

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОНЯТИЯ БЕСКОНЕЧНОСТИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Л.А. Серафимов, профессор, А.К. Фролкова, заведующий кафедрой,

Л.А. Хахин, ассистент

кафедры Химии и технологии основного органического синтеза МИТХТ им. М.В. Ломоносова

e-mail: frolova@mitht.ru

В работе рассмотрен ряд математических моделей химических и химико-технологических объектов, использующих понятие бесконечности. Выделены практически нереализуемые процессы, при моделировании которых бесконечность проявляется как некий фантом, и реальные процессы, которые достигают равновесного состояния за конечное, хотя и достаточно большое время.

The paper considers a number of mathematical models of chemical and chemical-engineering objects that use the concept of infinity. We allocated almost unrealizable processes, in the simulation of which infinity shows itself as a phantom. We considered also real processes that achieve the equilibrium state in a finite, but rather long time.

Ключевые слова: бесконечность, математическая модель, моделирование, равновесное состояние, стационарный процесс, полустационарность.

Key words: infinity, mathematical model, modeling, equilibrium state, stationary process, polistationarity.

В познании физико-химических явлений и процессов источником первичной информации выступают наблюдения, каждое из которых фиксирует определенные факторы. Для более полного понимания объекта необходимо выделить его сущность, основные свойства, поэтому имеющуюся информацию стремятся максимально сконцентрировать («сжать») в некоторое абстрактное понятие – модель. Модель – это изображение в компактной форме различной информации об объекте, находящейся в определенном соответствии с оригиналом. Сегодня метод моделирования является одним из приоритетных в современной науке.

Различают физическое и математическое моделирование. Обычно при построении модели сам объект упрощают. Это упрощение приводит к тому, что попытки расширить область применения, например, математической модели приводит иногда к неожиданным результатам. Что характерно для модели? Прежде всего, это формулировка ее принадлежности к определенному объекту и допущений, т.е. выделение границ применения конкретной модели. Если рассматривается математическая модель, то необходима ее математическая экспликация – запись в виде математических терминов.

Наибольшие трудности возникают, когда моделируемый объект содержит в своей основе понятие бесконечности, а также, например, когда стационарный процесс переходит в пределе в равновесное состояние системы, или когда нестационарный процесс, являющийся переходным от одного стационарного состояния в другое, становится стационарным. Во всех этих случаях исследователь также сталкивается с понятием бесконечности. Важно понимать, является ли бесконечность фантомом модели или она существует объективно. В естествознании фетишизация понятия бесконечности как объективного фактора приводит к резкому снижению возможностей исследователя и является тормозом развития данной области знаний, а иногда и целого направления науки.

Это и побудило авторов подготовить настоящую статью, посвятив ее понятию бесконечности и выявлению условий и моделей, в которых она встречается в ряде областей химии и химической технологии.

Понятие бесконечности в математике

Понятие бесконечности является определяющим в математике. Вейль определял математику как науку о бесконечности [1]. Гильберт считал, что трудности в обосновании современной математики связаны с произвольными абстрактными построениями и способами образования таких понятий как математическая бесконечность [2]. По мнению Рузавина, история математики свидетельствует о том, что важнейшие этапы в процессе ее развития сопровождались радикальным пересмотром существовавших концепций бесконечности [3]. Наиболее ярко эта связь прослеживается в истории обоснования анализа бесконечно малых величин.

Понятие математической бесконечности представляет собой абстракцию, отражающую только количественный, но не качественный характер окружающего мира. Различают три типа абстракций, приводящих к трем видам математической бесконечности. Это фактическая бесконечность, потенциальная бесконечность и актуальная бесконечность. Фактическая бесконечность рассматривается в естествознании и в технике в практическом смысле, т.е. как сравнение объектов достаточно большого и достаточно малого размеров. Диаметр электрона составляет всего 10^{-12} см, т.е. является бесконечно малой величиной по сравнению с любым макротелом, например, с диаметром Земли, который, в свою очередь, бесконечно мал по сравнению с диаметром нашей Вселенной. Использование понятия фактической бесконечности в математике создало бы значительные трудности, поскольку в этом случае математики, по существу, необходимо было бы отказаться от возможности неограниченного продолжения натурального ряда и ряда фун-

даментальных абстракций, что по мнению авторов, [4, 5] парализовало бы математику.

