

Всероссийское СМИ

«Академия педагогических идей «НОВАЦИЯ»

Свидетельство о регистрации Эл №ФС 77-62011 от 05.06.2015 г.

(выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций)

Сайт: akademnova.ru

e-mail: akademnova@mail.ru

Насырова Р.Р. Моделирование кинетики процесса получения полибутилакрилата // Академия педагогических идей «Новация». – 2017. – № 02 (февраль). – АРТ 08-эл. – 0,2 п. л. – URL: <http://akademnova.ru/page/875548>

РУБРИКА: ПРОФЕССИОНАЛЬНОЕ ОБРАЗОВАНИЕ

УДК 004

Насырова Рамиля Рустемовна

Магистр, 2 курс, факультет дизайна и программной инженерии

ФГБОУ ВО «Казанский национальный

исследовательский технологический университет»,

г. Казань, Республика Татарстан, Российская Федерация

e-mail: ramilya.rami2016@yandex.ru

**Моделирование кинетики процесса получения
полибутилакрилата**

Аннотация: В статье рассмотрено решение дифференциального уравнения методом Рунге-Кутты с помощью пакета вычислительной математики WolframMathematica 8.

Ключевые слова: дифференциальные уравнения, метод Рунге-Кутты, пакет вычислительной математики WolframMathematica 8.

Nasyrova Ramilya Rustemovna

Master, 2nd year, Design and Software Engineering Faculty

FGBOU IN «Kazan National Research Technological University»

Kazan, Republic of Tatarstan, Russian Federation

e-mail: ramilya.rami2016@yandex.ru

Modeling the kinetics process of obtaining polybutyl acrylate

Abstract: The article considers the decision by the Runge-Kutta method of differential equation using Computational Mathematics WolframMathematica 8 package.

Keywords: differential equations, Runge-Kutta method, the packet computing matematiki WolframMathematica 8.

Теория дифференциальных уравнений является самым огромным разделом современной арифметики. Уравнение, где безызвестной величиной является некая функция называется дифференциальным уравнением. Вдобавок, в самом уравнении участвуют не только лишь неведомая функция, да и разные ее производные. Дифференциальным уравнением изъясняется ассоциация меж безызвестной функцией и ее производными. Такого рода последовательности раскрываются в разных областях познаний: в механике, физике, химии, биологии, экономике и др.

Актуальность работы заключается в том, что модель процесса полимеризации позволяет без особых затрат решить главную проблему химической технологии, а именно, узнать как начальные условия процесса влияют на конечный продукт.

Это можно сделать с помощью множества экспериментов, но будет потрачено много времени и дорогостоящих химических компонентов.

Одним из наиболее известных способов решения дифференциальных уравнений находится метод Рунге-Кутта. Целью предоставленной работы является моделирование процесса радикальной полимеризации бутилакрилата при изотермической постановке задачи.

Объектом исследования являются дифференциальные уравнения.

Предметом исследования является метод Рунге-Кутты для решения дифференциальных уравнений.

Для достижения поставленной цели были решены следующие исследовательские задачи:

рассмотреть основные сведения о дифференциальных уравнениях;

провести обзор способов решения дифференциальных уравнений;

составление кинетической схемы процесса полимеризации бутилакрилата;

составление и решение балансных дифференциальных уравнений по компонентам кинетической схемы – разработать математическую модель полимеризации;

разработать алгоритм решения задачи;

привести описание функций и процедур решения;

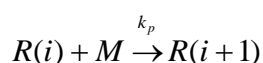
решить задачу;

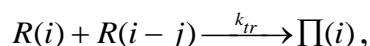
привести результаты решения задачи;

привести выводы и рекомендации по результатам решения.

Разработка математической модели. Кинетическая схема

Процесс полимеризации бутилакрилата содержит следующие элементарные реакции:





где $I, R(0), R(i), M, \Pi(i)$ – компоненты реакционной системы (см. табл. 1); i, j – количество мономерных звеньев в цепи; k_d, k_p, k_{tr} – константа скоростей реакций вещественного инициирования, роста цепи, передачи цепи на мономер.

