

ИНФОРМАТИКА, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА И УПРАВЛЕНИЕ / COMPUTER SCIENCE, COMPUTER ENGINEERING AND MANAGEMENT

УДК 519.6

DOI: 10.15507/2658-4123.029.201904.480-495



Параметрическая идентификация моделей с заданными качественными характеристиками

О. Г. Кантор^{1*}, С. И. Спивак², Н. Д. Морозкин²

¹ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной
технический университет» (г. Уфа, Россия)

²ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет»
(г. Уфа, Россия)

*o_kantor@mail.ru

Введение. По результатам решения задачи параметрической идентификации должна быть определена модель, которая в рамках выбранной структуры обеспечивает наилучшее воспроизведение экспериментальных данных. Понятие «наилучшее» не является жестко структурированным, поэтому процедура выявления такой модели подчиняется естественной логике и включает этапы формирования информационной базы исследования, определения множества приемлемых моделей и последующего выбора лучшей из них. Если это множество окажется большим, то процедура определения оптимальной модели может оказаться трудоемкой. В этой связи особую значимость приобретает разработка методов параметрической идентификации, в рамках которых уже на стадии формирования множества приемлемых моделей предоставляется возможность учета интересующих исследователя качественных аспектов идентифицируемой зависимости.

Материалы и методы. Совокупность приемлемых методов в задачах параметрической идентификации во многом зависит от типа неопределенности экспериментальных данных. Так, например, вероятностно-статистические методы целесообразно использовать, если наблюдаемые факторы являются случайными и подчиняются какому-либо закону распределения вероятностей. Если же условия применения таких методов не выполняются, то полезным может оказаться представленный в работе подход, основанный на выявлении границ области расположения параметров модели, обеспечивающих достижение заданных уровней качественных характеристик.

Результаты исследования. Формализована процедура параметрической идентификации моделей, основанная на использовании предельно допустимых оценок параметров, позволяющая определять множество их значений, гарантирующих достижение требуемого качественного уровня описания экспериментальных данных, в том числе с позиций анализа влияния изменений требований к точности их воспроизведения. Представлена апробация разработанного метода на примере построения однофакторной модели химической кинетики.

© Кантор О. Г., Спивак С. И., Морозкин Н. Д., 2019



Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 License.
This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 License.

Обсуждение и заключение. Показано, что полученное значение константы скорости химической реакции в соответствии с введенными критериями обеспечивает приемлемую точность, адекватность и устойчивость идентифицированной кинетической модели. При этом по результатам расчетов была выявлена информация, которая может составить основу для планирования экспериментов, проводимых в целях повышения точности воспроизведения экспериментальных данных.

Ключевые слова: параметрическая идентификация, предельно допустимые оценки, подход Л. В. Канторовича, качество модели

Для цитирования: Кантор О. Г., Спивак С. И., Морозкин Н. Д. Параметрическая идентификация моделей с заданными качественными характеристиками // Инженерные технологии и системы. 2019. Т. 29, № 4. С. 480–495. DOI: <https://doi.org/10.15507/2658-4123.029.201904.480-495>

Parametric Identification of the Models with Specified Quality Characteristics

O. G. Kantor^{a*}, S. I. Spivak^b, N. D. Morozkin^b

^aUfa State Petroleum Technological University (Ufa, Russia)

^bBashkir State University (Ufa, Russia)

*o_kantor@mail.ru

Introduction. The model of a given structure should be identified based on the results of solving the problem of parametric identification. This model should provide the best possible the database development reproduction of the experimental data. The concept of “best” is not strictly structured. Therefore, the procedure for identifying such a model is subject to natural logic and includes the stages of data a determination of a set of acceptable models and subsequent selection of the best of them. If the set of acceptable models is large, the procedure for determining the best one can be time-consuming. In this regard, the development of methods for parametric identification, which at the stage of creating a set of acceptable models allows taking into account the qualitative aspects of the identified dependence, which are of interest to the researcher, is of particular importance.

Materials and Methods. The set of acceptable methods in the problems of parametric identification largely depends on the type of the experimental data. Uncertainty for example, probabilistic and statistical methods are useful if the observed factors are random and subject to any law of probability distribution. If the conditions for the use of such methods are not met, it may be useful to present an approach based on identifying the boundaries of location of the model parameters that ensure the achievement of specified levels of quality characteristics.

Results. The procedure of parametric identification of models is formalized. It is based on the use of maximum permissible parameter estimates and allows one to determining the set of parameter values that guarantee the achievement of the required qualitative level of experimental data description, including from the standpoint of analyzing the impact of changes in accord with requirements to the accuracy of their reproduction. The approbation of the developed method on the example of the construction of a one-factor model of chemical kinetics is presented.

Discussion and Conclusion. It is shown that the obtained value of the chemical reaction rate constant, in accordance with the introduced criteria, provides acceptable accuracy, adequacy, and stability of the identified kinetic model. At the same time, the results of calculations revealed the information that can form the basis for planning experiments carried out in order to improve the accuracy of the experimental data.

Keywords: parametric identification, maximum allowable estimates, approach of L.V. Kantorovich, models' quality

For citation: Kantor O.G., Spivak S.I., Morozkin N.D. Parametric Identification of the Models with Specified Quality Characteristics. *Inzhenernyye tekhnologii i sistemy* = Engineering Technologies and Systems. 2019; 29(4):480-495. DOI: <https://doi.org/10.15507/2658-4123.029.201904.480-495>

Введение

В самом общем виде задачи параметрической идентификации сводятся к проблеме определения набора числовых параметров $\bar{a} = \{a_1, \dots, a_p\}$ функциональной зависимости известной спецификации:

$$y = f(\bar{a}, \bar{x}). \quad (1)$$

Этот набор должен обеспечивать в некотором смысле лучшее соответствие имеющихся экспериментальных данных y_t и значений функции \hat{y}_t , $t = \overline{1, m}$, рассчитанных в соответствии с моделью (1).

Традиционная схема решения задач параметрической идентификации может быть сведена к двухэтапной процедуре:

1) на основании экспериментальных данных $\{x_t, y_t\}$, $t = \overline{1, m}$ с использованием выбранного метода определить набор значений параметров \bar{a} модели (1), что равнозначно установлению ее точного вида;

2) анализ достоверности полученной модели.

Анализ достоверности модели подразумевает проверку соответствия значений эндогенной переменной y_t , $t = \overline{1, m}$ представлениям исследователя, которые формализуются в виде некоторых критериев. К числу таких критериев могут относиться точность, адекватность, устойчивость и пр.¹, которые по своей сути являются качественными характеристиками полученной модели.

