

Решение уравнения импеданса растворения железа в кислом сульфатном электролите с использованием генетического алгоритма

М.А. Малеева¹, А.Р. Еникеев², И.М. Губайдуллин²

ФГБУН ИФХЭ РАН¹, Башкирский государственный университет²,
Институт нефтехимии и катализа РАН³

Получена передаточная дробно-рациональная функция третьего порядка адмиттанса анодного процесса с тремя типами интермедиатов. Определены кинетические константы элементарных стадий анодного процесса с помощью параллельного генетического алгоритма. Представлена оценка эффективности и распараллеливания алгоритма.

Процесс анодного растворения железа в водных электролитах является совокупностью последовательных и параллельных стадий. Существенную информацию о кинетике таких реакций можно получить с помощью метода импедансной спектроскопии. Однако интерпретация полученных результатов является сложной задачей, поскольку трудно получить решение конструируемых уравнений. Цель работы – определить кинетические константы элементарных стадий анодного процесса с помощью генетического алгоритма.

В работе [1] получены спектры импеданса растворения железного электрода в сульфатном (рН 1.3) электролите в области потенциалов $-0.18 \div -0.26$ В. Спектры импеданса имеют индуктивный характер в низкочастотной области, причем число петель зависело от потенциала. На основании полученных спектров предложены электрические эквивалентные схемы [1], моделирующие импеданс железного электрода, и определены численные значения их элементов.

На основании схемы активного растворения железа в кислотах [2] и с помощью метода направленных графов получена передаточная дробно-рациональная функция [1] третьего порядка адмиттанса анодного процесса с тремя типами интермедиатов. Передаточная функция содержит константы скоростей и коэффициенты переноса элементарных стадий трех параллельных путей растворения металла. Найдено соответствие между ее параметрами и элементами электрической эквивалентной схемы. Полученные уравнения решали с помощью генетического алгоритма по схеме «мастер-рабочий» [3]. Использована схема ГА со стандартными генетическими операциями: скрещиванием, мутациями, кроссинговером мутацией, так же в наборах использовался элитизм (сохранение части лучших особей). Возможность распараллеливания алгоритма основа на том, что вычисление функции соответствия, включающие вычисления констант скорости и тафельских коэффициентов, может быть вычислена независимо для особей в популяции на каждом шаге эволюционного процесса. Решение задачи строится по схеме «мастер-рабочий».

Вычислительные эксперименты проводились на кластере БашГУ (32 процессора AMD Opteron). Показатель эффективности распараллеливания выше 0.7, что говорит о хорошем параллелизме программы. В результате применение ПГА позволило рассчитать кинетические параметры изучаемых процессов.

Литература

1. Малеева М.А., Маршаков А.И., Рыбкина А.А., Елкин В.В. Физикохимия поверхности и защита материалов, 2008, 44, 587.
2. Keddam M., Mattos O.R., Takenouti H. J. Electrochem. Soc., 1981, 128, 257.
3. Л.А. Гладков, В.В. Курейчик Генетические алгоритмы: Учебное пособие. 2-е изд.. М: Физматлит, 2006. С.320.