

УДК 519.673:547.562.4:628.3

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА ФОТОХИМИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ ПРОМЫШЛЕННЫХ СТОЧНЫХ ВОД ОТ ФЕНОЛЬНЫХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ

Шейнкман Л.Э., Дергунов Д.В., Савинова Л.Н.

ФГБОУ ВПО «Тульский государственный университет», Тула, e-mail: dmitrov83@mail.ru

Для эффективного управления процессом очистки сточных вод промышленных предприятий от фенольных соединений (на примере Бисфенола-А) с использованием усовершенствованных окислительных процессов (УФ излучения, $\lambda = 365$ нм, H_2O_2 , $FeCl_3$) предложена экспоненциальная модель снижения концентрации фенольных соединений, идентифицированная в программной среде Statistica. С целью стабилизации неустойчивых параметров модели использована идея регуляризации А.Н. Тихонова, проведена процедура «гребневой регрессии». Полученная регуляризованная модель, устанавливающая зависимость степени разложения фенольных соединений в водной среде под действием физико-химических факторов (реактив фото-Фентона) от параметров процесса, является статистически значимой ($R^2 = 0,9995$) и обладает улучшенными прогнозными свойствами, чем модель, идентифицированная по методу наименьших квадратов. С использованием регуляризованной модели снижения концентрации фенольных соединений методом множителей Лагранжа в системе MathCad определены удельные оптимальные уровни расходов $FeCl_3$, H_2O_2 , обеспечивающие снижение концентрации фенольных соединений в сточных водах до предельно допустимого уровня.

Ключевые слова: регуляризация, некорректные задачи, моделирование, фенол, сточные воды, очистка, усовершенствованные окислительные процессы

IDENTIFICATION OF PARAMETERS OF PHOTOCHEMICAL TREATMENT OF INDUSTRIAL WASTEWATER FROM PHENOLIC POLLUTANTS USING REGULARIZATION METHOD

Sheynkman L.E., Dergunov D.V., Savinova L.N.

Tula State University, Tula, e-mail: dmitrov83@mail.ru

To effectively manage the process of sewage treatment, industrial enterprises of phenolic compounds (for example, Bisphenol-A) using advanced oxidation processes (UV radiation, $\lambda = 365$ nm, H_2O_2 , $FeCl_3$) proposed exponential model reduction the concentration of phenolic compounds identified in the software environment Statistica. In order to stabilize the unstable parameters of the model, the concept of regularization A.N. Tikhonov, conducted procedure «ridge regression». The resulting regularized model, establishing the degree of decomposition of phenolic compounds in an aqueous medium under the influence physicochemical factors (Fenton's reagent photo) on the process parameters is statistically significant ($R^2 = 0,9995$) and has improved the forecast properties than the model identified by the method of least squares. With the use of a regularized model to reduce the concentration of phenolic compounds in the method of Lagrange multipliers to determine the specific system MathCad optimal levels of expenditure $FeCl_3$, H_2O_2 , ensuring reduction in the concentration of phenolic compounds in the wastewater to the maximum permissible level.

Keywords: regularization, incorrectly tasks, modeling, phenol, wastewater, clearing, advanced oxidation processes

Сточные воды ряда отраслей промышленности (химической, фармацевтической, металлургической, целлюлозно-бумажной, горно-перерабатывающей и др.) вносят значительный вклад в загрязнение поверхностных и подземных водных объектов фенольными и трудноокисляемыми органическими соединениями. Фенол – потенциально опасное, канцерогенное вещество, представляющее значительную медицинскую проблему, даже при низких концентрациях.

Усовершенствованные окислительные процессы (АОР) играют важную роль в разложении органических веществ, содержащихся в сточных водах в широких пределах концентраций. АОР-процессы генерируют гидроксильные радикалы, которые являются сильными окислителями, способными осуществлять минерализацию широкого спектра органических веществ. Гидроксильный

радикал имеет высокий окислительно-восстановительный потенциал ($E_0 = 2,80$ В) и способен реагировать с фактически всеми классами органических соединений [4]. Окисляющие гидроксильные радикалы могут быть инициированы фотолизом в результате фото-Фентон процесса.

