Моделирование и анализ данных
2023. Том 13. № 3. С. 66–78
DOI: https://doi.org/10.17759/mda.2023130305
ISSN: 2219-3758 (печатный)
ISSN: 2311-9454 (online)

Modelling and Data Analysis
2023. Vol. 13, no. 3, pp. 66–78
DOI: https://doi.org/10.17759/mda.2023130305
ISSN: 2219-3758 (print)
ISSN: 2311-9454 (online)

УДК 519.62

Идентификация интервальных констант скоростей химической реакции окисления нафталина

Морозов А.Ю.*
Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), г. Москва, Российская Федерация
ORCID: 0000-0003-0364-8665, e-mail: morozov@infway.ru

В работе выполняется применение ранее разработанного подхода параметрической идентификации динамических систем с интервальными параметрами к задаче нахождения констант скоростей химической реакции окисления нафталина. Данная реакция имеет практическое значение при производстве пластмасс и лакокрасочных материалов. Суть рассматриваемого подхода заключается в составлении целевой функции в пространстве границ интервальных параметров и характеризующей отклонение модельного решения от экспериментальных данных. Для целевой функции имеется возможность построить градиент и использовать для ее оптимизации методы первого порядка. В основе подхода лежит алгоритм адаптивной интерполяции, позволяющий получать для прямых интервальных задач решение в виде явных параметрических множеств. Найденные интервальные оценки констант скоростей согласуются с известными, но при этом имеют меньшую ширину, что демонстрирует преимущество применяемого подхода.

Ключевые слова: интервальная параметрическая идентификация, алгоритм адаптивной интерполяции, интервальная система обыкновенных дифференциальных уравнений, оптимизация, градиентные методы, химическая кинетика, константы скоростей, окисление нафталина.

Для цитаты:
Морозов А.Ю. Идентификация интервальных констант скоростей химической реакции окисления нафталина // // Моделирование и анализ данных. 2023. Том 13. № 3. С. 66–78. DOI: https://doi.org/10.17759/mda.2023130305

****Морозов Александр Юрьевич,*** кандидат физико-математических наук, научный сотрудник отдела 27 «Математического моделирования гетерогенных систем», Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), г. Москва, Российская Федерация, ORCID: https://orcid.org/0000-0003-0364-8665, e-mail: morozov@infway.ru

1. ВВЕДЕНИЕ

Важную роль при построении математических моделей процессов, которые происходят в окружающем нас физическом мире, играют обратные задачи. Их суть заключается в определении закономерностей по имеющимся экспериментальным данным. Задача параметрической идентификации возникает на этапе, когда математическая модель процесса уже известна, но неизвестными остаются ее параметры, которые необходимо подобрать так, чтобы модель наилучшим образом воспроизводила эксперимент.

Использование интервального аппарата [1–4] в данных задачах связано с предположением о том, что в параметрах модели могут содержаться интервальные неопределенности. В отличие от классических моделей, которые аппроксимируют интересующие величины, интервальные модели дают ограничения сверху и снизу на эти величины. В этом случае, как правило, имеется возможность подобрать интервальные параметры таким образом, чтобы модель полностью покрывала экспериментальные данные.

Существует ряд публикаций, посвященных подобным задачам. В сборнике [5] представлены статьи по системной идентификации и обработке данных в условиях ограниченной, в частности, интервальной неопределённости. В [6] и [7] рассматривается задача восстановления зависимостей по данным с интервальной неопределенностью.

Настоящая работа посвящена применению ранее разработанного подхода [8, 9] к решению задачи идентификации интервальных констант скоростей химической реакции окисления нафталина, приведенной в [10]. Данная реакция имеет практическое значение при производстве пластмасс и лакокрасочных материалов. В исходной работе [10] представлен алгоритм на основе метода Хука – Дживса для решения рассматриваемой задачи и приведены соответствующие результаты, с которыми в дальнейшем будет выполняться сравнение.

Отметим, что химическая кинетика [11, 12] играет важную роль в авиационно-космической отрасли, например при моделировании течений [13].

Идея используемого подхода заключается в составлении целевой функции в пространстве границ интервальных параметров и характеризующей степень отклонения модельного решения от экспериментальных данных. Минимизация целевой функции осуществляется с помощью методов оптимизации первого порядка [14, 15], так как имеется возможность построить градиент.

Процесс интервальной параметрической идентификации условно можно представить как поиск для каждой экспериментальной точки прообраза в пространстве параметров и заключение всех прообразов в интервальную оценку. При этом поиск осуществляется для всех точек одновременно в рамках текущей области неопределенности параметров и по найденным прообразам оценивается, как должны измениться границы области.

Решение прямых интервальных задач в ходе вычисления значений целевой функции (и ее градиента) выполняется с помощью ранее разработанного, теоретически обоснованного и апробированного на прикладных задачах алгоритма адаптивной интерполяции [16–18]. Алгоритм относится к группе методов, определяющих явную зависимость решения задачи от значений интервальных параметров. Данная группа методов включает в себя символьные методы [19, 20] и полиномиальные методы [21, 22]. Алгоритм принадлежит к полиномиальным методам.

В первом разделе приводится постановка задачи в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с неизвестными интервальными параметрами; во втором разделе обсуждаются и сравниваются полученные решения. В заключении формулируются основные результаты работы.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Выполним постановку задачи идентификации интервальных констант скоростей химической реакции окисления нафталина в соответствии с работой [10].