В том случае, если по результатам реализации второго этапа достигнутые значения рассматриваемых критериев не позволят считать модель достоверной, исследователю следует либо пересмотреть вид функциональной связи (1), либо уточнить и/или дополнить исходные данные, а затем вновь реализовать приведенную выше двух-

этапную процедуру. Очевидно, что количество итераций, которые предстоит осуществить исследователю, оценить заранее сложно. Безусловно, многое зависит от компетентности исследователя, однако степень неопределенности исходных данных, обусловленная их неточностью и ограниченным количеством, может существенно осложнить процесс решения задачи параметрической идентификации.

В этой связи особую актуальность приобретают методы, по результатам применения которых будет предоставляться возможность определения параметров идентифицируемых зависимостей, заведомо удовлетворяющих всем качественным характеристикам.

Важной особенностью задач математической обработки наблюдений является наличие априорной неточности в экспериментальных данных, источниками которой могут быть ошибки измерений или ошибки, возникающие в ходе непосредственной обработки данных. Это означает, что истинные значения исходных данных неизвестны наверняка, но относительно них можно утверждать, что их значения принадлежат некоторым не всегда заранее известным интервалам:

$$\begin{aligned} x_{it} \in [x_{it}, x_{it}], \quad y_t \in [y_t, y_t], \\ t = \overline{1, m}, \quad i = \overline{1, n}. \end{aligned} \quad (2)$$

В этих условиях может оказаться нецелесообразным определение единственного набора значений параметров модели (1), так как в силу того, что для исходных данных характерна интервальная неопределенность, единственность параметров модели будет означать, что получено точное решение на основании априори неточных данных. Поэтому более уместным может оказаться поиск интервалов значений

¹ Блехман И. И., Мышкис А. Д., Пановко Я. Г. Прикладная математика: предмет, логика, особенности подходов. Киев: Наукова думка, 1976. 270 с.

параметров \bar{a} , обеспечивающих приемлемые значения качественных характеристик.

Обзор литературы

Решение задач параметрической идентификации на основе использования статистических методов является наиболее распространенным подходом в прикладном анализе наблюдений², согласно которому по экспериментальным данным $\{\bar{x}_t, y_t\}$, $t = \overline{1, m}$ требуется определить регрессионную зависимость случайного результирующего фактора от неслучайных переменных, объясняющих его:

$$\hat{y}(\bar{x}) = f(\bar{x}) + \xi(\bar{x}), \quad (3)$$

где $\hat{y}(\bar{x})$ – функция, определяющая расчетные значения результирующего фактора, $\xi(\bar{x})$ – ошибки измерений результирующей переменной, которые могут зависеть и от неконтролируемых факторов.

Достаточно часто основой статистического инструментария является метод наименьших квадратов (МНК), применение которого позволяет получать несмещенные, состоятельные и эффективные оценки для параметров регрессионных зависимостей (3). Согласно МНК искомые параметры должны обеспечивать минимум суммы квадратов отклонений экспериментальных и расчетных значений результирующего фактора (эндогенной переменной). При этом должны выполняться определенные предпосылки³, являющиеся следствием условий Гаусса – Маркова⁴, которые справедливы далеко не для всех практических задач. Провер-

ка справедливости этих предпосылок предполагает исследование множества всех ошибок $\{\xi_t = \xi(\bar{x}_t), t = \overline{1, m}\}$, в отношении которых должно быть установлено, что они случайны, распределены по нормальному закону с нулевым математическим ожиданием и конечной дисперсией и не являются автокоррелированными.

В некоторых случаях проблемы неприменимости классического МНК удастся решить с помощью его модификаций⁵. Так, например, в случае гетероскедастичности или автокорреляции ошибок измерений, причинами которых могут выступать ошибки измерений объясняющих переменных \bar{x} , вместо классического МНК может использоваться обобщенный, а при определении параметров систем одновременных уравнений, двухшаговый или трехшаговый МНК. При этом и классический МНК, и все его модификации основаны на вероятностной теории статистических методов [1], согласно которой количество наблюдений должно быть достаточным для проведения расчетов, а сами экспериментальные данные должны состоять из независимых и одинаково распределенных случайных величин.

Перечисленные требования и классические предпосылки использования статистических методов в практических задачах математической обработки наблюдений могут не выполняться. Часто независимость экспериментальных данных, равно как и их одинаковая распределенность, принимаются как некоторая данность или формулируются как следствие «общих предпо-

² Алгоритмы и программы восстановления зависимостей / под ред. В. Н. Вапника. М.: Наука, 1984. 816 с. URL: <https://www.libex.ru/detail/book267535.html> (дата обращения: 20.10.2019); Белов В. М., Суханов В. А., Унгер Ф. Г. Обзор основных статистических методов определения параметров аппроксимирующих функций. Томск: ТИЦ СО АН СССР, 1990. 34 с.

³ Айвазян С. А., Мхитарян В. С. Прикладная статистика и основы эконометрики. М.: ЮНИТИ, 1998. 1022 с.

⁴ Дугерги К. Введение в эконометрику: учебник / пер. с англ. Изд. 3-е. М.: Инфра-М, 2009. 465 с.

⁵ Там же.

ложений», что далеко не всегда может соответствовать действительности. Помимо этого, в случае уникальных экспериментов данные априори могут не быть многочисленными, что способно усложнить проверку предпосылок МНК или даже поставить под сомнение принципиальную возможность применения вероятностных моделей, которые изначально ориентированы на исследование массовых явлений. Несоблюдение или игнорирование принципов и необходимых предпосылок статистических методов при решении задач параметрической идентификации может стать причиной получения модели, которая не будет являться адекватной объекту исследования.

В тех случаях, когда невозможно использование статистических методов, может применяться другой инструментарий [2; 3], в том числе основанный на теории нечетких множеств⁶ [4] или теории возможностей⁷. В контексте подобных ситуаций значительный интерес могут представлять и методы, основанные на обработке наблюдений в соответствии с подходом, предложенным Л. В. Канторовичем [5]. Суть этого подхода состоит в том, чтобы при опреде-

лении параметров модели максимально полно использовать всю имеющуюся количественную и качественную информацию об объекте исследования. Ключевым аспектом при реализации такого подхода является выявление интервалов значений параметров модели, каждый элемент которых обеспечивает соответствие заданным качественным характеристикам.

Идеи, высказанные Л. В. Канторовичем, заложили основу нового подхода к математической обработке наблюдений, который активно развивается в рамках интервального анализа благодаря теоретическим работам зарубежных⁸ [6–8] и российских авторов⁹ [9; 10], а также используется в отдельных научных направлениях [3; 11–13]. Одно из них связано с решением обратных задач химической кинетики при исследовании механизмов сложных химических реакций [14–17].

В настоящей работе представлен метод параметрической идентификации, основанный на использовании предельно допустимых оценок параметров при определении их интервальных оценок с учетом требуемых качественных характеристик, и его апробация

⁶ Дилигенский Н. В., Дымова Л. Г., Севастьянов П. В. Нечеткое моделирование и многокритериальная оптимизация производственных систем в условиях неопределенности: технология, экономика, экология. М.: Изд-во «Машиностроение – 1», 2004. 397 с.; Нечеткие множества и теория возможностей. Последние достижения / сборник статей пер. с англ. под ред. Р. Р. Ягера. М.: Радио и связь, 1986. 408 с. URL: <http://elibr.pstu.ru/vufind/Record/RUPSTUbooks147886> (дата обращения: 20.10.2019).