Очистка сточных вод от фенольных соединений с использованием усовершенствованных окислительных процессов происходит преимущественно в фотохимических реакторах. Фотохимические реакторы, представляют собой аппараты, в которых осуществляются фотохимические реакции. Но в них не только совершаются превращения, но и протекают сопутствующие процессы массо- и теплообмена и интенсивное движение среды. От правильности выбора типа реактора, его конструкции и режима работы в наибольшей степени зависит

эффективность и безопасность процесса очистки [6].

При использовании фотореакторов для решения различных прикладных задач эффективному облучению в них должны подвергаться большие объемы реагентов.

Важным элементом модуля фотохимической очистки в общей системе локальных очистных сооружений является система дозирования реагентов, катализатора FeCl_3 и перекиси водорода H_2O_2 .

Для стабильного функционирования реакторов и повышения эффективности минерализации органических соединений необходима оптимизация процесса очистки с целью определения оптимальных доз реагентов, вводимых в реактор. Оптимизация может быть основана на минимизации затрат, требуемых для осуществления запаса реагентов с учетом экологического регулирования процесса очистки. В качестве экологического регулятора может выступать функция зависимости концентрации органического загрязнителя от параметров процесса (концентраций реагентов и времени УФ-облучения), ограниченная предельно допустимым значением концентрации фенольного соединения. Функция концентрации определяется на основе статистического анализа экспериментальных данных АОР-процесса методом наименьших квадратов (МНК).

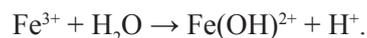
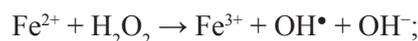
Зачастую задача определения параметров регрессионного уравнения методом наименьших квадратов является некорректно поставленной, и использование полученного уравнения при решении задачи оптимизации по определению оптимальных доз реагентов может привести к неадекватным результатам.

Таким образом, целью работы является применение методов регуляризации к построению устойчивой модели зависимости от концентрации фенольного соединения от параметров процесса фотохимической очистки и идентификации оптимальных уровней расходов перекиси водорода и хлорида железа (III) при минимизации затрат на реагенты.

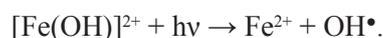
Для построения математической модели зависимости снижения концентрации фенольного соединения от параметров АОР-процесса при совместном воздействии перекиси водорода, хлорида железа (III) и ультрафиолетового излучения длиной волны 365 нм на фенольный загрязнитель в водной среде с целью решения задачи оптимизации по идентификации уровней расходов химических реагентов проводились экспериментальные исследования на модельных растворах, содержащих фе-

нольные соединения (бисфенол-А, ВРА), с применением жидкостной и газовой хроматографии. При проведении оптимального планирования эксперимента оценивалось влияние УФ-излучения и окислителей на уровень разложения органического загрязнителя при различных концентрациях ВРА – x_1 (50 мкг/л, 100 мкг/л); перекиси водорода H_2O_2 – x_2 (100 мг/л; 200 мг/л) и активатора – хлорида железа (III) FeCl_3 (1; 2 г/л) – x_3 . Модельный раствор, содержащий ВРА, перекись водорода и FeCl_3 , подвергался воздействию УФ-излучения в течение 2 часов (время облучения $t - x_4$). Пробы отбирались через 1 и 2 часа после облучения, и измерялась остаточная концентрация ВРА (y). Измерения осуществлялись жидкостным хроматографом LC-MS/MS. Продукты полураспада в течение фотодегградации ВРА были определены с помощью газового хроматографа GS-MS [8, 9].

