TÜRKMENISTANYŇ BILIM MINISTRLIGI

MAGTYMGULY ADYNDAKY TÜRKMEN
DÖWLET UNIWERSITETI

MUHAMMETBERDI GURBANOW

HIMIÝADA MATEMATIKI MODELIRLEMEGIŇ USULLARY

Türkmenistanyň ýokary okuw mekdepleri üçin
synag okuw kitaby

Türkmenistanyň Bilim ministrligi tarapyndan
hödürlenildi

Aşgabat 2010

UOK 01.08/26-09

Gurbanow M. Himiýada matematiki modelirlemegiň usullary. Synag okuw kitaby. – A.: 2010. – 1 s.

Bu synag okuw kitaby himiýada matematiki modelirlemegiň usullary hakynda türkmen dilinde ýazylan ilkinji işdir.

Bu synag okuw kitabynda dersiň maksady we meselesi, umumy düşünjeleri, himiýada matematiki modelirlemegiň usullary baradaky esasy soraglar ýazyldy. Himiýada matematiki modelirlemegiň usullarynyň esasy kanunalaýyklyklary we nazaryýeti beýan edildi. Kwant mehanikasy, himiki termodinamika, himiki önümçilikleriň optimizasiýasy baradaky temalarda ylmyň häzirki zaman derejesi göz öňünde tutuldy.

Kitap himiýa hünäri boýunça bilim alýan talyplara niýetlenendir.

GIRIŞ

Täze Galkynyşlar we Beýik Özgertmeler zamanynda hormatly Prezidentimiz Gurbanguly Berdimuhamedowyň parasatly ýolbaşçylygynda ylmyň we bilimiň beýleki pudaklary ýaly himiýa ylmy hem pajarlap ösýär.

Türkmenistanyň 2020-nji ýyla çenli döwre niýetlenen durmuş syýasatynyň özenini ilatyň ýaşaýyş derejesiniň görkezijilerini ýokarlandyrmak meselesi eýeleýär.Hemişe bolşy ýaly, býujet serişdeleriniň önjeýli bölegi durmuş pudagyna, onuň ösüşine gönükdirilýär.Ilatyň ösmegini hasaba almak, täze durmuş desgalarynyň gurulmagy, döredilen infrastrukturanyň netijeli peýdalanylmagy hem gözden salnanok. Ilata gazy, suwy, elektrik toguny, duzy mugt bermegi dowam etdirip, ilatyň mätäç böleginiň goraga alynjakdygy hem anyk aýdylýar. “Türkmenistany ykdysady, syýasy we medeni taýdan ösdürmegiň 2020-nji ýyla çenli döwür üçin baş ýörelgesi ”Milli Maksatnamasynda tebigy gurşawy goramak, ekologiýa barada şeýle ýazylýar “Ekologiýa, daş-töwerekdäki sredany goramak we biologik hem suw resurslaryndan oýlanyşykly peýdalanmak ugurlarynda tebigy resurslary kemeltmän, tebigatdan peýdalanmagyň ekologiýa–durmuş-ykdysady baş ýörelgesini, biologik köpdürliligi saklamagyň ylmy esaslaryny işläp düzmek boýunça işler, şeýle hem adamyň töwerekdäki tebigatyň gurluşyna täsir edişini kesgitlemek boýunça barlaglar dowam etdiriler”. Bu işleriň amala aşyrylmagy bilen Türkmenistanda töwerekdäki gurşawy goramagyň ýagdaýy has hem gowylanýar.

“Himiýada matematiki modelirlemegiň usullary“ dersi himiýa senagatynyň ösüşi bilen ýakyndan özara baglanşyklydyr. Maksatnamada himiýa senagatyny ösdürmek boýunça şu aşakdaky işler bellenilýär. Himiýa senagatyndaky tehnologik ösüşler dünýäniň, hem-de öz ýurdymyzyň innowasiýalaryny öwrenmäge esaslanar.

Garabogaz kölüniň mineral-çig mal resurslaryny agtaryp tapmagyň, çykarmagyň we gaýtadan işlemegiň, Türkmenistanyň territoriýasyndaky ýoduň, bromuň, organiki mineral dökünleriň we bentonitiň, gazylyp alynýan magdanlaryň önümçiliginiň netijeli usullary taýýarlanylýar we senagatda ornaşdyrylar.

2001-2003-nji ýyllarda täze dökün meliorantynyň önümçilik tehnologiýasy işlenilip düzüldi. “Garabogazsulfat” önümçilik birleşiginiň önümçilik galyndylarynyň fiziki-himiki esaslaryny we gaýtadan işleniş tehnologiýasyny işläp düzmek boýunça barlaglar geçirildi. Bu barlaglaryň netijeleri 2000-2004-nji ýyllarda Türkmenistanyň ykdysadyýeti üçin zerur bolan kaliý sulfatynyň, magniý okisiniň we beýleki himiki önümleriň synag-senagat önümçiligini gurmaga mümkinçilik berdi.

Ylmyň we tehnologiýanyň ösüşi töwerekdäki gurşawy goramaga uly kömek berýär. Maksatnamada bellenilen Türkmenistanyň ylmyny, tehnikasyny we tehnologiýasyny ösdürmegiň esasy ugurlary şu aşakdakylardan ybaratdyr.

Öňde goýulan maksada laýyklykda, ýurdyň ylmy-tehniki syýasaty şu aşakdaky esasda amala aşyrylýar:

ýurduň ykdysadyýetiniň esasy pudaklarynda dünýä ylmynyň we praktikasynyň gazananlaryny giňden peýdalanmak;

watanymyzyň ylmy-tehniki güýçleriniň alyp barýan düýpli we amaly ylmy-barlaglarynyň netijelerini önümçilige çalt ornaşdyrmak.

Ylmy-tehniki ösüş maksatnamasyny amala aşyrmak şu aşakdaky esasy wezipeleriň çözülmegini göz öň ünde tutýar:

ylmy güýçleri ykdysadyýetiň we durmuşyň ileri tutulýan ugurlarynda jemlemek hem-de pudaklaryň anyk meselelerini ýerli şertleri we Türkmenistanyň aýratynlyklaryny hasaba almak bilen çözmek;

ýokary okuw jaýlarynyň ylmyny ösdürmek, ýokary okuw jaýlarynyň ylmy güýçlerini iň ýokary derejede peýdalanmak;

Türkmenistanyň ykdysadyýetiniň pudaklarynyň ýokary depginler bilen ösüşini üpjün eder ýaly,
öňdebaryjy tehnologiýalar boýunça maglumatlar goruny döretmek we dünýä ylmynyň iň täze gazananlaryny giňden peýdalanmak;

daşary ýurtlar we halkara guramalar bilen ylym, tehnika hem-de öňdebaryjy tehnologiýalar babatynda hyzmatdaşlygy giňeltmek;

Türkmenistany ýokary ösen dünýewi demokratik döwlete öwürmek boýunça öňde goýulan wezipeleri çözmäge ukyply ýokary hünärli işgärleri taýýarlamak.

Tehnologik ösüşiň Türkmenistanyň durmuş-ykdysady, taryhy we geografik aýratynlyklaryny nazara alýan taktikasy şu aşakdaky wezipeleriň çözülmegine gönükdiriler:

gurluş-tehnologik özgertmeleri çuň geçirmek hem-de ýokary netijeli tehnologik giňişligi döretmek;

maliýeleşdirmegiň içki we daşky çemeleşmelerini netijeli peýdalanmak maksady bilen, milli we halkara tehnologik syýasatynyň oýlanyşykly özara täsirleri üpjün etmek;

önümçiligiň we hyzmatlaryň ugurlarynyň täze tehnologiýalary kabul edijiligini ýokarlandyrmaga, döwletiň durmuş-ykdysady ösüşiniň ýokary derejesini üpjün etmäge mümkinçilik berýän ykdysady usullaryny döretmek.

Ylmy-tehniki syýasat önümçiligi tehniki taýdan täzeden enjamlaşdyrmagyň, önümleriň we tehnologiýalaryň düýpden täze görnüşlerini özleşdirmegiň hasabyna ýurduň jemi içki önümini artdyrmaga, ýurdyň önümi daşary çykaryş kuwwatyny ýokarlandyrmaga ýardam etmelidir.

Ýurduň ykdysadyýetiniň ähli pudaklarynyň tehniki we tehnologik ösüşini tapgyrlar boýunça amala aşyrmak nazarda tutulýar.

Birinji tapgyrda (2000-2005ýý) döwletiň indiki ösüşi üçin geljegi bolan pudaklary saýlap-seçip, maýa goýujylar üçin zerur şertleri döretmek arkaly olary goldaw etmek esasy ugur hökmünde bellenildi we amala aşyryldy. Şu döwürde, Türkmenistanyň ykdysadyýetinde täze bir ýagdaý, täze bir gurluş emele geldi. Şuňa laýyklykda, döwletiň esasy serişdeleriniň baş çeşmesi daşary bazara çykarylýan çig mallar we olary gaýtadan işleýän pudaklaryň önümleri bolar. Çünki bu pudaklar döwletiň ýöriteleşmeginiň esasyny düzýärler.

Bular ilkinji nobatda nebit, gaz, himiýa we nebit himiýasy, pagta arassalaýjy, dokma senagatlarydyr. Saýlama maýa goýum syýasatynyň şu ugrunyň amala aşyrylmagynyň uly ykdysady manysy bar, çünki çig malyň belli bir derejede arzanlygy bilen bagly bäsdeşlik artykmaçlyklaryny goramak, ahyrky önüm çykarýan pudaklara goýum etmek üçin maýa toplanyşynyň möçberini artdyrmaga mümkinçilik döredýär.

Saýlap goýmagyň obýekti bolup, ilkinji tapgyrda import deregini tutýan, önümleriň sarp ediş bazary bolan azyk, tikinçilik, dokma pudaklary hyzmat eder. Olar,öz gezeginde, ykdysadyýetiň galan ugurlary üçin maýa toplamaga ýardam eder. Meýilnamada görkezilen bu tapgyr üstünlikli durmuşa geçirildi.

Ilkinji tapgyrda (2006-2010ýý) içerki we daşarky bazara nazarlanan ýokary ylym sygymly hem-de ýokary tehnologiýaly maşyn we abzal gurluşyk pudaklary hem-de ýöriteleşdirilen önümçiliklere hyzmat etmek bilen bagly pudaklary ösdürmek esasy ugur hökmünde bellenildi. Olar işerki we daşarky bazarlar üçin niýetlenen önümler bolar. Bu tapgyryň hem esasy bölegi ýerine ýetirildi.

Ylmy-tehnologik kuwwaty özgertmeklik öňi bilen döwletiň strategik bähbitlerini gorap saklamagy nazarda tutmalydyr. Öz tehnologik tutumlarymyzy döretjek maksatnamalaryň çäklendirilen sanawy boýunça ileri tutulýan düýpli we amaly işläp düzmeler döwlet tarapyndan goldanylar.

Magtymguly adyndaky Türkmen döwlet uniwersitetinde "Türkmenistanda mineral dökünleriň netijeliligini ýokarlandyrmak maksady bilen ýerli resurslaryň fiziki-himiki häsiýetlerini öwrenmek" diýen tema boýunça ylmy–barlag işleri alnyp baryldy. Netijede standart fosfor dökünleriniň we naften hem-de gumin kislotalarynyň esasynda täze organomineral döküniň tehnologiýasy işlenilip düzüldi. Bu täze döküniň, Türkmenistanyň ýokary karbonatly toprak şertlerinde netijeliligi, öňki standart fosfor dökünleri bilen deňeşdireniňde 2-3 esse ýokarydyr.Täze organofosfor döküniniň düzüminde ulanylýan naften we gumin kislotalary diňe bir toprakdaky hem-de dökün hökmünde sepilen fosforyň hereketliligini artdyrmak bilen çäklenmän, eýsem olar pagtanyň we dänäniň ösüşiniň höweslendirijileridir hem-de ýokumly dökünleridir. Mundan başgada bu ýerde geçirilen ylmy-barlag işleriniň netijesinde Türkmenistanyň ýerli şertleri üçin sada superfosfatyň netijeli dökündigi anyklanyldy. Onuň netijeliligi düzüminde gipsiň bolmagy bilen baglanyşyklydyr. Gipsiň toprak gurşawynyň pH reaksiýasyny peseldýändigi, topragy kükürt bilen baýlaşdyrýandygy hem-de topragyň gurluşyny gowylandyrýandygy anyklanyldy.

Bu getirilen maglumatlar ylmy önümçilik bilen ýakyndan baglanyşdyrmak baradaky ýörelgeleriň üznüksiz durmuşa geçirilýändigininiň aýdyň şaýatlarydyr. Gelejekde hem türkmen milli ylmynyň, tehnologiýasynyň ösjekdigi we türkmen jemgiýetiniň ösüşine özüniň saldamly goşandyny goşjakdygy şübhesizdir.

Ylmy barlaglaryň we işläp taýýarlamalaryň ugurlary Türkmenistanyň Prezidentiniň milli maksatnamasyny ýerine ýetirmek üçin ylmyň pudagynda we önümçilik gurluşynda anyk meseleleri çözmäge gönükdirlendir. Her kafedrada özüniň pudak alamatlary, häsiýetleri boýunça anyk ugurlaryň meselelerini çözýän ýöriteleşdirilen toparlar işleýär. Şeýle hem kabul edilen ylmy temalaryň esasynda her bir talyp üçin tema işlenip düzülýär we ol talyplara ylmy ýolbaşçy bellenýär. Fakultetleriň kafedralarynda ylmy milli mekdebi döretmäge tarap ilkinji ädimler ädilýär, kafedralarda tejribeli mugallymlar, görnükli alymlar, professorlar ylmy barlaglaryň tematikasyny belleýärler, onuň ýerine ýetirilmegini gurnaýarlar, ylmy derejeleri goraýjylara ýolbaşçylyk edýärler, ylym boýunça milli mekdebiň ilkinji guramalaryny döredýärler we oňa talyplary işjeň çekýärler.

Hormatly Prezidentimiz Gurbanguly Mälikgulyýewiç Berdimuhamedow talyplary ilkinji okuw gününden ylmy işe çekmekde ýokary okuw mekdepleriniň mugallymlarynyň, professorlarynyň wezipesine uly baha berýär. Bu bolsa milli ylmy mekdebi döretmäge esas bolup biler.

Hormatly Prezidentimiz Gurbanguly Mälikgulyýewiç Berdimuhamedowyň ylmy-tehniki syýasaty dünýä derejesindäki ösen tehnologiýanyň gazananlary bilen aýakdaş gidýän ylmy-tehniki açyşlar we olaryň önümçilige ornaşdyrylyşy bilen ugurdaş hereket edýär. Bu bolsa türkmen milli ylmynyň dünýäniň ösen ylmy-tehniki derejesi bilen bilelikde halkara sahnasyna çykmagyna şert döredýär.

1. Himiýada matematiki usullary ulanmagyň taryhy, ähmiýeti we ösüşi.

Häzirki zamanyň himiýasynyň matematikasyz ösmegi mümkin däldir. Himiýa üçin matematika aýratyn görnüşde zerurdyr. Nusgawy (klassiki) matematikanyň ülüşleri (elementleri) bilen bir hatarda himiki hadysalaryň özboluşlylygyny we himiki barlaglaryň aýratynlyklaryny hasaba alýan amaly matematikanyň usullaryny ulanmak hem zerurdyr. Matematiki usullaryň haçan himiýada ulanyp başlandygyna takyk jogap bermek aňsat däldir. Ýöne mukdar gatnaşyklarynyň öwrenilip başlanylan döwürlerini himiýada matematiki usullaryň ulanylyp başlanylan wagty diýip hasap etmek bolar. Biziň üçin himiýada matematiki usullaryň has ösen döwürlerini we bu döwürlerde ulanylýan nazaryýetleri bilmek has möhümdir. Şunuň ýaly işleriň biri hökmünde L. Gammetiň kitabyny görkezmek bolar [8]. Gammet özüniň bu kitabynda organiki sinteziň ähli hadysalaryny diýen ýaly takyk mukdar kanunlaryň kömegi bilen ýazyp beýan edýär. Bu kitabyň "Kislotalaryň we esaslaryň mukdar öwrenilişi", "Gurluş bilen reaksiýa başarjaňlygynyň arasyndaky mukdar baglanşyklar" ýaly baplarynyň atlary hem matematiki usullaryň giňden ulanylýandygyny habar berýär. Ol soňky bapda EEÇ–erkin energiýalaryň çyzyklylygy usulyny esaslandyrýar. Bu usula esaslanyp birnäçe korrelýasiýa usullary işlenilip düzüldi. Häzir giňden ulanylýan bu usullara, himiki hadysa baradaky taglymatda matematiki usullary peydalanmagyň bir görnüşi hökmünde seretmek bolar. Himiki hadysa baradaky taglymatda matematiki usullary ulanmagyň ýene bir görnüşi hem himiki tehnologiýada modelirlemekdir. Himiýa tehnologiýasynyň hadysalarynyň köpüsi üçin ähli faktorlaryň reaksiýalaryň ugruna we tizligine edýän täsirini hasaba almak örän kyndyr we kähalatlarda bolsa, bu mümkin hem däldir. Şonuň üçin hem himiýada tejribeleriň meýilnamalary düzülende matematiki modellerden peýdalanýarlar. Matematiki modeller sistemanyň ähli faktorlarynyň çylşyrymly özara täsirini bilmezden tehnologiýa guralynyň has rejeli taslamasyny döretmäge mümkinçilik berýär. Nýutonyň döwründen başlap tä XX-nji asyryň başlaryna çenli tebigat ylymyny öwrenijiler bir faktorly tejribä ýeke-täk dogry usul hökmünde seredip gelipdirler.

Muny takyk ylymlaryň “gowy gurnalan sistemalar“ bilen iş salyşmaga ymtylmagy bilen düşündirmek bolar. Ýöne himiýa tehnologiýasynyň sistemalary (HTS) “ýaramyz gurnalan sistemalar “ bolup çykdylar, ýagny olarda ähli faktorlar bilelikde, şol bir wagtda täsir edýärler. Şonuň üçin hem tejribe geçirmegiň köne usulyny öwrenmegiň zerur derejesini üpjün edip bilmeýär. Tejribeleriň täzeçe meýlnamasyny düzmek zerurlygy ýüze çýkdy. Netijede soňky ýyllarda tejribäniň özi barlag obýekti boldy. “Yaramaz gurnalan sistemalar öwrenilende şol bir wagtda birnäçe ululyklaryň üýtgedilmegi we soňra tejribe maglumatlarynyiň gowy usul boýünça beýan edýän funksiýanal baglanşygyň saýlap alynmagy bilen geçirilýän tejribeler amatly bolup çýkdy. Şunuň ýaly usul ähtimallyk nazaryýetiniň we matematiki statistikanyň usullaryny ulanmaklyga esaslanandyr.

Ilkinji gezek matematiki statistikanyň usullaryny optimizasiýa etmegiň ekstremal meselelerini çözmekde ulanmak ideýasy 1951-nji ýylda teklip edildi we çalt 1955-1956 ýyllarda himiki tehnologiýada amala aşyryldy. Tejribäniň meýlnamasyny düzmegiň usullarynyň giňden ýaýramagy bilen himiki tejribäni optimizasiýa etmekden, has anygy senagat himiki hadysalaryny optimizasiýa etmek maksady bilen geçirilýän tejribelerde başlandy. Matematiki usullary himiýada we himiki tehnologiýada ulanmagyň ýene bir görnüşi bar. Ol masştably geçiş meselesiniň çözülişi bilen baglanşykly we tejribelerden senagata geçmegiň uzak we kyn ýolunyň bäsdeşi bolup hyzmat edýär. Gürrüň 1960-njy ýylda G.K. Boreskow we M. G. Slinko tarapyndan işlenilip düzülen hadysalary we gurallary matematiki modirlemek barada gidýär [6,7]. Masştably geçişi amala aşyrmagyň yzygiderliligi şu aşäkdakylardan ybaratdyr:

1) Bütewi çylşyrmly himiýa tehnologiýasynyň hadysasyny aýratyn derejelere we özbaşdak hadysalara bölmek;

2) Himiki reaksiýalaryň tizliklerini we fiziki hadysalaryny aýratynlykda öwrenmek ýoly bilen “ilkinji kanunalaýyklyklary” kesgitlemek;

3) Her bir derejäniň elementleri hökmünde olaryň arasyndaky baglanşyklary kesgitemek;

4) Aratyn modelleriň esasynda umumy modeli almak. Hadysalary we reaktorlary matematiki modelirlemegiň we durnukly däl kinetikanyň “dinamiki hadysalarynyň” matematiki usuly boýunça

barlagynyň ösmegi bilen matematika, himiýa we himiki tehnologiýa bilen ýakyndan arabaglanşyga girdi. Häzirki wagtda himiki hadysalar baradaky taglymata fiziki himiýa we fiziki kinetika diýilýän hem bolsa onuň birleşdiriji esasyny matematika düzýär. Bu ýerde himiki , fiziki, tehniki, matematiki bilimleriň şol bir wagtdaky ösüşi amala aşyrylýar. Diferensiýal deňlemeleriň nusgawy (klassiki) nazaryýetiniň (teoriýasynyň) çäginde kinetiki meseleleri çözmek mümkin däldir. Himiki hadysalaryň geçişiniň çylşyrymly çyzykly däl häsiýeti täze meseleleri öňe sürdi. Ol meseleleriň çözülmegi matematikanyň özüni hem baýlaşdyrdy.

2.Kwantmehaniki operatorlar we olaryň häsiýetleri. Operatoryň spektory. Koordinatalaryň, impulsyň, energiýanyň operatorlary. Impulsyň momenti.

2.1.Kwant mehanikasynyň deňlemeleriniň operatorlaryň kömegi bilen ýazylyşy.

Mikrodünýäniň esasy kanunyny aňladýan Şredingeriň deňlemesine seredeliň. Tekizlikdäki tolkun üçin Şredingeriň deňlemesi şu aşakdaky ýaly ýazylýar :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \dddot{\gamma}^2\psi = 0 \qquad (2.1)$$

bu ýerde $\psi = 2A\cos\ddot{\gamma}x$, tolkunyň yrgyldyly hereketiniň amplitudasy, $\ddot{\gamma} = 2\pi/\lambda$, λ-tolkunyň uzynlygy.

Soňky (2.1) deňlemäni giňişlikdäki tolkun üçin ýazalyň

$$\frac{d^2\psi}{\partial x} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \ddot{\gamma}^2\psi = 0 \qquad (2.2)$$

Adatça bu differensial deňleme üç sany ikinji hususy önümleriň jeminiň gysgaldylan belgisiniň kömegi bilen has gysga görnüşde ýazylýar:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad (2.3)$$

Belgi ∇^2(nabla kwadrat), onuň öňünde duran ululygyň x, y we z ululyklar boýunça differensirlenip, alnan netijäniň bolsa goşulmalydygyny aňladýar. Bu (2.3) aňlatma Laplasyň operatory diýilýär. Operator onuň öňünde duran ululygyň üstünde nähili operasiýalaryň geçirilmelidigini aňladýar.

Getirilen (2.2) deňlemede tolkun sanynyň bahasyny $\ddot{\gamma} = 2\pi/\lambda$ goýup we (2.3) operatory ulanyp alarys:

$$\nabla^2\psi + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\psi = 0 \qquad (2.4)$$

2.2.Operator düşünjesi.

Bir funksiýa f beýleki φ funksiýanyň kömegi bilen aňladylýan düzgüne operator diýilýär:

$$f = \hat{L}\varphi \qquad (2.5)$$

Bu ýerde operator $\hat{L}$ bilen belgilenýär. Meselem,

x^2 funksiýany 2x funksiýa arkaly differensirleme $\frac{d}{dx}$ operatorynyň kömegi bilen aňlatmak bolar:

$$2x = \frac{d}{dx}(x^2) \qquad (2.6)$$

Eger $\hat{L}$ operator we $\psi(\psi \neq 0)$ funksiýa üçin

$$\hat{L}\psi = L\psi \qquad (2.7)$$

(bu ýerde L käbir san) gatnaşyk ýerine ýetirilýän bolsa, onda $\psi \hat{L}$ operatoryň hususy funksiýasy we L bolsa onuň hususy bahasy diýilýär.

Mysal üçin

$$\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + bR = 0 \qquad (2.8)$$

deňlemäni operator görnüşde ýazalyň:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} = -bR$$

ýa-da $\hat{L}R = -bR$

bu ýerde $\hat{L} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. $R - \hat{L}$ operatorlaryň hususy funksiýasy we (-b) onuň hususy bahasy.