⁷ Вошинин А. П. Задачи анализа с неопределенными данными – интервальность и/или случайность? // Интервальная математика и распространение ограничений: Рабочие совещания. МКВМ–2004. С. 147–158. URL: http://www-sbras.nsc.ru/interval/Conferences/IMRO_04/Voschinin.pdf (дата обращения: 20.10.2019); Дюбуа Д., Прад А. Теория возможностей. Приложения к представлению знаний в информатике. М.: Радио и связь, 1990. 288 с.; Дилигенский Н. В., Дымова Л. Г., Севастьянов П. В. Нечеткое моделирование и многокритериальная оптимизация...; Пытьев Ю. П. Возможность как альтернатива вероятности. Математические и эмпирические основы, применение. М.: Физматлит, 2016. 596 с. URL: https://rusneb.ru/catalog/000199_000009_008627200/ (дата обращения: 20.10.2019).

⁸ Жолен Л., Кифер М., Дидри О., Вальтер Э. Прикладной интервальный анализ. М.: Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2005. 468 с. URL: <http://www.nsc.ru/interval/Library/ArpBooks/ArpIntAnal.pdf> (дата обращения: 20.10.2019).

⁹ Калмыков С. А., Шокин Ю. И., Юлдашев З. Х. Методы интервального анализа. Новосибирск: Наука, 1986. 222 с. URL: https://www.studmed.ru/kalmykov-sa-shokin-yui-yuldashev-zh-metody-intervalnogo-analiza_6203900ede5.html (дата обращения: 20.10.2019); Шарый С. П. Конечномерный интервальный анализ. Новосибирск: Издательство «XYZ», 2019. 635 с. URL: <http://www.nsc.ru/interval/Library/InteBooks/SharyBook.pdf> (дата обращения: 20.10.2019).

для задачи построения модели химической кинетики.

Материалы и методы

Для оценки степени близости расчетных и экспериментальных данных введем в рассмотрение невязки – разности между расчетными и экспериментальными значениями переменной y :

$$\hat{y}_t - y_t, t = \overline{1, m}. \quad (4)$$

Условие того, что расчетные и экспериментальные данные (2) в каждом наблюдении не должны отличаться более чем на некоторую величину ζ_p , задается системой неравенств:

$$|\hat{y}_t - y_t| \leq \zeta_p, t = \overline{1, m}. \quad (5)$$

Очевидно, что искомые параметры $\bar{a} = \{a_1, \dots, a_p\}$ модели (1) влияют на величины невязок. При этом для одной и той же модели могут существовать несколько наборов значений параметров, которые одинаково хорошо будут описывать наблюдения, но в то же время будут существенно различаться между собой. Совокупность наборов значений всех подобных параметров, очевидно, задает некоторую область Λ^* , для обозначения которой будем использовать термин «область неопределенности». В данном случае термин «неопределенность» отражает тот факт, что каждая точка из области Λ^* может быть выбрана для задания окончательного вида модели (1), что в свою очередь равносильно отсутствию однозначного способа ее идентификации.

По каждому из параметров $\bar{a} = \{a_1, \dots, a_p\}$ определим отрезок:

$$a_j \in [\underline{a}_j, \bar{a}_j], j = \overline{1, p}, \quad (6)$$

состоящий из значений a_j , каждое из которых сохраняет совместность системы (5) при некоторых значениях других параметров, а вне его совместность этой системы не обеспечивается никаким набором значений параметров. Будем называть этот отрезок «интервалом неопределенности», а его границы – «предельно допустимыми оценками» параметров идентифицируемой зависимости (1).

Поставим задачу определения интервалов значений параметров (6), которые удовлетворяют системе ограничений (5). При таком подходе не требуется знание статистических свойств распределения погрешностей измерений, так как в системе неравенств (5) величины $\{\xi_t\}$, по сути, являются характеристиками абсолютных ошибок аппроксимации, и информация об их значениях может быть доступна исследователю (например, на основании технических характеристик используемого оборудования).

Введем величину $\xi^* = \max_{t=\overline{1, m}} \{\xi_t\}$. Тогда в силу условий (5) будут справедливы соотношения:

$$|\hat{y}_t - y_t| \leq \xi^*, t = \overline{1, m},$$

из которых следует, что модель (1) должна описывать экспериментальные данные в пределах, обусловленных величиной ξ^* . Для обозначения ξ^* будем использовать термин «предельно допустимая погрешность аппроксимации».

Введем в рассмотрение множество Λ , задаваемое прямым произведением интервалов (6):

$$\Lambda = [a_1, \bar{a}_1] \times \dots \times [a_p, \bar{a}_p]. \quad (7)$$

Очевидно, что Λ является аппроксимирующим множеством для области неопределенности Λ^* . Назовем Λ «множеством неопределенности».

Будем предполагать, что требуемые качественные характеристики имеют количественное задание, то есть формализованы в виде количественных соотношений (равенств, неравенств и пр.) или критериев. Причем данные характеристики могут относиться к временным интервалам как ретроспективного, так и перспективного

анализа. Очевидно, что такая информация приводит к сужению множества Λ и, как следствие, необходимости рассмотрения вместо него множества $\tilde{\Lambda} = \Lambda \cap \Omega$, где Ω – множество значений параметров модели (1), которые обеспечивают приемлемые уровни интересующих исследователя качественных характеристик. Все дальнейшие рассуждения приводятся для множества Λ , но могут быть повторены в терминах множества $\tilde{\Lambda}$.

Ранее было отмечено, что в число качественных характеристик целесообразно включать те, которые позволяют получить оценки точности, адекватности и устойчивости получаемого решения¹⁰. Основываясь на описанном выше подходе, в качестве характеристики точности модели примем величину предельно допустимой погрешности аппроксимации ξ^* , являющуюся мерой максимального расхождения экспериментальных и расчетных значений искомой функции. Соответствие ее значения представлениям исследователя о точности модели эквивалентно тому, что уровень данной качественной характеристики оценивается как приемлемый. Расчет предельно допустимой погрешности ξ^* в соответствии с подходом Л. В. Канторовича [18] предлагается осуществлять на основе решения оптимизационной задачи:

$$\begin{aligned} \xi &\rightarrow \min_a \\ |\hat{y}_t - y_t| &\leq \xi, \quad t = \overline{1, m} \\ \xi &\geq 0. \end{aligned} \quad (8)$$

В этом случае расчет предельно допустимых оценок параметров может проводиться на основе оптимизационных задач:

$$\begin{aligned} a_j &\rightarrow \min_a \left(\max_a \right), \quad j = \overline{1, p} \\ |\hat{y}_t - y_t| &\leq \xi^*, \quad t = \overline{1, m}. \end{aligned}$$

Адекватность модели должна устанавливаться в каждом конкретном случае с учетом специфики объекта исследования.

