

ĐẠI HỌC QUỐC GIA TP. HỒ CHÍ MINH
TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA

MÔ HÌNH HÓA–MÔ PHỎNG–TỐI ƯU HÓA
TRONG CÔNG NGHỆ HÓA HỌC

MÔ HÌNH HÓA HỆ ĐỘNG HỌC PHẢN ỨNG
(NHIỀU PHẢN ỨNG, NHIỀU CẤU TỬ)

TS. Nguyễn Đình Thọ

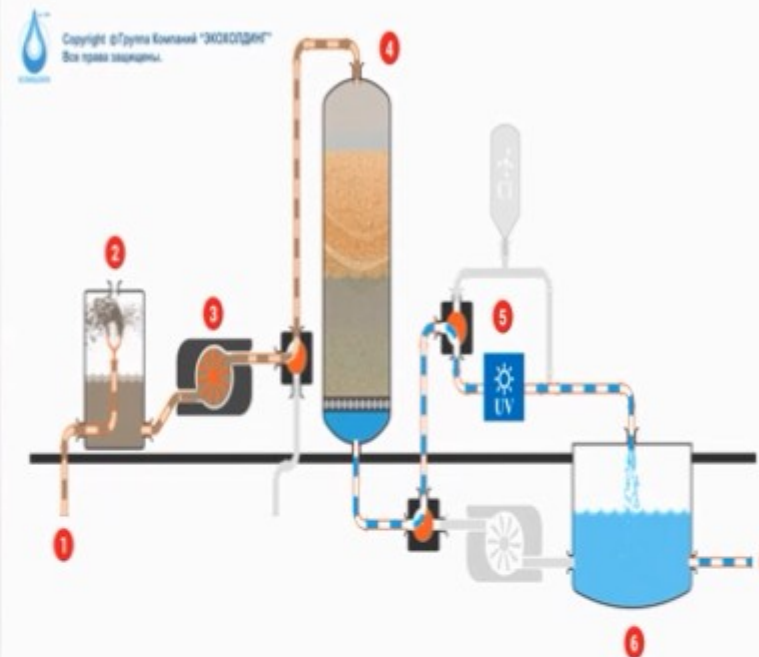
Bộ môn: Quá trình và thiết bị CN Hóa – Sinh học – Thực phẩm



Mô hình hóa Quá trình Hóa học



1. Phân loại phản ứng hóa học
2. Xác định số phản ứng độc lập, số cấu tử đặc trưng
3. Mô hình toán học hệ phản ứng hỗn hợp
4. Khảo sát bài toán động học phản ứng thực tế



1) Phân loại phản ứng hóa học:

Phân loại phản ứng hóa học:

a) Phản ứng đồng thể

- Đơn giản: bậc 1, bậc $n \neq 1$
- Phức tạp: nối tiếp, song song, thuận nghịch
- Hỗn hợp: nhiều cấu tử, nhiều phản ứng

b) Phản ứng dị thể (xúc tác rắn – khí): theo thuyết Lang Muyr, Frendlich, Temkin

c) Phản ứng giả đồng thể: Michaelis – Menten

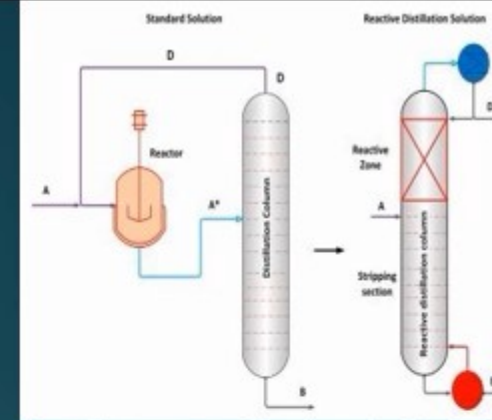
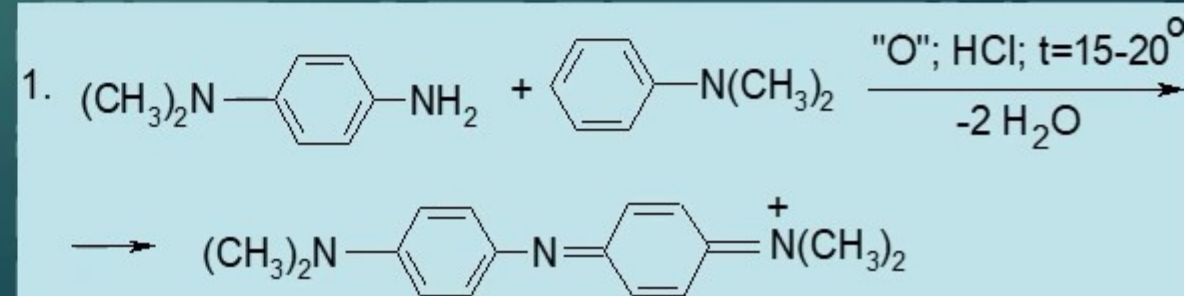
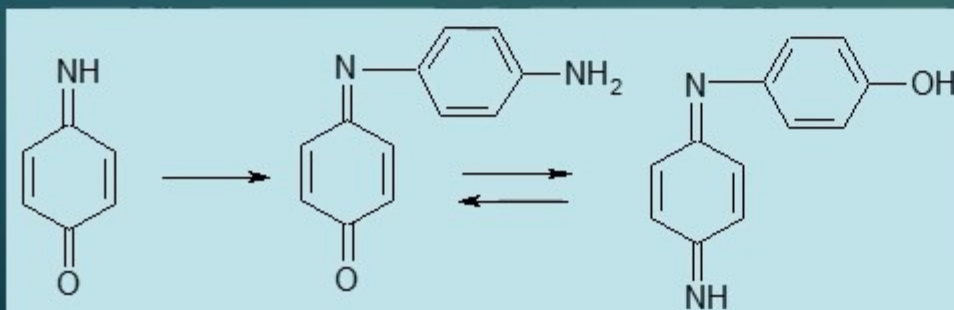
Xét phản ứng: $n\text{-C}_8\text{H}_{10} \rightarrow i\text{-C}_8\text{H}_{10} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_{10} + \text{C}_4\text{H}_8$

Ký hiệu dạng: $A \rightarrow B \rightarrow C + D$

Hay với các phản ứng: $\text{C}_6\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5 - \text{C}_2\text{H}_5$



Thậm chí:



2) Xác định số phản ứng độc lập:

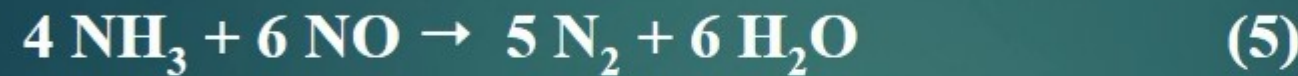
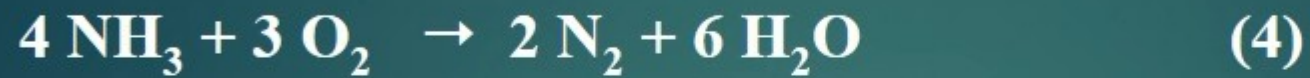
Trình tự thực hiện:

- Viết tất cả các phản ứng có thể xảy ra
- Lập ma trận hệ số tỷ lượng $V = v_{i,j}$: chất tham gia mang dấu “-”. Tạo thành dấu “+”
- Xác định hạng của ma trận V
- Chọn số cấu tử đặc trưng: dễ đo đạc, xác định độ U của chúng
- Viết phương trình cân bằng mol để xác định số mol của các cấu tử còn lại theo các cấu tử đặc trưng.

