УДК 517.958
С.Н. Шарая, кандидат физико-математических наук,
А.В. Шварц
Инновационный Евразийский университет (г. Павлодар)
E-mail: artur_shw@mail.ru

Моделирование задач химической технологии

Аннотация. *В работе рассмотрены математические методы решения задач химической технологии, описываемые дифференциальными уравнениями. Получено решение ряда практических задач как аналитическими, так и численным способом.*
Ключевые слова: *дифференциальные уравнения, аналитическое решение, численный расчет, химическая реакция, концентрация соединения, метод вариации переменных, метод Эйлера, воспламенение, зажигание.*

Дифференциальные уравнения являются одним из самых популярных и мощных средств решения практических задач.

Во многих случаях математическое описание объекта химической технологии имеет вид дифференциальных уравнений, практическая ценность которых обуславливается тем, что пользуясь ими, можно установить связь между основными переменными процесса.

Составление дифференциальных уравнений представляет собой задачу, для которой в настоящее время нет общих методов решения, и навыки в этой области могут быть приобретены лишь в результате изучения конкретных процессов.

Рассмотрим применение дифференциальных уравнений для решения задач химической технологии.

Химическая кинетика – наука о скоростях и механизмах химических реакций. Скорость химической реакции показывает, как быстро увеличивается количество продуктов реакций и уменьшается количество реагентов. Эта скорость обычно определяется как производная от концентрации продуктов по времени и, согласно закону действующих масс, пропорциональна действующим массам в данный момент.

Проанализируем процесс перехода вещества в раствор. Пусть *P* – насыщенный раствор, *x=x(t)* – количество вещества, перешедшего в раствор к моменту *t*. Согласно закону действующих масс

$$\frac{dx}{dt} = k(P - x), \qquad (1)$$

где k – коэффициент пропорциональности.

Задача свелась к решению уравнения первого порядка с разделяющимися переменными:

$$\int \frac{dx}{P - x} = k \int dt;$$

$$\ln|P - x| = -kt + \ln C;$$

$$P - x = Ce^{-kt};$$

$$x = P - Ce^{-kt}. \qquad (2)$$

В начальный момент времени *t=0* вещество не поступало в раствор, следовательно, *x(0) = 0*, тогда *C =P*.

Таким образом, закон перехода вещества в раствор имеет вид:

$$x(t) = P(1 - e^{-kt}).$$

При изучении конкретных химических задач часто используются не только аналитические, но и численные методы решения.

Уравнение скорости последовательно протекающих реакций

$$A \xrightarrow{k_1} P \xrightarrow{k_2} C$$

записывается следующим образом:

$$\frac{dx}{dt} = k_1 e^{-k_1 t} - k_2 x. \qquad (3)$$

Определим концентрацию соединения *x* спустя 1, 2, 3 минуты после начала реакции, если $x(t)|_{t=0} = 0$, k_1 – постоянная скорости первой стадии процесса, k_2 – второй стадии: k_1=0,05 дм^3/мольмин, k_2=6,5*10^{-3} дм^3/мольмин.

Уравнение (3) линейное неоднородное первого порядка, его решение найдем методом вариации произвольных постоянных [1]:

Перепишем (3) в виде:

$$\frac{dx}{dt} + k_2 x = k_1 e^{-k_1 t}$$

и решаем соответствующее ему однородное уравнение

$$\frac{dx}{dt} + k_2 x = 0\ ;$$

$$\frac{dx}{dt} = -k_2 x \quad \Rightarrow x = ce^{-k_2 t}. \tag{4}$$

Для неоднородного уравнения (3)

$$C'_{(t)} e^{-k_2 t} = k_1 e^{-k_1 t}$$

$$\frac{dC}{dt} = k_1 e^{-k_1 t + k_2 t}$$

$$C = \frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{(k_2 - k_1)t} + C_1 \tag{5}$$

Подставляя (5) в (4), получим

$$x(t) = \left(\frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{(k_2 - k_1)t} + C_1 \right) e^{-k_2 t}.$$

Константу C_1 находим из условия, что в начальный момент концентрация равна 0. Тогда,

$$C_1 = \frac{k_1}{k_1 - k_2}$$

и решение поставленной задачи записывается в виде:

$$x(t) = \frac{k_1}{k_2 - k_1} (e^{(k_2 - k_1)t} - 1) e^{-k_2 t}. \tag{6}$$

Подставляя численные значения постоянных k_1, k_2, получим

$$x(t) = \frac{10}{3} (e^{0{,}015t} - 1) e^{-0{,}065t}. \tag{7}$$

Концентрацию соединения в любой момент времени t можно получить из формулы (7).

