

Д. С. Г и р ш, Е. Н. Л а д о ш а (Ростов-на-Дону, ДГТУ). **Генетические алгоритмы в задаче о химическом равновесии.**

Существенный прогресс в исследованиях химических равновесий обусловлен применением генетических алгоритмов, которые позволяют существенно детализовать модели реагирования. Авторами разработан оригинальный метод определения химического и/или фазового состава реальных газов, находящихся в равновесии с конденсатом.

Подлежащий минимизации при материальных ограничениях

$$\alpha \cdot \mathbf{m} - \mathbf{m}_a = 0 \quad (1)$$

«взвешенный» потенциал Гиббса–Гельмгольца записывается как

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

В (1)–(2) $\alpha = \{\alpha_{i,j}\}$ — массовая доля атомов i -го сорта в веществе j ; $\mathbf{m} = \{m_j\}$ — вектор масс атомов; μ_j и g_j — соответственно молярный вес j -го вещества и его химический потенциал; M и P — общие масса и давление, β — весовой вектор.

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 нашем этот интервал приобретает определенную подвижность в соответствии с ограничениями (1). Другими словами, локализирующие масштабные свойства ограничений (1) вынесены в алгоритм, а тонкие уточняющие — в уравнения.

При каждой генерации гена ищутся граничные значения a и b с учетом реализации предыдущего гена и действующих ограничений (1). Локализовать экстремум сверху позволяет учет ресурса свободных атомов, а снизу — устранение невязки материального баланса с помощью свободных элементов. Фактически алгоритм автоматически выявляет базовые компоненты и легко модифицируется для поиска стационарных режимов в открытых реакторах. Опыт верификации алгоритма свидетельствует о возможности рассчитывать химический состав углеводородов при термическом крекинге, продуктов сгорания моторных и др. топлив.