УДК 519.652+519.654+519.613

Д.А. Мустафина[1], А.Е. Буракова[2],
А.И. Мустафин[2], А.С. Александрова[3]

[1]ООО «Промышленная кибернетика», Пермь, Россия
[2]ООО «Инфраструктура ТК», Пермь, Россия
[3]Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

ОБОБЩЕННАЯ МНОГОМЕРНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ МЕТОДОМ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Рассмотрен метод наименьших квадратов как способ обобщенной многомерной интерполяции. Интерполятор методом наименьших квадратов является обобщением интерполяции полиномом Лагранжа и обладает всеми ее свойствами. Интерполятор позволяет использовать в интерполяционном многочлене произвольные функции или произвольные комбинации произвольных функций от произвольных переменных или их комбинаций из исходного многомерного их набора. Предложен метод расчета аппроксимирующей зависимости методом наименьших квадратов по алгоритму, подобному расчету интерполятора Лагранжа в обобщенном виде, предложенном в статье. Расширено правило Крамера на случай, когда вторая матрица имеет больше чем один столбец и в том числе для получения произведения обратной матрицы на любую согласованную с ней матрицу без обращения матрицы, в том числе и на единичную, что и дает обратную к исходной матрицу. Показано, что аппроксимация методом наименьших квадратов может быть представлена в виде суммы отношений определителей. Отмечены очевидные, но не используемые в практике преимущества методов – возможность получения одним матричным выражением нескольких корреляционных зависимостей для метода наименьших квадратов и возможность преобразования интерполируемой переменной в интерполяционном полиноме Лагранжа.

Представлен пример применения интерполяции методом наименьших квадратов для случая нахождения двух функциональных зависимостей линейных относительно неизвестных параметров и произвольных известных функций от двух независимых переменных. Получены функциональные зависимости доли нормального пентана и изопентана в изопентановой фракции от технологических параметров (давления и температуры) на промышленной установке изомеризации пентан-гексановой фракции. Полученные результаты могут быть применены для задачи управления температурой верха колонны деизопентанизации с целью поддержания оптимального содержания нормального пентана в отделяемом изопентане, что позволит оптимизировать расход тепловой энергии.

Ключевые слова: многомерная интерполяция, аппроксимация, метод наименьших квадратов, определитель, обращение матриц, умножение обратной матрицы.

D.A. Mustafina[1], A.E. Burakova[2],
A.I. Mustafin[2], A.S. Aleksandrova[3]

[1]OOO «Promyshlennaia kibernetika», Perm, Russian Federation,
[2]OOO «Infrastruktura TK», Perm, Russian Federation,
[3]Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

GENERALIZED MULTIVARIATE INTERPOLATION THROUGH THE LEAST-SQUARE METHOD

The article considers the least-square method as a technique of the generalized multivariate interpolation. The interpolation instrument is the generalization of the Lagrange interpolation with all its features. The interpolator allows us to use in the interpolation polynomial arbitrary functions or arbitrary combinations of arbitrary functions of arbitrary variables or their combinations from the original multidimensional set of them. The authors suggest the method of calculation of the least-square method approximating value by the algorithm similar to the calculation of the Lagrange interpolation instrument. This study develops the Kramer`s rule and suggests the method which allows to receive the product of reciprocal matrix and every matrix matched without inversion inclusive identity matrix. It is shown that the least squares approximation can be represented as a sum of determinants relations. The authors describe evident methods advantages which are not used in the practical work – possibility to get by one matrix expression several correlations through the least-square method and to modify the interpolated variable by the Lagrange interpolation instrument.

An example of the application of least squares interpolation is presented for the case of finding two functional dependencies of parameters which are linear with respect to unknowns parameters and arbitrary known functions from two independent variables. Functional dependences of the proportion of normal pentane and isopentane in the isopentane fraction on process parameters (pressure and temperature) on the industrial isomerization unit of the pentane-hexane fraction are obtained. The obtained results can be applied to the task of controlling the temperature of the top of the deisopentanization column in order to maintain the optimum content of normal pentane in the isopentane to be separated, which will allow to optimize the consumption of thermal energy.

Keywords: multivariate interpolation, approximation, least-square method, determinant, matrix inversion, multiplication of the reciprocal matrix.

Введение. Задача многомерной интерполяции наряду с регрессией как вариант аппроксимации при моделировании имеет место во множестве различных областей исследований и управления [1–3]. Существующие методы многомерной интерполяции настолько громоздки, что обычно ограничиваются многочленом первой или второй степени [4, 5], имеют множество ограничений и условий применения [6]. Часто приходится предварительно подбирать замену переменных, преобразующих описывающую функцией поверхность в плоскость [7]. Подход, предложенный в [8], для функций со многими переменными является попыткой обобщения метода Лагранжа, но имеет ряд описанных там же недостатков и логически сложен. Предложенный в данной статье метод логически существенно проще, может сразу учитывать или вводить нелинейности по зависимым и моделируемым переменным. Метод основан на распространённом среди исследователей методе наименьших квадратов (МНК) [9–12]. Поскольку метод сводится к матричным операциям и вычислению определителей, уделено внимание матричной алгебре.

Метод наименьших квадратов как способ интерполяции. Результат МНК при количестве исходных точек, равном числу искомых коэффициентов, является интерполятором $L(x)$. Полученный полином обеспечивает выполнение основного условия интерполяции: $L(x_i) = y_i$.