2.3.Kwant mehanikasynyň operatorynyň häsiýetleri

Operatorlar funksiýanyň üstünde geçirilmeli amallaryň köplügini aňladýar. Sadaja ýagdaýda bu bir amal (köpeltmek, derejä götermek, logarifmirlemek we ş.m) bolup biler. Operatorlar goşulanda olar nobatma-nobat haýsy hem bolsa bir ululyga ulanylýar we netijeler goşulýar. Operatorlar köpeldilende ilki bilen ululyga ýakyn duran operatoryň amaly ýerine ýetirilýär we soňra nobatma-nobat bu ululykdan daşlaşýan operatorlaryň amallary ýerineýetirilýär.Eger şu aşakdaky gatnaşyk

$$\hat{L}(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) = C_1 \hat{L}\psi_1 + C_2 \hat{L}\ \psi_2$$

ýerine ýetirilýän bolsa, onda operatara çyzykly diýilýär. Meselem, $\hat{A} = x$ we $\hat{B} = \dfrac{d}{dx}$ operatorlar çyzyklydyrlar, sebäbi

$$x(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) = C_1(x\psi_1) + C_2(x\psi_2)$$

2.4. Operatoryň spektory

Operatoryň hususy bahalarynyň köplügine onuň spektory diýilýär. Goý operatoryň spektory diskret we ( ) görnüşli deňlemäni çözüp hususy funksiýalaryň we hususy bahalaryň ýygyndysyny alarys. Şunda iki ýagdaý mümkindir: operatoryň her biri hususy Lň bahasyna bir hususy funksiýa ψ_n degişli bolýar

$$\begin{array}{ccc} \psi_1, & \psi_2, \ldots, & \psi_n, \ldots \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ L_1, & L_2, \ldots, & L_n, \ldots \end{array}$$

ýa-da käbir hususy bahasyna birden köp hususy funksiýalar degişlidir

$$\Psi_1, \Psi_2, ..., \Psi_{n-1}, \psi_n, \underline{\psi_{n+1}, ..., \psi_{n+f}}$$

$$\downarrow$$

$$L_1, L_2, ..., L_{n-1}, L_n, L_{n+1}, ...,$$

Soňky ýagdaýda operatoryň hususy bahasy f- gezek gaýtalanan diýilýär. Hususy funksiýalardan her dürli çyzykly utgaşmalary düzmek bolar:

$$a_{n+1}\Psi_{n+1} + ... + a_{n+f}\Psi_{n+f} = \Psi_{n+1}$$

Bu utgaşmalar berilen operatoryň $\hat{L}$ hususy funksiýalarydyr.

2.5. Koordinatalaryň , impulsyň, energiýanyň operatorlary we impulsyň momenti.

Koordinatalaryň operatorlary iň sada operatorlara degişli bolmak bilen funksiýanyň, onuň täsir edýän koordinatyna köpeldilmegine deňdir

$$\hat{x}\,\psi(x, y, z) = x\psi(x, y, z)$$

we şuňa meňzeş ýa-da, gysgaça:

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} > z$$

Diňe koordinatlara funksiýa bolan fiziki ululygyň operatory, meselem potensial energiýanyň $\hat{U}(x, y, z)$ operatory hem köpeltmek operatorydyr:

$$\hat{U} = U(x, y, z)$$

Kwant mehanikasynda impulsyň dekart düzüm bölegine şu aşakdaky operatorlar degişlidir:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x};\ \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \text{we} \quad p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x};$$

Impulsyň operatorynyň düzüm bölekleri wektory emele getirýärler:

$$\hat{p} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\bar{i} + \frac{\partial}{\partial y}\bar{j}\frac{\partial}{\partial z}\bar{k}\right) = -i\hbar\nabla$$

Energiýanyň operatory (gamilltonion) şu aşakdaky usul boýunça alynýar:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + u(x,y,z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + u(x,y,z)$$

bu ýerde ∇^2-Laplasyň operatory. Kwant mehanikasynda impulsyň momentiniň operatory şu aşakdaky formula bilen kesgitlenýär:

$$\hat{M} = [\hat{r}\,x\,\hat{p}]$$

ýa-da düzüm bölekleri boýunça

$$\hat{M}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right);$$

$$\hat{M}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right);$$

$$\hat{M}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right);$$

3.Kwant mehanikasynda energiýa degişli kanunlarynyň matematiki apparaty

3.1. Kwant mehanikasynda saklanmak kanunlarynyň matematiki apparaty

Saklanmak kanunlarynyň matematiki apparaty hökmünde olaryň kwantmehaniki operatorlaryna syn edeliň. Klassiki mehanikada hereketiň integraly diýip adalga bar. Onuň kömegi bilen hereketde hemişelik bahasyny saklaýan we başlangyç şertler bilen kesgitlenilýän fiziki ululyklar aňladylýar. Kwant mehanikasynda şeýle ululyklar bar, olaryň ortaça bahasy islendik ýagdaýda wagtyň geçmegi bilen üýtgemeýär. Kwantmehaniki α fiziki ululygyň hereketiň integraly bolmagy we oňa degişli saklanmak kanunynyň ýerine ýeririlmegi üçin L operatoryň iki şerti kanahatlandyrmagy zerurdyr:

a) aç-açaçan wagta bagly bolmazlygy we

b)gamiltonian bilen kommutasiýada bolmagy $([\hat{L},\hat{H}]\equiv 0)$

Sada mysala garap geçeliň. Erkin elektronyň gamiltonianynyň (U(x,y,z)=o) aşakdaky görnüşi bar.

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)=-\frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2) \qquad (3.1)$$

Görnüşi ýaly

$$[\hat{H},\hat{p}_x]=[\hat{H},\hat{p}_y]=[\hat{H},\hat{p}_z]=0 \qquad (3.2)$$

ýagny erkin elektron wagtyň haýsy hem bolsa bir başlangyç pursatynda kesgitli impulsly ýagdaýda ýerleşýän bolsa, onda impulsuň bu bahasy wagtyň geçmegi bilen saklanar.

3.2. Durnukly ýagdaý. Energiýanyň kwantlaşmasy

Kwantmehaniki önümleriň köpüsine dogry düşünmek üçin durnukly düzgün düşünjesiniň üstünde aýratyn durup geçmek zerurdyr.Gamiltonyň operatory aç-açan wagta bagly bolmadyk sistema seredip geçeliň. Bu ýagdaýda Şredingeriň tolkun deňlemesi üýtgeýän ululyklary bölmäge mümkinçilik berýär;

$$\psi(x,y,z,t)=\varphi(x,y,z)\,f(t)$$

Onda

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+U\psi \qquad (3.3)$$

We

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+U(x,y,z,)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x,y,z)$$

(3.4)

Deňlemeleri hasaba almak bilen çykararys:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,y,z,t)}{\partial t}=i\hbar\varphi(x,y,z)\frac{\partial f(t)}{dt}=\hat{H}\,\psi(x,y,z,t)=$$
$$=f(t)\hat{H}\,\varphi(x,y,z)=f(t)E\psi(x,y,z) \qquad (3.5)$$

Bu ýerden:

$$i\hbar\frac{\partial f(t)}{\partial t}=Ef(t) \qquad (3.6)$$

we

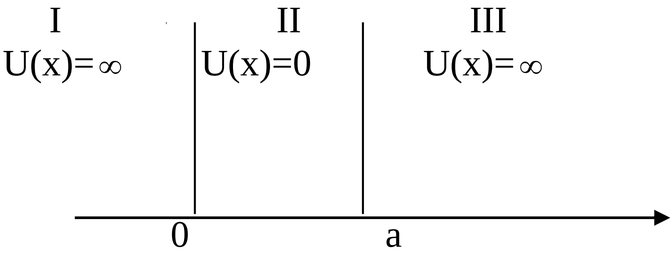
$$\hat{H}\,\varphi(x,y,z)=E\varphi(x,y,z) \qquad (3.7)$$

Soňky deňlemä Şedingeriň durnukly deňlemesi diýilýär.Onuň çözgüdi $\varphi(x,y,z)$ sistemanyň energiýasynyň kesgitli baha eýe bolan ýagdaýyna degişlidir. Soňky alnan deňlemäniň çözgüdi eksponensial funksiýadyr: $f(t) = e^{(-i|\hbar)Et}$

Durnukly ýagdaýyň tolkun funksiýasynyň görnüşi aşakdaky ýalydyr:

$$\psi(x,y,z,t) = \varphi(x,y,z)e^{-(i\backslash\hbar)Et} \qquad (3.8)$$

Şeýlelikde kwant mehanikasynda durnukly ýagdaý diýip düýbünden wagta bagly bolmadyk ýagdaý dälde, eýsem wagta getirilen kanun boýunça bagly bolan ýagdaýa düşünilýär. Indi çykarylan kwant mehanikasynyň matematiki apparatynyň anyk meselelerini çözmek üçin ulanylşyna syn edeliň.Mysal hökmünde elektronyň göniburçly potensial çukurdaky birölçegli hereketine ýüzleneliň. Potensial çukuryň ini a we beýikligi bolsa tükeniksiz (3.1-nji surat).



3.1-nji surat. Potensial çukuryň düýbi boýunça elektronyň birölçegli hereketi

Energiýanyň kwantlaşmasy nireden gelip çykýar? Şu soraga jogap bereliň. Biziň seredýän ýagdaýynuzda elektron x oky boýunça öňe we yza hereket edýär, ýöne ol meselň şertine görä çukuryň daşynda ýerleşip bilmez.Çukuryň daşynda U(x)=∞ we şunuň üçin hem x$\leq$0 hem-de x$\geq \alpha$ bolanda elektronyň tolkun funksiýasy $\psi(x)=0$ Çukuryň içindäki elektronyň $\psi(x)$ funksiýa üçin aňlatmasyny we energiýasyny tapalyň. Görkezilen ýer üçin Şredingeriň deňlemesi şu aşakdaky görnüşi alýar:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=E\psi(x) \qquad (3.9)$$

$\psi(0)=\psi(a)=0$ araçäk şertleri bilen $k^2=2mE|\hbar^2$ bölegini girizip alarys:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0 \qquad (3.10)$$

Şunuň ýaly diferensial deňlemeleriň umumy çözgüdi:

$$\psi(x)=A\sin kx+B\cos kx \qquad (3.11)$$

Bu formulada A we B hemişelikler nula deň bolmaly däldirler.

Indi araçäk şertleri hasaba alalyň

$$a)\psi(0)=A\sin k0+B\cos k0=B=0$$

$$b)\psi(a)=A\sin ka=0 \qquad (3.12)$$

Eger A$\neq$0 diýip kabul edip alsak, onda sinka=0, bu ýerde ka=nπ (bu ýerde n-bitin san) we

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \qquad (3.13)$$

Ýa-da $$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \qquad (3.14)$$

soňky (3.14) formulada görnüşi ýaly elektronyň energiýasy diňe kesgitli bahalary alyp biler, ýagny kwantlaşýar.

3.3.Tolkun funksiýany tapmak

Indi biz (3.9) deňlemäniň hususy funksiýalary üçin aňlatmany ýazyp bileris:

$$\psi_n(x) = A\sin\sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}}x \qquad (3.15)$$

bu ýerde (3.14) goýmak bilen alarys

$$\psi_n(x) = A\sin\frac{\pi nx}{a} \qquad (3.16)$$

Bu funksiýa ähli standart şertleri kanagatlandyrýar.Şunda normirowka şertleriniň güýjüne görä:

$$\int_0^a |\psi_n(x)|^2\, dx = A^2\int_0^a \sin^2\frac{\pi nx}{a} = A^2\frac{a}{2} = 1$$

bu ýerden

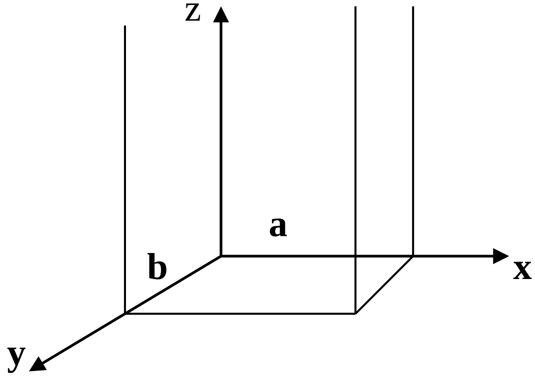
$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \qquad (3.17)$$

we

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n x}{a} \qquad (3.18)$$

3.4. Simmetriýa we utgaşyklyk. Beýleki kwantmehaniki ululyklaryň matematiki apparaty.

Indi elektronyň tükeniksiz çuň göniburçly çukurdaky ikiölçegli hereketine seredip geçeliň. Bu ýagdaýda elektron taraplary a we b bolan göniburçlygyň tekizliginde hereket edýär.



3.2-nji surat. Elektronyň ýerleşip biljek axb ölçegli meýdany.

Elektronyň bu hereketi x we y oklary boýunça iki sany baglanşyksyz hereketlere dargatmak bolar. Onda elektronyň energiýasy n_x we n_y kwant sanlarynyň kömegi bilen kesgitleniler.

$$E_{nx,ny}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n_x^2+\frac{\pi^2\hbar^2}{2mb^2}n_y^2 \qquad (3.19)$$

bu ýerde n_x=1,2,…,; n_y= 1,2,… we degişli tolkun funksiýasy her biir köpeldijisi diňe bir baglanşyksyz ululyga bagly bolan köpeltmek görnüşini alar:

$$\psi_{nx,ny}(x,y)=\psi_{nx}(x)\psi_{ny}(y) \qquad (3.20)$$

sistemanyň iki ýagdaýyna seredeliň:

$n_x=1$, $n_y=2$ we $n_x=2$, $n_y=1$

Eger $a \neq b$ bolsa, onda her bir ýagdaýa energiýanyň öz bahasy jogap berýär:

Ýagdaý	Energiýa
$n_x=1, n_y=2$	$E_{12}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{1^2}{a^2}+\frac{2^2}{b^2}\right)$
$n_x=2, n_y=1$	$E_{21}\,\frac{\pi\hbar^{2^2}}{2m}\left(\frac{2^2}{a^2}+\frac{1^2}{b^2}\right)$

Şeýlelikde , $E_{12} \neq E_{21}$ we utgaşma ýok.

Haçanda a=b bolanda, onda iki ýagdaýda hem sistemanyň energiýasy birmeňzeş

$$E_{12}=E_{21}=5\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

ýada, umumy ýagdaýda:

$$E_{nx,ny}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_x^2+n_y^2)$$

Sistemanyň simmetriýasynyň artmagy (berlen ýagdaýda elektronyň hereket edýän ýerini çäklendirýän göniburçlukdan kwadrata geçirmegi birnäçe ýagdaýlaryň energiýasynyň utgaşmagyna getirýär. Sistemanyň simmetriýasy bilen energetiki derejeleriň utgaşmasynyň strukturasynyň arasyndaky baglanşyk kwant mehanikasynyň çuňňur pikirleriniň biridir.

4.Termodinamiki funksiýalar U,H,G,G*. Makswelliň gatnaşygy. Kaloriki koeffisiýentleri hasaplamak

4.1. Termodinamiki funksiýalar U,H,G,G*

Termodinamikanyň matematiki apparaty manysy boýunça sistemanyň ähli termodinamiki ululyklaryny (parametirlerini) baglanşdyrýan bir umumy differensial deňlemäniň netijeleriniň derňewinden ybaratdyr.Bu deňlemä Gibbsiň binýat (fundemental) deňlemesi diýilýär.Ýöne bu umumy deňlemäni ýazmak üçin öňünden tejribede ölçenilmeýän iki sany ululyga-energiýa we entropiýa seredip geçmeli.Muny fizikanyň iki sany kanunlarynyň-termodinamikanyň birinji we ikinji başlangyçlarynyň kömegi bilen etmek bolar.Mundan başgada termodinamikanyň nazaryýetini işläp düzmek üçin birnäçe postulatlar goşmaça düşündürişsiz kabul edilip alynýar.Öwürlişikli hadysalar üçin Gibbsiň binýat deňlemesi şu aşakdaky görnüşde ýazylýar:

$$du = Tds - pdv \pm \sum p_k dx_k \qquad (4.1)$$

bu ýerde x_k-S we V ululyklardan başga beýleki ýagdaý koordinatlary. Getirilen U(S,V,x_k)

funksiýanyň analitiki kesgitlenilmegi empiriki beýan etme bilen deňeşdireniňde baglanşyksyz üýtgeýän ululyklaryň sanyny iki esse gysgaldýar.Sebäbi hemme umumylaşdyrlan güýçler (P_k) şol bir wagtda U funksiýadan x_k koordinatalar boýunça hususy matematiki önümdir.Muňa göz ýetirmek üçin (4.1) deňlemäni içki energiýanyň doly differensiýalynyň aňlatmasy bilen deňeşdirmek ýeterlikdir.

$$du = (\frac{\partial u}{\partial s})_{v,x_k} ds + (\frac{\partial u}{\partial v})_{s,x_k} dv \pm \sum(\frac{\partial u}{\partial x_k})_{s,v,x_{in}} dx \qquad (4.2)$$

Bu ýerden alarys

$$T = (\frac{\partial u}{\partial s})_{v,x_k}; \qquad p = -(\frac{\partial u}{\partial v})_{s,x_k}; \qquad (4,3)$$

$$p_k = \pm(\frac{\partial u}{\partial x_k})_{s,v,x_{in}}$$

bu ýerde in indeks x_k-dan beýleki ähli x_i koordinatalaryň hemişelikdigini aňladýar.Şeýlelikde matematikada gowy mälim bolan hususy matematiki önümleriň arasyndaky gatnaşyklar termodinamikada tejribe fizikasynyň nukdaýnazaryndan elmydama aýdyň görünip durmaýan fiziki kanunlaryň görnüşine eýe bolýar. Şunda termodinamiki üýtgeýän ululyklaryň özi bolsa ilkibaşdaky empiriki düşindirmesine baglanşyksyz bolan täze kesgitlemeleri alýarlar. Bu bolsa örän umumy we deňeşdirilende matematiki gatnaşykda sada bolan termodinamikanyň häzirk zaman apparadyny döretmäge mümkinçilik berdi. Emma munuň üçin birnäçe ölçenilmeýän termodinamiki ululyklary girizmek zerur boldy. Şol termodinamiki ululyklaryň manysyna seredip geňeliň. Içki energiýa U makroskopiki sistemanyň häsiýetnamasy bolmak bilen tejribe üsti bilen diňe onuň üýtgemesini ölçemek mümkindir, ýagny ol göni ölçenilýän ululyk däldir. Termodinamiki sistemanyň içki energiýasy, bu sistemany düzýän ähli bölejikleriň kinetik we potensiýal energiýasynyň jemine deňdir (bitewi sistemanyň kinetik we potensial energiýasyny hasaba almazdan). Sistemanyň içki energiýasynyň we basyşyň göwrüme köpeldilmeginiň jemine entalpiýa H diýilýär.

$$H=U+pv \qquad (4.4)$$

Üýtgemesi dS, sistema öwürişikli hadysa bilen berilen, getirilen ýylylyga $\frac{\delta q_{wr}}{T}$ deň bolan ululyga entropiýa diýilýär.

$$dS = \frac{\delta q_{owr}}{T} \qquad (4.5)$$

Gelmgolsyň energiýasy diýilip atlandyrylýan

$$F=U-T\,S \qquad (4.6)$$

we Gibbsiň energiýasyny girizeliň

G=A+pv=H-TS (4.7)

Olar ýagdaý funksiýalarydyr
Lejandryň özgertmesini

$$\Phi = U - \sum p_k x_k \qquad (4.8)$$

ulanmak bilen görkezilen ululyklaryň üýtgemelerini şu aşakdaky deňlemeleriň kömegi bilen ýazmak bolar:

$$dH = Tds + Vdp \pm \sum p_k dx_k \qquad (4.9)$$

$$d\tau = -SdT - pdv \pm \sum p_k dx_k \qquad (4.10)$$

$$dG = -SdT + Vdp \pm \sum p_k dx_k \qquad (4.11)$$

Soňky (4.11) deňlemede islendik x_k koordinatany baglanşyksyz üýtgeýän ululyk hökmünde oňa gabat gelýän umumylaşdyrylan p_k güýç bilen çalşyrmak üçin Lejandryň özgertmesini peýdalanýarlar.

$$G^* = U - TS + pV \pm p_k x_k \qquad (4.12)$$

4.2. Makswelliň gatnaşygy

Eger ϕ ýagdaýyň käbir funksiýasy, meselem U,H,F,G funksiýalaryň haýsy hem biri bolsa, onda ϕ funksiýanyň üznüksiz üýtgeýän çäginde gatnaşyk

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y_i \partial y_k} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial y_k \partial i_i} \qquad (4.13)$$

ýerine ýetirilýär. Bu ýerde $(\frac{\partial \phi}{\partial y_i})$ we $(\frac{\partial \phi}{\partial y_k})$ fiziki manysy boýunça sistemanyň termodinamiki parametrleridir. Olary x_i we x_k bilen belgiläliň. Onda biz Makswelliň gatnaşygyny alarys:

$$(\frac{\partial x_k}{\partial y_i})_{y_k} = (\frac{\partial x_i}{\partial y_k})_{y_i}$$

4.3. Kaloriki koeffisiýentleri hasaplamak

Kaloriki koeffisiýentler tejribe fizikasynda ulanylýar. Olar ýylylygyň mukdarynyň deňlemesinden kesgitlenýär.Üç sany p,V, T fiziki ululyklaryň islendik ikisi özara baglanşyksyz bolany sebäpli dQ üçin şu aşakdaky aňlatmany ýazmak mümkindir:

$$dQ = \lambda\, dp + H dV$$
$$dQ = l dv + c_v dT$$
$$dQ = c_p dt + h dp$$

Bu deňlemelerde λ, H,l,c_v,c_p,h parametrleriň san bahasyny beýleki fiziki üýtgeýän hemişelik bahasynda sistemanyň massa birliginiň temperaturasyny, göwrümini ýa-da basyşyny üýtgetmek üçin zerur bolan ýylylygyň mukdary boýunça hasaplamak mümkindir.

$$\lambda = \frac{dQ_v}{dp}; \qquad H = \frac{dQ_p}{dV}; \qquad l = \frac{dQ_T}{dV};$$

$$C_v = \frac{dQ_v}{dT}; \qquad C_p = \frac{dQ_p}{dT}; \qquad h = \frac{dQ_T}{dp};$$

5.Energiýany, entalpiýany we entropiýany hasaplamak. Häsiýetnama funksiýalary we deňagramlylygyň umumy okuwy

5.1.Energiýany, entralpiýany we entropiýany hasaplamak

Tejribe termodinamikasynda l we c_v, c_p we h ululyklaryň kesgitlenmegi içki energiýany göwrümiň we temperaturanyň funksiýasy hökmünde hasaplamaga mümkinçilik berýär. Matematiki nukdaýnazardan dU we dH üçin aňlatmalary integrirlemek barada gidýär:

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV + \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT \qquad (5.1)$$

we

$$dH = \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_T dp + \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p dT \qquad (5.2)$$

Bu deňlemedäki hususy önümler şu aşakdaky deňlikler bilen kesgitlenilýär:

$$(\frac{\partial U}{\partial V}) = l - p; \qquad l = T(\frac{\partial p}{\partial T})_V;$$

$$(\frac{\partial U}{\partial T})_V = C_V; \qquad (\frac{\partial H}{\partial p})_T = h + V; \qquad (5.3)$$

$$(\frac{\partial H}{\partial T})_p = C_p; \qquad h = -T(\frac{\partial V}{\partial p})_p$$

Getirilen (5.3) deňlemeleri hasaba almak bilen, sistemanyň ýagdaýynyň üznüksizlik ýaýlasynda (5.1) deňlemeden alarys:

$$dU = [T(\frac{\partial p}{\partial T})_V - p]dv + C_v dT \qquad (5.4)$$

Fazalaryň geçişi nokatlarynda T=const we p=const bolanda energiýanyň böküşi $\Delta U_{f.g}$ tejribe ululygy boýunça hasaplanylýar $Q_p=\Delta H_{f.g}$ ýa-da

$$\Delta U_{f,g}=\Delta H_{f,g}-p\Delta V_{f,g} \qquad (5.5)$$

Şeýlelikde ýokarda ýazylan (5.4) deňlemäni integrirlemek bilen alarys

$$U(V,T) = U(V_0,T_0) + \sum\int C_V dT + \sum(Q_{f,g} - P\Delta V_{f,g}) + \sum\int[T(\frac{\partial p}{\partial T}) - p]dV \qquad (5.6)$$

Bu ýerde jemleme her bir faza we integrirleme bolsa, berlen fazanyň bolmak aralygyna degişlidir.Öňkä meňzeş usul bilen (5.2) we (5,3) deňlemelerden alarys:

$$dH = [V - T(\frac{\partial V}{\partial T})_p]dp + C_p dT \qquad (5.7)$$

$$H(p,T) = H(p_0, T_0) + \sum \int C_p dT + \sum Q_{f,g} + \sum \int [V - T(\frac{\partial V}{\partial T})_p]dp \qquad (5.8)$$

Göwrüm V we basyş p boýunça integrirlemäni noldan dälde, göwrümiň, basyşyň standart bahalaryndan geçirýärler, sebäbi maddanyň berlen mukdary üçin V boýunça 0-dan integrirlemegiň fiziki manysy ýokdyr. Integrirlemäni amala aşyrmak üçin ýylylyk sygymlarynyň birini (-C_v ýa-da C_p-) we bizi gyzyklandyrýan sistemanyň ähli fazalardaky ýagdaý deňlemesini bilmek zerurdyr.

