

## РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ ДЛЯ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЯЗЫКА PYTHON

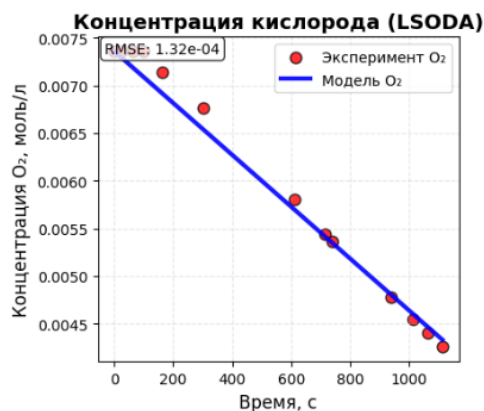
*Шайморданова Г.М., Федоров Д.А., Сафарова И.В.*

Уфимский университет науки и технологий

450076, г. Уфа, ул. З. Валиди, д. 32/5

Методы вычисления параметров химической кинетики и определения механизмов сложных химических реакции считаются одними из самых сложных в физической химии. Имеется большой арсенал программных средств, позволяющих моделировать химическую кинетику реакций, однако ряд из них имеет ограничения в доступности лицензии и универсальности. В настоящей работе апробирован язык программирования Python с библиотеками NumPy и SciPy.

Модельной системой служила реакция окисления 1,4-диоксана в присутствии антиоксиданта. В качестве экспериментальных данных вносились концентрация поглощаемого кислорода [1]. В код программы были дополнительно введены ограничения на неотрицательность концентраций, а также границы искомых констант скоростей. Результаты расчетов показали высокую сходимость предложенного алгоритма. На рисунке представлены экспериментальная и расчетная кинетические кривые поглощения кислорода.



Экспериментальная и расчетная кинетические кривые поглощения кислорода в реакции окисления 1,4-диоксана в присутствии антиоксиданта

Полученные значения констант скорости находятся в хорошем согласии с литературными данными, что подтверждает корректность разработанного программного кода на Python.

1. I.V. Safarova, et.al. Antioxidant Properties of Phenothiazine Derivatives in 1, 4-Dioxane Oxidation: Kinetic Study and Reaction's Mechanism // Physical Chemistry Research. 2025. Vol. 13, №. 3. P. 455-461