Для оценки устойчивости решения предлагается анализировать два множества:

– множество значений параметров $\Lambda' = \{\bar{a} \mid \xi^* \leq |\hat{y}_t - y_t| \leq \xi^*(1 + \theta), \theta \geq 0\}$, которые гарантируют приемлемое (на уровне θ) изменение решения к ослаблению требований на достигнутый уровень точности описания имеющихся данных ξ^* ;

– множество значений исходных данных, которые обеспечивают идентификацию модели (1) с учетом «ужесточения» требований на достигнутом уровне точности описания имеющихся данных ξ^* : $X' = \{\bar{x}_t, t = \overline{1, m} \mid |\hat{y}_t - y_t| \leq \xi^* \cdot \lambda, 0 \leq \lambda < 1\}$.

Определение точных границ областей Λ' и X' в случае задач больших размерностей может свестись к достаточно объемным вычислениям. По этой причине более целесообразным может оказаться выявление границ соответствующих аппроксимирующих множеств Λ'' и X'' , имеющих более простую структуру¹¹.

Для идентификации множества Λ'' предлагается использовать следующий подход.

Выберем набор параметров $\bar{a}^0 = \{a_1^0, \dots, a_p^0\}$: $\bar{a}^0 \in \Lambda^* \cap \Lambda$ (полагая, что ξ^* определено, а множество Λ^* – не идентифицировано). Зададим параметр θ и рассмотрим следующую оптимизационную задачу:

¹⁰ Блехман И. И., Мышкис А. Д., Пановко Я. Г. Прикладная математика: предмет, логика, особенности подходов.

¹¹ Калмыков С. А., Шокин Ю. И., Юлдашев З. Х. Методы интервального анализа.

$$\begin{aligned} &\eta \rightarrow \min_{\eta, \{\delta_j\}} \\ &|\hat{y}'_i - y_i| \leq \zeta^*(1 + \theta), \quad t = \overline{1, m} \\ &|1 - \delta_j| \leq \eta, \quad \delta_j \geq 0, \quad j = \overline{1, p} \\ &\eta \geq 0, \end{aligned} \quad (10)$$

где $y_i = f(\bar{a}^0, \bar{x}_i)$, $y'_i = f(\bar{a}', \bar{x}_i)$, $t = \overline{1, m}$, $\bar{a}' = \{a'_j | a'_j = \delta_j a_j^0, j = \overline{1, p}\}$.

По результатам решения задачи (10) должны быть рассчитаны максимальные относительные отклонения δ_j от каждого параметра a_j^0 , которые обеспечивают заданный уровень соответствия расчетных и экспериментальных данных. По сути, это означает, что будет определено аппроксимирующее множество Λ'' для области Λ' , состоящее из значений параметров $\bar{a}' = \{a'_1, \dots, a'_p\}$, которые гарантировано обеспечивают для всех невязок $\hat{y}'_i - y_i$ абсолютную точность, не превышающую $\zeta^*(1 + \theta)$ (рис. 1).

Если малым значениям параметра θ будет соответствовать малое значение параметра η (а значит и малые относительные отклонения от точки \bar{a}^0), то решение задачи параметрической идентификации, задаваемое областью неопределенности Λ^* , является устойчивым в точке \bar{a}^0 относительно вариаций уровней точности.

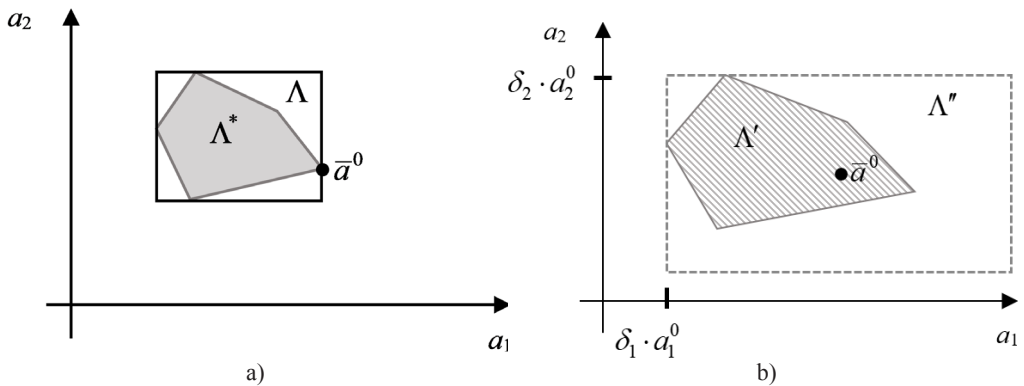
Вывод об устойчивости в целом множества Λ^* решения задачи параметрической идентификации может быть сделан на основании анализа результатов аналогичных расчетов для всех наборов значений параметров, лежащих на пересечении множеств Λ^* и Λ .

Таким образом, модель для идентификации множества X'' может быть представлена в следующем виде:

$$\begin{aligned} &\zeta \rightarrow \min_{\zeta, \{\gamma_i\}} \\ &|\hat{y}''_i - y_i| \leq \zeta^* \cdot \lambda, \quad t = \overline{1, m} \\ &|1 - \gamma_i| \leq \zeta, \quad \gamma_i \geq 0, \quad i = \overline{1, n} \\ &\zeta \geq 0, \end{aligned} \quad (11)$$

где $y_i = f(\bar{a}, \bar{x}_i)$; $y''_i = f(\bar{a}, \bar{x}'_i)$; $\bar{x}'_i = \{x'_i | x'_i = \gamma_i x_i, i = \overline{1, n}\}$; \bar{a} – произвольный элемент множества Λ^* ; λ – заданный числовой параметр ($0 \leq \lambda < 1$), характеризующий желаемое изменение точности соответствия расчетных и экспериментальных данных.

Оптимальное значение целевой функции задачи (11) ζ^* характеризует максимальную погрешность в параметрах при заданном уровне точности аппроксимации $\zeta^* \cdot \lambda$. Если малым вариациям точности аппроксимации



Р и с. 1. Геометрическая интерпретация начальных условий (а) и решения (б) задачи (10)

F i g. 1. Geometric interpretation of the initial conditions (a) and solution (b) of the problem (10)

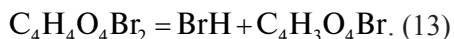
(что отвечает значениям λ , близким к 1) будут соответствовать малые вариации исходных данных (то есть допустимые ζ^*), то исходные данные задачи параметрической идентификации при фиксированном наборе значений параметров $\bar{a} \in \Lambda^*$ являются устойчивыми относительно вариации уровней точности. Другими словами, если значение ζ^* соответствует представлениям исследователя о предельно допустимой погрешности измерения исходных данных, то качество исходных данных можно считать приемлемым.

