

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ С ПОМОЩЬЮ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ПАКЕТА SCILAB

Королев В.Д.

Национальный фармацевтический университет

Ключевые слова: моделирование химической реакции, программирование.

Введение. Исследование и моделирование химических реакций является актуальной задачей. Оно позволяет ускорить процесс создания новых препаратов, способствует предотвращению превращений компонентов лекарственных препаратов, приводящих к нарушению или потере их потребительских качеств. Изучение процессов и применение полученных результатов в медицине дают возможность бороться с заболеваниями и старением организма.

Целью работы является создание математического аппарата для моделирование химических реакций с использованием свободных математических пакетов, способных решать системы дифференциальных уравнений.

Основная часть. В работе рассмотрено моделирование химических реакций. Рассмотрены различные виды реакций: простая изотермическая обратимая реакция, сложная параллельная и последовательная изотермическая реакции, обратимые изотермические реакции второго рода и неизотермическая реакция. Составлены математические модели различных видов химических реакций и различного количества (2-6) компонент для изотермических и неизотермических реакций, которые представляют собой системы дифференциальных уравнений первого порядка. Для решения дифференциальных уравнений применялся свободно распространяемый математический пакет Scilab. Задача моделирования сводится к анализу системы дифференциальных уравнений относительно концентрации веществ-реагентов и продуктов реакции при различных начальных условиях. Проведено моделирование серии химических реакций, выполнено решение систем дифференциальных уравнений, к которым сводятся эти реакции, представлены численные результаты и проведено их сравнение с результатами, полученными в коммерческих пакетах (таких как MathCad и MatLab). Построены графики зависимости концентрации веществ и температуры (в случае неизотермической реакции) от времени для каждой из реакций.

Выводы. Сравнив результаты, полученные в других пакетах, можно сделать вывод, что пакет Scilab не уступает по возможностям решения систем дифференциальных уравнений коммерческим пакетам и может с успехом применяться при моделировании химических процессов.