Xác định số phản ứng độc lập trong quá trình xử lý NH_3 bằng oxy trong nước?

Các phản ứng:	Ma trận hệ số tỷ lượng	NH_3	O_2	NO	H_2O	NO_2	N_2
$4 \text{NH}_3 + 5 \text{O}_2 \rightarrow 4 \text{NO} + 6 \text{H}_2\text{O}$	(1)	-4	-5	4	6	0	0
$2 \text{NO} + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{NO}_2$	(2)	0	-1	-2	0	2	0
$2 \text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}_2$	(3)	0	1	-2	0	0	1
$4 \text{NH}_3 + 3 \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{N}_2 + 6 \text{H}_2\text{O}$	(4)	-4	-3	0	6	0	2
$4 \text{NH}_3 + 6 \text{NO} \rightarrow 5 \text{N}_2 + 6 \text{H}_2\text{O}$	(5)	-4	0	-6	6	0	2
$\text{N}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{NO}$	(6)	0	-1	2	0	0	1

2) Xác định số phản ứng độc lập:



Ma trận hệ số tỷ lượng:

	NH_3	NO_2	N_2	O_2	H_2O	NO
(1)	-4	0	0	-5	6	4
(2)	0	2	0	-1	0	-2
(3)	0	0	1	1	0	-2
(4)	-4	0	2	-3	0	0
(5)	-4	0	5	0	6	-6
(6)	0	0	-1	-1	0	2

ma trận có hạng bằng 3

$$V := \begin{pmatrix} -4 & 0 & 0 & -5 & 6 & 4 \\ 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -2 \\ -4 & 0 & 2 & -3 & 6 & 0 \\ -4 & 0 & 5 & 0 & 6 & -6 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{rank}(V) = 3$$

2) Xác định số phản ứng độc lập:

Chọn 3 phản ứng độc lập:



Ba cấu tử đặc trưng: NH_3 , NO_2 , N_2

Phương trình cân bằng mol:

$$n_{\text{NO}} = n_{\text{NO}}^0 + 4X_1 - 2X_2 - 2X_3$$

$$n_{\text{O}_2} = n_{\text{O}_2}^0 - 5X_1 - X_2 + X_3$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = n_{\text{H}_2\text{O}}^0 + 6X_1$$

Với:
$$X_j = \frac{n_j^0 - n_j}{\nu_j}$$

2) Xác định số phản ứng độc lập:

Xác định số phản ứng độc lập:

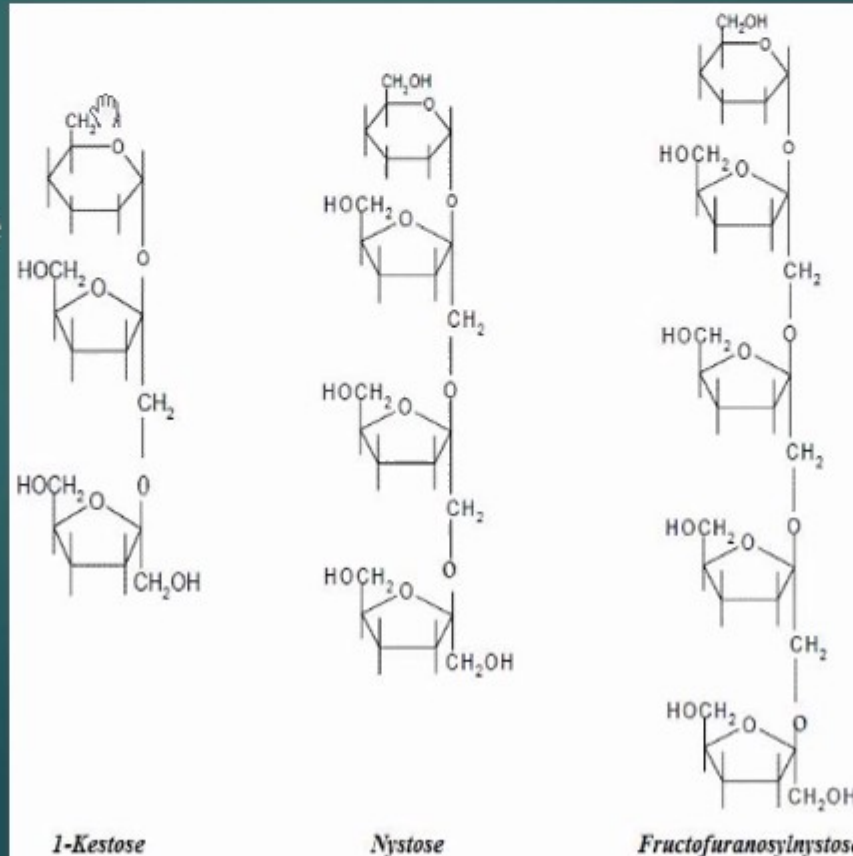
a) Sản xuất Oligosaccharide (Oligosaccharide Production in Enzymatic Lactose Hydrolysis - OLIGO)?

b) Sản xuất đường Fructooligosaccharides (FOS): GF_n
G – Glucose; F – Fructose; $n = 2 \div 4$

$n = 2$ GF_2 – 1 – Kestose

$n = 3$ GF_3 – Nystose

$n = 4$ GF_4 – Furanosylnystose



Fructooligosaccharide (FOS)



2) Xác định số phản ứng độc lập:

Xác định số phản ứng độc lập:

