

РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ, ОПИСЫВАЮЩЕЙ КИНЕТИКУ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ ПЕРВОГО ПОРЯДКА

А.С. Губкин

г. Томск, Томский политехнический университет

e-mail: a.g.s.111@yandex.ru

Суть данной работы заключается в разработке модели описывающей кинетику химической реакции первого порядка и проверки адекватности полученной модели. Основная задача была сформулирована следующим образом: реализация модели кинетики химической реакции для конкретной реакции с произвольными начальными условиями. Работа по созданию модели состояла из двух этапов: математическое описание определенной реакции с помощью системы дифференциальных уравнений, непосредственно, решение данной системы численным методом в пакете MATLAB. Следующим этапом работы была проверка адекватности полученной модели с помощью закона сохранения масс. Последний этап работы – анализ полученных результатов. При составлении системы дифференциальных уравнений, описывающих протекание реакции, были приняты следующие допущения: первое – реакция элементарная, то есть протекающая в одну стадию. Второе допущение заключалось в том, что реакция считается протекающей в замкнутом постоянном объеме. Второе допущение необходимо для упрощения системы, так как при переменном объеме концентрация будет зависеть от объема. Решение системы полученных уравнений было найдено численным методом в пакете MATLAB с помощью решателя ode45. Решатель ode45 реализует поиск решения системы дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутты четвертого порядка. Проверка выполнения закона сохранения масс дала следующий результат: масса реагентов остается постоянной на протяжении всего промежутка времени, на котором ищется решение. Следовательно, можно сделать вывод о том, что полученная модель адекватно описывает кинетику реакции первого порядка.

Литература

1. Федосеев А.М. Математическое моделирование кинетики сложных химических реакций Учебное пособие. Ч. I – Пермь: Изд-во Пермского государственного технического университета, 2010. – 223 с.
2. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики: Учебник для химических факультетов - 4-е изд., перераб. и доп.-М.: Высш. шк, 1984 -463 с.