УДК 541.10:66.08/09:518.62:168.0

И.А.Конопелько

СИСТЕМАТИКА И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБОБЩЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ФИЗИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ

В практике научных исследований математическое выражение закономерностей изучаемых явлений чаще всего базируется на выводе эмпирических формул. Однако сравнительный подбор эмпирического уравнения, наиболее подходящего для представления экспериментальных данных, ограничивает теоретическое обоснование исследуемой закономерности.

Цель данной работы состояла в разработке теоретически обоснованных общих типов уравнений, которые могут быть применены для математического описания многих реальных физико-химических процессов.

Известно [1], что протекающие в природе и в производственных условиях процессы подразделяются на три группы: 1) процессы, не связанные с изменением энергетического состояния системы; 2) самопроизвольные процессы, подчиняющиеся кинетическим закономерностям; 3) процессы, для совершения которых требуется затрата работы извне.

Для математического описания процессов часто используются следующие уравнения соответственно указанным группам:

$$Y = m X^{n}; \qquad (1)$$

$$Y = e^{m X^{n}} - 1; \qquad (2)$$

$$\frac{1}{Y} = e^{\frac{1}{m X^{n}}} - 1; \qquad (3)$$

где X и У – две взаимосвязанные переменные величины; m и n – постоянные величины.

Уравнение (1) применимо для таких систем, закономерные изменения которых не связаны с состоянием большого числа частиц, входящих в систему. Оно является основным математическим выражением для описания законов механики и известно как уравнение связи между двумя физическими величинами, одна из которых по Международной системе СИ может быть принята в качестве производной физической величины [2].

Уравнения (2) и (3) выводятся из законов статистической физики и справедливы для описания процессов, протекающих в системах, закономерные изменения энергетического состояния которых обусловлены взаимодействием очень большого числа частиц. Уравнение (2) применимо для описания кинетики физических и химических процессов [3, 4], а уравнение (3) широко известно в термодинамике [5, 6].

В уравнениях (1)-(3) каждая переменная величина может принимать любое положительное значение в бесконечном интервале, т.е. $0 < X < \infty$; $0 < Y < \infty$. Однако, рассматривая различные случаи взаимосвязи между физическими величинами, с учетом принятых единиц измерения, в зависимости от состояния исследуемых систем легко заметить, что зачастую исходные переменные величины x и y могут различаться между собой по начальным и конечным значениям. Например, для переменной y область ее изменения может быть ограничена одним из начальных $(0; y_н; \infty)$ и конечных $(0; y_к; \infty)$ значений; в свою очередь область изменения переменной x может быть представлена одним из следующих выражений: $0 < x < \infty$; $x_н < x < \infty$; $0 < x < x_к$; $x_н < x < x_к$.

Систематика всех разновидностей монотонной зависимости между исходными переменными величинами x и y при различной области их изменения представлена на рис. 1 в виде 32-х графиков. Монотонный характер зависимостей вытекает из уравнений (1)-(3), поскольку для описания любого процесса применяются физические величины, значения которых всегда выражаются только положительным числом единиц их измерений.

Переход от графической зависимости к ее аналитическому выражению, общему для всех 32-х разновидностей, можно осуществить преобразованием исходных переменных величин [7, 8].

Принцип преобразования заключается в переводе значений переменных величин из исходной системы единиц измерения в такую безразмерную систему, при которой область изменения преобразованных величин $X = f(x)$ и $Y = f(y)$ будет соответствовать условию $0 < x < \infty$; $0 < y < \infty$.

С этим принципом преобразования согласуется правило отрезков (правило рычага), согласно которому преобразованная величина в новой безразмерной системе единиц измерения может быть выражена отношением отрезков, на которые делится область изменения исходной переменной величины точкой ее заданного значения на числовой оси. Например, при условии

