



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ



ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №3

ИДЕНТИФИКАЦИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

доцент ОХИ ИШПР ТПУ, к.т.н.
Чузлов Вячеслав Алексеевич

2020



- Пусть дано дифференциальное уравнение:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad \text{с начальным условием:} \quad y \Big|_{x=x_0} = y_0$$

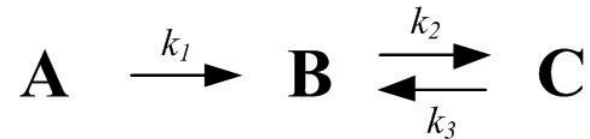
Формула Рунге-Кутта:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4) \\ x_{i+1} = x_i + h \end{cases} \quad \begin{aligned} k_1 &= h \cdot f(x, y) \\ k_2 &= h \cdot f(x + h/2, y + k_1/2) \\ k_3 &= h \cdot f(x + h/2, y + k_2/2) \\ k_4 &= h \cdot f(x + h, y + k_3) \end{aligned}$$

где **h** – шаг вычисления; **$f(x, y)$** – правая часть дифференциального уравнения



Дана схема химических превращений:



$$\begin{array}{ll} CA_0 = 0,8 \text{ моль/л} & k_1 = 0,6 \text{ с}^{-1} \\ CB_0 = 0,2 \text{ моль/л} & k_2 = 0,26 \text{ с}^{-1} \\ CC_0 = 0 \text{ моль/л} & k_3 = 0,1 \text{ с}^{-1} \end{array}$$

Решите систему дифференциальных уравнений изменения концентраций веществ во времени методом Рунге-Кутты на отрезке $[0; 2]$ с шагом $h = 0.1$. Постройте зависимость $C(t)$ для каждого компонента.

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \\ \frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B + k_3 C_C \\ \frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B - k_3 C_C \end{cases}$$



```
unit UR_K_method;  
  
interface  
  
type  
  TArrayOfDouble = array of double;  
  TArrayOfArrOfDouble = array of array of double;  
  Tfunc = function (c: TArrayOfDouble; kin_par: TArrayOfDouble;  
                    comp_count: integer): TArrayOfDouble;  
  
function RK(f: Tfunc; comp_count, react_count: integer;  
            h, tk: double;  
            init_conc, kin_par: TArrayOfDouble): TArrayOfArrOfDouble;
```



implementation

```
function RK(f: Tfunc; comp_count, react_count: integer; h, tk: double;  
            init_conc, kin_par: TArrOfDouble): TArrOfArrOfDouble;  
var  
    k1, k2, k3, k4, z: TArrOfDouble;  
    i, j: integer;  
begin  
    SetLength(result, Round(tk / h));  
    for i := 0 to Round(tk / h)-1 do  
        SetLength(result[i], comp_count);  
        SetLength(k1, comp_count);  
        SetLength(k2, comp_count);  
        SetLength(k3, comp_count);  
        SetLength(k4, comp_count);  
        SetLength(z, comp_count);
```



```
for j := 0 to Round(tk / h)-1 do
  begin
    k1 := f(init_conc, kin_par, react_count);
    for i := 0 to comp_count-1 do
      z[i] := init_conc[i] + k1[i] * h / 2;

    k2 := f(z, kin_par, react_count);
    for i := 0 to comp_count-1 do
      z[i] := init_conc[i] + k2[i] * h / 2;

    k3 := f(z, kin_par, react_count);
    for i := 0 to comp_count-1 do
      z[i] := init_conc[i] + k3[i] * h;

    k4 := f(z, kin_par, react_count);
    for i := 0 to comp_count-1 do
      begin
        init_conc[i] := init_conc[i] + (k1[i] + 2 * k2[i] + 2 * k3[i]
                                         + k4[i]) * h / 6;

        result[j, i] := init_conc[i]
      end;
    end;
  end;
end;

end.
```




```
program kinetic_calculation;

uses UR_K_method;

const
  react_count = 3;
  comp_count = 3;
  h = 0.1;
  tk = 2;
  kin_par: array of double = (0.6, 0.26, 0.1);

var
  i, j: integer;
  comp_conc: TArrayOfDouble;
  comp_conc_profile: TArrayOfArrOfDouble;

function kinetic_model(c, kin_par: TArrayOfDouble;
                      comp_count: integer): TArrayOfDouble;
begin
  SetLength(result, comp_count);
  result[0] := - kin_par[0] * c[0];
  result[1] := kin_par[0] * c[0] - kin_par[1] * c[1] + kin_par[2] * c[2];
  result[2] := kin_par[1] * c[1] - kin_par[2] * c[2];
end;
```



