Рисунок 3-Линейный тренд

Как видно из рис.3 показатель достоверности 0,531, она показывает, что с ростом инфляции имеется тенденция снижения продаж.

1. Айвазян С. А., Мхитарян В. С. Прикладная статистика и основы эконометрики. — М.: ЮНИТИ, 1998.
2. Баврин И.И. Теория вероятностей и математическая статистика / И.И. Баврин. - М.: Высш. шк., 2005. 160 с:
3. Вадзинский Р. Статистические вычисления в среде Excel. Библиотека пользователя. - СПб.: Питер, 2008. — 608 с.
4. Вентцель Е. С. Задачи и упражнения по теории вероятностей: Учеб. пособие для студ. втузов / Е. С. Вентцель, Л. А. Овчаров. 5-е изд., испр. - М.: Издательский центр «Академия», 2003. 448 с.
5. Гмурман В. Е. Руководство к решению задач по теории вероятностей и математической статистике /В. Е. Гмурман. - М., Высш.шк., 2004. - 404 с.
6. Сидняев, Н. И. Теория планирования эксперимента и анализ статистических данных: учеб. пособие для магистров / Н. И. Сидняев. – М.: Юрайт, 2012. – 399 с.

Логинова Е.А.

Применение обыкновенных дифференциальных уравнений в химии

*ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет
(Россия, Воронеж)*

doi: 10.18411/lj-07-2020-25

idsp: lj-07-2020-25

Аннотация

Необходимость изучения математических дисциплин часто вызывает массу вопросов у студентов непрофильных направлений. Это обусловлено во многом тем, что обучающиеся не знают, где в их специальности можно применять полученные знания. В статье рассматривается приложение такого раздела математики как дифференциальные уравнения к химии. В работе показано, какие химические процессы описываются дифференциальными уравнениями, построены модели процессов, представлены решения построенных моделей.

Ключевые слова: обыкновенное дифференциальное уравнение, линейное уравнение, химические процессы, описываемые дифференциальными уравнениями

Abstract

The need to study mathematical disciplines often raises a lot of questions among non-core students. This is largely due to the fact that students do not know where their knowledge can be applied in their specialty. The article considers the application of such a branch of mathematics as differential equations to chemistry. The work shows which chemical

processes are described by differential equations, constructed process models, presented solutions of the constructed models.

Keywords: ordinary differential equation, linear equation, chemical processes described by differential equations

Наиболее простым типом обыкновенных дифференциальных уравнений являются уравнения с разделяющимися переменными.

В общем случае такое уравнение можно описать формулой [1]

$$f_1(x)g_1(y)dx + f_2(x)g_2(y)dy = 0, \quad (1)$$

где f_1, g_1, f_2, g_2 - заданные функции.

Уравнение (1) необходимо поделить на произведение $g_1(y)f_2(x) \neq 0$, после чего проинтегрировать получившееся выражение. Общее решение уравнения (1) имеет вид

$$\int \frac{f_1(x)}{f_2(x)} dx + \int \frac{g_2(y)}{g_1(y)} dy = c,$$

где $c = const$. Также из выражения $g_1(y)f_2(x) = 0$ можно получить особые решения.

Уравнения с разделяющимися переменными находят свое приложение в химической термодинамике [4].

Например, если смешать в пробирке некоторое количество водных растворов карбоната натрия и соляной кислоты, после чего закрыть пробирку пробкой, то через некоторое время получившийся раствор совершит механическую работу A , в результате которой пробка вылетит из пробирки. При этом температура растворов остается практически неизменной. В пробирке, закрытой пробкой, образуется повышенное давление, которое сравнивается с атмосферным давлением в момент вылета пробки, в этот момент и совершается работа. В рассматриваемом случае работа представляет собой работу по расширению газа в изобарном процессе, т.е. при постоянном давлении.

Математически, запись имеет вид

$$\Delta A = p\Delta V, \quad (2)$$

где ΔA - изменение работы, ΔV - изменение объема, $p = const$ - давление.