1. $C_{38} + 2 \rightarrow C_4 + 2H_6$
2. $C_4H_{10} + 2 \rightarrow 2C_4 + C_2H_6$
3. $4C_3H_8 \rightarrow 3_{24} + 2_3H_6 + 4H_2$
4. $4_4H_{10} \rightarrow 3_{24} + 2_3H_6 + C_4H_8 + 4H_2$
5. $_{24} + 2 \rightarrow _2H_6$
6. $2_3H_6 + 3_2 \rightarrow 3C_2H_6$
7. $3_2H_4 \rightarrow C_6H_6 + 3_2$
8. $2_3H_6 \rightarrow C_6H_6 + 3H_2$
9. $3C_4H_8 \rightarrow 2C_6H_6 + 6H_2$
10. $7_2H_4 \rightarrow 2C_6H_5CH_3 + 6H_2$
11. $7C_3H_6 \rightarrow 3C_6H_5CH_3 + 9H_2$
12. $7_4H_8 \rightarrow 4C_6H_5C_3 + 12H_2$
13. $4_2H_4 \rightarrow C_6H_4(C_3)_2 + 3H_2$
14. $8_3H_6 \rightarrow 3C_6H_4(C_3)_2 + 9H_2$
15. $2_4H_8 \rightarrow C_6H_4(C_3)_2 + 3H_2$
16. $2_3H_8 \rightarrow C_6H_6 + 5H_2$
17. $7_3H_8 \rightarrow 3C_6H_5CH_3 + 16H_2$
18. $8C_3H_8 \rightarrow 3C_6H_4(CH_3)_2 + 17H_2$
19. $3C_4H_{10} \rightarrow 2C_6H_6 + 9H_2$
20. $7C_4H_{10} \rightarrow 4_6H_5CH_3 + 19H_2$
21. $2C_4H_{10} \rightarrow C_6H_4(C_3)_2 + 5H_2$
22. $5_6H_6 \rightarrow 3C_{10}H_8 + 3H_2$
23. $10C_6H_5CH_3 \rightarrow 7C_{10}H_8 + 12H_2$
24. $5C_6H_4(CH_3)_2 \rightarrow 4C_{10}H_8 + 9H_2$
25. $C_2H_6 + 2 \rightarrow 2CH_4$

3) Mô hình hóa quá trình hóa học

- Xác định số phản ứng độc lập và chọn cấu tử đặc trưng
- Lập ma trận hệ số tỷ lượng: chất tham gia mang dấu “-”. Tạo thành dấu “+”
- Lập vectơ tốc độ: tuân theo động học phản ứng đơn giản (bậc phản ứng bằng hệ số tỷ lượng)
- Vế phải: nhân nghịch đảo của ma trận tỷ lượng với véc tơ tốc độ
- Vế trái chính là vectơ cột cân bằng vật chất của các cấu tử

Ví dụ xét các phản ứng độc lập dạng sau: $A + B \rightarrow X \rightarrow P$

Ma trận hệ số tỷ lượng:	A	B	X	P
Phản ứng (1)	-1	-1	1	0
(2)	0	0	-1	1

Vec tơ tốc độ: $R = (R_1, R_2) = (k_1 C_A C_B, k_2 C_X)$

Hệ phương trình cân bằng vật chất:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \\ C_X \\ C_P \end{pmatrix} = V^T R = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}^T (k_1 C_A C_B, k_2 C_X) = \begin{cases} -k_1 C_A C_B \\ -k_1 C_A C_B \\ k_1 C_A C_B - k_2 C_X \\ k_2 C_X \end{cases}$$

Điều kiện đầu: khi $t = t_0 = 0$, $C_A = C_{A0}$, $C_B = C_{B0}$, $C_X = C_{X0}$, $C_P = C_{P0}$

3) Mô hình hóa quá trình hóa học

1. $C_{38}+2 \rightarrow C_4+2H_6$
2. $C_4H_{10}+2_2 \rightarrow 2C_4+C_2H_6$
3. $4C_3H_8 \rightarrow 3_{24}+2_3H_6+4H_2$
4. $4_4H_{10} \rightarrow 3_{24}+2_3H_6+C_4H_8+4H_2$
5. $2_4+2 \rightarrow 2H_6$
6. $2_3H_6+3_2 \rightarrow 3C_2H_6$
7. $3_2H_4 \rightarrow C_6H_6+3_2$
8. $2_3H_6 \rightarrow C_6H_6+3H_2$
9. $3C_4H_8 \rightarrow 2C_6H_6+6H_2$
10. $7_2H_4 \rightarrow 2C_6H_5CH_3+6H_2$
11. $7C_3H_6 \rightarrow 3C_6H_5CH_3+9H_2$
12. $7_4H_8 \rightarrow 4C_6H_5C_3+12H_2$
13. $4_2H_4 \rightarrow C_6H_4(C_3)_2+3H_2$
14. $8_3H_6 \rightarrow 3C_6H_4(C_3)_2+9H_2$
15. $2_4H_8 \rightarrow C_6H_4(C_3)_2+3H_2$
16. $2_3H_8 \rightarrow C_6H_6+5H_2$
17. $7_3H_8 \rightarrow 3C_6H_5CH_3+16H_2$
18. $8C_3H_8 \rightarrow 3C_6H_4(CH_3)_2+17H_2$
19. $3C_4H_{10} \rightarrow 2C_6H_6+9H_2$
20. $7C_4H_{10} \rightarrow 4C_6H_5CH_3+19H_2$
21. $2C_4H_{10} \rightarrow C_6H_4(C_3)_2+5H_2$
22. $5_6H_6 \rightarrow 3C_{10}H_8+3H_2$
23. $10C_6H_5CH_3 \rightarrow 7C_{10}H_8+12H_2$
24. $5C_6H_4(CH_3)_2 \rightarrow 4C_{10}H_8+9H_2$
25. $C_2H_6+2 \rightarrow 2CH_4$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_2 = k_2 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_3 = k_3 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_4 = k_4 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_5 = k_5 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_6 = k_6 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_7 = k_7 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_8 = k_8 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_9 = k_9 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_{10} = k_{10} C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_{11} = k_{11} C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_{12} = k_{12} C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$$r_1 = k_1 C_{C_3H_8} K_{C_3H_8}$$

