

Обратная задача восстановления параметров математической модели при отсутствии информации о погрешности данных

Лэ Ван Хуен

Аннотация — Данная работа посвящена восстановлению значений параметров математической модели в случае, когда не известна информация о погрешности исходных данных. Цель работы состоит в нахождении приближенных значений параметров, которые должны непрерывно зависеть от погрешности исходных данных. Сформулирована обратная задача восстановления параметров математической модели. Для решения обратной задачи задача двухкритериальной оптимизации объединена задачей минимизации функционала Тихонова. Метод регуляризации Тихонова использован для решения задачи минимизации функционала Тихонова. Для выбора значений параметров регуляризации использован метод выбора квазиоптимальных значений параметра регуляризации. Найдено множество Парето-оптимальных решений задачи двухкритериальной оптимизации. Для упрощения выбора решения из множества Парето использован алгоритм, разработанный на основе метода k-средних. В качестве примера рассмотрена математическая модель кинетики процесса нефтепереработки. Найдены значения параметров математической модели.

Ключевые слова — восстановление параметров, математическая модель, обратная задача, регуляризация Тихонова, задача двухкритериальной оптимизации, метод k-средних.

I. ВВЕДЕНИЕ

Обратные задачи – важный класс задач в прикладной математике, который возникают, когда необходимо определить причину, структуру или характерные параметры системы на основе наблюдаемых данных. В отличие от прямых задач, в которых параметры и модели известны, а решения вычисляются, обратные задачи начинаются с результатов измерений и пытаются вывести скрытые величины, лежащие в основе физического процесса. Такой подход точно отражает природу многих проблем в научной и инженерной практике, где люди могут наблюдать только выходные сигналы и должны делать выводы о внутренней природе системы. В медицине компьютерная томография является типичной обратной задачей: из рентгеновских лучей, проходящих через тело под разными углами, компьютер восстанавливает трехмерное изображение

внутренних органов. В геофизике ученые используют данные сейсмических волн для определения структуры недр Земли и местоположения месторождений полезных ископаемых. В метеорологии и гидрологии модели прогнозирования погоды используют обратный анализ наземных и спутниковых наблюдений для определения начального состояния атмосферы [1]-[6].

Исторически первые идеи об обратных задачах возникли в начале XIX века в исследованиях теории потенциала и дифференциальных уравнений. Однако лишь в XX веке, в частности в исследованиях дифференциальных уравнений в частных производных, обратные задачи сформировались как самостоятельная область. Значительный поворотный момент произошел в 1963 году, когда А. Н. Тихонов предложил метод коррекции Тихонова для решения некорректных обратных задач [7], [8]. Эта работа заложила основу для теории регуляризации и открыла систематическое направление исследований обратных задач.

Основная трудность в решении обратных задач, по мнению Жака Адамара, заключается в их некорректности. Адамар считал, что задача считается корректной, если её решение существует, единственно и непрерывно зависит от исходных данных [1]-[6]. Однако в большинстве обратных задач нарушается хотя бы одно из этих трех условий. В частности, наиболее серьезным препятствием является неустойчивость решения – то есть, решение может сильно меняться при малом изменении исходных данных. На практике решение обратных задач не просто, поскольку измеренные данные всегда содержат ошибки, и часто невозможно точно определить уровень погрешности исходных данных. В силу этих характеристик обратная задача является не просто чисто математической задачей, но и центральной проблемой современной науки. Разработка методов регуляризации, методов оптимизации и, в последнее время, методов на основе искусственного интеллекта для повышения устойчивости и надежности решения становится новым направлением исследований.

В [9] рассмотрена обратная задача восстановления параметров в случае, когда информация об погрешности исходных данных известна. На основе этого предположения методы решения обратных задач, особенно метод регуляризации Тихонова, могут быть построены и проанализированы относительно легко. Однако в практических задачах точное определение или даже оценка погрешности исходных данных часто

Статья получена 31 марта 2026.

Лэ Ван Хуен, кандидат Вьетнамского государственного технического университета имени Ле Куй Дона, Ханой, Вьетнам (huyenlevan120193@gmail.com).

$$- \mathbf{B}_\delta = \begin{pmatrix} \frac{\tilde{x}_1(t_k+h) - \tilde{x}_1(t_k-h)}{2h} \\ \frac{\tilde{x}_2(t_k+h) - \tilde{x}_2(t_k-h)}{2h} \\ \dots \\ \frac{\tilde{x}_n(t_k+h) - \tilde{x}_n(t_k-h)}{2h} \end{pmatrix} - \text{вектор свободных}$$

членов, $k = 1, 2, \dots, N$.

