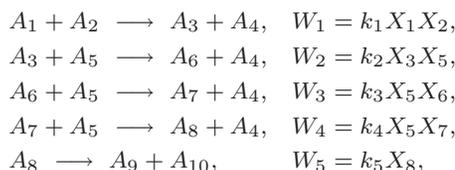


А. Д. Юмагужин, И. В. Ахметов, И. М. Губайдуллин (Уфа, БашГУ, ИНК РАН). Исследование жесткости реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты.

В работе [1] были определены кинетические параметры реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты (МЭАПКК).

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.

Трудности решения задач химической кинетики связаны с тем, что скорости различных стадий часто отличаются на несколько порядков, причем пренебречь ни одной из них нельзя. Жесткость дифференциальных уравнений приводят к необходимости использования специальных методов интегрирования.

Задача Коши  $y' = f(t, y)$ ,  $y(t_0) = y^0$ ,  $t_0 \leq t \leq t_k$ , называется жесткой [2] в некотором интервале  $I \subset [t_0, t_k]$ , если:

1)  $\operatorname{Re}(\lambda_i(t)) < 0$ ,  $1 \leq i \leq N$ ;

2)  $\max \operatorname{Re}(-\lambda_i(t)) / \min \operatorname{Re}(-\lambda_i(t)) \gg 1$ , где  $\lambda_i(t)$  — собственные числа матрицы Якоби  $\partial f / \partial y$ , вычисленной на решении  $y(t)$ .

Задача нахождения собственных чисел матрицы Якоби решалась методом Леверье–Фадеева. Программная реализация данного метода показала, что в каждой точке замера имеется положительное значение. Следовательно, система уравнений, описывающая реакцию получения МЭАПКК, не является жесткой. Предполагается интеграция программы в информационно-аналитическую систему обратных задач химической кинетики, разработанную в лаборатории математической химии ИНК РАН.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ахметов И. В., Губайдуллин И. М. Кинетическая модель реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты. — Обозрение прикл. и промышл. матем., 2009, т. 16, в. 5, с. 805.
2. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999.