

И. В. А х м е т о в, И. М. Г у б а й д у л л и н (Уфа, БашГУ, ИНК РАН). **Кинетическая модель реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты.**

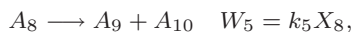
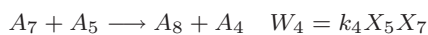
В работе [1] были определены кинетические параметры реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты (МЭАПКК). При этом решены следующие задачи:

— сконструировано математическое описание в виде нелинейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) для концентраций участвующих в реакции веществ;

— разработан пакет прикладных программ для расчета кинетических параметров реакции получения МЭАПКК, включающий базу данных экспериментальной информации и реляционную систему управления базой данных [2];

— найдены численные значения кинетических параметров, описывающих экспериментальные данные.

В результате вычислительного эксперимента определена наиболее вероятная схема химических превращений и соответствующие им кинетические уравнения, которые имеют вид:



где $A_1 = C_6H_7NO$, $A_2 = CCl_4$, $A_3 = C_7H_6NOCl_3$, $A_4 = HCl$, $A_5 = CH_4O$, $A_6 = C_8H_9Cl_2NO_2$, $A_7 = C_9H_{12}ClNO_3$, $A_8 = C_{10}H_{15}NO_4$, $A_9 = C_8H_9NO_3$, $A_{10} = C_2H_6O$, W_j — скорость j -й стадии ($j = 1 \dots 5$), X_i — мольная доля i -го компонента (соответствует A_i , $i = 1 \dots 10$), k_j — константа скорости j -й реакции.

Для данной схемы была решена обратная кинетическая задача. Система ОДУ решалась при помощи метода Рунге–Кутты пятого порядка, модификация Мерсона. Полученные численные значения кинетических констант скоростей адекватно описывают эксперимент. Однако, соединение CCl_4 довольно устойчивое, а полученное значение энергии активации для стадии 1 мало, поэтому предполагается дальнейшая ее детализация для выявления промежуточных веществ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ахметов И. В., Губайдуллин И. М.* Определение кинетических параметров реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты. — В сб.: *Материалы Всероссийской научно-практической конференции «Финансовая и актуарная математика»* г. Нефтекамск. Уфа: РИЦ БашГУ, 2009, с. 17–21.
2. *Спивак С. И., Губайдуллин И. М., Вайман Е. В.* Обратные задачи химической кинетики: Учебное пособие. Уфа: РИО БашГУ, 2003, 110 с.