

## **1 КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА № 1**

### **ТЕМА: ИЗУЧЕНИЕ ТИПОВЫХ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ**

Модель гидродинамики потоков как основа математической модели химико-технологических процессов. Типовые модели гидродинамики и типовые возмущения. Исследование типовых моделей и анализ влияния параметров моделей на их характеристики. Исследования проводятся в среде MathCad.

#### **1.1 Задание к контрольной работе № 1**

##### **Задание №1 – Аналитическая часть**

Напишите ответ на поставленный вопрос. Ответ на вопросы желательно давать в развернутом виде. При ответе на вопрос Вы должны продемонстрировать глубину ваших знаний. Эти знания помогут также выполнить остальные части контрольной работы.

##### **Задание №2 – Практическое задание**

Исследование одной из типовых моделей гидродинамики в соответствии с заданным вариантом задания. Приведите уравнения материального баланса и уравнения реакции объекта на типовые возмущения. Проведите вычислительный эксперимент. Получить таблицы и графики характеристик. Для заданной производительности определить рабочий объем аппарата.

На основании полученных результатов сделайте вывод о влиянии варьируемых параметров на выходные характеристики.

## Вариант 1

### Задание 1 – Аналитическая часть

Назовите этапы построения математического описания химико-технологического процесса.

### Задание 2 – Практическое задание

Тип модели: модель идеального смешения с проскоком.

Время исследования: 100 мин.

Начальная концентрация индикатора: 20 моль/л.

Время пребывания: 40 мин.

Варьируемый параметр: изменяется доля проскока в диапазоне от 0 до 0,3 с шагом 0,1.

Производительность аппарата: 200 л/мин.

Получить: кривые разгона и импульсные характеристики.

Определить рабочий объем аппарата

## Вариант 2

### Задание 1 – Аналитическая часть

Дать характеристику основным элементарным процессам, которые входят в состав ММ ХТП.

### Задание 2 – Практическое задание

Тип модели: модель идеального смешения с застойной зоной.

Время исследования: 80 мин.

Начальная концентрация индикатора: 30 моль/л.

Время пребывания: 20 мин.

Варьируемый параметр: изменяется доля застойной зоны в диапазоне от 0 до 0,3 с шагом 0,1.

Производительность аппарата: 150 л/мин.

Получить: кривые разгона и импульсные характеристики.

Определить рабочий объем аппарата.

## Вариант 3

### Задание 1 – Аналитическая часть

Приведите уравнения материального баланса типовых гидродинамических моделей.

### Задание 2 – Практическое задание

Тип модели: ячеечная модель.

Время исследования: 80 мин.

Начальная концентрация индикатора: 20 моль/л.

Время пребывания: 30 мин.

Варьируемый параметр: изменяется количество ячеек в диапазоне от 2 до 11 с шагом 3.

Производительность аппарата: 200 л/мин.

Получить: импульсные характеристики.

Определить рабочий объем аппарата.

#### **Вариант 4**

##### **Задание 1 – Аналитическая часть**

Основные требования, предъявляемые к ММ (точность, адекватность, универсальность, экономичность).

##### **Задание 2 – Практическое задание**

Тип модели: модель идеального смешения с проскоком и застойной зоной.

Время исследования: 100 мин.

Начальная концентрация индикатора: 20 моль/л.

Время пребывания: 40 мин.

Варьируемые параметры: изменяется доля проскока в диапазоне от 0 до 0,3 с шагом 0,1 и доля застойной зоны в диапазоне от 0 до 0,3 с шагом 0,1.

Производительность аппарата: 200 л/мин.

Получить: кривые разгона и импульсные характеристики.

Определить рабочий объем аппарата.

#### **Вариант 5**

##### **Задание 1 – Аналитическая часть**

Какие элементарные процессы входят в состав балансовых уравнений ММ ХТП, и как влияет тип модели гидродинамики (ИС, ИВ, ОДМ) на вид балансового уравнения?

##### **Задание 2 – Практическое задание**

Тип модели: однопараметрическая диффузионная модель.

Время исследования: 80 мин.

Начальная концентрация индикатора: 20 моль/л.

Время пребывания: 30 мин.

Варьируемый параметр: изменяется значение критерия Пекле в диапазоне от 100 до 500 с шагом 100.

Получить: импульсные характеристики.

## Вариант 6

### Задание 1 – Аналитическая часть

Какие параметры характеризуют ММ идеального смешения, идеального вытеснения, ячеечную модель, однопараметрическую диффузионную модель?

### Задание 2 – Практическое задание

Тип модели: модель идеального смешения с проскоком.

Время исследования: 80 мин.

Начальная концентрация индикатора: 30 моль/л.

Время пребывания: 20 мин.

Варьируемый параметр: изменяется доля проскока в диапазоне от 0 до 0,2 с шагом 0,05.

Производительность аппарата: 100 л/мин.

Получить: кривые разгона и импульсные характеристики.

Определить рабочий объем аппарата для каждого из вариантов.

## Вариант 7

### Задание 1 – Аналитическая часть

Какими типовыми динамическими звеньями могут быть описаны ММ идеального смешения, идеального вытеснения, ячеечная модель?

### Задание 2 – Практическое задание

Тип модели: модель идеального смешения с застойной зоной.

Время исследования: 100 мин.

Начальная концентрация индикатора: 20 моль/л.

Время пребывания: 40 мин.

Варьируемый параметр: изменяется доля застойной зоны в диапазоне от 0,1 до 0,36 с шагом 0,06.

Производительность аппарата: 150 л/мин.

Получить: кривые разгона и импульсные характеристики.

Определить рабочий объем аппарата.

## Вариант 8

### Задание 1 – Аналитическая часть

Какие параметры характеризуют ММ идеального смешения, вытеснения, ячеечную, диффузионную и комбинированные модели?

### Практическое задание

Задание 2 – Тип модели: ячеечная модель.

Время исследования: 80 мин.

Начальная концентрация индикатора: 50 моль/л.

Время пребывания: 30 мин.

Варьируемый параметр: изменяется количество ячеек в диапазоне от 3 до 19 с шагом 4.

Производительность аппарата: 300 л/мин.

Получить: импульсные характеристики.

## **Вариант 9**

### **Задание 1 – Аналитическая часть**

Как классифицируются математические модели по характеру отображаемых свойств? Приведите примеры.

### **Задание 2 – Практическое задание**

Тип модели: модель идеального смешения с проскоком и застойной зоной.

Время исследования: 100 мин.

Начальная концентрация индикатора: 30 моль/л.

Время пребывания: 40 мин.

Варьируемые параметры: изменяется доля проскока в диапазоне от 0 до 0,2 с шагом 0,05 и доля застойной зоны в диапазоне от 0 до 0,30 с шагом 0,1.

Производительность аппарата: 100 л/мин.

Получить: кривые разгона и импульсные характеристики.

## **Вариант 10**

### **Аналитическая часть**

**Задание 1** – Какие модели гидродинамики являются комбинированными и какими параметрами они характеризуются?

### **Задание 2 – Практическое задание**

Тип модели: однопараметрическая диффузионная модель.

