S.G. Applied Statistics for the Behavioral Sciences. Boston: Houghton Mifflin. – 2003. – 756 c.
- [23] Moriasi D.N. и др. Model Evaluation Guidelines for Systematic Quantification of Accuracy in Watershed Simulations // Trans. ASABE. – 2007. – T. 50. – № 3. – C. 885–900.
- [24] Lysenkova S.A. On mathematical modeling of catalytic cracking // Proceedings in Cybernetics. – 2018. – No. 4. – P. 107–110.
- [25] Mikshina V.S. and others. O matematicheskom modelirovanii kataliticheskogo krekinga [About mathematical modeling of catalytic cracking]. St. Petersburg: Naukoymkiye tekhnologii [SPb.: Science-intensive technologies]. – 2021. – 120 p.