Компоненты полимеризационной системы

I		M	
$R(0)$		$R(i)$	
R'		$\Pi(i)$	

В рамках кинетического подхода, на основе закона действующих масс, представленный механизм был математически отображен в виде системы дифференциальных уравнений (1):

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{d[I]}{dt} = -k_d \cdot [I]; \\
 \frac{d[R(0)]}{dt} = k_d \cdot [I] - k_p \cdot [M] \cdot [R(0)]; \\
 \frac{d[M]}{dt} = -k_d \cdot [M] \cdot [R(0)] - k_p \cdot [M] \cdot \sum_{i \geq 1} [R(i)] - k_{tr} \cdot [M] \cdot \sum_{i \geq 1} [R(i)]; \\
 \frac{d[R(1)]}{dt} = k_p \cdot [M] \cdot [R(0)] - k_p \cdot [R(1)] \cdot [M] - k_{tr} \cdot [R(1)] \cdot [M] + k_{tr} \cdot [M] \cdot \sum_{i \geq 1} [R(i)]; \\
 \frac{d[R(2)]}{dt} = -k_p \cdot [M] \cdot [R(2)] + k_p \cdot [R(1)] \cdot [M] - k_{tr} \cdot [M] \cdot [R(2)]; \\
 \dots \\
 \frac{d[R(i)]}{dt} = -k_p \cdot [M] \cdot [R(i)] + k_p \cdot [R(i-1)] \cdot [M] - k_{tr} \cdot [M] \cdot [R(i)]; \\
 \frac{d[\Pi(1)]}{dt} = k_{tr} \cdot [M] \cdot [R(1)]; \\
 \frac{d[\Pi(2)]}{dt} = k_{tr} \cdot [M] \cdot [R(2)]; \\
 \dots \\
 \frac{d[\Pi(i)]}{dt} = k_{tr} \cdot [M] \cdot [R(i)].
 \end{array} \right. \quad (1)$$

Константы скоростей реакций

$$\left\{ \begin{array}{l}
 k_{i1} = (1 \pm 0.1) * 10^5 \\
 k_{p11}(T) = (2.2 \pm 0.2) * 10^{13} \\
 k_{p12}(T) = (8.8 \pm 0.9) * 10^{12} \\
 k_{tr11}(T) = (2.6 \pm 0.9) * 10^{17} \\
 k_{p21}(T) = (4.0 \pm 1.5) * 10^{16} \\
 k_{p22}(T) = (1.6 \pm 0.2) * 10^{16} \\
 k_{t1} = (1.7 \pm 0.3) \\
 k_{tr21}(T) = (9.8 \pm 1.5) * 10^{18}
 \end{array} \right. \quad (2)$$

Однако систему уравнений 1 нельзя решить, так как в нем содержатся бесконечные члены. Поэтому система уравнений 1, с помощью метода производящих функций была сведена к системе уравнений 2 – в последней системе уравнения записывались относительно моментов молекулярно-массового распределения (ММР):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[I]}{dt} = -k_d[I]; \\ \frac{d[M]}{dt} = k_d[M] + [R(0)] - k_p\mu_{100} - k_{tr}\mu_{100}; \\ \frac{d\mu_{10}}{dt} = k_p[M][R(0)] - k_p[M]\mu_{10}; \\ \frac{d\mu_{11}}{dt} = k_p[M][R(0)] - k_p[M]\mu_{11} + k_{tr}[M]\mu_{10} - k_{tr}[M]\mu_{11}; \\ \frac{d\mu_{12}}{dt} = -k_p[M](\mu_{12} - \mu_{11}) - k_{tr}[M](\mu_{12} - \mu_{11}); \\ \frac{d\mu_{20}}{dt} = k_p[M]\mu_{10}; \\ \frac{d\mu_{21}}{dt} = k_p[M]\mu_{11}; \\ \frac{d\mu_{12}}{dt} = k_p[M](\mu_{12} - \mu_{11}), \end{array} \right. \quad (3)$$

Начальные условия к системе уравнений 2:

$$[I]_0=0.001; [M]_0=9.5; (\mu_{10})_0=0; (\mu_{11})_0=0; (\mu_{12})_0=0; (\mu_{20})_0=0; (\mu_{21})_0=0; (\mu_{22})_0=0.$$

Система уравнений 2 была численно решена в пакете вычислительной математики WolframMathematica8. WolframMathematica – это система компьютерной алгебры, которая используется в инженерных, математических, компьютерных и научных областях

Всероссийское СМИ

«Академия педагогических идей «НОВАЦИЯ»

Свидетельство о регистрации Эл №ФС 77-62011 от 05.06.2015 г.

(выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций)

Сайт: akademnova.ru

e-mail: akademnova@mail.ru

Кроме этого, WolframMathematica является интерпретируемым языком функционального программирования. Функции, которые особенно относятся к линейной алгебре, были написаны на языке C в целях оптимизации.

