

ПРОГРАММА ДЛЯ РАССЧЕТА КОНСТАНТ СКОРОСТИ СИСТЕМЫ ПАРАЛЛЕЛЬНО-ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ РЕАКЦИЙ

Фомин В.Н.

НАО Карагандинский университет им. Е.А. Букетова

В химической технологии часто приходится иметь дело со сложными системами химических реакций, для управления которыми проводится изучение их термодинамики и кинетики. Важной стадией таких исследований является расчёт констант скорости всех реакций системы на основе экспериментальных данных. Пример такой системы рассмотрен в [1]. Концентрации пяти компонентов системы меняются в ходе десяти реакций, протекающих одновременно (Рис.1).

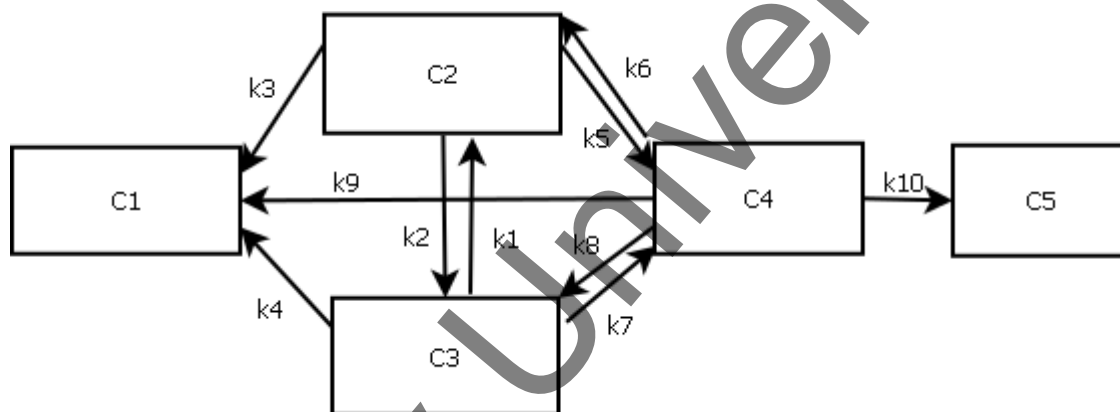


Рисунок 1. Схема процесса крекинга.

Ход процесса описывается системой из пяти дифференциальных уравнений первого порядка, которая, совместно с начальными и конечными концентрациями компонентов системы, с т.з. математики является примером краевой задачи. Решение краевых задач аналитическими методами требует хорошего знания математики и не всегда возможно [2]. Численные методы решения краевых задач реализованы во многих системах компьютерной алгебры, включая популярные проекты свободного ПО, такие как GNU Octave, SciLab, R [3,4] и др. Во всех случаях процедуры решения вызываются с большим набором параметров, значительную часть которых трудно считать интуитивно понятными без определенной математической подготовки и изучения соответствующего ПО. В связи с этим представляется актуальной разработка специализированной программы-калькулятора для решения этих задач.

В качестве среды разработки выбрана Embarcadero Delphi 10.4 Community Edition, позволяющая быстро разработать интерфейс и генерирующая нативные приложения Windows, которые исполняются многократно быстрее, чем интерпретируемые команды Python или математических пакетов.

Интерфейс программы, с загруженной задачей из работы [1], приведен на рисунке 2.