Время исследования: 80 мин.

Начальная концентрация индикатора: 20 моль/л.

Время пребывания: 30 мин.

Варьируемый параметр: изменяется значение критерия Пекле в диапазоне от 100 до 300 с шагом 50.

Получить: импульсные характеристики.

В следующем параграфе приводится пример выполнения контрольной работы № 1, сопровождаемый описанием процесса решения задачи в среде MathCad. При ответе на теоретический вопрос рекомендуется использовать сведения, представленные в «Базовом курсе».

## 1.2 Пример выполнения контрольной работы № 1

Получить с помощью пакета символьной математики MathCad кривые разгона (F-кривые) модели идеального смешения с проскоком при времени пребывания 30 мин, изменяя величину доли проскока от 0 до 0,3 от величины расхода с шагом 0,1.

Для расчета характеристик задать следующие входные данные: начальная концентрация индикатора равна 20 моль/л, время исследования 80 мин.

Получить таблицы и графики характеристик. Для заданной производительности 200 л/мин определить рабочий объем аппарата.

Ниже показано решение этой задачи с помощью MathCad (рисунки 1.1 и 1.2). Исходными данными являются: время пребывания ( $\tau = 30$  мин), доля проскока (значения заданы в соответствии с условием задачи:  $m_1 = 0$ ;  $m_2 = 0,1$ ;  $m_3 = 0,2$ ;  $m_4 = 0,3$ ), доля застойной зоны ( $z = 0$ ), начальная концентрация индикатора ( $c_0 = 20$  моль/л), время исследования меняется от 0 до 80 мин с шагом 1 мин (при необходимости величину шага можно изменить).

Схема аппарата может быть представлена в следующем виде (рисунок 1.1):

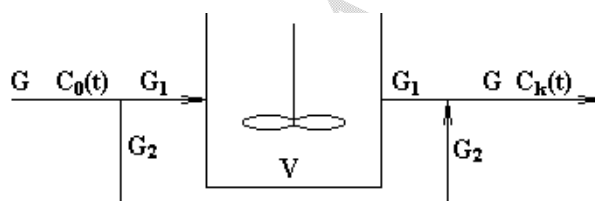


Рисунок 1.1 – Схема аппарата идеального смешения с проскоком

На рисунке 1.1 приняты следующие обозначения:  $G, G_1, G_2$  – полный объемный расход, объемный расход через аппарат, «проскакиваемый» расход на выход из реактора соответственно,  $\text{м}^3/\text{ч}$ ;

$m$  – доля проскока,  $m = G_2 / G$ ;

$G = G_1 + G_2$ ;

время пребывания  $\tau_{\text{усн}} = V / G_1$ .

1. Уравнения материального баланса модели ИСП:

$$V \cdot \frac{dC_k(t)}{dt} = G_1 \cdot C_0(t) - G_1 \cdot C_k(t);$$

$$\frac{dC_k(t)}{dt} = \frac{1}{\tau_{\text{усн}}} \cdot (C_0(t) - C_k(t)), \quad \text{где } \tau_{\text{усн}} = V / G_1$$

Начальные условия:

$$t = 0; C(t) = \frac{G_2}{G} \cdot C_0(t).$$

2. Кривая разгона модели ИСП:

$$F(t) = C_k(t) = C_0(t) \cdot \left[ 1 - (1 - m) \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau} \cdot (1 - m)\right) \right];$$

3. Импульсная характеристика модели ИСП:

$$C(t) = C_k(t) = C_0(t) \cdot (1 - m)^2 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau} \cdot (1 - m)\right);$$

4. Передаточная функция:

$$W_{исп}(P) = \frac{1}{\tau_{исп} P + 1}.$$

Далее записываются расчетные уравнения (рисунок 1.2), при решении которых выдаются результаты в виде таблиц и графиков. Для наглядности все F-кривые для каждого из возможных значений доли проскока построены на одной координатной плоскости (рисунок 1.3).

Исходя из приведенных выше формул, рабочий объем аппарата определяется по формуле  $V = \tau \cdot G \cdot (1 - m)$ , где  $\tau$  – время пребывания, мин;  $G$  – производительность аппарата, л/мин;  $m$  – доля проскока. Чем больше величина проскока, тем меньшего значения достигает выходная концентрация трассёра, но начальное значение (при  $t = 0$ ) тем больше, чем больше величина проскока.

$$\tau := 30 \quad m1 := 0 \quad m2 := 0.1 \quad m3 := 0.2 \quad m4 := 0.3 \quad z := 0 \quad c0 := 20$$

$$t := 0, 1.. 80$$

$$a1(t) := \frac{t}{\tau} \cdot \frac{1 - m1}{1 - z} \quad a2(t) := \frac{t}{\tau} \cdot \frac{1 - m2}{1 - z} \quad a3(t) := \frac{t}{\tau} \cdot \frac{1 - m3}{1 - z} \quad a4(t) := \frac{t}{\tau} \cdot \frac{1 - m4}{1 - z}$$

$$F1(t) := c0 \cdot [1 - (1 - m1) \cdot e^{-a1(t)}] \quad F2(t) := c0 \cdot [1 - (1 - m2) \cdot e^{-a2(t)}]$$

$$F3(t) := c0 \cdot [1 - (1 - m3) \cdot e^{-a3(t)}] \quad F4(t) := c0 \cdot [1 - (1 - m4) \cdot e^{-a4(t)}]$$

Рисунок 1.2 – Решение задачи к контрольной работе № 1

| t = | F1(t) = | F2(t) = | F3(t) = | F4(t) = |
|-----|---------|---------|---------|---------|
| 0   | 0       | 2       | 4       | 6       |
| 1   | 0.656   | 2.532   | 4.421   | 6.323   |
| 2   | 1.29    | 3.048   | 4.831   | 6.638   |
| 3   | 1.903   | 3.549   | 5.23    | 6.946   |
| 4   | 2.497   | 4.035   | 5.619   | 7.248   |
| 5   | 3.07    | 4.507   | 5.997   | 7.542   |
| 6   | 3.625   | 4.965   | 6.366   | 7.829   |
| 7   | 4.162   | 5.409   | 6.724   | 8.11    |
| 8   | 4.681   | 5.841   | 7.074   | 8.384   |
| 9   | 5.184   | 6.259   | 7.414   | 8.652   |
| 10  | 5.669   | 6.665   | 7.745   | 8.914   |
| 11  | 6.139   | 7.059   | 8.068   | 9.169   |
| 12  | 6.594   | 7.442   | 8.382   | 9.419   |
| 13  | 7.033   | 7.813   | 8.687   | 9.663   |
| 14  | 7.458   | 8.173   | 8.985   | 9.901   |
| ... | ...     | ...     | ...     | ...     |