$y_н < y < y_к$

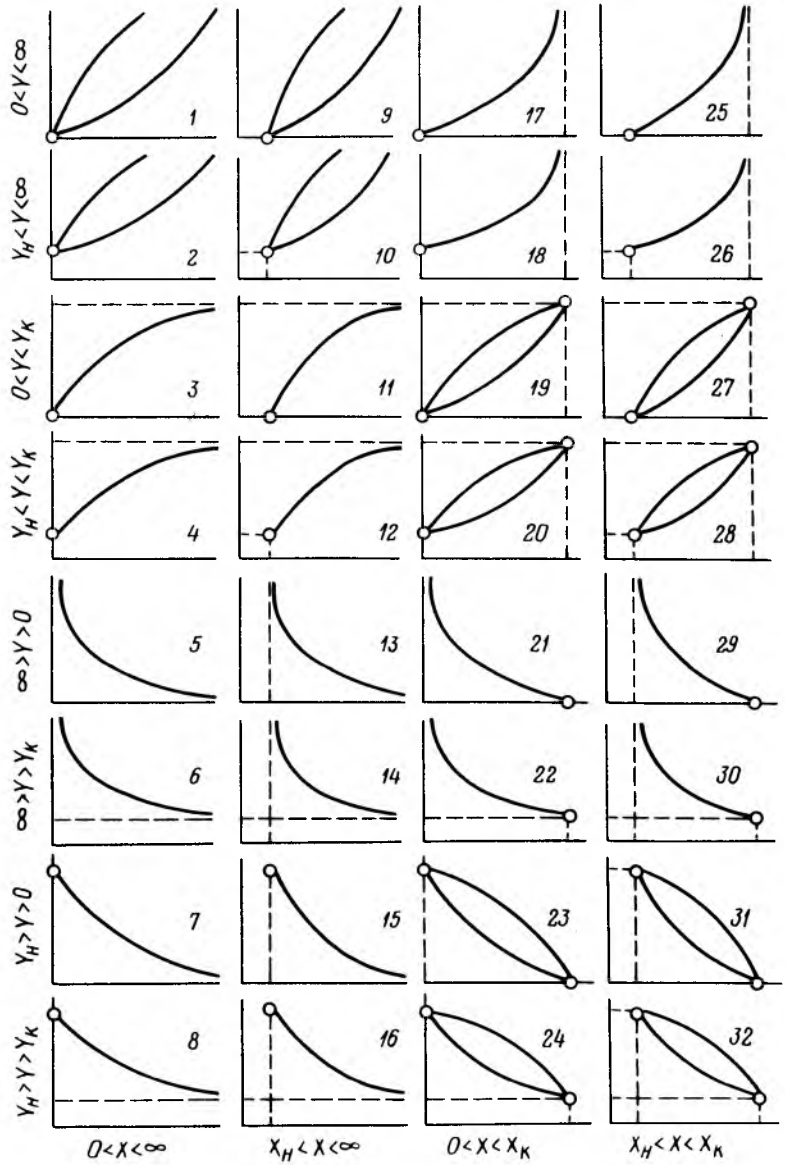

Рис. 1. Систематика монотонных зависимостей между исходными переменными величинами.

$$Y = \frac{y - y_н}{y_к - y} = \frac{\alpha}{1 - \alpha}, \qquad (4)$$

где $$\alpha = \frac{y - y_н}{y_к - y_н}; \quad 1 - \alpha = \frac{y_к - y}{y_к - y_н}. \qquad (5)$$

Таким путем можно произвести преобразование обеих исходных величин x и y, изменяющихся в любом интервале. Соотношения между исходной (y) и преобразованной (Y) величинами, а также соответствующие им выражения долевых частей α и $1-\alpha$ при различной области изменения исходной переменной величины y приведены в табл. 1.

Таблица 1. Выражения преобразованной величины Y и долевой части α через исходную переменную y

Область изменения исходной величины y	$Y = \frac{\alpha}{1-\alpha}$	α	$1-\alpha$
$0 < y < \infty$	y	$\frac{y}{1+y}$	$\frac{1}{1+y}$
$y_н < y < \infty$	$y - y_н$	$\frac{y - y_н}{1 + y - y_н}$	$\frac{1}{1 + y - y_н}$
$0 < y < y_к$	$\frac{y}{y_к - y}$	$\frac{y}{y_к}$	$\frac{y_к - y}{y_к}$
$y_н < y < y_к$	$\frac{y - y_н}{y_к - y}$	$\frac{y - y_н}{y_к - y_н}$	$\frac{y_к - y}{y_к - y_н}$
$\infty > y > 0$	$\frac{1}{y}$	$\frac{1}{1+y}$	$\frac{y}{1+y}$
$\infty > y > y_к$	$\frac{1}{y - y_к}$	$\frac{1}{1 + y - y_к}$	$\frac{y - y_к}{1 + y - y_к}$
$y_н > y > 0$	$\frac{y_н - y}{y}$	$\frac{y_н - y}{y_н}$	$\frac{y}{y_н}$
$y_н > y > y_к$	$\frac{y_н - y}{y - y_к}$	$\frac{y_н - y}{y_н - y_к}$	$\frac{y - y_к}{y_н - y_к}$

Аналогично выводятся выражения долевой части β для исходной переменной x.

