ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 3

Идентификация кинетических параметров при математическом моделировании химических превращений

Задание

- 1. Составьте кинетическую модель в соответствии с представленной схемой превращений.
- 2. Решите полученную кинетическую модель на заданном интервале по времени при заданных начальных концентрациях компонентов, участвующих в химических превращениях, методом Рунге-Кутты.
- 3. Определите кинетические параметры химических превращений, используя генетический алгоритм и данные по наблюдаемым концентрациям химических веществ, участвующих в реакциях, при различном времени процесса.
- Постройте зависимости изменения концентраций химических веществ от времени протекания реакций по исходным данных и результатам расчета.

Вариант 1

Схема превращений:

$$C_{10}H_{22} = C_{10}H_{20} + H_2$$

 $C_{10}H_{20} = C_{10}H_{18} + H_2$

Начальные концентрации:

C10H22	C10H20	C10H18	H ₂
1.0	0.0	0.0	0.0

Время процесса 1.0 сек.

Время, сек.	C10H22	C10H20	C10H18	H ₂
0.0	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.1	0.882497	0.112549	0.004954	0.122458
0.2	0.778800	0.202702	0.018498	0.239698
0.3	0.687290	0.273834	0.038876	0.351587
0.4	0.606523	0.328894	0.064583	0.458060
0.5	0.535250	0.370369	0.094381	0.559131
0.6	0.472363	0.400412	0.127225	0.654862
0.7	0.416866	0.420927	0.162207	0.745340
0.8	0.367882	0.433546	0.198571	0.830689
0.9	0.324655	0.439622	0.235723	0.911068
1.0	0.286508	0.440335	0.273157	0.986649

Схема превращений:

$$\begin{split} C_{11}H_{24} &= C_{11}H_{22} + H_2 \\ C_{11}H_{22} &= C_{11}H_{20} + H_2 \end{split}$$

Начальные концентрации:

C11H24	C11H22	C11H20	H ₂
0.8	0.1	0.1	0.0

Время процесса 1.0 сек.

Время, сек.	C11H24	C11H22	C11H20	H ₂
0.0	0.800000	0.100000	0.100000	0.000000
0.1	0.720260	0.172199	0.107542	0.087282
0.2	0.648467	0.232803	0.118729	0.170262
0.3	0.583815	0.283238	0.132947	0.249132
0.4	0.525593	0.324735	0.149672	0.324079
0.5	0.473189	0.358338	0.168473	0.395285
0.6	0.426033	0.385012	0.188955	0.462922
0.7	0.383595	0.405651	0.210754	0.527158
8.0	0.345388	0.421070	0.233541	0.588153
0.9	0.310968	0.432005	0.257027	0.646059
1.0	0.279972	0.439030	0.280998	0.701026

Вариант 3

Схема превращений:

$$C_{12}H_{26} = C_{12}H_{24} + H_2$$

 $C_{12}H_{24} = C_{12}H_{22} + H_2$

Начальные концентрации:

C ₁₂ H ₂₆	C12H24	C12H22	H ₂
1.0	0.0	0.0	0.0

Время процесса 1.5 сек.

Время, сек.	C12H26	C12H24	C12H22	H ₂
0.00	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.15	0.804527	0.180754	0.014719	0.210193
0.30	0.647262	0.300534	0.052204	0.404941
0.45	0.520733	0.374912	0.104355	0.583622
0.60	0.418956	0.415813	0.165231	0.746276
0.75	0.337032	0.432629	0.230339	0.893307
0.90	0.271153	0.432167	0.296680	1.025527
1.05	0.218183	0.419775	0.362042	1.143859
1.20	0.175526	0.399679	0.424795	1.249269

1.35	0.141217	0.374700	0.484083	1.342866
1.50	0.113622	0.347041	0.539336	1.425714

Схема превращений:

$$C_{13}H_{28} = C_{13}H_{26} + H_2$$

 $C_{13}H_{26} = C_{13}H_{24} + H_2$

Начальные концентрации:

C13H28	C13H26	C13H24	H ₂
1.0	0.0	0.0	0.0

Время процесса 2.0 сек.