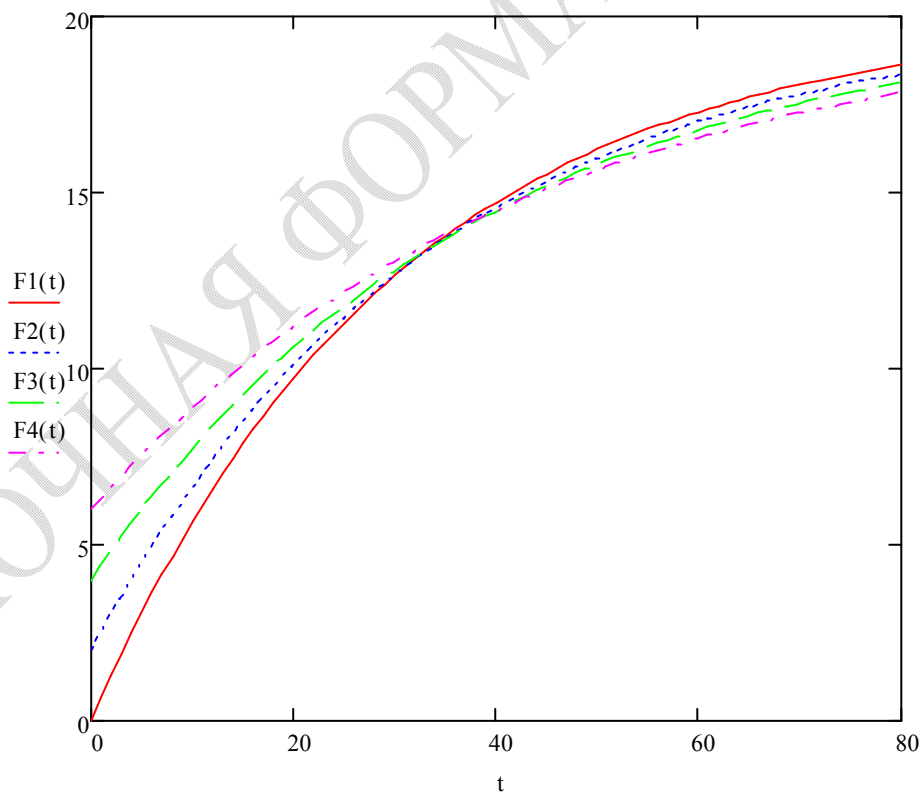


Рисунок 1.3 – F-кривые модели ИСП



## 2 КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА № 2

### ТЕМА: МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Описание химических реакций – один из основных модулей при моделировании ХТП, который включает в себя:

- описание стехиометрии;
- описание кинетики, то есть скорости образования и расходования компонентов реакционной системы в различных условиях проведения процесса;
- описание порядка и молекулярности реакций.

В работе осуществляется синтез модели по заданному механизму реакций и решение прямой кинетической задачи для динамического и статического режимов. На базе модели проводится исследование влияния различных параметров на выход целевых и побочных продуктов.

#### 2.1 Задание к контрольной работе № 2

##### Задание 1 – Аналитическая часть

Напишите ответ на поставленный вопрос. Ответ на вопросы желательно давать в развернутом виде. При ответе на вопрос Вы должны продемонстрировать глубину ваших знаний. Эти знания помогут также выполнить остальные части контрольной работы.

##### Задание 2 – Практическое задание

Построение динамической ММ на основании заданного механизма и кинетических констант в среде MathCad и исследование в соответствии с заданным вариантом задания. Необходимо привести матрицы стехиометрических коэффициентов, матрицы частных порядков реакций по компонентам, уравнения скоростей реакций, систему дифференциальных уравнений. Проведите вычислительный эксперимент. Получите таблицы и графики изменения концентраций компонентов. На основании полученных результатов сделайте вывод о влиянии варьируемых параметров на выходные характеристики.

##### Задание 3 – Практическое задание

Построение статической ММ на основании заданного механизма и кинетических констант в среде MathCad, решение её методом Ньютона-Рафсона и исследование в соответствии с заданным вариантом задания. Параметры метода решения для всех вариантов: предельно допустимая погрешность расчета концентраций,  $\varepsilon_{\max} = 5\%$ ; максимально допустимое число итераций  $I_{\max} = 50$ .

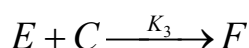
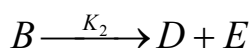
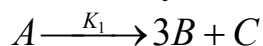
## Вариант 1

### Задание 1 - Аналитическая часть

Как определяется скорость химической реакции? Какие факторы оказывают влияние на скорость реакции?

### Задание 2 – Практическое задание

В реакторе периодического действия протекает процесс получения продукта «В», для которого предложен следующий механизм реакций:



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- интервал времени  $\tau = 50$  мин; шаг по времени  $\Delta t = 1$  мин;
- начальные концентрации  $C_{OA} = 0,600$  моль/л;
- предэкспоненциальные множители:  
 $k_{0i} = \{0,2 \cdot 10^{16} \text{ 1/мин}; 9 \cdot 10^{15} \text{ 1/мин}; 0,5 \cdot 10^{14} \text{ л/(моль} \cdot \text{мин)}\}$ ;
- энергия активации  $E_1 =$  не является постоянной величиной и зависит от активности катализатора,  $E_2 = 92$  кДж/моль,  $E_3 = 85$  кДж/моль;
- температура  $T = 5^\circ\text{C}$ .

Оценить влияние на выход целевого компонента:

а) Начальных концентраций компонентов:

$C_{OA} = 0,900$  моль/л;

б) Температуры реакции:  $T = -3^\circ\text{C}$ ;  $T = 0^\circ\text{C}$ ;

в) Активности катализатора: АК = 80 %.

Определить время пребывания  $\tau_{\text{опт}}$ , обеспечивающее максимально возможный выход целевого продукта для всех вариантов исследования процесса при условии, что на выходные параметры установлено следующее ограничение: степень превращения исходного компонента  $A$  должна быть более 80% от начальной.

Рассчитать рабочие объемы реактора (для каждого  $V$  для производительности аппарата  $G = 200$  л/мин:  $V = \tau_{\text{опт}} \cdot G$ ). Выбрать оптимальное значение рабочего объема  $V$ .

### Задание 3 – Практическое задание

Осуществить расчет статической модели кинетики (пример программы приведен на рисунке 2.4) при следующих исходных данных: объем реактора  $V = 200$  л, расход потока  $Q = 10$  л/мин, концентрации веществ во входном потоке: вещество  $A - 0,7$  моль/л, вещество  $B - 1,1$  моль/л, вещество  $C - 0$  моль/л; температура в реакторе  $T = 70^\circ\text{C}$ , предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса  $k_0 = 0,2 \cdot 10^{14}$  л/(мин·моль), энергия активации химической реакции  $E = 74$  кДж/моль, стехиометрический коэффициент  $d = 1$ . Оценить влияние изменения температуры в реакторе на результаты расчета, произведя вычисления в диапазоне температуры от 65 до 75 °С.

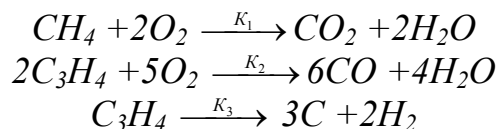
## Вариант 2

### Задание 1 – Аналитическая часть

Как формулируется прямая задача кинетики?