Имеются матрицы исходных данных:

$$X_b = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \text{ и } Y_b = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ x_4 \end{bmatrix}.$$

Квадратной матрицей X и матрицей-столбцом Y для расчета интерполяционного полинома третей степени методом наименьших квадратов будут:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 \\ 1 & x_4 & x_4^2 & x_4^3 \end{bmatrix}, \; Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ x_4 \end{bmatrix}.$$

При подстановке в многочлен $y = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + a_3 \cdot x^3$ элементов вектора – столбца рассчитанных МНК [2] – $\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \left(X^{'}X\right)^{-1}\left(X^{'}Y\right)$,

где X' транспонированная матрица X, и при группировке членов по y_i получим выражение:

$$y = \frac{\begin{pmatrix} y_1(x_3 - x_4)\cdot(x_2 - x_4)\cdot(x_2 - x_3)\cdot(x - x_4)\cdot(x - x_3)\cdot(x - x_2) - \\ - y_2(x_3 - x_4)\cdot(x_1 - x_4)\cdot(x_1 - x_3)\cdot(x - x_4)\cdot(x - x_3)\cdot(x - x_1) + \\ + y_3(x_2 - x_4)\cdot(x_1 - x_4)\cdot(x_1 - x_2)\cdot(x - x_4)\cdot(x - x_2)\cdot(x - x_1) - \\ - y_4(x_2 - x_3)\cdot(x_1 - x_3)\cdot(x_1 - x_2)\cdot(x - x_3)\cdot(x - x_2)\cdot(x - x_1) \end{pmatrix}}{(x_3 - x_4)\cdot(x_2 - x_4)\cdot(x_2 - x_3)\cdot(x_1 - x_4)\cdot(x_1 - x_3)\cdot(x_1 - x_2)}. \qquad (1)$$

Его дальнейшее упрощение дает интерполяцию полиномом Лагранжа:

$$y = y_1 \cdot \frac{(x-x_4)\cdot(x-x_3)\cdot(x-x_2)}{(x_1-x_4)\cdot(x_1-x_3)\cdot(x_1-x_2)} + y_2 \cdot \frac{(x-x_4)\cdot(x-x_3)\cdot(x-x_1)}{(x_2-x_4)\cdot(x_2-x_3)\cdot(x_2-x_1)} + \\ + y_3 \cdot \frac{(x-x_4)\cdot(x-x_2)\cdot(x-x_1)}{(x_3-x_4)\cdot(x_3-x_2)\cdot(x_3-x_1)} + y_4 \cdot \frac{(x-x_3)\cdot(x-x_2)\cdot(x-x_1)}{(x_4-x_3)\cdot(x_4-x_2)\cdot(x_4-x_1)}. \qquad (2)$$

Таким образом, интерполятор Лагранжа является другой формой записи интерполяции МНК функции одной переменной.

Определитель матрицы X есть знаменатель в правой части уравнения (1):

$$\det\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 \\ 1 & x_4 & x_4^2 & x_4^3 \end{bmatrix} = (x_3-x_4)\cdot(x_2-x_4)\cdot(x_2-x_3)\cdot(x_1-x_4)\cdot(x_1-x_3)\cdot(x_1-x_2).$$

Определители матриц, полученных заменой i-й строки в исходной матрице X на вектор $v=[1\ x\ \ x^2\ \ x^3]$, дают числители соответствующих выражений при y_i в уравнении (1). К примеру, для y_1

$$\det\begin{bmatrix} 1 & x & x^2 & x^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 \\ 1 & x_4 & x_4^2 & x_4^3 \end{bmatrix} = (x_3-x_4)\cdot(x_2-x_4)\cdot(x_2-x_3)\cdot(x-x_4)\cdot(x-x_3)\cdot(x-x_2).$$

Таким образом, интерполяционный многочлен Лагранжа 3-го порядка может быть записан в виде:

$$y = \frac{y_1\cdot\det\begin{bmatrix} 1 & x & x^2 & x^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 \\ 1 & x_4 & x_4^2 & x_4^3 \end{bmatrix} + y_2\cdot\det\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x & x^2 & x^3 \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 \\ 1 & x_4 & x_4^2 & x_4^3 \end{bmatrix} + y_3\cdot\det\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ 1 & x & x^2 & x^3 \\ 1 & x_4 & x_4^2 & x_4^3 \end{bmatrix} + y_4\cdot\det\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 \\ 1 & x & x^2 & x^3 \end{bmatrix}}{\det\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 \\ 1 & x_4 & x_4^2 & x_4^3 \end{bmatrix}}. \qquad (3)$$

Отношение определителей обладает свойством базисных полиномов Лагранжа:

– для i-й узловой точки отношение определителей i-го коэффициента равно единице, так как определитель в числителе равен определителю в знаменателе;

– для i-й узловой точки отношение определителей j-го коэффициента при $j \neq i$ равно нулю, так как определитель числителя имеет в этом случае две одинаковые строки.

При получении интерполяционного полинома МНК соответственно выполняется и условие единственности интерполяционного полинома.

Однако отметим, что при равенстве количества точек количеству искомых переменных, т.е. при интерполяции, имеет место равенство:

$$\left(X^{'}X\right)^{-1}\left(X^{'}Y\right)=\left(X\right)^{-1}\left(Y\right). \tag{4}$$

Таким образом, (1) и, соответственно, (3) можно получить простым решением системы алгебраических линейных уравнений.

Обобщение метода. МНК применим для аппроксимации произвольным набором комбинаций функций произвольного набора переменных из исходного набора X_{basic} [9]. Кроме того, в МНК может использоваться и преобразование пространства по координате y, например для линеаризации. В этом случае в качестве матрицы Y используется матрица преобразованных y_i.

Для интерполяции МНК имеются матрицы исходных данных:

$$X_b=\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} x_{a1} & x_{b1} & x_{c1} & x_{d1} & x_{e1} \\ x_{a2} & x_{b2} & x_{c2} & x_{d2} & x_{e2} \\ x_{a3} & x_{b3} & x_{c3} & x_{d3} & x_{e3} \\ x_{a4} & x_{b4} & x_{c4} & x_{d4} & x_{e4} \end{bmatrix},\ Y_b=\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} y_{a1} & y_{b1} \\ y_{a2} & y_{b2} \\ y_{a3} & y_{b3} \\ y_{a4} & y_{b4} \end{bmatrix}.$$

Требуется получить интерполяционный многочлен для преобразованной зависимой переменной y_a. Матрицы для расчета интерполяционных полиномов МНК имеют вид:

$$X_m=\begin{bmatrix} f_1(X_1) & f_2(X_1) & f_3(X_1) & f_4(X_1) \\ f_1(X_2) & f_2(X_2) & f_3(X_2) & f_4(X_2) \\ f_1(X_3) & f_2(X_3) & f_3(X_3) & f_4(X_3) \\ f_1(X_4) & f_2(X_4) & f_3(X_4) & f_4(X_4) \end{bmatrix},\ Y_m=\begin{bmatrix} u_{\text{direct}}\left(y_{a1}\right) \\ u_{\text{direct}}\left(y_{a2}\right) \\ u_{\text{direct}}\left(y_{a3}\right) \\ u_{\text{direct}}\left(y_{a4}\right) \end{bmatrix}.$$

