

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова»

Посвящается 55-летию Чувашского
государственного университета
имени И.Н. Ульянова

Н.И. Кольцов, В.Х. Федотов

ИНВАРИАНТЫ И ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Чебоксары
2022

УДК 544.4:515.127.2

ББК Г542:В152.241

К62

Рецензенты:

Н.Н. Зиятдинов – д-р техн. наук, профессор, зав. кафедрой системотехники Казанского национального исследовательского технологического университета;

С.А. Мустафина – д-р физ.-мат. наук, профессор, зав. кафедрой математического моделирования Башкирского государственного университета

Печатается по решению Ученого совета

Чувашского государственного университета имени И.Н. Ульянова

Кольцов Н.И.

К62 Инварианты и обратные задачи химической кинетики / Н.И. Кольцов, В.Х. Федотов. – Чебоксары: Изд-во Чуваш. ун-та, 2022. – 240 с.

ISBN 978-5-7677-3431-3

Изложены новые методы исследования кинетических инвариантов (нестехиометрических законов сохранения) химических реакций, которые являются базовым инструментом для идентификации их механизмов и могут использоваться при решении обратных задач. Приведенные результаты расширяют представления о стационарных и нестационарных кинетических закономерностях протекания сложных химических реакций с учетом особенностей их осуществления в различных типах реакторов и возможного отклонения от идеальной кинетики. Теоретические результаты проиллюстрированы практическими примерами исследования кинетики конкретных реакций.

Для научных работников, аспирантов, преподавателей вузов и студентов, специализирующихся в области химической кинетики и математического моделирования химических процессов.

УДК 544.4:515.127.2

ББК Г542:В152.241

© Издательство Чувашского университета, 2022

© Кольцов Н.И., Федотов В.Х., 2022

ISBN 978-5-7677-3431-3

ОГЛАВЛЕНИЕ

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ	3
ВВЕДЕНИЕ	4
ГЛАВА 1. КИНЕТИЧЕСКИЕ ИНВАРИАНТЫ. ИДЕНТИФИКАЦИЯ МЕХАНИЗМОВ	8
1.1. Линейные кинетические инварианты линейных реакций	9
1.2. Линейные концентрационные и температурные	16
инварианты	16
1.3. Стационарные кинетические структуры	23
1.4. Нелинейные реакции с одним реагентом	28
1.5. Нелинейные реакции с двумя реагентами	36
1.6. Нелинейные инварианты линейных реакций	42
1.7. Многореагентные инварианты	48
1.8. Реакции со свободными реагентами	54
1.10. Нелинейные инварианты нелинейных реакций	60
1.11. Мультиэкспериментные инварианты	67
1.12. Релаксационные инварианты	74
1.13. Реакции с неидеальной кинетикой	83
1.14. Стационарный изотермический реактор неполного смешения с диффузией	89
1.15. Стационарный неизотермический реактор неполного смешения с диффузией	101
1.16. Нестационарный реактор неполного	109
смешения с диффузией	109
1.17. Нестационарный реактор неполного смешения	118
с диффузией и конвекцией	118

ГЛАВА 2. ОЦЕНКА КОНСТАНТ СКОРОСТЕЙ СТАДИЙ БЕЗ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ОПТИМИЗАЦИОННЫХ АЛГОРИТМОВ.....	130
2.1. Стационарные данные. Открытый изотермический реактор идеального смешения.....	131
2.2. Стационарные данные. Открытый неизотермический реактор идеального смешения.....	138
2.3. Стационарные данные. Неидеальная кинетика	147
2.4. Нестационарные данные. Линейные сплайны.....	154
2.5. Нелинейные тайм-сплайны. Закрытый реактор идеального смешения.....	161
2.6. Кубические сплайны. Открытый реактор	171
идеального смешения.....	171
2.7. Закрытый неизотермический реактор идеального смешения: линейная интерполяция, дополнительные стадии	175
2.8. Закрытый неизотермический реактор идеального смешения: дополнительные стадии, условия близости исходной и расширенной моделей.....	179
2.9. Открытый неизотермический реактор идеального смешения. Дополнительные стадии	189
2.10. Нестационарный реактор идеального вытеснения с диффузией.....	201
2.11. Нестационарные данные. Неидеальная кинетика	208
2.12. Каталитические реакции с основными веществами в каждой стадии.....	214
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	226
ЛИТЕРАТУРА	227

Научное издание

КОЛЬЦОВ Николай Иванович
ФЕДОТОВ Владислав Харитонович

ИНВАРИАНТЫ И ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ
ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Монография

Редактор А.Н. Антонова
Компьютерная верстка и правка Н.И. Кольцова

Согласно Закону № 436-ФЗ от 29 декабря 2010 года
данная продукция не подлежит маркировке

Подписано в печать 25.02.2022. Формат 60×84/16. Бумага газетная.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 13,95. Уч.-изд. л. 13,01.
Тираж 500 экз. Заказ № 207.

Издательство Чувашского университета
Типография университета
428015 Чебоксары, Московский просп., 15