$k_1(0) = 0.021 \text{ h,}$
 $k_2(0) = 0.051 \text{ h,}$
 $k_3(0) = 0.041 \text{ h,}$
 $k_4(0) = 0.011 \text{ h,}$
 $k_5(0) = 0.041 \text{ h,}$
 $k_6(0) = 0.091 \text{ h,}$
 $k_7(0) = 0.051 \text{ h,}$
 $k_8(0) = 0.051 \text{ h,}$
 $k_9(0) = 0.111 \text{ h,}$
 $k_{10}(0) = 0.031 \text{ h,}$
 $k_{11}(0) = 0.021 \text{ h,}$
 $k_{12}(0) = 0.051 \text{ h,}$
 $k_{13}(0) = 0.0051 \text{ h,}$
 $k_{14}(0) = 0.0041 \text{ h,}$
 $k_{15}(0) = 0.091 \text{ h,}$
 $k_{16}(0) = 5.75 \cdot 10^{-71} \text{ khl} \cdot \text{h,}$
 $k_{17}(0) = 1.25 \cdot 10^{-51} \text{ \%khl} \cdot \text{h,}$
 $k_{18}(0) = 4.75 \cdot 10^{-71} \text{ \%khl} \cdot \text{h,}$
 $k_{19}(0) = 2.95 \cdot 10^{-61} \text{ \%khl} \cdot \text{h,}$
 $k_{20}(0) = 9 \cdot 10^{-51} \text{ \%khl} \cdot \text{h,}$
 $k_{21}(0) = 1.95 \cdot 10^{-51} \text{ \%khl} \cdot \text{h,}$
 $k_{22}(0) = 0.0031 \text{ h,}$
 $k_{23}(0) = 0.0031 \text{ h,}$
 $k_{24}(0) = 0.0041 \text{ h,}$
 $k_{25}(0) = 0.321 \text{ h,}$
 $B = 6000.$

3) Mô hình hóa quá trình và thiết bị hấp thụ

$$\begin{bmatrix}
 \mathcal{G}_{\text{CH}_4}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{C}_2\text{H}_6}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{C}_3\text{H}_8}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{C}_4\text{H}_{10}}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{C}_5\text{H}_{12}}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{C}_6\text{H}_{14}}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{C}_7\text{H}_{16}}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{C}_8\text{H}_{18}}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{H}_2}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{C}_4\text{H}_6}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{C}_7\text{H}_8}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{C}_8\text{H}_{10}}^R \\
 \mathcal{G}_{\text{C}_{10}\text{H}_8}^R
 \end{bmatrix}
 -
 \begin{bmatrix}
 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\
 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 3 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\
 -1 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & -7 & -8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & -1 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & -7 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 3 & 3 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -7 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 2 & 2 & 0 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & -7 & 0 & 0 & -8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & 0 & -7 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 -1 & -2 & 4 & 4 & -1 & -3 & 1 & 3 & 6 & 6 & 9 & 12 & 3 & 9 & 3 & 5 & 16 & 17 & 9 & 19 & 5 & 3 & 12 & 9 & -1 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & -5 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 3 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & -10 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 3 & 1 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -5 & 0 \\
 0 & 3 & 7 & 4 & 0
 \end{bmatrix}
 \begin{matrix}
 r_1 \\
 r_2 \\
 r_3 \\
 r_4 \\
 r_5 \\
 r_6 \\
 r_7 \\
 r_8 \\
 r_9 \\
 r_{10} \\
 r_{11} \\
 r_{12} \\
 r_{13} \\
 r_{14} \\
 r_{15} \\
 r_{16} \\
 r_{17} \\
 r_{18} \\
 r_{19} \\
 r_{20} \\
 r_{21} \\
 r_{22} \\
 R_{23} \\
 R_{24} \\
 r_{25}
 \end{matrix}$$

3) Mô hình hóa quá trình hóa học

a) Kiểm tra tính tương hợp của mô hình

Xét phản ứng: $A \rightleftharpoons B \rightleftharpoons P$ (1)

Ma trận hệ số tỷ lượng:

	A	B	P	
(1)	-1	1	0	
(2)	1	-1	0	(2)
(3)	0	-1	1	
(4)	0	1	-1	

Vecto tốc độ: $R = (R_1, R_2, R_3, R_4)$ (3)

Với: $R_1 = k_1 C_A$

$R_2 = k_{-1} C_B$

$R_3 = k_2 C_B$

$R_4 = k_{-2} C_P$

Điều kiện đầu: $t = 0$ $C_{A0} = 100$; $C_{B0} = 0$; $C_{P0} = 0$ (4)

Khi đó hệ phương trình động học:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \\ C_P \end{pmatrix} = \begin{cases} -k_1 C_A + k_{-1} C_B \\ k_1 C_A - k_{-1} C_B - k_2 C_B + k_{-2} C_P \\ k_2 C_B - k_{-2} C_P \end{cases} \quad (5) \quad C_A = C_{A0} \exp(-k_1 t)$$

Nghiệm giải tích:

$$C_B = \frac{C_{A0} k_1}{k_2 - k_1} [\exp(-k_1 t) + \exp(-k_2 t)] \quad (6)$$

$$C_P = \frac{C_{A0}}{k_2 - k_1} \{k_2 [1 - \exp(-k_1 t)] - k_1 [1 - \exp(-k_2 t)]\}$$

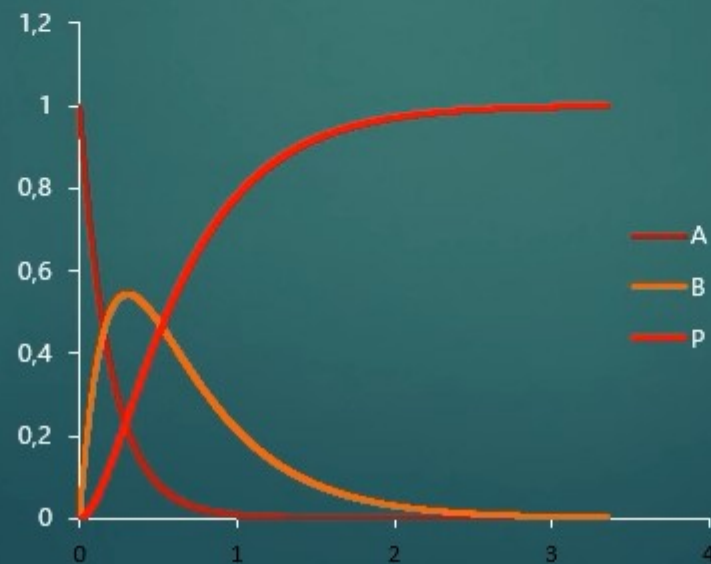
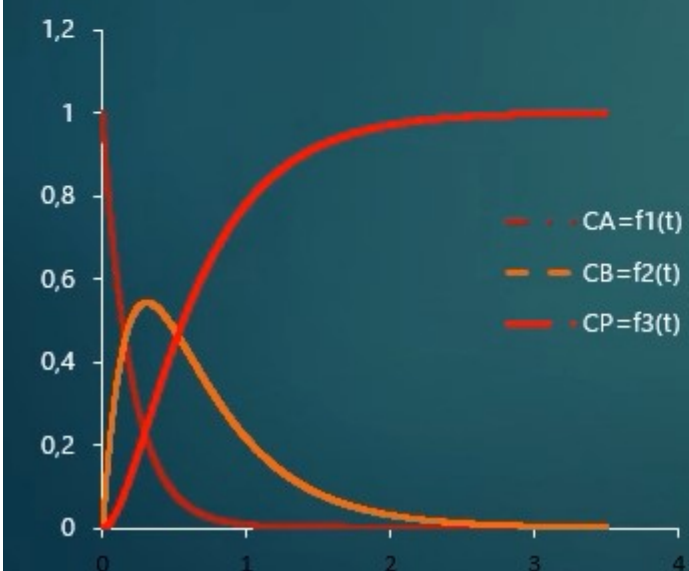
3) Mô hình hóa quá trình hóa học