В настоящее время в математике используются только два вида бесконечности – потенциальная и актуальная. Потенциальная бесконечность предполагает отвлечение от реальной возможности построения тех или иных математических объектов. При фактической ее осуществимости обычно различают построение объекта, требующее небольшого количества шагов и большого количества шагов, хотя сама граница большого и малого точно определена быть не может. Однако, используя понятие принципиальной осуществимости, исследователь допускает построение тех или иных математических объектов в виде бесконечного множества.

Актуальная бесконечность тесно связана с теоретико-множественным обоснованием математики. Понятие актуальной бесконечности, т.е. бесконечности завершенной, заданной всеми своими элементами, вводится на основе абстрактной абсолютной осуществимости. Это дает возможность применять к бесконечным множествам простой и хорошо изученный аппарат классической логики. Основная идея здесь состоит в том, что о бесконечном множестве обычно рассуждают по аналогии с конечными множествами. Еще Аристотель возражал против использования в науке понятия актуальной бесконечности, ссылаясь на то, что возможен счет только на конечных множествах [6–8]. У средневековых схоластов отрицание бесконечности приняло форму отречения «*Infinitum actu non datur*» (не существует действительной актуальной бесконечности).

Разбирая эти возражения, Кантор [9] указывает, что и с бесконечными множествами можно производить некоторые действия счета, если их определенным образом упорядочить. Разница в том, что если для конечных множеств порядок не влияет на результат счета, то для бесконечных множеств он зависит от способа их упорядочения. Актуальную бесконечность нельзя целиком объять, так как она предполагает, что это множество подсчитано. Бельцано [3] писал: «чтобы вообразить целое, нет необходимости представлять отдельно его части». Еще в 17 веке было отмечено: для бесконечных множеств аксиома, что часть меньше целого, теряет свою силу. Сравнение бесконечных множеств возможно путем введения понятия мощности. Два множества равны, если они равномощны.

Считая, что теория множеств дает окончательное обоснование математики, А. Пуанкаре писал [10]: «Теперь математика полностью арифметизирована. Достигнута определенная строгость».

После этого в теории множеств было вскрыто большое количество парадоксов. В свете этих парадоксов поиски обоснования математики продолжают. И все-таки, как правильно отмечает Марков [11], абстракция потенциальной бесконечности состоит в отвлечении от реальных гра-

ниц наших конструктивных возможностей, обусловленных ограниченностью нашей жизни в пространстве и времени.

Опираясь на абстракцию, можно признать потенциальную бесконечность как неограниченный процесс построения математического объекта, который не имеет последнего шага. Отрицание объективного характера потенциальной бесконечности не только во времена древнегреческих философов, но и в наши дни происходит из-за спорной интерпретации этого понятия. Например, не ищем же мы в природе точек, прямых и плоскостей в том виде, как они существуют в математике. Между тем Карри, основываясь на том, что в нашем окружении нет ничего, соответствующего идее бесконечности, делает вывод о несостоятельности реалистической точки зрения на математику [12].

Гильберт утверждал, что бесконечного нет в природе и оно недопустимо как основа нашего разумного мышления [2]. Отчасти он прав, если говорить о развитии математического моделирования различных объектов в естествознании. Вместе с тем, идея бесконечности все-таки допустима и в разумном мышлении, если не забывать о ее связи с конечными процессами и объектами. Сегодня понятие потенциальной бесконечности является одним из фундаментальных понятий всей математики.

Объекты с бесконечным числом элементов в химии и технологии

Обладая вполне ограниченным набором элементов, природа создает огромное число форм, отличающихся взаимным их расположением. Это основной закон комбинаторики. Так, число структурных изомеров насыщенных углеводородов достигает огромных чисел уже при числе углеродных атомов в молекуле больше десяти [13]. При увеличении числа компонентов (n) в зеотропной смеси стремительно растет число технологических схем ректификации (z) [14, 15]. Для двухкомпонентной зеотропной смеси конкретного состава существует всего один вариант схемы разделения, а, например, для $n=12$ число возможных схем достигает более 57 тысяч. Аналогично, множество классов и типов диаграмм фазового равновесия жидкость–пар для трехкомпонентных моноазеотропных систем насчитывает 26 диаграмм (49 с антиподами), а для четырехкомпонентных систем уже тысячи. Количество диаграмм возрастает на порядки и больше, если рассматривать системы, содержащие 5 и более компонентов и/или биазеотропные и триазеотропные составляющие в трехкомпонентных смесях.