Учитывая, что в формализации модели (11) присутствует произвольный вектор параметров $\bar{a} \in \Lambda^*$, то для формулировки вывода о качестве исходных данных требуется рассмотреть задачи (11) $\forall \bar{a} \in \Lambda^*$. Однако, если размер множества Λ^* небольшой (что равнозначно приемлемой неопределенности решения), и функция (1) является непрерывной, качество исходных данных может быть установлено на основе рассмотрения ограниченного множества векторов $\bar{a} \in \Lambda^*$. В этой связи целесообразным является проведение оценки степени неопределенности решения задачи параметрической идентификации [14], что с учетом справедливости соотношения $\Lambda^* \subset \Lambda$ может быть осуществлено с использованием предельно допустимых оценок параметров:

$$\text{diam } \Lambda^* = \text{diam } \Lambda = \max_{j=1, p} (\bar{a}_j - \underline{a}_j). \quad (12)$$

Результаты исследования

Апробация представленного подхода проводилась на классическом примере построения простейшей модели химической кинетики для реакции «превращения дибромантарной кислоты в бромистоводородную и бромомалеиновую»¹² [19]:



Для химической реакции (13) вид кинетической модели, описывающей изменение концентрации вещества (a) с течением времени (t), следующий:

$$\frac{da}{dt} = -ka, \quad (14)$$

где k – константа скорости реакции, причем из реакции (14) следует, что $k \geq 0$.

Значения константы скорости реакции k рассчитывались по формуле:

$$k = \frac{1}{t} \cdot \lg \frac{T_0}{3T_0 - 2T_n}, \quad (15)$$

где T_n – титры, измеряемые в моменты времени t_n .

Для расчета концентрации дибромантарной кислоты использовалась формула:

$$a_n = a_0 \left(3 - \frac{2T_n}{T_0} \right), \quad (16)$$

где a_0 – начальная концентрация.

Условиями проведения реакции гарантировалось постоянство константы скорости k . Поэтому справедливость кинетического уравнения (14) была установленной в силу того, что по результатам расчетов на основании формулы (16) получались близкие значения k .

Ниже приводятся этапы параметрической идентификации модели (14), реализованные в соответствии с представленным выше подходом. Расчет предельно допустимой погрешности аппроксимации по имеющимся экспериментальным данным (табл. 1) проводился на основе модели:

$$\begin{aligned} \xi &\rightarrow \min \\ |\hat{a}_i - a_i| &\leq \xi, \quad i = \overline{1, 19} \\ k &\geq 0, \quad \xi \geq 0, \end{aligned} \quad (17)$$

¹² Вант-Гофф Я. Г. Очерки по химической динамике. Л.: ОНТИ-Химтеорет, 1936. 178 с.

где a_i – концентрации дибромантарной кислоты, рассчитанные по формуле (16) на основе экспериментальных данных о титрах; a_i – расчетные значения концентрации согласно модели (17) (табл. 1).

По методу Рунге – Кутты для задачи (17) было получено единственное оптимальное решение $k^* = 0,03122$. Таким образом, был установлен точный вид модели (14):

$$\frac{da}{dt} = -0,03122a, \quad (18)$$

и получена первая качественная характеристика – точность описания экспериментальных данных $\zeta^* = 0,01840$ (это значение показывает, что в каждом опыте константа скорости k^* (табл. 1) обеспечивает описание экспериментальных концентраций с погрешностью, не превышающей 0,01840). Константе k^* соответствует обобщенный показатель точности описания данных – средняя ошибка аппроксимации¹⁴, равная 2,42 %. Интервал неопределенности по константе скорости в виду единственности оптимального значения k^* является вырожденным.

Т а б л и ц а 1

T a b l e 1

Результаты численной реализации модели (17)
Results of numerical implementation of the model (17)

t , мин. / min	T^{13} , мг/см ³ / mg/cm ³	k , мин. ⁻¹ / min ⁻¹	Концентрация, мг/см ³ / Concentration, mg/cm ³		Ошибка / Error	
			a	a_i	абсолютная, мг/см ³ / absolute error, mg/cm ³	относительная, % / relative error, %
0	10210,0	–	1000,0	–	–	–
2	10530,0	32,4	937,3	939,5	–2,20	–0,23
4	10790,0	30,2	886,4	882,6	3,80	0,42
6	11050,0	30,0	835,5	829,2	6,30	0,75
8	11250,0	28,5	796,3	779,0	17,30	2,17
10	11550,0	31,7	737,5	731,9	5,60	0,77
13	11940,0	31,8	661,1	666,4	–5,30	–0,81
16	12290,0	32,7	592,6	606,9	–14,30	–2,42
19	12530,0	31,9	545,5	552,6	–7,10	–1,30
22	12840,0	32,9	484,8	503,2	–18,40	–3,79
26	13030,0	32,0	447,6	444,1	3,50	0,77
30	13300,0	31,0	394,7	392,0	2,70	0,68
34	13570,0	31,6	341,8	346,0	–4,20	–1,22
39	13710,0	30,8	314,4	296,0	18,40	5,85
45	14050,0	31,0	247,8	245,4	2,40	0,95
52	14320,0	31,4	194,9	197,3	–2,40	–1,21
60	14520,0	31,0	155,7	153,7	2,00	1,32
71	14690,0	29,6	122,4	109,0	13,40	10,95
90	15030,0	32,1	55,8	60,3	–4,50	–8,02

¹³ В таблице 1 T , k – экспериментальные данные / In Table 1 T , k – experimental data.

$$^{14} \bar{A} = \frac{1}{19} \sum_{i=1}^{19} \left| \frac{\bar{a}_i - a_i}{a_i} \right|.$$

Кинетическая модель (18) является адекватной в силу логичной динамики расчетных значений концентраций дибромантарной кислоты.

Анализ устойчивости модели (18) проводился с учетом того, что в идентифицируемой зависимости определению подлежит единственный параметр. Поэтому множество Λ' представляет собой интервал, границы которого могут быть найдены на основе следующих оптимизационных задач:

$$\begin{aligned} k &\rightarrow \min (\max) \\ |\hat{a}_i - a_i| &\leq \xi^* (1 + \theta), \quad i = \overline{1, 19} \quad (19) \\ k &\geq 0, \end{aligned}$$

где $\theta \geq 0$ – заданный числовой параметр, отражающий «ослабление» усло-

вий на степень близости экспериментальных и расчетных значений.