Mô hình toán học (5) với điều kiện đầu (4) được giải dạng bài toán Cosi bằng phương pháp Runge – Kutta

Sử dụng nghiệm số của mô hình trên giải quyết một số vấn đề sau:

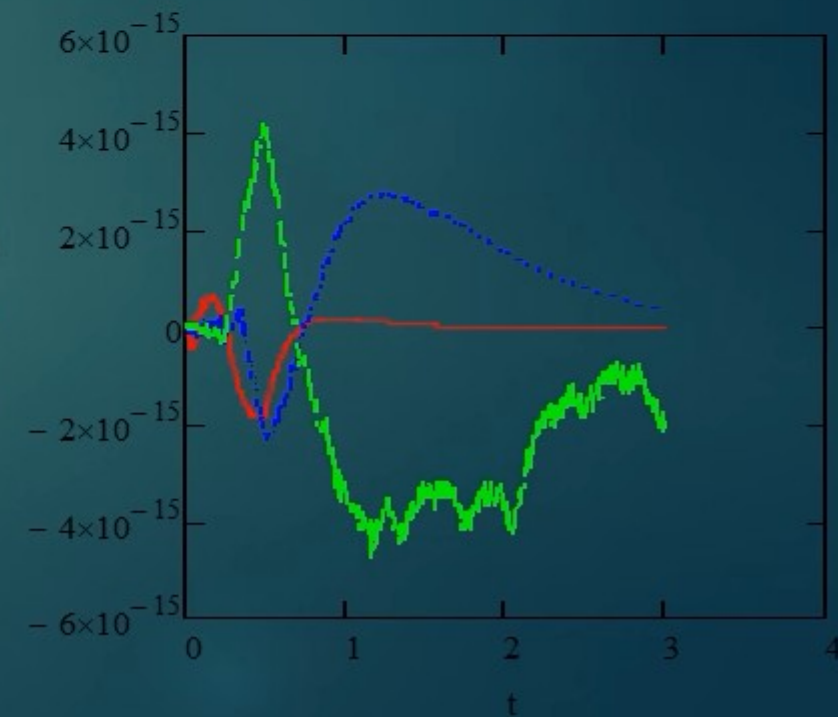
- Kiểm tra tính tương hợp của mô hình: so sánh nghiệm số với nghiệm giải tích (6)
- Giải bài toán thuận của động học phản ứng: tìm các thông số động học k , n , E
- Giải bài toán động học thực: khi biết k , tính biến đổi nồng độ theo t
khi biết k , tính thời gian để đạt năng suất cho trước

a) Kiểm tra tính tương hợp của mô hình



A – Aex(t)
B – Bex(t)
P – Pex(t)

A
B
P



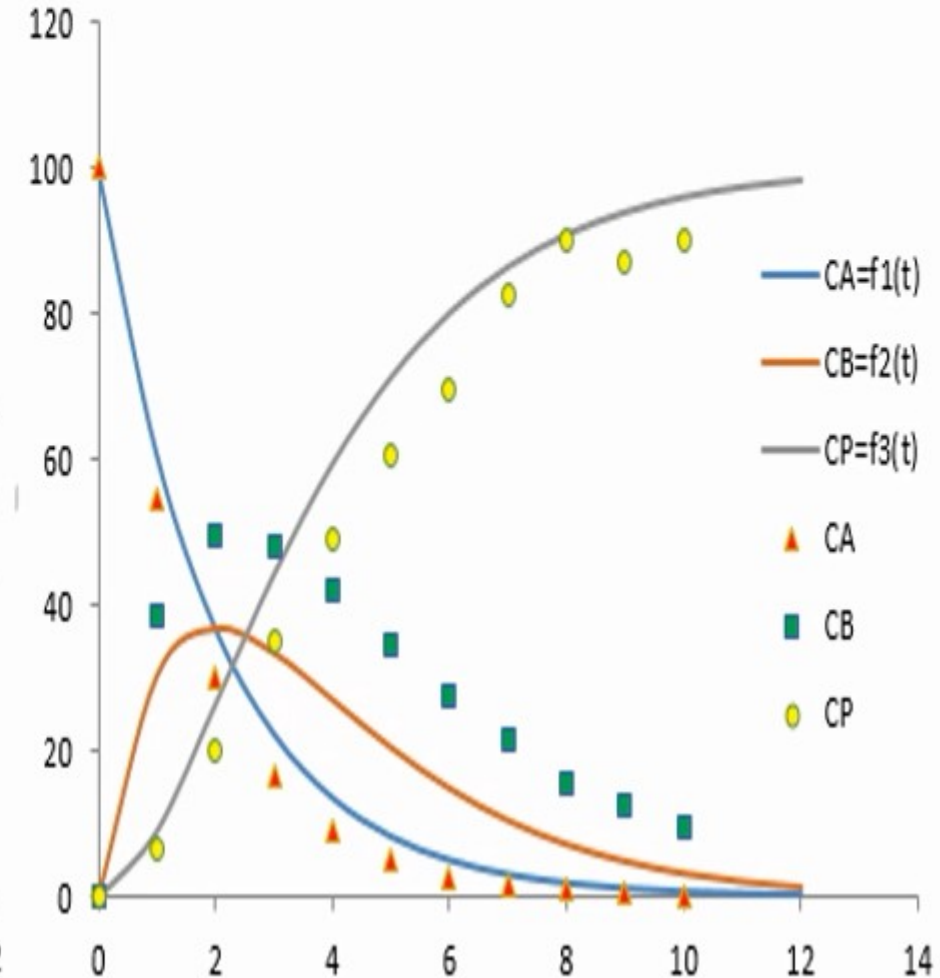
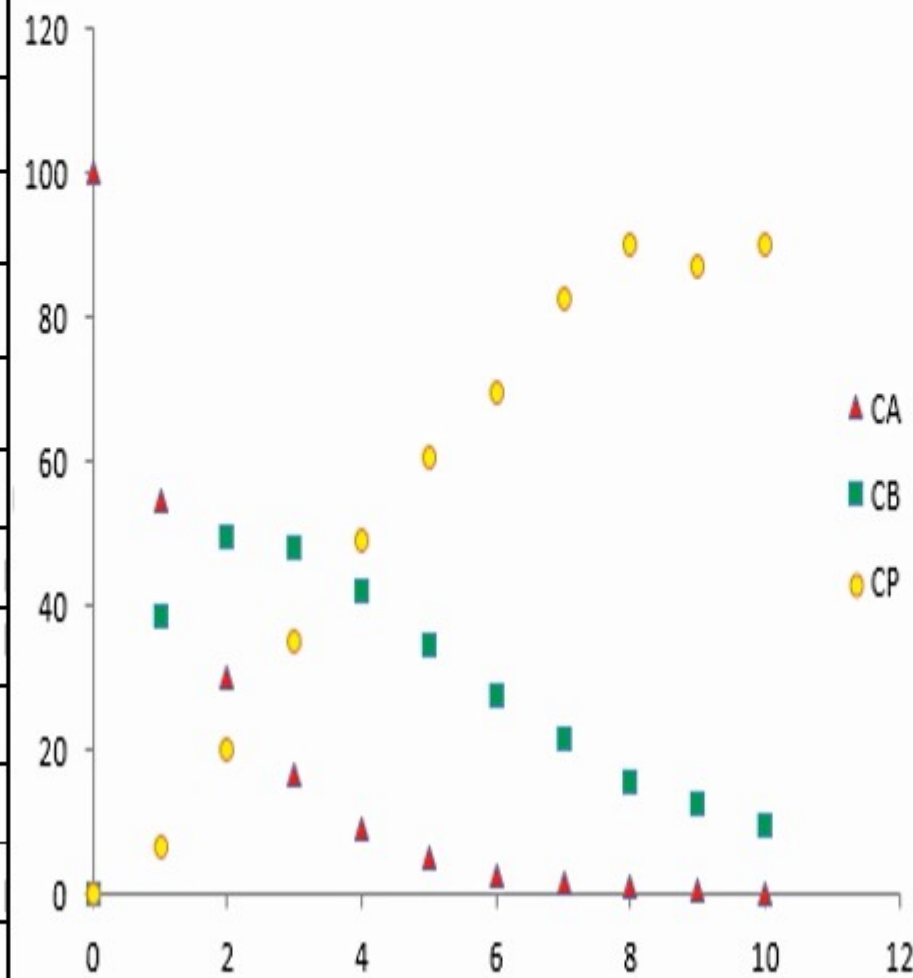
3) Mô hình hóa quá trình hóa học