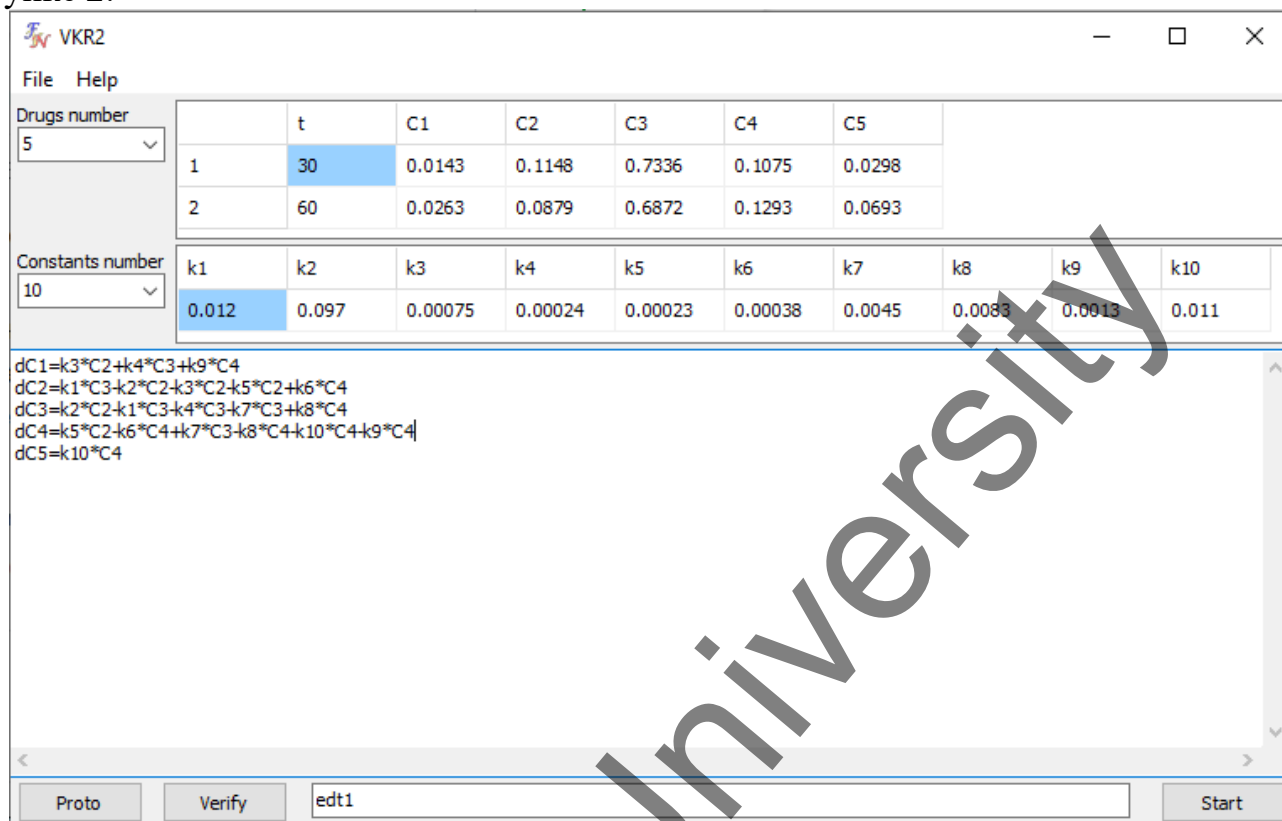


Рисунок 2. Главное окно программы.

Поиск констант скоростей реализован в виде итерационного алгоритма, изменяющего значения констант, изначально заданных пользователем, с шагом, задаваемым в настройках. Сочетания констант генерируются рекурсивной функцией. Лучший набор констант определяется по степени совпадения каждой из вычисленных конечных концентраций с экспериментально установленными.

В настоящее время проводится оптимизация парсера формул для ускорения расчета.

Литература

1. Гончаров А.В., Кривцов Е.Б. Расчет констант скоростей реакций термического крекинга и конденсации асфальтенов высокосернистых гудронов // Химия твердого топлива, 2022, № 2, с. 26-33.

2. Якимов А.С. Аналитический метод решения краевых задач - 2-е изд., доп. - Томск: Изд-во Том. ун-та, 2011. - 199 с.

3. R Core Team (2021). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <https://www.R-project.org/>.

4. John W. Eaton, David Bateman, Søren Hauberg, Rik Wehbring (2023). GNU Octave version 8.2.0 manual: a high-level interactive language for numerical computations. URL <https://www.gnu.org/software/octave/doc/v8.2.0/>

5. URL <https://www.embarcadero.com/ru/products/delphi/starter>