

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ПІВДЕННОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
імені К. Д. Ушинського
ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
імені І. І. Мечникова

ДВНАДЦЯТА ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
СТУДЕНТІВ І МОЛОДИХ НАУКОВЦІВ

ІНФОРМАТИКА, ІНФОРМАЦІЙНІ **СИСТЕМИ ТА ТЕХНОЛОГІЇ**

ПРИСВЯЧУЄТЬСЯ 150-РІЧЧЮ ОДЕСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО
УНІВЕРСИТЕТУ імені І. І. МЕЧНИКОВА



Одеса – 2015

РІШЕННЯ ПИТАНЬ ДОКАЗОВОЇ ХІМІЇ ЗАСОБАМИ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ

Ольга Седих, Світлана Маковецька

Національний університет харчових технологій

Відмінною рисою сучасного етапу розвитку природознавства є математизація, а використання математичних моделей різних явищ і процесів - її невід'ємна частина. Застосування математичних методів у хімії набуло великої популярності. Крім того, останнім часом особлива увага приділяється розробці питань доказової хімії, заснованої на застосуванні сучасних інформаційних технологій. Математичні методи використовуються і в хімічному виробництві різної продукції, що дозволяє проектувати створення оптимальних по ряду критеріїв.

Вступ. В даний час майже всі науково-технічні розрахунки ведуться на комп'ютерах. Для науково-технічних розрахунків, у тому числі і з хімічної проблематики, зручно використовувати не мови програмування і не табличні процесори, а так звані математичні програми. У даній роботі ми використовували пакет MathCAD, в середовищі якого можна успішно вирішувати як чисто хімічні задачі, так і задачі, що лежать на стику хімії та інших наукових дисциплін. Пакет MathCAD вигідно відрізняється від інших програм, що використовуються для науково-технічних розрахунків, у тому числі і в галузі хімії, такими особливостями: традиційний запис формул в тому вигляді, в якому вони зафіксовані в довідниках, підручниках і задачниках; можливість використовувати одиниці виміру в розрахунках.

Матеріали і методи. Розглянемо математичну модель багатокомпонентної суміші. Нехай M – маса суміші, а b_i – відсоток вмісту i -го компонента в суміші. Тоді для кожного компонента буде вірним наступний вираз:

$$\sum_{i=1}^q a_{ij} \cdot X_i = b_i \cdot M ,$$

де q – кількість компонентів суміші, X_i – вага i -го компонента.

Система таких рівнянь і є математичною моделлю даної суміші.

Розглянемо приклад проведення обчислень, пов'язаних із приготуванням нітруючої суміші. Нітруюча суміш, наприклад, масою 4250 кг повинна мати такий склад: H_2O – 22%, HNO_3 – 16%, H_2SO_4 – 62%. 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.

Реалізація в MathCAD:

Розрахунок нітруючої суміші

Початкові дані: Маса суміші $M := 4250$ кг

1. Меланж	$a_{11} := 5$	$a_{21} := 85$	$a_{31} := 10$
2. Олеум	$a_{12} := 0$	$a_{22} := 0$	$a_{32} := 100$
3. Розчин сульфатної кислоти	$a_{13} := 30$	$a_{23} := 0$	$a_{33} := 70$
4. Нітруюча суміш	$b_1 := 22$	$b_2 := 16$	$b_3 := 62$

ORIGIN := 1

$X_1 := 0$ $X_2 := 0$ $X_3 := 0$

Given

$$a_{11} \cdot X_1 + a_{12} \cdot X_2 + a_{13} \cdot X_3 = b_1 \cdot M$$

$$a_{21} \cdot X_1 + a_{22} \cdot X_2 + a_{23} \cdot X_3 = b_2 \cdot M$$

$$a_{31} \cdot X_1 + a_{32} \cdot X_2 + a_{33} \cdot X_3 = b_3 \cdot M$$

$Z := \text{Find}(X_1, X_2, X_3)$

$$Z = \begin{pmatrix} 800 \\ 466.667 \\ 2.983 \times 10^3 \end{pmatrix}$$

Перевірка правильності рішення: $Z_1 + Z_2 + Z_3 = 4.25 \times 10^3$

Рівняння матеріального балансу по кожному параметру суміші

Висновки. Наведене в даних тезах чисельне рішення хімічної 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 рішення завдань, яка використовується різними галузями науки і техніки, в тому числі і в хімії.

Література

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