

Программный комплекс mech_optimiz, версия 5.1

Руководство пользователя

Автор-составитель Митричев Иван

Москва

Март 2019

1. Назначение и условия применения программы

Назначение программного комплекса (модульной системы) `mech_optimiz` — подбор кинетических параметров в микрокинетических механизмах жидкофазных и газофазных каталитических реакций, а также моделирование каталитических превращений в жидкофазных и газофазных каталитических реакторах.

Функции, выполняемые программным комплексом:

- 1) подбор кинетических параметров в микрокинетических моделях жидкофазных каталитических реакций;
- 2) подбор кинетических параметров в микрокинетических моделях газофазных каталитических реакций;
- 3) моделирование каталитических превращений в жидкофазных каталитических реакторах с гомогенным или гетерогенным катализатором;
- 4) моделирование каталитических превращений в газофазных каталитических реакторах с гетерогенным катализатором.

Функции 1 и 2 реализуются в головном модуле `mech_optimiz`, 3 — в модулях `LiqKinetics`. 4 - в модуле `GasKinetics`.

Условия, необходимые для выполнения программы:

- для моделирования газофазных каталитических реакций необходимо
 - 1) объем свободной оперативной памяти — не менее 6 Гб;
 - 2) процессор — Intel серии i5/i7 или аналог;
 - 3) свободное место на накопителе с программой (жесткий или твердотельный диск, флэш-память и т. п.) - не менее 3 Гб.
 - 4) операционная система - Linux;
 - 5) установленное программное обеспечение: библиотеки Qt версии не ниже 5.6.2, Cantera.
- для моделирования жидкофазных каталитических реакций необходимо
 - 1) объем свободной оперативной памяти — не менее 2 Гб;
 - 2) процессор — Intel серии i5/i7 или аналог;
 - 3) свободное место на накопителе с программой (жесткий или твердотельный диск, флэш-память и т. п.) - не менее 3 Гб.
 - 4) операционная система - Linux;
 - 5) установленное программное обеспечение: библиотеки Qt версии не ниже 5.6.2, GNU Octave 4.0.0 и выше с дополнением `octave-odepkg` версии 0.8.4 и выше.

2. Характеристика программы

Программный комплекс состоит из головного модуля `mech_optimiz` (а - Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012660475. Параллельное программное обеспечение для подбора параметров

детальных кинетических механизмов / Митричев И.И., Кольцова Э.М., Женса А.В., 21.11.2012 г. б - Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016618809. Программа для построения и анализа микрокинетических механизмов поверхностных реакций / Митричев И.И., Женса А.В., Кольцова Э.М., Василенко В.А., заявка № 2016618809 от 22.06.2016 г., регистрация от 8.08.2016 г.), модуля расчета кинетики газофазных каталитических реакций, модулей LiqKinetics (Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018666786. Программа для расчета кинетики жидкофазных каталитических реакций LiqKinetics / Митричев И.И., Подобедова А.Я., Кольцова Э.М. Заявл.04.12.2018, зарег, 20.12.2018, опубл. 20.12.2018 Бюл. №12.) для расчета кинетики жидкофазных каталитических реакций.

Время работы программы зависит от числа итераций подбора кинетических параметров, числа реакций кинетического механизма и теоретически не ограничено. При 100 итераций и 50 реакциях на процессоре Intel i5-8400 примерное время выполнения

- для жидкофазных реакций - 3,5 часа;
- для газофазных реакций - 2,5 часа.

Режим работы программы: есть два режима, подбор кинетических параметров, и моделирование. Тип приложения — базово - консольный. В режиме моделирования и только для жидкофазных реакций — консольный, либо графический (есть возможность последовательного графического ввода данных). В режиме подбора кинетических параметров — консольный, либо графический (через веб-сайт Виртуального центра катализа).

Предусмотрены средства контроля правильности выполнения и самовосстанавливаемости программы. Для контроля правильности кода созданы тестовые примеры (юнит-тестирование), которые могут быть запущены для режима подбора кинетических параметров. Средства самовосстанавливаемости программы — сохранение результатов в файл специального внутреннего формата (save-файл) на каждой итерации расчета. Таким образом, после аварийного завершения работы программы (прерывание пользователем, отказ оборудования или недостаток места в оперативной памяти/на жестком диске) можно продолжить расчет с последней успешной итерации.