Время, сек.	C13H28	C13H26	C13H24	H ₂
0.0	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.2	0.637629	0.343481	0.018890	0.381261
0.4	0.406558	0.529700	0.063742	0.657184
0.6	0.259169	0.618828	0.122003	0.862834
0.8	0.165332	0.648634	0.186034	1.020702
1.0	0.105361	0.643538	0.251101	1.145740
1.2	0.067244	0.618173	0.314583	1.247338
1.4	0.042878	0.582219	0.374904	1.332026
1.6	0.027350	0.541318	0.431333	1.403983
1.8	0.017465	0.498969	0.483566	1.466101
2.0	0.011137	0.457303	0.531560	1.520423

Вариант 5

Схема превращений:

$$C_9H_{16} + H_2 = C_9H_{18}$$

 $C_9H_{18} + H_2 = C_9H_{20}$

Начальные концентрации:

	1		
C9H16	H ₂	C9H18	C9H20
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 1.0 сек.

Время, сек.	C9H16	H ₂	C9H18	C9H20
0.0	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.1	0.757713	0.723147	0.207721	0.034566
0.2	0.619292	0.529340	0.290756	0.089952
0.3	0.533877	0.393634	0.325880	0.140243
0.4	0.477364	0.296735	0.342007	0.180629

0.5	0.438801	0.226331	0.348730	0.212469
0.6	0.412341	0.174581	0.349898	0.237761
0.7	0.392521	0.135459	0.350417	0.257062
8.0	0.377492	0.105570	0.350587	0.271921
0.9	0.366246	0.082733	0.350240	0.283513
1.0	0.357668	0.065073	0.349736	0.292595

Схема превращений:

$$C_{10}H_{18} + H_2 = C_{10}H_{20}$$

 $C_{10}H_{20} + H_2 = C_{10}H_{22}$

Начальные концентрации:

C10H18	H ₂	C ₁₀ H ₂₀	C10H22
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 1.5 сек.

Время, сек.	C10H18	H ₂	C10H20	C10H22
0.00	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.15	0.730661	0.695581	0.234258	0.035081
0.30	0.585666	0.496531	0.325199	0.089135
0.45	0.499750	0.362552	0.363052	0.137198
0.60	0.444211	0.269242	0.380820	0.174969
0.75	0.407159	0.202813	0.388494	0.204347
0.90	0.381326	0.154374	0.391722	0.226952
1.05	0.362391	0.118200	0.393419	0.244190
1.20	0.348597	0.091133	0.393940	0.257464
1.35	0.338337	0.070618	0.393943	0.267720
1.50	0.330515	0.054838	0.393808	0.275677

Вариант 7

Схема превращений:

$$\begin{split} C_{11}H_{20} + H_2 &= C_{11}H_{22} \\ C_{11}H_{22} + H_2 &= C_{11}H_{24} \end{split}$$

Начальные концентрации:

ia ia ib ib ib i ke i qe i i paqiii i					
C11H20	H ₂	C11H22	C11H24		
1.0	1.0	0.0	0.0		

Время процесса 2.0 сек.

Время, сек.	C11H20	H ₂	C11H22	C11H24
0.0	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000

0.2	0.707130	0.679345	0.265086	0.027785
0.4	0.555274	0.484477	0.373928	0.070797
0.6	0.467018	0.357034	0.422998	0.109984
0.8	0.409909	0.268514	0.448696	0.141395
1.0	0.371596	0.205261	0.462068	0.166336
1.2	0.344525	0.158612	0.469563	0.185912
1.4	0.324783	0.123517	0.473951	0.201266
1.6	0.310291	0.096935	0.476354	0.213355
1.8	0.299320	0.076423	0.477782	0.222898
2.0	0.290881	0.060434	0.478672	0.230447

Схема превращений:

$$C_{12}H_{22} + H_2 = C_{12}H_{24}$$

 $C_{12}H_{24} + H_2 = C_{12}H_{26}$

Начальные концентрации:

- 1	Cualdas	11.	C I I	CII
	C 12 H 22	H 2	C 12 H 24	C12H26
	1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 5.0 сек.