Если в уравнениях (1)-(3) переменные величины X и У заменить их соответствующими выражениями долевых частей, то получим три типа общих (универсальных) уравнений:

$$\frac{\alpha}{1-\alpha} = m\left(\frac{\beta}{1-\beta}\right)^n; \qquad (6)$$

$$-\ln(1-\alpha) = m\left(\frac{\beta}{1-\beta}\right)^n; \qquad (7)$$

$$\frac{1}{-\ln\alpha} = m\left(\frac{\beta}{1-\beta}\right)^n. \qquad (8)$$

Таким образом, для всех 32-х монотонных зависимостей каждой группы физико-химических процессов, различающихся по области изменения исходных переменных величин, получены общие типы уравнений (6)-(8), которые представлены в виде соотношения долевых частей измеряемых величин. Они являются абсолютным выражением монотонной взаимосвязи между переменными величинами и имеют универсальный характер, поскольку представлены в виде соотношения безразмерных величин, независимы от системы единиц измерения, а также от начальных и конечных значений, ограничивающих область изменения переменных величин в исходной системе единиц измерения.

Эти математические соотношения безразмерных величин могут быть применимы для описания физико-химических явлений соответствующей группы процессов при изучении различных как идеальных, так и реальных гомогенных и гетерогенных систем: газов, жидкостей, растворов, расплавов и твердых аморфных и кристаллических тел.

Пользуясь выражением долевых частей α и β, любую графическую зависимость монотонного характера можно представить в виде уравнения, которое будет справедливо для описания изучаемого процесса. Для этого необходимо установить тип общего уравнения исходя из группы изучаемого процесса, определить область изменения исходных переменных величин и в конечном счете вычислить значения коэффициентов m и n.

В работе [8] опубликованы частные разновидности уравнения (6) для первой группы физико-химических процессов, не связанных с изменением энергетического состояния системы. Для процессов второй и третьей групп, которые протекают с изменением энергетического состояния систем и описываются уравнениями (7) и (8), аналитические выражения каждой графической зависимости рис. 1 приведены в табл. 2.

Таблица 2. Частные разновидности уравнений (7) и (8).

№ графика, (рис. 1)	Область изменения исходных переменных	$\ln \frac{1}{1-\alpha} = m\left(\frac{\beta}{1-\beta}\right)^n$	$\ln \frac{1}{\alpha} = \frac{1}{m}\left(\frac{1-\beta}{\beta}\right)^n$
1	$0 < x < \infty$ $0 < y < \infty$	$\ln(1+y) = m x^n$	$\ln \frac{1+y}{y} = \frac{1}{m x^n}$
2	$0 < x < \infty$ $y_н < y < \infty$	$\ln(1+y-y_н) = m x^n$	$\ln \frac{1+y-y_н}{y-y_н} = \frac{1}{m x^n}$
3	$0 < x < \infty$ $0 < y < y_к$	$\ln \frac{y_к}{y_к - y} = m x^n$	$\ln \frac{y_к}{y} = \frac{1}{m x^n}$
4	$0 < x < \infty$ $y_н < y < y_к$	$\ln \frac{y_к - y_н}{y_к - y} = m x^n$	$\ln \frac{y_к - y_н}{y - y_н} = \frac{1}{m x^n}$
5	$0 < x < \infty$ $\infty > y > 0$	$\ln \frac{1+y}{y} = m x^n$	$\ln(1+y) = \frac{1}{m x^n}$
6	$0 < x < \infty$ $\infty > y > y_к$	$\ln \frac{1+y-y_к}{y-y_к} = m x^n$	$\ln(1+y-y_к) = \frac{1}{m x^n}$
7	$0 < x < \infty$ $y_н > y > 0$	$\ln \frac{y_н}{y} = m x^n$	$\ln \frac{y_н}{y_н - y} = \frac{1}{m x^n}$