Оптимальное решение задачи (19) при $\theta = 0,15$ следующее:

$$\begin{aligned} k^{\min} &= 0,03097 = (1 - 0,0080)k^*, \\ k^{\max} &= 0,03146 = (1 + 0,0077)k^*. \end{aligned}$$

Модель для анализа устойчивости исходных данных относительно вариации уровней точности имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \zeta &\rightarrow \min_{k, \{\gamma_n\}} \\ |\tilde{a}_i - a_i| &\leq \zeta^* \cdot \lambda, \quad i = \overline{1, 19} \\ |1 - \gamma_i| &\leq \zeta, \quad \gamma_i \geq 0, \quad i = \overline{1, 19} \quad (20) \\ k &\geq 0, \quad \zeta \geq 0, \end{aligned}$$

Т а б л и ц а 2
T a b l e 2

Результаты численной реализации модели (20) при $\lambda = 0,85$
Results of the numerical implementation of the model (20) with $\lambda = 0,85$

t, мин. / min	γ_i	Концентрации, мг/см ³ / Concentration, mg/cm ³		Ошибка / Error	
		\tilde{a}_i	a_i	абсолютная, мг/см ³ / absolute error, mg/cm ³	относительная, % / relative error, %
0	0,001046	1000,0	–	–	–
2	–0,001046	933,0	939,0	–6,00	–0,64
4	–0,001046	882,0	881,7	0,20	0,02
6	0,001046	835,5	828,0	7,50	0,90
8	–0,000393	793,1	777,5	15,60	1,97
10	–0,001046	732,8	730,0	2,70	0,37
13	–0,001046	656,2	664,3	–8,10	–1,23
16	–0,000509	588,8	604,4	–15,60	–2,66
19	–0,001046	540,4	550,0	–9,60	–1,78
22	0,001046	484,8	500,5	–15,60	–3,23
26	–0,001046	442,3	441,3	1,00	0,22
30	–0,001046	389,3	389,1	0,20	0,04
34	–0,001046	336,3	343,1	–6,80	–2,03
39	–0,001046	308,8	293,1	15,60	5,07
45	–0,001046	242,0	242,7	–0,70	–0,28
52	–0,001046	189,0	194,7	–5,70	–3,01
60	–0,001046	149,8	151,4	–1,60	–1,08
71	–0,001046	116,4	107,1	9,30	7,99
90	–0,001046	49,7	59,0	–9,30	–18,75

где \tilde{a}_i и a_i – концентрации дибромантарной кислоты, рассчитанные по формуле (16) и согласно модели (20) на основе скорректированных на коэффициент $(1-\gamma_i)$ значений титров.

Ниже (табл. 2) представлены результаты расчетов, полученные при $\lambda = 0,85$ в соответствии с оптимальными значениями $\zeta^* = 0,00105$ и $k^* =$

$= 0,03147$ (средняя ошибка аппроксимации составила 2,85 %).

Таким образом, абсолютная погрешность на уровне k^* может быть обеспечена за счет вариации титров не более чем на 0,105 % от их экспериментальных значений, что позволяет считать экспериментальные данные устойчивыми к вариации значений критерия точности (табл. 3).

Т а б л и ц а 3

Результаты анализа качественных характеристик модели (18)

Этап	Показатели	Выводы
Исследование на устойчивость решения k^* (при $\theta = 0,15$)	Характеристики точности: – предельно допустимая погрешность аппроксимации $\xi^* = 0,01840$, долей ед.; – средняя ошибка аппроксимации $\bar{A} = 2,42$ %	Решение k^* устойчиво к вариации точности
	Характеристики неопределенности: – интервал по константе скорости $k \in [0,03097, 0,03146]$; – вариация относительных ошибок $[-8,02, 10,95]$, %	
Исследование на устойчивость исходных данных (при $\lambda = 0,85$)	Характеристики точности: – абсолютная ошибка аппроксимации $\xi^* \cdot \lambda = 0,0156$, долей ед.; – средняя ошибка аппроксимации $\bar{A} = 2,85$ %	Исходные данные устойчивы к вариации точности
	Характеристики неопределенности: – максимальное отклонение от фактически измеренных титров $\zeta^* = 0,00105$, долей ед.; – вариация относительных ошибок $[-18,75, 7,99]$, %	

T a b l e 3

Results of the analysis of the model (18) quality characteristics

Stage	Indicators	Findings
Solution sustainability study k^* (at $\theta = 0.15$)	Accuracy characteristics: – maximum permissible approximation error $\xi^* = 0.01840$, share units; – average approximation error $\bar{A} = 2.42\%$	The solution k^* is resistant to accuracy variations
	Uncertainty characteristics: – rate constant interval $k \in [0.03097, 0.03146]$; – relative error variation $[-8.02, 10.95]$, %	
Initial data sustainability study (at $\lambda = 0.85$)	Accuracy characteristics: – absolute approximation error $\xi^* \cdot \lambda = 0.0156$, share units; – average approximation error $\bar{A} = 2.85\%$	Initial data resistant to variation in accuracy
	Uncertainty characteristics: – maximum deviation from actually measured titres $\zeta^* = 0.00105$, share units; – relative error variation $[-18.75, 7.99]$, %	

Обсуждение и заключение

Проведенные расчеты с позиций реализации представленного в статье подхода к параметрической идентификации функциональных зависимостей позволили получить константу скорости рассматриваемой химической реакции $k^* = 0,03122$, которая обеспечивает приемлемые значения введенных качественных характеристик кинетической модели.

Важной отличительной особенностью метода являются возможности, которые предоставляются в части выявления свойств идентифицированной зависимости и планирования экспериментов.

Так, в рассмотренной выше задаче идентификации кинетической модели было установлено следующее. Если предположить, что погрешности в измерении каждого экспериментального значения концентрации вырастут не более чем на 15 %, то границы соответствующего интервала значений константы скорости будут отличаться от оптимальной величины k^* не более чем на 0,8 %. Таким образом, зная или предполагая предельный порог в расхождении между экспериментальными и расчетными значениями эндогенной переменной, исследователь может оценить соответствующие изменения диапазонов вариации искомых параметров. Если малым изменениям значений абсолютной точности будут соответствовать приемлемые, с точки зрения исследователя, изменения в параметрах, то полученное решение можно считать устойчивым к вариации точности.

С использованием представленного метода идентификации могут быть определены и диапазоны вариации исходных данных, обеспечивающие лучшие значения точности соответствия расчетных и фактических значений моделируемой переменной. Так, в рассмотренной задаче идентификации кинетической модели абсолютная точность может быть улучшена на 15 % за счет изменения значений титров не более чем на $\pm 0,105$ % от их фактических уровней. Данная оценка вариации погрешности титров находится в допустимых границах для этого типа экспериментальных данных, что позволяет характеризовать их качество как приемлемое.