Время, сек.	C12H22	H ₂	C12H24	C12H26
0.0	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.5	0.665873	0.654674	0.322928	0.011199
1.0	0.502873	0.473974	0.468228	0.028899
1.5	0.408112	0.362414	0.546190	0.045698
2.0	0.346932	0.286602	0.592738	0.060330
2.5	0.304690	0.231873	0.622494	0.072816
3.0	0.273961	0.190562	0.642640	0.083399
3.5	0.251084	0.158682	0.656514	0.092402
4.0	0.233349	0.133286	0.666589	0.100063
4.5	0.219334	0.112734	0.674066	0.106600
5.0	0.208110	0.095911	0.679690	0.112200

Вариант 9

Схема превращений:

$$C_{13}H_{24} + H_2 = C_{13}H_{26}$$

 $C_{13}H_{26} + H_2 = C_{13}H_{28}$

Начальные концентрации:

C13H24	H ₂	C13H26	C13H28
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 7.0 сек.

Время, сек.	C13H24	H ₂	C13H26	C13H28
0.0	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.7	0.563595	0.544649	0.417460	0.018946
1.4	0.399424	0.356326	0.557479	0.043098
2.1	0.315918	0.253029	0.621194	0.062889
2.8	0.266229	0.187820	0.655363	0.078409
3.5	0.234218	0.143610	0.675174	0.090608
4.2	0.212004	0.111767	0.687760	0.100236
4.9	0.196215	0.088312	0.695883	0.107903
5.6	0.184474	0.070426	0.701479	0.114047
6.3	0.175556	0.056560	0.705447	0.118997
7.0	0.168693	0.045691	0.708306	0.123001

Вариант 10

Схема превращений:

$$\begin{aligned} C_6H_6 + C_9H_{18} &= C_6H_5(C_9H_{19}) \\ C_6H_5(C_9H_{19}) + C_9H_{18} &= C_6H_5(C_9H_{19})_2 \end{aligned}$$

Начальные концентрации:

C ₆ H ₆	C9H18	C6H5(C9H19)	C ₆ H ₅ (C ₉ H ₁₉) ₂
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 1.0 сек.

Время, сек.	C ₆ H ₆	C9H18	C ₆ H ₅ (C ₉ H ₁₉)	C6H5(C9H19)2
0.0	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.1	0.763969	0.742402	0.214465	0.021567
0.2	0.623979	0.564771	0.316814	0.059208
0.3	0.534188	0.437880	0.369504	0.096308
0.4	0.473930	0.344740	0.396879	0.129191
0.5	0.430446	0.274286	0.413393	0.156160
0.6	0.398700	0.220262	0.422862	0.178438
0.7	0.375064	0.178274	0.428147	0.196790
0.8	0.356739	0.144984	0.431507	0.211755
0.9	0.342431	0.118421	0.433558	0.224010
1.0	0.331157	0.097082	0.434769	0.234075

Вариант 11

Схема превращений:

$$\begin{split} C_6H_6 + C_{10}H_{20} &= C_6H_5(C_{10}H_{21}) \\ C_6H_5(C_{10}H_{21}) + C_{10}H_{20} &= C_6H_5(C_{10}H_{21})_2 \end{split}$$

Начальные концентрации:

C ₆ H ₆	C10H20	C6H5(C10H20)	C6H5(C10H20)2
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 2.0 сек.

Время, сек.	C ₆ H ₆	C10H20	C6H5(C10H20)	C ₆ H ₅ (C ₁₀ H ₂₀) ₂
0.0	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.2	0.644289	0.588384	0.299805	0.055905
0.4	0.493888	0.368957	0.381180	0.124931
0.6	0.416366	0.240995	0.408263	0.175371
0.8	0.372289	0.161929	0.417350	0.210360
1.0	0.344779	0.110496	0.420939	0.234282
1.2	0.327257	0.076464	0.421950	0.250793
1.4	0.315496	0.053212	0.422219	0.262284
1.6	0.307580	0.037289	0.422129	0.270291
1.8	0.302148	0.026243	0.421948	0.275904
2.0	0.298359	0.018495	0.421777	0.279864

Вариант 12

Схема превращений:

$$\begin{split} C_6H_6 + C_{11}H_{22} &= C_6H_5(C_{11}H_{23}) \\ C_6H_5(C_{11}H_{23}) + C_{11}H_{22} &= C_6H_5(C_{11}H_{23})_2 \end{split}$$

Начальные концентрации:

C ₆ H ₆	C11H22	C6H5(C11H23)	C6H5(C11H23)2
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 3.0 сек.