5.2.Häsiýatnama funksiýalary we deňagramlylygyň umumy şertleri

Termodinamikanyň differensial deňlemelerinden, tejribede syn edilýän parametrleriň arasyndaky gatnaşyklara geçmek üçin, bu deňlemeleri integrirlemek zerurdyr.Şunuň üçin öwrenilýän sistemanyň hal deňlemesini ulanmaly bolýar. Bu deňlemeler bizi gyzyklandyrýan sistemanyň potensiallarynyň we koordinatlarynyň arasyndaky özara baglanşygy anyk görnüşde aňladýarlar

$$p_k = p(x_1, \ldots, x_n) \quad (k=1, \ldots, n) \qquad (5.9)$$

Emma iş ýüzünde S entropiýany baglanyşyksyz üýtgeýän ululyk hökmünde ulanmak mümkin däldir we şonuň üçin hem ony ýokarda ýazylan sistemadan aýyrýarlar. Meselem, gazlar üçin iki sany deňlemeleriň sistemasyny

$$p=p(V,S); \qquad (5.10)$$
$$T=T(S,V)$$

üç sany-p,V,T üýtgeýän ululyklary baglanyşdyrýan bir deňlemä getirýärler:

$$p=p(T,V) \quad ýa\text{-}da \quad f(p,V,T)=0 \qquad (5.11)$$

Makswell, esasy termodinamiki deňlemäni (4.1) we onuň özgerdilen görnüşlerini (4.9-4.11) derňäp, formal nukdaý nazardan sistemanyň ähli häsiýetleri baradaky has doly maglumatlary şu aşakdaky funksiýalaryň her biriniň hem berändigine üns berdi

$$U(V,S,x_k);H(p,S,x_k);F(T,V,x_k\ldots); \; G(T,p,x_k\ldots); \qquad (5.12)$$

Munuň üçin funksiýanyň ýaýyň içinde görkezilen "tebigy" üýtgeýän ululyklaryň üsti bilen anyk kesgitlenmegi ýeterlikdir.Eger funksiýanyň we onuň dürli önümleriniň bahalary sistemany doly beýan etmek üçin, ýagny bizi gyzyklandyrýan islendik ululygyň san bahasyny tapmak üçin ýeterlik bolsa, onda oňa häsiýetnama funksiýasy diýilýär. Eger (5.2) funksiýalaryň islendigi anyk görnüşde kesgitlenen bolsa, onda hakykatdan hem bu talap berjaý bolýar.

Mysal üçin Gelmgolsyň energiýasyna F(T,V) häsiýetnama funksiýasy hökmünde seredeliň. Eger bu funksiýa belli bolsa, onda F,T we V ululyklaryň berilendigini aňladýar. Onda

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T; \qquad (5.13)$$

$$-\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T = \frac{\partial^2 F}{\partial V^2}; \qquad (5.14)$$

$$l = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V}; \qquad (5.15)$$

$$C_v = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}; \qquad (5.16)$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \qquad (5.17)$$

Iki sany ýagdaýy belläp geçeliň. Birinjiden elmydama U,H, F we G häsiýetnama funksiýalary däldirler. Olar bu wezipäni diňe kesgitli tebigy üýtgeýän ululyklardan anyk funksiýa görnüşinde berlenlerde oýnaýarlar. Ikinjiden, eger U(S,V) häsiýetnama funksiýasy bolsa, onda S(U,V) we V(U,S) şonuň ýaly häsiýete eýedirler.Häsiýetnama funksiýalarynyň hemmesi termodinamikada ulanylmaýar.Termodinamikada häsiýetnama funksiýalarynyň bäşisi U,H,F,G we S giňden peýdalanylýar. Emma Makswelliň nygtaýşy ýaly F(V,T) ýa-da G(p,T) funksiýany tejribede göni kesgitlemek we hemme görkezilen artykmaçlyklary almak mümkin däldir. Häsiýetnama funksiýalarynyň usulynyň uzak wagtyň dowamynda başga ähmiýeti boldy: ony nazary termodinamikada dürli termodinamiki ululyklary özara baglanşdyrýan deňlemäni tapmak üçin ulandylar we anyk sistemalaryň häsiýetlerini öňki ýaly f(p,v,T) hal deňlemeleriniň hemde ýylylyk sygymlarynyň kömegi bilen beýan etdiler. Statistiki termodinamikanyň ýüze çykmagy bilen ýagdaý üýtgedi. Dogrudan hem , statistiki termodinamikanyň usullary öte çylşyrymly bolmadyk molekulýar modeller bilen beýan edilýän sistemalar üçin F(V,T) ýa-da G(p,T) funksiýany hasaplamaga mümkinçilik berýär. Şonuň üçin hem statistiki termodinamikada häsiýetnama funksiýalarynyň usulyny has doly görnüşde ulanmak, ýagny bizi gyzyklandyrýan termodinamiki parametrleriň ählisiniň san bahalaryny tapmak bolýar.

6.Gibbs-Gelmgolsyň deňlemesi.Himiki potensial, himiki üýtgeýän ululyk we doly potensiallar. Gazlaryň himiki potensialy. Uçujylyk.

6.1. Gibbs-Gelmgolsyň deňlemesi.

Iş hasaplamalary üçin U,H,F,G,S funksiýalaryň ähmiýeti, olaryň kömegi bilen ölçenilýän ululyklarynyň arasyndaky gatnaşygy aňsat tapyp bolýanlygyndan ybaratdyr. Bu Gibbs-Gelmgolsyň deňlemesiniň mysalynda aňsat görünýär. Mehaniki däl güýçleriň haýsy hem bolsa biriniň izotermiki işine seredeliň F we G funksiýanyň kesgitlemesine görä bu şertlerde

V-const, $d\tau_{T,V}=\pm dA_{mehd}$, $\Delta F=\pm A_{mehd}$ (T,V) (6.1)
P=const, $dG_{T,p}=\pm dA_{mehd}$, $\Delta G=\pm A_{mehd}$(T,p) (6.2)

Izotermiki hadysalar üçin

$$\Delta F=\Delta U-T\Delta S; \qquad \Delta G=\Delta H-T\Delta S \tag{6.3}$$

$$S=-(\frac{\partial F}{\partial T})_{V;} \qquad \Delta S=-(\frac{\partial \Delta F}{\partial T})_V; \tag{6.4}$$

$$\Delta F=\Delta U+T(\frac{\partial \Delta \tau}{\partial T})_V \tag{6.5}$$

$$S=-(\frac{\partial G}{\partial T})_p; \qquad \Delta S=-(\frac{\partial \Delta G}{\partial T})_p; \tag{6.6}$$

$$\Delta G=\Delta H+T(\frac{\partial \Delta G}{\Delta T})_p; \tag{6.7}$$

Eger biz bu deňlemelerde $Q_v=\Delta U$; $Q_p=\Delta H$; $A_{mehd}=\Delta F$, $A_{pmehd}=\Delta G$ bahalaryny goýsak, onda A_{mehd} ululygy Q_v we Q_p ýylylyklar bilen baglanşdyrýan möhüm deňlemeleri alarys:
Gelmgolsyň deňlemesi

$$A_{mehd}=Q_v+T(\frac{\partial A_{mehd}}{\partial T})_{v;} \tag{6.8}$$

Gibbsiň deňlemesi

$$A_{p,mehd}=Q_p+T(\frac{\partial A_{mehd}}{\partial T})_p \tag{6.9}$$

Bu deňlemeler Q_v ýa-da Q_p reaksiýanyň ýylylyk effektiniň we işiň temperatura koeffisiýentiniň bahalary boýunça mehaniki däl güýçleriň işini hasaplamaga mümkinçilik berýär. Bu meseläni elektrohimiki sistema üçin ilkinji gezek Gelmgols çözdi we erkin energiýa diýip atlandyrdy. Gibbsiň energiýasynyň kömegi bilen hem şunuň ýaly netijäni almak bolar.

Elektrohimiki hadysalar üçin

$$\Delta G_{T,p} = -zFE, \qquad \Delta T_{T,V} = -zFE, \qquad (6.10)$$

bu ýerde E-öýjügiň hereketlendiriji güýji, F-Faradeýiň hemişeligi.Elektrohimiýada kabul edilip alnan alamatlaryň düzgünine görä Gibbsiň (ýa-da Gelmgolsyň) energiýasynyň azalmagy (ΔG<0) bilen bolup geçýän hadysalar üçin E>0; zF-elektrohimiki öýjükde geçirilýän zarýad. Bu ýerden möhüm we giňden ulanylýan gatnaşyklar gelip çykýar:

$$\text{T,V=const,} \quad E=-\frac{Q_v}{zF}+T(\frac{\partial E}{\partial T})_{v,} \qquad (6.11)$$

$$\text{T,p=const;} \quad E=-\frac{Qp}{zF}+T(\frac{\partial E}{\partial T})_p \qquad (6.12)$$

6.2. Himiki potensial, himiki üýtgeýän ululyk we doly potensiallar.

Himiki reaksiýalaryň geçişi, sistemanyň düzüminiň islendik beýleki üýtgemesi ýaly, aýratyn düzüm bölekleriniň massalarynyň täzeden paýlanylmagy bilen baglanşyklydyr. Umumy ýagdaýda ol energiýanyň üýtgemegi bilen bolup geçýär. Şonuň üçin hem berlen ýagdaýda energiýanyň üýtgemesi üçin şu aşakdaky deňleme ýazylmalydyr;

$$dU = (\frac{\partial U}{\partial S})_{v,ni} dS + (\frac{\partial U}{\partial V})_{s,ni} dV + \sum (\frac{\partial U}{\partial ni})_{s,v,n_k} dn_{i,} \qquad (6.13)$$

bu ýerde n_i-i düzüm bölegininiň massasy, we n_k belgi n_i-den başga ähli n_k ululyklaryň hemişelikdigini aňladýar.Bu (6.13) deňlemedäki $(\frac{\partial U}{\partial n_i})_{s,v,n_k}$ önüme i düzüm bölegiň himiki potensialy diýilýär:

$$\mu_i = (\frac{\partial u}{\partial n_i})_{s,v,n_k} \qquad (6.14)$$

Himiki potensial maddanyň geçiş hadysasyndaky umumylaşdyrlan güýçdir. Şunuň ýaly geçiş faza öwürüşiklerinde we himiki reaksialarda bolup geçýär. Haýsy hem bolsa bir i düzüm bölegiň geçiş işi umumy görnüşde şeýle ýazylýar:

$$dA_i = \mu_i dn_i \qquad (6.15)$$

Bütinleýin himiki reaksiýa üçin düzüm bölekleriň ählisiniň massalarynyň özara baglanşykly üýtgemesi bolup geçýär. $dA_{him} = \sum \mu_i dn_i$ -massalaryň hereketiniň doly işi. Umumy ýagdaýda μ ululygy tejribe üsti bilen kesgitlemegiň usullart ýok, ýöne bu ululygy hasaplamagyň usuly bar. Eger P_k ululygy ölçäp bolmaýan bolsa, onda ony tapmagyň ýeke-täk ýoly- Gibbsiň binýat deňlemesini peýdalanyp ony hasaplamakdyr.

$$dU = TdS - pdV + \sum \mu_i dn_i + \sum p_k dx_k \qquad (6.16)$$

$$dG = -SdT + Vdp + \sum \mu_i dn_i + \sum p_k dx_k \qquad (6.17)$$

Bu ýerden himiki potensialy, islendik U,H,F,G funksiýanyň hususy önümi hökmünde hasaplamak usuly gelip çykýar:

$$\mu_i = (\frac{\partial U}{\partial n_i})_{S,v,n_k} = (\frac{\partial H}{\partial n_i})_{s,p,n_k} = (\frac{\partial F}{\partial n_o})_{T,v,n_k} = (\frac{\partial G}{\partial n_i})_{p,T,n_k} \qquad (6.18)$$

Aşakdaky görnüşli deňlemeleri

$$d\phi = \sum p_i dx_i \qquad (6.19)$$

şol funksiýanyň doly differensialy

$$d\phi = \sum (\frac{\partial \phi}{\partial x_i})_{xk} dx_i \qquad (6.20)$$

bilen deňeşdirmek diňe x_i üýtgeýän ululyklaryň ählisi hem baglanşyksyz bolanda $p_i = (\frac{\partial \phi}{\partial x_i})_{x_k}$ kabul etmäge mümkinçilik berýär. Massalar paýlanylanda bu şert elmydama ýerine ýetirilmeýär.Meselem, eger sistemada başky maddalaryň A_i we reaksianyň önümleriniň B_j käbir sanynyň gatnaşmagynda himiki reaksiýa geçýän bolsa

$$\sum_{1}^{n} \nu_i A_i = \sum_{1}^{m} \nu_j B_j, \qquad (6.21)$$

onda, A_i ýa-da B_j maddalardan islendiginiň mukdarynyň üýtgemegi beýleki galanlarynyň ählisiniň üýtgemegi bilen baglanşyklydyr. Maddy balansyň deňlemesinden aşakdaky gatnaşyklar alynýar:

$$\frac{an(A_1)}{dn(A_2)} = \frac{\nu_1}{\nu_2} \ldots \quad \text{ýa-da} \quad \frac{dn(A_1)}{dn(B_1)} = -\frac{\nu_1}{\nu_2} \ldots \qquad (6.22)$$

Şeýlelikde her bir himiki reaksiýa üçin, berlen himiki hadysa üçin önümleriň çykymyny kesgitleýän, diňe bir erkinlik derejesi mahsusdyr. Degişli üýtgeýän ululyga himiki üýtgeýän ululyk diýilýär. Onuň kesgitlemesi maddy balansyň deňlemelerinden gelip çykýar

$$\frac{dn(A_1)}{\nu_1} = \frac{dn(A_2)}{\nu_2} = \ldots = -\frac{dn(B_1)}{\nu'_1} = \ldots = d\xi \qquad (6.23)$$

Himiki reaksiýa üçin termodinamikanyň esasy deňlemeleri aşakdaky görnüşi alýar

$$dU = TdS - pdV + d\xi \sum_{1}^{n+m} \mu_k \nu_k \quad dG = -SdT + Vdp + d\xi \sum_{1}^{n+m} \mu_k \nu_k \qquad (6.24)$$

Bu ýerden taparys

$$(\frac{\partial G}{\partial \xi})_{T,p} = \sum \nu_k^{'} \mu_k^{'} - \sum \nu_i \mu_i = \tilde{\mu}(\theta n) - \tilde{\mu}(bash); \qquad (6.25)$$

Bu ýerde $\tilde{\mu}$-reaksiýanyň önümleriniň ýa-da başky maddalaryň doly potensiallary:

$$\tilde{\mu}(\theta n) = \sum_{1}^{m} \nu_k^{'} \mu_k^{'}(\theta n); \sum_{1}^{n} \nu_i \mu_i(bash) = \tilde{\mu}(bash) \qquad (6.26)$$

6.3.Gazlaryň himiki potensialy. Uçujylyk.

Bir düzümli sistema üçin himiki potensial G molýar bahasyna deňdir. Şonuň üçin hem himiki potensialy hasaplamak 1 mol gazyň entalpiýasyny we entropiýasyny kesgitlemäge syrykdyrylýar.

Ideal gazyň himiki potensialy

$$\mu = G = U_0 + c_p T - TS_0 - TC_p \ln T + RTlp \equiv \mu_0(T) + RT \ln P \qquad (6.27)$$

bu ýerde $\mu_0(T)$-temperatura funksiýasy,

G,U,S, we c_p molýar ululyklar. Goý p_0-standart ýagdaýdaky basyş, onda

$$\mu_{id} = H - TS = \mu^0(T, p_o) + RT \ln \frac{p}{p_0}, \qquad (6.28)$$

Amerikaly fiziko-himik G.N.Jýuis himiki potensialyň basyşa baglylygyny grafiki usul boýunça kesgitlemegi teklip etdi.Jýuis boýunça hasaplamagyň usuly täze funksiýany f uçujylygy (ýa-da figitiwligi) we işjeňligiň koeffisiýentini girizmek bilen baglanşyklydyr. Uçujylygyň kesgitlemesine görä $f \equiv \nu p$

$$\mu \equiv \mu_0(T) + RT \ln f(T, p) \qquad (6.29)$$

Işjeňlik koeffisiýenti ν şu aşakdaky deňlemelerden kesgitlenýär

$$f(T, p) \equiv \nu(T, p)p, \mu = \mu_0(T) + RT \ln \nu(T, p)p \qquad (6.30)$$

Koeffisiýent ady ν üçin şertlidir. Hakykatda bu funksiýa basyşa we temperatura baglydyr.

7.Himiki reaksiýalary we olarda bolup geçýän fiziki himiki hadysalary matematiki modulirlemek

7.1.Modilirleme barada umumy düşünje

Model sözi ölçegi, usuly, nusgany we ş.m. aňladýar. Bu söz köplenç halatlarda bir zadyň nusgasyny (geýimiň, maşynyň) we öwrenilýän hadysanyň göçme görnüşüni aňladýar. Meselem, elektrik togunyň suwuň akymy, tehnologiýa hadysasynyň şertli ýagtylyk çyzgysy, gün sistemasynyň model görnüşinde getirilmegi.

Modelirleme diýlip her dürli hadysalary we gurallary olaryň modellerinde öwrenmek we alnan netijeleri bolsa hakyky önümçilik şertlerine ýaýratmak usulyna aýdylýar. Hadysanyň ýa-da guralyň fiziki modeli bolup onuň belli bir kanun boýunça kiçeldilen (kähalatlarda ulaldylan) görnüşi hyzmat edýär. Himiki tehnologiýada fiziki model bolup tejribehana gurallary, abzallary we enjamlary belli bir tertipde hemde kesgitli maksat üçin ýygnalanda hyzmat edip bilerler. Ýöne model hökmünde matematiki strukturalar görnüşinde getirilen hakyky himiýa tehnologiýasynyň hadysasy baradaky kesgitli düşünjeler hyzmat edip biler. Matematiki strukturalara deňlemeler, deňsizlikler, formulalar, tablisalar, grafikler we ş .m degişlidirler.Şunuň ýaly modele adatça hakyky bolup geçýän tehnologiýa hadysasyny matematiki beýan etme ýa-da matematiki model diýilýär. Matematiki modele himiýa tehnologiýasynyň hadysasynyň esasy kinetiki deňlemeleri, onuň ykdysady-tehniki görkezijilerini hasaplamak üçin formulalar degişlidir.

Akyl ýetiriş taglymatyndan kabul edilip alnan suratlandyrma düşünjesine görä modelirlemäniň iki güşini aratapawutlandyrýarlar.

1).Modelirlemä daşky gurşawda bolup geçýän hadysalar baradaky maglumatlary ýygnamakdan ybarat bolan akyl ýetiriş hadysasy hökmünde garamak bolar. Şonuň ýaly maglumatlaty gaýtadan işlemegiň netijesinde aňda ruhy nusga meňzeş keşpler ýüze çykýar.Şu keşpleriň jemi, öwrenilýän hadysalaryň hil häsiýetlerini we mukdar ölçeglerini hem-de olaryň özara täsirini ýüze çykarmaga mümkinçilik berýär. Bu ýagdaýda modelirleme hyýaly (ideal) häsiýetde bolýar.

2).Modelirlemä asyl nusga (originala) belli bir derejede meňzeş sistemany gurmak hökmünde hem düşünmek bolar. Biri beýlekisiniň suratlandyrmasy bolan bu iki sistema öz aralarynda meňzeşlik gatnaşyklary bilen baglanşyklydyrlar. Bu ýerde modelirleme maddy häsiýetde bolýar, sebäbi ol barlanýan sistemany gaýtalaýan ýöriteleşdirlen enjamyň döredilmegi bilen amala aşyrylýar. Islendik maddy model, barlanýan asyl nusga baradaky fiziki-himiki düşünjelere akyl ýetirmegiň esasynda ýüze çykýan hyýaly modeliň esasynda gurulýar.

7.2.Matematiki modele edilýän talaplar

Himiki reaktorlaryň we onda bolup geçýn fiziki-himiki hadysalaryň matematiki modelini işläp düzmek kyn meseleleriň biridir, sebäbi matematiki modele edilýän talaplar köplenç halatlarda gapma-garşylykly bolýarlar. Birinjiden, model hakyky obektden sada bolmalydyr we bizi gyzyklandyrýan hadysanyň hemme hil taraplaryny aýdyň görkezmelidir. Diňe şunuň ýaly ýagdaýda modeliň üstünden “fiziki gözegçilik” etmek bolar. Mundan başgada, eger model hakyky obýektden çylşyrymly bolsa, onda hakyky obýektiň özüni öwrenmek aňsat bolardy.

Ikinjiden, model hadysanyň mukdar kanunalaýyklyklaryny ýeterlik takyk, doly we jikme-jik bermelidir. Eger bu talap ýerine ýetirilmese, onda islenilip düzülen modeli himiki reaktorlaryň işleýşiniň şertleriniň üýtgeýşiniň giň aralyklaryna ulanmak kyn bolardy. Bu talaplaryň gapma-garşylyklary aýdyň görnüp dur. Eger sistemanyň häsiýetlerini düýpli öwrenmeseň, onda sistemanyň haýsy häsyýetleriniň has möhümdigini we haýsylaryny bolsa, hasaba almasaň hem boljakdygy elmydama düşnükli däldir. Model sadalaşdyrylanda möhüm zatlaryň hasaba alynmazlygy mümkindir we şonuň üçin hem şol hasaplamalary geçirmek üçin ýaramsyzdyr. Model matematiki gatnaşykda örän çylşyrymly bolup hem biler. Bu ýagdaýda takyk hasaplamalary geçirmek mümkin däldir. Şeýlelikde matematiki modeli işläp düzmek. ýokarda görkezilen gapma-garşylykly talaplaryň arasyndaky ylalaşygy gözlemek bilen baglanşyklydyr. Himiki reaktorlara we olarda bolup geçýän fiziki-himiki hadysalara sistemalaýyn çemeleşmek usuly peýdalanylanda bu meseläni ýeňilleşdirmäge mümkinçilik berýär.

7.3.Sistemalaýyn çemeleşme himiki reaktorlary we olarda bolup geçýän hadysalary matematiki modelirlemäni ýeňilleşdiriji usul hökmünde

Himiki reaktor çylşyrymly sistema hökmünde seredilýär. Sistema, bir-biri bilen kesgitli gatnaşykda ýerleşip bütewi birligi emele getirýän elementleriň köplüginden ybaratdyr. Sistemalaýyn çemeleşmegiň çäginde tabynlyk usulyny ulanmak amatlydyr. Bu usulda çylşyrymly sistema, özara baglanşykly bölek sistemalaryň köplügi hököminde seredilýär. Tabynlygyň has ýokary derejelerinde ýerleşýän bölek sistemalar, tabynlygyň pes derejelerinde ýerleşýän bölek sistemalaryň hemmesiniň funksiýasyny ýerine ýetirýärler. Reaktor we onuň bölegi köp basgançakly strukturaly, çylşyrymly obýekt bolmak bilen, olaryň matematiki modeli böleklerden başlap tä reaktora çenli yzygiderli alnyp barylýar. Şunda ilki bilen pes derejeleriň matematiki modeli islenilip düzülýär. Soňra ýokary derejeleriň matematiki modeli işlenilip düzülende pes derejeleriň modelleri hem onuň düzümine girizilýär. Reaktorda bolup geçýän himiki hadysanyň esasy derejelerine seredeliň.

Molekulýar dereje-ilki bilen himiki kinetikanyň kanunalaýyklyklary bilen kesgitlenilýän, molekulalaryň ölçegleriniň tertibindäki aralyklarda molekulalaryň arasyndaky özara täsir. Bu özara täsir derňelende, dürli reagentleriň harçlanylyşynyň we reaksianyň önümleriniň emele gelmeginiň arasyndaky özara mukdar baglanşygy kesgitleýän stehiometrik gatnaşyklar, hem-de himiki deňagramlylygyň kanunlary hasaba alynýar.