При реализации процесса фото-Фентона ($\text{Fe}^{2+}/\text{H}_2\text{O}_2/h\nu$) для минерализации органических загрязнителей в кислой среде при $\text{pH} = 3$, формируется комплекс $\text{Fe}(\text{OH})^{2+}$ [4, 11, 17]:



Под действием УФ-облучения комплекс подвергается разложению, в результате чего образуются радикал OH^\bullet и ион Fe^{2+} :



Количественное описание фото-Фентон процесса на макроуровне, применительно к деградации органического загрязнителя в водной среде, можно описать моделью [18]:

$$r = -\frac{d[\text{RH}]}{dt} = k [\text{RH}]_0^\alpha [\text{Fe}^{2+}]_0^\beta [\text{H}_2\text{O}_2]_0^\gamma,$$

где $[\text{RH}]_0$ – начальная концентрация органического загрязнителя; $[\text{Fe}^{2+}]_0$, $[\text{H}_2\text{O}_2]_0$ – начальные концентрации, активатора, содержащего ионы железа (II) и перекиси водорода соответственно; k – константа скорости реакции; r – скорость реакции; α , β , γ – порядки реакции по веществам.

При создании математической модели зависимости снижения концентрации фенольного соединения, от факторов процесса фотохимической очистки с участием реагента «фото-Фентона» будем исходить из линейных моделей или моделей, которые можно свести к линейным по коэффициентам с помощью подходящего преобразования, которые могут быть записаны в общем виде следующим образом [1]:

$$y = \eta + \varepsilon = \sum_{i=1}^n \beta_i f_i(x_1, x_2, \dots, x_m) + \varepsilon, \quad (1)$$

где $f_i(x_1, x_2, \dots, x_m)$ – произвольные функции факторов (регрессоров); $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ – коэффициенты модели; ε – ошибка эксперимента.

Исходя из закона действующих масс [16, 18] зависимость концентрации фенольного соединения от факторов процесса математически можно представить следующим выражением:

$$\eta = \beta_1 x_1^{\beta_2} x_2^{\beta_3} x_3^{\beta_4} x_4^{\beta_5}, \quad (2)$$

где η – уровень остаточной концентрации ВРА в момент времени t , мг/л; x_1 – исходная концентрация ВРА, мг/л; x_2 – концентрация перекиси водорода, мг/л; x_3 – концентрация хлорида железа (III), г/л; x_4 – время процесса очистки, ч; $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \beta_5$ – параметры модели.

Коэффициенты в модель (2) входят нелинейно, но при линеаризации путем логарифмирования по натуральному основанию, правой и левой частей уравнения (2), получим

$$\ln \tilde{\eta} = \ln \tilde{\beta}_1 + \beta_2 \ln \tilde{x}_1 + \beta_3 \ln \tilde{x}_2 + \beta_4 \ln \tilde{x}_3 + \beta_5 \ln \tilde{x}_4,$$

где в соответствии с (1)

$$\eta = \ln \tilde{\eta}, \quad \beta = \ln \tilde{\beta}_1,$$

$$f_1 = 1, \quad f_2 = \ln \tilde{x}_1,$$

$$f_3 = \ln \tilde{x}_2, \quad f_4 = \ln \tilde{x}_3,$$

$$f_n = f_5 = \ln \tilde{x}_4.$$

Однако при таком преобразовании случайное возмущение (ошибка эксперимента) входит в модель мультипликативно и имеет логнормальное распределение, т.е. $y = \tilde{\eta}\tilde{\varepsilon}$, и после логарифмирования это дает

$$\ln y = \ln \tilde{\eta} + \ln \tilde{\varepsilon} \quad [1].$$

После линеаризации и введения новых переменных выражение (2) примет вид

$$Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_3 X_3 + b_4 X_4, \quad (3)$$

где предикторные переменные X_1, X_2, X_3, X_4 и отклик Y являются логарифмическими функциями:

$$Y = \ln y, \quad X_1 = \ln x_1,$$

$$X_2 = \ln x_2, \quad X_3 = \ln x_3, \quad X_4 = \ln x_4;$$

b_0, b_1, b_2, b_3, b_4 – параметры модели.