begin

```
SetLength(comp_conc, comp_count);
```

```
comp_conc[0] := 0.8;
```

```
comp_conc[1] := 0.2;
```

```
comp_conc[2] := 0;
```

```
comp_conc_profile := RK(kinetic_model, comp_count, react_count, h, tk,  
                        comp_conc, kin_par);
```

```
for i := 0 to Round(tk / h)-1 do
```

```
  begin
```

```
    write((i * h + h):4:1);
```

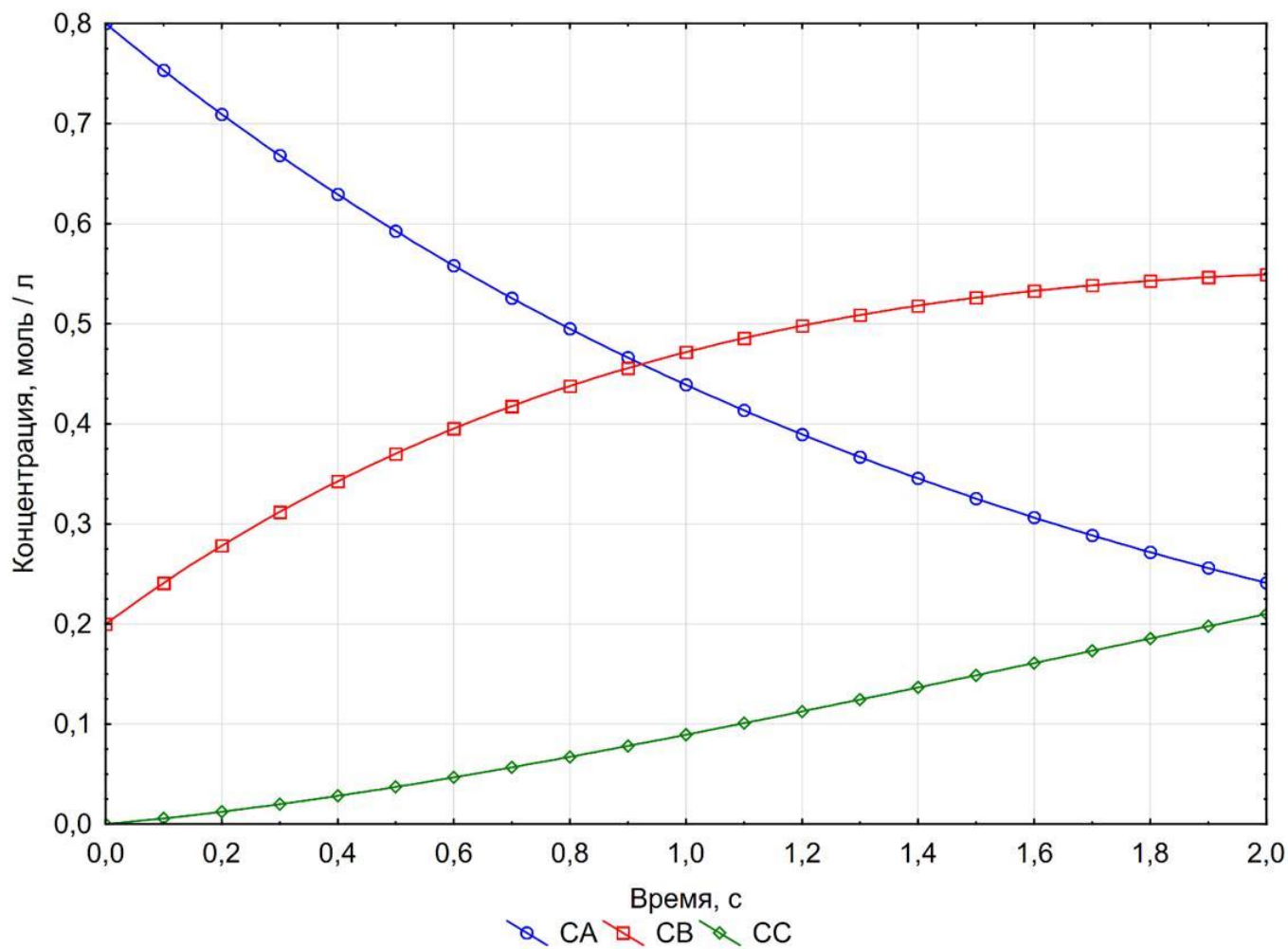
```
    for j := 0 to comp_count-1 do
```

```
      write(comp_conc_profile[i, j]:8:4);
```

```
    writeln();
```