Kiçi göwrümiň derejesi-reaksion göwrümiň makroskopik ölçegli käbir elementi, meselem kese-kesigi birnäçe kwadrat millimetre ýa-da santimetre deň bolan parallapiped, şar ýa-da silindr görnüşindedir.Katalizatoryň bir dänesi, gaz köpürjigi, bir nasadka we ş. m. hem şunuň ýaly element bolup bilerler. Öňki derejäniň kanunalaýyklyklary indi ýylylyk we massa geçişiň kanunalaýyklyklary bilen doldurulýar.

Guralyň iş bölegniniň derejesi- öňki derejede öwrenilen kiçi göwrümli elementleriň statistiki köplügi. Meselem, katalizatoryň gatlagy, doldurgyjyň (nasadkanyň) gatlagy, we ş. m. Bu derejede akymyň hereketiniň häsiýeti bilen baglanşykly ýüze çykýan netijeleri hasaba almak zerurdyr. Käbir ýagdaýlarda (meselem, gomogen reaksiýalara seredilende) kiçi göwrümiň derejesiniň üstünden böküp göni guralyň iş bölegniniň derejesine bu geçmek bolýandyr.

Guralyň derejesi-guralyň iş bölekleriniň konfigurasiýasy, özara baglanyşygy we özara ýerleşişi. Meselem, köp gatlakly katalitiki reaktorda, ýylylykçalşyjylar bilen bölünen, katalizatoryň birnäçe gatlagy ýa-da gaz-suwukluk reaksiýalaryny geçirmek üçin sütünli guralda birnäçe böwüsme jamlary.

8. Himiki reaktorlaryň we olaryň iş düzgünleriniň klasifikasiýasy. Akymly himiki reaktoryň elementar göwrümi üçin maddy balansyň deňlemesi.

8.1.Himiki reaktorlaryň we olaryň iş düzgünleriniň toparlara bölünişi (klassifikasiýasy)

Dürli hadysalary geçirmek üçin niýetlenen himiki reaktorlar biri-birinden konstruktiw aýratynlyklary, ölçegi we daşky görnüşleri boýunça tapawutlanýarlar.Bar bolan tapawutlara garamazdan, olar baradaky maglumatlary tertipleşdirmegi, matematiki beýanynyň düzülmegini we hasaplama usulunyň saýlanyp alynmagyny ýeňilleşdirýän reaktorlary toparlara bölmegiň umumy alamatlaryny bölüp çykarmak bolar.

8.1.1.Gidrodinamiki düzgüni boýunça toparlara bölünişi

Gidrodinamiki düzgüni boýunça hemme reaktorlary garyşdyryjy we gysyp çykaryjy reaktorlara bölýärler. Garyşdyryjy gurallar-bu mehaniki garyşdyryjy ýa-da aýlaw nasos bilen garylýan gap görnüşli guraldyr. Gysyp çykaryjy reaktorlar-uzaldylan kanal görnüşli turbaly gurallar. Turbaly reaktorlarda garyşdyrma ýerli häsiýetdedir we akymyň tizliginiň paýlanylyşynyň deňölçegsizligi we onuň fluktasiýalary, hem-de towlanmalary bilen burulmasy döredilýär.

Himiki reaktorlaryň nazaryýetinde adatça ilki bilen iki sany ideal gurala-ideal ýa-da doly garyşdyryjy reaktora we ideal ýa-da doly gysyp çykaryjy reaktora seredilýär.Ideal garyşdyrma üçin reaksiýany häsiýetlendirýän hemme ululyklaryň reaktoryň ähli göwrümi boýunça doly suratda deňleşmegi häsiýetlidir. Ideal gysylyp çykarylmada reagentleriň we önümleriň, islendik mukdary gaty porşen ýaly hereket edýär, we reaktoryň uzynlygy boýunça giňişlikde reaksiýalara we onuň bile ýüze çykýan fiziki hadysalara degişlilikde reaksiýanyň gatnaşyjylarynyň konsentrasiýalarynyň, temperaturanyň we beýleki ululyklaryň kesgitli paýlanmasy bolup geçýär. Hakyky reaktorlar köp ýa-da az derejede ideal garyşdyrma ýa-da ideal gysylyp çykarylma modellerine ýakynlaşýarlar. Ideal däldigine kesgitli düzedişleriň girizilmegi ideal gurallaryň modellerini hakyky reaktorlary beýan etmekde ulanmaga mümkinçilik berýär.

8.1.2.Ýylylyk çalşygyň şertleri boýunça toparlara bölünişi

Reaktorlarda himiki reaksiýalar ýylylygyň bölünip çykmagy ýa-da siňdirilmegi bilen bolup geçýär (meselem; eremek, kristallaşmak, bugarmak ýaly himiki reaksiýalaryň we onuň bilen bilelikde ýüze çykýan fiziki hadysalaryň ýylylyk netijeleri) Ýylylygyň bölünip çykmagy ýa-da siňdirilmegi netijesinde temperatura üýtgeýär we reaktor bilen töwerekdäki gurşawyň temperaturalarynyň aratapawudy, hemde kesgitli ýagdaýlarda reaktoryň içinde temperatura gradiýenti ýüze çykýar. Temperaturanyň aratapawudy ΔT ýylylyk çalşygynyň hereketlendiriji güýjidir.Töwerekdäki gurşaw bilen ýylylyk çalşygynyň ýok wagty reaktor adiabatdyr. Onda himiki hadysalaryň netijesinde bölünip çykýan ýa-da siňdirilýän ýylylygyň ählisi içki ýylylyk çalşyga-reaksion garyndyny gyzdyrmaga ýa-da sowatmaga harçlanylýar. Eger töwerekdäki gurşaw bilen ýylylyk çalşygynyň hasabyna reaktorda hemişelik temperatura saklanýan bolsa, onda oňa izotermik reaktor diýilýär. Bu ýagdaýda reaktoryň islendik nokadyndaky ýylylygyň bölünip çykmasynyň ýa-da siňdirilmesiniň öwezi doly suratda töwerekdäki gurşaw bilen ýylylyk çalşygynyň hasabyna doldurulýar.Aralyk ýylylyk düzgünli reaktorlarda himiki reaksiýanyň ýylylygynyň öwezini töwerekdäki gurşaw bilen ýylylyk çalşygynyň hasabyna doldurulýar, hem-de bölekleýin reaksion garyndynyň temperaturasynyň üýtgemesine sebäp bolýar, Awtotermiki reaktorlarda,hadysanyň zerur temperaturasy diňe reaksiýanyň ýylylygynyň hasabyna, energiýanyň daşky çeşmelerini ulanmazdan amala aşyrylýar. adatça himiki reaktorlary awtotermiki etmäge ymtylýarlar.

8.1.3.Reaksion garyndynyň faza düzümi boýunça toparlara bölünişi

Gomogen hadysalar üçin reaktorlary gazfazaly we suwuk fayaly täsirleşmeleri geçirmek üçin niýetlenen gurallara bölýärler. Geterogen hadysalary geçirmek üçin niýetlenen gurallary hem öz gezeginde gaz-suwukluk, gaz-gaty, suwukluk-gaty madda sistemalarda hadysalary geçirmek üçin niýetlenen reaktorlara bölýärler. Geterogen-katalitik hadysalary geçirmek üçin niýetlenen reaktorlary aýratyn bölüp çykarmak zerurdyr.

8.1.4.Hadysany gurnamagyň usuly boýunça toparlara bölünişi

Hadysany gurnamagyň (başky maddalary bermegiň we önümleri çykarmagyň) usuly boýunça reaktorlary periodik, üznüksiz we ýarym üznüksiz gurallara bölýärler. Periodik reaktorlarda hadysalar yzygiderli dürli-dürli wagtlarda ýerine ýrtirilýär. Periodik reaktorlarda wagt boýunça parametrler üýtgeýärler. Üznüksiz işleýän reaktorlarda hadysanyň aýratyn bölekleri dürli-dürli ýerlerde şol bir wagtda amala aşyrylýar. Ýarym üznüksiz reaktorlarda reagentleriň biri üznüksiz beýlekisi bolsa periodik berilýär. Reagentiň üznüksiz berlip önümiň periodik çykarylýan görnüşiň hem bolmagy mümkindir.

8.1.5.Hadysanyň ululyklarynyň wagta bagly üýtgeýşiniň häsiýeti boýunça toparlara bölünişi

Hadysanyň ululyklarynyň wagta bagly üýtgemegi boýunça reaktorlar durnukly we durnukly däl düzgünlerde işläp bilýärler. Eger reaktoryň içinde erkin saýlanylyp alnan nokatda wagtyň geçmegi bilen temperatura, basyş we şuňa meňzeş ululyklaryň bahalary üýtgemän galýan bolsa, onda bu düzgüne durnukly diýilýär. Şunuň ýaly düzgünde işleýän reaktorlaryň girelgesinde we çykalgasynda parametrleriň hemişelik bahalary saklanylýar. Eger reaktoryň içinde erkin saýlanyp alnan nokatda, wagtyň geçmegi bilen hadysanyň ululuklary üýtgeýän bolsa, onda bu düzgün durnukly däl düzgündir. Hemme periodik hadydalar durnukly däldirler.

8.1.6.Konstruktiw häsiýetnamalary boýunça toparlara bölünişi

Konstruktiw alamatlary boýunça şu aşakdaky reaktorlaryň görnüşlerini bellemek bolar: gaply reaktorlar (awtoklawlar; reaktorlar-kameralar; dik we kese silindrik konwertorlar we ş.m.); sütünli reaktorlar; ýylylyk çalşyjy görnüşli reaktorlar; peç görnüşli reaktorlar.

8.2. Matematiki deňlemeleri düzmek barada umumy düşünjeler

Ýokary derejeleriň matematiki modelleri düzgüne görä birnäçe deňlemeleri öz içine alýar. Şonuň üçin hem umumy ýagdaýda reaktoryň matematiki modeli- bu örän çylşyrymly deňlemeleriň sistemasy we bu modelleriň esasyndaky hasaplamalary EHM-iň kömegi bilen geçirmek maksadalaýykdyr. Şol bir wagtda sada matematiki usullary tabynlygyň pes derejesinde ulanmak bolar. Reaktorda geçýän himiki hadysa himiki reaksiýalaryň we geçiş hadysalarynyň (ýylylyk-massa geçişi we impulsyň geçişi) birliginden ybaratdyr. Matematiki modele girýän deňlemeler bu hadysalaryň hemmesini hasaba almalydyr.Eger olaryň her birini beýan etmek üçin özbaşdak deňleme ulanylsa, onda matematiki model has çylşyrymly bolar we pes derejede hem deňlemeleriň sistemasyny çözmek aňsat düşmez. Netijede reaktorda tehnologiki hasaplamalary geçirmek çylşyrymlaşar.Emma sanalyp geçilen hadysalaryň (himiki hadysalaryň elementleriniň) köpüsini bir ýa-da iki deňlemede birleşdirmek mümkindir.Bu deňlemeler tebigatyň binýat kanunlary bolan massanyň we energiýanyň saklanmak kanunlaryny aňladýarlar. Biz aşakdaky geçiriljek işimizde maddy balansyň deňlemesinde himiki reaksiýanyň geçişini (atomlaryň geçişini) konwektiw geçişi (impulsyň geçişi), diffuzion geçişi) hasaba almak boljakdygyny görkezeris. Eger bu deňleme reaktordaky ýylylyk geçişini hasaba alýan ýylylyk (energetiki) balansyň deňlemesi bilen doldurulsa, onda reaktoryň ýeterlik doly matematiki modeli alnar.Reaktordaky hemme hadysa giňişlikde we wagt boýunça geçýär, şoňa göräde balans deňlemelerini düzmek üçin hem käbir ΔV elementar göwrümi we $\Delta \tau$ wagt aralygyny saýlap almaly. Çäginde konsentrasiýalaryň we temperaturalaryň paýlanyşynyň deňölçegsizligini hasaba almak mümkin bolan göwrüme ΔV elementar göwrüm diýilýär. Elementar göwrüm gurala görä hereketsiz we reaksion akym bilen süýşmeýär.Umumy ýagdaýda elementar ΔV göwrüm hemme ölçeglerinde tükeniksiz kiçi, ýöne käbir hususy ýagdaýlarda, meselem ideal garyşdyryjy gural üçin reaktoryň göwrümi boýunça deňölçegli diýip hasap etmek bolar. Sebäbi reaktoryň bu görnüşinde konsentrasiýa we temperatura ähli göwrüm boýunça deňölçegli paýlanandyr. Dowamynda ΔV elementar göwrümiň içinde konsentrasiýanyň we temperaturanyň üýtgemegini hasaba almazlyk mümkin bolan wagta $\Delta \tau$ elementar wagt aralygy diýilýär. Reaktoryň durnukly däl işleýiş düzgüni üçin elementar wagt aralygy tükeniksiz kiçi we durnukly işleýiş düzgüni üçin islendik wagt aralygy saýlanyp alynyp biliner.

8.3.Maddy balansyň deňlemeleri barada düşünje

Maddy balansyň deňlemelerini (bir ýa-da birnäçe) ol ýa-da beýleki düzüm bölek boýunça düzýärler. Deňlemelerde bu düzüm bölek boýunça bolup geçýän hemme üýtgemeleri suratlandyrýarlar.Eger reaktorda geçýän himiki reaksiýa sada bolsa, onda haýsy hem bolsa bir reagent ýa-da önüm boýunça bir maddy deňleşdirmäniň (balansyň) deňlemesini düzýärler.Eger reaksiýa çylşyrymly bolsa, onda matematiki beýany her biri azyndan bir sada reaksiýa gatnaşýan, birnäçe maddalar boýunça birnäçe deňlemeleri öz içine alýar. Haýsy hem bolsa bir J madda boýunça maddy balansyň deňlemesi ΔV elementar göwrümiň çäginde

$\Delta\tau$ wagt aralygynyň dowamynda bu düzüm bölegiň girişiniň we harçlanyşynyň ähli görnüşlerini hasaba alýar:

$$n_{j,gir}-n_{j,çyk} \pm n_{j,h,r}=n_{j,ýyg} \qquad (8.1)$$

bu ýerde $n_{j,gir}$-elementar ΔV göwrüme $\Delta\tau$ wagtda reaksiýanyň gatnaşyjylarynyň akymy bilen girizilen J maddanyň mukdary; $n_{j,çyk}$-elementar ΔV göwrümden $\Delta\tau$ wagtda reaksiýanyň gatnaşyjylarynyň akymy bilen çykarylan J maddanyň mukdary; $n_{j,h,r}$-elementar göwrümde (ΔV), $\Delta\tau$ wagtda himiki reaksiýa harçlanan (ýa-da himiki reaksiýanyň netijesinde emele gelen) J maddanyň mukdary; $n_{j,ýyg}$-elementar ΔV göwrümde $\Delta\tau$ wagtda ýygnanan J maddanyň mukdary (şol bir wagtda ΔV göwrümde ýerleşýän J maddanyň mukdarynyň üýtgemesi) Ýylylyk balansynyň deňlemesi hem şuňa meňzeş düzülýär. Elementar $\Delta\tau$ wagt aralygy üçin, ΔV elementar göwrüme girýän, ondan çykýan ýa-da onuň içinde emele gelýän ýylylyk akymlarynyň ählisine seredilýär. Olaryň jemi $\Delta\tau$ wagtda ΔV göwrümde ýylylygyň ýygnanmagyna deňdir:

$$Q_{gir}-Q_{çyk} \pm Q_{h,r} \pm Q_{y,ç}=Q_{ýyg} \qquad (8.2)$$

bu ýerde Q_{gir}-elementar ΔV göwrüme $\Delta\tau$ wagtda girýän maddalaryň ýylylyk düzümi; $Q_{çyk}$-açyk elementar ΔV göwrümden $\Delta\tau$ wagtda çykýan maddalaryň ýylylyk düzümi, $Q_{h,r}$-elementar ΔV göwrümde $\Delta\tau$ wagtda himiki reaksiýanyň netijesinde bölünip çykýan ýa-da siňdirilýän ýylylyk; $Q_{ч.ç}$-ΔV göwrümiň $\Delta\tau$ wagtda töwerekdäki gürşaw bilen ýylylyk çalşygyna harçlan ýylylygy; Q_{vyg}-Δt wagtda ΔV göwrümde ýygnanan ýylylyk .

8.4. Akymly himiki reaktoryň elementar göwrümi üçin maddy balansyň deňlemesi.

Getirilen klassifikasiýa degişlilijkde himiki reaksiýalaryň aýratyn görnüşlerine seretmezden öňürti J madda boýunça akymly himiki reaktoryň elementar göwrümi üçin maddy balansyň deňlemesini düzeliň .

Reaktoryň üstünden geçýän suwuklygyň akymyna seredeliň. Reaktorda himiki hadysanyň geçişine J maddanyň C_J molýar konsentrasiýasynyň üýtgeýşi boýunça baha bereris. Konsentrasiýanyň paýlanylyşy dört sany üýtgeýän ululyklara x,y,z, koordinatlara we τ wagta funksiýadyr: $C_J=C_J(x,y,z,\tau)$ Elementar wagt aralygy hökmünde $\Delta\tau$ tükeniksiz kiçi wagty $(\Delta\tau \to 0)$ we elementar göwrüm hökmünde taraplary dx, dy, dz tükeniksiz kiçi bolan parallepipedi kabul edip alalyň. Seredilýän J maddanyň üýtgemesi esasan üç sebäp bilen baglanşyklydyr: Diffuziýa geçişi, konwektiw geçiş we himiki reaksiýa. Diffuziýa geçişi J maddanyň giňişlikde deňölçegsiz paýlanmagy bilen ýüze çykýar. Diffuziýa geçişi Fikiň kanuny bilen aňladylýar.Bu kanuna görä J maddanyň üýtgemesi $DgradC_J$ deňdir (D-diffuziýanyň koýeffisiýenti)

Konwektiw geçiş ýa-da impulsyň geçişi haýsy hem bolsa bir daşky täsir astynda akymyň *u* tizlik bilen hereketi netijesinde ýüze çykýar.Suwuklygyň uly hereketlerinde, onuň ülüşleri öz düzümini üýtgetmän bilelikde hereket edýärler we netijede arassa garyşma bolup geçýär.Giňişligiň her bir hereketsiz nokadynda maddanyň konsentrasiýasy üýtgäp durýar. Konwektiw geçişi suwuklugyň göwrüm birliginiň impulsynyň üýtgemesi bilen häsiýetlendirmek bolar.Elementar göwrümde himiki reaksiýanyň geçmegi islendik himiki hadysanyň aýrylmaz bölegi.Reaksiýanyň barşynda J maddanyň harçlanmagy we emele gelmegi ω_{rj} himiki reaksiýanyň tizligine proporsionaldyr.Bu üç sany üýtgemeleriň jemi J maddanyň ýygnanmasyna deň bolmalydyr.Maddy balansyň deňlemesiniň aýratyn düzümlerini ýazalyň.

Diffuziýa akymy parallelepipediň içine dx,dy granyň üstünden (z okuň ugry bilen) girende Fikiň birinji kanunyna degişlilikde

$$-D\frac{\partial C_j}{\partial z}dxdy \qquad (8.3)$$

Akym elementar göwrümi geçende konsentrasiýanyň gradiýenti $\frac{\partial^2 C_j}{\partial z^2}dz$ ululyk üýtgär. Diýmek akym parallelepipetden gapma garşylykly grandan çykanda

$$-D\left(\frac{\partial C_J}{\partial z}+\frac{\partial^2 C_J}{\partial z^2}dz\right)dxdy \qquad (8.4)$$

Parallelepipediň hemme granlarynyň üstünden $d\tau$ wagtda diffuziýa geçişiniň netijesinde J maddanyň üýtgemesi

$$\Delta n_{J,dif} = (\frac{\partial^2 C_J}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 C_J}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_J}{\partial z^2})dxdydzd\tau = D\nabla^2 C_J dVd\tau (8.5)$$

Konwektiw akym bilen $d\tau$ wagtda dxdy grana z okuň ugry boýunça J maddanyň C_J $u_z dxdy d\tau$ mol mukdary girer.Şoňa meňzeş dydz granyň üstünden C_J u_x dydz$d\tau$ mol we dzdx granyň üstünden $C_J u_y$ dzdx mol J madda girer.Jemi konwektiw akym bilen elementar göwrüme

$$C_J(u_z dxdy+u_x dydz+u_y dzdx)d\tau \qquad (8.6)$$

J madda girer/

Parallelepipediň gapma garşylykly granyndan dτ wagtda z okunyň ugrunda

$$(u_z c_J + \frac{\partial(u_z c_J)}{\partial z}dz)dxdyd\tau = (u_z c_J + u_z \frac{\partial c_z}{dz}dz + c_J \frac{\partial u_z}{\partial z}dz)dxdyd\tau; \qquad (8.7)$$

y okuň ugrunda

$$(u_y c_J + u_y \frac{\partial c_J}{\partial y}dy + \frac{\partial u_y}{\partial y}dy)dzdxd\tau \qquad (8.8)$$

x okuň ugrunda

$$(u_z c_j + u_x \frac{\partial c_J}{\partial x}dx + c_J \frac{\partial u_x}{\partial x}dx)dydzd\tau \qquad (8.9)$$

Jemi hemme oklar boýunça:

$$c_J(u_z dxdy + u_x dydz + u_y dzdx)d\tau + \lfloor u grad c_J + c_j div u \rfloor dxdydzd\tau$$
(8.10)

bu ýerde

$$u_z \frac{\partial c_J}{\partial z} + u_x \frac{\partial c_J}{\partial x} + u_y \frac{\partial c_J}{\partial y} = ugradc_J \qquad (8.11)$$

we

$$\frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = divu \qquad (8.12)$$

(8.6) aňlatmadan (8.10)-y aýranymyzdan soňra (gysylmaýan suwukluk üçin divu=0 hasaba alyp) konwektiw geçişiň netijesinde $d\tau$ wagtda elementar göwrümde maddanyň mukdarynyň üýtgemesi.

$$\Delta n_{J,konw} = -U_{grad,C_J} dVd\tau \qquad (8.12)$$

Görkezilen dV göwrümde, dτ wagtda himiki reaksiýanyň netijesinde J maddanyň mukdarynyň üýtgemesi:

$$\Delta n_{J,h,r} = \omega_{rJ} dVd\tau \qquad (8.13)$$

Degişlilikde ΔV elementar göwrümde maddanyň ýygnanmasy

$$\Delta n_{j,ýyg} = \frac{\partial C_J}{\partial \tau} \partial\tau\partial V (8.14)$$

Şeýllikde J madda boýunça maddy balansyň deňlemesini (8.3-8.13) deňlemelere degişlilikde aşakdaky görnüşde ýazmak bolar

$$D\Delta^2 C_J dVd\tau - ugradC_J dVd\tau - \omega_{rg} dvd\tau = \frac{\partial C_J}{\partial \tau} \partial\tau\partial V \quad (8.15)$$

ýa-da soňky (8.15) deňlemäniň hemme agzalaryny dVdτ bölüp alarys,

$$D\Delta^2 C_J - ugradC_J - \omega_{rj} = \frac{\partial C_J}{\partial \tau} \quad (8.16)$$

Bu soňky (8.16) deňleme himiki reakorlarda bolup geçýän hadysalary doly suratda ýazyp beýan edýän hem bolsa ol örän çylşyrymly bolup ony çözmek kyndyr.

9.Ideal garyşdyryjy we ideal gysyp çykaryjy reaktorlar we olaryň netijeligini deňeşdirmek.

9.1.Ideal himiki reaktorlar barada umumy düşünjeler.

Ilki bilen izotermiki düzgünde işleýän reaktorlara seredip geçeliň.Bu reaktorlarda ýylylyk çalşygynyň hereketlendiriji güýji ýok ($\Delta T = 0$),şonuň üçin hem matematiki modeliň düzüminden ýylylyk balansynyň deňlemesini aýyrmak bolar.Has ýönekeýleşdirmek üçin ideal strukturaly reaktorlary iki sany özbaşdak toparlara-garyşdyryjy we gysyp çykaryjy reaktorlara bölmek bolar.Akymyň ideallygy barada düşünje (8-16) deňlemeden birnäçe operatorlary aýyrmak arkaly, ony sadalaşdyrmaga mümkinçilik berýär.

9 2.Ideal garyşdyryjy reaktoryň matematiki modeli.