Значения функций $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$ в моменты $(t_k \pm h)$, т.е. $x_1(t_k \pm h), x_2(t_k \pm h), \dots, x_n(t_k \pm h)$, где $k = 1, 2, \dots, N$, определены методом интерполяции кубическими сплайнами.

Матрица \mathbf{X}_η и вектор \mathbf{B}_δ называются приближениями к \mathbf{X}_0 и \mathbf{B}_0 по отношениям: $\|\mathbf{X}_\eta - \mathbf{X}_0\| \leq \eta, \|\mathbf{B}_\delta - \mathbf{B}_0\| \leq \delta$, где η, δ – маленькие положительные числа.

Решить систему уравнений $\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} = \mathbf{B}_\delta$ не просто, поскольку она может не иметь решения, может иметь много решений или её решение не зависит непрерывно от исходных данных $\{\mathbf{X}_\eta; \mathbf{B}_\delta\}$. Из системы уравнений $\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} = \mathbf{B}_\delta$ будет найдено приближение $\tilde{\mathbf{K}}$ к вектору \mathbf{K}^0 так, чтобы $\tilde{\mathbf{K}} \rightarrow \mathbf{K}_0$ при $\{\mathbf{X}_\eta; \mathbf{B}_\delta\} \rightarrow \{\mathbf{X}_0; \mathbf{B}_0\}$.

Рассмотрена задача двухкритериальной оптимизации:

$$\begin{cases} \|\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} - \mathbf{B}_\delta\| \rightarrow \min_{\mathbf{K}}, \\ \|\mathbf{K}\| \rightarrow \min_{\mathbf{K}}, \end{cases} \quad (2)$$

с дополнительным условием, что \mathbf{K} устойчиво при малом изменении исходных данных $\{\mathbf{X}_\eta; \mathbf{B}_\delta\}$.

Найдено множество Парето-оптимальных решений (далее – множество Парето) задачи (2). Для этого использован метод регуляризации Тихонова [1]-[6].

Рассмотрена задача оптимизации:

$$\|\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} - \mathbf{B}_\delta\| + \alpha \|\mathbf{K}\| \rightarrow \min_{\mathbf{K}} \min_{\alpha}, \quad (3)$$

где α – параметр регуляризации.

Из (3) сформирована регуляризирующая система уравнений Тихонова:

$$(\mathbf{X}_\eta^* \mathbf{X}_\eta + \alpha \mathbf{E}) \mathbf{K} = \mathbf{X}_\eta^* \mathbf{B}_\delta, \quad (4)$$

где \mathbf{X}_η^* – сопряженная матрица к \mathbf{X}_η ; α – параметр регуляризации [1]-[6].

При каждом значении α решение задачи (3) имеет следующий вид: $\mathbf{K}^\alpha = (\mathbf{X}_\eta^* \mathbf{X}_\eta + \alpha \mathbf{E})^{-1} \mathbf{X}_\eta^* \mathbf{B}_\delta$, которое называется регуляризованным решением и устойчиво при малом изменении $\{\mathbf{X}_\eta; \mathbf{B}_\delta\}$. Нетрудно доказать, что \mathbf{K}^α также является Парето-оптимальным решением задачи (2).

Для нахождения решения \mathbf{K}^α , которое удовлетворяет условию, что $\|\mathbf{K}^\alpha - \mathbf{K}^0\| \approx 0$, использован метод выбора квазиоптимальных значений параметра регуляризации [13], [14]. Разработан алгоритм выбора значений параметра регуляризации.