Реакция окисления нафталина представляется в следующем виде:

$$\mathrm{C_{10}H_8} + 4\,\mathrm{O_2} \rightarrow 2\,\mathrm{H_2O} + 2\,\mathrm{CO_2} + \tilde{\mathrm{N}}_8\mathrm{H_4O_3},$$

$$\mathrm{C_{10}H_8} + \mathrm{O_2} \rightarrow \mathrm{H_2O} + \mathrm{C_{10}H_6O_2},$$

$$\tilde{\mathrm{N}}_8\mathrm{H_4O_3} + 5\,\mathrm{O_2} \rightarrow \mathrm{H_2O} + 4\,\mathrm{CO_2} + \mathrm{C_4H_2O_3},$$

где $\mathrm{C_{10}H_8}$ – нафталин, $\mathrm{C_{10}H_6O_2}$ – нафтохинон, $\tilde{\mathrm{N}}_8\mathrm{H_4O_3}$ – фталевый ангидрид, $\mathrm{CO_2}$ – углекислый газ, $\mathrm{C_4H_2O_3}$ – малеиновый ангидрид, $\mathrm{O_2}$ – кислород, $\mathrm{H_2O}$ – вода.

Запишем математическую модель реакции в виде системы ОДУ:

$$\frac{dy_1}{dt} = -\beta_1 y_1 y_6^4 - \beta_2 y_1 y_6,$$

$$\frac{dy_2}{dt} = \beta_2 y_1 y_6,$$

$$\frac{dy_3}{dt} = \beta_1 y_1 y_6^4 - \beta_3 y_3 y_6^5,$$

$$\frac{dy_4}{dt} = 2\beta_1 y_1 y_6^4 + 4\beta_3 y_3 y_6^5,$$

$$\frac{dy_5}{dt} = \beta_3 y_3 y_6^5,$$

$$\frac{dy_6}{dt} = -4\beta_1 y_1 y_6^4 - \beta_2 y_1 y_6 - 5\beta_3 y_3 y_6^5, \quad (1)$$

$$\frac{dy_7}{dt} = 2\beta_1 y_1 y_6^4 + \beta_2 y_1 y_6 + \beta_3 y_3 y_6^5,$$

$$y_1(0) = y_6(0) = 1, \;\; y_2(0) = y_3(0) = y_4(0) = y_5(0) = y_7(0) = 0,$$

$$\beta_1 \in \left[\underline{\beta_1}, \overline{\beta_1}\right], \beta_2 \in \left[\underline{\beta_2}, \overline{\beta_2}\right], \beta_3 \in \left[\underline{\beta_3}, \overline{\beta_3}\right],$$

$$t \in [0, 2],$$

где $y_1, y_2, ..., y_7$ – концентрации реагентов в мольных долях: y_1 – $C_{10}H_8$, y_2 – $C_{10}H_6O_2$, y_3 – $Ñ_8H_4O_3$, y_4 – CO_2, y_5 – $C_4H_2O_3$, y_6 – O_2 и y_7 – H_2O; $\underline{\beta_1} \le \overline{\beta_1}, \underline{\beta_2} \le \overline{\beta_2}, \underline{\beta_3} \le \overline{\beta_3}$ – неизвестные нижние и верхние границы интервальных констант скоростей реакций.

Решение системы в каждый момент времени t_k является параметрическим множеством:

$$Y^k\left(\underline{\beta_1}, \overline{\beta_1}, \underline{\beta_2}, \overline{\beta_2}, \underline{\beta_3}, \overline{\beta_3}\right) = \left\{ \mathbf{y}^k\left(z_1, z_2, z_3\right) \middle| \begin{array}{l} z_1 \in \left[\underline{\beta_1}, \overline{\beta_1}\right], \\ z_2 \in \left[\underline{\beta_2}, \overline{\beta_2}\right], \\ z_3 \in \left[\underline{\beta_3}, \overline{\beta_3}\right]. \end{array} \right\}, \quad (2)$$

где $\mathbf{y}^k\left(z_1, z_2, z_3\right) = \left(y_1\left(t_k\right), y_2\left(t_k\right), ..., y_7\left(t_k\right)\right)^T$ – решение системы при значениях параметров $\beta_1 = z_1$, $\beta_2 = z_2$ и $\beta_3 = z_3$.

Ключевым моментом в применяемом подходе является то, что алгоритм адаптивной интерполяции позволяет в явном виде получать множества : для каждого момента времени t_k выполняется построение вектор-функции

$$\mathbf{P}^k\left(z_1, z_2, z_3\right) = \left(P_1^k\left(z_1, z_2, z_3\right), P_2^k\left(z_1, z_2, z_3\right), ..., P_7^k\left(z_1, z_2, z_3\right)\right)^T,$$

интерполирующей $\mathbf{y}^k\left(z_1, z_2, z_3\right)$ с контролируемой точностью.

В табл. 1 представлены значения концентраций в определенные моменты времени, принятые за экспериментальные данные [10].