b) Xác định tham số của mô hình: $A \rightleftharpoons B \rightleftharpoons P$

Khi cho $k_{-1} = k_{-2} = 0$: $A \rightarrow B \rightarrow P$

Tìm hằng số tốc độ theo số liệu thực

τ	C_A	C_B	C_P
0	100	0	0
1	54,8	38,5	6,7
2	30,00	49,6	20,3
3	16,4	48,3	35,2
4	9,00	42,1	48,9
5	4,9	34,7	60,4
6	2,7	27,6	69,7
7	1,5	21,4	82,7
8	0,8	15,5	90,0
9	0,44	12,5	87,0
10	0,24	9,4	90,3



3) Mô hình hóa quá trình hóa học

b) Giải bài toán thuận của động học: $A \rightleftharpoons B \rightleftharpoons P$

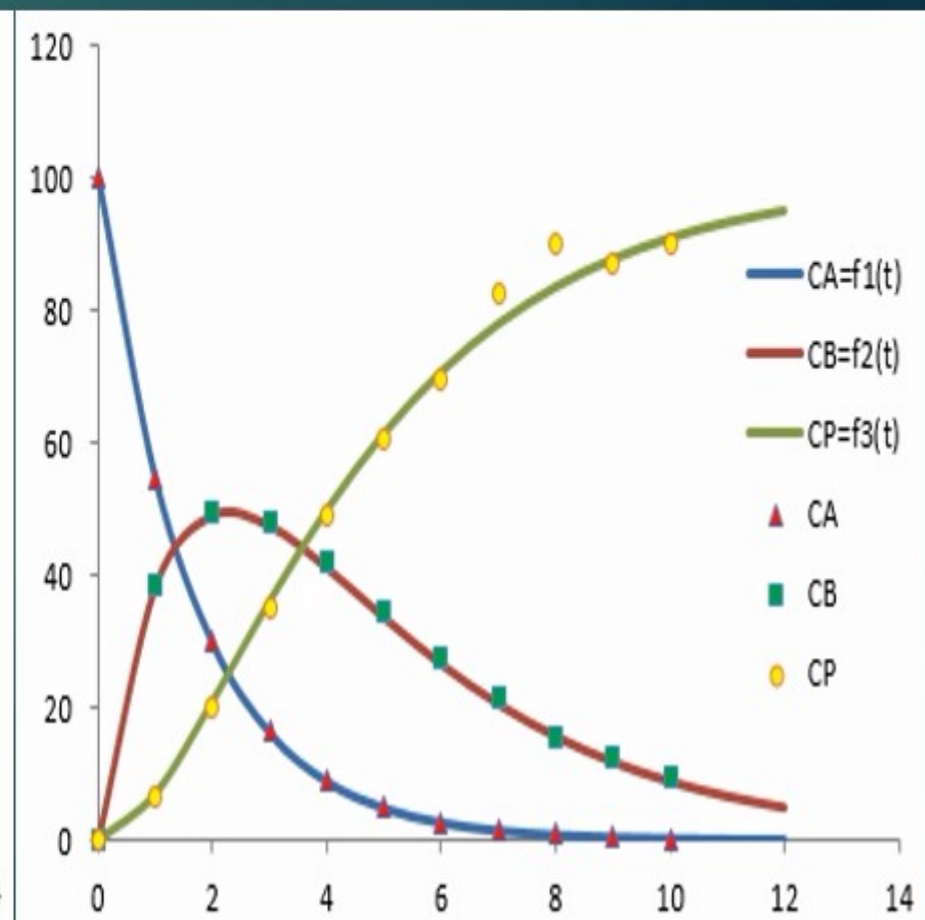
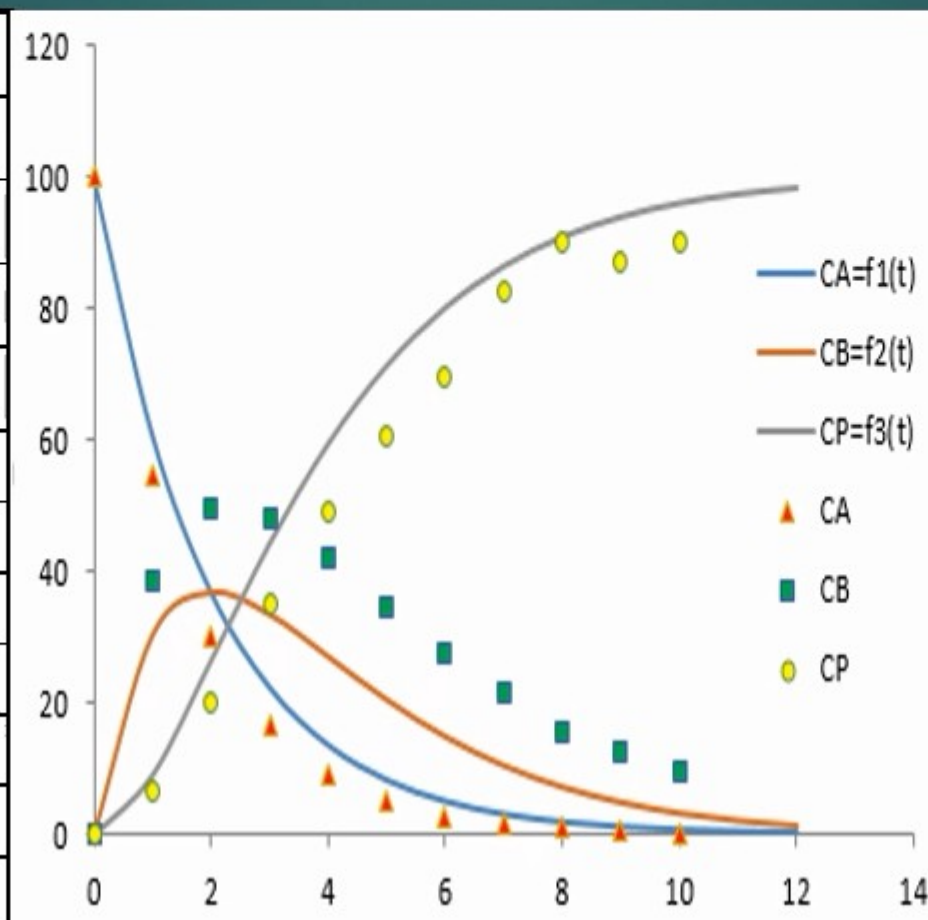
Khi cho $k_{-1} = k_{-2} = 0$: $A \rightarrow B \rightarrow P$

