

DOI: 10.15643/mmcct-2023-13

Информативность эксперимента при решении обратных задач химической кинетики

А. С. Исмагилова

Уфимский университет науки и технологий

Россия, Республика Башкортостан, 450076 г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.

Email: ismagilovaas@yandex.ru

В докладе обсуждаются подходы к оценке значимости экспериментальной информации, возможностей ее теоретической интерпретации, построение экспериментальных стратегий, направленных на решение задачи идентификации сложных химических процессов.

Ключевые слова: обратные задачи, механизм сложной химической реакции, кинетические параметры модели, информативность.

При использовании методов математического моделирования в химии и нефтехимии возникают сложные задачи, связанные с решением обратных задач кинетики. Решение обратных задач построения кинетических моделей играет решающую роль как в задачах идентификации схем сложных химических реакций, так и в задачах расчета оптимальных режимов протекания каталитических процессов. Основная проблема – анализ информативности кинетических измерений с точки зрения надежности решения обратных задач химической кинетики и оценки значимости имеющихся экспериментальных данных. Общность строящейся методологии позволяет использовать получаемые результаты в каталитических процессах самого разного типа.

Моделирование химических процессов подразумевает применение соответствующих математических методов, позволяющих решать задачи в условиях ограниченности и неточности экспериментальной информации.

Неидентифицируемость и ненаблюдаемость являются следствием инвариантности модели, измеряемого отклика, по отношению к некоторым преобразователям ее параметров. Это является основой группового анализа исследования вопросов,

связанных с неоднозначностью как констант скоростей, так и концентраций промежуточных веществ. В случае больших размерностей исследуемых систем целесообразно применить метод декомпозиции.

Подход к задаче идентификации механизмов сложных химических реакций может опираться на теорию групповых преобразований, основы которой были заложены еще С. Ли [1] и впоследствии развиты в работах Л. В. Овсянникова [2] и Ю. Н. Павловского [3]. Алгоритм группового преобразования создает адекватную методологическую основу для решения задач приведения систем обыкновенных дифференциальных уравнений с параметрами к минимально-параметрическому виду. В частности, для анализа уровня однозначности при решении обратной задачи химической кинетики В. Р. Кудашевым и С. И. Спиваком построен аппарат групповых преобразований [4]. Предложенная методика позволяет анализировать ситуацию ненаблюдаемости и неидентифицируемости в нестационарных кинетических моделях. Однако возникают трудности технического характера, нарастающие при увеличении размерности исследуемых систем. Их можно преодолеть, используя метод декомпозиции, развиваемый в работах автора.

Декомпозиция механизмов сложных химических реакций позволяет перейти к задачам существенно меньшей размерности. В работах [5, 6] доказано, что механизм сложной химической реакции можно разделить на системы подмеханизмов, число которых равно числу базисных маршрутов. При декомпозиции каждая из составляющих, отвечает за самостоятельное физико-химическое содержание.

Результатом данного исследования является применение метода декомпозиции к групповому анализу в задачах идентификации схем сложных химических реакций при решении обратных задач химической кинетики.

Литература

1. S. Lie. *Vorlesungen über kontinuierliche Gruppen*. – Leipzig: Teubner, **1893**. – 805 с.
2. Овсянников Л.В. *Групповой анализ дифференциальных уравнений*. – М.: Наука, **1978**. – 400 с.
3. Павловский Ю.Н. // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. **1974**. Т. 14. №4. С. 862.
4. Кудашев В. Р., Спивак С. И. // *Теоретические основы химической технологии*. **1992**. Т.26. №6. С. 872.
5. Спивак С. И., Исмагилова А. С. // *Доклады Академии наук*. **2014**. Т. 455. №5. С. 547.
6. Спивак С. И., Исмагилова А. С. // *Химическая промышленность сегодня*. **2014**. № 10. С.5.