Таблица 1

Экспериментальные значения концентраций

t	$t_1 = 0.5$ с	$t_2 = 1.0$ с	$t_3 = 1.5$ с	$t_4 = 2.0$ с
$\hat{y}_1$	0.8422	0.8015	0.7751	0.7549
$\hat{y}_2$	0.0361	0.0585	0.0765	0.0918
$\hat{y}_3$	0.1213	0.1395	0.1478	0.1526
$\hat{y}_4$	0.2452	0.2823	0.2992	0.3090
$\hat{y}_5$	0.0004	0.0005	0.0006	0.0006
$\hat{y}_6$	0.4748	0.3785	0.3268	0.2920
$\hat{y}_7$	0.2799	0.3391	0.3739	0.3989

Задача параметрической идентификации заключается в нахождении таких границ интервалов $\underline{\beta_1}, \overline{\beta_1}, \underline{\beta_2}, \overline{\beta_2}, \underline{\beta_3}, \overline{\beta_3}$, чтобы $\hat{\mathbf{y}}^k \in \mathrm{Y}^k\left(\underline{\beta_1}, \overline{\beta_1}, \underline{\beta_2}, \overline{\beta_2}, \underline{\beta_3}, \overline{\beta_3}\right)$, $k = 1, 2, 3, 4$ или чтобы сумма квадратов расстояний $\rho\left(\mathrm{Y}^k, \hat{\mathbf{y}}^k\right) = \min\limits_{\mathbf{y}^k \in \mathrm{Y}^k} \left\| \mathbf{y}^k - \hat{\mathbf{y}}^k \right\|$ была минимальной, где $\hat{\mathbf{y}}^k = \left(\hat{y}_1^k, \hat{y}_2^k, ..., \hat{y}_7^k\right)^{\mathrm{T}}$. В качестве $\|\cdot\|$ удобно использовать взвешенную евклидову норму, в этом случае целевая функция примет следующий итоговый вид:

$$J\left(\underline{\beta_1}, \overline{\beta_1}, \underline{\beta_2}, \overline{\beta_2}, \underline{\beta_3}, \overline{\beta_3}\right) = \sum_{k=1}^{4} \min_{\substack{z_j \in \left[\underline{\beta_j}, \overline{\beta_j}\right] \\ j = \overline{1,2,3}}} \sum_{i=1}^{7} w_i^2 \left[P_i^k\left(z_1, z_2, z_3\right) - \hat{y}_i^k\right]^2, \qquad (3)$$

где $w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = w_6 = w_7 = 1, w_5 = 10^3$ – весовые коэффициенты, учитывающие разный порядок значений концентраций.

Запишем выражения для компонент градиента целевой функции :

$$J'_{\underline{\beta_j}} = 2\sum_{k=1}^{4} \max\left(0, \sum_{i=1}^{7} w_i^2 \left[P_i^k\left(\tilde{z}_1^k, \tilde{z}_2^k, \tilde{z}_3^k\right) - \hat{y}_i^k\right] \frac{dP_i^k\left(\tilde{z}_1^k, \tilde{z}_2^k, \tilde{z}_3^k\right)}{dz_j}\right), j = 1, 2, 3,$$

$$J'_{\overline{\beta_j}} = 2\sum_{k=1}^{4} \min\left(0, \sum_{i=1}^{7} w_i^2 \left[P_i^k\left(\tilde{z}_1^k, \tilde{z}_2^k, \tilde{z}_3^k\right) - \hat{y}_i^k\right] \frac{dP_i^k\left(\tilde{z}_1^k, \tilde{z}_2^k, \tilde{z}_3^k\right)}{dz_j}\right), j = 1, 2, 3,$$

где

$$\left(\tilde{z}_1^k, \tilde{z}_2^k, \tilde{z}_3^k\right) = \arg\min_{\substack{z_j \in \left[\underline{\beta_j}, \overline{\beta_j}\right] \\ j = \overline{1,2,3}}} \sum_{i=1}^{7} w_i^2 \left[P_i^k\left(z_1, z_2, z_3\right) - \hat{y}_i^k\right]^2.$$

Приведем дополнительные правила сужения интервалов:

$$\underline{\beta_j} = \min_k \tilde{z}_j^k, \text{ если } J'_{\underline{\beta_j}} = 0 \text{ и } \overline{\beta_j} = \max_k \tilde{z}_j^k, \text{ если } J'_{\overline{\beta_j}} = 0, \; j = 1, 2, 3. \qquad (4)$$

Таким образом, решение исходной задачи сводится к минимизации целевой функции с помощью градиентных методов. Правила сужения применяются после каждого шага оптимизации.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В данном разделе представлено полученное решение поставленной задачи. В качестве критерия остановки градиентного спуска применялось ограничение на значение минимизируемой функции $J < 10^{-7}$. Для решения прямых задач использовалась модификация алгоритма адаптивной интерполяции на основе разреженных сеток [23–25] с нелинейным базисом четвертой степени [18]. Значение параметра, отвечающего за точность: $\varepsilon = 10^{-6}$.

Начальное приближение в методе градиентного спуска: $\beta_1^{(0)} \in [0.70, 0.80]$, $\beta_2^{(0)} \in [0.09, 0.10]$, $\beta_3^{(0)} \in [0.15, 0.16]$. На 34-й итерации метод завершил работу. Получены следующие значения интервальных констант скоростей реакции:

$$\beta_1^{(34)} \in [1.3893, 1.3918], \beta_2^{(34)} \in [0.1298, 0.1397], \beta_3^{(34)} \in [0.1038, 0.1171]. \qquad (5)$$