Обычно в задачах обработки данных матрица эксперимента и вектор отклика известны неточно, т.е. с погрешностями,

$$C_{ost} = \exp\left(-0,081205 + 0,971509 \ln C_{BPA} - 0,06986 \ln C_{H_2O_2} - 0,156641 \ln C_A - 0,203035 \ln t\right) \quad (6)$$

и задача определения регрессионных коэффициентов по методу наименьших квадратов неустойчива к ошибкам в исходных данных [15]. При плохой обусловленности информационной матрицы $F^T F$ (F – матрица регрессоров) МНК-оценки обычно неустойчивы. Для преодоления плохой обусловленности информационной матрицы предложена идея регуляризации, обобщенная в работах А.Н. Тихонова [12–15].

Применительно к решению регрессионных задач идея регуляризации А.Н. Тихонова интерпретирована А.Э. Хоэрлом как процедура «гребневой регрессии». При использовании метода «гребневой регрессии» для стабилизации МНК-оценок (определяемых $b = (F^T F)^{-1} F^T Y$) регуляризация связана с добавлением некоего положительного числа τ (параметра регуляризации) к диагональным элементам матрицы $F^T F$ [2].

Выбор параметра регуляризации τ Хоэрл, Кеннард и Белдвин [2, 3] предложили осуществлять следующим образом:

$$\tau = \frac{m \cdot S S_e}{n - m - 1} \cdot \frac{1}{b^{*T} b^*}, \quad (4)$$

где m – количество параметров (без учета свободного члена) в исходной модели регрессии; $S S_e$ – остаточная сумма квадратов, полученная по исходной модели регрессии без корректировки на мультиколлинеарность; b^* – вектор-столбец коэффициентов регрессии, преобразованный по формуле

$$b_j^* = b_j \sqrt{\sum (X_j - \bar{X}_j)^2},$$

где b_j – параметр при переменной X_j в исходной модели регрессии, определенный по МНК; \bar{X}_j – среднее значение j -й независимой переменной.

После выбора величины τ формула для оценки регуляризованных параметров регрессии будет иметь вид

$$b_\tau = (F^T F + \tau I)^{-1} F^T Y, \quad (5)$$

где I – единичная матрица; F – матрица регрессоров; Y – вектор значений зависимой переменной.

Величина параметра регуляризации, определяемая по формуле (4), принимает значение, равное $\tau = 1,371 \cdot 10^{-4}$.

Регуляризованная модель снижения концентрации фенольного соединения, построенная в системе Statistica с учетом формулы (5), может быть представлена в виде

где $C_{ост}$ и $C_{ВРА}$ – остаточная и начальная концентрации фенольного загрязнителя соответственно, мг/л; $C_{H_2O_2}$ – концентрация перекиси водорода, мг/л; C_A – концентрация хлорида железа (III), г/л; t – время, ч.

Значения коэффициента детерминации, $R^2 = 0,9995$, критерия Фишера $F = 5348,417$, превышающего критическое значение ($F_{кр}(0,01; 4,11) = 5,67$), характеризуют адекватность регуляризованной модели результатам эксперимента на уровне значимости $\alpha = 0,1$.

Определение оптимальных удельных значений концентраций химических реагентов ($FeCl_3$, H_2O_2), необходимых для очистки воды, при достижении минимального удельного уровня затрат представляет собой задачу нелинейного (выпуклого) программирования вида (7–9) [7]:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow \min; \quad (7)$$

$$g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq b_i \quad (i = \overline{1, m}); \quad (8)$$

$$x_j \geq 0 \quad (j = \overline{1, n}), \quad (9)$$

где f – функция финансовых средств, связанная с запасом химических реагентов $f = Z(c_2, c_3)$; g_i – функция снижения концентрации фенольного соединения в водной среде в процессе физико-химической очистки, $g = C_{ост}(c_1, c_2, c_3, t)$ (функция ограничения); x_1, x_2, \dots, x_n – параметры процесса; x_1 – начальная концентрация фенольного соединения, $x_1 = c_1$, мг/л; x_2 и x_3 – концентрации перекиси водорода и хлорида железа (III) соответственно $x_2 = c_2$, мг/л, $x_3 = c_3$, г/л; t – время, ч; b_i – предельно допустимая концентрация фенольного соединения (ПДК), мг/л.