Шаг 1. Построение последовательности α_i с начальным значением $\alpha_0 = 1$ и знаменателем прогрессии $q = const$ ($0 < q < 1$) по условию: $\alpha_{i+1} = q\alpha_i$, где $i = 0, 1, 2, \dots, L$;

Шаг 2. Решение система (4) со значениями параметра регуляризации, которые являются элементами последовательности $\{\alpha_i\}$. В результате получена множество решений $\{\mathbf{K}^{\alpha_i}\}$;

Шаг 3. Вычисление нормы разности элементов на двух соседних итерациях в последовательности $\{\mathbf{K}^{\alpha_i}\}$:

$$\Delta_i = \left\| -\alpha_i \frac{d\mathbf{K}^{\alpha_i}}{d\alpha_i} \right\| \approx \left\| -\alpha_i \frac{\mathbf{K}^{\alpha_{i+1}} - \mathbf{K}^{\alpha_i}}{\alpha_{i+1} - \alpha_i} \right\| = \frac{1}{1-q} \|\mathbf{K}^{\alpha_{i+1}} - \mathbf{K}^{\alpha_i}\|,$$

где $i = 0, 1, 2, \dots, L-1$. В результате расчетов получено множество $\{\Delta_i\}$;

Шаг 4. Выбор значений параметра регуляризации. В качестве параметра регуляризации выбраны значения α_i , для которых $\Delta_i \approx 0$.

В результате расчетов получено множество решений задачи (4), которое обозначается \mathbf{Q} .

Задача (2) преобразована в виде:

$$\begin{cases} \|\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} - \mathbf{B}_\delta\| \rightarrow \min_{\mathbf{K} \in \mathbf{Q}}, \\ \|\mathbf{K}\| \rightarrow \min_{\mathbf{K} \in \mathbf{Q}}. \end{cases} \quad (5)$$

Как выше сказано, что \mathbf{Q} также является множество Парето задачи (5). Количество элементов множеств \mathbf{Q} , предположим, равно M , может быть большим. Для упрощения выбора элементов в множестве \mathbf{Q} использован метод k-средних [17]-[18].

Разработан следующий алгоритм:

Шаг 1. Вычислены значения $f_1(\mathbf{K}_i) = \|\mathbf{X}_\eta \mathbf{K}_i - \mathbf{B}_\delta\|$, $f_2(\mathbf{K}_i) = \|\mathbf{K}_i\|$, где $\mathbf{K}_i \in \mathbf{Q}$, $i = 1, 2, \dots, M$. В результате получено множество $\mathbf{Q}' = \{f_1(\mathbf{K}_i), f_2(\mathbf{K}_i)\}$;

Шаг 2. Разделены элементы множества \mathbf{Q}' на три кластера со схожими характеристиками.

Первый кластер состоит из элементов \mathbf{K}_i , удовлетворяющих условию $f_1(\mathbf{K}_i)$ больше и $f_2(\mathbf{K}_i)$ меньше. Второй кластер состоит из элементов \mathbf{K}_i , удовлетворяющих условию $f_1(\mathbf{K}_i)$ – средний и $f_2(\mathbf{K}_i)$ – средний. Третий кластер состоит из элементов \mathbf{K}_i , удовлетворяющих условию $f_1(\mathbf{K}_i)$ меньше и $f_2(\mathbf{K}_i)$ больше.

Найдены три центра трех кластеров. Также

определены три элемента множества \mathbf{Q}' , наиболее близкие к центрам трех кластеров. Эти элементы называются оптимальными элементами трех кластеров.

Шаг 3. Выбраны элементы в множестве \mathbf{Q}

Из множества \mathbf{Q} выбраны три элемента \mathbf{K}^1 , \mathbf{K}^2 , \mathbf{K}^3 , так чтобы $(f_1(\mathbf{K}^1), f_2(\mathbf{K}^1))$, $(f_1(\mathbf{K}^2), f_2(\mathbf{K}^2))$, $(f_1(\mathbf{K}^3), f_2(\mathbf{K}^3))$ являются оптимальными элементами трех кластеров.

Шаг 4. Решена прямая задача и проверено совпадение измеренных и расчетных данных.

Решена прямая задача с векторами \mathbf{K}^1 , где $\mathbf{K}^1 = (a_{11}^1, a_{12}^1, \dots, a_{1n}^1, \dots, a_{n1}^1, a_{n2}^1, \dots, a_{nm}^1)^T$.

Вычислены значения функций $x_1(t)$, $x_2(t)$, ..., $x_n(t)$ в моменты t_k : $x_1(t)_{t=t_k} = \hat{x}_1(t_k)$, $x_2(t)_{t=t_k} = \hat{x}_2(t_k)$, ..., $x_n(t)_{t=t_k} = \hat{x}_n(t_k)$, где $k=1, 2, \dots, N$. В данной работе $\hat{x}_1(t_k)$, $\hat{x}_2(t_k)$, ..., $\hat{x}_n(t_k)$ называются расчетными данными и определяются с помощью математической модели (1).