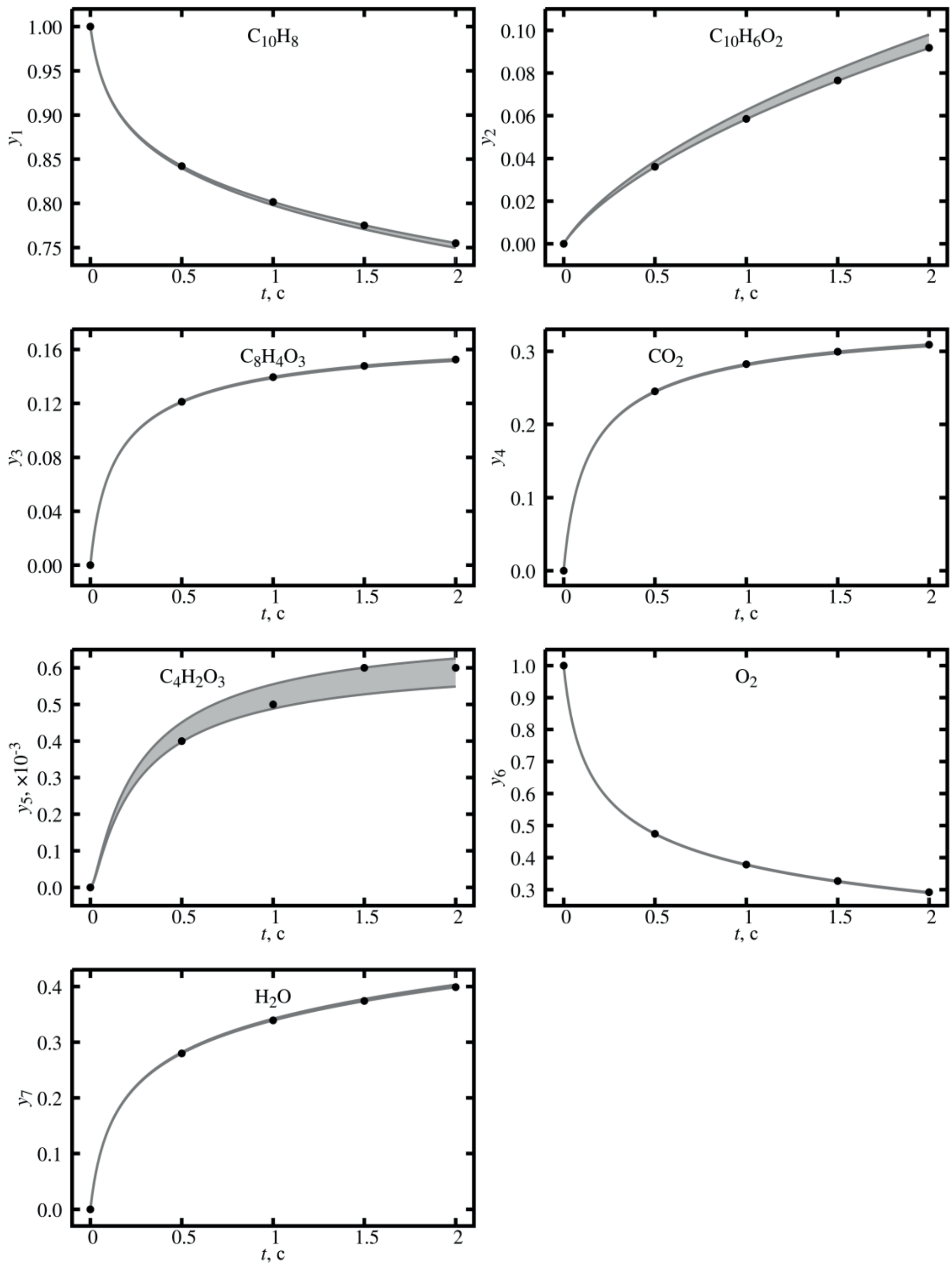

Рис. 1. Сравнение интервальных оценок концентраций, полученных при найденных значениях интервальных скоростей реакции (серый цвет), с экспериментальными данными (черные точки)