Время, сек.	C ₆ H ₆	C11H22	C ₆ H ₅ (C ₁₁ H ₂₃)	C6H5(C11H23)2
0.0	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.3	0.700735	0.664857	0.263386	0.035878
0.6	0.550138	0.461514	0.361238	0.088624
0.9	0.464910	0.330510	0.400690	0.134400
1.2	0.410900	0.241523	0.419723	0.169377
1.5	0.375600	0.179452	0.428252	0.196148
1.8	0.350991	0.134635	0.432653	0.216356
2.1	0.333537	0.101855	0.434781	0.231682
2.4	0.320982	0.077633	0.435668	0.243350
2.7	0.311626	0.059357	0.436105	0.252269
3.0	0.304640	0.045537	0.436256	0.259104

Схема превращений:

$$\begin{split} C_{10}H_{22} &= C_{10}H_{20} + H_2 \\ C_{10}H_{20} &= C_{10}H_{18} + H_2 \end{split}$$

Начальные концентрации:

C10H22	C10H20	C10H18	H ₂
1.0	0.0	0.0	0.0

Время процесса 3.0 сек.

Время, сек.	C10H22	C10H20	C10H18	H ₂
0.0	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.3	0.798512	0.196856	0.004631	0.206119
0.6	0.637629	0.345377	0.016993	0.379364
0.9	0.509125	0.455738	0.035136	0.526011
1.2	0.406554	0.535895	0.057551	0.650996
1.5	0.324666	0.592312	0.083021	0.758355
1.8	0.259172	0.630259	0.110569	0.851397
2.1	0.206936	0.653567	0.139498	0.932562
2.4	0.165324	0.665440	0.169236	1.003911
2.7	0.132049	0.668659	0.199291	1.067242
3.0	0.105444	0.665231	0.229326	1.123882

Вариант 14

Схема превращений:

$$\begin{split} C_{11}H_{24} &= C_{11}H_{22} + H_2 \\ C_{11}H_{22} &= C_{11}H_{20} + H_2 \end{split}$$

Начальные концентрации:

C11H24	C11H22	C11H20	H ₂
0.8	0.1	0.1	0.0

Время процесса 4.0 сек.

Время, сек.	C11H24	C11H22	C11H20	H ₂
0.0	0.800000	0.100000	0.100000	0.000000
0.4	0.592651	0.233285	0.174063	0.281412
0.8	0.439050	0.277354	0.283596	0.544545
1.2	0.325249	0.274252	0.400500	0.775251
1.6	0.240959	0.248230	0.510811	0.969852
2.0	0.178496	0.213638	0.607866	1.129369
2.4	0.132246	0.177654	0.690099	1.257853
2.8	0.097956	0.144498	0.757546	1.359590

3.2	0.072582	0.115378	0.812039	1.439457
3.6	0.053772	0.090998	0.855230	1.501459
4.0	0.039836	0.071047	0.889116	1.549280

Схема превращений:

$$C_{12}H_{26} = C_{12}H_{24} + H_2$$

 $C_{12}H_{24} = C_{12}H_{22} + H_2$

Начальные концентрации:

• •	•		
C12H26	C12H24	C12H22	H ₂
1.0	0.0	0.0	0.0

Время процесса 2.5 сек.

Время, сек.	C12H26	C12H24	C12H22	H ₂
0.00	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.25	0.769126	0.179279	0.051594	0.282468
0.50	0.591555	0.246087	0.162357	0.570802
0.75	0.454978	0.254623	0.290399	0.835421
1.00	0.349938	0.235179	0.414883	1.064945
1.25	0.269144	0.204706	0.526150	1.257006
1.50	0.207007	0.171754	0.621239	1.414232
1.75	0.159211	0.140799	0.699989	1.540778
2.00	0.122460	0.113448	0.764092	1.641632
2.25	0.094184	0.090438	0.815378	1.721194
2.50	0.072444	0.071441	0.856116	1.783672

Вариант 16

Схема превращений:

$$C_{13}H_{28} = C_{13}H_{26} + H_2$$

 $C_{13}H_{26} = C_{13}H_{24} + H_2$

Начальные концентрации:

C13H28	C13H26	C13H24	H ₂
1.0	0.0	0.0	0.0

Время процесса 3.0 сек.

