Іваніцька А. А., студентка, Лагода О. А., доцент
Київський національний університет технологій та дизайну

ЗАСТОСУВАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ У ХІМІЇ

Анотація. *Описано алгоритм побудови диференціальної моделі, яка містить диференціальне рівняння 1 порядку. Побудовано конкретну диференціальну модель для рівняння хімічної реакції, що складається з двох певних реакцій першого порядку. Знайдено розв'язок та написано програму на мові Python для отримання концентрацій в різні моменти часу та за різної температури.*

Ключові слова: *диференціальна модель; диференціальне рівняння; хімічна реакція першого порядку; речовина; концентрація речовини; швидкість реакції; математика в хімії.*

Ivanitska A. A., Lahoda O. A.
Kyiv National University of Technologies and Design

APPLYING OF DIFFERENTIAL EQUATIONS IN CHEMISTRY

Abstract. *The algorithm for constructing a differential model containing a differential equation of order 1 has been described. A specific differential model for the chemical reaction equation, consisting of two specific reactions of the first order has been constructed. A solution was found and a program written in Python to obtain concentrations at different points in time and at different temperatures.*

Keywords*: differential model; differential equation; first-order chemical reaction; substance; concentration of a substance; reaction rate; mathematics in chemistry.*

Вступ. Сучасний хімік-технолог потребує застосування математичного моделювання та статистики при проведенні хімічних, біофармацевтичних та фармакологічних досліджень, а також впровадженням нових технологій фармацевтичного виробництва у розробку лікарських препаратів [1, 2].

Зокрема, основу статистичної термодинаміки складає теорія ймовірностей, органічна хімія для передбачення властивостей складних органічних молекул використовує теорію графів, хімічна термодинаміка широко використовує методи топології та диференціальної геометрії, а основний інструмент хімічної кінетики – диференціальні рівняння [3, с. 39].

Теорія диференціальних рівнянь є одним із найбільших розділів сучасної математики, яка продовжує активно розвиватися [4–10]. Саме застосуванню диференціального рівняння до розв'язання прикладної хімічної задачі і присвячена дана стаття. Диференціальне рівняння – це рівняння для відшукання функцій, похідні або диференціали яких задовольняють деякі наперед задані умови. Диференціальною моделлю якого-небудь явища чи процесу називають диференціальне рівняння, яке отримане в результаті дослідження цього реального явища або процесу. Варто зазначити, що при розв'язанні хімічних технологічних задач зустрічаються різні типи диференціальних рівнянь. Наприклад, процес хлорування органічних сполук, витрата реагенту при максимальному виході цільового продукту в складних реакціях потребують розв'язання однорідного диференціального рівняння першого порядку. Система оборотних реакцій, що протікають при постійному об'ємі, закон руху частинки, що випадає в осад в рідині без початкової швидкості, та безперервний процес гідролізу твердого жиру в розпилювальній колонці приводять до неоднорідних диференціальних рівнянь другого порядку зі сталими коефіцієнтами [11]. З диференціальними рівняннями другого порядку, що допускають зниження порядку, пов'язаний рух рідини в капілярах.

Постановка завдання. Метою представленого у статті наукового дослідження є опис загального алгоритму побудови диференціальної моделі 1 порядку, побудова конкретної диференціальної моделі, розв'язання отриманого диференціального рівняння та відповідної задачі Коші, написання програми на мові Python для отримання концентрацій в різні моменти часу та за різної температури.

Результати досліджень.

Для побудови диференціальної моделі задачі з фізико-хімічним змістом можна рекомендувати таку послідовність дій:

1. Встановити, яким законам підпорядковується даний процес та вирішити, що вибрати за незалежну змінну (наприклад, час t), а що за шукану функцію (наприклад, $y = y(t)$.
2. Виходячи з умов завдання, визначити початкові умови (наприклад, $y_0 = y(t_0)$).
3. Відобразити всі наявні в задачі величини через t, y, y′, використовуючи при цьому фізичний зміст похідної як швидкості зміни функції y в досліджуваному процесі.
4. Виходячи з умов завдання та на підставі фізичного закону, якому підпорядковується даний процес, скласти диференціальне рівняння.
5. Знайти загальний інтеграл диференціального рівняння.
6. За початковими умовами знайти частинний розв'язок.

При розв'язанні великої кількості фізико-хімічних задач слід знати, що швидкість зміни змінної величини пропорційна самому значенню цієї змінної.

Такі процеси називаються процесами першого порядку і описуються рівнянням:

$$\frac{dx}{dt} = kx.$$

У разі хімічної реакції величини, що входять до неї, означають: x – кількість речовини в одиниці об'єму, k – постійну величину при заданій температурі (стала швидкості реакції), t – час.

До таких процесів належить радіоактивний розпад, зміна концентрації розчину, хімічна реакція, що відбувається відповідно до стехіометричного рівняння типу A→B, закон охолодження тіла та ін. [12, с. 40].