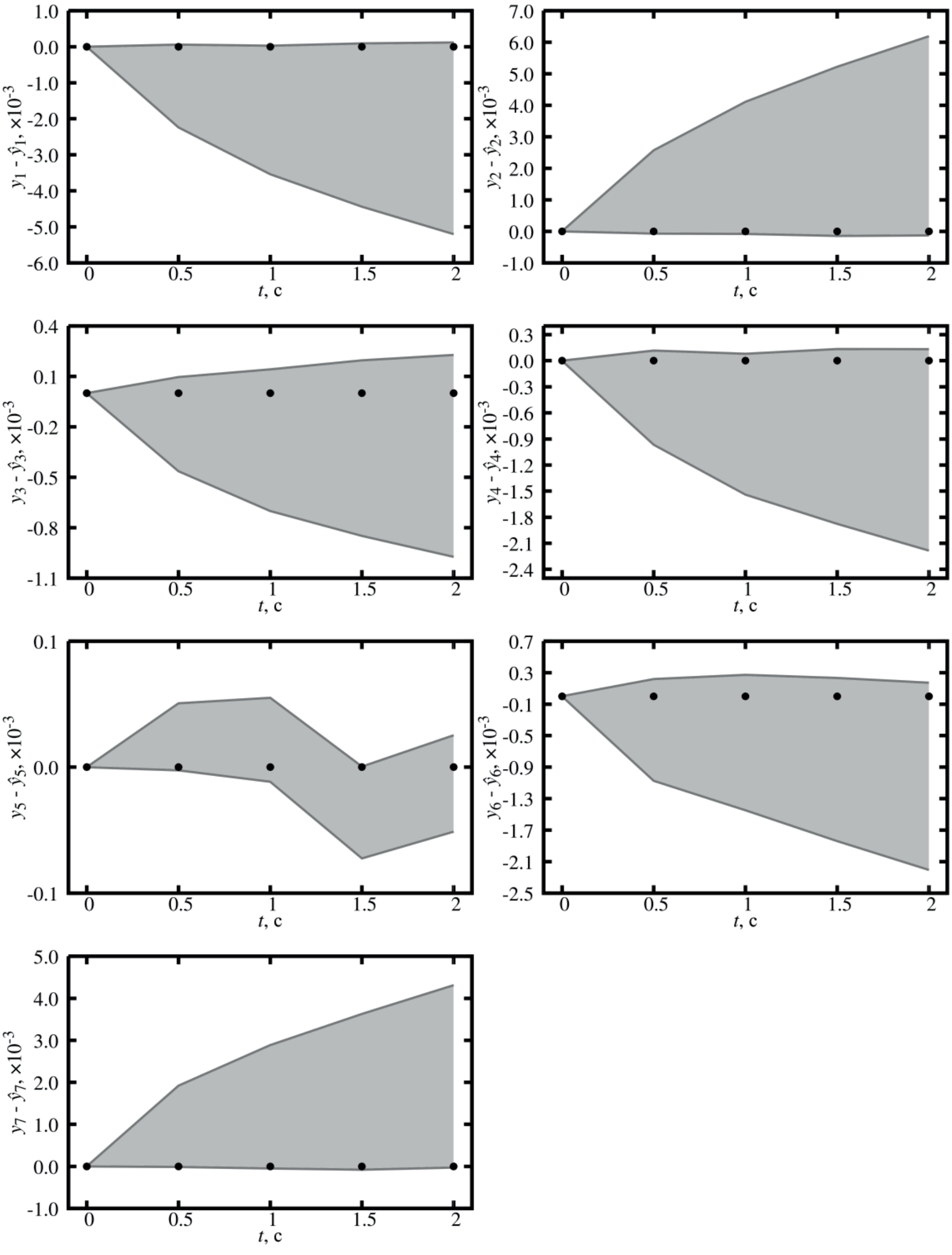

Рис. 2. Зависимости от времени интервальных оценок концентраций (серый цвет) относительно экспериментальных данных (черные точки)

На рис. 1 серым цветом показаны зависимости от времени интервальных оценок концентраций при найденных значениях констант скоростей . Черными точками показаны экспериментальные данные в соответствии с табл. 1. Оценки концентраций имеют небольшую ширину, и, чтобы показать, что все экспериментальные точки содержатся в полученных оценках, дополнительно приведем графики зависимостей относительно экспериментальных данных (рис. 2).

Здесь все экспериментальные точки выстроились в одну линию ($y = 0$) и все они содержатся в соответствующих интервальных коридорах. Таким образом, поставленная задача успешно решена.

Отметим, что построение интервальных оценок концентраций выполнялось с помощью проекции полученных параметрических множеств в процессе работы алгоритма адаптивной интерполяции на координатные прямые:

$$y_i^k \in \left[\min_{\substack{z_j \in \left[\underline{\beta_j}, \overline{\beta_j}\right] \\ j=1,2,3}} P_i^k\left(z_1, z_2, z_3\right), \max_{\substack{z_j \in \left[\underline{\beta_j}, \overline{\beta_j}\right] \\ j=1,2,3}} P_i^k\left(z_1, z_2, z_3\right) \right], i = 1, 2, ..., 7 .$$

В исходной работе [10] приведены следующие интервальные значения констант скоростей реакции, полученные с помощью оригинального алгоритма на основе метода Хука – Дживса:

$$\begin{aligned} \beta_1 &\in [1.1170, 1.5160], \\ \beta_2 &\in [0.1113, 0.1547], \\ \beta_3 &\in [0.0967, 0.1199]. \end{aligned} \tag{6}$$

По сравнению с интервальные оценки имеют меньшую ширину и полностью содержатся в , что демонстрирует преимущество применяемого подхода. Однако заметим, что вычислительная сложность используемого в подходе алгоритма адаптивной интерполяции больше, чем аналогичного метода [26], применяемого в [10]. Тем не менее при современном уровне развития вычислительных технологий это является некритичным.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе успешно решена задача идентификации интервальных скоростей реакции окисления нафталина с помощью ранее разработанного подхода на основе алгоритма адаптивной интерполяции. Представлена целевая функция в пространстве границ интервальных параметров и характеризующая отклонение модельного решения от экспериментальных данных. Выполнена минимизация целевой функции с помощью метода градиентного спуска. Найденные интервальные оценки констант скоростей согласуются с известными, но при этом имеют меньшую ширину, что демонстрирует преимущество применяемого подхода.

