Лабораторная работа №2  
Моделирование кинетики гетерогенных химических реакций

**Цель работы**

1. Ознакомиться с методами построения кинетических моделей гетерогенных химических реакций.

2. Составить кинетическую модель гетерогенной химической реакции в соответствии с заданным механизмом.

3. Выбрать численный метод и разработать программу расчета.

4. Исследовать динамику изменения концентраций реагирующих веществ реакции и промежуточных соединений.

**Исходные данные:** вариант 2

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Вариант | Уравнения реакций | Начальные концентрации | Константы реакций |
| 2 |  | СC4H8(0) =0,72; CC8H10(0) =0; CH2(0) =0; Z(0) =1; Z(0) =0;  Z(0) =0 | *k*1=0,38;  *k*2=0,33;  *k*3=0,29;  *k*-1=0,13;  *k*-3=0,07 |

**Кинетическая модель**

В основе метода Эйлера лежит аппроксимация производной при малых изменениях аргумента.

Общая формула Эйлера:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.1) |

где  – правая часть дифференциального уравнения (например, );

.

Задав начальные условия: при *t* = 0 *С* = *С*0, величину шага интегрирования *h*, а также параметры уравнения, с помощью формулы (1.1) можно провести пошаговый расчёт и получить решение данного уравнения (рис. 1.1).



*Рис. 1.1. Графическая иллюстрация метода Эйлера*

*Рис. 1.2. Блок-схема расчета кинетики   
гомогенной химической реакции методом Эйлера*

*Рис. 1.2. Блок-схема расчета кинетики   
гомогенной химической реакции методом Эйлера*

**Алгоритм программы:**

1. Задаем исходные данные
2. Формируем листы для каждого вещества
3. Организуем цикл для расчета концентраций всех компонентов с помощью метода Эйлера.

**Начало**

**Ввод исходных данных *Сi*, *i*=1, *m*, *k*1, *k*2, *tk*, *h***

**нет**

**нет**

**да**

**да**

***t* = 0**

***i* = 1**

**Расчет *F*(*Сi*)**

**Расчет *Ci***

***i* = *i* + 1**

***i* < *m* mmm**

**Конец**

***t* < *tk* mmm**

**Вывод результатов**

***t* = *t* + *h***

1. Исследуем зависимость степени превращения от разных температур
2. Выводим результат в виде графиков

**Код программы по методу Эйлера**

import matplotlib.pyplot as plt

k1 = 0.38

kn1 = 0.13

k2 = 0.33

k3 = 0.29

kn3 = 0.07

h = 0.02

CC4H8\_list = [0.72]

Cz\_list = [1]

CzC4H8\_list = [0]

CzC8H10\_list = [0]

CH2\_list = [0]

CC8H10\_list = [0]

for time in range(2000):

    r1 = k1 \* CC4H8\_list[-1] \* Cz\_list[-1]

    rn1 = kn1 \* CzC4H8\_list[-1]

    r2 = k2 \* CzC4H8\_list[-1] \* CC4H8\_list[-1]

    r3 = k3 \* CzC8H10\_list[-1]

    rn3 = kn3 \* Cz\_list[-1] \* CC8H10\_list[-1]

    CC4H8 = CC4H8\_list[-1] + h \* (-r1 + rn1 - r2)

    Cz = Cz\_list[-1] + h \* (-r1 + rn1 + r3 - rn3)

    CzC4H8 = CzC4H8\_list[-1] + h \* (r1 - rn1 - r2)

    CzC8H10 = CzC8H10\_list[-1] + h \* (r2 - r3 + rn3)

    CH2 = CH2\_list[-1] + h \* r2

    CC8H10 = CC8H10\_list[-1] + h \* (r3 - rn3)

    CC4H8\_list.append(CC4H8)

    Cz\_list.append(Cz)

    CzC4H8\_list.append(CzC4H8)

    CzC8H10\_list.append(CzC8H10)

    CH2\_list.append(CH2)

    CC8H10\_list.append(CC8H10)

plt.figure

plt.subplot(1,2,1)

plt.title("Изменение концентрации по времени основных продуктов")

plt.xlabel("Время")

plt.ylabel("Концентрация, моль/л")

t=range(2001)

plt.plot(t, CC4H8\_list, label='C4H8')

plt.plot(t, CC8H10\_list, label='C8H10')

plt.plot(t, CH2\_list, label='H2')

plt.legend()

plt.subplot(1,2,2)

plt.title("Изменение концентрации по времени побочных продуктов")

plt.xlabel("Время")

plt.ylabel("Концентрация, моль/л")

plt.plot(t, Cz\_list, label='z')

plt.plot(t, CzC4H8\_list, label='zC4H8')

plt.plot(t, CzC8H10\_list, label='zC8H10')

plt.legend()

plt.show()

**Результат расчёта**