Операции, аналогичные получению полинома третьей степени, изложенные в первой части статьи, дадут интерполятор для зависимой моделируемой переменной y_a, подобный интерполятору Лагранжа:

$$\begin{aligned} L(X) &= u_{\text{reverse}}\left(\sum_{i=1}^{4} \frac{u_{\text{direct}}(y_{ai})\det[X_{mXi}]}{\det[X_m]}\right) = \\ &= u_{\text{reverse}}\left(\frac{1}{\det[X_m]}\sum_{i=1}^{4} u_{\text{direct}}(y_{ai})\det[X_{mXi}]\right), \end{aligned} \tag{5}$$

где $x_a \ldots x_e$ – независимые переменные; u_{direct}, u_{reverse} – прямая и соответствующая ей обратная функции преобразования интерполируемых переменных y_a; $f_i(X)$ – функция или произвольная комбинация каких-либо функций переменных или произвольной комбинации переменных из набора X, к примеру, $x_a \cdot \sin(x_c) \cdot \exp(-x_d/5)$, в том числе может быть и единицей, но только одна из них. Следует использовать функции, гладкие в области определения интерполятора; X_{mXi} – матрицы, полученные из матрицы X_m заменой i-й строки вектором $v = [f_1(X) \quad f_2(X) \quad f_3(X) \quad f_4(X)]$.

К примеру:

$$[X_{mX_2}] = \begin{bmatrix} f_1(X_1) & f_2(X_1) & f_3(X_1) & f_4(X_1) \\ f_1(X) & f_2(X) & f_3(X) & f_4(X) \\ f_1(X_3) & f_2(X_3) & f_3(X_3) & f_4(X_3) \\ f_1(X_4) & f_2(X_4) & f_3(X_4) & f_4(X_4) \end{bmatrix}.$$

Каждый базисный многочлен $\dfrac{\det[X_{mXi}]}{\det[X_m]}$ также обладает свойствами базисного полинома Лагранжа: равен единице для узловой точки $X = X_i$ и нулю для всех остальных узлов $X = X_j$ при $j \neq i$.

При искажении координаты y значения полученного интерполятора в узловых точках $L(X_i) = y_i$ для любых функций преобразования. Для других значений вектора $X \neq X_i$, $i = 1..k$, значения $L(X)$ для разных функций преобразования будут различны, так как многочлен в каждом случае получается иной. Если брать $u_{\text{direct}}(v)$, к примеру, степенной функцией, то полученный многочлен может иметь любую степень и, соответственно, может быть бесконечно дифференцируемым. Таким образом, через заданное количество точек строится кривая линия (поверхность) другого порядка. Полином единственный для данной функции преобразования, но различных функций существует бесконечное множество.

Интерполяционный многочлен Лагранжа с преобразованием y имеет следующий вид:

$$L(X) = f_{\text{reverse}}\left(\sum_{i=0}^{n} f_{\text{direct}}(y_i)\cdot\prod_{\substack{j=0\\ i\neq j}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\right). \tag{6}$$

Методы расчета коэффициентов (оценок). Поскольку расчёт интерполяционного полинома (5) сводится к трудоемким вычислениям определителей с тем же результатом, использование МНК становится предпочтительным, а поскольку МНК использует матричные операции [13], для некоторых обобщений сделаем небольшое отступление в матричную алгебру.

Для решения систем линейных алгебраических уравнений: $Y = X{\cdot}A$, где $Y = \begin{bmatrix} y_1\\ y_2\\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1\cdot x_{a1}+a_2\cdot x_{b1}+a_3\cdot x_{c1}\\ a_1\cdot x_{a2}+a_2\cdot x_{b2}+a_3\cdot x_{c2}\\ a_1\cdot x_{a3}+a_2\cdot x_{b3}+a_3\cdot x_{c3} \end{bmatrix}$, $A = \begin{bmatrix} a_1\\ a_2\\ a_3 \end{bmatrix}, X = \begin{bmatrix} x_{c1} & x_{b1} & x_{c1}\\ x_{c2} & x_{b2} & x_{c2}\\ x_{c3} & x_{b3} & x_{c3} \end{bmatrix}$, известны методы:

– по правилу Крамера [14]:

$$\begin{bmatrix} a_1\\ a_2\\ a_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{\det[X]}\begin{bmatrix} \det\begin{bmatrix} y_1 & x_{b1} & x_{c1}\\ y_2 & x_{b2} & x_{c2}\\ y_3 & x_{b3} & x_{c3} \end{bmatrix}\\ \det\begin{bmatrix} x_{a1} & y_1 & x_{c1}\\ x_{a2} & y_2 & x_{c2}\\ x_{a3} & y_3 & x_{c3} \end{bmatrix}\\ \det\begin{bmatrix} x_{a1} & x_{b1} & y_1\\ x_{a2} & x_{b2} & y_2\\ x_{a3} & x_{b3} & y_3 \end{bmatrix} \end{bmatrix}, \tag{7}$$

– с использованием обратной матрицы:

$$\begin{bmatrix} a_1\\ a_2\\ a_3 \end{bmatrix} = X^{-1}\begin{bmatrix} y_1\\ y_2\\ y_3 \end{bmatrix}, \tag{8}$$

что дает равенство:

$$X^{-1}\cdot Y = X^{-1}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{\det[X]}\begin{bmatrix} \det\begin{bmatrix} y_1 & x_{b1} & x_{c1} \\ y_2 & x_{b2} & x_{c2} \\ y_3 & x_{b3} & x_{c3} \end{bmatrix} \\ \det\begin{bmatrix} x_{a1} & y_1 & x_{c1} \\ x_{a2} & y_2 & x_{c2} \\ x_{a3} & y_3 & x_{c3} \end{bmatrix} \\ \det\begin{bmatrix} x_{a1} & x_{b1} & y_1 \\ x_{a2} & x_{b2} & y_2 \\ x_{a3} & x_{b3} & y_3 \end{bmatrix} \end{bmatrix}. \qquad (9)$$

Из правила умножения матриц [13, 14] следует: элементы столбцов (строк) второго (первого) сомножителя участвуют только в выражениях для вычисления элементов соответствующих столбцов (строк) матрицы-произведения. Из этого следует, что изменение элементов столбца (строки), дополнение, удаление, перемена мест столбцов (строк) второго (первого) сомножителя изменяют элементы столбца (строки), добавляют, удаляют, меняют местами соответствующие столбцы (строки) в результирующей матрице, не меняя значения элементов других столбцов (строк).

