



Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України "КПІ"
Хіміко-технологічний факультет НТУУ "КПІ"
Центрально-східно-європейський інститут сталого розвитку
Національний університет "Львівська політехніка"
Санкт-Петербургский государственный технологический институт (ТУ)
Казанский государственный технологический университет
Technische Universitat Dresden, Institut fur Technische Chemie
Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Lukaszewicza
ДержНДІ ХімТехнологія
ТОВ «Комплексні очисні пристрої»

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ ТА ТЕХНОЛОГІЯХ І СТАЛИЙ РОЗВИТОК

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

другої міжнародної
науково-практичної конференції

Київ, 12-15 травня 2010 року



ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА С MATHCAD, MAPLE И MCS: КНИГА + САЙТ

Коробов В.И., Очков В.Ф. *

Днепропетровский национальный университет им. Олеся Гончара, korvik58@mail.ru

*Московский энергетический институт (технический университет), OchkovVF@mpei.ru

Изданная авторами доклада книга «Химическая кинетика: введение с Mathcad/Maple/MCS» (М.: Горячая линия - Телеком, 2009) имеет некоторые особенности, отличающие ее от традиционных книг по химической кинетике. Во-первых, представленный читателю материал рассматривается с позиции реализации расчетов с помощью современных систем компьютерной математики Mathcad и Maple. Во-вторых, подавляющее большинство иллюстраций к книге являются полноценными расчетными документами. Пользователю необязательно воспроизводить последовательность расчетов путем формирования собственных документов. Достаточно обратиться на сайт книги (<http://twt.mpei.ac.ru/ТТНВ/ChemKin.html>), где можно скачать готовый документ Mathcad (наиболее

рапространенных версий 11, 13, 14) или Maple. Многие документы реализованы в сетевом варианте, т. е. работать с ними можно, не устанавливая на компьютер пользователя систему Mathcad. Расчет при этом осуществляется по технологии Mathcad Calculation Server (MCS) дистанционно через сеть Интернет.

Chemical Kinetics Simulator on the MCS

from S.Bruff (UK), V.Korobov (UA), V.Ochkov (RU) and I.Geleta (UA)

Define a new set of chemical equations

(The number of elementary steps should be equal 2 or more)

A->B; B->A; B->C; C->D; B+C->E; E->F;