Giải $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k (C_{ij} - C_{Nj})^2 \rightarrow \text{Min}$ bằng solver $k_1 = 0,5$ $k_2 = 0,5$

Kết quả tìm được $k_1 = 0,61$ $k_2 = 0,31$



τ	C_A	C_B	C_P
0	100	0	0
1	54,8	38,5	6,7
2	30,00	49,6	20,3
3	16,4	48,3	35,2
4	9,00	42,1	48,9
5	4,9	34,7	60,4
6	2,7	27,6	69,7
7	1,5	21,4	82,7
8	0,8	15,5	90,0
9	0,44	12,5	87,0
10	0,24	9,4	90,3



3) Mô hình hóa quá trình hóa học

a) Kiểm tra tính tương hợp của mô hình: hệ có 3 phản ứng độc lập, 3 cấu tử đặc trưng (đỏ)



Với: $\text{A} - \text{TI}^+$, $\text{B} - \text{Co}^{3+}$, $\text{C} - \text{TI}^{2+}$, $\text{D} - \text{Co}^{2+}$, $\text{E} - \text{TI}^{3+}$.

Điều kiện đầu: $t = 0$ $C_{\text{A}0} = C_{\text{B}0} = 1$; $C_{\text{C}0} = C_{\text{D}0} = C_{\text{E}0} = 0$

$$k_1 = 1; k_2 = 0,25; k_3 = 0,5$$

Ma trận hệ số tỷ lượng: A B C D E Tốc độ phản ứng $R = (R_1, R_2, R_3)$

Phản ứng (1) - 1 -1 1 1 0 $R_1 = k_1 C_A C_B$

(2) 1 1 -1 -1 0 $R_2 = k_{-1} C_C C_D$

(3) 0 -1 -1 1 1 $R_3 = k_2 C_B C_C$

Mô hình toán: $\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \\ C_C \\ C_D \\ C_E \end{pmatrix} = \begin{cases} -k_1 C_A C_B + k_{-1} C_C C_D \\ -k_1 C_A C_B + k_{-1} C_C C_D - k_2 C_B C_C \\ k_1 C_A C_B - k_{-1} C_C C_D - k_2 C_B C_C \\ k_1 C_A C_B - k_{-1} C_C C_D + k_2 C_B C_C \\ k_2 C_B C_C \end{cases}$

3) Mô hình hóa quá trình hóa học

b) Giải bài toán thuận của động học

Xét phản ứng: $A + B \rightleftharpoons C + D$ k_1 k_2



Tiêu chí: $\delta = \sum_{l=1}^T \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k \left(\frac{C_{j,i,l}^M - C_{j,i,l}^{TN}}{C_{j,i,l}^{TN}} \right)^2 \rightarrow \min$

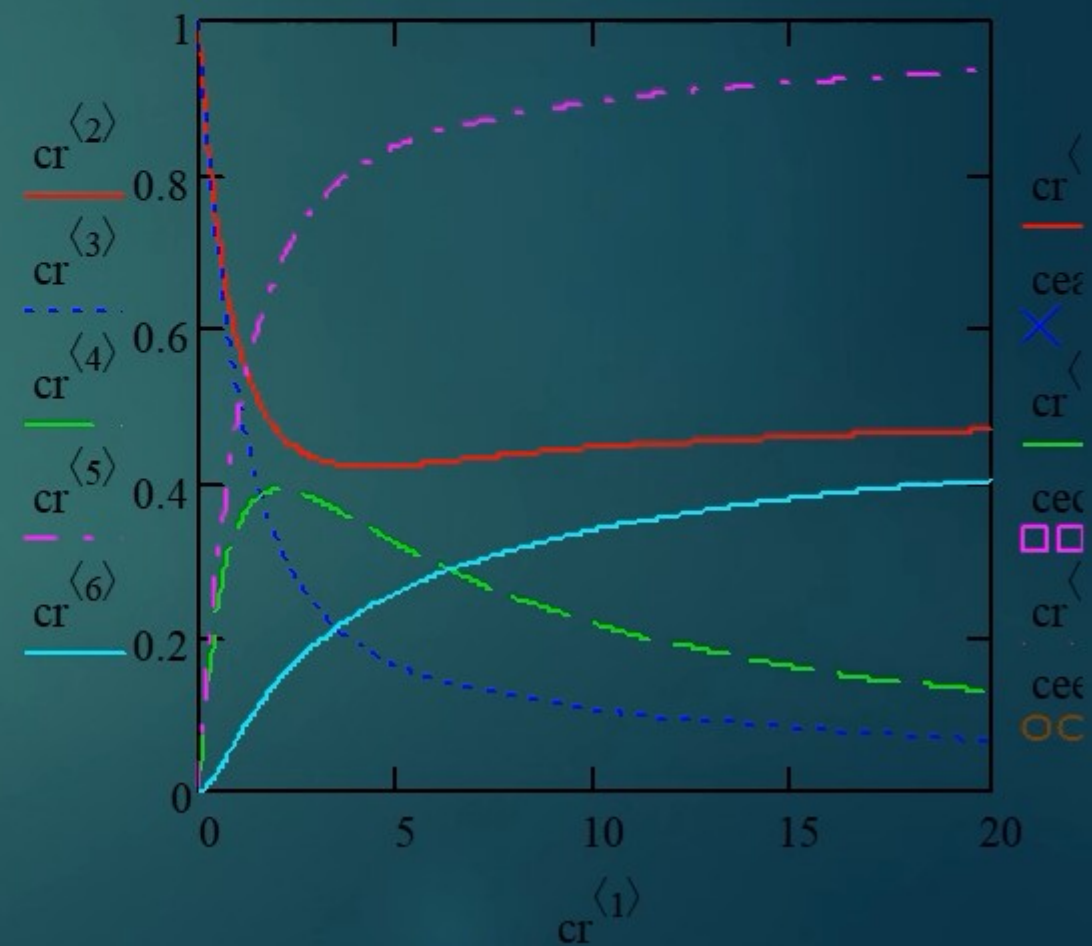
Với: $j = 1 \div k$: số cấu tử; $i = 1 \div N$: số thí nghiệm