В перечисленных случаях нет необходимости привлекать понятие бесконечности, так как для них разработаны строгие методы расчета числа этих форм. Мы остановимся на объекте, в котором привлечение понятия бесконечности оказалось весьма плодотворным. Речь идет о так называемых

непрерывных смесях, модель которых с успехом используется в практике переработки нефти и других сложных смесей типа смол, восков и т.п. Экспериментально исследуя такие объекты, можно косвенно соприкоснуться с понятием бесконечности. Вопрос непрерывных смесей кратко изложен в монографии [16].

В настоящее время все смеси органических веществ подразделяют на два множества: непрерывные смеси и дискретные смеси. Модель непрерывной смеси предусматривает бесконечно большое число веществ в ней, при этом концентрация каждого вещества стремится к нулю, а температура кипения смеси образует определенный континуум в виде кривой истинных температур кипения. Это предельная модель, так как в реальных смесях такого вида число компонентов огромно, но конечно. Даже фракции нефти, например бензиновые, могут содержать до 500 веществ, а масляные фракции еще большее число компонентов. Здесь привлечение понятия бесконечности позволяет выделить из непрерывной смеси фракции, выкипающие в строго определенных температурных интервалах. В этом случае модель, основанная на потенциальной бесконечности, дает в виде практического результата непрерывную кривую истинных температур кипения, определяемую экспериментально.

В отличие от непрерывных, дискретные многокомпонентные смеси состоят из сравнительно небольшого числа веществ. При этом каждое вещество в процессе разгонки представлено своей «ступенькой» конечной протяженности на зависимости температуры от количества отогнанной фракции. Характерными примерами таких смесей являются смеси легких углеводородов и смеси, получаемые в технологиях основного органического и нефтехимического синтеза. В то же время в ряде процессов органического синтеза получаемые смеси приближаются к непрерывным. Например, смеси, получаемые окислением газового или прямогонного бензинов. Разделение таких смесей осуществляется путем отделения легкокипящих и тяжелокипящих фракций, которые не всегда находят сбыт и, как правило, сжигаются.

В практике встречаются также дискретно-непрерывные (полунепрерывные) смеси, которые представляют собой сочетание дискретной, как правило, легкокипящей части смеси с непрерывной тяжелокипящей. К таким смесям относятся бензины, керосины и дизельные топлива. На рис. 1 приведены кривые истинных температур кипения (ИТК) для непрерывных, дискретно-непрерывных и дискретных смесей. При четком разделении смеси методом ректификации получают кривые истинных температур кипения; при нечетком делении, например, простой перегонкой получают кривые условных температур кипения (УТК).

Таким образом, моделирование различных сложных смесей привело к понятию непрерывных смесей, т.е. смесей, в которых концентрация

индивидуального компонента в пределе стремится к нулю, но сохраняется его температура кипения, дающая с другими температурами непрерывную монотонную кривую. Последняя может быть определена экспериментально. Этот факт напоминает образ чеширского кота в произведении Льюиса Кэрролла «Алиса в стране чудес», после исчезновения которого оставалась его улыбка. Такая аналогия не случайна, ведь автор произведения – математик. Естественно, в этом случае используется для моделирования ситуации понятие потенциальной бесконечности, которая воспринимается как фактическая бесконечность. В области непрерывных смесей было проведено большое число исследований А.А. Кондратьевым и Ф.Б. Петлюком с учениками [17]. Подробно останавливаться на этих работах не входит в нашу задачу, однако еще раз подчеркнем, что идея непрерывности кривой разгонки оказалась весьма плодотворной в технологии разделения.

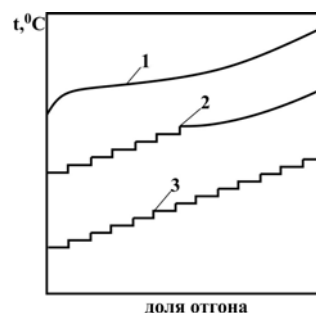


Рис. 1. Кривые истинных температур кипения многокомпонентной жидкой смеси.
1 – непрерывные; 2 – дискретно-непрерывные;
3 – дискретные смеси.