Для практического применения часто используется не формула (7), а искомое решение ищут в виде таблицы значений. Расчет проведен методом Эйлера. Таблицу значений искомой функции $x(t)$ можно получить при циклическом применении формул:

$$x_{k+1} = x_k + \Delta x_k\ ;$$

$$\Delta x_k = h x'_k.$$

Полагая $h=1$, $x(0)=0$, $t \in [0;3]$, находим числовые значения концентрации соединения:

Таблица 1 – Зависимость концентрации соединения от времени

t	Способ	0	1	2	3
x(t)	Метод Эйлера	0	0,04720	0,08914	0,12624
	Точное решение	0	0,04694	0,08927	0,12630

К решению уравнений в частых производных сводятся задачи теории горения о воспламенении и зажигании в неподвижной среде. Математическое решение этих задач можно существенно упростить, вводя соответствующие безразмерные переменные.

Рассмотрим решение задачи о разогреве химически реагирующей смеси газов, находящийся в цилиндрическом сосуде бесконечной высоты без учета выгорания.

В этом случае в безразмерном виде уравнение теплопроводности запишется

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\delta}\left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) + e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \tag{8}$$

с краевыми условиями:

$$\theta(\xi,0) = \theta_H,\ \theta(1,\tau) = \theta_W,\ \left.\frac{\partial \theta}{\partial \xi}\right|_{0,\tau} = 0.$$

Выражения безразмерных переменных и параметров имеют вид:

$\theta = \frac{E}{RT_0^2}(T - T_0)$ – температура; $\xi = \frac{r}{r_0}$ - координата ($0 \le \xi \le 1$), δ – тепловое сопротивление; t – время ($0 \le \tau < \infty$); r_0 – радиус сосуда, r – переменный радиус; E – энергия активации; R – газовая постоянная.

Безразмерный критерий β, как показал Д.А. Франк-Каменецкий [2], в процессе горения и воспламенения оказывает очень слабое влияние на поведение системы, поэтому в расчетах его можно принимать постоянным.

Уравнение (8) решено численно методом конечных разностей. Полученные температурные кривые характеризуют различный режим разогрева горючей смеси при изменении параметра δ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1 Пантелеев А.В., Якимова А.С., Босов А.В. Обыкновенные дифференциальные уравнения в примерах и задачах. – Москва: Высшая школа, 2001. – 375 с.

2 Франк-Каменецкий Д.Ф. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – Москва: Наука, 1967.

REFERENCES

1 Panteleev A.V., Jakimova A.S., Bosov A.V. Obyknovennye differencial'nye uravnenija v primerah i zadachah. – Moskva: Vysshaja shkola, 2001. – 375 s.

2 Frank-Kameneckij D.F. Diffuzija i teploperedacha v himicheskoj kinetike. – Moskva: Nauka, 1967.

ТҮЙІН

С.Н. Шарая, *физика-математика ғылымдарының кандидаты,*
А.В. Шварц
Инновациялық Еуразия университеті (Павлодар)

Химиялық технология есептерін модельдеу

Осы жұмыста дифференциалдық теңдеулермен сипатталатын химиялық технология есептерін шығарудың математикалық әдістері қарастырылған. Аналитикалық та, сандық та тәсіл арқылы бірқатар тәжірибелік есептердің шешімдері табылды.

Түйін сөздер: *дифференциалдық теңдеулер, аналитикалық шешімдер, сандық есеп, химиялық реакция, қосу концентрациясы, айнымалылардың өзгеру тәсілі, Эйлер әдісі, жалындау, тұтану.*

RESUME

S.N. Sharaya, *Candidate of Physical and Mathematical Sciences*
A.V. Shvarts
Innovative University of Eurasia (Pavlodar)

Modeling of chemical technology tasks

Annotation. *This article considers mathematical methods of solving problems of chemical technology described by differential equations. Solution of practical problems is obtained by analytical and numerical methods.*

Keywords*: differential equations, analytical solution, numerical computation, chemical reaction, concentration of the compound, variable variation method, Euler's method, inflammation, ignition.*