

ЛР 3. Задание 4. $\vec{M}^B = [Na_2CO_3; HNO_3; NaNO_3; H_2O; CO_2; CaO; Ca(NO_3)_2]$

$$\vec{M}^A = [Na; C; O; H; N; Ca]$$

$$\vec{M}^B = \begin{matrix} & Na & C & O & H & N & Ca \\ \begin{matrix} Na_2CO_3 \\ HNO_3 \\ NaNO_3 \\ H_2O \\ CO_2 \\ CaO \\ Ca(NO_3)_2 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 2 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 3 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 2 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix} * \begin{bmatrix} Na \\ C \\ O \\ H \\ N \\ Ca \end{bmatrix}$$

Получить уравнения химических реакций между заданными веществами

Их количество определяется так: из числа веществ вычесть ранг матрицы А. В данном случае:

$7-5=2$, следовательно в матрице стехиометрических коэффициентов В будет 2 строки (количество реакций) и 7 столбцов (количество столбцов). Каждая строка матрицы В соответствует одной химической реакции. Стехиометрические коэффициенты веществ, не принимающих участия в этой реакции, равны нулю, отрицательные коэффициенты принадлежат исходным веществам, а положительные – продуктам реакции.

Решить однородную СЛАУ: $B \cdot A = 0$, где $A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 3 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 2 & 1 \end{bmatrix}$

$\text{rank}(A) = 5$, следовательно система не доопределена. Мы можем найти только 5 неизвестных, опираясь на базисную подматрицу. Нужно для этого задать две неизвестных, поскольку их всего 7. Делаем это с помощью единичной матрицы 2×2 .

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} & b_{15} & b_{16} & b_{17} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} & b_{25} & b_{26} & b_{27} \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} b_{11} = 1 & b_{12} = 0 \\ b_{21} = 0 & b_{22} = 1 \end{matrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & b_{13} & b_{14} & b_{15} & b_{16} & b_{17} \\ 0 & 1 & b_{23} & b_{24} & b_{25} & b_{26} & b_{27} \end{bmatrix}.$$

Таким образом, нужно решить две СЛАУ:

$$\left\{ \begin{array}{l} 2 + b_{13} = 0 \\ 1 + b_{15} = 0 \\ 3 + 3b_{13} + b_{14} + 2b_{15} + b_{16} + 6b_{17} = 0 \\ 2b_{14} = 0 \\ b_{13} + 2b_{17} = 0 \\ b_{16} + b_{17} = 0 \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} b_{23} = 0 \\ b_{25} = 0 \\ 3 + 3b_{23} + b_{24} + 2b_{25} + b_{26} + 6b_{27} = 0 \\ 1 + 2b_{24} = 0 \\ 1 + b_{23} + 2b_{27} = 0 \\ b_{26} + b_{27} = 0 \end{array} \right.$$

Решение этих СЛАУ выполняется с использованием средств символьной математики МАТЛАБ.

Также определить обусловленность матрицы коэффициентов и проверить точность решения системы уравнений.

В соответствии с полученной матрицей стехиометрических коэффициентов В записать уравнения химических реакций. Вещества с отрицательными стехиометрическими коэффициентами –

исходные вещества, записываются в левой части уравнений, а вещества с положительными коэффициентами – продукты реакции, записываются в правой части уравнений.

Рассмотреть решения, основанные на двух различных базисных подматрицах, выделенных из матрицы A .