Исходя из этого:

1. Равенство (9) справедливо и для умножения обратной матрицы на любую согласованную с произвольным количеством столбцов и к каждому может быть применено правило Крамера.

Имеются матрицы:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \text{ и } B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} \end{bmatrix}.$$

Требуется получить результирующую матрицу $C = A^{-1}\cdot B$. Элементом матрицы C_{ij} будет отношение двух определителей: знаменатель – определитель исходной матрицы A, а числитель – определитель матрицы, полученной из A заменой i-го столбца j-м столбцом матрицы B:

$$C = A^{-1} \cdot B = \frac{1}{\det\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}} \times$$

$$\times \begin{bmatrix} \det\begin{bmatrix} b_{11} & a_{12} & a_{13} \\ b_{21} & a_{22} & a_{23} \\ b_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} b_{12} & a_{12} & a_{13} \\ b_{22} & a_{22} & a_{23} \\ b_{32} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} b_{13} & a_{12} & a_{13} \\ b_{23} & a_{22} & a_{23} \\ b_{33} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} b_{14} & a_{12} & a_{13} \\ b_{24} & a_{22} & a_{23} \\ b_{34} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \\ \det\begin{bmatrix} a_{11} & b_{11} & a_{13} \\ a_{21} & b_{21} & a_{23} \\ a_{31} & b_{31} & a_{33} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} a_{11} & b_{12} & a_{13} \\ a_{21} & b_{22} & a_{23} \\ a_{31} & b_{32} & a_{33} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} a_{11} & b_{13} & a_{13} \\ a_{21} & b_{23} & a_{23} \\ a_{31} & b_{33} & a_{33} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} a_{11} & b_{14} & a_{13} \\ a_{21} & b_{24} & a_{23} \\ a_{31} & b_{34} & a_{33} \end{bmatrix} \\ \det\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & b_{11} \\ a_{21} & a_{22} & b_{21} \\ a_{31} & a_{32} & b_{31} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & b_{12} \\ a_{21} & a_{22} & b_{22} \\ a_{31} & a_{32} & b_{32} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & b_{13} \\ a_{21} & a_{22} & b_{23} \\ a_{31} & a_{32} & b_{33} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & b_{14} \\ a_{21} & a_{22} & b_{24} \\ a_{31} & a_{32} & b_{34} \end{bmatrix} \end{bmatrix}.$$

Следовательно, умножение обратной к A матрицы на матрицу B можно делать без обращения матрицы A по методу Крамера, распространенному, таким образом, на операции с матрицами.

Использование в этой операции вместо матрицы B единичной матрицы E дает обратную к A матрицу. Получился более формализованный метод обращения матриц через матрицу алгебраических дополнений. Так, например, числитель элемента обратной матрицы

$$A^{-1}{}_{2,3} = \frac{\det\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} \\ a_{21} & 0 & a_{23} \\ a_{31} & 1 & a_{33} \end{bmatrix}}{\det\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}}$$

есть элемент транспонированной матрицы алгебраических дополнений, вычисляемых не через минор с соответствующим знаком и последующим транспонированием, а как определитель матрицы, полученной заменой 2-го столбца матрицы A 3-м столбцом единичной матрицы.

2. Матрица Y, а, соответственно, и $X'Y$ могут иметь несколько столбцов. В этом случае одним матричным выражением $A=(X'X)^{-1}\cdot X'Y$ может быть получено несколько регрессионных зависимостей или интерполяционных полиномов для одной матрицы X.

Таким образом, матрицу оценок МНК можно получить и без обращения матрицы $X'X$ и сразу, к примеру, для двух зависимых переменных:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{bmatrix} = \frac{1}{\det[X'X]} \begin{bmatrix} \det\begin{bmatrix} x'y_{11} & x'x_{12} & x'x_{13} \\ x'y_{21} & x'x_{22} & x'x_{23} \\ x'y_{31} & x'x_{32} & x'x_{33} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} x'y_{12} & x'x_{12} & x'x_{13} \\ x'y_{22} & x'x_{22} & x'x_{23} \\ x'y_{32} & x'x_{32} & x'x_{33} \end{bmatrix} \\ \det\begin{bmatrix} x'x_{11} & x'y_{11} & x'x_{13} \\ x'x_{21} & x'y_{21} & x'x_{23} \\ x'x_{31} & x'y_{31} & x'x_{33} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} x'x_{11} & x'y_{12} & x'x_{13} \\ x'x_{21} & x'y_{22} & x'x_{23} \\ x'x_{31} & x'y_{32} & x'x_{33} \end{bmatrix} \\ \det\begin{bmatrix} x'x_{11} & x'x_{21} & x'y_{11} \\ x'x_{21} & x'x_{22} & x'y_{21} \\ x'x_{31} & x'x_{32} & x'y_{31} \end{bmatrix} & \det\begin{bmatrix} x'x_{11} & x'x_{21} & x'y_{12} \\ x'x_{21} & x'x_{22} & x'y_{22} \\ x'x_{31} & x'x_{32} & x'y_{32} \end{bmatrix} \end{bmatrix}, \qquad (10)$$

где a_{ij} – элементы матрицы коэффициентов двух регрессий; $x'x_{ij}$ – элементы матрицы $X'X$; $x'y_{ij}$ – элементы матрицы $X'Y$.

В знаменателе элементов матрицы-столбца оценок – определитель матрицы $X'X$, а в числителе – определитель матрицы, полученной заменой в матрице $X'X$ соответствующего столбца на соответствующий столбец двухстолбцевой матрицы $X'Y$.