Время, сек.	C13H28	C13H26	C13H24	H ₂
0.0	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.3	0.509126	0.451887	0.038987	0.529861
0.6	0.259169	0.618828	0.122003	0.862834
0.9	0.132030	0.649323	0.218647	1.086618

1.2	0.067244	0.618173	0.314583	1.247338
1.5	0.034223	0.562150	0.403627	1.369403
1.8	0.017459	0.498976	0.483564	1.466105
2.1	0.008898	0.437094	0.554008	1.545111
2.4	0.004528	0.380008	0.615464	1.610936
2.7	0.002311	0.328919	0.668770	1.666460
3.0	0.001177	0.283976	0.714846	1.713669

Схема превращений:

$$C_9H_{16} + H_2 = C_9H_{18}$$

 $C_9H_{18} + H_2 = C_9H_{20}$

Начальные концентрации:

C ₉ H ₁₆	H ₂	C9H18	C9H20
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 2.0 сек.

Время, сек.	C9H16	H ₂	C9H18	C ₉ H ₂₀
0.0	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.2	0.803123	0.757841	0.196877	0.045282
0.4	0.682473	0.551843	0.317527	0.130631
0.6	0.606924	0.392091	0.393076	0.214833
0.8	0.558928	0.274084	0.441072	0.284845
1.0	0.528232	0.189702	0.471768	0.338529
1.2	0.507657	0.130401	0.492343	0.377257
1.4	0.494112	0.089270	0.505888	0.404842
1.6	0.485231	0.061124	0.514769	0.424108
1.8	0.479111	0.041679	0.520889	0.437432
2.0	0.474987	0.028393	0.525013	0.446594

Вариант 18

Схема превращений:

$$C_{10}H_{18} + H_2 = C_{10}H_{20}$$

 $C_{10}H_{20} + H_2 = C_{10}H_{22}$

Начальные концентрации:

C10H18	H ₂	C10H20	C10H22
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 3.5 сек.

Время, сек.	C10H18	H_2	C10H20	C10H22

0.00	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.35	0.669667	0.617725	0.278391	0.051942
0.70	0.519913	0.400333	0.360506	0.119581
1.05	0.439948	0.268614	0.388717	0.171334
1.40	0.393167	0.184867	0.398533	0.208300
1.75	0.363478	0.129197	0.402241	0.234281
2.10	0.343967	0.091363	0.403429	0.252604
2.45	0.330791	0.065162	0.403579	0.265629
2.80	0.321604	0.046650	0.403443	0.274954
3.15	0.315225	0.033609	0.403159	0.281616
3.50	0.310685	0.024261	0.402892	0.286423

Схема превращений:

$$C_{11}H_{20} + H_2 = C_{11}H_{22}$$

 $C_{11}H_{22} + H_2 = C_{11}H_{24}$

Начальные концентрации:

C11H20	H ₂	C ₁₁ H ₂₂	C11H24
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 2.2 сек.

Время, сек.	C11H20	H ₂	C11H22	C11H24
0.00	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.22	0.661596	0.626595	0.303402	0.035001
0.44	0.505841	0.421978	0.410297	0.083862
0.66	0.420830	0.296421	0.454761	0.124409
0.88	0.369146	0.213868	0.475576	0.155278
1.10	0.335496	0.157024	0.486033	0.178471
1.32	0.312598	0.116731	0.491536	0.195866
1.54	0.296648	0.087674	0.494378	0.208974
1.76	0.285045	0.066157	0.496067	0.218888
1.98	0.276604	0.050204	0.496995	0.226401
2.20	0.270374	0.038260	0.497512	0.232114

Вариант 20

Схема превращений:

$$\begin{split} C_{12}H_{22} + H_2 &= C_{12}H_{24} \\ C_{12}H_{24} + H_2 &= C_{12}H_{26} \end{split}$$

Начальные концентрации:

na lasibilbie kengenip	ia las is liste Keridem Padyim					
C12H22	H ₂	C12H24	C12H26			
1.0	1.0	0.0	0.0			

Время процесса 4.0 сек.

