

А. О. Антонова (Казань, КНИТУ). **Влияние неопределенности в кинетических параметрах многостадийной реакции на расчет оптимальной температуры.**

Практически все эмпирические константы определяются на основе полученной совокупности экспериментальных данных. Способы получения такой информации достаточно разнообразны. Это непосредственное измерение, анализ литературных данных, обработка результатов косвенных измерений. Всем им присуща определенная неточность. Причины могут быть различные: погрешность аппаратуры, применение знаний округленных параметров (числа π , e и т. д.), ошибки, определяемые методикой расчета (например, при численном интегрировании или дифференцировании) [1]. Следовательно, любое экспериментальное измерение содержит в себе некоторую неопределенность.

В химической технологии кинетические константы (энергии активации и константы скорости реакций) определяются обычно в широких интервалах варьирования. Вычислительный эксперимент проводится на основе кинетической модели, точность которой существенно зависит от входящих в нее параметров [2, 3]. При определении теоретических оптимальных условий функционирования системы неопределенность в химических константах может привести к тому, что весь химический процесс в целом будет протекать не в том режиме, который ожидал исследователь.

К настоящему времени известны приемы интервальных вычислений и пакеты прикладных программ и алгоритмических макроязыков, реализующих элементы интервального анализа на машинном уровне. Основная идея интервального анализа состоит в замене арифметических операций и вещественных функций над вещественными числами интервальными операциями и функциями, преобразующими интервалы, содержащие эти числа. Ценность интервальных решений заключается в том, что они содержат точные решения исходных задач [4].

В данной работе рассмотрена математическая модель для многостадийной обратимой реакции первого порядка с интервальными кинетическими данными. Решена оптимальная задача поиска температуры, при которой выполняется требование максимального получения продукта для выбранной стадии. Исследована чувствительность результата теоретической оптимизации в условиях интервальной неопределенности по кинетическим параметрам. Выведены условия качественной неизменности оптимальной температуры, необходимые для прогнозирования местоположения температурного экстремума, а также определены границы изменения оптимального температурного режима с применением теории интервального анализа. В качестве исходных данных были взяты кинетические константы процесса изомеризации ксилолов. Вычислительный эксперимент проведен с помощью разработанного программного приложения, адаптированного к решению задач оптимизации химической кинетики в условиях интервальной неопределенности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Мустафина С. А.* Оптимизация равновесных процессов в условиях неопределенности по константам равновесия. — Труды Средневолжского математического общества, 2006, т. 8, № 1, с. 282.
2. *Островский Г. М., Волин Ю. М.* Технические системы в условиях неопределенности: анализ гибкости и оптимизация. М.: БИНОМ, 2008, 319 с.
3. *Островский Г. М., Волин Ю. М., Зиятдинов Н. Н.* Методы оптимизации химико-технологических процессов. М.: КДУ, 2008, 424 с.
4. *Добронец Б. С.* Интервальная математика. Красноярск, 2004, 216 с.