

Г. К. Райманова, С. И. Спивак (Уфа, БашГУ). **Область неопределенности по кинетическим константам для одной кинетической модели.**

Рассмотрим систему, способную переходить из состояния A_1 в A_2 и из A_2 в A_3 с интенсивностью переходов k_1 и k_2 , соответственно:



где A_1, A_2, A_3 могут рассматриваться как символы химических веществ, k_1 и k_2 — константы скорости.

Рассмотрим следующую задачу: при каких значениях k_1 и k_2 соответствующие им решения a_1, a_2, a_3 будут отличаться по модулю от $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$ не более, чем на $\varepsilon(t)$, в промежутке времени $0 \leq t \leq T$, где $\bar{a}_1$ и $\bar{a}_2$ заданы таблично. Такая задача возникает при решении обратных задач химической кинетики — определение кинетических констант по экспериментальным данным.

Система дифференциальных уравнений, соответствующая (1), имеет вид:

$$a'_1 = -k_1 a_1, \quad a'_2 = k_1 a_1 - k_2 a_2, \quad a'_3 = k_2 a_2. \quad (2)$$

Решая систему (2) как систему дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами и учитывая начальные данные $a_1(0) = 1, a_2(0) = a_3(0) = 0, a_1 + a_2 + a_3 = 1$, получим решение вида:

$$a_1 = e^{-k_1 t}, \quad a_2 = \frac{k_1}{k_2 - k_1} (e^{(k_2 - k_1)t} - 1) e^{-k_2 t}, \quad a_3 = 1 - a_1 - a_2.$$

Таким образом, первоначальная задача сводится к тому, чтобы определить, при каких значениях k_1 и k_2 система неравенств

$$|\bar{a}_1(t) - a_1(t)| \leq \varepsilon(t), \quad |\bar{a}_2(t) - a_2(t)| \leq \varepsilon(t) \quad (3)$$

выполняется для всех t из интервала $0 \leq t \leq T$.

На интервале $0 \leq t \leq 2$ таблично зададим значения $\bar{a}_1$ и $\bar{a}_2$:

t	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1	1,2	1,4	1,6	1,8	2
$\bar{a}_1(t)$	1	0,82	0,67	0,54	0,45	0,37	0,30	0,25	0,20	0,17	0,14
$\bar{a}_2(t)$	1	0,15	0,22	0,25	0,24	0,23	0,21	0,19	0,16	0,14	0,11

Для численного решения системы (3) написана программа, которая находит начальное приближение по некоторому первоначальному значению k_1 и k_2 с шагом h и строит некоторую прямоугольную область k_1 и k_2 , удовлетворяющую этой системе.

Результаты работы программы приведены на рис. 1, где $\varepsilon(t) = 0,1; T = 2; k_1 = 6$ и $k_2 = 5, h = 1$; шаг $dk = 0,01$.

Из результата работы программы видим, что поиск начального приближения зависит от начального значения k_1, k_2 и шага h , область значений k_1 и k_2 является выпуклой односвязанной областью и зависит от начального значения. Начальное приближение принадлежит области, но не является его центральной точкой.

