

Интервальный поиск параметров кинетической модели реакции аминотетраметилирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина*

А.В. Новичкова¹, К.Ф. Коледина², Л.Ф. Нурисламова¹, Ю.О. Бобренёва²,
И.М. Губайдуллин¹

Институт нефтехимии и катализа РАН¹,
Башкирский Государственный Университет²

Для качественного построения кинетических моделей химических реакций необходимо постоянное сочетание натурального и вычислительного экспериментов. На основе кинетической модели можно варьировать начальные данные и режимы проведения реакции, прогнозировать эффективные новые натурные эксперименты с целью получения максимального выхода целевых продуктов за наименьшее время с минимальными затратами.

Азот- и серасодержащие органические соединения находят применение в качестве эффективных средств защиты растений, антиокислительных, противокоррозионных, противозадирных, противоизносных присадок к топливам и маслам. До настоящего времени одним из наиболее известных методов синтеза аминосульфидов остается классическая реакция аминотетраметилирования тиолов по Манниху [1] с помощью вторичных аминов и альдегидов. В настоящей работе рассматривается аминотетраметилирование тиолов с помощью тетраметилметандиамина (Рис. 1).

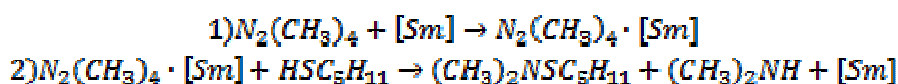


Рис. 1. Реакция аминотетраметилирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина

Нами был определен один набор кинетических параметров (константы скорости, энергии активации). В связи с тем, что экспериментаторам неизвестны данные о промежуточных веществах, полученный нами набор параметров не является единственным. Для полного физико-химического анализа о механизме реакции необходимо рассмотреть все возможные варианты. Таким образом, необходим поиск интервалов кинетических параметров.

Была разработана последовательная программа для определения двумерных и трехмерных областей неопределенности кинетических параметров. Планируется распараллелить данную программу [2] с использованием программной модели CUDA и протестировать ее на видеокарте NVIDIA GeForce GTS 250.

Литература

1. Новичкова А.В., Акманов Б.Ф., Миникеева Л.Р., Хайруллина Р.Р., Губайдуллин И.М. Кинетическая модель реакции аминотетраметилирования тиолов // Дифференциальные уравнения и их приложения: Труды Всероссийской научной конференции с международным участием / Уфа: Гилем, 2011. С.320-323
2. Губайдуллин И.М., Аристархов А.В., Спивак С.И. Использование параллельных распределенных вычислений для определения областей пространства кинетических параметров // Труды международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии (ПАВТ'2009)». Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2009. С. 439-443.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Госконтракт №02.740.11.0631) и РФФИ (гранты №12-07-00324 и №12-07-31029).