Розглянемо приклад.

Для хімічної реакції, що складається з двох реакцій першого порядку

$$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C \text{ (послідовна реакція)},$$

за умови, що відомі сталі швидкості реакцій $y_{A_0}, y_{B_0}, y_{C_0,}$ визначити концентрації y_B та y_C в моменти часу 60с, 90с, 120с, якщо $y_{A_0} = 3\,\frac{\text{кмоль}}{\text{м}^3}$, $y_{B_0} = 0$, $y_{C_0} = 0$. а k_1 та k_2 залежно від температури набувають таких значень

Температура	k_1 (10^{-3}с$^{-1}$)	k_2 (10^{-3}с$^{-1}$)
28	93	27.7
40	124	61
60	171	111
70	217	151
80	279	215

Нехай y_A, y_B, y_C – відповідно концентрації речовин A, B, C. Рівняння швидкості реакції для речовини A:

$$\frac{dy_A}{dt} = -k_1 y_A \quad (1)$$

Речовина B утворюється з речовини A, тому швидкість утворення речовини B пропорційна концентрації речовини A у відповідний момент часу t. Сама речовина B є джерелом речовини C і швидкість розпаду (зворотного процесу утворення) речовини B пропорційна його концентрації у відповідний момент часу. Ці два процеси протікають одночасно; швидкість зміни кількості B визначається рівнянням [6, с. 41]

$$\frac{dy_B}{dt} = k_1 y_A - k_2 y_B \quad (2)$$

Швидкість реакції утворення речовини C визначається концентрацією y_B, відповідне рівняння має вигляд:

$$\frac{dy_C}{dt} = k_2 y_B \quad (3)$$

Рівняння (1) – це диференціальне рівняння з відокремлюваними змінними. Його розв’язок:

$$y_A = y_{A_0} e^{-k_1 t} \quad (4)$$

Якщо підставимо (4) у рівняння (2), то отримаємо лінійне диференціальне рівняння першого порядку:

$$\frac{dy_B}{dt} + k_2 y_B = k_1 y_{A_0} e^{-k_1 t}. \quad (5)$$

Розв’яжемо це рівняння, використовуючи метод Бернуллі.

$$y_B = u(t)v(t), y_B' = u'(t)v(t) + u(t)v'(t). (6)$$

Підставимо (6) у рівняння (5)

$$u'v + uv' + k_2 uv = k_1 y_{A_0} e^{-k_1 t},$$
$$u'v + u(v' + k_2 v) = k_1 y_{A_0} e^{-k_1 t}, (7)$$

та покладемо

$$v' + k_2 v = 0. \quad (8)$$

Рівняння (7) – це диференціальне рівняння з відокремлюваними змінними. Розв’яжемо його

$$\int \frac{dv}{v} = -k_2 \int dt, \ \ln v = -k_2 t, v = e^{-k_2 t}.$$

Підставимо знайдене v у рівняння (7)

$$u' e^{-k_2 t} = k_1 y_{A_0} e^{-k_1 t}$$

Після спрощення та інтегрування будемо мати u

$$u' = k_1 y_{A_0} e^{-(k_1 - k_2)t}, u = \frac{k_1 y_{A_0}}{k_2 - k_1} e^{-(k_1 - k_2)t} + C$$

Підставивши u та v отримаємо шукану концентрацію y_B

$$y_B = \frac{k_1 y_{A0}}{k_2 - k_1} e^{-(k_1 - k_2)t} e^{k_2 t} + C e^{-k_2 t}$$

Залишилось розв’язати задачу Коші, щоб знайти С. В момент часу t = 0 концентрація була рівна y_{B_0}, тому маємо

$$y_{B_0} = \frac{k_1 y_{A0}}{k_2 - k_1} + C;\ C = y_{B_0} - \frac{k_1 y_{A_0}}{k_2 - k_1}.$$

Тому

$$y_B = \frac{k_1 y_{A_0}}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} + y_{B_0} e^{-k_1 t} - \frac{k_1 y_{A_0}}{k_2 - k_1} e^{-k_2 t}.$$

Остаточно

$$y_B = y_{B_0} e^{-k_2 t} + \frac{k_1 y_{A_0}}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}).$$

Щоб знайти y_c запишемо рівняння матеріального балансу:

$$y_{A_0} + y_{B_0} + y_{C_0} = y_A + y_B + y_C.$$

Звідси

$$y_C = y_{A_0} + y_{B_0} + y_{C_0} - y_A - y_B$$

$$y_C = y_{A_0} + y_{B_0} + y_{C_0} - y_{A_0} e^{-k_1 t} - y_{B_0} e^{-k^2 t} - \frac{k_1 y_{A_0}}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}).$$