Также в Mathematica допускаются отложенные вычисления, и есть возможность задать правила работы с любыми выражениями.

Компьютерная реализация математической модели

Код программы, разработанной в пакете вычислительной математики WolframMathematica8, приведен в приложении 1. Результатом работы программы является файл out.xls.

0	0	0	Complexin	0	0,1	0	0	0	0	0	0	Indetermin	Indetermin	Indetermin	Inc
1	0,012016	0,277377	194,0785	1,231088	0,072262	0,023665	0,004052	4,94E-07	1,88E-07	2,39E-08	1,96E-06	0,853178	0,146087	1	
2	0,020812	0,415758	224,2692	1,271297	0,058424	0,03221	0,00932	4,67E-07	2,87E-07	5,95E-08	1,42E-06	0,774775	0,224193	1	
3	0,028543	0,511693	249,9319	1,296413	0,048831	0,036649	0,014448	4,24E-07	3,49E-07	9,71E-08	1,21E-06	0,716319	0,282394	8	
4	0,035681	0,584871	273,3539	1,313901	0,041513	0,03907	0,019318	3,81E-07	3,89E-07	1,35E-07	1,1E-06	0,66812	0,330355	6	
5	0,042423	0,643401	295,4605	1,326703	0,03566	0,040292	0,023921	3,41E-07	4,16E-07	1,72E-07	1,03E-06	0,626375	0,371876	5	
6	0,048879	0,691564	316,7299	1,336308	0,030844	0,040733	0,028269	3,06E-07	4,34E-07	2,09E-07	9,87E-07	0,589154	0,408879	4	
7	0,055114	0,731943	337,4445	1,343583	0,026806	0,040634	0,032376	2,73E-07	4,44E-07	2,45E-07	9,54E-07	0,555339	0,442481	3	
8	0,061171	0,766239	357,7855	1,349081	0,023376	0,040152	0,036259	2,44E-07	4,49E-07	2,8E-07	9,3E-07	0,524215	0,473393	3	
9	0,067082	0,795647	377,8757	1,353176	0,020435	0,039392	0,039932	2,19E-07	4,5E-07	3,14E-07	9,13E-07	0,495303	0,502097	2	
10	0,072869	0,821039	397,8014	1,356137	0,017896	0,038427	0,043406	1,95E-07	4,47E-07	3,47E-07	9E-07	0,468259	0,528933	2	
11	0,07855	0,84308	417,6251	1,358161	0,015692	0,037315	0,046694	1,74E-07	4,42E-07	3,8E-07	8,9E-07	0,442835	0,554148	2	
12	0,084138	0,862289	437,3921	1,3594	0,013771	0,036095	0,049805	1,56E-07	4,34E-07	4,11E-07	8,83E-07	0,418843	0,577932	1	
13	0,089643	0,879081	457,1358	1,359973	0,012092	0,034801	0,052749	1,39E-07	4,25E-07	4,41E-07	8,78E-07	0,396138	0,600429	1	
14	0,095075	0,893793	476,8808	1,359976	0,010621	0,033459	0,055533	1,24E-07	4,14E-07	4,71E-07	8,75E-07	0,374604	0,621753	1	
15	0,100441	0,906705	496,6445	1,359488	0,009329	0,032087	0,058167	1,1E-07	4,02E-07	4,99E-07	8,73E-07	0,354152	0,641995	1	
16	0,105745	0,918051	516,4391	1,358573	0,008195	0,030703	0,060656	9,79E-08	3,89E-07	5,26E-07	8,72E-07	0,334706	0,661229	1	
17	0,110994	0,928028	536,2725	1,357286	0,007197	0,02932	0,063007	8,69E-08	3,76E-07	5,52E-07	8,72E-07	0,316205	0,679517	9	
18	0,11619	0,936807	556,1493	1,355676	0,006319	0,027947	0,065228	7,72E-08	3,62E-07	5,78E-07	8,72E-07	0,298597	0,696911	8	
19	0,121339	0,944534	576,0713	1,353782	0,005547	0,026595	0,067324	6,84E-08	3,48E-07	6,02E-07	8,73E-07	0,281837	0,713456	7	
20	0,126441	0,951335	596,038	1,35164	0,004867	0,025269	0,0693	6,06E-08	3,34E-07	6,25E-07	8,75E-07	0,265885	0,729191	6	
21	0,131501	0,95732	616,0474	1,349281	0,004268	0,023975	0,071163	5,36E-08	3,2E-07	6,48E-07	8,77E-07	0,250708	0,744151	5	
22	0,13652	0,962587	636,0958	1,346734	0,003741	0,022718	0,072917	4,74E-08	3,05E-07	6,69E-07	8,79E-07	0,236273	0,758366	4	
23	0,1415	0,967219	656,1786	1,344023	0,003278	0,0215	0,074568	4,19E-08	2,91E-07	6,89E-07	8,81E-07	0,222552	0,771866	4	
24	0,146443	0,971291	676,2903	1,341171	0,002871	0,020325	0,076121	3,69E-08	2,77E-07	7,08E-07	8,83E-07	0,209518	0,784678	3	
25	0,15135	0,97487	696,4245	1,338198	0,002513	0,019194	0,07758	3,26E-08	2,64E-07	7,27E-07	8,86E-07	0,197146	0,796828	3	
26	0,156223	0,978012	716,5748	1,335121	0,002199	0,018109	0,07895	2,87E-08	2,51E-07	7,44E-07	8,89E-07	0,185409	0,808341	2	
27	0,161062	0,980771	736,7341	1,331958	0,001923	0,01707	0,080236	2,52E-08	2,38E-07	7,61E-07	8,91E-07	0,174286	0,819239	2	
28	0,165868	0,983191	756,8954	1,328724	0,001681	0,016076	0,081442	2,22E-08	2,25E-07	7,77E-07	8,94E-07	0,163752	0,829547	2	
29	0,170643	0,985312	777,0515	1,325431	0,001469	0,01513	0,082571	1,95E-08	2,13E-07	7,92E-07	8,96E-07	0,153784	0,839288	1	
30	0,175387	0,987171	797,1954	1,322093	0,001283	0,014228	0,083628	1,71E-08	2,01E-07	8,06E-07	8,99E-07	0,14436	0,848484	1	