Ideal garyşdyryjy reaktorlarda, onuň göwrüminiň hemme ýerlerinde temperatura, konsentrasiýa, maddalaryň öwrülmek derejesi birmeňzeş bolmalydyr. Bu netije reagentleri we önümleri gowy garyşdyrmak arkaly ýetilýär. Ideal garyşdyryjy reaktorlary iki sany topara-periodik we üznüksiz işleýänlere bölýärler. Ilki bilen periodik ideal garyşdyryjy reaktoryň matematiki modeline seredip geçeliň. Periodik reaktorlara başky çig mallary ýüklänlerinden soňra tä hadysa tamamlanýaça hiç bir reagent goşmaýarlar. Hemme ululyklaryň deňölçeglidigi üçin diffuziýa geçişi ýok, şonuň üçin hem (8-16) deňlemäniň birinji agzasy nola deňdir.Periodik reaktorlarda akymyň tizliginiň nola deňligi üçin (8-16) deňlemedäki konwektiw geçişiň agzasy, ýagny ikinji agza nola deňdir.Şeýlelikde, ideal garyşdyryjy periodik reaktor üçin maddy balansyň deňlemesi, şu aşakdaky görnüşi alýar:

$$\omega_{\mathrm{rz}} = \frac{dCj}{d\tau} \qquad (9.1)$$

Öwrülişigiň berlençuňňurlygyna ýetmek üçin zerur bolan wagt şu aşakdaky deňleme boýunça kesgitlenilýär:

$$\tau = \int_{c_{J,f}}^{c_{J,f}} \frac{dc_J\, j}{\omega_{rJ}(c_J)} \qquad (9.2)$$

Eger J madda başky çig mal bolsa, onda c_J konsentrasiýany öwrülmek derejesiniň üsti bilen aňlatmak bolar:

$$c_J = c_{J,o}(1 - x_J) \qquad (9.3)$$

we (9.2)deňleme şu aşakdaky görnüşi alar :

$$\tau = c_{J,0} \int_{o}^{x_{J,f}} \frac{dx_J}{\omega_{rJ}(x_J)} \qquad (9.4)$$

Indi durnukly düzgünde işleýän akymly ideal garyşdyryjy reaktoryň matematiki modeline seredeliň. Ideal garyşdyryjy gurallarda (8-16) deňlemäniň diffuziýa agzasy nola deňdir. Mundan başgada durnukly düzgünde maddalaryň ýygnanmasy ýok. we $\frac{dc_J}{d\tau}=0$

Reaktorlaryň seredilýän görnüşi üçin konwektiw geçişiň agzasyny tükenikli-tapawut görnüşinde ýazmak bolar.

$$u \operatorname{grad} c_J = -\bar{u}\frac{\Delta c_J}{\Delta Z} = -\frac{\upsilon}{F}\frac{\Delta c_J}{\Delta z} = -\frac{\upsilon}{V}\Delta c_J \qquad (9.5)$$

bu yerde ΔZ-koordinatyň üýtgemesi F-kese kesiginiň meýdany; V-reaktoryň göwrümi υ-göwrüm harçlanyşy.Getirilen (9.5) aňlatmada Δc_J reaktoryň çykalgasyndaky c_{Jf} we girelgesindäki c_{J0} konsentrasiýalaryň aratapawudyna deňdir Durnukly düzgünde işleýän akymly (üznüksiz) ideal garyşdyryjy reaktoryň matematiki modelini şu aşakdaky görnüşde ýazmak bolar:

$$\frac{\upsilon}{V}(c_{J,o}-c_{J,0}f)-\omega_{rJ}=o \qquad (9.6)$$

ýa-da

$$\frac{V}{\upsilon}=\bar{\tau}=\frac{c_{J,0}-c_{J,f}}{\omega_{rJ}} \qquad (9.7)$$

Bu ýerde τ-reaktoryň düzüminiň doly suratda täzelenişiniň dowamlylygyny häsiýetlendirýär.Bu ululyga reagentleriň akymly reaktorda bolmagynyň ortaça wagty diýlip atlandyrylýar.

9.3.Ideýal gysyp çykartyjy reaktoryň matematiki modeli

Ideal gysyp çykaryjy reaktorda reaksion garyndy porşen düzgüninde işleýär. Kanalyň oky boýunça reaksion garyndylar biri birleri bilen garyşmaýarlar .Iki we ondanda köp reagentleriň gatnaşmagynda bolup geçýän himiki reaksiýalarda garyşdyrmak zerur şertleriň biridir. Ideal gysyp çykaryjy reaktorlarda garyşdyrma ýerli häsiýetdedir. Ideal gysyp çykaryjy reaktorlar üçin kabul edilip alnan şertlere görä (8.16) deňlemäni sadalaşdyrmak bolar. Akymyň kanalynyň okuna perpendikulýar bolan tükeniksiz dz ýakyn aralykda geçirilen tekizlikleriň kesip alnan göwrümini elementar göwrüm hökmünde kabul edip almak bolar.

Bu elementar göwrümde kabul edilip alnan şertlere laýyklykda

dcj/dx=0 we dcj/dy=0.

Diýmek konwektiw geçşiş diňe z okuň ugry boýunça bolup geçýär. Ideal gysyp çykaryjy reaktorda diffuziýa geçişi ýok. Diýmek (8.10)deňleme durnukly däl düzgünde işleän ideal gysyp çykaryjy reaktor üçin şu aşakdaky görnüşi alýar.

$$-u_Z \frac{\partial cj}{\partial z} - \omega_{rJ} = \frac{\partial c_J}{\partial \tau} \qquad (9.8)$$

Bu ýagdaýda, cj iki sany üýtgeýän ululyga z koordinata t wagta funksiýadyr.Durnukly düzgünde deňleme has hem sadadyr:

$$-u_Z \frac{\partial cj}{\partial z} - \omega_{rJ} = 0 \qquad (9.9)$$

$$u_z = \upsilon/f \text{ we } fz/\upsilon = V/\upsilon = \bar{\tau} \qquad (9.10)$$

(9.10) deňlemäni hasaba almak bilen (9.9) deňlemäni şu aşakdaky görnüşde
ýazmak bolar.

$$-\frac{dc_J}{d\bar{\tau}} - \omega_{rJ} = 0 \qquad (9.11)$$

Bu ýerde getirilen $\bar{\tau}$ wagt (9.8) deňlemedäki τ wagtdan özüniň fiziki manysy boýunça düýpli aratapawutlanýar.Çykarylan (9.11) deňlemäni $\bar{\tau}$ we cj görä integrirlemek bolar:

$$\bar{\tau} = \int_{cj,o}^{cj,f} \frac{dcj}{\omega_{rJ}(c_J)} ; c_J = \int \frac{\omega_{rJ}}{u_z} dz \qquad (9.12)$$

ýa-da J-başky reagent bolsa onda

$$\bar{\tau} = c_{J,0} \int_{o}^{x_{J,f}} \frac{dx_J}{\omega_{rJ}(x_J) -} \qquad (9.13)$$

9.4.Ideal garyşdyryjy we ideal gysyp çykaryjy reaktorlaryň netijeliligini deňeşdirmegiň matematiki usuly.

Bu reaktorlary berilen netijäni almak üçin sarp edilýän wagt boýünça deňeşdireliň .

Ideal garyşdyryjy akymyly reaktor üçin :

$$\bar{\tau}_{gar} = [c_{A,o} - c_{A,f}]\left[\frac{1}{\omega_{rA}(c_{A,f})}\right] \qquad (9.14)$$

Durnukly düzgünde işleýän ideal gysyp çykaryjy reaktor üçin

$$\bar{\tau}_{gys} = -\int_{cA,0}^{cA,f} \frac{1}{\omega_{rA}(c_{A,f})} dc_A \qquad (9.15)$$

Şol bir göwrüm harçlanşynda, birmeňzeş netijelere ýetmek üçin, akymly ideal garyşdyryjy reaktora garanyňda ideal gysyp çykaryjy reaktoryň göwrümi kiçi bolmalydyr. Şonda ideal gysyp çykaryjy reaktoryň öndürijiligi we intensiwligi ýokary bolar.

10.Akymly reaktorlarda ideallykdan gyşarmalaryň sebäpleri. Ideal däl strukturaly akymly reaktorlaryň matematiki modelleri

10.1.Akymly reaktorlarda ideallykdan gyşarmalarynyň sebäpleri

Ideal reaktorlaryň matematiki modelleri düzülende birnäçe şertler kabul edilip alnypdy.Bu şertler matematiki modelleri gurmagy we onuň esasynda hasaplamalary geçirmegi aňsatlaşdyrypdy.Emma bu kabul edilip alnan şertler elmydama hakyky şertlere ýakyn bolup durmaýar.Ilki bilen ideallykdan gyşarmalaryň sebäplerine we soňra bolsa hakyky reaktorlaryň matematiki modelleriniň gurluşynyň usullaryna seredip geçeliň.Üznüksiz hereket edýän akymly reaktorlary şu aşakdaky ýaly häsiýetlendirmek bolar: çig mal akymy gurala girýär we haýsy hem bolsa bir usul boýunça girelgeden çykalga tarap süýşýär.Şunda çig malyň hemmesi, olaryň arasyndaky öwrülişik hadysalary bolup geçýänçä, käbir wagtyň dowamynda guralda ýerleşýär diýip kabul edilýär.Umumy ýagdaýda, akymyň aýratyn bölekleriniň guralda bolýan wagty, bahasy noldan tükeniksizlige çenli üýtgeýän tötänleýin ululykdyr.Akymyň käbir bölekleri, guralyň durnuklaşan ýerine düşip öwürlişikli hadysalara gatnaşman hem bilerler.Bu ýerde maddalaryň garyndysy saklanylýar we himiki hadysanyň tizligi nola deň bolmasada hadysanyň esasy akymyndaky tizliginden düýpli aratapawutlanýar.Maddalaryň akymynyň böleginiň hadysalara gatnaşyp bilmezliginiň sebäpleriniň ýene biri hem onuň guralyň içinde aýlanyp geçmegidir.Şonuň ýaly aýlanyp geçmelere, hadysa giňişligi bolup katalizatorlarynyň däneleriniň üsti hyzmat edýän gurallarda köp duş gelinýär.Eger maddalaryň akymlarynyň hemmesi hadysa giňişliginde takyk birmeňzeş wagt ýerleşse, onda iň gowy netije alynardy.Bu akymyň çyzykly tizlikleriniň gapdaly tekiz bolan, ideal gysyp çykaryjy gurallarda mümkindir.Emma ideal gysyp çykaryjy gurallara ýakyn bolan hakyky gurallarda hem akymyň bölekleriniň wagt boýunça paýlanylmagy bolup geçýär.Bu hadysa okuň ugrunda bölekleýin garylmagyň netijesinde mümkindir. Meselem: şunuň ýaly garylma, malekulýar diffuziýanyň netijesinde ýüze çykyp biler:Gysyp çykaryjy guralyň uzynlygy boýunça iki sany goňşy nokatlarda hadysanyň gatnaşyjylarynyň konsentrasiýalary dürli-dürlidir. Konsentrasiýalaryň tapawudy ΔC diffuziýanyň hereketlendiriji güýjidir.Uzynlygyna diffuziýanyň bolmagy akymyň “gaty” hereketiniň pozulmagyna getirýär. Molekulýar diffuziýa bilen bir hatarda turbulent diffuziýa hem bolup geçýär. Turbulent akym, onuň tizliginiň ortaça tizlige görä tertipsiz yrgyldamalary bilen tapawutlanýar. Şunda radial ugurdaky yrgyldamalar şertleriň (konsentrasiýanyň, temperaturanyň) deňleşmegine, diýmek ideal gysyp çykarmagyň kabul edilen şertleriniň ýerine ýetirilmegine getirýär.Uzaklyk boýunça yrgydamalar, Ok boýunça diffuziýa turbulent akymda bolup geçmeýär.Meselem: suwuklugyň laminar akymyda, tizlikleriň meýdanynyň deňölçegsizligi netijesinde uzynlyk boýunça garylma ýüze çykyp biler. Şunuň ýaly garylma Teýloryň diffuziýasy diýilýär. Gysyp çykaryjy reaktorlarda durgunlaşal ýerler bilen bir hatarda aýlaw ýerler hem bolup biler. Onda garyndy akymyň özenine garanyňda has köp wagt saklanýar. Akymyň esasy bölegi guralyň üstünden, ortaça bolmak wagtyndan çalt geçýär. Gurallaryň teoriýasyda akymyň ideal däldigini hasaba alýan modeller hem käbir sadalaşmalara esaslanýar we şonuň üçin hem hakykata belli bir derejede ýakynlaşýar. Emma bu modeller, ideal garyşdyrma we gysyp çykarma modellerine garanyňda hakyky hadysany has takyk ýazyp beýan edýär.

10.2. Ideal däl strukturaly akymly reaktorlaryň matematiki modelleri

Ideal däl strukturaly akymly reaktorlaryň matematiki modeli birnäçe talaplary kanahatlandyrmalydyr. Birinjiden ol ideal strukturaly akymly reaktoryň modeline garanyňda himiki hadysalaryň kanunalaýyklyklaryny has takyk bermelidir. Ikinjiden modeliň çylşyrymlylygyna garamazdan, analitiki ýa-da san usullary bilen gurallaryň möhüm ulukyklaryny hasaplamak üçin zerur bolan baglanşyklary çykarmak mümkin bolmalydyr. Ideal garyşdyryjy we ideal gysyp çykaryjy gurallaryň getirilen deňeşdirilmesinden görnüşi ýaly, bu gurallar maddanyň konsentrasiýasynyň guralyň göwrümi boýunça paýlanyşynyň iki sany çäk ýagdaýlaryny beýan edýär. Şonuň üçin hem ideal däl strukturaly akymly reaktorlaryň modellerine bir goşmaça talap bildirmek mümkindir.Modele girýän deňlemeleriň kabir çäk bahalarynda, ol ýa ideal garyşdyryjy ýa-da ideal gysyp çykaryjy guraly beýan etmelidir. Düzgüne görä, matematiki modeller işlenilip düzülende, nazaryýet matematiki beýan etmegiň umumy deňlemelerini berýär, hem-de deňlemelerdäki hemişelikleriň bahasy tejribe üsti bilen kesgitlenilýär. Bu hemişeliklere matematiki modeliň parametrleri diýilýär.Adatça şunuň ýaly parametrleriň az bolmagy ugrunda çalyşýarlar. Bir tarapdan seredeniňde parametrleriň köp bolmagy modeli takyk edýär, emma şunda köp sanlu ýalňyşlyklaryň ýüze çykmak howpy döreýär. Sebäbi parametrler näçe köp bolsa, ony kesgitlemek üçin şonçada köp tejribeler geçirmek gerek bolýar. Ideal däl reaktorlaryň matematiki modelini iki sany çemeleşmäniň esasynda gurmak mümkindir. Olaryň birisi hakyky reaktoryň ideal reaktorlaryň pikirdäki ol ýa-da beýleki utgaşdyrylmasyna esaslanandyr. Ikinji çemeleşmäniň uly fiziki esaslandyrmasy bar. Bu çemeleşmelerde, bolup geçýän fiziki hadysalaryň möhümlerini degişli matematiki operatorlaryň kömegi bilen modeliň deňlemelerine girizmäge çalyşýarlar. Birinji çemeleşmede, matematiki model, birnäçe ideal reaktorlaryň matematiki beýanyny birleşdirýän deňlemeleriň sistemasyndan ybarat bolar. Deňlemeleriň sany köp bolup biler, ýöne olar ideal modelleriň deňlemeleri ýaly sada bolup galarlar. Ikinji çemeleşmede deňlemeleriň sany az hem bolsa olar çylşyrymlydyr.Bir parametrli öüjükli modeller has giň ýaýrandyr. Öýjükli modelde hakyky reaktorlary beýan etmek üçin birinji çemeleşme ulanylandyr: hakyky reaktor pikirde N sany yzygiderli birikdirilen ideal garyşdyryjy öýjüklere bölünýär.Ähli öýjükleriň göwrümleriniň jemi reaktoryň doly göwrümine deňdir. Şonuň ýaly çalyşmagyň dogrulygy ideal garyşdyrma reaktorlarynyň hataryny aýratyn ideal garyşdyrma we ideal gysyp çykarma reaktorlary bilen deňeşdirmekden gelip çykýar.Öýjükli model J düzüm boýunça maddy balansyň N deňlemeleriniň sistemasyndan ybaratdyr. Olaryň her biriniň şu aşakdaky ýaly görnüşi bardyr.

$$\bar{\tau}_i = \frac{V_i}{\upsilon} = \frac{C_{J,i-1} - C_{J,i}}{\omega_{rJ}(C_{J,i})} \qquad (10.1)$$

N=1 bolanda (10.1) deňleme ideal garyşdyrma reaktorynyň birini beýan edýär

$$\bar{\tau} = \frac{V}{\upsilon} = \frac{C_{J,o} - C_{J,f}}{\omega_{rj}(C_{J,f})} \qquad (10.2)$$

$N \to \infty$ we bölümçeleriň tükeniksiz kiçi V_i göwrümlerinde N sany reaktorlaryň hatarynda bolmak wagtyny jemiň käbir çägi hökmünde seretmek bolar

$$\bar{\tau}_{\Sigma} = \sum_{i=1}^{N} \tau_{\bar{i}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{-\Delta C_{J,i}}{\omega_{r,J}(C_{J,i})}, \tag{10.3}$$

bu ýerde $\Delta C_{J,i} - C_{J,i-1}$. Bu çäge integral hökmünde seretmek bolar

$$\bar{\tau}_{\Sigma} = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{N} \frac{-\Delta C_{J,i}}{\omega_{rJ}(C_{J,i})} = -\int_{C_{J,0}}^{C_{J,f}} \frac{dC_J}{\omega_{rJ}(C_J)} \tag{10.4}$$

(10.4) we (9.15) deňlemeleri deňeşdirip $N \to \infty$ öýjükli modeliň akymly ideal gysyp çykaryjy reaktoryň modeline öwrülýändigine göz ýetirmek bolar. Şeýlelikde öýjükli modeliň kömegi bilen çäkdäki gidrodinamiki düzgünleri beýan etmek bolar. Şonuň ýalyda bu modeliň kömegi bilen aralyk düzgünleri hem beýan etmek bolar. N<10 bolanda öýjükli modeliň ulanylmagy hakyky reaktory kanagatlanarlykly beýan etmäge mümkinçilik berýär. Hakyky reaktory çalyşýan öýjükleriň sany N öýjükli modeliň ýeke-täk parametridir.

11.Geterogen hadysalaryň umumy aýratynlyklary. Geterogen hadysalaryň diffuziýa basgançaklary (stadiýalary).“Gaz-gaty madda sistemada geterogen katalitik däl hadysalar.

11.1.Geterogen hadysalaryň umumy häsiýetnamasy.

Himiýa tehnologiýasynyň hadysalarynda ulanylýan himiki reaksiýalaryň köpüsi dürli fazalardaky maddalaryň gatnaşmagy bilen bolup geçýär. Reaksiýanyň gatnaşyjylarynyň haýsy fazadadygyna baglylykda iki fazaly we üç fazaly sistemalara bölýärler.

Arasyndaky özlerine mahsus bolan tapawutlara garamazdan, olaryň hemmesi bir umumy alamat boýunça birleşdirilendir: himiki reaksiýa geçmezden öňürti, fazalaryň araçäk üstüne ýa-da beýleki fazanyň göwrümine reagentleriň geçmegi. Adatça, geterogen hadysalar fazalaryň araçäk üstünde geçýärler. Şunda hemme reagentleriň we önümleriň bir fazada ýerleşýändigine garamazdan hadysa geterogen bolup biler. Meselem, gazgörnüşli azotdan we wodoroddan ammiagyň sintezi demir katalizatoryň üstünde bolup geçýär, şonuň üçin hem bu hadysa geterogendir.

11.2.Geterogen hadysalaryň umumy aýratynlyklary.

Gomogen reaksiýalarda, maddalaryň reaktoryň giňişliginiň bir böleginden beýleki bölegine geçmegi örän çalt bolup geçýär we şonuň üçin hem reaksiýanyň tizligine täsir etmeýär.

Geterogen hadysalarda maddalaryň bir fazadan beýleki faza geçmegi örän haýal bolup geçýär, şonuň üçin hem ony hasaba almak zerurdyr.

Köplenç halatlarda geterogen hadysanyň tizligi himiki reaksiýanyň tizligi bilen dälde, eýsem diffuziýa geçişiniň tizligi bilen kesgitlenilýär. Geterogen hadysanyň häsiýetli aýratynlygy, onuň köp basgançaklylygydyr. Bir ýa-da birnäçe himiki basgançaklar bilen bir hatarda fiziki basgançaklar hem bolýar. Biziň bilişimiz ýaly, fiziki basgançaklarda himiki öwürlişikler bolup geçmeýär.

Bu basgançaklarda maddalar konsentrasiýalarynyň aratapawudynyň täsiri astynda bir fazadan başga bir faza geçýärler. Şeýlelikde, maddalaryň konsentrasiýalarynyň aratapawudy diffuziýa hadysalarynyň hereketlendiriji güýjüdir. Geterogen hadysalarda himiki basgançak geterogen ýa-da gomogen himiki reaksiýa bolup biler. Meselem, dürli sulfid magdanlary bişirilende bolup geçýän metallaryň sulfidi bilen kislorodyň arasyndaky özara täsir geterogendir. Suwuk uglewodorodlaryň molekulýar kislrod bilen okislenmek reaksiýasy, reagentleriň dürli fazada bolmagyna garamazdan gomogen reaksiýa ýaly bolup geçýär. Sebäbi, uglewodorodlar suwda erän kislorod bilen reagirleşýärler. Bu ýagdaýda himiki reaksiýa geterogen bolman, eýsem onuň öň ýanyndaky kislorodyň suwda eremek basgançagy geterogendir.

Başky reagentler we önümiň reaksiýalary bir ýa-da birnäçe faza emele getirýändigine baglylykda himiki hadysalary gomofazalylara we geterofazalylara bölýärler. Başky reagentleri, durnukly aralyk maddalary we reaksiýanyň önümleri bir fazanyň çäginde ýerleşýän himiki hadysalara gomofazaly diýilýär. Başky reagentleri, durnukly aralyk maddalary we reaksiýanyň önümleri birden köp faza emele getirýän himiki hadysalara geterofazaly diýilýär. “Gomogen” we “geterogen” reaksiýalar düşünjeleri “gomofazaly” we “geterofazaly” düşünjelerine gabat gelmeýär. Reaksiýanyň gomogenligi we geterogenligi belli bir kesgitli derejede onuň mehanizmini suratlandyrýar: reaksiýa bir fazanyň göwrüminde ýa-da fazalaryň araçäk üstünde geçýärmi.

Hadysanýň gomofazalylygy ýa-da geterofazalylygy diňe reaksiýanyň gatnaşyjylarynyň faza düzümi barada aýtmaga mümkinçilik berýär. Meselem, kislotanyň aşgar bilen bitaraplaşdyrylyşy–bu gomofazaly gomogen hadysa. Ýokarda seredilip geçilen ammiagyň sintezi gomofazaly geterogen hadysa. Uglewodorodlaryň suwuk fazada molekulýar kislorod bilen okislendirilmegi, himiki reaksiýasy gomogen bolan, geterofazaly hadysa. Hekiň söndürilşi:

$$CaO + H_2O \rightarrow Ca(OH)_2$$

reaksiýa gatnaşyjylaryň üçisi hem aýratyn fazalary emele getirýärler we himiki reaksiýa suw bilen kalsiniň oksidiniň araçäk üstünde bolup geçýär. Şonuň üçin hem bu geterofazaly geterogen hadysadyr. Geterogen hadysalar köp stadiýalydyr.

Umumy ýagdaýda, geterogen hadysany düzýän aýratyn stadiýalaryň tizlikleri düýpli tapawutlanyp we tehnologiki düzgüniň parametrleriň üýtgeýşine dürli baglylykda bolup bilerler.Meselem, temperatura himiki reaksiýanyň tizligine we diffuziýanyň hasabyna maddalaryň geçişine birmeňzeş täsir etmeýär. Eger çylşyrymly hadysa parallel stadiýalardan ybarat bolsa, onda onuň tizligi bu stadiýalaryň tizlikleriň jemine deňdir: $W_{\sum} = \sum_{i=1}^{n} Wi$

$$\omega_{\Sigma} = \sum_{i=1}^{n} \omega_i \qquad (11.1)$$

Birnäçe yzygiderli stadiýalardan durýan hadysanyň umumy tizliginiň we onuň aýratyn stadiýalarynyň tizlikleriniň arasyndaky baglanyşyk durnukly we durnukly däl düzgünler üçin tapawutlydyr.

