

## УСОВЕРШЕНСТВОВАННАЯ МЕТОДИКА РАСЧЕТА ХИМИЧЕСКИХ РАВНОВЕСИЙ НА ОСНОВЕ ГЕНЕТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ

Гирш Д.С., Кудашин И.И. (ДГТУ, г. Ростов-на-Дону, Россия)

При рассмотрении реагирующих газовых сред как динамических систем практический интересны равновесные или стационарные состояния. Их локализация и исследование на предмет устойчивости важны при анализе фазового пространства систем физико-химической природы. Высокая размерность распределенность затрудняют их анализ традиционными численными методами [1-4]. Перспективы исследования таких систем связывают с генетическими алгоритмами и нейросетями [5-8].

Авторами разработан оригинальный генетический алгоритм решения оптимизационной задачи в постановке, возникающей при отыскании равновесного и/или стационарного состояния физико-химической системы с реакциями и фазовыми переходами. Решение с его помощью простейшей задачи обозначенного класса осуществляется следующим образом. На первом этапе (для некоторой фиксированной массы реагирующей однофазной среды при заданных температуре и давлении) подлежащее минимизации при материальных ограничениях

$$\alpha \cdot m - m_a = 0 \quad (1)$$

выражение суммарного термодинамического потенциала системы Гиббса – Гельмгольца записать в виде [1-4]

$$G = \sum_j \frac{m_j}{\mu_j} \cdot \left[ g_j + RT \left( \ln(M \cdot P) + \ln \left( \frac{m_j}{\mu_j} \right) \right) \right] \rightarrow \min . \quad (2)$$

В (1)-(2)  $\alpha = \{\alpha_{i,j}\}$  – массовая доля атомов  $i$ -го сорта в веществе  $j$ ;  $m = \{m_j\}$  – вектор масс веществ;  $m_a = \{m_{a,i}\}$  – вектор масс атомов сорта;  $\mu_j$  и  $g_j$  – соответственно молярная масса  $j$ -го вещества и его химический потенциал;  $M$  и  $P$  – общие масса и давление соответственно.

В первом приближении  $g_j(T) = H_j + C_{p,j}(T - 298) - T(S_j + C_{p,j} \ln T / 298)$ , где  $H_j$ ,  $C_{p,j}$ ,  $S_j$  – соответственно энтальпия образования, теплоемкость при постоянном давлении и энтропия  $j$ -го вещества при температуре  $T = 298$  К

Минимизировать (1)-(2) с помощью стандартного генетического алгоритма [5-8] препятствуют жесткие ограничения (1). Стандартным способом решения проблемы этой проблемы служит «взвешивание»: вместо условного минимума (1)-(2) ищут абсолютный минимум модифицированного функционала

$$G = \sum_j \frac{m_j}{\mu_j} \cdot \left[ g_j + RT \left( \ln(M \cdot P) + \ln \left( \frac{m_j}{\mu_j} \right) \right) \right] + \beta \cdot (\alpha \cdot m - m_a)^2 \rightarrow \min . \quad (3)$$

При высокой размерности  $i, j$  задачи вероятность выхода популяции на ограничения (1) оказывается ничтожной, и, если ограничиться разумным объемом вычислений, процесс поиска оканчивается в одном из локальных минимумов, где условие (1) обычно не выполняется. Попытки понизить размерность системы, исключая компоненты на основании (1), приводят к артефактам как отрицательные концентрации (массы).

Идея авторов состоит в переносе ограничений (1) из адаптивной функции в кодировку хромосома. Если в классическом алгоритме кодировка гена ограничена

фиксированным интервалом  $[a, b]$ , то в модифицированном этот интервал приобретает определенную подвижность в соответствии с ограничениями (1). При каждой генерации гена ищутся граничные значения  $a$  и  $b$  с учетом реализации предыдущего гена и действующих ограничений (1). Стандартный подход к решению этой задачи состоит в использовании симплекс-метода, который, требуя объемных вычислений при каждой генерации гена, оказывается в нашем случае неэффективным. Использование простых физических соображений позволяет заметно сузить интервал локализации экстремума как сверху (ресурсом свободных атомов), так и снизу (устранением невязки материального баланса). Фактически предлагаемый способ реализует выбор самим генетическим алгоритмом базовых компонентов в системе [1-3], однако при этом соблюдение (1) не гарантируется. Это несовершенство описанного метода легко устраняется классической коррекцией, состоящей в замене минимизации (1)-(2) на минимизацию (3). То есть, локализуя масштабные свойства ограничений (1) вынесены в алгоритм, а тонкие уточняющие - в уравнения.