Рис 1 Результаты вычислений в пакете вычислительной математики WolframMathematica 8

Выводы по результатам решения.

По результатам решения можно сделать вывод, что метод Рунге-Кутта 4-го порядка является наиболее точным, но с увеличением точности требуется большое количество вычислений. За счет большой точности можно увеличивать величину шага интегрирования, на величину допустимой погрешности.

Для нашего случая был выбран шаг равный 1.

Выводы по результатам времени нахождения решения

Время нахождения решения для задачи минимально, но увеличивается с повышением точности и увеличением области интегрирования и с уменьшением шага

Рекомендации по повышению точности результатов

Для повышения точности результатов предлагается максимально увеличить область интегрирования и сократить шаг.

Преимуществом метода Рунге-Кутта является простота изменения шага интегрирования единообразный, а также алгоритм для каждого процесса решения. Помимо этого, в памяти механизма не обязательно сохранять результаты решения, которые получены на предшествующих шагах. Ограниченность метода заключается в потребности неоднократного решения правых частей системы уравнений на каждом шаге решения, которая существенно увеличивает его трудоемкость, а также недостатка способа оценки точности интегрирования, который не сопровождается значительным увеличением объема вычислений. Разностные методы интегрирования — многошаговые: для вычисления решения уравнения на каждом шаге изменения аргумента необходимо знать решение на предыдущих шагах.

Всероссийское СМИ

«Академия педагогических идей «НОВАЦИЯ»

Свидетельство о регистрации Эл №ФС 77-62011 от 05.06.2015 г.

(выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций)

Сайт: akademnova.ru

e-mail: akademnova@mail.ru

Список использованной литературы:

1. Арнольд В. И. Обыкновенные дифференциальные уравнения / В. И. Арнольд . – М.: ДМК Пресс, 2000. – 308с.
2. Дифференциальные и интегральные уравнения, вариационное исчисление в примерах и задачах / А. В. Васильева [и др.]. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 432с.
3. Эльсгольц Л. Э. Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление / Л. Э. Эльсгольц. – М.: Наука, 1969. – 424с.
4. Пантелеев А. В. Обыкновенные дифференциальные уравнения в примерах и задачах / А. В. Пантелеев, А. С. Якимова, А. В. Босов. – М.: МАИ, 2000. – 380с.

Дата поступления в редакцию: 15.02.2017 г.

Опубликовано: 16.02.2017 г.

© Академия педагогических идей «Новация», электронный журнал, 2017

© Насырова Р.Р., 2017