Модели химико-технологических процессов, использующие понятие бесконечности

Моделирование технологических процессов получило значительное распространение в предпроектных исследованиях благодаря возможности широкого использования ЭВМ и специализированных программных продуктов. При моделировании бесконечность проявляется во всех случаях, когда неравновесная система переходит в состояние равновесия. Последнее понятно, так как равновесие есть состояние системы, а не процесс [18]. Такие переходы связаны с качественными изменениями объекта и характерны для следующих случаев:

1. Исследование равновесной (обратимой) ректификации.
2. Достижение особых точек в процессах открытого равновесного испарения.
3. Достижение особых точек в процессе ректификации.
4. Определение минимального флегмового числа.
5. Достижение особой точки в случае реальной дистилляции.
6. Достижение химического равновесия в реакционных и совмещенных реакционно-массообменных процессах.

7. Исследования переходных режимов, реализуемых при переходе от одного стационарного состояния к другому.

Рассмотрим каждый из приведенных случаев более подробно.

1. Процесс равновесной (обратимой) ректификации. Это название является условным, поскольку равновесный процесс сам не идет, его «ведут» теоретически, «мысленно». Процесс обратимой ректификации бинарной смеси, протекающий в колонне с дифференциальным изменением состава, характеризуется совпадением рабочих и равновесных концентраций. При разделении многокомпонентной смеси на каждом уровне колонны рабочая нода совпадает с равновесной нодой жидкость-пар. Для реализации такого режима в исчерпывающей части колонны дифференциально подводится определенное количество тепла, а в укрепляющей части колонны это тепло отводится дифференциально с каждого уровня. Образно говоря, этот процесс проводится при нулевой движущей силе. Возможность его организации обусловлена причислением процесса ректификации к так называемым потенциально обратимым процессам [19]. Каждому составу здесь соответствует бесконечная эффективность ректификационной колонны. В тарельчатых колоннах для разделения каждого состава необходимо бесконечное число ступеней разделения. Рассматриваемый процесс является чисто абстрактным. Вместе с тем, он характеризуется наименьшими энергозатратами на ректификацию и наименьшим производством энтропии и играет большую роль в синтезе энергосберегающих схем ректификации. Особенности такого процесса подробно изложены в монографии [17].

2. Достижение особых точек в процессах открытого равновесного испарения

Процесс открытого равновесного испарения [20, 21] предусматривает, что в каждый момент времени уходящий пар термодинамически равновесен кипящей жидкости. Математическая модель процесса записывается в векторном виде:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \overline{y^* - x^*}, \quad (1)$$

где t – параметр, аналог времени; x^* , y^* – составы равновесных жидкой и паровой фаз.

Уравнение (1) можно представить в виде системы уравнений:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = (K - 1)\bar{x}, \quad (2)$$

где $(K - 1)$ – матрица равновесных коэффициентов распределения компонентов.

При достижении изолированной особой точки правая часть уравнения (2) равна нулю при условии, что концентрации ряда компонентов равны нулю, коэффициенты распределения остальных компонентов равны единице. В этом случае, параметр t стремится к бесконечности, а состав \bar{x} стремится к постоянной величине. Так как сама система представляет собой

определенную, нереализуемую на практике абстракцию, появление бесконечной величины параметра t вполне допустимо, но это характерно именно для рассматриваемой модели.

3. Достижение особых точек в ректификации многокомпонентных смесей

Для колонн с дифференциальным изменением состава фаз (насадочные и пленочные колонны), работающих в стационарном режиме, было предложено уравнение [22–23]:

$$\frac{d\bar{x}}{dh} = \frac{A}{L} (B) \overline{(y^* - x^*) - (y - x)}, \quad (3)$$

где h – высота колонны; $\overline{(y^* - x^*)}$ – вектор разницы равновесных составов жидкости и пара на границе раздела фаз; $\overline{(y - x)}$ – вектор разности рабочих концентраций потоков жидкости и пара; A – гидродинамический коэффициент; L – количество молей потока жидкой фазы; (B) – матрица коэффициентов массопереноса порядка $n-1$, где n – число компонентов смеси.

Особая точка реализуется всякий раз, когда движущая сила процесса ректификации становится равной нулю. Обнуление правой части уравнения (3) приводит к тому, что величина h стремится к бесконечности, а состав x – к постоянной величине. Уравнение процесса ректификации является линеаризованной формой, которую можно получить, используя закономерности термодинамики необратимых процессов. Оно строго линейно относительно коэффициентов массопереноса, в то время как при движении по высоте линейность не соблюдается, а только сохраняется соотношение Онзагера. В связи с этим, матрица (B) является функциональной.