В терминах дифференциалов уравнение (2) можно записать формулой

$$dA = p dV. \quad (3)$$

Уравнение (3) – уравнение с разделяющимися переменными. Решая его описанным выше способом, с учетом того, что известны начальный V_1 и конечный V_2 объемы, получим

$$A = \int_{V_1}^{V_2} p dV = p \int_{V_1}^{V_2} dV = pV \Big|_{V_1}^{V_2} = p(V_2 - V_1).$$

Другим примером является уравнение адиабатного процесса или уравнение Пуассона [5]

$$pV^\gamma = const, \quad (4)$$

где V - объем газа, p - давление газа, γ - показатель адиабаты.

Выражение (4) представляет собой решение дифференциального уравнения с разделяющимися переменными

$$\gamma p dV + V dp = 0,$$

которое в свою очередь выводится из уравнения Менделеева-Клапейрона и первого закона термодинамики для адиабатного процесса.

Рассмотрим еще один тип обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка – линейные уравнения, т.е. уравнения, которые задаются формулой [1]

$$y' + p(x)y = g(x), \quad (5)$$

где $f(x)$, $g(x)$ - известные функции.

Для решения уравнения (5) можно использовать метод И. Бернулли или метод Лагранжа вариации произвольной постоянной [1].

Общее решение уравнения (5) имеет вид

$$y = \left(\int g(x)e^{\int p(x)dx} + c \right) e^{-\int p(x)dx},$$

где c - произвольная константа.

Примером химического процесса, описываемого линейным неоднородным дифференциальным уравнением первого порядка, является уравнение скорости последовательно протекающих реакций перехода вещества в раствор [3].

Уравнение имеет вид

$$\frac{dx}{dt} = k_1 e^{-k_1 t} - k_2 x, \quad (6)$$

где k_1 , k_2 - известные постоянные коэффициенты пропорциональности, t - время, искомая функция $x = x(t)$ - концентрация соединения, т.е. количество вещества, перешедшего в раствор ко времени t .

Предполагается, что в начальный момент $t = 0$ вещество в раствор не поступало, т.е. задано условие

$$x(0) = 0. \quad (7)$$

Решим уравнение (6) методом Бернулли. Для этого перепишем его в виде

$$x' + k_2 x = k_1 e^{-k_1 t}. \quad (8)$$

Функцию $x = x(t)$ будем искать как произведение двух функций $x(t) = u(t) \cdot v(t)$, тогда $x'(t) = u'(t) \cdot v(t) + u(t) \cdot v'(t)$.

Подставим получившиеся выражения в формулу (8):

$$u'(t) \cdot v(t) + u(t)(v'(t) + k_2 v(t)) = k_1 e^{-k_1 t}. \quad (9)$$

Согласно методу И. Бернулли приравняем к нулю выражение $v'(t) + k_2 v(t)$.

Получим обыкновенное дифференциальное уравнение с разделяющимися переменными

$$v'(t) + k_2 v(t) = 0,$$

решая его, находим $v = e^{-k_2 t}$.

Подставим найденное значение v в формулу (9), которая примет вид

$$u'(t)e^{-k_2 t} = k_1 e^{-k_1 t},$$

или

$$\frac{du}{dt} = k_1 e^{(-k_1 + k_2)t}.$$

уравнение с разделяющимися переменными. Решая его, находим

$$u = \frac{k_1}{k_2 - k_1} \cdot e^{(k_2 - k_1)t} + c,$$

где $c = const$.

Таким образом, общее решение уравнения (6) задается равенством $x(t) = u(t) \cdot v(t) = \left(\frac{k_1}{k_2 - k_1} \cdot e^{(k_2 - k_1)t} + c \right) e^{-k_2 t}$. Используя условие (7), окончательно получим

$$x(t) = \frac{k_1}{k_2 - k_1} \cdot (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}). \quad (10)$$

Итак, зная конкретные значения k_1 , k_2 , можно по формуле (10) вычислить концентрацию соединения в любой момент времени t .

Свое применение в химии находят и дифференциальные уравнения порядков, выше первого.

Некоторые процессы можно описать с помощью линейных дифференциальных уравнений второго порядка с постоянными коэффициентами.