Пользовательский интерфейс реализующей компьютерной программы показан на рис. 1. Необходимые для термохимических расчетов константы хранятся в проблемно-ориентированной БД; кроме того, реализована возможность импорта первичной термодинамической информации из стандарта *STANJAN* [4].

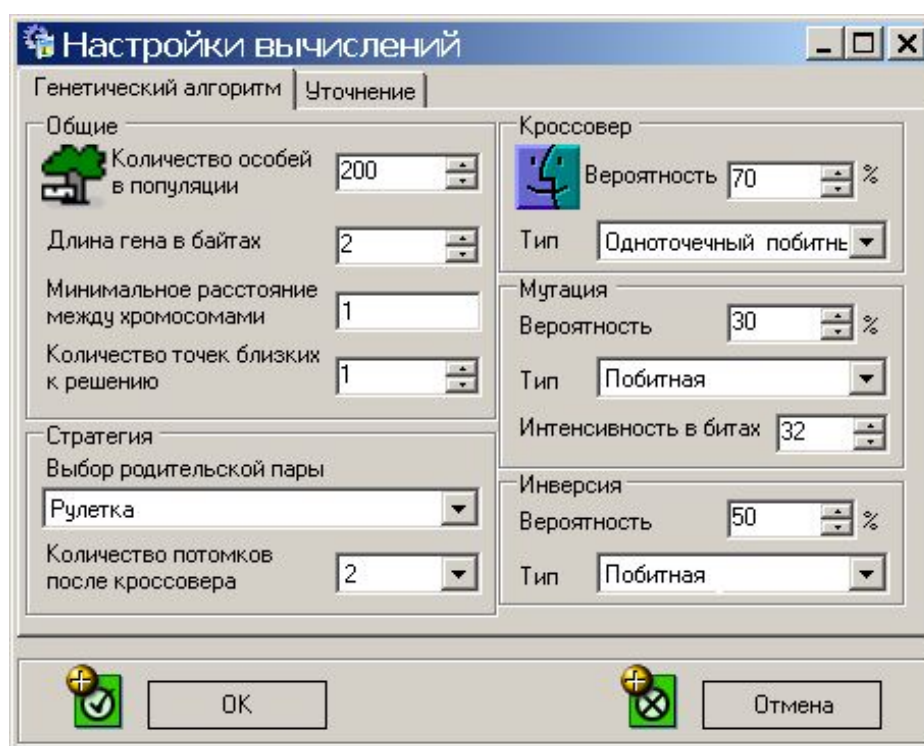


Рис. 1. Форма настройки генетического алгоритма, предназначенного для поиска химических равновесий и стационаров

Пример расчета равновесного состава в процессе термического крекинга высокомолекулярного углеводорода показан на рис. 2. Опыт верификации алгоритма свидетельствует о реальных возможностях рассчитывать подробный состав углеводородов в процессе термического крекинга, а равновесных продуктов сгорания моторных и др. топлив.