Все приведенные выше модели используют теорию однородных дифференциальных уравнений, поэтому их свойства определяются общими закономерностями этой области математики. Естественно, это абстрактные модели, полезность которых несомненна, однако в представленном виде они не могут быть реализованы на практике.

Перейдем теперь к процессам второй группы.

4. Режим минимального флегмового числа. При минимальном флегмовом числе число ступеней разделения (как реальных, так и теоретических) на уровне ввода в ректификационную колонну исходной смеси заданного состава устремляется в бесконечность. Это абстрактный режим, так как создать колонну бесконечно большой высоты невозможно. Вместе с тем, он отвечает конечным и наименьшим энергозатратам на ректификацию, и мы получаем реальную точку отсчета потребления энергии в ректификационной колонне. Здесь речь идет о пределе реального процесса, когда при увеличивающемся числе ступеней разделения процесс приближается к режиму минимального флегмового числа. Беря конечное, но очень большое число ступеней разделения, мы сколь угодно близко можем подойти к этому пределу, т.е. когда процесс остается реальным, пока мы не использовали последнего шага, устремив в

бесконечность число ступеней разделения. Это яркий пример потенциальной бесконечности. Необходимо добавить, что минимальное флегмовое число тесно связано с зоной постоянного состава. Иными словами бесконечность, по высоте колонны дает конечный состав смеси на определенном уровне колонны.

При определении минимального флегмового числа важную роль играют как равновесная (обратимая) ректификация, так и особые точки, свойственные этому процессу. В рассматриваемом случае бесконечность реализуется локально в том смысле, что энергозатраты и состав, соответствующие рассматриваемому режиму, конечны, т.е. вполне реальные.

5. Достижение особой точки в случае реальной дистилляции. В работе [24] приведено уравнение для реального процесса дистилляции, которое имеет вид:

$$\left(\frac{d\bar{x}}{dt}\right)_1 = (B)\left(\frac{d\bar{x}}{dt}\right)_2, \quad (4)$$

где $\left(\frac{d\bar{x}}{dt}\right)_1$ – изменение вектора состава жидкой фазы при реальной дистилляции многокомпонентной смеси; $\left(\frac{d\bar{x}}{dt}\right)_2$ – изменение вектора сос-

тава жидкой фазы в процессе открытого равновесного испарения, когда пар термодинамически равновесен жидкости в каждое мгновение времени; (B) – диагональная матрица, которая имеет вид:

$$B = \begin{pmatrix} 1 - e^{-B_1 \Delta t F_0} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 - e^{-B_2 \Delta t F_0} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 - e^{-B_n \Delta t F_0} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где B_i – коэффициент массопереноса диффузионной линеаризованной модели; Δt – время контакта жидкости и пузырька пара; F_0 – поверхность контакта жидкой и паровой фазы.

Доказано, что траектории реальной дистилляции топологически подобны траекториям открытого равновесного испарения, то есть оба процесса реализуют одни и те же особые точки. Для трехкомпонентных смесей число особых точек и набор их типов дает 26 типов диаграмм траекторий реальной дистилляции. Основным допущением здесь является использование диагональной матрицы (B) . Хотя даже в линеаризованной системе эта матрица не является диагональной, а содержит недиагональные члены. Последнее отражает тот факт, что в многокомпонентных смесях даже при линеаризации основных уравнений массоперенос каждого компонента зависит от величин движущей силы всех других компонентов. Правда, недиагональные коэффициенты массопереноса намного меньше диагональных. Для того, чтобы матрица стала единичной, необходимо равенство каждого диагонального члена единице. Это возможно, если

$1/e^{-B_2 \Delta t F_0} = 0$. Последнее, в свою очередь, реализуется при любом условии, когда $\Delta t = \infty$, или каждое $B_i = \infty$, или $F_0 = \infty$.