$l = 1 \div T$: t_1, t_2, \dots, t_T nhiệt độ

Điều kiện đầu: $t = 0$ $C_{A0} = C_{B0} = 1$; $C_{C0} = C_{D0} = C_{E0} = 0$

$$k_1 = 1; k_2 = 0,25; k_3 = 0,5$$

Từ đó:
$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \\ C_C \\ C_D \\ C_E \end{pmatrix} = \begin{cases} -k_1 C_A C_B + k_{-1} C_C C_D \\ -k_1 C_A C_B + k_{-1} C_C C_D - k_2 C_B C_C \\ k_1 C_A C_B - k_{-1} C_C C_D - k_2 C_B C_C \\ k_1 C_A C_B - k_{-1} C_C C_D + k_2 C_B C_C \\ k_2 C_B C_C \end{cases}$$



3) Mô hình hóa quá trình hóa học

b) Giải bài toán thuận của động học

Xét phản ứng: $A + B \rightleftharpoons C + D$ k_1 k_2

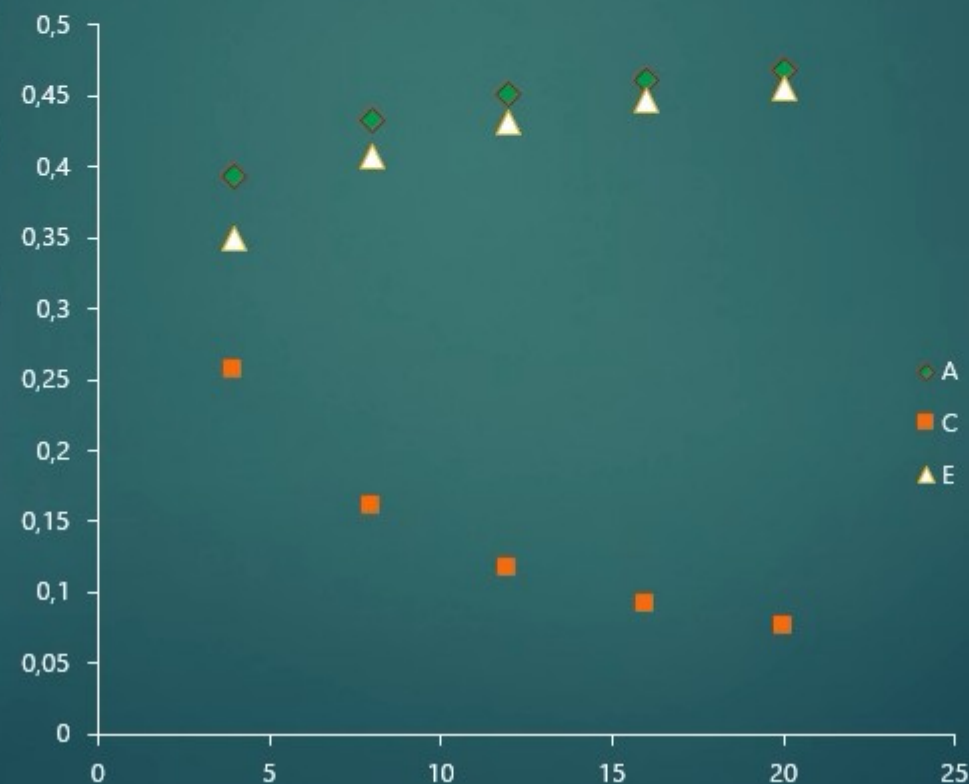


Hằng số tốc độ phản ứng phụ thuộc vào nhiệt độ:

$$k_1(T) = \exp\left(23 - \frac{1400}{2T}\right)$$

$$k_2(T) = \exp\left(24 - \frac{1600}{2T}\right)$$

$$k_3(T) = \exp\left(30 - \frac{1800}{2T}\right)$$



TT τ , ph	Số liệu thực nghiệm			
	A	C	E	t, K
4	0.393	0.257	0.35	283
8	0.433	0.161	0.407	
12	0.451	0.117	0.432	
16	0.461	0.092	0.447	
20	0.468	0.076	0.456	
4	0.45	0.122	0.428	293
8	0.472	0.068	0.46	
12	0.481	0.047	0.473	
16	0.485	0.036	0.479	
20	0.488	0.029	0.483	
4	0.479	0.052	0.469	303
8	0.489	0.027	0.484	
12	0.493	0.018	0.489	
16	0.495	0.014	0.492	
20	0.496	0.011	0.493	
4	0.492	0.022	0.487	313
8	0.496	0.011	0.493	
12	0.497	0.0073	0.496	
16	0.498	0.0055	0.497	
20	0.498	0.0044	0.497	

3) Mô hình hóa quá trình hóa học

b) Giải bài toán thuận của động học

Xét phản ứng: $A + B \rightleftharpoons C + D$ k_1 k_2



Trong đó ký hiệu: $A - Tl^+$, $B - Co^{3+}$, $C - Tl^{2+}$, $D - Co^{2+}$, $E - Tl^{3+}$.

Tìm được:

$$k_1 = 0,776$$

$$k_2 = 0,209$$

$$k_3 = 0,472$$