Литература

1. *Moore R.E., Kearfott R.B., Cloud M.J.* Introduction to Interval Analysis, SIAM, 2009.
2. *Добронец Б.С.* Интервальная математика. Красноярск: Краснояр. гос. ун-т, 2007.
3. *Шарый С.П.* Конечномерный интервальный анализ. Новосибирск: XYZ, 2017.
4. *Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л.* Моделирование динамических систем с интервальными параметрами. Обзор методов и программных средств // Моделирование и анализ данных. 2019. № 4. С. 5–31. DOI: 10.17759/mda.2019090401
5. *Дилигенская А.Н., Самокиш А.В.* Параметрическая идентификация в обратных задачах теплопроводности в условиях интервальной неопределенности на основе нейронных сетей // ВЕСТН. САМАР. ГОС. ТЕХН. УН-ТА. СЕР. ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ. 2020. Т. 28. № 4. С. 6–18.
6. *Петрикевич Я.И.* Структурно-параметрическая идентификация динамических объектов по интервальным исходным данным : диссертация ... кандидата технических наук : 05.13.18. – Кемерово, 2006.- 225 с.: ил. РГБ ОД, 61 06-5/2799
7. *Milanese M., Norton J., Piet-Lahanier H., Walter E.,* eds. Bounding Approaches to System Identification. – New York: Plenum Press, 1996.
8. *Шарый С.П.* Восстановление функциональных зависимостей по данным с интервальной неопределенностью // Информатика и системы управления. 2022. № 3(73). с. 130–143. DOI: 10.22250/18142400_2022_73_3_130
9. *Шарый С.П.* Задача восстановления зависимостей по данным с интервальной неопределенностью // Заводская лаборатория. диагностика материалов. 2020. Т. 86. № 1. С. 62–74. DOI: 10.26896/1028-6861-2020-86-1-62-74
10. *Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л.* Интервальный подход к решению задач параметрической идентификации динамических систем // Дифференциальные уравнения. 2022. Т. 58. № 7. С. 962–976. DOI: 10.31857/S0374064122070081.
11. *Морозов А.Ю.* Параллельный алгоритм параметрической идентификации динамических систем с интервальными параметрами // Программная инженерия. 2022. Т. 13. № 10. С. 497–507. DOI: 10.17587/prin.13.497-507.
12. *Мифтахов Э.Н., Зигангирова Д.Р., Мустафина С.А., Морозкин Н.Д.* Алгоритм решения обратной задачи химической кинетики в условиях неопределенности исходных данных // Вестник технологического университета. 2020. Т. 23. № 11. С. 101–105.
13. *Яблонский Г.С., Спивак С.И.* Математические модели химической кинетики. М.: Знание, 1977
14. *Быков В.И., Добронец Б.С.* К интервальному анализу уравнений химической кинетики. Математические проблемы химической кинетики. Новосибирск: Наука, 1989. С. 226–232.
15. *Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С.* Численное моделирование сжигания топлива в стационарной детонационной волне в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе [Электронный ресурс] // Труды МАИ. 2019. № 109. URL: http://trudymai.ru/published.php?ID=111353. DOI: 10.34759/trd-2019-109-6
16. *Гилл Ф., Мюррей У., Райт М.* Практическая оптимизация. М.: Мир, 1985.
17. *Пантелеев А.В., Летова Т.А.* Методы оптимизации в примерах и задачах: Учеб. пособие. 2-е изд. М.: Высш. шк., 2005. 544 с.
18. *Морозов А.Ю.* Алгоритм адаптивной интерполяции для решения задач небесной механики с интервальными неопределенностями [Электронный ресурс] // Труды МАИ. 2022. № 123. URL: https://trudymai.ru/published.php?ID=165501. DOI: 10.34759/trd-2022-123-24
19. *Морозов А.Ю.* Интерполяционный подход в задачах моделирования динамических систем с эллипсоидными оценками параметров [Электронный ресурс] // Труды МАИ. 2022. № 124. URL: https://trudymai.ru/published.php?ID=167168. DOI: 10.34759/trd-2022-124-24

20. *Морозов А.Ю.* Параллельный алгоритм адаптивной интерполяции на основе разреженных сеток для моделирования динамических систем с интервальными параметрами // Программная инженерия. 2021. Т. 12. № 8. С. 395–403. DOI: 10.17587/prin.12.395-403.
21. *Berz M., Makino K.* Verified integration of ODEs and flows with differential algebraic methods on Taylor models // Reliable Computing. Vol. 4. № 4. 1998. P. 361–369.
22. *Рогалев А.Н.* Гарантированные методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений на основе преобразования символьных формул // Вычислительные технологии. 2003. Т. 8. № 5. С. 102–116.
23. *Fu C., Ren X., Yang Y.-F., Lu K., Qin W*. Steady-state response analysis of cracked rotors with uncertain but bounded parameters using a polynomial surrogate method. Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 2019, 68, 240–256, doi:10.1016/j.cnsns.2018.08.004.
24. *Fu C., Xu Y., Yang Y., Lu K., Gu F., Ball A.* Response analysis of an accelerating unbalanced rotating system with both random and interval variables. J. Sound Vib. 2020, 466, 115047, doi:10.1016/j.jsv.2019.115047.
25. *Смоляк С.А.* Квадратурные и интерполяционные формулы на тензорных произведениях некоторых классов функций // Докл. АН СССР, 148:5 (1963), 1042–1045.
26. *Bungatrz H-J., Griebel M.* Sparse grids // Acta Numerica. 2004. Vol. 13, no. 1. pp. 147–269.
27. *Gerstner T., Griebel M.* Sparse grids // Encyclopedia of Quantitative Finance / Ed. R. Cont. New York, 2010.
28. *Вайтиев В.А., Мустафина С.А.* Построение двусторонних оценок решения прямой задачи химической кинетики // Журнал Средневолжского математического общества. 2012. Т. 14. № 4. С. 18–25.