Два последних условия заведомо нереальны; первое условие создает иллюзию, что достижение равновесия возможно только в случае, когда время контакта фаз равно бесконечности. На самом деле это фантом модели, так как равновесие достигается за вполне определенное время. Это время даже в случае твердого раствора конечно. Достаточно вспомнить, что время кристаллизации обычных оконных стекол довольно большое, но конечное. Что касается систем жидкость–пар, то весь опыт отгонки растворителей от органических соединений, имеющих более высокую температуру кипения, показывает, что такая отгонка проходит за конечное время, причем в зависимости от разности температур кипения оно может быть не таким уж большим и далеко не бесконечным. Вторым аргументом в пользу конечности реального времени является огромный опыт, накопленный при экспериментальном исследовании фазового равновесия жидкость–пар в различных приборах, в частности, в циркуляционных. Совпадение данных, полученных разными способами (статическим и циркуляционным), косвенно подтверждает, что величины равновесных составов жидкости и пара инвариантны относительно времени их получения.

Во всех уравнениях, описывающих переход от неравновесного состояния к равновесному, появляется бесконечность некоторых переменных. Это связано со скачкообразным изменением качественного состояния системы, независимо от того, является ли переход стационарным или нестационарным.

Особенно это проявляется в многопараметрических системах, в которых в предельном случае модель дает бесконечность относительно одного из параметров, в то время как остальные параметры конечны. Именно в этом случае, чтобы приблизить результаты моделирования к реальному объекту, мы вынуждены допускать бесконечность времени или определенных параметров. Ярким примером таких объектов являются совмещенные реакционно-ректификационные процессы, в которых массоперенос сочетается с протеканием химических реакций.

6. Достижение химического равновесия в реакционных и совмещенных реакционно-массообменных процессах.

При исследовании указанных процессов в работах [25, 26] использовано различие их скоростей. В частности, в работе [25] доказаны основные теоремы термодинамико-топологического анализа для случая мгновенных химических реакций, когда все траектории процесса открытого равновесного испарения располагаются на многообразии химического равновесия. В работах [26, 27] подсчитано число типов диаграмм с учетом того, что для реакции $A+B \leftrightarrow C+D$ эта диаграмма аналогична диаграммам взаимных

систем [27] и имеет вид квадрата. В работе [28] это число уточнено с использованием специально созданной компьютерной программы.

Если использовать приближенные кинетические модели, то, рассматривая многообразие химического равновесия как особое [29], мы придем к тому, что достижение любой кинетической траекторией этого многообразия потребует бесконечного времени. Однако это фантом модели. На самом деле химическое равновесие достигается за конечное время, причем величина этого времени зависит от многих факторов, в частности, от термодинамических свойств рассматриваемой системы. Кстати, в кинетике активно используется понятие необратимых (односторонних) и обратимых (двухсторонних) реакций. При этом игнорируется тот факт, что теоретически все реакции являются двухсторонними. Поэтому вместо выражения «химически равновесные концентрации» корректнее употреблять словосочетание «практически равная нулю концентрация реагента», нежели утверждать, что реакция необратима.

Приведенный выше подход позволяет выделить класс быстрых реакций, благодаря которым траектории дистилляции и ректификации располагаются исключительно на многообразии химического равновесия. Таким образом, появляется возможность исследовать тип особых точек на этих многообразиях, т.е. так называемые хемиазетропы [25, 29], и в целом структуры многообразий химического равновесия.

7. Исследования переходных режимов, реализуемых при переходе от одного стационарного состояния к другому

Рассмотрим так называемые переходные режимы в ректификации, которые проявляются при переходе от одного стационарного состояния к другому или связаны с пуском ректификационной колонны. Стационарный режим характеризуется постоянными значениями всех входных и выходных параметров, а также единственной траекторией, причем траекторией, которая инвариантна относительно физического времени. Переход от одного стационарного режима к другому фактически является переходом от одной инвариантной траектории к другой. Обычно при этом рассматривают во времени различные характерные параметры, например, температуры на определенном уровне колонны или непрерывно анализируют составы конечных продуктов или составы на определенной ступени (рис. 1) [30]. На рис. 2 приведена характерная кривая переходного режима. Видно, что за конечное время контролируемая температура выходит на практически постоянную величину.

В работе [31] для исследования приближения процессов открытой равновесной дистилляции (конденсации) к стационарному режиму предложено использовать координаты, подобные координатам пространства конфигураций в теоретической физике. Для этого используются два состава, например, состав дистиллята и кубового продукта. Каждой концентрации присваивается

двойной индекс, отражающий принадлежность к компоненту и к уровню в ректификационной колонне. Тогда для бинарной смеси имеем две переменных x_1^D и x_1^W . В этих координатах стационарное состояние процесса изображается точкой, а приближение к нему в зависимости от начальных состояний – некоторыми траекториями.