### Задание 2 – Практическое задание

В сажевом реакторе непрерывного действия идеального смешения протекает процесс, механизм которого представлен в следующем виде:



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- интервал времени  $\tau = 100$  мин; шаг по времени  $\Delta t = 2$  мин;
- начальные концентрации исходных реагентов:  $C_{\text{CH}_4} = 5$  Кмоль/м<sup>3</sup>;

$C_{\text{O}_2} = 6$  Кмоль/м<sup>3</sup>;  $C_{\text{C}_3\text{H}_4} = 10$  Кмоль/м<sup>3</sup>;

Константы скорости реакций:  $K_1 = 1$  м<sup>3</sup>/(Кмоль·мин);  $K_2 = 7$  м<sup>3</sup>/(Кмоль·мин);  $K_3 = 0,1$  1/мин.

Частные порядки по компонентам во всех реакциях равны единице.

Объем реактора  $V = 5$  м<sup>3</sup>. Расход реакционной массы  $G = 0,18$  м<sup>3</sup>/мин.

Определить режим, обеспечивающий максимальный выход сажи ( $C_c$ ), изменяя расход реакционной массы в диапазоне от 0.15 до 0.25 м<sup>3</sup>/мин. и концентрацию кислорода от 5 до 8 Кмоль/м<sup>3</sup>.

### Задание 3 – Практическое задание

Осуществить расчет статической модели кинетики (пример программы приведен на рисунке 2.4) при следующих исходных данных: объем реактора  $V = 100$  л, расход потока  $Q = 8$  л/мин, концентрации веществ во входном потоке: вещество  $A - 0,7$  моль/л, вещество  $B - 1,1$  моль/л, вещество  $C - 0$  моль/л; температура в реакторе  $T = 70$  °С, предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса  $k_0 = 0,2 \cdot 10^{14}$  л/(мин·моль), энергия активации химической реакции  $E = 74$  кДж/моль, стехиометрический коэффициент  $d = 2$ . Оценить влияние изменения температуры в реакторе на результаты расчета, производя вычисления в диапазоне температуры от 65 до 75 °С.

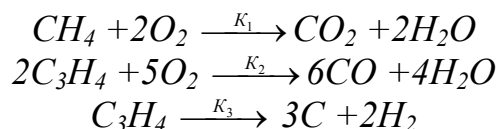
### Вариант 3

#### Задание 1 – Аналитическая часть

Как формируется матрица стехиометрических коэффициентов и что она характеризует?

#### Задание 2 – Практическое задание

В сажевом реакторе периодического действия идеального смешения протекает процесс, механизм которого представлен в следующем виде:



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- интервал времени  $\tau = 100$  мин; шаг по времени  $\Delta t = 2$  мин;
- начальные концентрации исходных реагентов:  $C_{CH_4} = 5$  Кмоль/м<sup>3</sup>;  
 $C_{O_2} = 6$  Кмоль/м<sup>3</sup>;  $C_{C_3H_4} = 10$  Кмоль/м<sup>3</sup>;
- Константы скорости реакций:  $K_1 = 1$  м<sup>3</sup>/(Кмоль·мин);  $K_2 = 7$  м<sup>3</sup>/(Кмоль·мин);  
 $K_3 = 0,1$  1/мин.

Частные порядки по компонентам во всех реакциях равны единице.

Определить время пребывания  $\tau_{\text{опт}}$ , обеспечивающее максимально возможный выход сажи ( $C_c$ ) при условии, что концентрация кислорода изменяется от 5 до 8 Кмоль/м<sup>3</sup>.

Рассчитать рабочий объем реактора  $V$  для производительности аппарата  $G = 0,2$  м<sup>3</sup>/мин.

$$V = \tau_{\text{опт}} \cdot G$$

#### Задание 3 – Практическое задание

Осуществить расчет статической модели кинетики (пример программы приведен на рисунке 2.4) при следующих исходных данных: объем реактора  $V = 100$  л, расход потока  $Q = 8$  л/мин, концентрации веществ во входном потоке: вещество  $A - 0,6$  моль/л, вещество  $B - 1,3$  моль/л, вещество  $C - 0$  моль/л; температура в реакторе  $T = 68$  °С, предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса  $k_0 = 0,25 \cdot 10^{14}$  л/(мин·моль), энергия активации химической реакции  $E = 74$  кДж/моль, стехиометрический коэффициент  $d = 2$ . Оценить влияние изменения температуры в реакторе на результаты расчета, произведя вычисления в диапазоне температуры от 65 до 75 °С.

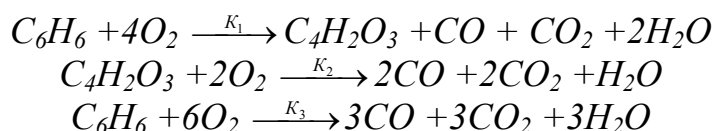
## Вариант 4

### Задание 1 – Аналитическая часть

Представить блок-схему решения дифференциального уравнения методом Эйлера.

### Задание 2 – Практическое задание

В периодическом реакторе идеального смешения происходит окисление бензола  $C_6H_6$  до малеинового ангидрида  $C_4H_2O_3$  по следующему механизму:



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- интервал времени  $\tau = 100$  мин; шаг по времени  $\Delta t = 1$  мин;
- начальные концентрации  $C_{C_6H_6} = 0,9$  моль/л;  $C_{O_2} = 1,2$  моль/л;
- предэкспоненциальные множители:

$$K_{0i} = \{920; 160; 58\} \text{ л}/(\text{моль} \cdot \text{мин});$$

- энергия активации  $E_1=15000$  Дж/моль,  $E_2=13000$  Дж/моль,  $E_3=9900$  Дж/моль;

- температура  $T = 100^\circ\text{C}$ .

Частные порядки по компонентам во всех реакциях равны единице.

Оценить влияние на выход целевого компонента:

а) Начальных концентраций компонентов

$$C_{O_2} = 1,5 \text{ моль/л};$$

б) Температуры реакции  $T = 120^\circ\text{C}$ ;  $T = 140^\circ\text{C}$ .

Определить время пребывания  $\tau_{\text{опт}}$ , обеспечивающее максимально возможный выход целевого продукта для всех вариантов исследования процесса.

Рассчитать рабочий объем реактора  $V$  для производительности аппарата  $G = 200$  л/мин.

$$V = \tau_{\text{опт}} \cdot G$$

### Задание 3 – Практическое задание

Осуществить расчет статической модели кинетики (пример программы приведен на рисунке 2.4) при следующих исходных данных: объем реактора  $V = 100$  л, расход потока  $Q = 8$  л/мин, концентрации веществ во входном потоке: вещество  $A - 0,8$  моль/л, вещество  $B - 1,3$  моль/л, вещество  $C - 0$  моль/л; температура в реакторе  $T = 68^\circ\text{C}$ , предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса  $k_0 = 0,25 \cdot 10^{14}$  л/(мин·моль), энергия активации химической реакции  $E = 74$  кДж/моль, стехиометрический коэффициент  $d = 3$ . Оценить влияние изменения температуры в реакторе на результаты расчета, произведя вычисления в диапазоне температуры от  $65$  до  $75^\circ\text{C}$ .