Identification of the Interval Constants of the Rates of the Chemical Reaction of Naphthalene Oxidation

Alexander Yu. Morozov*
Federal Research Center Computer Science and Control
of the Russian Academy of Sciences (FRC CSC RAS), Moscow, Russia
ORCID: https://orcid.org/0000-0003-0364-8665
e-mail: morozov@infway.ru

In this work, the previously developed approach of parametric identification of dynamic systems with interval parameters is applied to the problem of finding the rate constants of the chemical reaction of naphthalene oxidation. This reaction is of practical importance in the production of plastics and paints and varnishes. The essence of the considered approach lies in the compilation of the objective function in the space of the boundaries of the interval parameters and characterizing the deviation of the model solution from the experimental data. For the objective function, it is possible to construct a gradient and use first-order methods to optimize it. The approach is based on the adaptive interpolation algorithm, which makes it possible to obtain solutions for direct interval problems in the form of explicit parametric sets. The found interval estimates of the rate constants are consistent with the known ones, but at the same time they have a smaller width, which demonstrates the advantage of the approach used.

Keywords: interval parametric identification, adaptive interpolation algorithm, interval system of ordinary differential equations, optimization, gradient methods, chemical kinetics, rate constants, naphthalene oxidation.

For citation:
Morozov A.Yu. Identification of the Interval Constants of the Rates of the Chemical Reaction of Naphthalene Oxidation. *Modelirovanie i analiz dannykh = Modelling and Data Analysis*, 2023. Vol. 13, no. 3, pp. 66–78. DOI: 10.17759/mda.2023130305 (In Russ., abstr. in Engl.).

References

1. Moore R.E., Kearfott R.B., Cloud M.J. Introduction to Interval Analysis, SIAM, 2009.
2. Dobronets B.S. Interval’naya matematika [Interval mathematics]. Krasnoyarsk: Publ. Krasnoyar. state un-t, 2007. (In Russ.)
3. Sharyi S.P. Konechnomernyi interval’nyi analiz [Finite-dimensional interval analysis]. Novosibirsk: Publ. XYZ, 2017. (In Russ.)

***Alexander Yu. Morozov,** PhD (Physical and Mathematical), Researcher, Department 27 “Mathematical Modeling of Heterogeneous Systems”, Federal Research Center Computer Science and Control of the Russian Academy of Sciences (FRC CSC RAS), Moscow, Russia, ORCID: https://orcid.org/0000-0003-0364-8665, e-mail: morozov@infway.ru

4. Morozov A.Yu., Reviznikov D.L. Modelirovanie dinamicheskikh sistem s interval'nymi parametrami. Obzor metodov i programmnykh sredstv [Modeling of dynamic systems with interval parameters. Overview of Methods and Software]. Modelirovanie i analiz dannykh = Modeling and data analysis, 2019, no. 4, pp. 5–31. DOI: 10.17759/mda.2019090401 (In Russ.)
5. Diligenskaya A.N., Samokish A.V. Parametricheskaya identifikatsiya v obratnykh zadachakh teploprovodnosti v usloviyakh interval'noi neopredelennosti na osnove neironnykh setei [Parametric identification in inverse problems of heat conduction under conditions of interval uncertainty based on neural networks]. Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta = Bulletin of the Samara State Technical University, 2020, V. 28, no. 4 (68), pp. 6–18. (In Russ.)
6. Petrikevich Ya. I. Strukturno-parametricheskaya identifikatsiya dinamicheskikh ob"ektov po interval'nym iskhodnym dannym: dis. kand. tekhn. nauk: 05.13.18 [Structural-parametric identification of dynamic objects by interval initial data: dis. … cand. tech. Sciences: 05.13.18.], Kemerovo: Kemer. state un-t, 2006. 225 p. (In Russ.)
7. Milanese M., Norton J., Piet-Lahanier H., Walter E., eds. Bounding Approaches to System Identification. – New York: Plenum Press, 1996.
8. Sharyi S.P. Vosstanovlenie funktsional'nykh zavisimostei po dannym s interval'noi neopredelennost'yu [Recovery of functional dependencies from data with interval uncertainty]. Informatika i sistemy upravleniya = Informatics and control systems, 2022, no. 3(73). pp. 130–143. DOI: 10.22250/18142400_2022_73_3_130 (In Russ.)
9. Sharyi S.P. Zadacha vosstanovleniya zavisimostei po dannym s interval'noi neopredelennost'yu [The problem of recovering dependencies from data with interval uncertainty]. Zavodskaya laboratoriya. diagnostika materialov = Zavodskaya lab. material diagnostics, 2020, V. 86, no. 1. pp. 62–74. DOI: 10.26896/1028-6861-2020-86-1-62-74 (In Russ.)
10. Morozov A. Yu., Reviznikov D.L. Interval approach to solving parametric identification problems for dynamical systems. Differential Equations, 2022, V. 58, no. 7, pp. 952–965. DOI: 10.1134/S0012266122070084
11. Morozov A.Yu. Parallel'nyi algoritm parametricheskoi identifikatsii dinamicheskikh sistem s interval'nymi parametrami [Parallel Algorithm for Parametric Identification of Dynamic Systems with Interval Parameters]. Programmnaya inzheneriya=Software Engineering, 2022, V. 13, no. 10, pp. 497–507. DOI: 10.17587/prin.13.497-507 (In Russ.)
12. Miftakhov E.N., Zigangirova D.R., Mustafina S.A., Morozkin N.D. Algoritm resheniya obratnoi zadachi khimicheskoi kinetiki v usloviyakh neopredelennosti iskhodnykh dannykh [Algorithm for solving the inverse problem of chemical kinetics under conditions of initial data uncertainty]. Vestnik tekhnologicheskogo universiteta = Vestnik tekhnologicheskogo universiteta, 2020, V. 23, no. 11, pp. 101–105. (In Russ.)
13. Yablonskii G.S., Spivak S.I. Matematicheskie modeli khimicheskoi kinetiki [Mathematical models of chemical kinetics], Moscow: Publ. Knowledge, 1977. (In Russ.)
14. Bykov V.I., Dobronets B.S. K interval'nomu analizu uravnenii khimicheskoi kinetiki [To the interval analysis of the equations of chemical kinetics]. Matematicheskie problemy khimicheskoi kinetiki = Mathematical problems of chemical kinetics. Novosibirsk: Nauka, 1989, pp. 226–232. (In Russ.)
15. Gidaspov V.Yu., Kononov D.S. Chislennoe modelirovanie szhiganiya topliva v statsionarnoi detonatsionnoi volne v kanale peremennogo secheniya so sverkhzvukovym potokom na vkhode i vykhode [Elektronnyi resurs] [Numerical modeling of fuel combustion in a stationary detonation wave in a channel of variable cross section with a supersonic flow at the inlet and outlet]. Trudy MAI = Proceedings of the MAI, 2019, no. 109, URL: http://trudymai.ru/published.php?ID=111353. DOI: 10.34759/trd-2019-109-6 (In Russ.)

