

# МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ В КОНТЕКСТЕ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Дегтяренко Н.А.

Белорусский государственный университет, г. Минск

В естественнонаучном высшем образовании особую значимость имеют междисциплинарные и проблемно-ориентированные формы деятельности, основанные на системном мышлении и гибридном интеллекте. Значительную роль в реализации таких форм деятельности играют математическое образование, информационные технологии и математическое моделирование с помощью компьютерной техники. Анализ математических моделей дает в руки исследователя эффективный инструмент, например, статистические методы обработки экспериментальных данных, который может использоваться для предсказания поведения систем и сравнения получаемых результатов [1]. Моделирование позволяет логическим путем прогнозировать последствия альтернативных действий и достаточно уверенно показывает, какому из них следует отдать предпочтение. Применение моделей – это метод, повышающий эффективность суждений и интуиции исследователя, нацеленный на развитие способности принятия интеллектуальных решений.

В учебный план специальностей 1-31 05 01 «Химия (по направлениям специальности 1-31 05 01 01 научно-производственная деятельность, 1-31 05 01 04 охрана окружающей среды)», 1-31 05 03 «Химия высоких энергий», 1-31 05 04 «Фундаментальная химия» включена базовая учебная дисциплина «Математическое моделирование химических процессов», в рамках которой студенты второго года обучения приобретают первичные навыки построения математических моделей химических процессов и реализации этих моделей с помощью компьютера. В данном сообщении приводится конкретный фрагмент учебного материала с комментариями, связанного с применением метода наименьших квадратов для решения обратной задачи химической кинетики. Учебное задание составлено на базе источников [2, 3].

Различают прямую и обратную задачу химической кинетики. Отправной точкой для решения прямой задачи химической кинетики служит кинетическая схема протекания реакции, отражающая предполагаемый механизм химического превращения. Далее на основе постулированной схемы составляется математическая модель реакции: для  $N$  участников многостадийной реакции ее математической моделью является система из  $N$  дифференциальных уравнений, описывающих скорость изменения количества (в некоторых единицах) каждого участника реакции. В результате решения системы получают зависимости концентраций веществ от времени, так называемые кинетические кривые. В обратной задаче химической кинетики по экспериментальным данным рассчитывают кинетические параметры реакций. Обратная задача, таким образом, преследует цель воссоздать кинетическую схему реакции, т. е. установить ее механизм. Студентам в лабораторной работе, посвященной математическим методам обработки экспериментальных данных, предлагается следующее задание с применением метода наименьших квадратов.

Получены экспериментальные данные по гидролизу метилацетата в разбавленном водном растворе при  $\text{pH} < 7$ . Опыт проводится при постоянной температуре  $T$ . Решите обратную задачу химической кинетики, выполнив последующие пункты (решение предполагается с использованием электронных таблиц EXCEL). *Комментарий:* в каждом из индивидуальных вариантов указываются экспериментальные текущие значения концентрации реагента в различные моменты времени при определенной температуре.

1. Линеаризуйте исходные данные в соответствии с исходными гипотезами, что данная реакция протекает согласно кинетическим закономерностям простой моно-, би- или тримолекулярной реакции.

*Комментарий:* предварительно пройдены темы, посвященные моделированию прямой задачи химической кинетики, поэтому студентам необходимо вспомнить дифференциальные модели и их решения (кинетические кривые), соответствующие простым моно-, би- и тримолекулярным реакциям:

$$C(t) = C_0 e^{-kt}; C(t) = \frac{C_0}{1 + 2ktC_0}; C(t) = \frac{C_0}{\sqrt{1 + 6ktC_0^2}}.$$

Формулы для расчета текущих концентраций реагента приведены в соответствии с указанными порядками реакций,  $C_0$  – начальная концентрация реагента,  $k$  — константа скорости реакции.

2. Для каждого из случаев пункта 1 постройте диаграммы по данным в линейных координатах. Добавьте к каждой диаграмме подписанную линию тренда и коэффициент детерминации. Выберите наиболее подходящий случай и определите предполагаемый порядок реакции.

*Комментарий:* здесь используется и повторяется материал, пройденный студентами на первом году обучения в рамках учебной дисциплины «Основы информационных технологий».

3. Рассмотрите линейную модель, соответствующую определенному Вами порядку реакции. Используя метод наименьших квадратов, найдите ее коэффициенты. Сравните результаты с подписью линии тренда.

*Комментарий:* здесь студентам рекомендуется ознакомиться с помощью справочной системы EXCEL с рядом встроенных функций (например, МОПРЕД, МОБР, ЛИНЕЙН и др.), которые будут применяться при выполнении данного пункта задания.

4. Оцените качество полученной модели.

*Комментарий:* здесь предлагается применить методы оценки, изложенные, например, в [4, с.203–205].

5. Найдите константу скорости реакции и начальную концентрацию реагента. Запишите формулу зависимости текущей концентрации реагента от времени.

*Комментарий:* используя метод выравнивания, здесь следует вернуться к исходной функциональной модели, указав модельную кинетическую кривую, соответствующую экспериментальным данным.

6. Изобразите диаграмму, позволяющую сопоставить опытные и модельные данные. Изобразите еще на одной диаграмме экспериментальные данные, выберите подходящий тип линии тренда, подпишите ее, сравните с результатами пункта 5. Добавьте на диаграмму коэффициент детерминации.

7. Вычислите модельную начальную скорость реакции, а также концентрацию реагента в момент времени  $t = 10$ .

*Комментарий:* здесь следует вспомнить химический смысл производной функции одной переменной, а также ее геометрический смысл. Начальная скорость реакции определяется как модуль тангенса угла наклона касательной к кинетической кривой в начальный момент времени.

8. Сформулируйте выводы.

*Комментарий:* студенты формулируют выводы об адекватности построенной математической модели экспериментальным данным и о возможности использования построенной модели для прогнозирования.

Практически ориентированные задания по курсам математике, которые проводятся преподавателями кафедры общей математики и информатики для студентов химического факультета Белорусского государственного университета, способствуют формированию математической культуры студентов нематематических специальностей, в частности специальности «экология», что, например, отражено в методической литературе [5]. В силу специфики нашей кафедры много внимания уделяется также использованию вычислительной техники.

## Литература

1. Дегтяренко, Н.А. Математическая статистика: пособие для студентов химического факультета / Н.А. Дегтяренко, О.Г. Душкевич. – Минск: БГУ, 2008. – 141 с.
2. Аналитическая химия. Проблемы и подходы: в 2 т. / Пер. с англ./ Под общ. ред. Р. Кельнера [и др.]. – М.: «Мир»: ООО «Издательство АСТ», 2004. – Т. 1. – 608 с. – (Лучший зарубежный учебник).
3. Коробов, В.И. Химическая кинетика: введение с Mathcad / Maple / MCS / В.И. Коробов, В.Ф. Очков. – М.: Горячая линия-телеком, 2009. – 384 с.
4. Расолько, Г.А. Использование информационных технологий в курсе вузовской математики. В 3-х ч. Ч. 1. Решение задач в пакете MathCad: учеб.-метод. пособие / Г.А. Расолько, Ю.А. Кремень, Н.В. Бровка, Л.Г. Третьякова. – Минск: БГУ, 2010. – 320 с.
5. Ерошенко, В.А. О математической культуре экологов и нравственности экологического мышления / В.А. Ерошенко, Н.А. Дегтяренко // Адукацыя і выхаванне. – 2006. – № 8. – С. 27–32.