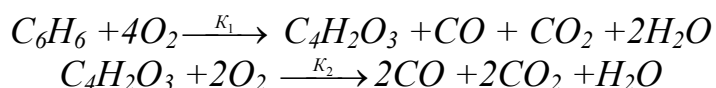
## Вариант 5

### Задание 1 – Аналитическая часть

Представить блок-схему решения дифференциального уравнения методом Рунге-Кутты.

### Задание 2 – Практическое задание

В периодическом реакторе идеального смешения происходит окисление бензола  $C_6H_6$  до малеинового ангидрида  $C_4H_2O_3$  по следующему механизму:



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- интервал времени  $\tau = 100$  мин; шаг по времени  $\Delta t = 1$  мин;
- начальные концентрации  $C_{C_6H_6} = 0.9$  моль/л;  $C_{O_2} = 1.2$  моль/л;
- предэкспоненциальные множители:

$K_{0i} = \{920; 160; 58\}$  л/(моль·мин);

- энергия активации  $E_1 = 15000$  Дж/моль,  $E_2 = 13000$  Дж/моль,  $E_3 = 9900$  Дж/моль;

- температура  $T = 100^\circ C$ .

Частные порядки по компонентам во всех реакциях равны единице.

Оценить влияние на выход целевого компонента:

а) Начальных концентраций компонентов:

$C_{O_2} = 1,0$  моль/л;

б) Температуры реакции:  $T = 120^\circ C$ ;  $T = 140^\circ C$ .

Определить время пребывания  $\tau_{\text{опт}}$ , обеспечивающее максимально возможный выход целевого продукта для всех вариантов исследования процесса.

Рассчитать рабочий объем реактора  $V$  для производительности аппарата  $G = 200$  л/мин.

$$V = \tau_{\text{опт}} \cdot G$$

### Задание 3 – Практическое задание

Осуществить расчет статической модели кинетики (пример программы приведен на рисунке 2.4) при следующих исходных данных: объем реактора  $V = 150$  л, расход потока  $Q = 5$  л/мин, концентрации веществ во входном потоке: вещество  $A - 0,8$  моль/л, вещество  $B - 1,3$  моль/л, вещество  $C - 0$  моль/л; температура в реакторе  $T = 68^\circ C$ , предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса  $k_0 = 0,2 \cdot 10^{14}$  л/(мин·моль), энергия активации химической реакции  $E = 74$  кДж/моль, стехиометрический коэффициент  $d = 1$ . Оценить влияние изменения температуры в реакторе на результаты расчета, производя вычисления в диапазоне температуры от  $65$  до  $75^\circ C$ .

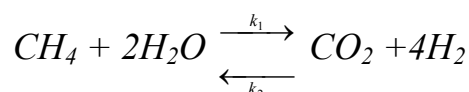
## Вариант 6

### Задание 1 – Аналитическая часть

Какие законы физики и химии используются при разработке ММ кинетики химических реакций?

### Задание 2 – Практическое задание

В периодическом реакторе идеального смешения происходит получение водорода из исходных реагентов метан/водяной пар по следующему механизму:



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- интервал времени  $\tau = 100$  мин; шаг по времени  $\Delta t = 1$  мин;
- начальные концентрации  $C_{\text{CH}_4} = 1,0$  моль/л;  $C_{\text{H}_2\text{O}} = 1,0$  моль/л;
- предэкспоненциальные множители:  $K_{01} = 2 \cdot 10^5$ ;  $K_{02} = 3 \cdot 10^6$ ;
- энергия активации  $E_1 = 124100$  Дж/моль,  $E_2 = 180000$  Дж/моль;
- температура  $T = 1100$  К.

Частные порядки по компонентам во всех реакциях равны единице.

Оценить влияние на выход целевого компонента:

- изменения концентрации метана от 1 до 5 моль/л;
- изменения температуры реакции от  $T = 900$  К до  $T = 1400$  К.

Определить время пребывания  $\tau_{\text{опт}}$ , обеспечивающее максимально возможный выход целевого продукта для всех вариантов исследования процесса.

Рассчитать рабочий объем реактора  $V$  для производительности аппарата  $G = 200$  л/мин.

$$V = \tau_{\text{опт}} \cdot G$$

### Задание 3 – Практическое задание

Осуществить расчет статической модели кинетики (пример программы приведен на рисунке 2.4) при следующих исходных данных: объем реактора  $V = 100$  л, расход потока  $Q = 6$  л/мин, концентрации веществ во входном потоке: вещество  $A - 0,8$  моль/л, вещество  $B - 1,3$  моль/л, вещество  $C - 0$  моль/л; температура в реакторе  $T = 68$  °С, предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса  $k_0 = 0,2 \cdot 10^{14}$  л/(мин·моль), энергия активации химической реакции  $E = 74$  кДж/моль, стехиометрический коэффициент  $d = 2$ . Оценить влияние изменения температуры в реакторе на результаты расчета, произведя вычисления в диапазоне температуры от 65 до 75 °С.

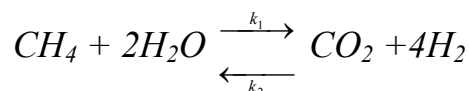
## Вариант 7

### Задание 1 – Аналитическая часть

Что такое скорость химической реакции? От чего зависит размерность константы скорости?

### Задание 2 – Практическое задание

В непрерывном реакторе идеального смешения происходит получение водорода из исходных реагентов метан/водяной пар по следующему механизму:



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- интервал времени  $\tau = 100$  мин; шаг по времени  $\Delta t = 1$  мин;
- начальные концентрации  $C_{\text{CH}_4} = 1,0$  моль/л;  $C_{\text{H}_2\text{O}} = 1,0$  моль/л;
- предэкспоненциальные множители:  $K_{01} = 2 \cdot 10^5$ ;  $K_{02} = 3 \cdot 10^6$ ;
- энергия активации  $E_1 = 124100$  Дж/моль,  $E_2 = 180000$  Дж/моль;
- температура  $T = 1100$  К.

Время пребывания реагентов в реакторе составляет 20 минут.

Частные порядки по компонентам во всех реакциях равны единице.

Оценить влияние на выход целевого компонента:

- изменения концентрации метана от 1 до 5 моль/л
- изменения температуры реакции от  $T = 900$  К до  $T = 1400$  К.

### Задание 3 – Практическое задание

Осуществить расчет статической модели кинетики (пример программы приведен на рисунке 2.4) при следующих исходных данных: объем реактора  $V = 100$  л, расход потока  $Q = 4$  л/мин, концентрации веществ во входном потоке: вещество  $A - 0,8$  моль/л, вещество  $B - 1,3$  моль/л, вещество  $C - 1$  моль/л; температура в реакторе  $T = 68$  °С, предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса  $k_0 = 0,2 \cdot 10^{14}$  л/(мин·моль), энергия активации химической реакции  $E = 74$  кДж/моль, стехиометрический коэффициент  $d = 2$ . Оценить влияние изменения температуры в реакторе на результаты расчета, производя вычисления в диапазоне температуры от 65 до 75 °С.



