

DOI: 10.15643/vnpm-2023-46

АВТОМАТИЗАЦИЯ ФОРМИРОВАНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ КИНЕТИКИ ДЛЯ МНОГОСТАДИЙНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ

Коледина К.Ф.^{1,2} Лысенко Н.А.²

¹*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

²*Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия*

e-mail: nikitka_lysenko_2016@mail.ru

Изучение кинетики химических процессов имеет большое теоретическое и практическое значение, так как позволяет выяснить механизм реакций, открывая пути для сознательного управления процессом; появляется возможность ускорять желательные и замедлять нежелательные химические реакции [1].

Кинетический анализ является важной задачей в химической технологии, так как позволяет оптимизировать процессы синтеза и прогнозировать их эффективность. В случае многостадийных реакций, математическое описание кинетики является сложной задачей, так как процесс исследования кинетики и построение механизмов химических реакций подразумевает под собой обработку большого объема информации [2].

Автоматизация этого процесса позволяет значительно ускорить получение математического описания кинетики многостадийных реакций, снизить вероятность ошибок и упростить процесс работы с данными. Поэтому, автоматизация формирования математического описания кинетики является актуальной проблемой в химической технологии и решение этой проблемы важно для развития отрасли.

На данный момент существует множество методов формирования кинетических уравнений для многостадийных химических реакций, например “Метод химических событий” или “Метод средних значений скоростей реакции”. В данной работе мы предлагаем программный продукт, который автоматически формирует математическое описание с учётом кинетики, термодинамики и изменения объёма реакционной смеси.

В качестве входных данных такая программа принимает информацию о начальных концентрациях исходных реагентов, температуру химической реакции, предэкспоненциальные множители, энергии активации и схему реакции в виде стехиометрической матрицы.

На выходе программа формирует систему обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка, описывающих изменение концентраций веществ, температуры реакции и объёма реакционной смеси во времени. ОДУ решаются численно с помощью таких методов, как стандартный метод языка программирования Python (odeint) для решения дифференциальных уравнений первого порядка, Рунге-Кутты 4-го порядка, многошаговый метод Гира, и результаты представляются в виде графиков.

Такая автоматизация процесса описания кинетики химических реакций позволяет значительно ускорить и упростить работу специалистов в области химии и смежных дисциплин, а также повысить точность расчетов.

Литература

1. Холохонова Л.И., Короткая Е.В. Кинетика химических реакций: Учебное пособие. – / Кемеровский технологический институт пищевой промышленности. – Кемерово, 2004. – 80 с.
2. Файзуллин М.Р., Балаев А.В. Автоматизированная система исследования кинетики сложных химических реакций // Вестник Башкирского университета. 2008. №3. С. 835-839.