Проверено совпадение между измеренными данными и расчетными данными с помощью средней абсолютной ошибки (MAE) [12].

Аналогично для векторов \mathbf{K}^2 и \mathbf{K}^3 . Из \mathbf{K}^1 , \mathbf{K}^2 , \mathbf{K}^3 выбран такой вектор, который удовлетворяет условию, что отклонение между измеренными и расчетными данными является наименьшей.

В результате расчетов найдено приближение $\tilde{\mathbf{K}}$ к вектору \mathbf{K}^0 так, чтобы $\tilde{\mathbf{K}} \rightarrow \mathbf{K}_0$ при $\{\mathbf{X}_n; \mathbf{B}_s\} \rightarrow \{\mathbf{X}_0; \mathbf{B}_0\}$.

IV. ЧИСЛЕННЫЙ ПРИМЕР

В работах [9], [15], [16] исследована динамика химических реакций в процессе нефтепереработки. Математическая модель, описывающая этот процесс, имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dx_1(t)}{dt} = k_5 x_2(t) + k_1 x_3(t) + k_4 x_4(t), \\ \frac{dx_2(t)}{dt} = -k_5 x_2(t) + k_1 x_3(t) + k_4 x_4(t), \\ \frac{dx_3(t)}{dt} = -(k_1 + k_2) x_3(t) + k_3 x_4(t), \\ \frac{dx_4(t)}{dt} = k_2 x_3(t) - (k_2 + k_4) x_4(t), \end{cases} \quad (6)$$

где $x_1(t)$, $x_2(t)$, $x_3(t)$, $x_4(t)$ – неизвестные функции, выражающие зависимость от времени концентрации веществ, $\frac{\text{моль}}{\text{л}}$; k_1 , k_2 , k_3 , k_4 , k_5 – константы скорости химических реакций, c^{-1} .

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 веществ в начальный момент времени $t=0$: $x_1(0)$, $x_2(0)$, $x_3(0)$, $x_4(0)$, определить функции $x_1(t)$, $x_2(t)$, $x_3(t)$, $x_4(t)$.

Обратная задача. По заданным (измеренным) концентрациям вещества в разные моменты времени t_k : $\tilde{x}_1(t_k)$, $\tilde{x}_2(t_k)$, $\tilde{x}_3(t_k)$, $\tilde{x}_4(t_k)$, где $k=1, 2, \dots, m$, определить значения параметров математической модели k_{10} , k_{20} , k_{30} , k_{40} , k_{50} .

Пусть известны концентрации веществ в моменты времени t_k , где $k=1, 2, \dots, 8$ (таблица I) [9].

Таблица I. Заданные (измеренные) концентрации веществ в моменты времени t_k , $k=1, 2, \dots, 8$

k	t_k (с)	$\tilde{x}_1(t_k)$	$\tilde{x}_2(t_k)$	$\tilde{x}_3(t_k)$	$\tilde{x}_4(t_k)$
1	0	0	0	90	10
2	30	77.762060	12.47561	48.11464	6.76653
3	60	132.29327	7.46789	25.74512	4.37430
4	90	162.81084	4.12939	13.78771	2.74217
5	120	179.58861	2.26780	7.39035	1.68145
6	150	188.79792	1.24467	3.96468	1.01403
7	180	193.85216	0.68309	2.12871	0.60366
8	210	196.62600	0.37489	1.14389	0.35567

Преобразована (6) в формальную систему уравнений $\mathbf{XK} = \mathbf{V}$ относительно параметров k_1 , k_2 , k_3 , k_4 , k_5 :

$$\begin{cases} x_3(t)k_1 + x_4(t)k_4 + x_2(t)k_5 = \frac{x_1(t+h) - x_1(t-h)}{2h} + o(h^3), \\ x_3(t)k_1 + x_4(t)k_4 - x_2(t)k_5 = \frac{x_2(t+h) - x_2(t-h)}{2h} + o(h^3), \\ -x_3(t)k_1 - x_3(t)k_2 + x_4(t)k_3 = \frac{x_3(t+h) - x_3(t-h)}{2h} + o(h^3), \\ [x_3(t) - x_4(t)]k_2 - x_4(t)k_4 = \frac{x_4(t+h) - x_4(t-h)}{2h} + o(h^3). \end{cases}$$