В общем виде неоднородное дифференциальное уравнение такого типа записывается формулой [1]

$$y'' + a(x)y' + b(x)y = f(x), \quad (11)$$

где $a(x), b(x), f(x)$ - заданные, непрерывные на некотором интервале (a, b) функции.

Общее решение уравнения (11) записывается как сумма общего решения соответствующего однородного уравнения и частного решения неоднородного уравнения (11).

Уравнение типа (11) описывает, в частности, непрерывный процесс гидролиза твердого жира в распылительной колонне. В этом случае уравнение (11) принимает вид [2]

$$\frac{d^2 y}{dh^2} + (p + q) \frac{dy}{dh} + pqy = \frac{pq}{r - 1} \left(ry_0 - \frac{mz_0}{w} \right), \quad (12)$$

где h - длина колонны, m - коэффициент распределения, w - количество жира на 1 кг глицерина, z - массовая доля гидролизующегося жира в рафинате, $y(h)$ - доля глицерина в экстракте, h - длина колонны. Через p, q, r обозначены следующие величины:

$$p = \frac{k\rho S}{L}, \quad q = \frac{kaS}{G}(r - 1), \quad r = \frac{mG}{L},$$

где k - константа скорости реакции, ρ - масса жира на единицу объема колонны, S - площадь поперечного сечения колонны, L - скорость движения рафината (кг/ч), a - межфазная поверхность на единицу объема колонны, G - скорость движения экстракта (кг/ч).

Для построения решения уравнения (12) для начала необходимо выписать характеристическое уравнение соответствующего (12) однородного уравнения. Оно имеет вид

$$\lambda^2 + (p + q)\lambda + pq = 0.$$

Корнями получившегося уравнения будут функции $y_1 = -p$, $y_2 = q$. Следовательно, общее решение однородного уравнения, соответствующего (12), можно выписать равенством

$$y = ae^{-ph} + be^{qh}, \quad (13)$$

где a, b - произвольные константы.

Правая часть уравнения (12) представляет собой число, следовательно, частное решение (12) будем искать в виде: $y_q = c$, $c = const$. Подставляя y_q в равенство (12), получим

$$y_q = \frac{1}{r-1} \left(ry_0 - \frac{mz_0}{w} \right).$$

Таким образом, общее решение уравнения (12) задается формулой

$$y = ae^{-ph} + be^{qh} + \frac{1}{r-1} \left(ry_0 - \frac{mz_0}{w} \right).$$

Если уравнение (12) дополнить начальными условиями, то можно найти конкретные значения постоянных a, b .

Безусловно, рассмотренными примерами не исчерпывается применение дифференциальных уравнений в химии. Большое количество процессов описывается дифференциальными уравнениями в частных производных, а также более сложными, чем рассмотренные в статье, обыкновенными дифференциальными уравнениями. Кроме того, одним и тем же типом уравнений могут задаваться различные процессы.

При решении дифференциальных уравнений, описывающих химические процессы, необходимо иметь ввиду, что свойства конкретных веществ и величин накладывают ограничения на свойства решений уравнений, т.е. из всего множества абстрактных решений иметь химический смысл может только несколько функций.

Таким образом, теория дифференциальных уравнений активно применяется в различных направлениях химии и, следовательно, данный раздел математики необходимо изучать студентам химических факультетов.

1. Письменный Д. Т. Конспект лекций по высшей математике. Полный курс / Д. Т. Письменный. – 14-е издание. – М. : Айрис-Пресс, 2017. – 608 с.
2. Батунер Л. М. Математические методы в химической технике / Л. М. Батунер, М. Е. Позин. – 6-е издание. – Л. : Изд-во «Химия», 1971. – 824 с.
3. Шарая С. Н. Моделирование задач химической технологии / С. Н. Шарая, А. В. Шварц // Вестник Инновационного Евразийского университета. – 2014. – С. 145 -147.
4. Загорский В. В. Лекции по общей и неорганической химии / В. В. Загорский. – URL: <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/general/welcome.html> (дата обращения 17.06.2020).
5. Литневский Л. А. Три закона термодинамики (лекция) / Л. А. Литневский. – URL: <https://www.omgups.ru/university/employees/441/> (дата обращения 17.06.2020).