Durnukly däl düzgünde yzygiderli stadiýalaryň tizlikleri özara tapawutlanýarlar we hadysanyň umumy tizligi iň haýal stadiýanyň tizligine deňdir. Durnukly düzgünde yzygiderli stadiýalaryň tizlikleri iň kynlyk bilen geçýän stadiýanyň tizlikleri bilen deňleşýärler: olaryň bahasy hadysanyň umumy tizligine deňdir:

$$W_1 = W_2 = ... = W_i = ... = W_{\Sigma} \qquad (11.2)$$

Dürli modellerde, geterogen hadysalar yzygiderli ýada yzygiderli we parallel stadiýalardan ybaratdyr. Geterogen himiki reaksiýanyň tizligi diýilip, reagentleriň ýada reaksiýanyň önümleriniň biriniň wagt birliginde we fazalaryň araçäginde üst birliginde reagirleşýän ýada emele gelýän mukdaryna aýdylýar. Geterogen hadysanyň tizligi **J** düzüm boýunça şu aşakdaky formula bilen kesgitlenýär:

$$W_J = \pm\frac{1}{j}\frac{1}{s}\frac{dn_J}{d\tau} \qquad (11.3)$$

bu yerde s–täsirleşmäniň üst meýdany; j–J reagentiň (ýa-da önümiň) stehiometriki koeffisiýenti. Geterogen hadysanyň aýratyn basgançaklarynyň (stadiýalarynyň) we ähli hadysanyň tizlikleri olary deňeşdirmek mümkin bolar ýaly birmeňzeş bolmalydyrlar. Diýmek, himiki basgançaklarynyň tizligini (11.3) deňleme bilen kesgitläris we diffuziýa basgançaklarynyň tizligini W_{dJ} hem wagt birliginde fazalaryň araçäginiň üst birliginden geçirilen J maddanyň mukdary hökmünde taparys.Kähalatlarda geterogen himiki reaksiýanyň tizligi wagt birliginde reaksiýa girişen ýa--da reaksiýanyň netijesinde emele gelen maddanyň mukdary görnüşinde kesgitlenilýär.Bu kesgitleme öndürijilik düşünjesi bilen gabat gelýär.Reaksion giňişligiň göwrümi näçe uly bolsa reaktoryň öndürijiligi hem şonça ýokarydyr: berlen ýagdaýda ol fazalaryň araçäk üstüne proporsionaldyr. Geterogen hadysanyň tizligini beýan etmek üçin (11.3) deňlemeden peýdalanjakdyrys.Kähalatlarda şünuň ýaly tizlige udel tizlik diýilýär. Şunda tizlik fazalaryň araçäk üstüniň ölçeglerine bagly däldir.Islendik himiýa tehnologiýasynyň ahyrky netijesi–bu himiki öwrülişigiň netijesinde önümiň emele gelmegidir.

Şuňa görä hem islendik ýagdaýda geterogen hadysanyň tizligi himiki hadysanyň tizliginden ýokary bolup bilmez. Dogrydan hem, maddanyň bir fazadan beýleki faza geçişi näçe çalt bolsa hem bu geçiş öz--özünden önümiň emele gelmegine getirmeýär.Emma geterogen hadysanyň tizligi diffuziýa geçişiniň tizliginden ýokary hem bolup bilmeýär, sebäbi ol himiki reaksiýanyň öňünden gelýär.Geterogen hadysalar derňelende iki sany düýpli tapawutlanýan ýagdaýlary belleýärler.Birinji ýagdaýda himiki reaksiýanyň tizligi uly we diffuziýa stadiýalaryň tizliklerinden ýokary geçýär.Onda, reaktoryň öndürüjiligini ýokarlandyrmak üçin diffuziýa basgançaklarynyň päsgelini aýyrmaga çalyşýarlar.Bu ýagdaý geterogen hadysanyň geçişiniň diffuziýa ýaýlasyna degişlidir.Ikinji ýagdaýda himiki reaksiýanyň tizligi diffuziýa basgançaklarynyň tizliginden kiçi. Bu ýagdaýda reaktoryň öndürijiligini artdyrmak üçin himiki reaksiýany çaltlandyrýan tehnologiki düzgünlere geçmek zerurdyr. Şunuň ýaly geterogen hadysalary, kinetiki ýaýlada geçýän diýlip atlandyrmak kabul edilendir.

11.3.Geterogen hadysalaryň diffuziýa basgançaklarynyň.

Geterogen himiki reaksiýanyň geçmegi netijesinde giňişligiň dürli nokatlarynda reagentleriň we önümleriň dürli konsentrasiýalary emele gelýär.

Meselem, gazgörnüşli A reagent B gaty reagent bilen özara täsir edişende, gaty maddanyň daşynda geçýän akymyň özine garanyňda B gaty reagentiň üstündäki A reagentiň konsentrasiýasy kiçidir.

A reagentiň konsentrasiýalarynyň gradiýenti diffuziýanyň ýüze çykmagynyň sebäpkäridir. Bu hadysa özakymyna, molekulalaryň tertipsiz hereketi bilen tä konsentrasiýalaryň paýlanyşynyň deňagramlylyk ýagdaýyna ýetilýänçä dowam edýär. Maddanyň bölejikleriniň tertipsiz ýylylyk hereketi massaçalyşyk hadysasynyň çaltlaşmagyna ýardam edýar.Geterogen hadysalar seredilende himiki hadysanyň öňünde bolup geçýän diffuziýa hadysalarynyň tizligini bilmek zerurdyr. Bu onüň himiki hadysanyň umumy tizligine päsgel berýändigini ýa päsgel bermeýändigini anyklamaga mümkinçilik berýär. Diffuziýanyň tizligi gurşawýň dykyzlygyna we şepbeşikligine, temperatura, diffuziýa gatnaşýan bölejikleriň tebigatyna, daşky güýçleriň täsirine we ş. m. baglydyr. Diffuziýa hadysalarynyň kanunalaýyklary Fikiň kaniny bilen beýan edilýär. Fikiň birinji kanunyna görä, geçişiň ugruna perpendikulýar S üstden wagt birliginde geçirilýän A maddanyň mukdary bu maddanyň berlen τ pursatdaky gradiýentine proporsionaldyr:

$$\omega_{Ad} = \frac{1}{aS}\frac{dn_A}{d\tau} = D\left(\frac{dC_A}{dZ}\right)\tau \qquad (11.4)$$

D–proporsionallyk koeffisiýentine, molekulýar diffuziýanyň koeffisiýenti diýilýär; onuň ölçeg birligi (uzunlyk)^2(wagt)$^{-1}$, meselem sm^2/s. $\alpha - A$ maddanyň stehiometrik koeffisiýenti.

Umumy ýagdaýda konsentrasiýa giňişlikde we wagt boýunça üýtgeýär. A maddanyň konsentrasiýasynyň wagt boýunça molekulýar diffuziýanyň netijesinde üýtgemegi Fikiň kanuny bilen beýan edilýär:

$$D\frac{\partial^2 C_A}{\partial Z^2} = \frac{\partial C_A}{\partial \tau} \qquad (11.5)$$

ýa-da üçölçegli giňişlikdäki diffuziýa üçin

$$\frac{\partial C_A}{\partial \tau} = D\nabla^2 C_A = D\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right) \qquad (11.6)$$

(11.4) deňlemede konsentrasiýanyň gradiýentini tükenikli üýtgemeleriň gatnaşygy bilen çalşyralyň:

$$W_d = -\frac{1}{aS}\frac{dn_A}{d\tau} = D\frac{\partial C_A}{\partial Z} \approx D\frac{\Delta C_A}{\Delta Z} \qquad (11.7)$$

bu ýerde ΔC_A-üstünden diffuziýa akymy geçýän $\Delta Z = \delta$-galyňlykdaky gatlaga deň bolan aralykda konsentrasiýanyň üýtgemegi.

Onda

$$W_d \approx \beta \Delta C_A, \qquad (11.8)$$

bu ýerde β–proporsionallyk koeffisienti (massaberijilik koeffisiýenti),

$$\beta = \frac{D}{\Delta Z} = \frac{D}{\delta} \qquad (11.9)$$

Araçäk üstde geterogen hadys geçende başka reagentleriň harçlanmagy we reaksiýanyň önümleriniň emele gelmegi bolup geçýär. Hadysanyň durnukly geçmegi üçin reaksiýa geçýän üstde başky reagentiň harjanyşynyň üstüni dolup durmak we ondan emele gelen önümleri aýyrmak zerurdyr. Diffuziýanyň hasabyna geçiş konsentrasiýalaryň aratapawudy barka bolýar.

Reaksiýa näce çale geçýän bolsa, diffuziýanyň tizligi hem şonça ýokary bolmalydyr, bolmasa himiki reaksiýa diffuziýa hadysalary bilen päsgellenip biler.
Konsentrasiýalaryň aratapawudy, fazalaryň araçäk üstünde ýerleşýän, diffuziýa gatlakçasynda ýüze çykýar diýip hasap etmek bolar. Bu diffuziýa gatlagynyň içinde maddanyň geçişi diňe molekulýar diffuziýanyň hasabyna bolup geçýär.

Gatlakçanyň galyňlygy näçe uly bolsa, (11.9) deňlemä degişlilikde massaberijiligiň koeffisiýenti şonçada ulydyr. Molekulýar diffuziýanyň koeffisiýenti D (diffuziýanyň tizliginiň deňlemelerindäki proporsionallyk koeffisiýenti) diffuziýa gatnaşýan maddalaryň molekulýar häsiýetlerine baglydyr. Ol temperaturaň ýokarlanmagy bilen gowşak ösýär we basyşyň ýokarlanmagy bilen peselýär.D diffuziýa koeffisiýentini esasan tejribe boýunça, hemde empiriki we ýarymempiriki baglanyşyklar boýunça kesgitlenýärler.

11.4.“Gaz-gaty madda” sistemada geterogen katalitik däl hadysalar.

“Gaz-gaty madda” sistemadaky geterogen hadysalar senagat himiýa tehnologiýasynda giňden ýaýrandyr. Olara dürli magdanlaryň bişirilşi, sement klinkeriniň alnyşy, sinkiň oksidiniň kükürtwodorody siňdirişi we ş.m. degişlidir. Şu toparyň içinde hem geterogen hadysalaryň aýratyn görnüşlerini tapawutlandyrmak bolar. Umumy ýagdaýa reagentleriň we önümleriň düzüminde gaty we gaz görnüşli maddalar bolýar:

$$aA(gaz) + bB(gaty) \rightarrow rR(gaz) + sS(gaty)$$

Reaksiýalaryň şeýle görnüşine, meselem, demir kolçedanyň ýakylmagy degişlidir:

$$11O_2 + 4FeS_2 \rightarrow 8SO_2 + 2Fe_2O_3$$

Gaz görnüşli reagent, ýa-da gaty önüm bolmadyk reaksiýalar hem mümkindir.

Meselem:

$$aA(gaz) + bB(gaty) \rightarrow rR(gaz)$$
$$(O_2 + C \rightarrow CO_2)$$

12.Katalizatoryň içki üstüniň netijeliligini hasaplamak üçin deňlemeler.

Katalizatoryň üstüniň ulanylyşynyň netijeliligi hadysanyň geçirilşiniň şertlerine–temperatura, basyşa we reaksiýanyň tizliginiň hemişeligine we diffuziýanyň koeffisiýentine täsir edýän beýleki ululyklara baglydyr. Meselem, demir katalizatorda ammiagyň sintezi geçirilende, katalizatoryň üstüniň ulanylyş derejesi 5,4% deňdir. Wanadiý katalizatorynda kükürdiň oksidiniň okislenmegi geçirilende, katalizatoryň üstüniň ulanylyş derejesi 71% deňdir.

Katalizatoryň üstüniň ulanylyş derejesine mukdar taýdan netijeliligiň koeffisiýenti ε boýunça baha bermek bolar. Ol katalizatoryň öýjüklerinde reagentiň harçlanylyşynyň ortaça tizliginiň, päsgellenmäniň ýok wagtyndaky iň uly tizligine bolan gatnaşygyna deňdir.

Goý, katalizatoryň R radiusly we α uzynlykly göni silindr görnüşli öýjükleri bar we onuň üstünde tizligi:

$$\omega_{r\alpha} = -\frac{1}{aS}\frac{dn_A}{d\tau} = K_s C_A \qquad (12.1)$$

deňleme bilen beýan edilýän, birinji tertipli himiki reaksiýa geçýär. Bu ýerde S–katalizatoryň üsti; K_s–birinji tertipli üst reaksiýasynyň tizliginiň hemişeligi.

Içki diffuziýanyň päsgellendiriji täsiri täsiri netijesinde, öýjügiň uzynlygy boýunça, A reagentiň konsentrasiýasy azalýar.Onda reaksiýanyň tizligi öýjügiň başynda we ahyrynda birmeňzeş däldir.

Eger, öýjügiň ähli uzynlygy boýunça reagentiň konsentrasiýasy, onuň daşky üstdäki konsentrasiýasyna $C_{A,S}$ deň bolsa onda reagentiň harçlanyşynyň iň uly tižligi bolar:

$$-\frac{1}{a}\left(\frac{dn_A}{d\tau}\right)_{MAX} = K_S S C_{A,S} \qquad (12.2)$$

S–silindrik öýjügiň içki üsti:

$$S = 2\pi RL \qquad (12.3)$$

(12.3) deňlemäni hasaba almak bilen:

$$-\frac{1}{a}\left(\frac{dn_A}{d\tau}\right)_{MAX} = 2\pi RLK_S C_{A,S} \qquad (12.4)$$

Içki diffuziýanyň kynlaşdyrylan şertlerinde A maddanyň himiki reaksiýa hakyky harçlanylyşy, onuň molekulýar diffuziýanyň hasabyna öýjügiň agzyna berlişiniň tizliginden ýokary bolup bilmez:

$$-\frac{1}{a}\left(\frac{dn_A}{d\tau}\right)_{ort} = D\pi R^2\left(\frac{dC_A}{dZ}\right)_{z=0} \qquad (12.5)$$

bu ýerde Z–koordinata.(12.4) we (12.5) deňlemeleri hasaba almak bilen katalizatoryň içki üstüniň ulanylyşynyň netijeliliginiň koeffisiýentini şu aşakdaky aňlatma görnüşinde ýazmak bolar:

$$\varepsilon = \frac{D\pi R^2 \left(\frac{dC_A}{dZ} \right)_{z=0}}{2\pi RLK_S C_{A,S}} = \frac{DR \left(\frac{dC_A}{dZ} \right)_{z=0}}{2LK_S C_{A,S}} \qquad (12.6)$$

Öýjügiň agzyndaky konsentrasiýanyň gradiýentini $\left(\frac{dC_A}{dZ} \right)_{z=0}$ hasaplamak üçin $C_A(Z)$ baglanyşygy almak zerurdyr. Bu maksat bilen, dZ aralykda ýerleşýän iki sany kesik bilen emele getirilen öýjügiň içindäki tükeniksiz kiçi göwrüm üçin maddy balans düzeliň. A maddanyň bu göwrüme girmegi diňe diffuziýanyň hasabyna bolup geçýär:

$$-\pi DR^2 \left(\frac{dC_A}{dZ} \right)_Z \qquad (12.7)$$

A maddanyň harçlanylyşy Z+dZ kesikde diffuziýanyň hasabyna

$$-\pi DR^2 \left(\frac{dC_A}{dZ} \right)_{z+dz} = -\pi DR^2 \left(\frac{dC_A}{dZ} + \frac{d^2 C_A}{dZ^2} dZ \right) \qquad (12.8)$$

şeýle hem üstdäki himiki reaksiýanyň hasabyna

$$2\pi RdZK_S C_A \qquad (12.9)$$

bolup geçýär.

Durnukly düzgünde (12.7), (12.8) we (12.9) akymlaryň algebraik jemi nola deňdir:

$$\pi DR^2 \frac{d^2C_A}{dZ^2} dZ - 2\pi RdZK_S C_A = 0 \qquad (12.10)$$

ýa-da

$$\frac{d^2C_A}{dZ^2} - \frac{2K_S}{RD} C_A = 0 \qquad (12.11)$$

Belgileme girizeliň

$$\frac{2K_S}{RD} = m^2 \qquad (12.12)$$

Onda ikinji tertipli birgörnüşli differensial deňleme aşakdaky görnüşi alar:

$$C_A^{||} - m^2 C_A = 0 \qquad (12.13)$$

Onuň çözgüdini aşakdaky araçäk şertlerde tapalyň:

1) $Z=0 \qquad C_A=C_{A,S}$; (12.14)

2) $Z=L \qquad \left(\frac{dC_A}{dZ}\right)_L = 0$ (12.15)

yagny öýjügiň düýbünde diffuziýa akymy ýok. (12.13) deňlemäniň hususy çözgüdini $C_A = e^{AZ}$ görnüşde gözläliň. Onda $C_A=Ae^{AZ}$, $C_A^{||} = A^2e^{AZ}$ we (12.13) deňleme şu görnüşi alar

$A^2e^{AZ} - m^2e^{AZ} = 0$, bu ýerde $A = \pm m$ alynýar. Diýmek (12.13) deňlemäniň hususy çözgütleri:

$C_A=e^{mZ}$ we $C_A=e^{-mZ}$

we umumy çözgüdi olaryň çyzykly utgaşmasydyr

$$C_A=M_1e^{mZ} + M_2e^{-mZ} \qquad (12.16)$$

Integrirlemegiň M_1 we M_2 hemişeliklerini (12.14) we (12.15) araçäk şertlerden taparys.
(12.14) şertden Z=0; $C_{A,S}=M_1+M_2$

ýa-da

$$M_2=C_{A,S}-M_1$$

(12.15) şertden

$$Z=L\left(\frac{dC_A}{dZ}\right)_{Z=L}=M_1me^{mL}-M_2me^{-mL}=0$$

ýa-da (12.17) hasaba alyp

$$M_1e^{mL}-C_{A,S}e^{-mL}+M_1e^{-mL}=0$$

Bu ýerden

$$M_1=C_{A,S}\frac{e^{-mL}}{e^{mL}+e^{-mL}}=C_{A,S}\frac{e^{-mL}}{2ch(mL)} \qquad (12.18)$$

bu ýerde $ch(mL)=\dfrac{e^{mL}+e^{-mL}}{2}$

Şeýlelikde, C_A konsentrasiýanyň öýjügiň uzunlygy boýunça $C_A(Z)$ paýlanyşynyň görnüşi

$$C_A=C_{A,S}\frac{e^{-mL}e^{mZ}}{2ch(mL)}+C_{A,S}\frac{e^{mL}e^{-mZ}}{2ch(mL)}=C_{A,S}\frac{ch[m(L-Z)]}{ch(mL)} \qquad (12.19)$$

Indi öýjügiň agzyndaky konsentrasiýanyň gradiýentiniň bahasyny almak kyn däldir:

$$\left(\frac{dC_A}{dZ}\right)_{Z=0}=\frac{C_{A,S}m}{ch(mL)}sh(mL)=mC_{A,S}th(mL) \qquad (12.20)$$

(12.20) deňlemäni (12.16) aňlatmada goýup we (12.12) hasaba alyp taparys.

$$\varepsilon = \frac{DRmC_{A,S}\, th(mL)}{2K_S L C_{A,S}} = \frac{th(mL)}{mL} \qquad (12.21)$$

$mL = L\sqrt{\dfrac{2K_S}{RD}} = h_1$ ululyga Tiläniň moduly diýilýär ("1" indeks, onuň birinji tertipli reaksiýa üçin alynandygyny aňladýar).

Onda

$$\varepsilon = \frac{1}{h_1} thh_1 \qquad (12.22)$$

Bu giperboliki trigonometrik funksiýa $\mathrm{th}\,h_1$, h_1<0,5 bolanda $\mathrm{thh}_1 \cong h_1$.

Diýmek, h_1 kiçi bahalarynda üsti peýdalanmagyň koeffisiýenti iş ýüzünde bire deňdir. Bu netije, öýjük gysgadan giň we üst reaksiýasynyň tizliginiň hemişeligi diffuziýanyň koeffisiýenti bilen deňeşdireniňde kiçi bolanda alynýar.

h_1>4 bolanda thh_1 we h_1 näçe uly bolsa ε şonçada kiçidir. Eger, katalizator dardan uzyn öýjükli, diffuziýanyň koeffisiýenti kiçi hem-de üst reaksiýasynyň tizliginiň hemişeligi uly (meselem, ýokary temperaturalarda) bolsa, onda katalzatoryň içki üstüniň ulanylyşynyň netijeliligi kiçidir.

Eger h_1>>1, onda ε → 0.

13.Himiki-tehnologiki sistema barada düşünje. Himiki kärhana çylşyrymly kibernetiki sistema hökmünde

13.1.Himiki tehnologiki sistema barada düşünje

Islendik himiki önümçilik başky çig maly edilỳän talaba görä fiziki-himiki özgetrmek üçin niỳetlenen tehnologiki gurallaryň köplüginden ybaratdyr.Aỳratyn gurallaryň dälde, himiki önümçiligiň ähli gurallarynyň köplüginiň ylmy barlagy we ululyklaryň amatly bahasynyň gözlegi iň uly ykdysady netije berỳär. Sebäbi ähli önümçiligiň isleỳşiniň kriteriỳasynyň amatly bahalary, aỳratyn gurallaryň isleỳşiniň kriteriỳasynyň amatly bahalarynyň additiw funksiỳalary däldir. Aỳratyn tehnologiki sehler we himiki önümçilikler, çylşyrymly himiki–tehnologiki sistemalardyr.

Himiki tehnologiki sistema (HTS)–bu tehnologiki operasiỳalaryň kesgitli yzygiderligi geçirilỳän, akymlar arkaly özara baglanşykly we bir bitewi ỳaly bolup isleỳän gurallaryň köplügidir.Islendik çylşyrymly sistema ỳaly,himiki kärhana hem köpsanly özara baglanşykly elementlerden ỳa-da böleklerden ybaratdyr.Ylmy barlag meseleleriniň nukdaỳnazaryndan sistemanyň elementi üỳtgäp durỳan düşünjedir.

Eger çylşyrymly sistema hököminde himiki kärhana alynsa onda aỳratyn himiki önümçilikleri ỳa-da tehnologiki sehleri onuň elementleri hasap etmek bolar.Eger çylşyrymly sistema hökmünde aỳratyn önümçilik ỳa-da tehnologiki seh alynsa, onda aỳratyn gurallar onuň elementleridir.Aỳratyn gural, meselem rektifikasiỳa sütüni sistema hökmünde öwrenilende jamjagazlar onuň elementleridir.

HTS-nyň elementi-haỳsy hem bolsa birgörnüşli himiki-tehnologiki hadysa geçỳän guraldyr.HTS barlanda, elementiň içki häsiỳetleri we strukturasy öwrenilmän, eýsem onuň beỳleki elementler bilen özara täsirini kesgitleỳän ỳa-da bütin sistemanyň häsiỳetine täsir edỳän (saldamly, möhüm) häsiỳetleri öwtenilỳär.

HTS-nyň işleỳşine käbir wagt aralygynda, sistemanyň ỳagdaỳlarynyň yzygiderli çalyşmagy hökmünde seredilỳär.

HTS-nyň girelge üỳtgeỳän ululyklaryna çig mallaryň ỳa-da başky önümleriň girelgedäki akymlarynyň fiziki parametrleri, hemde töwerekdäki gurşawyň HTS-nyň isleỳiş hadysasyna edỳän dürli fiziki-himiki täsirleriniň parametrleri (temperatura, basyş, çyglylyk we ş.m) degişlidir.

HTS-nyň çykalga üỳtgeỳän ululyklary bolup, HTS-nyň çykalgasyndaky himiki önümleriň maddy we energetiki akymlarynyň fiziki parametrleri hyzmat edỳär.Bu parametrler ỳagdaỳ parametrlerine (massa harçlanyşy, himiki düzüm bölekleriniň konsentrasiỳalary, basyş, temperatura, entalpiỳa we ş. m) we akymlaryň häsiỳetleriniň parametrlerine (ỳylylyk sygymy,şepbeşiklik, dykyzlyk we ş.m) bölünýärler. Sistemanyň ỳagdaỳy HTS-nyň parametrlerine,elementleriň tehnologiki düzgünleriniň parametrlerine we çig mallaryň ỳa-da başky önümleriň girelgedäki maddy we energetiki akymlaryň HTS-a edỳän täsirlerine baglydyr.

HTS-nyň parametrleri we elementleriň tehnologiki düzgünleriniň parametrleri sistemanyň isleỳiş hadysasynyň häsiỳetini, ỳagny sistemanyň ỳagdaỳynyň üỳtgeỳşiniň käbir kanunyny şertlendirỳär.