«Приближенная» система уравнений $\mathbf{X}_n \mathbf{K} = \mathbf{V}_s$ имеет следующий вид [9]:

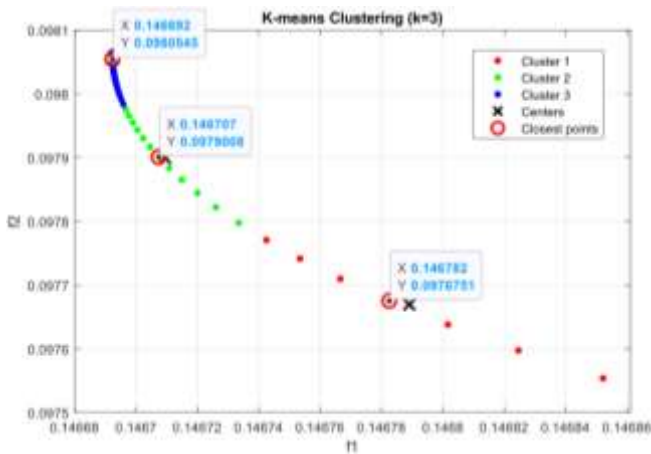


Рис. 2. Разделение множества Парето-оптимальных векторов на три кластера

На рис. 2 центры трех кластеров обозначены черными символами «x». Определены оптимальные элементы кластеров: (0.146692, 0.098054), (0.146707, 0.097901), (0.146782, 0.097675).

Шаг 3. Выбраны элементы в множестве Q

Из множества Q выбраны три элемента $K^{\alpha_3} = (0.02081, 0.00024, 0.00054, 0.01559, 0.09415)$, $K^{\alpha_{12}} = (0.02065, 0.00043, 0.00072, 0.01663, 0.09424)$, $K^{\alpha_{39}} = (0.02054, 0.00056, 0.00085, 0.01734, 0.09429)$.

Шаг 4. Решена прямая задача и проверено совпадение измеренных и расчетных данных.

Первый случай: Решена прямая задача со значениями параметров $k_1 = 0.02081$, $k_2 = 0.00024$, $k_3 = 0.00054$, $k_4 = 0.01559$, $k_5 = 0.09415$.

Расчетные концентрации веществ в разные моменты времени t_k , $k = 1, 2, \dots, 8$, приведены в таблице IV.

Таблица IV. Расчетные концентрации веществ в первом случае

k	$t_k (c)$	$\hat{x}_1(t_k)$	$\hat{x}_2(t_k)$	$\hat{x}_3(t_k)$	$\hat{x}_4(t_k)$
1	0	0	0	90	10
2	30	77.75927	13.28710	47.95762	6.59287
3	60	132.49974	8.01218	25.56661	4.29944
4	90	163.05673	4.41557	13.63709	2.78015
5	120	179.79985	2.41894	7.27849	1.78573
6	150	188.98731	1.32902	3.88755	1.14086
7	180	194.04868	0.73329	2.07814	0.72571
8	210	196.84972	0.40650	1.11198	0.45999

Средняя абсолютная ошибка (MAE) между измеренными и расчетными данными равна 0.14803.

Второй случай: Решена прямая задача со значениями параметров $k_1 = 0.02065$, $k_2 = 0.00043$, $k_3 = 0.00072$, $k_4 = 0.01663$, $k_5 = 0.09424$.

Расчетные концентрации веществ в разные моменты времени t_k , $k = 1, 2, \dots, 8$, приведены в таблице V.

Таблица V. Расчетные концентрации веществ во втором

случае

k	$t_k (c)$	$\hat{x}_1(t_k)$	$\hat{x}_2(t_k)$	$\hat{x}_3(t_k)$	$\hat{x}_4(t_k)$
1	0	0	0	90	10
2	30	77.68097	13.26647	47.94728	6.65058
3	60	132.43556	8.00947	25.55993	4.33628
4	90	163.03758	4.41887	13.63524	2.78578
5	120	179.81751	2.42191	7.27964	1.76939
6	150	189.02460	1.33014	3.88993	1.11377
7	180	194.09138	0.73283	2.08066	0.69604
8	210	196.88899	0.40512	1.11414	0.43243

Средняя абсолютная ошибка (MAE) между измеренными и расчетными данными равна 0.146

Третий случай: Решена прямая задача со значениями параметров $k_1 = 0.02054$, $k_2 = 0.00056$, $k_3 = 0.00085$, $k_4 = 0.01734$, $k_5 = 0.09429$.