Функцию финансовых средств, представляющую двухноменклатурную модель затрат, связанную с запасом перекиси водорода и хлорида железа (III), с учетом формулы Вильсона можно представить в виде [10]

$$\begin{aligned} Z(c_2, c_3) &= k_2 \cdot \frac{c_2^2 \cdot I_1}{2A} + \\ &+ k_3 \cdot \frac{c_3^2 \cdot I_2}{2A} + c_2 \cdot I_1 + c_3 \cdot I_2; \\ A &= m_1 \cdot k_2 + m_2 \cdot k_3; \\ I_1 &= i_1 \cdot k_2; \quad I_2 = i_2 \cdot k_3, \end{aligned} \quad (10)$$

где $Z(c_2, c_3)$ – удельные суммарные затраты, связанные с запасом, руб.; A – удельные накладные затраты одной общей поставки, руб.; c_2 – удельное потребление перекиси водорода, мг/л; c_3 – удельное потребление хлорида железа, г/л; I_1, I_2 – удельные тари-

фы затрат на хранение перекиси водорода и хлорида железа (III) соответственно, руб.; m_1, m_2 – доля цены продукции, приходящаяся на затраты на выполнение одного заказа по перекиси водорода и хлориду железа (III) соответственно; i_1, i_2 – доля цены продукции, приходящаяся на затраты на содержание запаса по перекиси водорода и хлориду железа (III) соответственно; k_2, k_3 – удельная закупочная цена единицы запаса перекиси водорода (руб./мг) и хлорида железа (III) (руб./г) соответственно.

Для решения системы (7)–(9) вводится набор переменных $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$, называемых множителями Лагранжа, составляют функцию Лагранжа:

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) + \sum_{i=1}^m \lambda_i [g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) - b_i],$$

находятся частные производные $\frac{\partial F}{\partial x_j} (j = \overline{1, n})$ и $\frac{\partial F}{\partial \lambda_i} (i = \overline{1, m})$ и рассматривается система $n + m$ уравнений

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial x_j} = \frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = 0 \quad (j = \overline{1, n}); \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda_i} = g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) - b_i = 0 \quad (i = \overline{1, m}); \end{cases} \quad (11)$$

с $n + m$ неизвестными $x_1, x_2, \dots, x_n; \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$. Всякое решение системы уравнений (11) определяет условно-стационарную точку, в которой может иметь место экстремум функции $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$. При соблюдении условий Куна – Таккера (12.1)–(12.6) точка $X^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*; \lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_m^*)$ является седловой точкой функции Лагранжа, т.е. найденное решение задачи (7)–(9) оптимально [5, 7]:

$$\frac{\partial F^*}{\partial x_j} \geq 0, \quad j = \overline{1, n}; \quad (12.1)$$

$$x_j^* \frac{\partial F^*}{\partial x_j} = 0, \quad j = \overline{1, n}; \quad (12.2)$$

$$x_j^* \geq 0, \quad j = \overline{1, n}; \quad (12.3)$$

$$\frac{\partial F^*}{\partial \lambda_i} \leq 0, \quad i = \overline{1, m}; \quad (12.4)$$

$$\lambda_i^* \frac{\partial F^*}{\partial \lambda_i} = 0, \quad i = \overline{1, m}; \quad (12.5)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad i = \overline{1, m}. \quad (12.6)$$

