

Постановка проблемы

Принадлежит Л.А. Грибову.

Проблема является чисто практической, поскольку она вытекает из практического опыта индустриальной химии. Деятели этой области нуждаются в средствах управления процессами накопления продуктов работы реактора путем воздействия на различные параметры модели реактора. Поиск таких средств немислим без теоретической проработки деталей модели проходящих в системе процессов путем составления и решения сложных систем кинетических уравнений. Сложность этой работы состоит в необходимости составлять разветвленные системы дифференциальных уравнений для скоростей реакций и в необходимости опираться на эмпирические константы скоростей реакций. Последнее как раз и составляет проблему, для решения которой в случае реакций второго и более высоких порядков приходится прибегать к громоздким методам хемометрики, причем без гарантии получения необходимой для практики точности решения обратных задач.

В данной работе исследуется возможность найти решение указанной химической проблемы, используя совершенно иной подход к прогнозированию химических процессов в плотных средах. Мы пытаемся отказаться от принятого в химии подхода, основанного на макроскопических представлениях о происходящих процессах. Эти представления находят свое математическое выражение в дифференциальных соотношениях между весовыми количествами реагирующих веществ. Используется следующая примерная схема рассуждений

$$dC = k_a A dt + k_b B dt ,$$

где dt – малый промежуток времени; A , B и C – текущие массы реагирующих веществ; k_a и k_b – эмпирические коэффициенты.

Количества B и C измеряются в миллиграммах или тоннах и являются макроскопическими характеристиками протекающего процесса превращения веществ. Но и количество продукта dC , изображаемое символом дифференциала, бесконечно малой величины, на практике является макроскопической величиной, измеряемой долями миллиграмма или тонны. Однако сам процесс химического превращения не дифференциальной природы. Это микроскопический физический процесс, который Природа отслеживает не в граммах, а в числе случившихся элементарных актах химического превращения $C = A + B$. Поэтому не следует удивляться, что в каких-то сложных случаях такое неадекватное представление о ходе процесса не позволяет получить правильный прогноз.

В данной работе предлагается проверить возможность прямого следования природной логике микроскопического акта химического превращения, а макроскопические следствия из физических представлений получать статистическими методами.