

## ГРУППОВОЙ АНАЛИЗ ИДЕНТИФИЦИРУЕМОСТИ ПАРАМЕТРОВ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Спивак С.И., Исмагилова А.С.<sup>1</sup>

ГОУ ВПО «Башкирский государственный университет», Россия, 450074, г.Уфа, ул.Заки  
Валиди, 32, (347)2736162, [S.Spivak@bashnet.ru](mailto:S.Spivak@bashnet.ru)

<sup>1</sup>Нефтекамский филиал ГОУ ВПО «Башкирский государственный университет»,  
Россия, 452680, г.Нефтекамск, ул.Тракторная, 1, (34783)21710, [IsmagilovaAS@rambler.ru](mailto:IsmagilovaAS@rambler.ru)

В работе проведено исследование неединственности решения обратной задачи для моделей нестационарной химической кинетики с привлечением идей группового анализа.

Рассмотрим обратную задачу определения параметров математических моделей кинетики сложных химических реакций. Известно, что даже в «идеальной» ситуации возникает неоднозначность решения обратных задач, физико-химической причиной которой является отсутствие информации о концентрациях промежуточных веществ [1]. Основным этапом построения математических моделей в химии является исследование идентифицируемости параметров [2]. Эти модели инвариантны по отношению к некоторому функциональному преобразованию. Такие преобразования могут составлять группу. Поэтому при решении обратных задач химической кинетики для исследования неидентифицируемости моделей важно использовать аппарат групповых преобразований [3].

Представленная в работе методика позволяет анализировать случай ненаблюдаемости и неидентифицируемости. Она алгоритмична и ее применение сводится к сложностям технического характера. Эти сложности связаны, прежде всего, с увеличением размерности систем. Для устранения трудностей вычислительного характера создана программа для компьютерного анализа наблюдаемости и идентифицируемости. Результатом программы являются явные аналитические выражения, связывающие параметры. Иными словами, решается вопрос о том, с какой точностью определяются константы при заданной величине погрешности кинетического эксперимента.

### Литература.

1.Спивак С.И., Горский В.Г. Неединственность решения задачи восстановления кинетических констант // Доклады Академии наук СССР Т.257, №2, 1981. С.412.

2.Горский В.Г., Спивак С.И. Исследование идентифицируемости параметров – один из важнейших этапов построения математических моделей в химии // Журнал структурной химии Т.29, №6, 1988. С.119.

3.Овсянников Л.В. Групповые свойства дифференциальных уравнений. - Новосибирск: СО АН СССР, 1962. 240 с.