Задача идентификации оптимальных параметров процесса очистки промышленных сточных вод от фенольных соединений при достижении минимального уровня текущих удельных затрат, необходимых для обесфеноливания вод, решалась при следующих исходных данных: начальная концентрация фенольного загрязнителя в сточных водах 0,006 мг/л (6 ПДК); время очистки, определенное технологическим процессом, – 5 суток (120 часов); предельно допустимая концентрация загрязнителя 0,001 мг/л ($b = 0,001$); удельная закупочная цена единицы запаса по перекиси водорода $24,5 \cdot 10^{-6}$ руб./мг ($k_2 = 24,5 \cdot 10^{-6}$), по хлориду железа (III) $37,5 \cdot 10^{-3}$ руб./г ($k_3 = 37,5 \cdot 10^{-3}$); доля цены продукции, приходящаяся на затраты по содержанию запаса по перекиси водорода и хлориду железа, равна соответственно 10 % ($i = 0,1$) и 12 % ($i = 0,12$); доля цены продукции, приходящаяся на затраты по выполнению заказа по перекиси водорода и хлориду железа 5 % ($m_1 = 0,05$) и 7 % ($m_2 = 0,07$) соответственно.

Решая задачу (7)–(9) в системе MathCad, получаем точку X^* с координатами

$$(c_2^*, c_3^*, \lambda^*) = (6,361 \cdot 10^3; 5,694; 1,346 \cdot 10^4),$$

в которой соблюдаются условия Куна – Таккера (12.1)–(12.6). Существует точка, принадлежащая области допустимых решений, в которой выполняется условие регулярности Слейтера:

$$C_{\text{ost}}(c_2^*, c_3^*) = C_{\text{ost}}(10^3, 1) = -7,22 \cdot 10^{-9} < 0.$$

Вид условно-стационарной точки определялся в соответствии с критерием Сильвестра [5] применительно к матрице Гессе функции Лагранжа:

$$L = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2}{\partial c_2^2} F(c_2^*, c_3^*, \lambda^*) & \frac{\partial^2}{\partial c_2 \partial c_3} F(c_2^*, c_3^*, \lambda^*) & \frac{\partial^2}{\partial c_2 \partial \lambda} F(c_2^*, c_3^*, \lambda^*) \\ \frac{\partial^2}{\partial c_3 \partial c_2} F(c_2^*, c_3^*, \lambda^*) & \frac{\partial^2}{\partial c_3^2} F(c_2^*, c_3^*, \lambda^*) & \frac{\partial^2}{\partial c_3 \partial \lambda} F(c_2^*, c_3^*, \lambda^*) \\ \frac{\partial^2}{\partial \lambda \partial c_2} F(c_2^*, c_3^*, \lambda^*) & \frac{\partial^2}{\partial \lambda \partial c_3} F(c_2^*, c_3^*, \lambda^*) & \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} F(c_2^*, c_3^*, \lambda^*) \end{vmatrix}$$

В соответствии с критерием Сильвестра матрица L является ни положительно, ни отрицательно определенной (полуопределенной) ($\Delta_1 = 4,772 \cdot 10^{-8} \geq 0$; $\Delta_2 = 6,639 \cdot 10^{-9} \geq 0$; $\Delta_3 = -5,042 \cdot 10^{-17} \leq 0$).

Из выполнения условий Куна – Таккера, регулярности Слейтера и на основе исследования знакоопределенности матрицы

Гессе функции Лагранжа в условно-стационарной точке следует, что точка $(6,361 \cdot 10^3; 5,694; 1,346 \cdot 10^4)$ является седловой точкой функции Лагранжа, т.е. оптимальным решением задачи (7)–(9).

Таким образом, для снижения уровня фенолов в промышленных сточных водах с 0,006 мг/л (6 ПДК) до предельно допустимого (0,001 мг/л), потребуются удельные текущие затраты в размере 1,545 руб./л. Данное значение удельных затрат является минимальным при использовании в процессе очистки оптимальных удельных уровней расхода перекиси водорода $6,361 \cdot 10^3$ мг/л и хлорида железа (III) 5,694 г/л.