Расчетные концентрации веществ в разные моменты времени t_k , $k = 1, 2, \dots, 8$, приведены в таблице VI.

Таблица VI. Расчетные концентрации веществ во третьем случае

k	$t_k (c)$	$\hat{x}_1(t_k)$	$\hat{x}_2(t_k)$	$\hat{x}_3(t_k)$	$\hat{x}_4(t_k)$
1	0	0	0	90	10
2	30	77.62669	13.25433	47.94238	6.68893
3	60	132.39449	8.00934	25.55793	4.35940
4	90	163.02964	4.42202	13.63613	2.78791
5	120	179.83531	2.42430	7.28196	1.75755
6	150	189.05557	1.33102	3.89253	1.09569
7	180	194.12569	0.73256	2.08295	0.67701
8	210	196.92085	0.40424	1.11591	0.41530

Средняя абсолютная ошибка (MAE) между измеренными и расчетными данными равна 0.14553.

Видно, что в третьем случае абсолютная ошибка (MAE) наименьшая. Поэтому, в качестве параметров математической модели (1) можно выбрать $k_1 = 0.02054$, $k_2 = 0.00056$, $k_3 = 0.00085$, $k_4 = 0.01734$, $k_5 = 0.09429$.

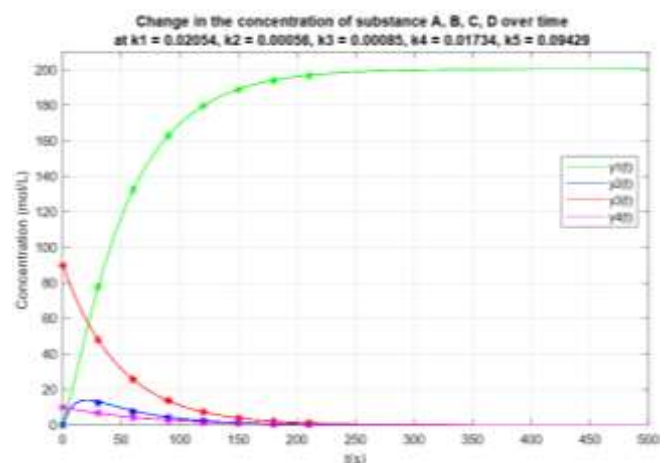


Рис. 3. Изменение концентрации вещества при $k_1 = 0.02054$, $k_2 = 0.00056$, $k_3 = 0.00085$, $k_4 = 0.01734$, $k_5 = 0.09429$

На рис. 3 кривые $x_1(t)$, $x_2(t)$, $x_3(t)$, $x_4(t)$ выражают изменение с течением времени концентраций веществ по математической модели (1). Измеренные концентрации веществ отмечены звездочками. Видно, что измеренные значения очень близки к кривым.

V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе была рассмотрена обратная задача восстановления параметров математической модели в случае, когда не известна погрешность исходных данных. Задача двухкритериальной оптимизации была решена в сочетании с задачей минимизации функционала Тихонова. Разработан алгоритм, основанный на кластеризации методом k -средних, для упрощения выбора решений в множестве Парето. Цели работы достигнуты. Были найдены приближенные значения параметров математической модели, которые устойчивы при малом изменении исходных данных. Разработанные алгоритмы были использованы для решения обратной задачи восстановления параметров математической модели в процессе нефтепереработки.

Данная работа вносит вклад в развитие теории решения обратных задач, связанных с восстановлением параметров в условиях отсутствия информации о погрешности исходных данных. Наша работа также вносит методологический вклад, интегрируя алгоритм кластеризации k -средних для выбора решения, тем самым преодолевая разрыв между теорией обратных задач и методами машинного обучения.

Данная работа позволяет эффективно решать обратные задачи в инженерной и промышленной областях, где точное измерение погрешности исходных данных затруднено. Применение к процессу нефтепереработки демонстрирует осуществимость и эффективность метода на практике.