16. Gill P.E., Murray W., Wright M.H. Practical Optimization, ACADEMIC PRESS, INC. San Diego, 1997.
17. Panteleev A.V., Letova T.A. Metody optimizatsii v primerakh i zadachakh: Ucheb. posobie. 2-e izd [Optimization methods in examples and tasks: Proc. allowance. 2nd ed.] Moscow: Publ. Higher. school, 2005, 544 p. (In Russ.)
18. Morozov A.Yu. Algoritm adaptivnoi interpolyatsii dlya resheniya zadach nebesnoi mekhaniki s interval'nymi neopredelennostyami [Elektronnyi resurs] [Adaptive interpolation algorithm for solving problems of celestial mechanics with interval uncertainties]. Trudy MAI = Proceedings of MAI, 2022, no. 123. URL: https://trudymai.ru/published.php?ID=165501. DOI: 10.34759/trd-2022-123-24 (In Russ.)
19. Morozov A.Yu. Interpolyatsionnyi podkhod v zadachakh modelirovaniya dinamicheskikh sistem s ellipsoidnymi otsenkami parametrov [Elektronnyi resurs] [Interpolation approach in the problems of modeling dynamic systems with ellipsoid parameter estimates]. Trudy MAI = Proceedings of MAI, 2022, no. 124. URL: https://trudymai.ru/published.php?ID=167168. DOI: 10.34759/trd-2022-124-24 (In Russ.)
20. Morozov A.Yu. Parallel'nyi algoritm adaptivnoi interpolyatsii na osnove razrezhennykh setok dlya modelirovaniya dinamicheskikh sistem s interval'nymi parametrami [Parallel adaptive interpolation algorithm based on sparse grids for modeling dynamic systems with interval parameters]. Programmnaya inzheneriya = Software Engineering, 2021, V. 12, no. 8, pp. 395–403. DOI: 10.17587/prin.12.395-403. (In Russ.)
21. Berz M., Makino K. Verified integration of ODEs and flows with differential algebraic methods on Taylor models // Reliable Computing. Vol. 4. № 4. 1998. P. 361–369.
22. Rogalev A.N. Garantirovannye metody resheniya sistem obyknovennykh differentsial'nykh uravnenii na osnove preobrazovaniya simvol'nykh formul [Guaranteed methods for solving systems of ordinary differential equations based on the transformation of symbolic formulas]. Vychislitel'nye tekhnologii = Computational technologies, 2003, V. 8, no. 5. pp. 102–116. (In Russ.)
23. Fu C., Ren X., Yang Y.-F., Lu K., Qin W. Steady-state response analysis of cracked rotors with uncertain but bounded parameters using a polynomial surrogate method. Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 2019, 68, 240–256, doi:10.1016/j.cnsns.2018.08.004.
24. Fu C., Xu Y., Yang Y., Lu K., Gu F., Ball A. Response analysis of an accelerating unbalanced rotating system with both random and interval variables. J. Sound Vib. 2020, 466, 115047, doi:10.1016/j.jsv.2019.115047.
25. Smolyak S.A. Kvadraturnye i interpolyatsionnye formuly na tenzornykh proizvedeniyakh nekotorykh klassov funktsii [Quadrature and interpolation formulas on tensor products of some classes of functions]. Dokl. AN SSSR = Reports of the Academy of Sciences of the USSR, 1963, 148:5, pp. 1042–1045. (In Russ.)
26. Bungatrz H-J., Griebel M. Sparse grids // Acta Numerica. 2004. Vol. 13, no. 1. pp. 147–269.
27. Gerstner T., Griebel M. Sparse grids // Encyclopedia of Quantitative Finance / Ed. R. Cont. New York, 2010.
28. Vaitiev V.A., Mustafina S.A. Postroenie dvustoronnikh otsenok resheniya pryamoi zadachi khimicheskoi kinetiki [Construction of two-sided estimates for the solution of the direct problem of chemical kinetics]. Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva = Journal of the Middle Volga Mathematical Society, 2012, V. 14, no. 4, pp. 18–25. (In Russ.)

Получена 14.07.2023
Принята в печать 16.08.2023

Received 14.07.2023
Accepted 16.08.2023