Расчет аппроксимируемой МНК величины $y = a_1 \cdot x_1 + a_2 \cdot x_2 + a_3 \cdot x_3$ при получении коэффициентов по (10) для заданного вектора $X = [x_1 \quad x_2 \quad x_3]$ выглядит следующим образом:

$$y = \frac{x_1 \cdot \det\begin{bmatrix} x'y_{11} & x'x_{12} & x'x_{13} \\ x'y_{21} & x'x_{22} & x'x_{23} \\ x'y_{31} & x'x_{32} & x'x_{33} \end{bmatrix} + x_2 \cdot \det\begin{bmatrix} x'x_{11} & x'y_{11} & x'x_{13} \\ x'x_{21} & x'y_{21} & x'x_{23} \\ x'x_{31} & x'y_{31} & x'x_{33} \end{bmatrix} + x_3 \cdot \det\begin{bmatrix} x'x_{11} & x'x_{21} & x'y_{11} \\ x'x_{21} & x'x_{22} & x'y_{21} \\ x'x_{31} & x'x_{32} & x'y_{31} \end{bmatrix}}{\det\begin{bmatrix} x'x_{11} & x'x_{12} & x'x_{13} \\ x'x_{21} & x'x_{22} & x'x_{23} \\ x'x_{31} & x'x_{32} & x'x_{33} \end{bmatrix}}.$$

Поскольку метод Лагранжа и МНК – разные формы одного и того же, то и расчет аппроксимируемой величины по модели МНК можно записать и в форме Лагранжа, без расчета оценок, через операции с определителями:

$$y = \frac{x'y_{11} \cdot \det\begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ x'x_{21} & x'x_{22} & x'x_{23} \\ x'x_{31} & x'x_{32} & x'x_{33} \end{bmatrix} + x'y_{21} \cdot \det\begin{bmatrix} x'x_{11} & x'x_{11} & x'x_{13} \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ x'x_{31} & x'x_{31} & x'x_{33} \end{bmatrix} + x'y_{31} \cdot \det\begin{bmatrix} x'x_{11} & x'x_{21} & x'x_{11} \\ x'x_{21} & x'x_{22} & x'x_{21} \\ x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix}}{\det\begin{bmatrix} x'x_{11} & x'x_{12} & x'x_{13} \\ x'x_{21} & x'x_{22} & x'x_{23} \\ x'x_{31} & x'x_{32} & x'x_{33} \end{bmatrix}}.$$

Поскольку вычисление определителей – это трудоемкий процесс, использование последнего маловероятно.

Примечание: *отсутствие свободного члена объясняется использованием стандартизированных (центрированных и нормированных) переменных.*

Пример применения. На промышленной установке изомеризации пентан-гексановой фракции имеется процесс деизопентанизации – отгон изопентана из сырья путем ректификации. Стоит задача управления температурой верха колонны деизопентанизации с целью поддержания оптимального содержания нормального пентана в отделяемом изопентане [15–18]. Избыточное содержание нормального пентана снижает ресурс высокооктановых компонентов завода, а низкое содержание требует избыточного расхода тепловой энергии. Приведены результаты определения зависимостей доли нормального пентана в отделяемом изопентане от температуры и давления верха колонны деизопентанизации интерполяцией МНК. В табл. 1 приведены исходные данные для моделирования, где н_С5 – нормальный пентан, i_С5 – изопентан.

Таблица 1

Исходные данные для моделирования

№ п/п	Температура верха, T, °С	Избыточное давление, $P_{\text{ИЗБ}}$, кгс/см^2	Температура верха, T, К	Абсолютное давление, $P_{\text{абс}}$, кПа	Доля Н_С5	Доля I_С5
1	70,00	2,242	343,15	325,009	0,40088	0,59912
2	70,00	2,278	343,15	328,629	0,35289	0,64711
3	65,00	1,866	338,15	287,518	0,35096	0,64904
4	63,12	1,700	336,27	270,947	0,38374	0,61626
5	57,47	1,300	330,62	231,049	0,38305	0,61695
6	56,60	1,300	329,75	231,057	0,28552	0,71448
7	50,00	0,908	323,15	191,971	0,25292	0,74708
8	62,36	1,700	335,51	270,941	0,29672	0,70328
9	66,21	2,000	339,36	300,902	0,29844	0,70156
10	69,79	2,300	342,94	330,848	0,30056	0,69944
11	75,00	2,894	348,15	390,107	0,17123	0,82877
12	75,00	2,893	348,15	390,024	0,17224	0,82776
13	44,97	0,677	318,12	168,845	0,16404	0,83596
14	49,97	0,953	323,12	196,424	0,16545	0,83455
15	49,84	0,806	322,99	181,726	0,44161	0,55839
16	53,68	1,027	326,83	203,810	0,44355	0,55645
17	57,78	1,285	330,93	229,575	0,44544	0,55456
18	62,28	1,596	335,43	260,636	0,44757	0,55243
19	69,63	2,173	342,78	318,168	0,45101	0,54899
20	67,73	1,739	340,88	274,875	0,88017	0,11983
21	63,06	1,402	336,21	241,245	0,87994	0,12006
22	67,37	1,711	340,52	272,075	0,88094	0,11906
23	76,83	2,494	349,98	350,199	0,88295	0,11705
24	66,94	1,678	340,09	268,792	0,88201	0,11799
25	73,95	2,239	347,10	324,717	0,88388	0,11612
26	70,94	1,988	344,09	299,718	0,88313	0,11687
27	41,20	0,525	314,35	153,762	0,08090	0,91910

С учетом [19, 20] была построена модель вида:

$$y_1 = a_1 \cdot f_1(T,P) + a_2 \cdot f_2(T,P) + a_3 \cdot f_3(T,P) + a_4 \cdot f_4(T,P) + a_5 \cdot f_5(T,P);$$

$$y_2 = b_1 \cdot f_1(T,P) + b_2 \cdot f_2(T,P) + b_3 \cdot f_3(T,P) + b_4 \cdot f_4(T,P) + b_5 \cdot f_5(T,P),$$

где y_1, y_2 – доля нормального пентана и изопентана соответственно в изопентановой фракции;

$$f_2(T,P) = \frac{\ln(T) \cdot T}{-2{,}689 \cdot \ln(T) \cdot T - 791 + 17{,}41 \cdot T + 0{,}3127861 \cdot 10^{-5} - 5T^3};$$

$$f_3(T,P) = \frac{1}{-2{,}689 \cdot \ln(T)T - 791 + 17{,}41T + 0{,}3127861 \cdot 10^{-5} - 5T^3};$$

$$f_4(T,P) = \frac{T}{-2{,}689 \cdot \ln(T)T - 791 + 17{,}41T + 0{,}3127861 \cdot 10^{-5} - 5T^3};$$

$$f_5(T,P) = \frac{T^3}{-2{,}689 \cdot \ln(T)T - 791 + 17{,}41T + 0{,}3127861 \cdot 10^{-5} - 5T^3}.$$

Значения функций $f_1(T,P)$, $f_2(T,P)$, $f_3(T,P)$, $f_4(T,P)$, $f_5(T,P)$, используемые для интерполяции методом МНК зависимости доли нормального пентана и изопентана в изопентановой фракции от технологических параметров (давления и температуры), приведены в табл. 2.

