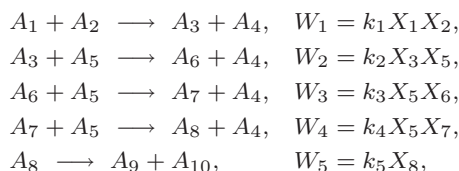


А. Д. Юмагужин, И. В. Ахметов, И. М. Губайдуллин (Уфа, БашГУ, ИНК РАН). Исследование жесткости реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты.

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.