

**О. А. Антонова, С. А. Мустафина** (Стерлитамак, СФ БГУ).  
**Теоретическая оптимизация многостадийной последовательной обратимой реакции в условиях неопределенности кинетических данных.**

Для многостадийной последовательной обратимой реакции в равновесном случае рассмотрена задача нахождения оптимальной температуры, доставляющей максимум выхода целевого продукта. При этом учитывалось, что начальные кинетические данные для реакции (кинетические константы скорости  $k_i^0$  и энергии активации  $E_i$ ) содержат в себе некоторую погрешность [1], т. е. находятся в условиях неопределенности:

$$(k_i^0)^{cp} - \Delta(k_i^0) \leq k_i^0 \leq (k_i^0)^{cp} + \Delta(k_i^0), \\ E_i^{cp} - \Delta E_i \leq E_i \leq E_i^{cp} + \Delta E_i.$$

Математическая модель для многостадийной последовательной обратимой реакции  $X_1 \rightarrow X_2 \rightarrow X_3 \rightarrow \dots \rightarrow X_n$  имеет вид

$$\begin{pmatrix} -k_1^p & 1 & \dots & 0 \\ 0 & -k_2^p & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix},$$

где  $k_i^p$  — константа равновесия,  $x_i$  — равновесная концентрация  $i$ -го продукта ( $i = 1, 2, \dots, n$ ).

По технологическим условиям на температуру накладывается ограничение вида  $T \in [T_*, T^*]$ . Неопределенность в начальных данных порождает неопределенность и в параметрах модели [2]. На основе интервального аналога метода Гаусса построен алгоритм расчета интервально-значных равновесных концентраций. Построен также алгоритм анализа задачи в условиях качественной неизменности (изотермичность оптимального температурного режима) и выведены условия, выполнение которых гарантирует сохранение качества оптимальной температуры при изменении констант равновесия в заданных интервалах.

Для процесса пассивации никелевых катализаторов и для реакции изомеризации ксилолов изучено влияние неопределенности в термодинамических параметрах на результаты теоретической оптимизации и, как следствие из этого, требование к точности определения параметров, необходимых для гарантированного прогноза условий проведения реакций.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Антонова О. А., Мустафина С. А. Расчет оптимального температурного режима в условиях неопределенности кинетических констант методами интервального анализа. — В сб.: Труды Международной конференции «Дифференциальные уравнения и смежные проблемы». Уфа: Гилем, 2008, т. 3, с. 163–168.
2. Мустафина С. А. Оптимизация равновесных процессов в условиях неопределенности по константам равновесия. — Труды Средневолжского математического общества, 2006, т. 8, № 1, с. 282–287.