Define the rate coefficients

NumberOfSteps = 6

*The number of rate coefficients should be equal to number of steps

0.1 0.04 0.03 0.005 0.001 0.015

Define the initial concentrations

NumberOfSpecies = 6

*The number of initial concentrations should be equal to number of species

1 0 0 0 0.5 0

Choose Integrator

Endpoint of the integration interval

- AdamsBDF
 Radau
 Rkadapt
 rkfixed
 Adams
 BDF

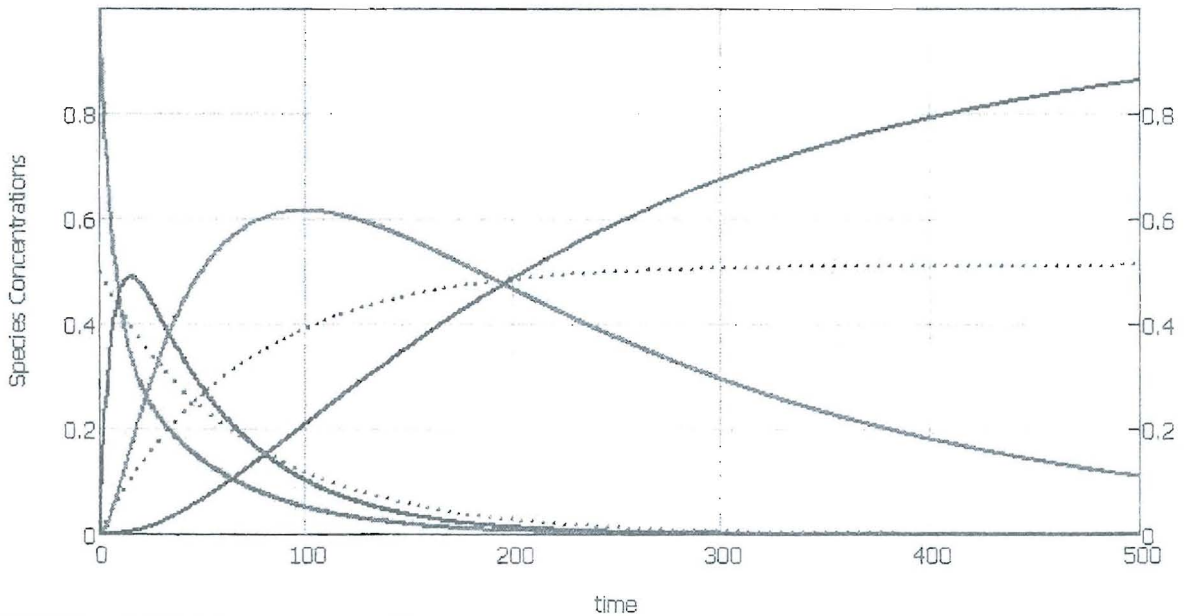
500

Number of the integration steps

Recalculate

1000

Plot the results (sorry, not more 16 curves)



Mathcad
Calculation Server



This web page is running on a [Mathcad Calculation Server](#), and was authored with Mathcad

This web page can use the [WaterSteamPro](#) functions.

You can also visit our products site at <http://www.trie.ru>.

Copyright (c) [Moscow Power Engineering Institute](#), 2007-2008.

Рис. 1 Сетевой вариант кинетического симулятора на Mathcad Calculation Server

Структура книги охватывает 7 разделов. В первых двух из них речь идет о формально-кинетическом описании простых реакций, а также тех сложных реакций, для которых возможно аналитическое решение прямой задачи. Раздел 3 посвящен численным методам расчета кинетических кривых всех участников многостадийных реакций, математической моделью которых есть системы нелинейных дифференциальных уравнений. Показано, что системы Mathcad и Maple обладают достаточным арсеналом встроенных функций-интеграторов, применение которых дает возможность быстрого и точного прогноза эволюции реакционной системы во времени. На базе пакета Mathcad 14 разработан сетевой вариант универсального кинетического симулятора многостадийных реакций (рис. 1).

Значительное место в книге уделено методам оценки констант скоростей элементарных стадий многостадийных реакций по экспериментальным кинетическим данным. Показано, что встроенные средства пакета Mathcad позволяют эффективно оценивать кинетические параметры даже в тех случаях, когда математическая модель реакции не имеет аналитического решения относительно текущих концентраций участников реакции. Предложен универсальный подход к решению обратных задач химической кинетики, базирующийся на применении исключительно численных методов расчета. На первом этапе вычислений проводится обработка кинетических данных средствами интерполяции с формированием функции пользователя, значения которой передаются в программный блок GIVEN/MINERR, минимизирующий сумму квадратов отклонений экспериментальных значений концентраций от их расчетных величин. При таком подходе конечный результат расчета констант практически не зависит от задаваемых начальных приближений. В наиболее сложных случаях, когда гиперповерхность, характеризующая сумму квадратов отклонений, имеет множество локальных минимумов, предлагается использовать генетический алгоритм оптимизации.

Впервые приведена компьютерная реализация решения основных задач кинетики электрохимических реакций, включающих замедленные стадии разряда-ионизации и диффузии. Проанализирован случай последовательного переноса заряда при реакциях с участием многозарядных ионов.

Рассмотрены вопросы расширенного использования интерфейса Mathcad, призванные повысить эффективность работы пользователя в применении к проведению кинетических расчетов. Приведены задачи для самостоятельного решения, многие из которых носят выраженный исследовательский характер.

Авторы выражают признательность профессорам В.П.Дьяконову (Смоленск), В.И.Ткачу (Днепропетровск) и А.С.Шмелеву (Северодонецк) за ценные замечания и предложения по улучшению материала книги, высказанные ими в процессе рецензирования.