БИБЛИОГРАФИЯ

- [1] Денисов А.М. Введение в теорию обратных задач. М.: Изд-во МГУ. – 1994. – 208 с.
- [2] Денисов А.М., Дмитриев В.И. Обратные и некорректно поставленные задачи // Вестник Московского университета. Серия 15. Вычислительная математика и кибернетика. – 2005. – № 5. – С. 23–30.
- [3] Иванов В.К. О некорректно поставленных задачах // Ма- тем. сб. – 1963. – Т. 61(103). – № 2. – С. 211–223.
- [4] Кабанихин С.И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сибирский федеральный университет. – 2009. – 457 с.
- [5] Colton D., Kress R. Ill-Posed Problems // Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory. – 2019. – Т. 93. 2019. С. 111–136.
- [6] Kabanikhin S.I. Inverse Problems of Natural Science // Comput. Math. Math. Phys. – 2020. – Т. 60. – № 6. – С. 911–914.
- [7] Тихонов А.Н. О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации // Докл. АН СССР. – 1963. – Т. 151. – № 3. – С. 501–504.
- [8] Тихонов А.Н. О регуляризации некорректно поставленных задач // Докл. АН СССР. – 1963. – Т. 153. – № 1. – С. 49–52.
- [9] Лэ В.Х., Черненькая Л.В. Обратная задача восстановления параметров математической модели с заданной погрешностью данных // Int. J. Open Inf. Technol. – 2023. – Т. 11. – № 7. – С. 86–93.
- [10] Лэ В.Х. Коэффициентная обратная задача в математической модели кинетики процесса нефтепереработки // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2022. – Т. 18. – № 5. – С. 64–72.
- [11] Лэ В.Х., Черненькая Л.В. Методика нахождения приближенного решения для коэффициентной обратной задачи // Известия

- ТулГУ. Технические науки. – 2022. – № 10. – С. 274–282.
- [12] Лэ В.Х., Черненькая Л.В. Алгоритм оценки отклонения между регуляризованным и точным решениями в обратных задачах // Int. J. Open Inf. Technol. – 2023. – Т. 11. – № 10. – С. 6–13.
- [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] Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. 2-е изд. М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы. – 1979. – 285 с.
- [15] Микшина В.С. и др. О математическом моделировании каталитического крекинга: монография. СПб.: Научное издание. – 2021. – 120 с.
- [16] Лысенкова С.А. О математическом моделировании каталитического крекинга // Вестник кибернетики. – 2018. – № 4. – С. 107–110.
- [17] Vemuri V.K. The Hundred-Page Machine Learning Book // J. Inf. Technol. Case Appl. Res. – 2020. – Т. 22. – № 2. – С. 136–138.
- [18] Jo T. Machine Learning Foundations. Cham: Springer International Publishing. – 2021. – 391 с.

The inverse problem of restoring the parameters of a mathematical model in the absence of information about the data error

Le Van-Huyen

Abstract — This paper examines the recovery of mathematical model parameter values in cases where the uncertainty of the initial data is unknown. The objective of the paper is to find approximate parameter values that should continuously depend on the uncertainty of the initial data. An inverse problem of recovering the mathematical model parameters is formulated. To solve the inverse problem, a two-criteria optimization problem is combined with a Tikhonov functional minimization problem. The Tikhonov regularization method is used to solve the Tikhonov functional minimization problem. A method for selecting quasi-optimal regularization parameter values is used to select the regularization parameter values. A set of Pareto-optimal solutions to the two-criteria optimization problem is found. To simplify the selection of a solution from the Pareto set, an algorithm developed based on the k-means method is used. A mathematical model of the kinetics of an oil refining process is considered as an example. The values of the mathematical model parameters are found.

Keywords — parameter recovery, mathematical model, inverse problem, Tikhonov regularization, two-criteria optimization problem, k-means method.