8	$0 < x < \infty$ $y_H > y > y_K$	$\ln \frac{y_H - y_K}{y - y_K} = m x^n$	$\ln \frac{y_H - y_K}{y_H - y} = \frac{1}{m x^n}$
9	$x_H < x < \infty$ $0 < y < \infty$	$\ln(1+y) = m(x - x_H)^n$	$\ln \frac{1+y}{y} = \frac{1}{m(x - x_H)^n}$
10	$x_H < x < \infty$ $y_H < y < \infty$	$\ln(1+y-y_H) = m(x - x_H)^n$	$\ln \frac{1+y-y_H}{y - y_H} = \frac{1}{m(x - x_H)^n}$
11	$x_H < x < \infty$ $0 < y < y_K$	$\ln \frac{y_K}{y_K - y} = m(x - x_H)^n$	$\ln \frac{y_H}{y} = \frac{1}{m(x - x_H)^n}$
12	$x_H < x < \infty$ $y_H < y < y_K$	$\ln \frac{y_K - y_H}{y_K - y} = m(x - x_H)^n$	$\ln \frac{y_K - y_H}{y - y_H} = \frac{1}{m(x - x_H)^n}$
13	$x_H < x < \infty$ $\infty > y > 0$	$\ln \frac{1+y}{y} = m(x - x_H)^n$	$\ln(1+y) = \frac{1}{m(x - x_H)^n}$
14	$x_H < x < \infty$ $\infty > y > y_K$	$\ln \frac{1+y-y_K}{y - y_K} = m(x - x_H)^n$	$\ln(1+y-y_K) = \frac{1}{m(x - x_H)^n}$
15	$x_H < x < \infty$ $y_H > y > 0$	$\ln \frac{y_H}{y} = m(x - x_H)^n$	$\ln \frac{y_H}{y_H - y} = \frac{1}{m(x - x_H)^n}$

Продолжение табл. 2

№ графика, (рис. 1)	Область изменения исходных переменных	$\ln\frac{1}{1-\alpha} = m\left(\frac{\beta}{1-\beta}\right)^n$	$\ln\frac{1}{\alpha} = \frac{1}{m}\left(\frac{1-\beta}{\beta}\right)^n$
16	$x_н < x < \infty$ $y_н > y > y_к$	$\ln\frac{y_н - y_к}{y - y_к} = m(x - x_н)^n$	$\ln\frac{y_н - y_к}{y_н - y} = \frac{1}{m(x - x_н)^n}$
17	$0 < x < x_к$ $0 < y < \infty$	$\ln(1+y) = m\left(\frac{x}{x_к - x}\right)^n$	$\ln\frac{1+y}{y} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x}\right)^n$
18	$0 < x < x_к$ $y_н < y < \infty$	$\ln(1+y-y_н) = m\left(\frac{x}{x_к - x}\right)^n$	$\ln\frac{1+y-y_н}{y - y_н} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x}\right)^n$
19	$0 < x < x_к$ $0 < y < y_к$	$\ln\frac{y_к}{y_к - y} = m\left(\frac{x}{x_к - x}\right)^n$	$\ln\frac{y_к}{y} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x}\right)^n$
20	$0 < x < x_к$ $y_н < y < y_к$	$\ln\frac{y_к - y_н}{y_к - y} = m\left(\frac{x}{x_к - x}\right)^n$	$\ln\frac{y_к - y_н}{y - y_н} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x}\right)^n$
21	$0 < x < x_к$ $\infty > y > 0$	$\ln\frac{1+y}{y} = m\left(\frac{x}{x_к - x}\right)^n$	$\ln(1+y) = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x}\right)^n$
22	$0 < x < x_к$ $\infty > y > y_к$	$\ln\frac{1+y-y_к}{y - y_к} = m\left(\frac{x}{x_к - x}\right)^n$	$\ln(1+y-y_к) = \frac{1}{m}\left(\frac{x_н - x}{x}\right)^n$