Методом множителей Лагранжа для технико-экономических условий ($c_1 = 0,006$ мг/л; $t = 120$ ч; $b = 10^{-3}$ мг/л; $k_2 = 24,5 \cdot 10^{-6}$ руб./мг; $k_3 = 37,5 \cdot 10^{-3}$ руб./г; $i_1 = 10\%$, $i_2 = 12\%$; $m_1 = 5\%$, $m_2 = 7\%$) решена задача определения оптимальных удельных значений ингредиентов, используемых в качестве окислителей в фотокаталитическом процессе разложения фенольного соединения, содержащегося в промышленных сточных водах до уровня ПДК.

Идентифицированная регуляризованная математическая модель, устанавливающая зависимость уровня снижения концентрации фенольного соединения в водной среде от параметров процесса фотохимической очистки, обладает лучшими прогнозными свойствами, чем модель, определяемая по методу наименьших квадратов. С использованием полученной регуляризованной математической модели методом множителей Лагранжа решена задача математического программирования по определению оценок оптимальных удельных расходов химических

реагентов (FeCl_3 , H_2O_2), являющихся устойчивыми решениями.

Рассмотренный подход к идентификации оптимальных параметров процесса фотохимической очистки с применением регуляризации позволит обеспечивать эффективное управление очисткой сточных вод от фенольных соединений.

Список литературы

1. Вучков И., Бояджиева Л., Солаков Е. Прикладной линейный регрессионный анализ. – М.: Финансы и статистика, 1987. 240 с.
2. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2007. – 912 с.
3. Елисеева И.И. Эконометрика. – М.: Издательство Юрайт, 2014. – 449 с.
4. Кармазинов Ф.В., Костюченко С.В., Кудрявцев Н.Н., Храменков С.В. Ультрафиолетовые технологии в современном мире: монография. – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2012. – 392 с.
5. Моисеев Н.Н., Иванилов Ю.П., Столярова Е.М. Методы оптимизации. – М.: Наука, 1978. – 352 с.
6. Рабек Я. Экспериментальные методы в фотохимии и фотофизике: Т. 2. – М.: Мир, 1985. – 544 с.
7. Соколов А.В., Токарев В.В. Методы оптимальных решений. В 2 т. Т.1. Общие положения. Математическое программирование. – М.: Физматлит, 2010. – 564 с.
8. Соколов Э.М., Шейнкман Л.Э., Дергунов Д.В. Исследование снижения концентрации фенольных соединений в водных средах с использованием математического моделирования // Вестник Южного научного центра РАН. – 2013. – Т. 9, № 2. – С. 23–31.
9. Соколов Э.М., Шейнкман Л.Э., Дергунов Д.В. Нелинейная кинетика распада фенольных соединений в водной среде // Фундаментальные исследования. – 2014. – № 9, Ч. 12. – С. 2677–2681.
10. Стерлигова А.Н. Управление запасами в цепях поставок. – М.: ИНФРА-М, 2009. – 430 с.
11. Сычев А.Я., Исак В.Г. Соединения железа и механизмы гомогенного катализа активации O_2 , H_2O_2 и окисления органических субстратов // Успехи химии. – 1995. – № 64 (12). – С. 1183–1209.
12. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1979. – 285 с.
13. Тихонов А.Н. О регуляризации некорректно поставленных задач // Доклады АН СССР. – 1963. – № 153(1). – С. 45–52.
14. Тихонов А.Н. Решение некорректно поставленных задач и метод регуляризации // Доклады АН СССР. – 1963. – № 151(3). – С. 501–504.
15. Тихонов А.Н., Уфимцев М.В. Статистическая обработка результатов экспериментов. – М.: Издательство МГУ, 1988. – 174 с.
16. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. – М.: Высшая школа, 1984. – 463 с.
17. Marta I. Litter, Natalia Quici Photochemical Advanced Oxidation Processes for Water and Wastewater Treatment // Recent Patents on Engineering. – 2010. – Vol. 4, № 3. – P. 217–241.
18. Xiangxuan Liu, Jiantao Liang, Xuanjun Wang Kinetics and Reaction Pathways of Formaldehyde Degradation Using the UV-Fenton Method // Water Environment Research. – 2011. – Vol. 83, № 5. – P. 418–426.

