

**KIMYOVIY-TEXNOLOGIK JARAYONLARNI MATEMATIK
MODELLASH, MA'LUMOTLARNI QAYTA ISHLASH***Turayev Qahramon Nortojoyevich**“Matematik analiz” kafedrasida katta o'qituvchisi*

Annotatsiya: Maqolada kimyoviy -texnologik jarayonlarni matematik modellash, ma'lumotlarni qayta ishlash to'g'risida keng ma'lumotlar berilgan.

Kalit so'zlar: matematik modellar, eksperimentlar, asimptotik usullar, tamoyillar, balans.

KIRISH:

Ushbu darslikning maqsadi o'quvchiga kimyo muhandisligida matematik modellarni shakllantirish, qurish, soddalashtirish, baholash/talqin qilish va ulardan foydalanish bo'yicha tushuncha va ko'nikma berishdir. Modellarning tipik sinflari uchun yechish usullarining umumiy ko'rinishi berilgan bo'lsa ham, bu matematik modellarning yechimi haqidagi kitob emas.

Har xil turdagi va murakkablikdagi modellar kimyo muhandisligida tobora ko'proq foydalanilmoqda, masalan. reaktorlar, separatorlar va issiqlik almashtirgichlarni loyihalash, kattalashtirish/pasaytirish, optimallashtirish va ishlatish uchun. Matematik modellar eksperimentlarni rejalashtirish va baholashda hamda murakkab tizimlarni mexanik tushunishni rivojlantirish uchun ham qo'llaniladi. Masalan, differensial yoki integral shakldagi muvozanat modellari va muvozanat modellari kabi algebraik modellar.

Kitob modelni shakllantirishni o'z ichiga oladi, ya'ni matematik tilda fizik/kimyoviy haqiqatni qanday tasvirlash, modelning turi va murakkablik darajasini qanday tanlash kerak. Ta'kidlanishicha, bu iterativ protsedura bo'lib, unda modellar bosqichma-bosqich takomillashtiriladi yoki tajribalar bilan qarama-qarshilikdan rad etiladi. Modelni qisqartirish va taxminiy usullar, masalan, o'lchovli tahlil, vaqt doimiy tahlili va asimptotik usullar ko'rib chiqiladi. Modellarning tipik sinflari uchun yechim usullarining umumiy ko'rinishi berilgan. Modelni yaratishda yakuniy qadamlar sifatida parametrlarni baholash va modelni tekshirish va baholash muhokama qilinadi.

ASOSIY QISM:

Molekulyar tavsif: Hozirgi sharoitda jarayonlarning eng fundamental tavsifi molekulyar mulohazaga asoslanadi. Molekulyar tavsif o'zboshimchalik bilan tuzilgan tizimga go'yo har biri ma'lum qoidalarga bo'ysunadigan alohida ob'ektlardan tashkil topgandek munosabatda bo'lishi bilan ajralib turadi. Shunday qilib, tizimning xususiyatlari va holati o'zgaruvchilari barcha ob'ektlarni yig'ish orqali olinadi. Kvant mexanikasi, muvozanat va muvozanatsiz statistik mexanika va klassik mexanika tipik tahlil usullari bo'lib, ular yordamida tizimning xossalari va javoblarini hisoblash mumkin.

Mikroskopik tavsif

Mikroskopik tavsif jarayonning uzluksizligi va massa, impuls va energiya balanslarini fenomenologik tenglamalar shaklida yozishni nazarda tutadi.

Balans va saqlanish tamoyillari va oqimlar uchun konstitutsiyaviy munosabatlarni

qo'llash orqali matematik modellarni shakllantirish - bu bobning mavzusi. Maqsad o'quvchiga quyidagi vositalar va ko'nikmalarni berishdir:

impuls, issiqlik, massa va raqamlar (aholi balanslari) uchun differentsial yoki makroskopik nazorat hajmlari bo'yicha balanslardan foydalangan holda modellarni qurish; umumiy model tenglamalarini soddalashtirish orqali modellar qurish.

Balanslar va saqlash tamoyillari

Modelni shakllantirishdan oldin tizim chegarasini aniqlash juda muhimdir. Chegaraning maqsadi tizimni uning atrofiga nisbatan belgilashdir. Aralashirma idish atrofida chiziqli doira bilan ajratiladi. Ushbu chegara doirasidagi barcha muhim hodisalar muvaffaqiyatli modelga kiritilishi kerak. Tizim. chegara turli yo'llar bilan tanlanishi mumkin, lekin ko'pchilik tizimlar uchun chegara tabiiydir. Fizik-kimyoviy tamoyillardan kelib chiqqan modellar odatda umumiy muvozanat kontseptsiyasiga asoslanadi:

Bu munosabat juda umumiydir. Model yaratishning maqsadi og'zaki tushunchani qiziqish miqdoriga xos bo'lgan matematik bayonotlarga aylantirishdir. Biz massa, energiya va impulsni, shuningdek, masalan, entropiya va hisoblanuvchi ob'ektlarni, masalan, o'lcham va yosh taqsimotini (aholi balansi) muvozanatlashimiz mumkin. Bu jismlarning ba'zilar, masalan, umumiy massasi saqlanib qoladi, ba'zilar esa, masalan, aralashmadagi turning massasi (kimyoviy reaksiyalar tufayli) saqlanib qolmaydi.

Balans printsiptan foydalanib, biz belgilangan tizim chegarasidagi miqdorlarni muvozanatlash orqali model tenglamalarini olishimiz mumkin. Muhim balans tenglamalarining bir nechta misollari quyida keltirilgan.

Umumiy (jami) massa balansi

Umumiy umumiy massa balansi tizimdagi umumiy massani tavsiflaydi. Shubhasiz, faqat bitta umumiy massa balansi tenglamasi bo'lishi mumkin va aniq hosil qilish muddati nolga teng, ya'ni massa saqlangan miqdordir.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR:

1. Bird, R.B., W.E. Stewart, and F.N. Lightfoot, Transport Phenomena, 2nd edn. New York: Wiley, 2002.
2. Levenspiel, O., Chemical Reaction Engineering, 3rd edn. New York: Wiley, 1999.
3. Welty, J.R., C.E. Wicks, and R.E. Wilson, Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer, 5th edn. Hoboken, NJ: Wiley, 2007.
4. Kunes, J., Dimensionless Physical Quantities in Science and Engineering. Burlington, MA: Elsevier, 2012.
5. Le Veque, R.J., Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems. Philadelphia, PA: SIAM, 2007.
6. Sauer, T., Numerical Analysis. Boston, MA: Pearson, 2012.