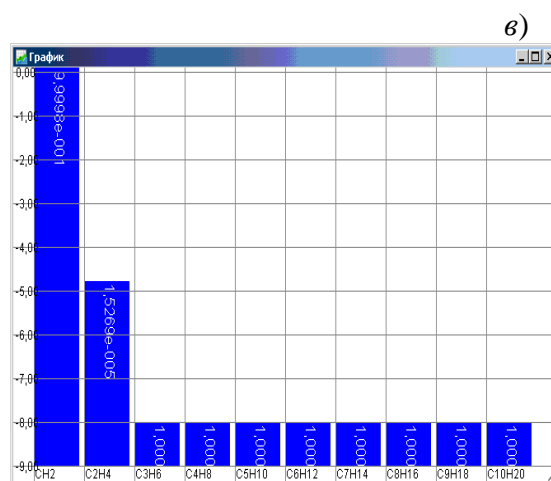
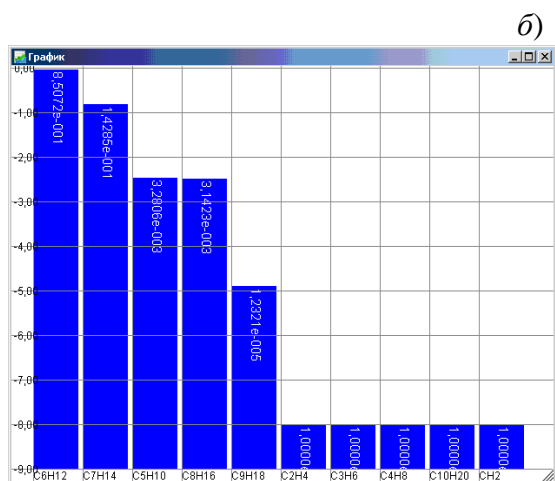
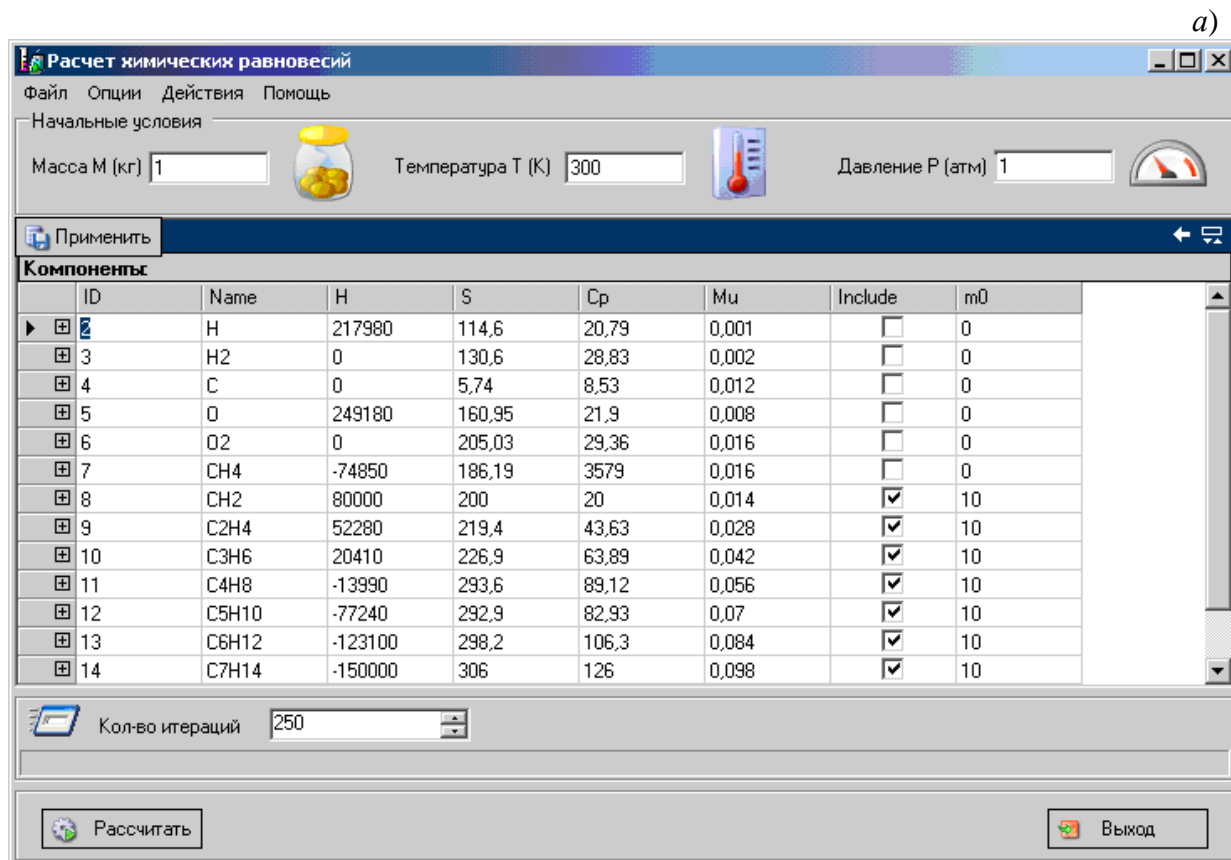


Рис. 2. Начальные условия (а) и результаты расчета (б, в) равновесного состава при крекинге углеводорода посредством модифицированного генетического алгоритма

**Список литературы:** 1. Джонсон К. Численные методы в химии: Пер с англ. М.: Мир, 1983. 2. Reynolds W.C. The element potential method for chemical equilibrium analysis: implementation in the interactive program STANJAN version 3. Dept. of Engineering, Stanford University. 1986. 3. Вороновский Г.К., Махотило К.В., Петрашев С.Н., Сергеев С.А. Генетические алгоритмы, искусственные нейронные сети и проблемы виртуальной реальности. Х.: ОСНОВА, 1997. 4. Тархов Д.А. Нейронные сети. Модели и алгоритмы. Кн.18. М.: Радиотехника, 2005. 256 с.