Використовуючи онлайн програмування на мові Pyton [(Online IDE – Code Editor, Compiler, Interpreter (online-ide.com))] знайдемо значення концентрацій. Необхідна програма:

```
import math

time = [60, 90, 120]
k1 = [0.093, 0.124, 0.171, 0.217, 0.279]
```

```
k2 = [0.0277, 0.061, 0.111, 0.151, 0.215]

A0 = 3000
B0 = 0
C0 = 0
for t in time:
 print('t =',t)
 for i in range(5):
 yb = B0 * math.exp(-t * k2[i]) + A0 * k1[i] / (k2[i] - k1[i]) * (math.exp(-t * k1[i]) -
math.exp(-t * k2[i]))
 print('yb =', round(yb , 3))
for t in time:
 print('t =',t)
 for i in range(5):
 yc = A0 + B0 + C0 - A0 * math.exp(-t * k1[i]) - B0 * math.exp(-t * k2[i]) - A0 * k1[i] /
(k2[i] - k1[i]) * (math.exp(-t * k1[i]) - math.exp(-t * k2[i]))
 print('yc =', round(yc , 3))
```

Оформимо отримані результати у вигляді таблиці

Темпера-тура, °С	Сталі швидкості реакцій		Час, сек					
			60		90		120	
t	k_1	k_2	y_B	y_C	y_B	y_C	y_B	y_C
28	0.093	0.028	794.644	2194.039	352.189	2647.116	153.789	2846.169
40	0.124	0.061	148.477	2849.762	24.29	2975.667	3.908	2996.091
60	0.171	0.111	10.655	2989.24	0.39	2999.609	0.014	2999.986
70	0.217	0.151	1.125	2998.869	0.012	2999.988	0.0	3000.0
80	0.279	0.215	0.032	2999.968	0.0	2647.116	0.0	3000.0

Висновки. Наведено загальний алгоритм побудови диференціальної моделі 1 порядку, побудовано конкретну диференціальну модель, якій відповідає задача Коші для лінійного диференціального рівняння 1 порядку. Розв’язано отримане лінійне диференціальне рівняння методом Бернуллі. За допомогою написаної на мові Python програми обчислено концентрації в різні моменти часу та за різної температури з точністю до третього знаку. Програма є корисною у випадку зміни початкових умов і дозволяє отримати концентрації в довільний момент часу та з довільною точністю.

Список використаної літератури

1. Жовтоніжко І. М. Роль фізико-математичних дисциплін у процесі підготовки майбутніх фармацевтів. С. 98–100. URL: https://dspace.nuph.edu.ua/bitstream/123456789/15031/1/97-100.pdf.
2. Жовтоніжко І. М., Бабакішієва Є. Н. Роль математики у підготовці майбутніх фахівців фармацевтичної галузі. *Викладання мов у вищих навчальних закладах освіти на сучасному етапі: тези XIX Міжнар. наук.-практ. конф.* (4-5 черв. 2015 р., Харк. нац. ун-т імені В. Н. Каразіна). Х., 2015. С. 7–8.
3. Гальченко Д. О. Формування математичного світогляду в процесі вивчення диференціальних рівнянь. *Всеукраїнська дистанційна науково-методична конференція з міжнародною участю, ІТМ*плюс – 2011*. С. 14–15 URL: https://repository.sspu.edu.ua/bitstream/123456789/10802/1/Halchenko.pdf.
4. Ляшко І. І., Боярчук О. К., Гай Я. Г., Калайда О. Ф. Диференціальні рівняння. К.: Вища школа, 1981.
5. Парасюк І. О. Вступ до якісної теорії диференціальних рівнянь. К.: ВПЦ "Київський університет", 2005.
6. Парасюк І. О., Перестюк М. О. Локальний аналіз нелінійних диференціальних рівнянь. К.; П.: Аксіома, 2013.
7. Перестюк М. О., Чернікова О. С. Теорія стійкості. К.: ВПЦ "Київський університет", 2009.
8. Самойленко А. М., Перестюк М. О., Парасюк І. О. Диференціальні рівняння. К.: Либідь, 2003.

9. Самойленко А. М., Кривошея С. А., Перестюк М. О. Диференціальні рівняння в задачах. К.: Либідь, 2003.
10. Самойленко А. М., Станжицький О. М. Якісний та асимптотичний аналіз диференціальних рівнянь з випадковими збуреннями. К.: Наукова думка, 2009.
11. Бухкало С. І. Деякі моделі процесів хімічного спінювання вторинного поліетилену. *Вісник НТУ «ХПІ»*. 2017. № 18 (1240). С. 35–45. URL: http://library.kpi.kharkov.ua/files/Vestniki/2018_18.pdf.
12. Пріщенко О. П., Черногор Т. Т. Аналіз прикладів застосовування диференціальних рівнянь в хімічній та харчовій технології. *Вісник Національного Технічного Університету «ХПІ»*. 2018. № 40. С. 39–45. URL: http://repository.kpi.kharkov.ua/bitstream/KhPIPress/39365/1/vestnik_KhPI_2018_40_Prishchenko_Analiz_prykladiv.pdf.