HTS-nyň parametrlerini konstruksiýa we tehnologiki parametrlere bölýärler.Konstruksiýa parametrlere sistemanyň elementleriniň gurallar bilen üpjün edilşiniň häsiỳetnamalary (reaktoryň göwrümi, guralyň kese kesiginiň esasy ölçegi, massaçalşyjy gurallarda doldurguçyň (nasadkanyň) gatlagynyň diametri we beỳikligi we ş.m) degişlidir. Tehnologiki parametrlere öwrülmek derejesiniň hemişelikleri we himiki düzüm bölekleriniň bölünmek derejeleri, ỳylylyk we massa gowşuryjylygyň hemişelikleri, himiki reaksiỳalaryň hemişelikleri we ş.m degişlidir.HTS-nyň elementleriniň tehnologiki düzgüniniň parametrleri diỳlip, tehnologiki hadysanyň tizligine, önümleriň çykymyna we hiline täsir edỳän elementiň içki esasy faktorlarynyň (parametrleriniň) (temperatura, basyş katalizatoryň ulanylyşy we işjeňligi, düzüm bölekleriň akymlarynyň hereketiniň gidrodinamiki şertleri) köplügine aỳdylỳar.HTS-nyň isleỳişiniň hili, sistemanyň öňünde goỳlan meseleleri ỳerine ỳetirmäge uỳgunlaşyşynyň derejesine baha berỳän onuň san häsiỳetnamalarynyň ỳagny netijeliliginiň görkezijileriniň kömegi bilen kesgitlenilỳär.HTS-nyň elementleriniň islendik köplügine bu sistemanyň bölegi hökmünde seretmek bolar we ol sistemanyň käbir derejede özbaşdak işleỳän bölegidir.Meselem, üç sany elementleriň köplügi –rektifikasiỳa sütüni, gyzdyryjy we seperator doly suwuklykly aỳlawly shema boỳunça karbamidiň önümçiliginiň çylşyrymly HTS-nyň distilỳasiỳa bölek sistemasyny emele getirỳär.Bölek sistemalaryň dogry bölünip çykarylmagy bütin sistemanyň barlag meselesiniň çözülmegini aňsatlaşdyrỳar.Himiki kärhanalaryň önümçiliklerini we tehnologiki sehlerine degişli bolan HTS-a uly ýa-da çylşyrymly sistemalara häsiýetli bolan alamatlaryň hemmesi mahsusdyr: 1). Kesgitli maksada gönükdirilenligi ýa-da ähli sistemanyň işleýşiniň umumy maksadynyň bolmagy (ähli tehnologiki gurallar we akymlar önümi çykarmaga birleşdirilendirler); 2).Sistemany düzýän elementleriň sany, şeýle hem onuň işleýiş hadysasyny häsiýetlendirýän parametrleriň sany boýunça ölçeginiň ululygy (tehnologiki akymlar bilen baglanşykly gurallaryň sanynyň ululygy);3).Sistemanyň üýtgeýän ululyklarynyň arasyndaky özara sepleşýän baglanşyklaryň köpsanlylygynda ýüze çykýan, onuň özüni alyp barşynyň çylşyrymlylygy (bir guralyň işleýiş düzgüniniň üýtgemegi bütin önümçiligiň işine täsir edýär); 4) Sistemanyň işleýşiniň dowamynda käbir çylşyrymly we köpfaktorly maksatly funksiýany ýerine ýetirmegi; 5). EHM-ny we beýleki häzirki zaman gurallaryny ulanyp önümçiligi dolandyrmagyň ýokary derejede awtomatlaşdyrylmagy.Çylşyrymly HTS-larda, sistemanyň işleýiş kadalaryny awtomatiki dolandyrmagyň möhüm ähmiýeti bardyr. Ýörite serişdeleriň awtomatiki dolandyryş sistemalarynyň (ADS) we dolandyryjy gurluşlaryň kömegi bilen maglumatlaryň ýygnalyşyna, geçirilişine we gaýtadan işlenilişine dolandyryş diýilýär. Umumy ýagdaýda çylşyrymly HTS-laryň isleýiş hadysasyny dolandyrmak tehnologiki we guramaçylyk derejelerinde geçirilýär. Himiki kärhana, himiki önümçilik ýa-da tehnologiki seh iki sany bölek sistemalaryň HTS-laryň we ADS-larynyň köplüginden ybaratdyr. Olar bir bitewi çylşyrymly kibernetiki sistema ýaly hereket edýärler we netijede talap edilýän önümleri çykarýarlar.

2.Himiki kärhanalaryň işleýiş hadysasy çylşyrymly kibernetiki sistema hökmünde iki bölekden ybaratdyr–tehnologiki hadysanyň özünden we kärhanany tehnologiki we guramaçylyk ugurdan dolandyrmakdan.Şunda dolandyrmak hadysasy
DAS-larynyň we dolandyryjy gurluşlaryň kömegi bilen amala aşyrylýar.Häzirki zaman himiki

kärhanany özara baglanşykly bölek sistemalara bölmek bolar. Bu bölek sistemalaryň özara tabynlygy dört derejede görkezilýär.Bu strukturanyň aýratynlygy, onuň daragt görnüşli däldigidir, sebäbi şol bir derejedäki bölek sistemalaryň arasynda hem özara baglanyşyk bardyr. Himiki kärhananyň strukturasynyň iň pes birinji derejesini HTS-nyň elementleri we bu elementleriň işleýşiniň awtomatiki tehnologiki hadysasyny ýerli dolandyrmagyň sistemasy (DAS) emele getirýärler.Himiki kärhananyň struktutasynyň ikinji derejesini tehnologiki sehler we sehleriň işleýşiniň tehnologiki we guramaçylyk hadysalaryny DAS-lary düzýär. Strukturanyň üçünji derejesini aýratyn himiki önümçilikler we himiki önümçilikleri dolandyrmagyň awomatiki sistemalary düzýär.

I Ierarhiýanyň birinji derejesi birgörnüşli (tipiki) himiki-tehnologiki hadysalar (mehaniki, gidrodinamiki ,ýylylyk diffuziýa ,himiki) we ýerli durnuklaýjy sistemalar;

II ierahiýanyň ikinji derejesi tehnologiki sehlere degişli himiki –tehnologiki sistemalar, sehleriň işleýşiniň durnuklylyk we tehnologiki hadysalaryny DAS, himiki-tehnologiki sistemalary DAS,

III ierahiýanyň üçünji derejesi-gutarnykly we aralyk himiki önümçilikler degişli bolan çylşyrymly himiki-tehnologiki sistemalar,we önümçilikleriň işleýşiniň guramaçylyk we tehnologiki DAS

IY ierarhiýanyň dördünji derejesi–himiki kärhana we kärhanany guramaçylykly dolandyrmagyň awtomatlaşdyrylan informasiýa sistemasy 1, 2,…, N,…,S-ierarhiýanyň I we II derejeleriniň bölek sistemalary.

13.2.Himiki kärhana çylşyrymly kibernetiki sistema hökmünde. Hmiki-tehnologiki sistemanyň (HTS) modelleriniň klassifikasiýasy

Strukturanyň ýokary derejesi himiki kombinaty ýa-da zawody emele getirýän köpsanly himiki önümçilikleriň, kömekçi önümçilik gulluklarynyň we bölümleriniň, himiki kärhanany guramaçylykly dolandyrmagyň awtomatlaşdyrlan informasiýa sistemasynyň köplüginden ybaratdyr.

Himiki kärhananyň gurluşynyň, ýagny strukturasynyň her bir derejesi kesgitli işleýşiniň netijeliliginiň görkezijisi bilen häsiýetlendirilýär.HTS-nyň aýratyn elementleriniň işleýşiniň maksady tehnologiki akymlara ýokary öndürijilik we depgin ýagny intensiwlik bilen kesgitli fiziki-himiki täsir etmekdir.

HTS-nyň elementleriň işleýşiniň netijeliliginiň esasy görkezijileri peýdaly täsir koeffisiýenti (p.t.k) we HTS-nyň elementinden himiki önümiň hakyky çykymy görnüşinde aňladylýar.Elementleriň peýdaly täsir koeffisiýentleri tehnologiki hadysanyň deňagramlylyga ýakynlaşyşyny görkezýär. Peýdaly täsir koeffisiýentini (p.t.k.) hasaplamak deňagramlylyk gatnaşyklaryny bilmegi talap edýär. Emma bu ululyklar esasan hadysanyň kinetikasy bilen kesgitlenilýär. Himiki reaksiýa gatnaşan düzüm bölekleriň hakyky sany ýa-da siňdirilen düzüm bölegiň mukdary degişlilikde himiki öwrülişigiň tizligine ýa-da massageçirijiligiň tizligine baglydyr. HTS-nyň elementleri himiki-tehnologiki hadysalaryň maksatly geçmegine päsgel berýän içki we daşky täsirleriň astynda işleýärler.Içki täsirler elementleriň tehnologiki parametrleriniň we HTS-nyň işleýşiniň tehnologiki düzgünleriniň parametrleriniň üýtgemegi bilen şertlendirilýär (katalizatorlaryň könelişmegi, elementleriň içinde basyşyň we temperaturanyň üýtgemegi we ş.m) Daşky täsirler maddy we energetiki akymlarynyň fiziki parametrleriniň üýtgemegi bilen şertlendirilýär (çig malyň ýa-da başky önümleriň mukdary we düzümi, akymlaryň basyşynyň üýtgemegi, sowadyjy agentleriň temperaturasynyň üýtgemegi we ş.m).Bu täsirler determinirlenen, şeýle hem stohastiki häsiýetde bolmak bilen olaryň periody giň aralykda (diýapazonda) (1-10 gije-gündiz) üýtgeýär.Päsgel berýän täsirleriň şertlerinde, HTS-nyň elementleriniň işleýşiniň öňde goýlan maksatlaryny ýerine ýetirmek üçin himiki-tehnolosiki sistemanyň hadysalaryny dolandyrmagyň ýerli awtomatiki sistemasyndan peýdalanylýar.HTS-nyň elementiniň işleýişiniň hadysasyny dolandyrmagyň ýerli sistemasy tehnologiki hadysalary optimizasiýa etmegiň ýerli sistemalaryny,çykýan önümleriň akymlarynyň fiziki parametrlerini we elementiň tehnologiki düzgünleriniň paramrtrlerini durnuklaşdyrmagy göz öňüne tutýar. Tehnologiki sehleriň we aýratyn himiki önümçilikleriň işiniň maksady gutarnykly himiki önümi ýa-da aralyk önümi berlen hilde we kesgitli mukdarda öümdürmekden ybaratdyr.

Tehnologiki sehleriň we aýratyn himiki önümçilikleriň işiniň netijeleriniň görkezijileriniň çig malyň, ýangyjyň, elektroenergiýanyň, gyzdyryjy buguň we sowadyjy suwuň tebigy (natural) birliklerde harçlanyş hemişelikleri degişlidir. Harçlanyş hemişelikleri belli bir derejede tehnologiki sehleriň we aýratyn himiki önümçilikleriň işiniň kämilligini häsiýetlendirmek bilen esasan berlen gutarnykly önümiň ýa-da aralyk önümiň öndürilişiniň ykdysadyýetini kesgitleýär.Harçlanyş koeffisiýenti stehiometrikä näçe ýakyn bolsa önümçilik şonçada kämildir, we onuň ykdysady görkrzijileri hem gowydyr.

Tehnologiki sehleriň we aýratyn hem himiki önümçilikleriň işleýşiniň netijeliligine baha berlende ykdysady netijeliginiň görkezijileri bolan öndürijiligiň, önümiň özüne düşýän gymmatynyň, getirilen harçlaryň, fondgaýtaryjylygyň, düşewüntliligiň we ş.m möhüm ähmiýeti bardyr. Tehnologiki sehiň ýa-da himiki önümçiligiň işleýşiniň adaty düzgünini şu aşakdaky päsgel berýän täsirler bozýarlar:berlen himiki önüme bolan islegiň üýtgemegi; zerur bolan başky çig mallary ýa-da aralyk önümleri çykarýan önümçilikleriň iş düzgüniniň üýtgemegi (daşky päsgelçilikler) esasy we kömekçi enjamlaryň abatlaýyş çärelerini geçirmek üçin duruzulmagy (içki päsgelçilikler);Görkezilen päsgelçilikleriniň yrgyldama periody we üýtgeme häsiýeti dürli-dürlidir.Himiki kärhananyň ierarhiýasynyň ikinji we üçünji derejelerinde HTS dolandyrylanda optimizasiýa we programirleme meseleleri ýüze çykýar.Olaryň maksady bölek sistemalaryň we elementleriň işleýşiniň optimal utgaşmasyny (koordinasiüýasyny) döretmekden we tehnologiki akymlary optimal sazlamakdan hemde olaryň arasynda paýlamakdan ybaratdyr.

Himiki kärhananyň işleýşiniň maksady tebigy çig maly doly hemmetaraplaýyn (kompleksleýin) gaýtadan işlemekden, standarta we tehniki şertlere laýyk gelýän berlen mukdardaky himiki önümleri çykarmakdan ybaratdyr. Himiki kärhananyň işleýşiniň netijeliligi ykdysady görkezijileriň kömegi bilen amala aşyrylýar.Ykdysady görkezijileriň esaslaryna şu aşakdakylar degişlidir

1.Satylan önümleriň mukdary t/ýyl.Önümiň n görnüşini çykarýan himiki kärhana üçin şol önümlere degişli bolan parametriň {Mj}, (bu ýerde j=1,2,…,n) köplügi netijeliligiň bu görkezijisini häsiýetlendirýär.

2.Önümiň hili.Ahyrky önümleriň her biri fiziki ýa--da fiziki-himiki parametrleriň, meselem eremek temperaturasy, garyndylaryň mukdary, erginiň bulanyklygy we ş. m parametrleriň kömegi bilen häsiýetlendirilýär.

3.Önümi öndürmek üçin ulanyş harçlary H_u.

4.Önümçiligi işletmek üçin zerur bolan aýlaw fondlary hem öz içine alýan binýat (düýpli) harçlar D.

Ýokarda beýan edilen talaplary kanagatlandyrýan önümçiligiň ykdysady netijeliginiň umumylaşdyrylan görkezijisi hököminde getirilen girdeýjini ulanmak bolar. (man.\ýyl):

$$G_{get} = \sum_{j=1}^{n} B_j M_j - H_u - ED_\tau$$

Bu ýerde B_j –j önümiň satuw bahasy; M_j-j önümiň bir ýylda çykarylýan mukdary; H_u-bir ýyldaky ulanylyş harçlarynyň jemi, man/ýyl; E-düýpli maýa goýumlarynyň ykdysady netijeliliginiň normatiw koeffisiýenti (özüni ödemegiň normatiw möhletine ters bolan ululuk) $ýyl^{-1}$. D_τ -önümçilik fondlary, ýagny wagty hasaba almak bilen bir gezeklik harçlar.

14.Balanslaryň deňlemeleriň sistemasynyň umumy görnüşi. HTS-nyň balanslarynyň deňlemeleriniň sistemasynyň kesgitliligi.Umumy tehnologiki baglanşykly HTS-laryň maddy balanslarynyň deňlemeleriniň sistemasynyň kesgitliligi. HTS-nyň erkinlik derejesi düşünjesi. HTS-nyňberlen we sazlaýjy üýtgeýän ululyklary. HTS-nyň erkinli derejesini kesgitlemek.

14.1.Akymlaryň görnüşleri we olaryň matematiki deňlemeleri.

HTS-nyň balanslarynyň deňlemeleriniň sistemasy düzülende, sistema durnukly tehnologiki düzünde işleýär diýlip kabul edilip alynýar.Sistemanyň elementleriniň, sistema bilen töwerekdäki gurşawyň arasyndaky özara täsirler maddy we energetiki fiziki akymlaryň üstünden bolup geçýär.HTS-da fiziki akymlaryň iki gönüşini aratapawutlandyrýarlar,ýagny tehnologiki we şertli. Tehnologiki akymlar sistemanyň maksadalaýyk işleýşini üpjün edýärler. Şertli akymlar maddanyň we energiýanyň töwerekdäki gurşawa ýitirilmegini hem-de töwerekdäki gurşawyň sistemanyň işleýşine edýän maddy we energetiki päsgellendiriji täsirini görkezýärler. i-nji fiziki akymyň häşietleri aşäkdaky ýagdaý parametrleriniň toplumy bilen beýan edilýär:

$$P_i=\{m_i;x_{i1};x_{i2};\ldots,x_{ik};t_i;p_i;H_i\} \qquad (14.1).$$

bu ýerde m_i-maddanyň umumy massa harçlanyşy; x_{ik}-k-njy himiki düzümiň paýy; t_i-temperatura ;p_i-basyş; H_i-ýylylygyň harçlanylyşy.HTS-nyň işleýşiniň hadysalary barlanylanda sistemanyň maddalarynyň we energiýalarynyň daşky we içki çeşmelerine (akyndylaryna) seredýärler.

HTS-nyň her bir elementi (bölek sistemasy) üçin massanyň we energiýanyň saklanmak kanunlarynyň esasynda şu aşakdaky özara baglanşyksyz deňlemeleri düzmek bolar :

a) fiziki akymlaryň maddasynyň umumy massa harçlanylyşy boýunça maddy balansyň deňlemelerini

$$\sum_{j=1}^{n} m_j = 0 \qquad (14.2).$$

b) fiziki we toslanan maddy akymlaryň düzümleriniň massa harçlanylyşy boýünça maddy balansyň deňlemesini

$$\sum_{j=1}^{n} m_j x_{ji} + \sum_{e=1}^{\vartheta} G_e = 0 \qquad (14.3).$$

w) fiziki we toslanan ýylylyk akymlaryň ýylylyk harçlanylyşy boýunça ýylylyk balansyň deňlemesini

$$\sum_{j=1}^{n} m_j h_j + \sum_{e=1}^{\vartheta} Q_e = 0 \qquad (14.4a)$$

ýa-da

$$\sum_{j=1}^{n} m_j \bar{c}_j t_j + \sum_{e=1}^{\vartheta} Q_e = 0 \qquad (14.4b)$$

bu ýerde j-nji fiziki akym üçin m_j-maddanyň umumy massa harçlanylyşy; x_{ji}-maddanyň umumy harçlanylyşynyň birliginde i düzümiň paýy; h_j-entalpiýa; $\bar{c}_j$-ortaça udel ýylylyk sygymy; t_j-temperatura ; G_e-e-nji toslanan maddy akymyň massa harçlanylyşy; Q_e-e-nji toslanan ýylylyk akymynyň ýylylyk harçlanylyşy.Umumy ýagdaýda (16.3), we (16.4) deňlemeleriň sistemasy çyzykly däldir. Emma şu aşakdaky ýörite kabul edilen şertleriň kömegi bilen islendik balansyň deňlemeleriniň sistemasyny çyzykly görnüşe geçirmek bolar :

a)eger m_j berlen bolsa, onda balanslaryň deňlemeleriniň sistemalary x_{ji} we h_i(ýa-da t_j) üýtgeýän ululyklara görä çyzyklydyr .

b)eger x_{ji} we (ýa-da) h_j berlen bolsa, onda deňlemeleriň, sistemasy m_j üýtgeýän ululyklara görä çyzyklydyr.

Bu şertleriň ulanylmagynyň mümkin bolmadyk ýagdaýlarynda, HTS-nyň umumylaşdyrylan akymlary düşünjesini peýdalanmak bilen deňlemeleriň sistemasyny çyzykly görnüşe geçirýärler.HTS-nyň umumylaşdyrylan akymlarynyň şu aşakdaky görnüşlerini tapawutlandyrýarlar:

Sistemanyň fiziki akymlarynyň umumy massa harçlanylyşyna gabat gelýän, W_{1i} umumylaşdyrylan maddy akym

$$W_{1i}=m_i \qquad (14.5).$$

Sistemanyň fiziki akymynyň himiki düzüminiň, massa harçlanylyşyna we sistemanyň toslanan maddy akymyna gabat gelýän W_{2i}-umumylaşdyrylan maddy akym

$$W_{2i}=\left\{\begin{matrix} W'_{2i} = m_{ki} = m_i x_{ki} \\ W''_{2i} = G_i \end{matrix}\right\} \qquad (14.6), (14.7)$$

Fizki akymyň ýylylyk harçlanyşyna we toslanan ýylylyk akymyna gabat gelýän W_{3i}-umumylaşdyrylan ýylylyk akymy

$$W_{3i}=\begin{cases} W_{3i}' = q_i = m_i h_i = m_i \overline{c_i t_i} \\ W_{3i}'' = Q_i \end{cases} \qquad (14.8), (14.9)$$

W_{2i}' we W_{3i}'' umumylaşdyrylan akymlar üçin aňlatma umumy görnüşde şu aşakdaky ýaly ýazylýar.

$$W_{ji}=m_i X_p$$

Bu ýerde m_i-umumy massa harçlanylyşy;m_{ki}-(m_{ni})-k-njy düzümiň (k düzüme geçýäň n-nji elementiň) massa harçlanyşy; X_{ki}-k düzümiň paýy ;q_i- ýylylygyň harçlanyşy h_i-entalpiýa; $\bar{c}_i$-ortaça udel ýylylyk sygymy ;t_i-temperatura;$X_p=\{x_{ki};h_i;(c_i t_i)\}$-sitemanyň fiziki akymynyň parametri.

HTS-nyň i elementi üçin umumylaşdyrylan akymlaryň her bir görnüşiniň balansynyň çyzykly deňlemesi dogrydyr.

$$\sum_{j=1}^{n} W_{ji} = 0 \qquad (14.10)$$

ýa-da

$$\sum_{j=1}^{k} W_{ji}' + \sum_{j=1}^{\vartheta} W_{ji}^{*} = \sum_{j=1}^{n} W_{ij}'' + \sum_{j=1} W_{ij}^{**} \qquad (14.11)$$

Bu ýerde W_{ij}-HTS-nyň i-nji elementi bilen baglanşykly j-nji umumylaşdyrylan akym;W_{ji}^{I} -i-nji elemente girýän fiziki akymyň käbir parametrine gabat gelýän j-nji umumylaşdyrylan akym;W_{ji}^{*} -i-nji elementde çeşmesi bolan toslanan akymyň parametrine gabat gelýän j-nji umumylaşdyrylan akym;W_{ji}''-fiziki akymyň i elementinden çykýan käbir parametre gabat gelýän j-nji umumylaşdyrylan akym;W_{ij}^{**}-HTS-nyň i elementiniň içinde akyndysy bolan toslanan akymyň parametrine gabat gelýän j-nji umumylaşdyrylan akym.

Sistemanyň ähli elementleri üçin düzülen,(16.10) we (16.11) görnüşli deňlemeleriň köplügi,HTS-nyň umumylaşdyrylan akymlarynyň bir görnüşiniň çyzykly deňlemeleriniň sistemasyny emele getirýär:

$$[A]x[W]=0 \qquad (14.12)$$

Bu ýerde $[A]=[a_{ij}]$-elementleri aşakda görkezilen, deňlemeleriň sistemasynyň matrisasy

$$a_{ij}=\begin{cases} +1(-1), \\ o, \end{cases} \qquad (14.13)$$

+1(-1) eger j umumylaşdyrylan akym i elemente girýän (çykýan) bolsa, 0-eger j umumylaşdyrylan akym i element bilen baglanşykly däl bolsa. Mundan başgada $-[W]=[W_{ij}]$-bir görnüşli umumylaşdyrylan akymlaryň matrisa sütüni;i=1,k-HTS-nyň elementleriniň san belgisi; i=$\overline{1,e}$-umumylaşdyrylan akymlaryň san belgisi.

14.2.Funksional baglanşyklaryň deňlemeleri.

Funksional baglanşyklaryň deňlemeleri fiziki akymlaryň komponentler boýunça düzümini kesgitleýär; degişli reaksiýalaryň himiki komponentleriniň çeşmeleriniň (akymlarynyň) ululygyny ;fiziko-himiki öwrülişiklere degişli ýylylygyň çeşmeleriniň (akymlarynyň) ululygyny ;belli bolan funksional baglanşyklarynyň koeffisientlerinde ýa-da elementleriň p.t.k.-inde akymlaryň arasyndaky özara baglanşygy hasaba alýar; akymlaryň ululyklarynyň tehnologiki parametrleriniň berlen ululyklaryna, HTS-nyň öndürijiligine we ş.m.baglylygyny beýan edýär.

