

А. Р. А р с л а н о в а, С. И. С п и в а к (Уфа, БашГУ). **Интервалы неопределенности в задачах температурной зависимости константы скорости химической реакции.**

Зависимость константы скорости химической реакции от температуры выражается уравнением Аррениуса: $k = k_0 e^{-E_A/(RT)}$.

Будем называть *интервалом неопределенности* по k_0 и E решение системы неравенств

$$\eta_i = k_i - k_0 e^{-E/(RT_i)}, \quad i = 1, \dots, n, \quad |\eta_i| \leq \varepsilon, \quad (1)$$

где ε — погрешность измерения k при фиксированной температуре.

Решение системы неравенств (1) относительно k_0 , E выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} E \geq RT_i(\ln k_0 - \ln k_i - \varepsilon), \\ E \leq RT_i(\ln k_0 - \ln k_i + \varepsilon), \end{cases} \quad i = 1, \dots, n, \\ \begin{cases} k_0 \leq \exp \left\{ \frac{T_i \ln k_i - T_{i-1} \ln k_{i-1} + \varepsilon(T_i - T_{i-1})}{T_i - T_{i-1}} \right\}, \\ k_0 \geq \exp \left\{ \frac{T_i \ln k_i - T_{i-1} \ln k_{i-1} - \varepsilon(T_i - T_{i-1})}{T_i - T_{i-1}} \right\}, \end{cases} \quad i = 2, \dots, n, \\ \begin{cases} E \geq \frac{RT_i T_{i-1} (\ln k_i - \ln k_{i-1})}{T_i - T_{i-1}} - 2\varepsilon RT_i, \\ E \leq \frac{RT_i T_{i-1} (\ln k_i - \ln k_{i-1})}{T_i - T_{i-1}} + 2\varepsilon RT_i, \end{cases} \quad i = 2, \dots, n.$$

Был рассчитан реальный пример, $T_1, \dots, T_n = 300, \dots, 500$; $R = 1,987$; $\varepsilon = 0,1$. Полученное значение интервала: $904,837418036088 \leq k_0 \leq 1105,170918075590$; $4800 \leq E \leq 5124$.