23	$0 < x < x_к$ $y_н > y > 0$	$\ln \frac{y_н}{y} = m\left(\frac{x}{x_к - x}\right)^n$	$\ln \frac{y_н}{y_н - y} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x}\right)^n$
24	$0 < x < x_к$ $y_н > y > y_к$	$\ln \frac{y_н - y_к}{y - y_к} = m\left(\frac{x}{x_к - x}\right)^n$	$\ln \frac{y_н - y_к}{y_н - y} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x}\right)^n$
25	$x_н < x < x_к$ $0 < y < \infty$	$\ln(1+y) = m\left(\frac{x - x_н}{x_к - x}\right)^n$	$\ln \frac{1+y}{y} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x - x_н}\right)^n$
26	$x_н < x < x_к$ $y_н < y < \infty$	$\ln(1+y-y_н) = m\left(\frac{x - x_н}{x_к - x}\right)^n$	$\ln \frac{1+y-y_н}{y - y_н} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x - x_н}\right)^n$
27	$x_н < x < x_к$ $0 < y < y_к$	$\ln \frac{y_к}{y_к - y} = m\left(\frac{x - x_н}{x_к - x}\right)^n$	$\ln \frac{y_к}{y} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x - x_н}\right)^n$
28	$x_н < x < x_к$ $y_н < y < y_к$	$\ln \frac{y_к - y_н}{y_к - y} = m\left(\frac{x - x_н}{x_к - x}\right)^n$	$\ln \frac{y_к - y_н}{y - y_н} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x - x_н}\right)^n$
29	$x_н < x < x_к$ $\infty > y > 0$	$\ln \frac{1+y}{y} = m\left(\frac{x - x_н}{x_к - x}\right)^n$	$\ln(1+y) = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x - x_н}\right)^n$
30	$x_н < x < x_к$ $\infty > y > y_к$	$\ln \frac{1+y-y_к}{y-y_к} = m\left(\frac{x - x_н}{x_к - x}\right)^n$	$\ln(1+y-y_к) = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x - x_н}\right)^n$
31	$x_н < x < x_к$ $y_н > y > 0$	$\ln \frac{y_н}{y} = m\left(\frac{x - x_н}{x_к - x}\right)^n$	$\ln \frac{y_н}{y_н - y} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x - x_н}\right)^n$
32	$x_н < x < x_к$ $y_н > y > y_к$	$\ln \frac{y_н - y_к}{y - y_к} = m\left(\frac{x - x_н}{x_к - x}\right)^n$	$\ln \frac{y_н - y_к}{y_н - y} = \frac{1}{m}\left(\frac{x_к - x}{x - x_н}\right)^n$

Новый метод математического описания физико-химических явлений с помощью общих уравнений (6)-(8) открывает большие перспективы для более глубокого, теоретически обоснованного анализа сложных процессов, определяющих технологические режимы многих производств. С его помощью можно решать вопросы сознательного управления технологическими процессами, совершенствования существующих и проектирования новых прогрессивных технологий, разработки и создания новых материалов с комплексом заданных свойств, отвечающих современным требованиям техники. Весьма перспективным является применение общих типов уравнений для математического моделирования технологических процессов, особенно в химической промышленности, где физико-химические процессы определяют технологию химических производств.

Литература

1. Киреев В.А. Курс физической химии. - М., 1955. 2. Чертов А.Г. Международная система единиц измерений. - М., 1967. 3. Продан Е.А., Павлюченко М.М. О механизме реакций термической диссоциации твердых веществ. - В сб.:Гетерогенные химические реакции. - Минск, 1965. 4. Казеев С.А. Кинетика в приложении к металловедению. - М., 1956. 5. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. -М.-Л., 1953. 6. Свелин Р.А. Термодинамика твердого состояния / Пер. с англ. - М., 1968. 7. Конопелько И.А. Обобщение кинетических закономерностей физико-химических процессов. - ДАН БССР, 1979, № 4. 8. Конопелько И.А. Общая взаимосвязь между физическими величинами в безразмерной системе единиц измерения. - В сб.: Товароведение и легкая промышленность. Минск, 1979, вып.6.

УДК 666.171+666.172:[620.193.15'199]

Ю.И.Марьин

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДОУСТОЙЧИВОСТИ ТАРНЫХ СТЕКОЛ

В настоящее время вопросу повышения качества стеклянной тары уделяется большое внимание. Это объясняется жесткими требованиями сохранности жидких пищевых продуктов в течение длительного периода времени (до нескольких лет). Естественно, что основополагающим фактором в данном случае является хи-