Время, сек.	C12H22	H ₂	C12H24	C12H26
0.0	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.4	0.717432	0.667358	0.232494	0.050074
0.8	0.573883	0.453738	0.305971	0.120146
1.2	0.492097	0.315587	0.331392	0.176510
1.6	0.441820	0.223638	0.339998	0.218182
2.0	0.410777	0.161311	0.339757	0.249466
2.4	0.388673	0.117277	0.339932	0.271396
2.8	0.373203	0.085929	0.339523	0.287274
3.2	0.362297	0.063390	0.338796	0.298907
3.6	0.354376	0.046883	0.338131	0.307493
4.0	0.348624	0.034786	0.337538	0.313838

Вариант 21

Схема превращений:

$$C_{13}H_{24} + H_2 = C_{13}H_{26}$$

 $C_{13}H_{26} + H_2 = C_{13}H_{28}$

Начальные концентрации:

C13H24	H ₂	C13H26	C13H28
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 3.0 сек.

Время, сек.	C13H24	H ₂	C13H26	C13H28
0.0	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.3	0.683586	0.650535	0.283362	0.033051
0.6	0.529644	0.448487	0.389199	0.081157
0.9	0.443570	0.320919	0.433780	0.122651
1.2	0.389621	0.234951	0.455710	0.154670
1.5	0.354340	0.175081	0.466401	0.179259
1.8	0.329748	0.131813	0.472317	0.197935
2.1	0.312437	0.100235	0.475360	0.212203
2.4	0.299854	0.076717	0.477010	0.223136
2.7	0.290481	0.058941	0.477980	0.231540
3.0	0.283471	0.045456	0.478513	0.238016

Вариант 22

Схема превращений:

$$\begin{split} C_6H_6 + C_9H_{18} &= C_6H_5(C_9H_{19}) \\ C_6H_5(C_9H_{19}) + C_9H_{18} &= C_6H_5(C_9H_{19})_2 \end{split}$$

Начальные концентрации:

C ₆ H ₆	C9H18	C6H5(C9H19)	C ₆ H ₅ (C ₉ H ₁₉) ₂
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 2.2 сек.

Время, сек.	C ₆ H ₆	C9H18	C6H5(C9H19)	C6H5(C9H19)2
0.00	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.22	0.657520	0.617898	0.302858	0.039622
0.44	0.502886	0.409475	0.403703	0.093411
0.66	0.419708	0.282886	0.443471	0.136821
0.88	0.369815	0.200738	0.461108	0.169077
1.10	0.337663	0.144882	0.469555	0.192781
1.32	0.316106	0.105897	0.473685	0.210209
1.54	0.301238	0.078151	0.475676	0.223087
1.76	0.290573	0.057922	0.476775	0.232652
1.98	0.282951	0.043194	0.477292	0.239757
2.20	0.277398	0.032336	0.477539	0.245063

Вариант 23

Схема превращений:

$$\begin{split} C_6H_6 + C_{10}H_{20} &= C_6H_5(C_{10}H_{21}) \\ C_6H_5(C_{10}H_{21}) + C_{10}H_{20} &= C_6H_5(C_{10}H_{21})_2 \end{split}$$

Начальные концентрации:

C ₆ H ₆	C10H20	C ₆ H ₅ (C ₁₀ H ₂₀)	C6H5(C10H20)2
1.0	1.0	0.0	0.0

Время процесса 1.5 сек.

Время, сек.	C ₆ H ₆	C10H20	C ₆ H ₅ (C ₁₀ H ₂₀)	C ₆ H ₅ (C ₁₀ H ₂₀) ₂
0.00	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.15	0.734116	0.703946	0.235714	0.030170
0.30	0.588501	0.510376	0.333374	0.078125
0.45	0.501080	0.378848	0.376688	0.122232
0.60	0.443979	0.286058	0.398100	0.157921
0.75	0.404962	0.218883	0.408960	0.186078
0.90	0.377622	0.169341	0.414096	0.208281
1.05	0.357377	0.131807	0.417054	0.225570
1.20	0.342363	0.103226	0.418500	0.239137
1.35	0.331123	0.081315	0.419070	0.249808
1.50	0.322459	0.064227	0.419310	0.258232