Анализ вариации абсолютной точности в разрезе каждого экспериментального значения экзогенной переменной может составить основу для проведения экспериментов, целью которых будет являться уточнение имеющихся данных, в большей степени влияющих на значение достигнутого уровня точности. Так, применительно к рассмотренной задаче анализ расчетных данных (табл. 2) показал, что при изменении исходных данных в соответствии с оптимальным решением задачи (17) в момент времени $t = 90$ минут существенно возрастает погрешность для значений концентрации. Поэтому для повышения точности воспроизведения экспериментальных данных модели целесообразным является проведение таких опытов, которые будут аналогичны осуществленным в данный момент времени.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Орлов А. И. Некоторые нерешенные вопросы в области математических методов исследования // Заводская лаборатория. 2002. Т. 68, № 3. С. 52–56.
2. Ионов П. А., Сенин П. В., Столяров А. В. Моделирование напряженно-деформированного состояния в ресурсолимитирующем соединении объемного гидропривода // Вестник Мордовского университета. 2018. Т. 28, № 4. С. 537–551. DOI: <https://doi.org/10.15507/0236-2910.028.201804.537-551>

3. **Коржавина А. С., Князьков В. С.** Метод умножения с масштабированием результата для высокоточных модулярно-позиционных интервально-логарифмических вычислений // Инженерные технологии и системы. 2019. Т. 29, № 2. С. 187–204. DOI: <https://doi.org/10.15507/2658-4123.029.201902.187-204>
4. **Жбанова Н. Ю., Блюмин С. Л.** Параметрическая идентификация кусочно-линейных и кусочно-нелинейных многоэтапных нечетких процессов // Вестник Иркутского государственного технического университета. 2016. Т. 20, № 11. С. 84–93. DOI: <http://www.doi.org/10.21285/1814-3520-2016-11-84-93>
5. **Канторович Л. В.** О некоторых новых подходах к вычислительным методам и обработке наблюдений // Сибирский математический журнал. 1962. Т. 3, № 5. С. 701–709.
6. **Alefeld G., Mayer G.** Interval Analysis: Theory and Applications // Journal of Computational Applied Mathematics. 2000. Vol. 121, Issue 1–2. Pp. 421–464. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0377-0427\(00\)00342-3](https://doi.org/10.1016/S0377-0427(00)00342-3)
7. Стандартизация обозначений в интервальном анализе / Б. Кирфотт [и др.] // Вычислительные технологии. 2010. Т. 15, № 1. С. 7–13. URL: <http://www.ict.nsc.ru/jct/annotation/1345> (дата обращения: 20.10.2019).
8. **Moore R. E.** Interval Analysis // Journal of the Franklin Institute. 1967. Vol. 284, Issue 2. Pp. 148–149. DOI: [https://doi.org/10.1016/0016-0032\(67\)90590-X](https://doi.org/10.1016/0016-0032(67)90590-X)
9. **Кумков С. И.** Обработка экспериментальных данных ионной проводимости расплавленного электролита методами интервального анализа // Расплавы. 2010. № 3. С. 79–89.
10. **Оскорбин Н. М., Жилин С. И., Суханов С. И.** Интервальный подход к оценке согласованности и точности геоанализов // Геодезия и картография. 2011. № 11. С. 12–16. URL: <https://geocartography.ru/archive/2011-november> (дата обращения: 20.10.2019).
11. **Суханов В. А.** Исследование эмпирических зависимостей: нестатистический подход: сборник научных статей / под ред. Н. А. Оскорбина, П. И. Кузьмина. Барнаул: Алт. ун-т, 2007. С. 115–127.
12. Chemometrics in Analytical Chemistry – Part I: History, Experimental Design and Data Analysis Tools / R. G. Brereton [et al.] // Analytical and Bioanalytical Chemistry. 2017. Vol. 409, Issue 25. Pp. 5891–5899. DOI: <http://www.doi.org/10.1007/s00216-017-0517-1>
13. Chemometrics in Analytical Chemistry – Part II: Modeling, Validation, and Applications / R. G. Brereton [et al.] // Analytical and Bioanalytical Chemistry. 2018. Vol. 410, Issue 26. Pp. 6691–6704. DOI: <http://www.doi.org/10.1007/s00216-018-1283-4>
14. **Кантор О. Г., Спивак С. И., Талипова Р. Р.** Параметрическая идентификация математических моделей химической кинетики // Системы и средства информатики. 2017. Т. 27, № 3. С. 145–154. DOI: <https://doi.org/10.14357/08696527170312>
15. **Спивак С. И., Тимошенко В. И., Слинько М. Г.** Методы построения кинетических моделей стационарных реакций // Химическая промышленность сегодня. 1979. № 3. С. 33–36.
16. **Яблонский Г. С., Спивак С. И.** Математические модели химической кинетики. М.: Знание, 1977. 64 с.
17. **Pomerantsev A. L., Kutsenova A. V., Rodionova O. Ye.** Kinetic Analysis of Non-Isothermal Solid-State Reactions: Multi-Stage Modeling Without Assumptions in the Reaction Mechanism // Physical Chemistry Chemical Physics. 2017. Vol. 19, Issue 5. Pp. 3606–3615. DOI: <https://doi.org/10.1039/c6cp07529k>
18. **Спивак С. И., Исмагилова А. С., Кантор О. Г.** Области неопределенности в математической теории анализа измерений // Системы управления и информационные технологии. 2014. Т. 58, № 4. С. 17–21. URL: <http://www.sbook.ru/suit/CONTENTS/140400.pdf> (дата обращения: 20.10.2019).
19. **Кантор О. Г., Спивак С. И.** Оценка качества моделей химической кинетики // Известия Уфимского научного центра РАН. 2017. № 2. С. 11–17. URL: <http://sciencerb.ru/#> (дата обращения: 20.10.2019).

Поступила 06.05.2019; принята к публикации 06.06.2019; опубликована онлайн 31.12.2019

Об авторах:

Кантор Ольга Геннадиевна, доцент кафедры корпоративных финансов и учетных технологий ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет» (450062, Россия, г. Уфа, ул. Космонавтов, д. 1), кандидат физико-математических наук, ResearcherID: O-5136-2015, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-3186-3285>, ScopusID: 26767794600, o_kantor@mail.ru

Спивак Семен Израилевич, заведующий кафедрой математического моделирования ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет» (450076, Россия, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32), доктор физико-математических наук, профессор, ResearcherID: B-9334-2017, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0911-7446>, ScopusID: 16465463600, semen.spivak@mail.ru

Морозкин Николай Данилович, ректор ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет» (450076, Россия, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32), доктор физико-математических наук, профессор, ResearcherID: D-2570-2019, ScopusID: 6603118906, rector@bsunet.ru

Заявленный вклад соавторов:

О. Г. Кантор – формирование основной концепции, цели и задачи исследования, проведение расчетов, подготовка текста, формирование выводов; С. И. Спивак – научное руководство, анализ результатов исследований, доработка текста, корректировка выводов; Н. Д. Морозкин – корректировка литературного анализа, доработка текста, корректировка выводов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