Таблица 2

Исходные данные для интерполяции МНК

№ п/п	Доля н_С5	Доля i_C5	$f_1(T,P)$	$f_2(T,P)$	$f_3(T,P)$	$f_4(T,P)$	$f_5(T,P)$
1	0,35289	0,64711	–25,70	–25,89	–0,012924	–4,435	–522230,3
2	0,25292	0,74708	–21,17	–23,27	–0,012461	–4,027	–420489,9
3	0,17123	0,82877	–27,06	–26,55	–0,013029	–4,536	–549789,6
4	0,88017	0,11983	–24,65	–25,60	–0,012876	–4,389	–510031,8
5	0,08090	0,91910	–19,35	–22,10	–0,012227	–3,844	–379819,0

Полученные в результате коэффициенты модели построенной интерполяцией МНК приведены в табл. 3.

Таблица 3

Коэффициенты модели

Интерполяция МНК	
A_I	B_I
1,02068772	–1,02068772
13,94068214	–16,62975614
5864,418647	–6655,415647
–101,4246726	118,8352526
–2,58824E-05	2,90103E-05

Значения долей нормального пентана и изопентана, рассчитанные по полученной модели, и исходные значения, а также абсолютная ошибка приведены в табл. 4.

Таблица 4

Тестирование полученных моделей

№ п/п	Исходные данные		Интерполяция МНК		Δ	
	Доля н_C5	Доля i_C5	Доля н_C5	Доля i_C5	Доля н_C5	Доля i_C5
1	0,40088	0,59912	0,4032	0,5968	–0,00230	0,00230
2	***0,35289***	***0,64711***	***0,3529***	***0,6471***	***0,00000***	***0,00000***
3	0,35096	0,64904	0,3455	0,6545	0,00542	–0,00542
4	0,38374	0,61626	0,3797	0,6203	0,00403	–0,00403
5	0,38305	0,61695	0,3821	0,6179	0,00097	–0,00097
6	0,28552	0,71448	0,2777	0,7223	0,00787	–0,00787
7	***0,25292***	***0,74708***	***0,2529***	***0,7471***	***0,00000***	***0,00000***
8	0,29672	0,70328	0,2867	0,7133	0,01004	–0,01004
9	0,29844	0,70156	0,2903	0,7097	0,00810	–0,00810
10	0,30056	0,69944	0,2972	0,7028	0,00339	–0,00339
11	***0,17123***	***0,82877***	***0,1712***	***0,8288***	***0,00000***	***0,00000***
12	0,17224	0,82776	0,1723	0,8277	–0,00009	0,00009
13	0,16404	0,83596	0,1657	0,8343	–0,00162	0,00162
14	0,16545	0,83455	0,1546	0,8454	0,01086	–0,01086
15	0,44161	0,55839	0,4591	0,5409	–0,01753	0,01753
16	0,44355	0,55645	0,4523	0,5477	–0,00880	0,00880
17	0,44544	0,55456	0,4480	0,5520	–0,00253	0,00253
18	0,44757	0,55243	0,4470	0,5530	0,00052	–0,00052
19	0,45101	0,54899	0,4547	0,5453	–0,00374	0,00374
20	***0,88017***	***0,11983***	***0,8802***	***0,1198***	***0,00000***	***0,00000***
21	0,87994	0,12006	0,8804	0,1196	–0,00050	0,00050
22	0,88094	0,11906	0,8808	0,1192	0,00017	–0,00017
23	0,88295	0,11705	0,8962	0,1038	–0,01323	0,01323
24	0,88201	0,11799	0,8817	0,1183	0,00034	–0,00034
25	0,88388	0,11612	0,8907	0,1093	–0,00681	0,00681
26	0,88313	0,11687	0,8855	0,1145	–0,00234	0,00234
27	***0,08090***	***0,91910***	***0,0809***	***0,9191***	***0,00000***	***0,00000***

В табл. 4 курсивом выделены точки, по которым строилась модель интерполяцией МНК, интерполируемые значения для этих точек совпадают с исходными данными. Модель, построенная путем интерполяции МНК, выдает значение доли нормального пентана и изопентана в изопентановой фракции от технологических параметров (давления и температуры) с СКО 0.00705 от тестовой выборки.

Результаты и выводы. Показано, что интерполяция полиномом Лагранжа есть частный случай аппроксимации методом наименьших квадратов – только одной переменной, только степенным полиномом, только для количества точек, равных количеству коэффициентов, и без использования преобразования интерполируемой переменной.

Предложен метод решения некоторых задач, требующих обращения матрицы, минуя использование этой операции, в том числе расчет оценок методом наименьших квадратов, а также логически более формализованный метод обращения матрицы.

Отмечено, что одним матричным выражением МНК $A = (X^{'}X)^{-1}\cdot(X^{'}Y)$ можно получить несколько регрессионных зависимостей или интерполяционных полиномов, когда матрица Y имеет несколько столбцов. Также отмечено, что в интерполятор Лагранжа может быть введено преобразование для интерполируемой переменной. Показано, что расчет аппроксимируемой величины методом наименьших квадратов может быть представлен в виде, подобном интерполяционному полиному.

Предложенный метод интерполяции универсален по количеству переменных, по составу и виду членов полинома, но он не является, на наш взгляд, лучшим решением для этой задачи, так как рассчитывает интерполируемую величину через громоздкие расчеты определителей, а для получения многочлена в явном виде требуются дополнительные операции приведения к полиномиальному виду. Интерполяция же методом наименьших квадратов либо простым решением систем линейных уравнений при количестве точек, равному количеству коэффициентов, по результату идентична, также универсальна и сразу дает коэффициенты многочлена, соответственно, является предпочтительной.