References

1. Vuchkov I., Bojadzhieva L., Solakov E. Prikladnoj linejnij regreسیونnyj analiz. M.: Finansy i statistika, 1987. 240 p.

2. Dreyper N., Smit G. Prikladnoj regressionnyj analiz. M.: Izdatel'skij dom «Vil'jams», 2007. 912 p.
3. Eliseeva I.I. Jekonometrika. M.: Izdatel'stvo Jurajt, 2014. 449 p.
4. Karmazinov F.V. Ul'traioletovye tehnologii v sovremenom mire: monografija / F.V. Karmazinov, S.V. Kostjuchenko, N.N. Kudrjavcev, S.V. Hramenkov – Dolgoprudnyj: Izdatel'skij Dom «Intel'ekt», 2012. 392 p.
5. Moiseev N.N., Ivanilov Ju.P., Stoljarova E.M. Metody optimizacii. M.: Nauka, 1978. 352 p.
6. Rabek Ja. Jeksperimental'nye metody v fotohimii i fotofizike: T. 2. M.: Mir, 1985. 544 p.
7. Sokolov A.V., Tokarev V.V. Metody optimal'nyh reshenij. Vol. 2 t. T.1. Obshhie položenija. Matematicheskoe programmirovanie. M.: Fizmatlit, 2010. 564 p.
8. Sokolov Je.M., Shejnkman L.Je., Dergunov D.V. Issledovanie snizhenija koncentracii fenol'nyh soedinenij v vodnyh sredah s ispol'zovaniem matematicheskogo modelirovanija // Vestnik Juzhnogo nauchnogo centra RAN. 2013. Tom 9, no. 2. pp. 23–31.
9. Sokolov Je.M., Shejnkman L.Je., Dergunov D.V. Nelinejnaja kinetika raspada fenol'nyh soedinenij v vodnoj srede // Fundamental'nye issledovanija. 2014. no. 9. Ch.12. pp. 2677–2681.
10. Sterligova A.N. Upravlenie zapasami v cepjah postavok. M.: INFRA-M, 2009. 430 p.
11. Sychev A.Ja., Isak V.G. Soedinenija zheleza i mehanizmy gomogennogo kataliza aktivacii O_2 , H_2O_2 i oksilenija organicheskikh substratov // Uspehi himii. 1995. 64 (12). pp. 1183–1209.
12. Tihonov A.N., Arsenin V.Ja. Metody reshenija nekorrektnykh zadach. M.: Nauka, 1979. 285 p.
13. Tihonov A.N. O reguljarizacii nekorrektno postavlennykh zadach // Doklady AN SSSR. 1963. 153(1). pp. 45–52.
14. Tihonov A.N. Reshenie nekorrektno postavlennykh zadach i metod reguljarizacii // Doklady AN SSSR. 1963. 151(3). pp. 501–504.
15. Tihonov A.N., Ufimcev M.V. Statisticheskaja obrabotka rezul'tatov jeksperimentov. M.: Izdatel'stvo MGU, 1988. 174 p.
16. Jemanujel' N.M., Knorre D.G. Kurs himicheskoj kinetiki. M.: Vysshaja shkola, 1984. 463 p.
17. Marta I. Litter, Natalia Quici Photochemical Advanced Oxidation Processes for Water and Wastewater Treatment // Recent Patents on Engineering. 2010. Vol. 4, no. 3. pp. 217–241.
18. Xiangxuan Liu, Jiantao Liang, Xuanjun Wang Kinetics and Reaction Pathways of Formaldehyde Degradation Using the UV-Fenton Method // Water Environment Research. 2011. Vol. 83, no. 5. pp. 418–426.

Рецензенты:

Яшин А.А., д.т.н., д.б.н., профессор кафедры «Общая патология» Медицинского института, ФГБОУ ВПО «Тульский государственный университет», г. Тула;

Короткова А.А., д.б.н., профессор, заведующая кафедрой биоэкологии и туризма, ФГБОУ ВПО «Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого», г. Тула.

Работа поступила в редакцию 16.02.2015.