

Лекція 2. Розрахунок кінетичних параметрів реакцій у потоці рідини або газу.

Визначення швидкості хімічної реакції. Закон діючих мас. Молекулярність реакції і порядок кінетичного рівняння. Рівняння Ареніуса. Фізико-хімічний сенс енергії активації і передекспоненційного множника. Інтегрування кінетичних рівнянь нульового, першого і другого порядків. Алгоритм розрахунку кінетичних параметрів. Аналіз методів визначення кінетичних параметрів за літературними даними.

Розрахунок і оптимізація об'єктів дослідження за математичними моделями другого порядку. Композиційне планування. Композиційний план для двох факторів – матриця і рисунок. Композиційний план другого порядку для трьох факторів – матриця і рисунок. Центр експерименту. Необхідність обмеження фактора при пошуку оптимуму. Методи пошуку оптимуму. Алгоритм розрахунку коефіцієнтів рівняння регресії.

Лекция 2. Расчет кинетических параметров реакций в потоке жидкости или газа.

Определение скорости химической реакции. Закон действующих масс. Молекулярность реакции и порядок кинетического уравнения. Уравнение Аррениуса. Физико-химический смысл энергии активации и предэкспоненциального множителя. Интегрирование кинетических уравнений нулевого, первого и второго порядков. Алгоритм расчета кинетических параметров. Анализ методов определения кинетических параметров по литературным данным.

Расчет и оптимизация объектов исследования по математическим моделям второго порядка. Композиционное планирование. Композиционный план для двух факторов - матрица и рисунок. Композиционный план второго порядка для трех факторов - матрица и рисунок. Центр эксперимента. Необходимость ограничения фактора при поиске оптимума. Методы поиска оптимума. Алгоритм расчета коэффициентов уравнения регрессии.

Lecture 2. Calculation of kinetic parameters of the reactions in the flow of liquid or gas.

Determinftion of the rate of a chemical reaction. The law of mass action. Molecule reactions and order kinetic equation. Arrhenius equation. Physico-chemical sense of the activation energy and pre-exponential factor. Integration of the kinetic equations of the zero, first and second order. The algorithm for calculating the kinetic parameters. Analysis methods for the determination of kinetic parameters from the literature.

Calculation and optimization of objects of research on mathematical models of the second order. Compositional planning. The composite plan for the two factors - the matrix and pattern. The composite plan for the three factors - the matrix and pattern. The center of the experiment. The need to limit factor when searching for the optimum. Methods of search optimum. The algorithm for calculating the coefficients of the regression equation.