Представлен пример применения интерполяции МНК для нахождения функциональных зависимостей долей нормального пентана и изопентана в изопентановой фракции от технологических параметров (давления и температуры) промышленной установки изомеризации пентан-гексановой фракции. Высокая точность предсказания модели, построенной методом интерполяции по 5 точкам, объясняется использованием предложенного метода для адаптации теоретически обоснованной модели технологического процесса [19, 20].

Библиографический список

1. Аналитический обзор научных работ по проблемам математического моделирования, идентификации и управления технологическими процессами в производстве формалина / А.Г. Шумихин, С.Н. Кондрашов, Д.А. Мельков, М.П. Зорин // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Химическая технология и биотехнология. – 2017. – № 1. – С. 7–36.

2. Терехин А.А., Даденков Д.А. Обзор способов идентификации параметров асинхронного электропривода // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Электротехника, информационные технологии, системы управления. – 2017. – № 22. – С. 55–66.

3. Жмако О.А., Голиков К.А., Чуприн Е.Н. Применение метода наименьших квадратов в физико-химических методах анализа // Инновационные технологии в науке и образовании. – 2015. – № 3. – С. 20–22.

4. Утешев А.Ю., Тамасян Г.Ш. К задаче полиномиального интерполирования с кратными узлами // Вестник Санкт-Петербург. ун-та. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. – 2010. – № 3. – С. 76–85.

5. Use B-spline interpolation fitting baseline for low concentration 2, 6-di-tertbutyl p-cresol determination in jet fuels by differential pulse voltammetry / D.S. Wen, H. Wen, Y.G. Shi, B. Su, Z.C. Li, G.Z. Fan // 2nd International Conference on New Material and Chemical Industry (NMCI2017); 18–20 November. – Sanya, 2017. DOI: 10.1088/1757-899X/292/1/012071

6. Крепкогорский В.Л. О многомерных методах интерполяции // Известия высших учебных заведений. Математика. – 1999. – № 11. – С. 41–49.

7. Калиткин Н.Н. Численные методы. – М.: Наука, 1978. – 512 с.

8. Тараник В.А. Применение «интерполяционного многочлена Лагранжа» для функций со многими переменными // ScienceRise. – 2015. – № 8. – С. 69–76.

9. Турчак Л.И., Плотников П.В. Основы численных методов. – М.: Физматлит, 2003. – 304 с.

10. Выгодский М.Я. Справочник по высшей математике. – М.: АСТ, 2003. – 991 с.

11. Белов А.Г. Вероятностно-статистический подход к методу наименьших квадратов // Прикладная математика и информатика. – 2010. – № 3. – С. 76–85.

12. Мусатов М.В., Львов А.А. Анализ моделей метода наименьших квадратов и методов получения оценок // Вестник Саратов. гос. техн. ун-та. – 2009. – Т. 4, № 2. – С. 137–140.

13. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ. Кн. 1. – М.: Финансы и статистика, 1986. – 366 с.

14. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. – М.: Наука, 1970. – 720 с.

15. Chuzlov V.A., Chekantsev N.V., Ivanchina E.D. Development of Complex Mathematical Model of Light Naphtha Isomerization and Rectification Processes // Chemistry and Chemical Engineering in XXI century: XV International Scientific Conference / dedicated to Prof. L.P. Kulyov; 26–29 May. – Tomsk, 2014. DOI: 10.1016/j.proche.2014.10.040

16. Efficiency improvement of the light gasoline fractions isomerization by mathematical modeling / V.A. Chuzlov, E.D. Ivanchina, N.V. Chekantsev, K.V. Molotov // International Conference on Oil and Gas Engineering; 25–30 April. – Omsk, 2015. DOI: 10.1016/j.proeng.2015.07.305

17. Improving gasoline quality produced from MIDOR light naphtha isomerization unit / M.F. Mohamed, W.M. Shehata, A.A. Abdel Halim, F.K. Gad // Egyptian Journal of Petroleum. – 2017. – Vol. 26(1). – P. 111–124. DOI: 10.1016/j.ejpe.2016.02.009

18. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей / пер. с англ. под ред. Б.И. Соколова. – 3-е изд., перераб. и доп. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.

19. Optimal Technological Parameters of Diesel Fuel Hydroisomerization Unit Work Investigation by Means of Mathematical Modelling Method / N. Belinskaya, E. Ivanchina, E. Ivashkina, E. Frantsina, G. Silko // Procedia Chemistry. – 2014. – Vol. 10. – P. 258–266. DOI: 10.1016/j.proche.2014.10.043

20. Расчеты основных процессов и аппаратов нефтепереработки: справочник / под ред. Е.Н. Судакова. – М.: Химия, 1979. – 568 с.

References

1. Shumikhin A.G., Kondrashov S.N., Mel'kov D.A., Zorin M.P. Analiticheskii obzor nauchnykh rabot po problemam matematicheskogo modelirovaniia, identifikatsii i upravleniia tekhnologicheskimi protsessami

v proizvodstve formalina [Analitical review of scientific papers on the mathematical modeling identification and control of technological processes in the production of formalin]. *Vestnik Permskogo natsional'nogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Khimicheskaia technologiia i biotekhnologiia*, 2017, no. 1, pp. 7-36.

2. Terekhin A.A., Dadenkov D.A. Obzor sposobov identifikatsii parametrov asinkhronnogo elektroprivoda [Review of identification methods of induction motor parameters]. *Vestnik Permskogo natsional'nogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Elektrotekhnika, informatsionnye tekhnologii, sistemy upravleniia*, 2017, no. 22, pp. 55-66.

3. Zhmako O.A., Golikov K.A., Chuprin E.N. Primenenie metoda naimen'shikh kvadratov v fiziko-khimicheskikh metodakh analiza [The application of the method of least squares in the physical and chemical methods of analysis]. *Innovatsionnye tekhnologii v nauke i obrazovanii*, 2015, no. 3, pp. 20-22.

4. Uteshev A.Iu., Tamasian G.Sh. K zadache polinomial'nogo interpolirovaniia s kratnymi uzlami [On polynomial interpolation problem with multiple interpolation points]. *Vestnik Sankt-Peterburgskogo universiteta. Prikladnaia matematika. Informatika. Protsessy upravleniia*, 2010, no. 3, pp. 76-85.