REFERENCES

1. Orlov A.I. Some Unresolved Issues in the Field of Mathematical Methods of Research. *Zavodskaya laboratoriya* = Industrial Laboratory. 2002; 68(3):52-56. (In Russ.)
2. Ionov P.A., Senin P.V., Stolyarov A.V. Modeling of Stress-Strain State in Connection Resource Defines of Volumetric Hydraulic Drive. *Vestnik Mordovskogo universiteta* = Mordovia University Bulletin. 2018; 28(4):537-551. (In Russ.) DOI: <https://doi.org/10.15507/0236-2910.028.201804.537-551>
3. Korzhavina A.S., Knyazkov V.S. The Multiplication Method with Scaling the Result for High-Precision Residue Positional Interval Logarithmic Computations. *Inzhenernyye tekhnologii i sistemy* = Engineering Technologies and Systems. 2019; 29(2):187-204. (In Russ.) DOI: <https://doi.org/10.15507/2658-4123.029.201902.187-204>
4. Zhibanova N. Yu., Blyumin S.L. Parametric Identification of Piecewise Linear and Piecewise Non-Linear Multistage Fuzzy Processes. *Vestnik Irkutskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* = Irkutsk State Technical University Bulletin. 2016; 20(11):84-93. (In Russ.) DOI: <http://www.doi.org/10.21285/1814-3520-2016-11-84-93>
5. Kantorovich L.V. Some New Approaches to Computational Methods and Processing of Observations. *Sibirskiy matematicheskii zhurnal* = Siberian Mathematical Journal. 1962; 3(5):701-709. (In Russ.)
6. Alefeld G., Mayer G. Interval Analysis: Theory and Applications. *Journal of Computational Applied Mathematics*. 2000; 121(1-2):421-464. (In Eng.) DOI: [https://doi.org/10.1016/S0377-0427\(00\)00342-3](https://doi.org/10.1016/S0377-0427(00)00342-3)
7. Kearfott B., Nakao M., Neumaier A., et al. Standardized Notation in Interval Analysis. *Iychnislitelnye tekhnologii* = Computational Technologies. 2010; 15(1):7-13. Available at: <http://www.ict.nsc.ru/jct/annotation/1345> (accessed 20.10.2019). (In Eng.)
8. Moore R.E. Interval Analysis. *Journal of the Franklin Institute*. 1967; 284(2):148-149. (In Eng.) DOI: [https://doi.org/10.1016/0016-0032\(67\)90590-X](https://doi.org/10.1016/0016-0032(67)90590-X)
9. Kumkov S.I. Processing of Experimental Data on the Ionic Conductivity of the Expanded Electrolyte by Interval Analysis Methods. *Rasplavy* = Melts. 2010; (3):79-89. (In Russ.)
10. Oskorbin N.M., Zhilin S.I., Sukhanov S.I. Interval Approach to Assessment of Geodata Consistency Andaccuracy. *Geodeziya i kartografiya* = Geodesy and Cartography. 2011; (11):12-16. Available at: <https://geocartography.ru/archive/2011-november> (accessed 20.10.2019). (In Russ.)

11. Sukhanov V.A. Empirical Dependence Research: A Non-Statistical Approach. In: Collection of Scientific Articles. Oskorbin N.A., Kuzmin P.I. (Eds.). Barnaul: Altai University Publ.; 2007. p. 115-127. (In Russ.)
12. Brereton R.G., Jansen J., Lopes J., et al. Chemometrics in Analytical Chemistry – Part I: History, Experimental Design and Data Analysis Tools. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. 2017; 409(25):5891-5899. (In Eng.) DOI: <http://www.doi.org/10.1007/s00216-017-0517-1>
13. Brereton R.G., Jansen J., Lopes J., et al. Chemometrics in Analytical Chemistry – Part II: Modeling, Validation, and Applications. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. 2018; 410(26):6691-6704. (In Eng.) DOI: <http://www.doi.org/10.1007/s00216-018-1283-4>
14. Kantor O.G., Spivak S.I., Talipova R.R. Parametric Identification of Mathematical Models of Chemical Kinetics. *Sistemy i sredstva informatiki* = Informatics Systems and Tools. 2017; 27(3):145-154. (In Russ.) DOI: <https://doi.org/10.14357/08696527170312>
15. Spivak S.I., Timoshenko V.I., Slinko M.G. Methods of Construction of Kinetic Models of Stationary Reactions. *Khimicheskaya promyshlennost segodnya* = Chemical Industry Today. 1979; (3):33-36. (In Russ.)
16. Yablonskiy G.S., Spivak S.I. Mathematical Models of Chemical Kinetics. Moscow: Znanie Publ.; 1977. 64 p.(In Russ.)
17. Pomerantsev A.L., Kutsenova A.V., Rodionova O.Ye. Kinetic Analysis of Non-Isothermal Solid-State Reactions: Multi-Stage Modeling Without Assumptions in the Reaction Mechanism. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2017; 19(5):3606-3615. (In Eng.) DOI: <https://doi.org/10.1039/c6cp07529k>
18. Spivak S.I., Ismagilova A.S., Kantor O.G. Areas of Uncertainty in the Mathematical Theory of Measurement Analysis. *Sistemy upravleniya i informatsionnyie tehnologii* = Control Systems and Information Technologies. 2014; 58(4):17-21. Available at: <http://www.sbook.ru/suit/CONTENTS/140400.pdf> (accessed 20.10.2019). (In Russ.)
19. Kantor I.G., Spivak S.I. Quality Estimation of the Chemical Kinetic Models. *Izvestiya Ufimskogo nauchnogo tsentra RAN* = Proceedings of the RAS Ufa Scientific Centre. 2017; (2):11-17. Available at: <http://sciencerb.ru/#> (accessed 20.10.2019). (In Russ.)

Received 06.05.2019; revised 06.06.2019; published online 31.12.2019

About the authors:

Olga G. Kantor, Associate Professor of the Chair of Corporate Finance and Accounting Technologies, Ufa State Petroleum Technological University (1 Kosmonavtov St., Ufa 450062, Russia), Ph.D. (Physics and Mathematics), ResearcherID: O-5136-2015, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-3186-3285>, ScopusID: 26767794600, o_kantor@mail.ru

Semen I. Spivak, Head of Chair of Mathematical Modeling, Bashkir State University (32 Zaki Validi St., Ufa 450076, Russia), D.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, ResearcherID: B-9334-2017, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0911-7446>, ScopusID: 16465463600, semen.spivak@mail.ru

Nikolay D. Morozkin, Rector of Bashkir State University (32 Zaki Validi St., Ufa 450076, Russia), D.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, ResearcherID: D-2570-2019, ScopusID: 6603118906, rector@bsunet.ru

Contribution of the authors:

O. G. Kantor – formulation of the basic concept, goals and objectives of the study, calculations, preparation of the text, drawing conclusions; S. I. Spivak – scientific guidance, analysis of the research results, revision of the text, correction of the conclusions; N. D. Morozkin – correction of the literary analysis, revision of the text, correction of the conclusions.

All authors have read and approved the final manuscript.