

Використання математичних методів у хімічних розрахунках

Дмитро Дятлов, Віра Іщенко, Ольга Седих, Світлана Маковецька
Національний університет харчових технологій

Вступ. Діяльність інженера-хіміка в умовах сучасного виробництва потребує проведення різних, як правило, досить складних, розрахунків. Обробка експериментальних даних у дослідній лабораторії, обґрунтування і вибір оптимальних умов проведення хімічного процесу, визначення об'ємів подачі і витрати сировини, розрахунок виходу хімічного продукту — усе це лише незначна частина обчислювальних задач, що постають перед хіміком.

Більшість таких розрахунків можна провести, використовуючи математичну систему MathCad, яка є одним із найкращих і найпопулярніших програмних продуктів для науково-технічних обчислень [1].

Матеріали і методи. Розглянемо розрахунок сумішей складного складу. Нехай для проведення експерименту потрібно приготувати суміш, яка містить m речовин. Причому в суміш повинно входити b_i одиниць (масових, об'ємних) i -ої речовини ($i=1, \dots, m$).

Відомо, що для приготування суміші є n компонентів, кожен j -ий з яких містить a_{ij} одиниць i -ої речовини ($j=1, \dots, n$).

Якщо позначити через x_j кількість j -го компоненту, яку необхідно взяти для приготування потрібної суміші, то сума

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n$$

дає необхідну в суміші кількість b_i речовини, тобто

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i \quad (1)$$

де ($i=1, \dots, m$)

Таким чином, процедура приготування суміші, що містить необхідну кількість деякої речовини, описується системою лінійних алгебраїчних рівнянь виду (1).

Результати. В роботі проведено обчислення, пов'язані із приготуванням нітруючої суміші. Нітруюча суміш повинна мати такий склад: H_2O – 25%, HNO_3 – 15%, H_2SO_4 – 60%. Суміш готують із меланжу (H_2O – 5%, HNO_3 – 85%, H_2SO_4 – 10%), олеуму (100% H_2SO_4) та 70%-го розчину сульфатної кислоти. На конкретному прикладі показано реалізацію даного завдання традиційним способом та з використанням математичної системи MathCad.

Висновки. Наведений розв'язок даної задачі у середовищі MathCAD показує, що застосування обчислювальних систем при вирішенні задач з хімії прискорює процес обчислень, підвищує надійність і достовірність обчислень. Таким чином, MathCAD є потужною і в той же час простою універсальною системою для вирішення завдань, яка використовується в різних галузях науки і техніки.

Література.

1. Неділько, С.А. Математичні методи в хімії: підручник/ С.А. Неділько. – Київ: Либідь, 2005. – 256 с.
2. Гурский, Д. А., Вычисления в MathCAD 12: учеб./ Д.А. Гурский, Е.С. Турбина. - Питер, 2006. – 544 с.