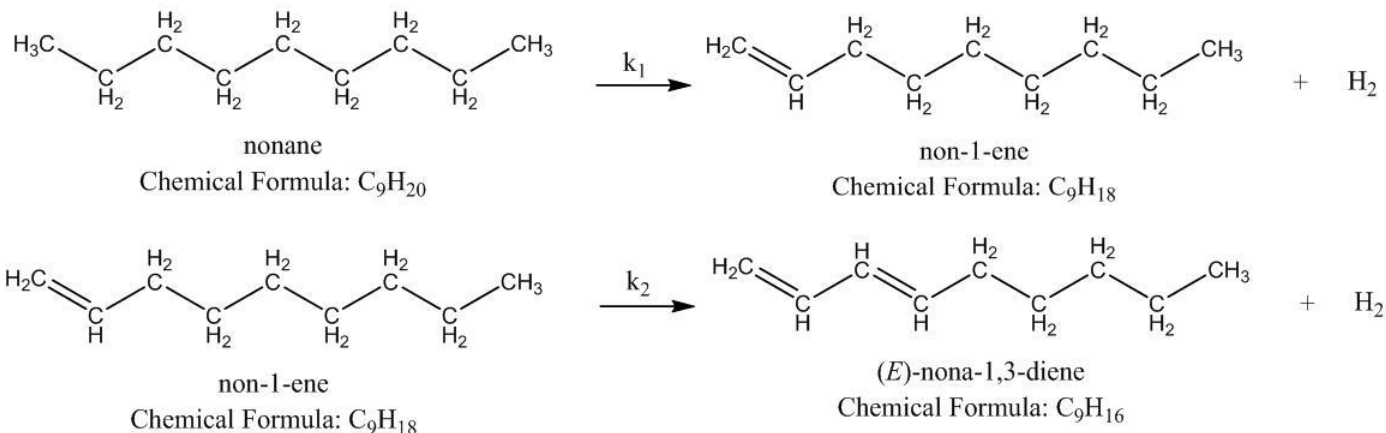
```
  end;
```

```
end.
```



Дана схема химических превращений:



Необходимо определить изменение концентрации каждого компонента в течение 1 часа с шагом 0,1. Принять $k_1 = 1.8$, $k_2 = 1.03$. Концентрация $[\text{C}_9\text{H}_{20}]$ в начальный момент времени 1 моль / л, концентрации остальных компонентов равны нулю. Постройте зависимость $C(t)$ для каждого компонента.

$$\begin{cases} \frac{d[\text{C}_9\text{H}_{20}]}{dt} = -k_1 \cdot [\text{C}_9\text{H}_{20}] \\ \frac{d[\text{C}_9\text{H}_{18}]}{dt} = k_1 \cdot [\text{C}_9\text{H}_{20}] - k_2 \cdot [\text{C}_9\text{H}_{18}] \\ \frac{d[\text{C}_9\text{H}_{16}]}{dt} = k_2 \cdot [\text{C}_9\text{H}_{18}] \\ \frac{d[\text{H}_2]}{dt} = k_1 \cdot [\text{C}_9\text{H}_{20}] + k_2 \cdot [\text{C}_9\text{H}_{18}] \end{cases}$$

Результаты эксперимента

Время, ч	Концентрация компонента, моль / л			
	C_9H_{20}	C_9H_{18}	C_9H_{16}	H_2
1	0.1653	0.4481	0.3866	1.2213