5. Wen D.S., Wen H., Shi Y.G., Su B., Li Z.C., Fan G.Z. Use B-spline interpolation fitting baseline for low concentration 2, 6-di-tertbutyl p-cresol determination in jet fuels by differential pulse voltammetry. *2nd International Conference on New Material and Chemical Industry (NMCI2017); 18-20 November*. Sanya, 2017. DOI: 10.1088/1757-899X/292/1/012071

6. Krepkogorskii V.L. O mnogomernykh metodakh interpoliatsii [On multidimensional methods of interpolation]. *Izvestiia vysshikh uchebnykh zavedenii. Matematika*, 1999, no. 11, pp. 41-49.

7. Kalitkin N.N. Chislennye metody [Numerical analisis]. Moscow: Nauka, 1978. 512 p.

8. Taranik V.A. Primenenie “interpoliatsionnogo mnogochlena Lagranzha” dlia funktsii so mnogimi peremennymi [Application of "interpolation multiliner of lagrange" for functions with many variables]. *ScienceRise*, 2015, no. 8, pp. 69-76.

9. Turchak L.I., Plotnikov P.V. Osnovy chislennykh metodov [Bases of numerical methods]. Moscow: Fizmatlit, 2003. 304 p.

10. Vygodskii M.Ia. Spravochnik po vysshei matematike [Handbook of Higher Mathematics]. Moscow: ACT, 2003. 991 p.

11. Belov A.G. Veroiatnostno-statisticheskii podkhod k metodu naimen'shikh kvadratov [Probabilistic-statistical approach to the method of least squares]. *Prikladnaia matematika i informatika*, 2010, no. 3, pp. 76-85.

12. Musatov M.V., L'vov A.A. Analiz modelei metoda naimen'shikh kvadratov i metodov polucheniia otsenok [Analysis of LS models and method of obtaining estimates]. *Vestnik Saratovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*, 2009, vol. 4, no. 2, pp. 137-140.

13. Dreiper N., Smit G. Prikladnoi regressionnyi analiz. Kniga 1 [Applied regression analisis. Book 1]. Moscow: Finansy i statistika, 1986. 366 p.

14. Korn G., Korn T. Spravochnik po matematike dlia nauchnykh rabotnikov i inzhenerov [Mathematical handbook for scientist and engineers]. Moscow: Nauka, 1970. 720 p.

15. Chuzlov V.A., Chekantsev N.V., Ivanchina E.D. Development of Complex Mathematical Model of Light Naphtha Isomerization and Rectification Processes. *Chemistry and Chemical Engineering in XXI century: XV International Scientific Conference. Dedicated to Prof. L.P. Kulyov; 26–29 May*. Tomsk, 2014. DOI: 10.1016/j.proche.2014.10.040

16. Chuzlov V.A., E.D., Ivanchina N.V. Chekantsev, K.V. Molotov Efficiency improvement of the light gasoline fractions isomerization by mathematical modeling. *International Conference on Oil and Gas Engineering; 25–30 April*. Omsk, 2015. DOI: 10.1016/j.proeng.2015.07.305

17. Mohamed M.F., Shehata W.M., Abdel Halim A.A., Gad F.K. Improving gasoline quality produced from MIDOR light naphtha isomerization unit. *Egyptian Journal of Petroleum*, 2017, vol. 26(1), pp. 111-124. DOI: 10.1016/j.ejpe.2016.02.009

18. Rid R., Prausnits Dzh., Shervud T. Svoistva gazov i zhidkostei [Properties of gases and liquids]. 2nd ed. Ed. B.I. Sokolov. Leningrad: Khimiia, 1982. 592 p.

19. Belinskaya N., Ivanchina E., Ivashkina E., Frantsina E., Silko G. Optimal Technological Parameters of Diesel Fuel Hydroisomerization Unit Work Investigation by Means of Mathematical Modelling Method. *Procedia Chemistry*, 2014, vol. 10, pp. 258-266. DOI: 10.1016/j.proche.2014.10.043

20. Raschety osnovnykh protsessov i apparatov neftepererabotki [Calculations of the main processes and apparatus of oil refining]. Ed. E.N. Sudakova. Moscow, Khimiia, 1979. 568 p.

Сведения об авторах

Мустафина Дарья Александровна (Пермь, Россия) – кандидат физико-математических наук, старший эксперт, ООО «Промышленная кибернетика» (614000, Пермь, ул. Луначарского, 85, e-mail: dmustafina@yandex.ru).

Буракова Алёна Евгеньевна (Пермь, Россия) – руководитель группы моделирования технологических процессов центра высокотехнологичных решений, ООО «Инфраструктура ТК» (614016, Пермь, ул. Глеба Успенского, 15а, e-mail: alenka.byrakova@yandex.ru).

Мустафин Александр Иванович (Пермь, Россия) – главный специалист центра высокотехнологичных решений, ООО «Инфраструктура ТК» (614016, Пермь, ул. Глеба Успенского, 15а, e-mail: aleksandr.mustafin@infra.ru).

Александрова Анна Сергеевна (Пермь, Россия) – старший преподаватель кафедры «Автоматизация технологических процессов» Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: boyarshinovaann@gmail.com).

About the authors

Mustafina Daria Alexandrovna (Perm, Russian Federation) is a Ph. D. in Physics and Mathematics, Senior Expert, OOO “Promyshlennaia kibernetika”, (614000, Perm, 85, Lunacharskij st., e-mail: dmustafina@yandex.ru).

Burakova Alena Evgenievna (Perm, Russian Federation) is a group chief of modeling of technological processes, the High-Tech Solutions Center, OOO “Infrastruktura TK”, (614016, Perm, 15a, Gleb Uspenskij str., e-mail: alenka.byrakova@yandex.ru)

Mustafin Aleksandr Ivanovich (Perm, Russian Federation) is a chief specialist of the High-Tech Solutions Center, OOO “Infrastruktura TK”, (Gleb Uspenskij str., Perm, 614016, e-mail: aleksandr.mustafin@infra.ru).

Aleksandrova Anna Sergeevna (Perm, Russian Federation) is a Senior Lecturer department of automation technological processes Perm National Research Polytechnic University (614990, Perm, 29, Komsomolsky pr., e-mail: boyarshinovaann@gmail.com).

Получено 09.07.2018