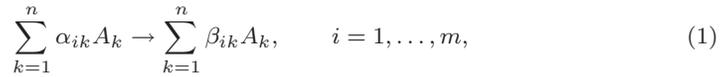


Е. В. Степашина, А. И. Байтимерова, С. А. Мустафина (Стерлитамак, СФ БГУ). **Математическая модель процесса в РИС на двудольном графе.**

В химической кинетике для описания реакций оказывается удобной геометрическая трактовка схемы реакций. Если реакция протекает в m стадий, в которых участвует n веществ A_1, \dots, A_n , то схема реакций имеет вид



где α_{ik}, β_{ik} — стехиометрические коэффициенты. В схеме (1) участвуют два конечных множества: множество $A = \{A_1, \dots, A_n\}$ — веществ, и множество $B = \{b_1, \dots, b_m\}$ — самих реакций. Тот факт, что α_{ik} единиц вещества A_k вступает в реакцию b_i , обозначим стрелкой, идущей от вершины A_k к вершине b_i с весовым коэффициентом α_{ik} . Аналогично, с помощью стрелок, идущих от вершины b_i к вершине A_k , будем отображать, что β_{ik} единиц вещества A_k является продуктом реакции b_i . В результате получаем конечный ориентированный двудольный граф Γ . Каждой вершине A_k поставим в соответствие функцию концентрации $C_k(t)$, вершине b_i — функцию скорости $\omega_i(t, C)$. Тогда система

$$\frac{dC_k}{dt} = \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} \omega_i(t, C), \quad k = 1, \dots, n, \quad (2)$$

называется *системой дифференциальных уравнений на графе* Γ [1]. Система (2) представляет кинетическую модель реакции. При составлении математического описания РИС она дополняется уравнением теплового баланса

$$c\rho \frac{dT}{dt} = \sum_{i=1}^m Q_i \omega_i - \alpha(T - T_0), \quad (3)$$

где c — теплоемкость, ρ — плотность, Q — тепловой эффект реакции, α — коэффициент теплоотдачи, T — температура в реакторе в момент времени t , T_0 — температура окружающей среды.

Обозначим $u_i = C_i$, $i = 1, \dots, n$, $u_{n+1} = c\rho(T - T_0)$, $\omega_{m+1} = \alpha(T - T_0)$. Тогда уравнения (2), (3) примут вид

$$\frac{du_k}{dt} = \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} \omega_i, \quad k = 1, \dots, n, \quad \frac{du_{n+1}}{dt} = \sum_{j=1}^m Q_j \omega_j - \omega_{m+1}. \quad (4)$$

Таким образом, ко множеству $A = \{u_1, \dots, u_n, u_{n+1}\}$ добавляется вершина u_{n+1} , отвечающая за температуру, и ко множеству $B = \{\omega_1, \dots, \omega_m, \omega_{m+1}\}$ добавляется вершина ω_{m+1} , отвечающая за скорость изменения температуры. Основная идея описания схемы реакций с помощью двудольных графов состоит в том, чтобы связать свойства решений системы (4) с геометрическими свойствами графа. Многие важные свойства решений прямой задачи химической кинетики определяются только геометрией графа и не зависят от частного вида функций уравнений модели.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Вольперт А.И., Худяев С.И.* Анализ в классах разрывных функций и уравнения математической физики. М: Наука, 1975, 351 с.