

## Применение генетических алгоритмов для решения обратных задач химической кинетики

Степашина Е.В., *старш. преп.*

Стерлитамакский филиал

Башкирского государственного университета, г. Стерлитамак

Одной из важнейших задач химической кинетики является установление механизмов протекания сложных химических реакций. Обратная кинетическая задача – это задача восстановления вида кинетической модели и ее параметров на основе экспериментальных данных.

Для решения задачи идентификации математической модели схемы реакции необходимо рассчитать значения кинетических констант  $k_{0j}$  и энергий активации  $E_j$  ( $j=1, \dots, m$ ,  $m$  – количество стадий схемы реакции), исходя из которых определяются константы скоростей стадий согласно уравнению Аррениуса. Процедура решения обратной задачи состоит в поиске констант скоростей стадий, минимизирующих функционал отклонения между расчетными и экспериментальными значениями концентраций веществ, то есть в решении экстремальной задачи [1].

Существенными недостатками большинства численных методов поиска экстремума функций являются трудности в достижении сходимости процесса, которая напрямую зависит от выбора начального приближения.

В настоящее время широко применяются методы компьютерной симуляции и разработанные на их основе генетические алгоритмы, которые позволяют эффективно находить глобальный оптимум за приемлемое время. Одним из достоинств генетических алгоритмов является то, что для них не важно начальное приближение. Таким образом, для нахождения минимума функционала отклонения между расчетными и экспериментальными данными можно построить генетический алгоритм. Тогда найденные с его помощью константы скоростей стадий химической реакции не будут зависеть от выбранного начального приближения.

1. С.И. Спивак, И.М. Губайдуллин, Е.В. Вайман. *Обратные задачи химической кинетики* (Уфа: РИО БашГУ: 2003).