

TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Системный анализ процессов химической технологии

Лабораторная работа №8

Идентификация кинетических параметров
при моделировании химических реакций

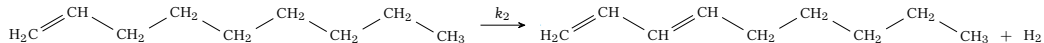
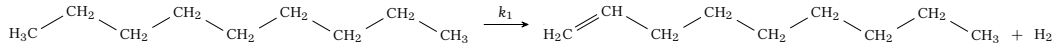
Вячеслав Алексеевич Чузлов,
к.т.н., доцент ОХИ ИШПР

12 марта 2024 г.

Задача

Необходимо определить кинетические параметры изменения концентрации каждого компонента в течение 1 часа с шагом 0.1. Концентрация $[C_9H_{20}]$ в начальный момент времени 1 моль/л, концентрации остальных компонентов равны нулю. Построить зависимость $C(t)$ для каждого компонента.

Схема химических превращений:



Задача

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[C_9H_{20}]}{dt} = -k_1 \cdot [C_9H_{20}] \\ \frac{d[C_9H_{18}]}{dt} = k_1 \cdot [C_9H_{20}] - k_2 \cdot [C_9H_{18}] \\ \frac{d[C_9H_{16}]}{dt} = k_2 \cdot [C_9H_{18}] \\ \frac{d[H_2]}{dt} = k_1 \cdot [C_9H_{20}] + k_2 \cdot [C_9H_{18}] \end{array} \right.$$

Реакция	C_9H_{20}	C_9H_{18}	C_9H_{16}	H_2
r_1	-1	1	0	1
r_2	0	-1	1	1

Концентрация компонентов, моль/л

Время, ч	C_9H_{20}	C_9H_{18}	C_9H_{16}	H_2
0.1	0.8353	0.1563	0.0084	0.1732
0.2	0.6977	0.2715	0.0308	0.3331
0.3	0.5827	0.3540	0.0633	0.4805
0.4	0.4868	0.4104	0.1028	0.6161
0.5	0.4066	0.4463	0.1471	0.7405
0.6	0.3396	0.4662	0.1942	0.8546
0.7	0.2837	0.4736	0.2427	0.9591
0.8	0.2369	0.4716	0.2915	1.0545
0.9	0.1979	0.4625	0.3396	1.1417
1.0	0.1653	0.4481	0.3866	1.2213

TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Контакты

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



Учебный корпус №2, ауд. 136



chuva@tpu.ru



+7-962-782-66-15

Благодарю за внимание!