Точка, отвечающая стационарному состоянию, есть особая точка типа «устойчивый узел». В общем виде движение фигуративной точки к стационарному состоянию (рис. 3) можно представить системой дифференциальных уравнений вида:

$$\begin{cases} \frac{dx_1^D}{dt} = X_D \\ \frac{dx_1^W}{dt} = X_W \end{cases}, \quad (6)$$

где X_D и X_W – некоторые функции, t – физическое время.

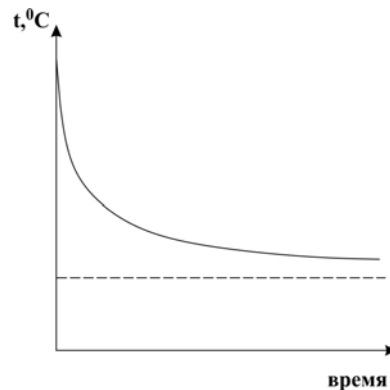


Рис. 2. Приближение (асимптотическое) величины свойства θ к стационарному состоянию.

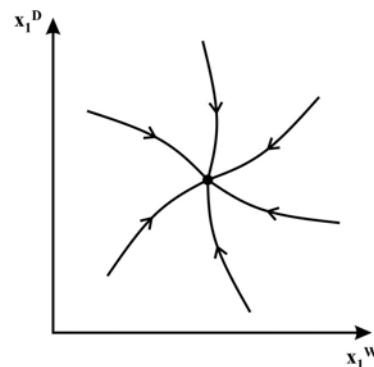


Рис. 3. Стационарная точка типа «устойчивый узел», соответствующая стационарному состоянию процесса ректификации.

Очевидно, в особой точке, соответствующей стационарному режиму, $X_D = 0$ и $X_W = 0$, и, следовательно, x_1^D и x_1^W будут постоянны, а время t будет стремиться к бесконечности. Фактически мы только представили переходный режим в других координатах и получили время перехода, равное бесконечности. С другой стороны, вся практика работы ректификационных промышлен-

ных колонн показывает, что реальное время выхода колонны на стационарный режим конечно.

Здесь не наблюдается новое качество, просто рассматривается переход от одного стационарного состояния в другое, при котором бесконечное время является следствием использования аппарата обыкновенных дифференциальных уравнений. Это особенность применяемых математических моделей, так как в практике разделения никаких бесконечностей не наблюдается. Они появляются или в виде абстрактных построений, или при использовании математических моделей, характеризующихся разной степенью приближения к реальности.