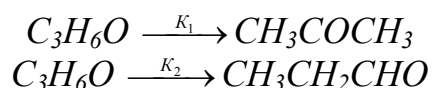
## Вариант 8

### Задание 1 – Аналитическая часть

Какие факторы оказывают влияние на скорость реакции? Что такое молекулярность реакции и порядок реакции?

### Задание 2 – Практическое задание

В газофазном реакторе непрерывного действия происходит процесс получения ацетона ( $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ ) из окиси пропилена ( $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ ) по следующему механизму:



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- объем аппарата составляет  $1\text{ м}^3$ ; расход реагентов –  $0,05\text{ м}^3/\text{мин}$ ;
- интервал времени  $\tau = 100\text{ мин}$ ; шаг по времени  $\Delta t = 1\text{ мин}$ ;
- начальная концентрация  $C_{\text{C}_3\text{H}_6\text{O}} = 1,0\text{ Кмоль}/\text{м}^3$ ;
- предэкспоненциальные множители:  $K_{01} = 2$ ;  $K_{02} = 2$ ;
- энергия активации  $E_1 = 20000\text{ Дж}/\text{моль}$ ,  $E_2 = 24000\text{ Дж}/\text{моль}$ ;
- температура  $T = 700\text{ К}$ .

Частные порядки по компонентам в реакциях равны единице.

Оценить влияние на выход целевого компонента:

- изменения температуры в реакторе от  $700\text{ К}$  до  $1000\text{ К}$  с шагом  $100\text{ К}$ ;
- изменения объема реактора от  $1$  до  $3\text{ м}^3$ .

Выбрать наилучший вариант проведения процесса с точки зрения получения максимального выхода целевого продукта.

### Задание 3 – Практическое задание

Осуществить расчет статической модели кинетики (пример программы приведен на рисунке 2.4) при следующих исходных данных: объем реактора  $V = 100\text{ л}$ , расход потока  $Q = 4\text{ л}/\text{мин}$ , концентрации веществ во входном потоке: вещество  $A - 0,8\text{ моль}/\text{л}$ , вещество  $B - 1,3\text{ моль}/\text{л}$ , вещество  $C - 1\text{ моль}/\text{л}$ ; температура в реакторе  $T = 68\text{ }^\circ\text{C}$ , предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса  $k_0 = 0,2 \cdot 10^{14}\text{ л}/(\text{мин} \cdot \text{моль})$ , энергия активации химической реакции  $E = 74\text{ кДж}/\text{моль}$ , стехиометрический коэффициент  $d = 2$ . Оценить влияние изменения температуры в реакторе на результаты расчета, производя вычисления в диапазоне температуры от  $65$  до  $75\text{ }^\circ\text{C}$ .

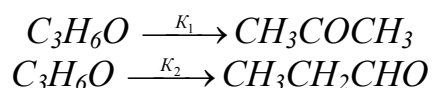
## Вариант 9

### Задание 1 – Аналитическая часть

Как формируется математическое описание кинетики каталитических реакций?

### Задание 2 – Практическое задание

В периодическом реакторе идеального смешения происходит процесс получения ацетона ( $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ ) из окиси пропилена ( $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ ) по следующему механизму:



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- интервал времени  $\tau = 100$  мин; шаг по времени  $\Delta t = 1$  мин;
- начальная концентрация  $C_{\text{C}_3\text{H}_6\text{O}} = 1,0$  Кмоль/м<sup>3</sup>;
- предэкспоненциальные множители:  $K_{01} = 2$ ;  $K_{02} = 2$ ;
- энергия активации  $E_1 = 20000$  Дж/моль,  $E_2 = 24000$  Дж/моль;
- температура  $T = 700$  К.

Частные порядки по компонентам в реакциях равны единице.

Оценить влияние на выход целевого компонента:

- изменения концентрации окиси пропилена от 1 до 5 моль/м<sup>3</sup>;
- изменения температуры реакции от  $T = 500$  К до  $T = 900$  К.

Определить время пребывания  $\tau_{\text{опт}}$ , обеспечивающее максимально возможный выход целевого продукта (ацетона) для всех вариантов исследования процесса.

Рассчитать рабочий объем реактора  $V$  для производительности аппарата  $G = 0,2$  м<sup>3</sup>/мин.

$$V = \tau_{\text{опт}} \cdot G$$

### Задание 3 – Практическое задание

Осуществить расчет статической модели кинетики (пример программы приведен на рисунке 2.4) при следующих исходных данных: объем реактора  $V = 100$  л, расход потока  $Q = 4$  л/мин, концентрации веществ во входном потоке: вещество  $A - 0,8$  моль/л, вещество  $B - 1,3$  моль/л, вещество  $C - 1$  моль/л; температура в реакторе  $T = 68$  °С, предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса  $k_0 = 0,2 \cdot 10^{14}$  л/(мин·моль), энергия активации химической реакции  $E = 74$  кДж/моль, стехиометрический коэффициент  $d = 2$ . Оценить влияние изменения температуры в реакторе на результаты расчета, произведя вычисления в диапазоне температуры от 65 до 75 °С.

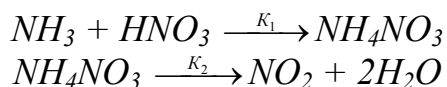
## Вариант 10

### Задание 1 – Аналитическая часть

Как формируются уравнения для скоростей изменения концентраций компонентов в случае открытого и закрытого реактора?

### Задание 2 – Практическое задание

В периодическом реакторе идеального смешения происходит процесс получения аммиачной селитры ( $\text{NH}_4\text{NO}_3$ ) по следующему механизму:



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- интервал времени  $\tau = 300$  мин; шаг по времени  $\Delta t = 1$  мин;
- начальные концентрации  $C_{\text{NH}_3} = 1,0$  моль/л;  $C_{\text{HNO}_3} = 1,0$  моль/л;
- предэкспоненциальные множители:  $K_{01} = 5530$ ;  $K_{02} = 2 \cdot 10^{13}$ ;
- энергия активации  $E_1 = 48650$  Дж/моль,  $E_2 = 137000$  Дж/моль;
- температура  $T = 200$  °C.

Частные порядки по компонентам во всех реакциях равны единице.

Оценить влияние на выход целевого компонента:

- изменения концентрации аммиака от 1 до 5 моль/л;
- изменения температуры реакции от  $T = 170$  °C до  $T = 230$  °C.

Определить время пребывания  $\tau_{\text{опт}}$ , обеспечивающее максимально возможный выход целевого продукта для всех вариантов исследования процесса.

Рассчитать рабочий объем реактора  $V$  для производительности аппарата  $G = 200$  л/мин.