REFERENCES

- [1] Denisov A.M. Vvedenie v teoriyu obratnykh zadach [Introduction to the theory of inverse problems]. M.: Izd-vo MGU [Moscow: Publishing House of Moscow State University]. – 1994. – 208 p.
- [2] Denisov A.M., Dmitriev V.I. Obratnye i nekorrektno postavlennye zadachi [Inverse and incorrectly set tasks] // Vestnik Moskovskogo universiteta. Seriya 15. Vychislitel'naya matematika i kibernetika. [Bulletin of the Moscow University. Series 15. Computational mathematics and cybernetics]. – 2005. – No. 5. – P. 23-30.
- [3] Ivanov V.K. O nekorrektno postavlennykh zadachah [On incorrectly set tasks] // Ma- tem. sb [Mathematical Collection]. – 1963. – Vol. 61(103). – № 2. – P. 211-223.
- [4] Kabanikhin S.I. Obratnye i nekorrektnye zadachi [Inverse and ill-posed problems]. Novosibirsk: Sibirskij federal'nyj universitet [Novosibirsk: Siberian Federal University]. – 2009. – 457 p.
- [5] Colton D., Kress R. Ill-Posed Problems // Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory. – 2019. – Vol. 93. P. 111-136.
- [6] Kabanikhin S.I. Inverse Problems of Natural Science // Comput. Math. Math. Phys. – 2020. – Vol. 60. – No. 6. – P. 911-914.
- [7] Tikhonov A.N. On solving incorrectly set tasks and the regularization method [O reshenii nekorrektno postavlennykh zadach i metode regularizacii] // Dokl. AN SSSR [Dokl. USSR Academy of Sciences]. – 1963. – Vol. 151. – No. 3. P. 501-504.
- [8] Tikhonov A.N. O regularizacii nekorrektno postavlennykh zadach [On regularization of ill-posed problems] // Dokl. AN SSSR [Dokl. USSR Academy of Sciences]. – 1963. – Vol. 153. – No. 1. – P. 49-52.
- [9] Le V.H., Chernenkaya L.V. Obratnaya zadacha vosstanovleniya parametrov matematicheskoy modeli s zadannoj pogreshnost'yu dannyh [The inverse problem of restoring the parameters of a mathematical model with a given data error] // Int. J. Open Inf. Technol. – 2023. – Vol. 11. – No. 7. – P. 86-93.
- [10] Le, V.H. Koefitsientnaya obratnaya zadacha v matematicheskoy modeli kinetiki processa neftepererabotki [Coefficient inverse problem in the mathematical model of the kinetics of the oil refining process] // Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo tehniceskogo universiteta [Bulletin of the Voronezh State Technical University]. – 2022. – Vol. 18. – No. 5. – P. 64-72.
- [11] Le, V.Kh., Chernenkaya, L.V., Metodika nahozhdeniya priblizhennogo resheniya dlya koefitsientnoj obratnoj zadachi [A method for finding an approximate solution for a coefficient inverse problem], Izvestiya TulGU. Tehnicheskie nauki [Izvestiya TulSU. Technical sciences]. – 2022. – No. 10. – P. 274-282.
- [12] Le V.Kh., Chernenkaya L.V. Algoritm ocenki otkloneniya mezhdru regularizovannym i tochnym resheniyami v obratnykh zadachah [Algorithm for estimating the deviation between regularized and exact solutions in inverse problems] // Int. J. Open Inf. Technol. – 2023. – Vol. 11. – No. 10. – P. 6-13.
- [13] Tikhonov A.N., Glasko V.B., Kriksin Yu.A. K voprosu o kvaziopital'nom vybore regularizovannogo priblizheniya [On the issue of quasi-optimal choice of a regularized approximation] // Dokl. AN SSSR [Dokl. USSR Academy of Sciences]. – 1979. – vol. 248. – No. 3. P. 531-535.
- [14] Tikhonov A.N., Arsenin V.Ya. Metody resheniya nekorrektnykh zadach [Methods for solving ill-posed problems]. M.: Nauka, Glavnaya redakciya fiziko-matematicheskoy literatury [Moscow: Nauka, The main editorial office of the physico-mathematical literature]. – 1979. – 285 p.
- [15] Mikshina V.S. et al. O matematicheskom modelirovanii kataliticheskogo krekinga [On mathematical modeling of catalytic cracking]. SPb.: Naukoemkie tehnologii [St. Petersburg: Science-intensive technologies]. – 2021. – 120 p.
- [16] Lysenkova S.A. O matematicheskom modelirovanii kataliticheskogo krekinga [On mathematical modeling of catalytic cracking] // Vestnik kibernetiki [Bulletin of Cybernetics]. – 2018. – No. 4. – P. 107-110.
- [17] Vemuri V.K. The Hundred-Page Machine Learning Book // J. Inf. Technol. Case Appl. Res. – 2020. – vol. 22. – No. 2. P. 136-138.
- [18] Jo T. Machine Learning Foundations. Cham: Springer International Publishing. – 2021. – 391 p.