

**Ф.Т.Бадртдинова, Л.А.Бигаева, С.И.Спивак** (Бирск, БирГСПА, Уфа, БГУ). **Определение интервалов неопределенностей для процесса поликонденсации аспарагиновой кислоты.**

При решении обратной задачи химической кинетики нередко приходится сталкиваться с неоднозначностью решения. Факт неоднозначности решения обратных задач химической кинетики хорошо известен и неоднократно обсуждался.

Рассмотрим химический процесс поликонденсации аспарагиновой кислоты, который проходит в двух зонах твердой фазы. Механизм и моделирование процесса были исследованы в работах [1, 2]. В соответствии с математической моделью, определены 6 констант скоростей и параметр  $\alpha$  при различных температурах в диапазоне от 169° С до 227° С, т. е. была решена обратная задача химической кинетики. Результаты решения обратной задачи приведены в статье [2].

Основываясь на идее определения интервалов неопределенности по Канторовичу, который описан также в работе [3], были рассчитаны интервалы неопределенности для констант скоростей процесса поликонденсации аспарагиновой кислоты. В качестве критерия соответствия расчета измерения используется неравенство, которое характеризует вариацию экспериментальных данных в пределах величины их максимальной относительной погрешности:  $\max_{1 \leq i \leq n} |Y_i^{\text{эксп}} - Y_i^{\text{расч}}| / Y_i^{\text{эксп}} < \varepsilon$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , где  $n$  — число экспериментальных точек,  $Y_i^{\text{эксп}}$  — экспериментальное значение,  $Y_i^{\text{расч}}$  — расчетное значение, которое находится из математической модели,  $\varepsilon$  — предельно допустимая погрешность измерений. Начальными точками для поиска интервалов неопределенностей будут служить найденные в ходе решения обратной задачи кинетические константы [2].

Интервалы неопределенности для процесса поликонденсации аспарагиновой кислоты при температуре  $t = 187^\circ \text{C}$  приведены ниже.

**Таблица.** Интервалы неопределенности при температуре  $t = 187^\circ \text{C}$ .

Константы скорости	Значения констант скоростей	Интервал неопределенности при $\varepsilon = 1\%$	Интервал неопределенности при $\varepsilon = 2\%$	Интервал неопределенности при $\varepsilon = 3\%$
$k_1$	0,00380134	[0,002507; 0,0066]	[0,001501; 0,0103]	[0,0008; 0,0159]
$k_2$	0,1234692	[0,09847; 0,15547]	[0,07047; 0,19547]	[0,04347; 0,24446]
$k_3$	0,0163344	[0,00683; 0,02583]	[0; 0,04183]	[0; 0,068334]
$k_4$	0,0040703	[0,00267; 0,0072]	[0,00147; 0,01207]	[0,0007; 0,01937]
$k_5$	0,35839844	[0,297398; 0,424398]	[0,228398; 0,52039]	[0,164398; 0,63439]
$k_6$	0,0221875	[0,013187; 0,02969]	[0,000188; 0,04419]	[0; 0,06369]

Полученные интервалы неопределенности позволяют дискриминировать химическую модель процесса поликонденсации аспарагиновой кислоты и выполнять оценку кинетических параметров.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гольдберг В. М. и др. Кинетический анализ твердофазной поликонденсации аспарагиновой кислоты. — Доклады Академии наук, 2008, т. 423, № 5, с. 583–587.
2. Бадртдинова Ф. Т., Спивак С. И., Гольдберг В. М., Бигаева Л. А. Кинетическая модель процесса поликонденсации аспарагиновой кислоты по данным термогравиметрии. — Пластические массы. (В печати.)
3. Канторович Л. В. О некоторых новых подходах к вычислительным методам и обработке наблюдений. — Сибирский математический журнал, 1962, т. 3, № 5, с. 701–709.