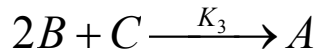
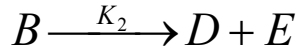
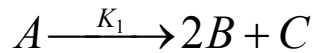
$$V = \tau_{\text{опт}} \cdot G$$

### Задание 3 – Практическое задание

Осуществить расчет статической модели кинетики (пример программы приведен на рисунке 2.4) при следующих исходных данных: объем реактора  $V = 100$  л, расход потока  $Q = 4$  л/мин, концентрации веществ во входном потоке: вещество  $A - 0,8$  моль/л, вещество  $B - 1,3$  моль/л, вещество  $C - 1$  моль/л; температура в реакторе  $T = 68$  °C, предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса  $k_0 = 0,2 \cdot 10^{14}$  л/(мин·моль), энергия активации химической реакции  $E = 74$  кДж/моль, стехиометрический коэффициент  $d = 2$ . Оценить влияние изменения температуры в реакторе на результаты расчета, произведя вычисления в диапазоне температуры от 65 до 75 °C.

## 2.2 Пример выполнения контрольной работы № 2

В реакторе периодического действия протекает процесс получения продукта «В», для которого предложен следующий механизм реакций:



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- интервал времени  $\tau = 50$  мин; шаг по времени  $\Delta t = 0,5$  мин;
- начальные концентрации  $C_{OA} = 0,800$  моль/л;
- предэкспоненциальные множители:  
 $k_{0i} = \{0,2 \cdot 10^{14} \text{ 1/мин}; 9 \cdot 10^{15} \text{ 1/мин}; 0,5 \cdot 10^{14} \text{ л}^2/(\text{моль}^2 \cdot \text{мин})\}$ ;
- энергия активации  $E_1 = 74$  кДж/моль,  $E_2 = 89$  кДж/моль,  $E_3 = 80$  кДж/моль;
- температура  $T = -3^\circ\text{C}$ .

Решение примера показано на рисунке 2.1.

Прежде чем записать решение данной задачи в MathCad, необходимо сформировать структуру математической модели кинетики. Для этого составляются матрицы стехиометрических коэффициентов и частных порядков, а также уравнения для скоростей реакций и уравнения для скоростей изменения концентраций компонентов (см. гл. 3 «Базового курса»).

Для рассматриваемого примера матрица стехиометрических коэффициентов будет иметь следующий вид:

$$S = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Матрица частных порядков примет следующую форму:

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

В соответствии с матрицами записываются уравнения для скоростей реакций:

$$\begin{aligned} w_1 &= k_1 \cdot C_A; \\ w_2 &= k_2 \cdot C_B; \\ w_3 &= k_3 \cdot C_B^2 \cdot C_C. \end{aligned}$$

Уравнения для скоростей изменения концентраций компонентов выглядят следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -w_1 + w_3 \\ \frac{dC_B}{dt} = -2w_1 - w_2 - 2w_3 \\ \frac{dC_C}{dt} = w_1 - w_3 \\ \frac{dC_A}{dt} = w_2 \\ \frac{dC_A}{dt} = w_2 \end{cases}$$

При записи уравнений в MathCad концентрация компонента А обозначается буквой  $c_0$ , компонента В –  $c_1$ , компонента С –  $c_2$ . Для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений используется встроенная функция Rkadapt (метод Рунге – Кутты с переменным шагом), аргументами которой являются вектор-столбец начальных концентраций  $c_0$ , начальное и конечное значение диапазона времени исследования (в данном случае от 0 до 50 минут), количество шагов по времени (в данном случае 100 шагов) и название решаемой системы (в данном случае она называется D).

$$\begin{aligned} & k01 := 0.2 \cdot 10^{14} \quad k02 := 9 \cdot 10^{15} \quad k03 := 0.5 \cdot 10^{14} \\ & E1 := 74000 \quad E2 := 89000 \quad E3 := 80000 \\ & R := 8.31 \quad T := -3 + 273.15 \quad n := 100 \\ & c0 := \begin{pmatrix} 0.8 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad k1 := k01 \cdot e^{\frac{-E1}{R \cdot T}} \quad k2 := k02 \cdot e^{\frac{-E2}{R \cdot T}} \quad k3 := k03 \cdot e^{\frac{-E3}{R \cdot T}} \\ & k1 = 0.097 \quad k2 = 0.055 \quad k3 = 0.017 \\ & u := \text{Rkadapt}(c0, 0, 50, n, D) \quad D(t, c) := \begin{bmatrix} -k1 \cdot c_0 + k3 \cdot (c_1)^2 \cdot c_2 \\ 2k1 \cdot c_0 - k2 \cdot c_1 + -2k3 \cdot (c_1)^2 \cdot c_2 \\ k1 \cdot c_0 + -k3 \cdot (c_1)^2 \cdot c_2 \\ k2 \cdot c_1 \\ k2 \cdot c_1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Рисунок 2.1 – Расчет примера для контрольной работы № 2

На рисунке 2.2 представлены результаты расчета рассмотренной задачи. В нулевом столбце таблицы находятся значения текущего времени (поэтому время на оси абсцисс графика концентраций обозначено как  $u^{(0)}$ ); в остальных столбцах выводятся расчетные концентрации компонентов реакционной системы. В соответствии с содержимым этих столбцов строятся графики, приведенные на рисунке 2.2.

|    | 0   | 1     | 2     | 3     | 4                     |
|----|-----|-------|-------|-------|-----------------------|
| 0  | 0   | 0.8   | 0     | 0     | 0                     |
| 1  | 0.5 | 0.762 | 0.074 | 0.038 | $1.029 \cdot 10^{-3}$ |
| 2  | 1   | 0.726 | 0.143 | 0.074 | $4.013 \cdot 10^{-3}$ |
| 3  | 1.5 | 0.692 | 0.207 | 0.108 | $8.806 \cdot 10^{-3}$ |
| 4  | 2   | 0.659 | 0.266 | 0.141 | 0.015                 |
| 5  | 2.5 | 0.628 | 0.32  | 0.172 | 0.023                 |
| 6  | 3   | 0.599 | 0.369 | 0.201 | 0.033                 |
| 7  | 3.5 | 0.571 | 0.415 | 0.229 | 0.043                 |
| 8  | 4   | 0.544 | 0.456 | 0.256 | 0.055                 |
| 9  | 4.5 | 0.519 | 0.493 | 0.281 | 0.068                 |
| 10 | 5   | 0.495 | 0.527 | 0.305 | 0.082                 |
| 11 | 5.5 | 0.473 | 0.558 | 0.327 | 0.097                 |
| 12 | 6   | 0.451 | 0.585 | 0.349 | 0.113                 |
| 13 | 6.5 | 0.431 | 0.609 | 0.369 | 0.129                 |
| 14 | 7   | 0.412 | 0.631 | 0.388 | 0.146                 |
| 15 | 7.5 | 0.394 | 0.649 | 0.406 | ...                   |

