

3. Чумаков, П. М. Белок p53 и его универсальные функции в многоклеточном организме / П. М. Чумаков. – Успехи биологической химии, 2007. – Т. 47. – С. 3-52.
4. Prives, C. Cancer: Mutant p53 and chromatin regulation / C. Prives, S. W. Lowe. – Nature, 2015. – V. 525. – P. 199-200.
5. Brosh, R. When mutants gain new powers: news from the mutant p53 field / R. Brosh, V. Rotter. – Nature Rev. Cancer, 2009. – V. 9. – P. 701-713.

МАТНСАД-ТЕХНОЛОГИИ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ: МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПРОСТЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Труханов Г. А., Косых Т. В.

Гродненский государственный медицинский университет

Научный руководитель: к. физ.-м.н., доцент Клинецвич С. И.

Актуальность. В настоящее время широкое распространение получил метод математического моделирования химико-технологических процессов [1]. Современные химические технологии отличаются достаточно высокой сложностью, химические реакции, лежащие в их основе, как правило, проходят в несколько стадий, в реакторах используются многокомпонентные реактивы. Кроме того, в химических реакторах тепловые и механические явления взаимосвязаны и влияют друг на друга, поэтому изучение каждого из них не может рассматриваться изолированно. В этих условиях применение математического моделирования кинетики реакций на стадии проектирования химических технологий позволяет правильно выбрать конструкцию химического реактора, детально просчитать его параметры, определить оптимальное соотношение химических реагентов и является экономически оправданным. Поэтому понимание основ математического моделирования химических процессов должно входить в число компетенций выпускников вузов соответствующих профилей. В данной работе рассматривается простая математическая модель протекания гомогенных химических реакций, разработанная в среде MathCad.

Цель. Разработать простую учебную математическую модель, описывающую кинетику гомогенных химических реакций. Исследовать зависимость концентрации химического вещества от параметров модели и получить зависимость концентрации химических реагентов во времени, а также сравнить полученные результаты с имеющимися литературными данными.

Методы исследования. Предлагаемая модель кинетики химических реакций базируется на следующей системе математических уравнений: 1) дифференциального уравнения для описания скорости химических реакций первого порядка; 2) уравнения Аррениуса, учитывающего зависимость

константы скорости реакции от температуры; 3) выбранной функциональной зависимости температуры в химическом реакторе от времени. Для достижения поставленной цели нами решались следующие задачи: а) выбор метода численного интегрирования; б) разработка алгоритма численных расчетов; в) написание компьютерной программы с использованием синтаксиса пакета программ компьютерной алгебры MathCad; г) отладка спроектированной компьютерной программы; д) расчет кинетики химической реакции, исследование влияния на скорость реакции различных параметров модели, сравнение полученных результатов с имеющимися литературными данными.

Результаты и их обсуждение. В рамках созданной математической модели выполнены численные расчеты изменения концентрации в химическом реакторе с течением времени: 1) исходного химического реагента; 2) промежуточного вещества; 3) конечных веществ. Модель подтвердила закономерность, имеющуюся в литературе: чем больше время контакта веществ в реакторе, тем быстрее изменяются их концентрации, пока не достигают состояния равновесия, а также увеличивается степень превращения исходных реагентов.

Таким образом, анализ полученных результатов показал, что разработанная нами численная модель кинетики химической реакции является адекватной и дает удовлетворительные результаты, которые хорошо согласуются с имеющимися в литературе данными.

Выводы.

1. Разработанная нами численная модель кинетики химической реакции, скорости которых описываются обыкновенными дифференциальными уравнениями, является адекватной и дает удовлетворительные результаты, которые хорошо согласуются с имеющимися в литературе данными.

2. Модель является простой, доступной для практического применения в лабораторном практикуме для численного моделирования кинетики химических реакций.

3. Модель может применяться в качестве платформы для разработки практических заданий при организации управляемой самостоятельной работы студентов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бондарь, А. Г. Математическое моделирование в химической технологии. / А. Г. Бондарь. – Киев: «Вища школа», 1973. – 280 с.