Таким образом, из рассмотренных выше случаев можно сформировать две группы объектов: первая группа включает практически нереализуемые процессы (1–3), при моделировании которых бесконечность проявляется как некий фантом. Вторую группу составляют реальные процессы (4–7), которые достигают равновесного состояния за конечное время, хотя иногда это время является достаточно большим. Вопрос корректного использования понятия бесконечности в химии и химической технологии является принципиальным, поскольку позволяет определить границы применения математических моделей.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Вейль Г. О философии математики. – М.: КомКнига, 2010. 128 с.
2. Гильберт Д. Основание геометрии: пер с 7-го нем. издания И.С. Традштейна / под ред. Л.К. Рашевского. – М.-Л.: Гостехиздат, 1948. 491 с.
3. Рузавин Г.И. О природе математического знания. – М.: Мысль, 1968. 299 с.
4. Есенин-Вольпин А.С. Об аксиоматическом методе // Вопросы философии. 1959. № 7. С. 99–106.
5. Есенин-Вольпин А.С. Анализ потенциальной осуществимости // В сб. «Логические исследования». – М.: АН СССР, 1959. С. 218–262.
6. Аристотель. Метафизика: пер. А.В. Кубицкого. – М.-Л.: Соцэкгиз, 1934. 348 с.
7. Аристотель. Физика: соч. в 4-х т. Пер. В.П. Карпова. – М.: Мысль, 1981. Т. 3. 616 с.
8. Аристотель. Аналитики, первая и вторая: соч. в 4-х т. Пер. Б.А. Фохта. – М.: Мысль, 1978. Т. 2. 688 с.
9. Кантор Г. Основы общего учения о многообразиях // В сб. «Новые идеи в математике». Вып. 6. – СПб.: Образование, 1914. С. 30.
10. Пуанкаре А. Философия науки: сб. избр. трудов в 3-х т. / Под ред. Н.Н. Боголюбова. – М.: Наука, 1974. Т.3. 772 с.
11. Марков А.А. Теория алгоритмов // Труды математического института имени В.А. Стеклова. 1954. Т. 17. С. 75.
12. Curry H. V. Outlines of formalist philosophy of mathematics. – Amsterdam: North Holland, 1951. 78 p.
13. Сланина З. Теоретические аспекты явления изомерии в химии: пер. с англ. – М.: Мир, 1984. 168 с.
14. Львов С.В. Некоторые вопросы ректификации бинарных и многокомпонентных смесей. – М.: Изд. АН СССР, 1960. 167 с.
15. Серафимов Л.А., Мозжухин А.С., Науменкова Л.В. Определение числа вариантов технологических схем ректификации *n*-компонентныхazeотропных смесей // Теор. основы хим. технологии. 1993. Т. 27. № 3. С. 292–295.
16. Александров И.А. Перегонка и ректификация в нефтепереработке. – М.: Химия, 1981. 352 с.
17. Кричевский И.Р. Понятие и основы термодинамики: 2-ое изд. – М.: Химия, 1970. 140 с.
18. Беннедикт М., Рубин Л. Многоступенчатые процессы разделения / Сб. «Физическая химия разделения смесей»: пер. с англ. под ред. Н.М. Жаворонкова. – М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1949. С. 12–72.
19. Петлюк Ф.Б., Серафимов Л.А. Многокомпонентная ректификация. Теория и расчет. – М.: Химия, 1983. 304 с.
20. Жаров В.Т., Серафимов Л.А. Физико-химические основы дистилляции и ректификации. – Л.: Химия, 1978. 240 с.
21. Серафимов Л.А. Термодинамико-топологический анализ гетерогенного равновесия многокомпонентных смесей // Журн. физ. химии. 2002. Т. 76. № 5. С. 1351–1365.
22. Серафимов Л.А. Термодинамико-топологический анализ и проблемы разделения многокомпонентных, полиazeотропных смесей // Теор. основы хим. технологии. 1987. Т. 21. № 1. С. 74–85.
23. Серафимов Л.А., Тимошенко А.В. Общие закономерности траекторий ректификации в колоннах с дифференциальным изменением состава // Теор. основы хим. технологии. 2006. Т. 40. № 2. С. 148–156.
24. Серафимов Л.А. Классификация фазовых портретов реальной периодической дистилляции // Теор. основы хим. технологии. 2001. Т. 35. № 3. С. 252–256.
25. Жаров В.Т. Термодинамико-топологическое исследование открытых фазовых процессов и нелокальных закономерностей диаграмм фазового равновесия в гетерогенных системах различного типа: автореф. дис. ... докт. хим. наук. – Л., ЛГУ, 1969. 22 с.
26. Серафимов Л.А., Балашов М.И. Реакционно-ректификационные процессы / В кн.: Дж. Астарита «Массопередача с химической реакцией», глава 17 / пер. с англ. под ред. Л.А. Серафимова. – Л.: Химия, 1971. С. 186–209.
27. Серафимов Л.А., Федоров П.П., Бучинская И.И. Фазовые портреты тройных взаимных систем с непрерывными твердыми фазами // Журн. неорган. химии. 2002. Т. 47. № 8. С. 1371–1377.
28. Писаренко Ю.А., Серафимов Л.А., Шалунова С.Ю., Шувалов А.С. Обоснование правила азеотропии для двумерных концентрационных комплексов // Теор. основы хим. технологии. 2003. Т. 37. С. 172–178.
29. Шалунова С.Ю., Писаренко Ю.А., Шувалов А.С., Серафимов Л.А. Закономерности диаграмм равновесного открытого испарения с мгновенными химическими реакциями // Теор. основы хим. технологии. 2004. Т. 38. № 1. С. 33–43.
30. Демиденко В.Д., Ушатинская Н.П. Моделирование, распределенный контроль и управление химическими процессами. – Новосибирск: Наука, 1978. 285 с.
31. Фролкова А.К., Хахин Л.А., Раева В.М. Полистационарность в дифференциальных процессах открытой равновесной дистилляции и равновесной конденсации // Теор. основы хим. технологии. 2008. Т. 42. № 5. С. 605–614.