

معرفی کمومتریक्स و اهمیت شبیه سازی : مطالعه موردی واکنش های سینتیکی و تعادل

سیده مریم سجادی

استادیار شیمی، دانشگاه سمنان، دانشکده شیمی، گروه شیمی تجزیه

چکیده

روشهای ریاضی و آمار با علوم مختلف برای پیشرفت تکنولوژی ترکیب شده است. در شیمی این ترکیب به عنوان شاخه جدید کمومتریक्स شناخته شده است و کاربردهای متنوعی در زمینه بهینه سازی واکنش های تجزیه ای و فرایندهای صنعتی، آنالیز و استخراج اطلاعات از داده های شیمیایی دارد. در این مقاله به تعریف کمومتریक्स و اهمیت شبیه سازی سیستمهای شیمیایی و سپس معرفی روش مدل سازی سخت برای محاسبه پارامترهای غیرخطی پرداخته می شود. نرم افزار chemkinetics برای شبیه سازی برخی واکنشهای سینتیکی و نرم افزار Excel برای شبیه سازی واکنشهای تعادلی اسید باز معرفی می گردد. محاسبه پارامترها ثابت سرعت در مطالعات سینتیکی و ثابت اسیدی در تیتراسیون اسید-باز با استفاده از Solver Add-in در محیط Excel توضیح داده می شود.

کلمات کلیدی

کمومتریक्स، شبیه سازی، مدل سازی سخت، chemkinetics، Excel، Solver

نکات برجسته پژوهش

- اهمیت شبیه سازی برای به دست آوردن داده با اطلاعات کافی.
- استفاده از روش کمومتریکی مناسب برای استخراج بیشترین اطلاعات از داده های شیمیایی.
- استفاده از روش مدل سازی سخت برای محاسبه پارامترهای غیرخطی سیستم های شیمیایی پیر مبنای مدل معین.