Umumy ýagdaýda funksonal baglanşyklaryň deňlemeleri köp sanly üýtgeýän ululyklaryň anyk däl funksiýasydyr.

$$F_i(\pi_i;\eta;\alpha;\upsilon;k;D)=0 \qquad (14.14)$$

bu ýerde π_i-fiziki akymlaryň hal parametrleri; η-HTS-nyň elementleriniň p.t.k.-i α-reaksiýa gatnaşýan komponentleriň mol gatnaşyklary; υ – stehiometrik koeffisienler we fiziki-himiki hemişelikler; K-HTS-nyň elementleriniň konstruksiýa we tehnologiki parametrleri;D-HTS-nyň tehnologiki düzgünleriniň parametrleri.

Meselem:asakdaky deňleme boýunça himiki öwrülişik geçýän bolsa

$$a_1A_1+a_2A_2+\ldots+a_nA_n=b_1B_1+b_2B_2+\ldots+b_kB_k$$

bu ýerde $a_1,a_2,\ldots,a_n,b_1,b_2,\ldots,b_n$-belli bolan stehiometrik koeffisienler; $A_1,A_2,\ldots,A_n,B_1,B_2,\ldots, B_n$-

reaksiýa gatnaşýan komponentleriň himiki formulalary.

HTS-nyň tehnologiki düzgüni boýunça komponentleriň mol gatnaşyklary$(\alpha_{A1},\alpha_{A2},..,\alpha_{An}), p.t.k.(\eta)$ we B_1 reaklsiýanyň önümi boýunça öndürijiligi berlen.Bu ýagdaýda funksional baglanşyklaryň deňlemeleri şu aşakdaky görnüşde bolýar:

fiziki akymlaryň komponent düzümi boýunça deňlemeleri

$$\sum_{i=1}^{k} X_{ij} - 1 = 0 \text{ ýa-da } \sum_{i=1}^{k} m_j x_{ij} - m_j = 0 \text{ ýa-da}$$

$$\sum_{i=1}^{k} m_{ji} - m_j = 0 \qquad (14.15)$$

j=$\overline{1,e}$ bolanda

reaksiýa gatnaşýan komponentleriň (m_{ij}) harçlanyşynyň deňlemeleri

$$m_{in} - \beta_i(m_j x B_{ij}) = 0 \text{ ýa-da } m_{in} - \beta_i m B_i = 0 \quad i=\overline{1,k}$$

bolanda (14.16)

toslanan akymlara degişli komponentleriň (m_{in}^*) harçlanyşynyň deňlemeleri

$$m_{in}^* - \beta_i^* m_{cj} = 0 \qquad (14.17)$$

i=1,k bolanda

Funksional baglanşyklaryň 14.15-14.17 deňlemeleriniň her biriniň, HTS-nyň funksional baglanşygynyň umumy deňlemeleriniň hususy ýagdaýdygyny belläp geçeliň :

$$F_i(m_j; m_{i1}; m_{i2},..., m_{ij}\beta_i; \beta_i^*; \eta \ ;(m_{Bj};)=0$$

bu ýerde m_j umumy massa harçlanylyşy; X_{B1}j-j akymdaky B_1komponentiň paýy;
$\beta_i = \beta_i(\alpha_i; M_i; M_{B1}; \eta), \beta_i^* = \beta_i^*(\upsilon_i; m_i; m_{B1}; \eta)$-hemişelik koeffisientler; M_i-komponetleriň molekulýar massalary; α-komponentleriň mol gatnaşyklary.

Seýlelikde, islendik HTS üçin, balanslaryň deňlemeleriniň sistemalary, çyzykly baglanşyksyz deňlemeleriň köplügi hökmünde şu aşakdaky umumy matrisa görnüşde bolýar :

$$\begin{bmatrix} A_{kxe1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{k1xe2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{k2xe3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{k3xk3} \end{bmatrix} X \begin{bmatrix} M_{e1x1} \\ M_{e2x1} \\ Q_{e3x1} \\ F_{k3x1} \end{bmatrix} = 0 \qquad (14.18)$$

bu ýerde $[A_{kxe1}]$,$[A_{k1xe2}]$,$[A_{k2xe3}]$- (14.13) aňlatma boýunça hasaplanylýan a_{ij} elementli bölek matrisalar; $[E_{k3xk3}]$-ýeke bölek matrisa ;$[M_{e2x1}]$,$[Q_{e3x1}]$-elemenleri (14.6)-(14.9) aňlatmalardan kesgitlenilýän HTS-nyň umumylaşdyrylan akymy bolan sütünli bölek matrisasy;[F_{k3x1}]elementleri (14.14) görnüşli funksional baglanşyklaryň deňlemelriniň çep bölegine degişli bolan sütünli bölek matrisa;K-HTS-nyň elementleriniň ýa-da bölek sistemalarynyň sany;K_1-umumylaşdyrylan akymlaryň komponentleriniň (himiki elementleriň ýa-da erkin radikallaryň) massa harçlanylyşy;boýunça balanslaryň deňlemeleriniň sany; K_2-umumylaşdyrylan akymlaryň ýylylygynyň harçlanyşy boýunça balanslaryň deňlemeleriniň sany; K_3-funksional baglanşyklaryň deňlemeleriniň sany; e_1-maddanyň umumy massa harçlanyşlary boýunça umumylaşdyrylan akymlaryň sany ;e_2-komponentleriň massa harçlanyşlary boýunça umumylaşdyrylan akymlaryň sany;e_3-ýylylygyň harçlanyşlary boýunça umumylaşdyrylan akymlaryň sany. $r=(K+K_1+K_2+K_3)$-[A] matrisanyň rangyny özgerdip aşakdaky matrisany alarys

$$\left[A^*\right]=\begin{bmatrix} A_{kxe1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{k1xe2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{k2xe3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{k3xk3} \end{bmatrix} \qquad (14.19)$$

onuň tertibi NxM deňdir,$N=r$ we $M=e_1+e_2+e_3$.

Umumy ýagdaýda HTS-nyň matematiki beýanynyň deňlemeleriniň sistemasy diýip balanslaryň deňlemeleriniň sitemasyna, şeýle hem HTS-nyň matematiki modeliniň deňlemeleriniň sistemasyna aýdylýar.HTS-nyň matematiki beýanynyň deňlemeleriniň sistemasynyň matrisa görnüşi

$$[A]x[X]=0 \qquad (14.20)$$

bu ýerde [A]-tertibi NxB deň bolan sistemanyň matrisasy; N-baglanşyksyz setirleriň sany;M-sütünleriň sany;[X]-M elementden ybarat bolan näbellileriň sütünli matrisasy.

14.3.HTS-nyň balanslarynyň deňlemeleriniň sistemasynyň kesgitliligi.

HTS-nyň her biri üçin maddy ýa-da ýylylyk balanslarynyň deňlemeleriniň sistemalarynyň aşakdaky görnüşlerini tapawutlandyrarlar: a)HTS-nyň bir elementininiňki;b)HTS-nyň bir bölek sistemasynyňky; W)Önümçiligiň ýa-da HTS–nyň hemmesininiňki

Element, bölek sistema ýa-da HTS-nyň hemmesi üçin maddy ýa-da ýylylyk balanslaryň deňlemeleriniň anyk däl reaksiýalaryň sistemasyndan ybaratdyr (m$\neq$n):

$$\begin{cases} \varphi_1(x_1, x_2, ..., x_n) = 0 \\ \varphi_2(x_1, x_2, ..., x_n) = 0 \\ \varphi_m(x_1, x_2, ..., x_n) = 0 \end{cases} \qquad (14.21)$$

Sistema girýän deňlemeleriň hemmesi baglanşyksyz bolmalydyr.

Eger,funksiýalaryň iň bolmanda biri galan funksiýalardan käbir funksional baglanşygy düzýän bolsa, onda $\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_n$ funksiýalara baglanşykly diýilýär. Ýagny

$$\varphi_i = F(\varphi_1; \varphi_2; ...; \varphi_{i-1}; \varphi_i; \varphi_{i+1}; ...; \varphi_m) \qquad (14.22)$$

Eger (16.22) deňlik,berlen funksiýalaryň toplumy üçin ýerine ýetirilmeýän bolsa, onda $\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_m$ funksiýalara baglanşyksyz diýilýär.

HTS-nyň balanslarynyň deňlemeleriniň sistemalary (14.1-14.3) çyzykly ýa-da çyzyksyz deňlemeleriň birgörnüşli sistemalarydyr,şonuň üçin hem olar elmydama utgaşyklydyr,sebäbi nol ýa-da triwial çözgüdi bar

$$X_1=X_2=X_3=\ldots=X_n=0$$

Olaryň iş ähmiýetleri ýokdur. HTS-nyň balanslarynyň deňlemeleriniň sistemalarynyň deňlemeleriniň sany m üýtgeýan ululyklaryň n sanyndan elmydama kiçidir, şonuň üçin hen bu sistemalaryň tükeniksiz köp nol däl ýa-da triwial däl çözgütleri bardyr. Her bir HTS-nyň käbir kesgitli tehnologiki şertlere laýyklyklykda işleýändigi sebäpli,tehnologiki nukdaý nazardan nol çözgütleriň sany elmydama tükeniksizdir.

Her bir nol däl çözgüt tehniki işiň we tehnologiki şertleriň talaplaryny kanagatlandyrmalydyr.

Deňlemeleriň baglanşyksyzlygyny we balanslaryň deňlemeleriniň sistemalarynyň utgaşyklygyny kesgitlemekde berlen deňlemeleriň sistemasyna gabat gelýän [J] Yakobynyň funksional matrisasyna seretmek zerurdyr. Bu matrisanyň her bir elementi

$$j_{ke}=\frac{\partial \varphi_k}{\partial x_e}$$

deňdir,şunda φ_k-k-nji deňleme we X_e-deňlemeleriň sitemasynyň e-nji üýtgeýän ululygy.

[J] matrisanyň r tertipli minoryna Ýakobiniň funksional minory ýa-da Ýakobian diýilýär we [J] bilen belgilenýär.

[J] matrisanyň r_j rangy şu bahalary alyp biler: eger $r_j=r=m$, onda balanslaryň deňlemeleriniň sistemasy m sany baglanşyksyz deňlemelerden ybarat we utgaşyklydyr;eger $r_j=r\angle m$, onda balanslaryň deňlemeleriniň sitemasy $r=r_j$ baglanşyksyz deňlemeleri öz içine alýar we (m-r) deňlemeler beýleki r deňlemeler bilen baglanşyksyz we deňlemeleriň sistemasy utgaşyklydyr.

Balanslaryň deňlemeleriniň sitemasynyň nol däl çözgütleri r sanly näbellili r deňlemeleri hasaplamak ýoly bilen kesgitlenilýär.Ol deňlemeler üçin

$$[J]=\left|\frac{\partial\varphi_k}{\partial x_e}\right|\neq 0 \quad k=e=r \quad \text{bolanda}$$

Şeýlelikde, bu deňlemeleriň sitemasy hasaplanylanda r sany näbelliler erkin üýtgeýän ululyklar diýlip atlandyrylýan $x_{r+1},x_{r+2},\ldots,x_n$ galan (n-r) üýtgeýän ululyklaryň üsti bilen aňladylýar. Balanslaryň deňlemeleriniň sistemasynyň hemme erkin üýtgeýän ululyklary özara baglanşyksyz bolmalydyr we HTS-nyň tehniki işine we işleýşiniň tennologiki şertleriniň talaplaryna gabat gelmelidir.

Eger balanslaryň deňlemeleriniň sistemasy çyzykly bolsa, onda Yakobiniň funksional matrisasyny derňemek hökman däldir,sebäbi bu ýagdaýda

Yakobian çyzykly deňlemeleriniň sistemasynyň matrisasyna gabat gelýär.Olaryň nol däl çozgutlerde utgaşyklygyny kesgitlemek üçin çyzykly algebradan belli bolan teoremany peýdalanýarlar.

14.4.HTS-nyň erkinlik derejesini kesgitlemek

HTS-ny taslamak we ulanmak meselelerini çözmek üçin sistemanyň matematiki modeli zerurdyr. Ol HTS-nyň üýtgeýän ululyklarynyň we parametrleriniň arasyndaky baglanşyksyz funksional gatnaşyklaryň köplügi görnüşinde berilär. Sistemanyň matematiki modeline girýän HTS-nyň üýtgeýäň ululyklaryna we parametrlerine habaryň üýtgeýäň ululyklary (HÜU) diýilýär. HTS-nyň matematiki modeliniň funksional gatnaşyklary, ýa-da habar baglanşyklary, m habaryň üýtgeýäň ululyklarynyň n baglanşyksyz anyk däl funksiýalarynyň sitemasyndan ybaratdyr:

$$\overline{f}(\overline{z}) = 0$$

bu ýerde $\overline{f}$=(f_1,f_2,…,f_n)-habaryň (informasiýanyň) üýtgeýän ululyklarynyň $\overline{z}$(z_1,z_2,…,z_m) m-ölçegli wektoryndan n-ölçegli wektor funksiýa. $\overline{f}$-wektor-funksiýa girýän, her bir $\overline{F}_i$ anyk däl funksiýa ,habaryň üýtgeýän ululyklarynyň K ölçegli wektoryna $\overline{Z}_j$=(z_1,z_2,…,z_k) baglydyr, ýagny $\overline{f}_i(\overline{z_j})$=0

Her bir wektora düzüm bölekleriniň köplügini ýa-da wektoryň koordinatlaryny degişli edip goýmak bolar.

Himiýa tehnologiýasynyň sistemasynyň F erkinlik derejesi diýlip,sistemanyň doly matematiki modelini düzmek üçin zerur bolan m habaryň üýtgeýän ululyklarynyň sany bilen, habaryň üýtgeýän ululyklarynyň arasyndaky n habar baglanşyiklarynyň (ýa-da şertleriniň) tapawudyna aýdylýar, ýagny

$$F = m - n$$

Erkinlik derejesiniň bolmagy habaryň üýtgeýän ululyklarynyň sitemasynyň wektoryny iki sany wektorlaryň birleşmesi hökmünde ýazmaga mümkinçilik berýär :

$$\overline{Z} = \overline{X} \cup \overline{Y}$$
$$\overline{X} \cap \overline{Y} = \phi$$

bu ýerde $\overline{X}=(x_1,x_2,\ldots,x_{m-n})$ HTS-nyň erkin üýtgeýän ululyklarynyň (m-n)-ölçegli wektory. $\overline{Y}=(y_1,y_2,\ldots,y_n)$-HTS-nyň binýat (bazis) üýtgeýän ululyklarynyň n-ölçegli wektory. Bu ýagdaýda n-ölçegli $\overline{f}$ wektor funksiýany,erkin (baglanşyksyz) habaryň üýtgeýäň ululyklary (HÜU) sistemasynyň (m-n) ölçegli wektoryndan, sitemanyň bazis (baglanşykly) anyk n-ölçegli wektor funksiýasy görnüşinde ýazmak bolar

$$\overline{f}(\overline{x}, \overline{y}) = 0$$
$$\overline{y} = \overline{g}(\overline{x})$$

bu ýerde $\overline{g}=(g_1,g_2,\ldots,g_n)$-bazis habaryň üýtgeýäň ululyklarynyň sitemasynyň wektor funksiýasy. Şeýlelikde,erkinlik derejesi F HTS-nyň işleýşiniň hadysasyny kesgitli görkezmek üçin zerur we ýeterlik bolan erkin (baglanşyksyz)HÜU sanyndan ybaratdyr.

Sistemanyň ähli erkin habaryň üýtgeýäň ululyklary (HÜU) özaralarynda baglanşyksyz bolmalydyr. Erkinlik derejesiniň sany dolandyrylýan üýtgeýän ululyklaryň sanyna gabat gelýär we sistemanyň ýa-da bölek sitemanyň işleýiş hadysasynyň berlen hilini üpjün etmek üçin zerur bolan sazlaýjylaryň ýa-da awtomatiki dolandyryşyň sistemasynyň sanyny kesgitleýär.

14.5. HTS-nyň berlen we sazlaýjy taslama üýtgeýän ululyklary.

HTS barlananda, HTS-nyň işleýşiniň hadysasyny kesgitli matematiki beýan etmek üçin öräň möhim bolan habaryň üýtgeýäň ululyklarylaryny saýlap almakda,kesgitsizlik we çylşyrymlylyk ýygy-ýygydan ýüze çykyp durýar. Bu, sistemanyň habaryň üýtgeýäň ululyklarynyň haýsylaryny erkin (baglanşyksyz) üýtgeýän ululyklar hökmünde saýlanyp alynmalydygyny görkezýän islendik HTS-nyň erkinlik derejeleriniň sany üçin umumy deňlemäni almagyň mümkin däldigi bilen şertlendirilendir. Sebäbi her bir barlanylýan HTS, işleýşiniň hadysalaryny häsieýti boýunça takyk hasusydyr. Emma sistemanyň erkin üýtgeýän ululyklaryny saýlap almak boýunça käbir esasy maslahatlary bermek bolar.HTS toslananda we amatly şertleri gözlenilende şolardan ugur alynmalydyr.

Sistemanyň işleýşini doly häsiýetlendirýäň, ähli habaryň üýtgeýän ululyklaryny taslama (berlen) we hasaplama (başky) üýtgeýän ululyklara bölýärler. Sistemanyň erkin habaryň üýtgeýäň ululyklary (HÜU) hökmünde hemme habaryň üýtgeýän ululyklarynyň içinden diňe HTS-nyň taslama üýtgeýän ululyklary saýlanylyp alnyp bilner.

Taslama üýtgeýän ululyklary-bu HTS-nyň işleýşiniň esasy maksadyny töwerekdäki gurşagyň sistema ýa-da bölek sistema edýän täsirini, berlen sistemanyň beýleki HTS-lary bilen özara baglanşygyny we onuň işiniň hadysalaryny käbir hil kriteriýalaryna laýyklykda optimizasiýa etmek mümkinçiligini häsiýetlendirýän habaryň, ýagny informasiýanyň üýtgeýäň ululyklarydyr.

Hasaplama (başky) üýtgeýäň ululyklar-bu kesgitlenilmesi,sistemany taslamagyň we barlamagyň maksady bolan habaryň üýtgeýän ululygydyr.

Taslama üýtgeýän ululyklarynyň içinden reglamentirlenen we optimizasiýa ediji üýtgeýän ululyklary bolup çykarýarlar.

Berlen ýagny reglamentirlenen üytgeýäň ululyklar HTS-nyň işleýşiniň esasy maksadyny daşky gurşawyň sistema edýän täsirini, berlen sistemanyň beýleki sistemalar bilen özara täsirini kesgitleýärler.Bu üýtgeýän ululyklaryň köpüsi taslama işiniň maglumatlary we tehnologiýa şertleriniň talaplary boýunça kesgitlenilýär.

Reglamentirlenen üýtgeýän ululyklara aşakdaky HTS-nyň tehnologiki parametrleri degişlidir: çig malyň akymlarynyň massa harçlanyşy, düzümi, temperaturasy we basyşy; taýýar önümleriň massa harçlanyşy, düzümi we temperaturasy; himiki reaktoryň bölek sistemalaryň girelgesindäki ýygylyk akymlarynyň parametrleri; himiki öwrülişikleriň katalizatorlarynyň görnüşi we işjeňligi; ýylylykçalşyjyly bölek sistemalaryň girelgesinde we çykalgasynda ýylylyk äkidijileriň ýa-da sowadyjy agentleriň akymlarynyň parametrleri hemde tehnologiýa hadysalarynyň talap edilýän ugurda geçmegini tizlendirýän, elmentleriň ýa-da bölek sistemalaryň işleýşiniň tehnologiýa düzgünleriniň parametrleri.

Reglamentirlenen üýtgeýän ululyklaryň beýleki toparyny elementleriň ýa-da bölek sistemalaryň konstruksiýa parametrleri düzýärler, gurallaryň konstruksiýa görnüşi; reaksiýa göwrüminiň beýikligi; katalizatoryň gatlagynyň diametri we beýikligi; guralyň konstruksiýa ölçegleri we ş.m.

Şeýlelikde, HTS-nyň käbir erkinlik derejesiniň sany, taslama işine we tehnologiýa şertlerine görä, reglamentirlenen üýtgeýän ululyklara harçlanylýar.

Erkinlik derejeleriniň sanynyň harçlanylman galanlaryny kesgitläp, habaryň üýtgeýäň ululyklarynyň haýsylaryny HTS-nyň işleýşiniň hadysasyny kesgitli häsiýetlendirmek üçin goşmaça saýlap almagyň gerekdigini çözmek zerurdyr.

Galan erkinligiň derejelerini optimizasiýa ediji üýtgeýän ululyklara degişli edýärler. Berlen reglamentirlenen üýtgeýän ululyklarda, olaryň san bahalarynyň üytgedilmegi, sistemanyň işleýşiniň hadysasynyň käbir maksatly funksiýa laýyklykda optimizasiýany üpjün edýär. Düzgüne görä bu funksiýanyň ykdysady häsiýeti bar. Biziň önümizde ykdysady taýdan amtly habarlaryň üýtgeýän ululyklarynyň toplumyny saýlap almak meselesi durýar.

HTS-nyň işleýşiniň hakyky hadysasy sistemanyň tehnologiýa we konstruksiýa üýtgeýän ululyklarynyň hilini we mukdaryna edilýän kesgitli çäklendirmelerde bolup geçýär. Meselem, käbir reagentleriň başlangyç konsentrasyýyasy partlama çäginden kiçi bolmalydyr; sitemanyň fiziki akymlarynyň temperaturasy ýylylyk çalşyjy gurallaryň mümkinçiligi bilen çäklendirilendir;

HTS-lar taslanylanda optimizasiýa parametrlerine tehnologiýa we konstruksiýa parametrleri degişledir. Işleýän HTS-lar optimizasiýa edilende optimizasiýa parametrlerine diňe tehnologiýa parametrleri degişlidir.

EDEBIÝAT

Esasy

1. Gurbanguly Berdimuhammedow. Ösűşiň täze belentliklerine tarap.Saýlanan eserler. 1t.- Aşgabat: Tűrkmenistanyň Ministrler Kabinetiniň ýanyndaky Baş arhiw műdirligi, Tűrkmenistanyň Prezidentiniň Arhiw gaznasy, 2008.- 360 sah.
2. Berdimuhamedow Gurbanguly Mälikgulyýewiç "Garşsyzlyga guwanmak, Watany, Halky söýmek bagytdyr" Aşgabat 2007 ýyl.
3. Алтухов К.В. и др. Химическая технология. М.: 1985
4. Амелин А Г и др. Общая химическая технология. Учеб. Пособие. М.: Химия, 1977. 314 с.
5. Белоцветов А.В. и др.Химическая технология. М.:1976.

6. БоресковГ.К.,СлинькоМ.Г.Расчет каталических просессов в промышленных реакторах. Хим.пром. 1960 №3 с.17-25

7.Боресков Г.К., Слинько М.Г.Моделирование каталических просесов.Вестник АН СССР, 1961,т.31.№10, с.29-35.

8.Гаммет Л. Основы физической органической химии.- М.: Мир, 1972

9.Беляева И. И. и др. Сборник задач по химической технологии. М.:1982.

10.Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: Химия, 1985. 447 с.
11.Калниньш К.К., Махов Г.М. Перенос водорода в реакции н-фенилендиамина с хлоранилом.Журнал прикладной химии. Санкт-Петербург.: Наука. Том 82, выпуск 4, апрель 2009
12.Кутепов А.М. и др.Общая химическая технология. М.: Высш. Шк. 1990. 520 с.
13.Мовсумзаде Э.М. и др. Природные и синтетичские цеолити, их получение и применение. Уфа: Реактив, 2000. 230 с.
14.Сальников Д.С., Погорелова А.С., Макаров С.В. Восстановление ионов серебра фульвокислотами торфа. Журнал прикладной химии. Санкт-Петербург.: Наука. Том 82, выпуск 4, апрель 2009.
15.Технология пластических масс./Под. ред. В. В. Коршака, М.:Химия, 1985. 560 с.
16.Франк-Каменецкий Д.А.Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.:Наука, 1987. 490 с.
17.Холькин А.И., Патрушева Т.Н. Экстракционно-пиролитический метод: Получение функциональных оксидных материалов. М.: КомКнига, 2006, 288с.

Goşmaça

1.Авербух А.Я. и др.Практикум по общей химической технологии. М.:1979.
2.Мухленов И.П. Основы химической технологии. М.:1983.
3.Химико-технологические системы. Синтез оптимизация и управление/ Под. ред. Мухленова И.П. М.:1986.
4.Никитин Д. П., Новиков Ю.В. Окружающая среда и человек. М.: 1980. 424 с.
5.Ключников Н.Г. Практические занятия по химической технологии. М.:1978. 296 с.
6.Смирнов Н.Н. Волжинский А.И.Химические реакторы в примерах и задачах.-Л.:Химия, 1986.
7.Лейтес И.Л. и др. Теория и практика химической энерготехнологии М.: Химия, 1985.

MAZMUNY