

**Э. Р. А х м а т с а ф и н а, И. М. Г у б а й д у л л и н, С. И. С п и в а к** (Уфа, ИНК РАН). Математическая модель кинетики реакции циклоаюминирования олефинов триэтилалюминием в присутствии  $Cp_2ZrCl_2$ .

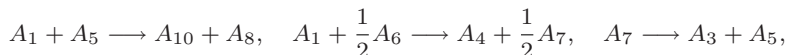
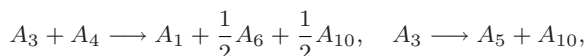
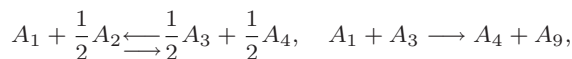
Прямая кинетическая задача — это расчет состава многокомпонентной реагирующей смеси и скорости реакции на основе заданной кинетической модели с известными параметрами. Обратная кинетическая задача — восстановление на основе экспериментальных данных вида кинетической модели и ее параметров.

Участники химической реакции делятся на измеряемые и неизменяемые, критерий сравнения расчета с измерениями рассматривается по измеряемым веществам. В решении получаем многомерную область для кинетических констант, которая удовлетворяет рассматриваемой модели в пределах погрешности измерений, т. е. по каждой из констант имеем интервал неопределенности. Модель описывает измерения в пределах их точности, если выполняется система неравенств

$$\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{I1} |x_{ij}^e - x_{ij}^p| \leq \varepsilon_{ij}. \quad (1)$$

По каждой из констант находим интервал неопределенности как отрезок, вариация константы внутри которого сохраняет совместность системы неравенств. Такая постановка задачи определения интервалов неопределенности для констант при условии удовлетворения системы (1) принадлежит Л. В. Канторовичу.

Объектом нашего исследования является механизм реакции циклоаюминирования олефинов [1], для которой схема химических превращений и соответствующая ей система уравнений имеют вид:



$$\frac{dX_1}{dt} = -W_1 - W_2 + W_3 - W_5 - W_6, \quad \frac{dX_2}{dt} = -\frac{1}{2}W_1, \quad \frac{dX_3}{dt} = \frac{1}{2}W_1 - W_2 - W_3 - W_4 + W_7,$$

$$\frac{dX_4}{dt} = \frac{1}{2}W_1 + W - 2 - W - 3 + W_6, \quad \frac{dX_5}{dt} = \frac{1}{2}W_4 - W_5 + W_7, \quad \frac{dX_6}{dt} = \frac{1}{2}W_3 - \frac{1}{2}W_6,$$

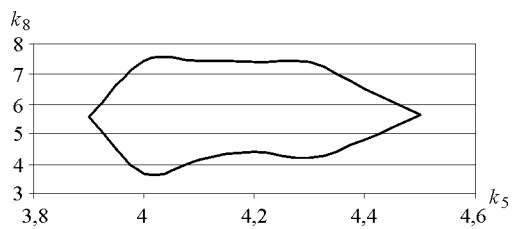
$$\frac{dX_7}{dt} = \frac{1}{2}W_6 - W_7, \quad \frac{dX_8}{dt} = W_5, \quad \frac{dX_9}{dt} = W_2, \quad \frac{dX_{10}}{dt} = \frac{1}{2}W_3 + W_4 + W_5,$$

где  $W_1 = k_1X_1X_2^{1/2} - k_8X_3^{1/2}X_4^{1/2}$ ,  $W_2 = k_2X_1X_3$ ,  $W_3 = k_3X_3X_4$ ,  $W_4 = k_4X_3$ ,  $W_5 = k_5X_1X_5$ ,  $W_6 = k_6X_6X_9$ ,  $W_7 = k_7X_1X_{10}$ ,  $W_8 = k_8X_1X_6^{1/2}$ ,  $W_9 = k_9X_7$ ;  $X_1, \dots, X_{10}$  — концентрации веществ  $A_1, \dots, A_{10}$ .

В нашем случае измеряемыми являются  $X_2, X_3, X_5, X_7, X_8, X_{10}$ , поэтому система неравенств примет вид

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{ij}^e - X_{ij}^p| \leq \varepsilon_i, \quad i = 2, 3, 5, 7, 8, 10.$$

Для нахождения интервалов неопределенности кинетических констант систему решали методом перебора вдоль границ, используя многопроцессорные вычислительные системы. В результате, например, фазовая плоскость по константам  $k_8$  и  $k_5$  имеет вид, изображенный на рис.



## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Балаев А. В., Парфенова Л. В., Русаков С. В., Губайдуллин И. М., Спивак С. И., Халилов Л. М., Джемилев У. М. Механизм реакции циклоалюминирования алкенов триэтилалюминием в алюмациклопентаны, катализируемой  $Cp_2ZrCl_2$ . — Докл. РАН, 2001, т. 381, № 3.