$u =$

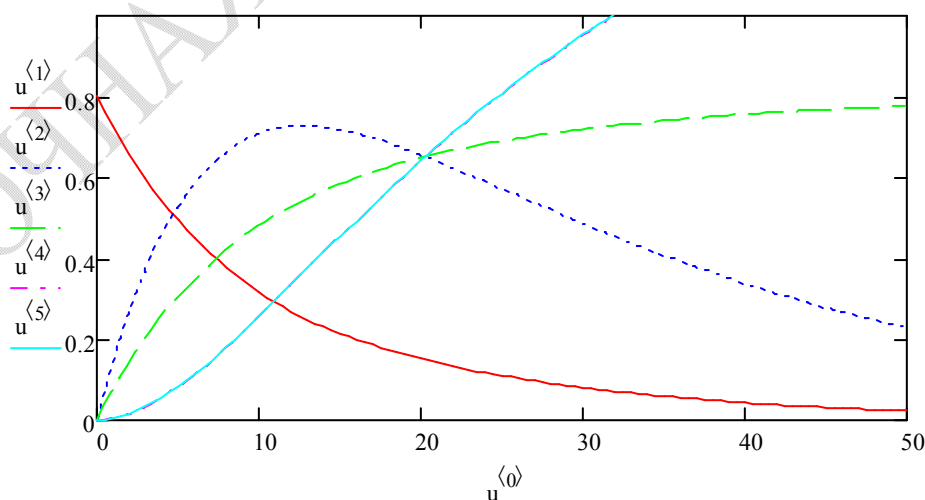
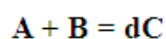


Рисунок 2.2 – Результаты расчета примера для контрольной работы № 2

- + Гомогенная химическая реакция, протекающая в аппарате с мешалкой в изотермических условиях



Исходные данные для расчета концентраций веществ в выходном потоке из реактора

*Стехиометрический коэффициент*

$$d := 1$$

*Геометрические параметры реактора*

Объем реактора, л  $V := 100$

*Режимные параметры процесса*

Расход потока, л/мин  $Q := 5$

Концентрации веществ во входном потоке, моль/л:

вещество А  $Ca0 := 0.8$

вещество В  $Cb0 := 1.2$

вещество С  $Cc0 := 0$

Температура в реакторе, С  $T := 60$

*Эмпирические коэффициенты модели*

Предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса, л/(мин\*моль)

$$k0 := 0.5 \cdot 10^{13}$$

Энергия активации химической реакции, кДж/моль

$$E := 80$$

---

*Параметры метода решения модели*

- + Предельно допустимая погрешность расчета концентраций, %

$$\epsilon_{\max} := 5$$

Максимально допустимое число итераций

$$I_{\max} := 50$$

Рисунок 2.3 – Исходные данные для программы в контрольной работе № 2 (задание 3)

```

NR :=  $\tau \leftarrow \frac{V}{Q}$ 
       $E \leftarrow 1000 \cdot E$ 
       $k \leftarrow k_0 \cdot e^{\frac{-E}{8.31 \cdot (T+273.15)}}$ 
       $i \leftarrow 0$ 
       $Ca_i \leftarrow Ca_0$ 
       $Cb_i \leftarrow Cb_0$ 
       $\varepsilon_0 \leftarrow 2 \cdot \varepsilon_{\max}$ 
      while  $\varepsilon_i > \varepsilon_{\max} \wedge i < I_{\max}$ 
      |  $i \leftarrow i + 1$ 
      |  $Fa \leftarrow \frac{1}{\tau} \cdot (Ca_0 - Ca_{i-1}) - k \cdot Ca_{i-1} \cdot Cb_{i-1}$ 
      |  $Fb \leftarrow \frac{1}{\tau} \cdot (Cb_0 - Cb_{i-1}) - k \cdot Ca_{i-1} \cdot Cb_{i-1}$ 
      |  $dFa\_dCa \leftarrow \frac{-1}{\tau} - k \cdot Cb_{i-1}$ 
      |  $dFa\_dCb \leftarrow -(k \cdot Ca_{i-1})$ 
      |  $dFb\_dCa \leftarrow -(k \cdot Cb_{i-1})$ 
      |  $dFb\_dCb \leftarrow \frac{-1}{\tau} - k \cdot Ca_{i-1}$ 
      |  $J \leftarrow dFa\_dCa \cdot dFb\_dCb - dFa\_dCb \cdot dFb\_dCa$ 
      |  $\Delta a \leftarrow -Fa \cdot dFb\_dCb + Fb \cdot dFa\_dCb$ 
      |  $\Delta b \leftarrow -dFa\_dCa \cdot Fb + Fa \cdot dFb\_dCa$ 
      |  $Ca_i \leftarrow Ca_{i-1} + \frac{\Delta a}{J}$ 
      |  $Cb_i \leftarrow Cb_{i-1} + \frac{\Delta b}{J}$ 
      |  $\varepsilon_a \leftarrow \frac{|Ca_i - Ca_{i-1}|}{|Ca_i|} \cdot 100$ 
      |  $\varepsilon_b \leftarrow \frac{|Cb_i - Cb_{i-1}|}{|Cb_i|} \cdot 100$ 
      |  $\varepsilon_i \leftarrow \max(\varepsilon_a, \varepsilon_b)$ 
       $Cc \leftarrow Cc_0 + \tau \cdot d \cdot k \cdot Ca_i \cdot Cb_i$ 
       $NR_0 \leftarrow Ca$ 
       $NR_1 \leftarrow Cb$ 
       $NR_3 \leftarrow \varepsilon$ 
       $NR_4 \leftarrow i$ 
       $NR_5 \leftarrow \tau$ 
       $NR_6 \leftarrow k$ 
       $NR_7 \leftarrow Cc$ 

```

Рисунок 2.4 – Программа для контрольной работы № 2 (задание 3)



|                   | Ca   | Cb                | c  |
|-------------------|--|-------------------|--|
| NR <sub>0</sub> = | $\begin{pmatrix} 0.8 \\ 0.328 \\ 0.125 \\ 0.064 \\ 0.058 \\ 0.058 \end{pmatrix}$ | NR <sub>1</sub> = | $\begin{pmatrix} 1.2 \\ 0.728 \\ 0.525 \\ 0.464 \\ 0.458 \\ 0.458 \end{pmatrix}$     |
|                   |  | NR <sub>3</sub> = | $\begin{pmatrix} 10 \\ 143.634 \\ 163.336 \\ 94.46 \\ 11.296 \\ 0.134 \end{pmatrix}$ |
|                   | Cc = 0.742   |                   |  |

Рисунок 2.5 – Результаты расчета программы  
в контрольной работе № 2 (задание 3)

На рисунках 2.3 – 2.5 приводятся данные, необходимые для решения статической кинетической задачи. Программа (рисунок 2.4) для определенных исходных данных (рисунок 2.3) позволяет рассчитать концентрации веществ в выходном потоке (рисунок 2.5). В данном примере эти концентрации равны:  $C_A = 0,058$  моль/л,  $C_B = 0,458$  моль/л,  $C_C = 0,742$  моль/л.

Реализовав все описанные действия, в дальнейшем нетрудно выполнить требования, содержащиеся в задании, то есть проанализировать влияние варьируемых параметров на выходные характеристики.