



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ



**СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ
ИДЕНТИФИКАЦИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ
МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ КИНЕТИКИ
ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ**

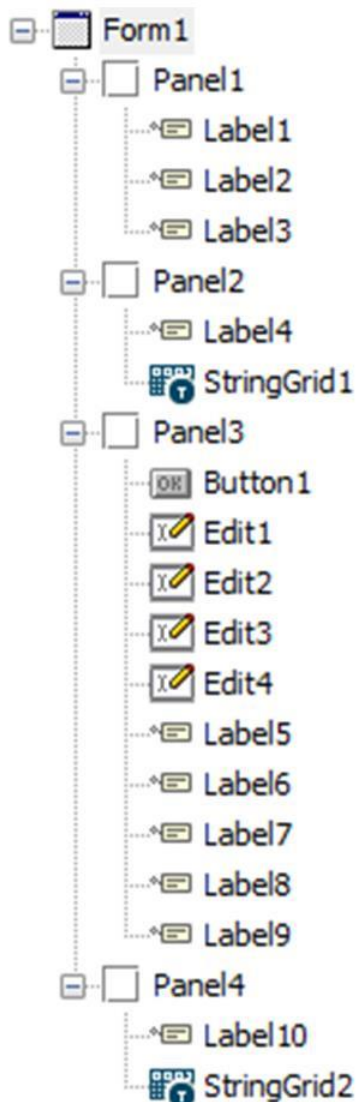
РАЗРАБОТКА ПРИЛОЖЕНИЯ В СРЕДЕ DELPHI

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

2020



Общий вид и структура пользовательского интерфейса



Идентификация кинетических параметров

Схема химических реакций

$$\text{C}_9\text{H}_{20} = \text{C}_9\text{H}_{18} + \text{H}_2$$
$$\text{C}_9\text{H}_{18} = \text{C}_9\text{H}_{16} + \text{H}_2$$

Исходные данные

| | C ₉ H ₂₀ | C ₉ H ₁₈ | C ₉ H ₁₆ | H ₂ |
|--|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|----------------|
| Исходные концентрации, моль / л | 1,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 |
| Экспериментальные концентрации, моль / л | 0,1653 | 0,4481 | 0,3866 | 1,2213 |

Параметры модели

k₁ k₂ t_k h

Результаты расчета

| Время, ч | C ₉ H ₂₀ | C ₉ H ₁₈ | C ₉ H ₁₆ | H ₂ |
|----------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|----------------|
| 0,1 | 0,9048 | 0,0905 | 0,0047 | 0,0998 |
| 0,2 | 0,8187 | 0,1637 | 0,0175 | 0,1988 |
| 0,3 | 0,7408 | 0,2222 | 0,0369 | 0,2961 |
| 0,4 | 0,6703 | 0,2681 | 0,0616 | 0,3912 |
| 0,5 | 0,6065 | 0,3033 | 0,0902 | 0,4837 |
| 0,6 | 0,5488 | 0,3293 | 0,1219 | 0,5731 |
| 0,7 | 0,4966 | 0,3476 | 0,1558 | 0,6592 |
| 0,8 | 0,4493 | 0,3595 | 0,1912 | 0,7419 |
| 0,9 | 0,4066 | 0,3659 | 0,2275 | 0,8209 |



```
procedure TForm1.get_data(var kin_par, comp_conc:TArrOfDouble;  
                           var tk, h: double);  
  
var  
    i: Integer;  
  
begin  
    SetLength(kin_par, react_count);  
    SetLength(comp_conc, comp_count);  
    kin_par[0] := StrToFloat(Edit1.Text);  
    kin_par[1] := StrToFloat(Edit2.Text);  
    for i := 0 to comp_count - 1 do  
        comp_conc[i] := StrToFloat(StringGrid1.Cells[i+1, 1]);  
    tk := StrToFloat(Edit3.Text);  
    h := StrToFloat(Edit4.Text);  
end;
```



```
procedure TForm1.show_result(comp_conc_profile: TArrOfArrOfDouble;  
                             tk, h: double);  
  
var  
    i, j: integer;  
begin  
    with StringGrid2 do  
        for i := 0 to Trunc(tk / h)-1 do  
            begin  
                RowCount := RowCount + 1;  
                cells[0, i+1] := FloatToStrF((i * h + h), fffixed, 4, 1);  
                for j := 0 to comp_count-1 do  
                    cells [j+1, i+1] := FloatToStrF(comp_conc_profile[i, j],  
                                                       fffixed, 8, 4);  
            end;  
        end;  
    end;
```



```
procedure TForm1.FormCreate(Sender: TObject);
```

```
begin
```

```
  with StringGrid1 do
```

```
    begin
```

```
      StringGrid1.ColWidths[0] := 260;
```

```
      Cells[0, 1] := 'Исходные концентрации, моль / л';
```

```
      Cells[0, 2] := 'Экспериментальные концентрации, моль / л';
```

```
      Cells[1, 0] := 'C9H20';
```

```
      Cells[2, 0] := 'C9H18';
```

```
      Cells[3, 0] := 'C9H16';
```

```
      Cells[4, 0] := 'H2';
```

```
      Cells[1, 1] := '1,0';
```

```
      Cells[2, 1] := '0,0';
```

```
      Cells[3, 1] := '0,0';
```

```
      Cells[4, 1] := '0,0';
```

```
      Cells[1, 2] := '0,1653';
```

```
      Cells[2, 2] := '0,4481';
```

```
      Cells[3, 2] := '0,3866';
```

```
      Cells[4, 2] := '1,2213';
```

```
    end;
```

- Данные нужно взять для своего варианта!



```
with StringGrid2 do
begin
    Cells[0, 0] := 'Время, ч';
    Cells[1, 0] := 'C9H20';
    Cells[2, 0] := 'C9H18';
    Cells[3, 0] := 'C9H16';
    Cells[4, 0] := 'H2';
end;
end;
```




```
function TForm1.kinetic_model(c, kin_par: TArrayOfDouble;  
                               react_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];  
    result[2] := kin_par[1] * c[1];  
    result[3] := kin_par[0] * c[0] + kin_par[1] * c[1];  
end;
```

- *Нужно записать для своего варианта!*



```
procedure TForm1.Button1Click(Sender: TObject);  
var  
    kin_par, comp_conc:TArrOfDouble;  
    tk, h: double;  
    comp_conc_profile: TArrOfArrOfDouble;  
begin  
    StringGrid2.RowCount := 1;  
    get_data(kin_par, comp_conc, tk, h);  
    comp_conc_profile := RK(kinetic_model, comp_count, react_count, h, tk,  
                           comp_conc, kin_par);  
    show_result(comp_conc_profile, tk, h)  
end;
```




В модуле, привязанном к форме:

- необходимо добавить блок **const**:

const

```
comp_count = 4;  
react_count = 2;
```

- в блоке **uses** необходимо подключить модуль, в котором описаны расчеты; для этого сначала нужно скопировать файл модуля с расчетами в папку с проектом и добавить этот модуль к проекту следующим образом: выбрать вкладку «Project», затем «Add to Project...», а затем выбрать файл модуля, который необходимо добавить.
- В модуле с реализацией метода Рунге-Кутты сделать следующую корректировку:

type

```
Tfunc = function (c: TArrOfDouble; kin_par: TArrOfDouble;  
                 react_count: integer): TArrOfDouble of object;
```