3. Обращение к программе

Запуск программы осуществляется с консоли

`./mech_optimiz config_file.txt`

`config_file.txt` — название конфигурационного файла.


`./mech_optimiz config_file.txt config_file.txt-xxx`

`config_file.txt-xxx` — название save-файла, где xxx — номер итерации (число).

4. Входные и выходные данные

Входные данные. Режим подбора кинетических параметров

Входные данные в режиме подбора кинетических параметров можно вводить через конфигурационный файл, либо через формы веб-сайта Виртуального центра катализа (рис. 1, 2).



Виртуальный центр катализа

Вы здесь: [Главная](#) ► [Моделирование](#) ► Подбор параметров жидкофазных реакций

Подбор параметров жидкофазных реакций

Категория: [Математическое моделирование](#) | Опубликовано: 24.08.2018 09:01

Ввод параметров генетического алгоритма

Номер начальной итерации *	Максимальное число потоков (Pthreads) - особей ГА, создаваемых программой *
<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="4"/>
Число бит в генах *	Максимальное число итераций ГА *
<input type="text" value="12"/>	<input type="text" value="1"/>
Требуемое значение целевой функции *	Число хромосом в популяции генетического алгоритма *
<input type="text" value="0.01"/>	<input type="text" value="2"/>
Файл с газофазным кинетическим механизмом *	Вероятность мутации бита при выполнении операции скрещивания, % *
<input type="button" value="Выберите файл"/> Файл не выбран	<input type="text" value="0"/>
Файл с поверхностным кинетическим механизмом *	Вероятность инверсии бита при выполнении
<input type="button" value="Выберите файл"/> Файл не выбран	

Рис. 1. Веб-форма для запуска задачи подбора кинетических параметров жидкофазных реакций в Виртуальном центре катализа

→ ↻ ⓘ Не защищено | centralcatalysis.muctr.ru/modelirovanie/10-programm.html

приложения 🌐 Getting Started 📁 Импортирован

ГЛАВНАЯ ЭКСПЕРИМЕНТ НОВОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕОРИЯ ПУБЛИКАЦИИ О НАС

Виртуальный центр катализа

Вы здесь: [Главная](#) ▶ [Моделирование](#) ▶ Программа

Программа

Категория: [Математическое моделирование](#) | Опубликовано: 13.10.2017 07:20

Ввод параметров генетического алгоритма

Номер начальной итерации *	Максимальное число потомков (Pthreads) - особей ГА, создаваемых программой *
<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="44"/>
Число бит в генах *	Максимальное число итераций ГА *
<input type="text" value="12"/>	<input type="text" value="1"/>
Требуемое значение целевой функции *	
<input type="text"/>	

Рис. 2. Веб-форма для запуска задачи подбора кинетических параметров газофазных реакций в Виртуальном центре катализа

Входные данные в режиме подбора параметров собраны в конфигурационный файл, файл с кинетическим механизмом, файл настроек термодинамической непротиворечивости, файл с термодинамическими данными.

1) Конфигурационный файл

Для **режима подбора кинетических параметров для газофазных реакций** файл имеет следующую структуру (курсив — пояснения, не входящие

в конфигурационный файл, круглые скобки — выбор одного из вариантов, квадратные скобки — необязательный параметр):

```
[RKP]
[строка_параметров_запуска]
CASE ...

...
CONVERSION_(molar_conc,mole_fr,mass_fr)...
[ENTROPY PRODUCTION ...номер_реакций...
(y,n) (y,n) (y,n)]
[ADDEQUATIONS (dPdVr dVdVr CONVERSION_REL_ERROR)]
[RESPECT_BOUNDARIES]
[UNITS E KJOULES/MOLE]
PARAMETERS
номер_реакции (y,n) (y,n) (y,n) число число число
k строк вида
    число число [число]
где k=сумма значений, начиная со второго, из предыдущей строки, причем y
считается за 1, n за 0.

...
```

Первая строка

Первая строки для поиска кинетических параметров должна иметь значение RKP, что расшифровывается как Reverse Kinetic Problem (обратная кинетическая задача). Если строка опущена, по умолчанию подразумевается тип задачи RKP.

Строка параметров запуска

В первой строке задаются базовые настройки программы и параметры генетического алгоритма бинарного кодирования, составляющего основу алгоритма подбора параметров. Синтаксис поясним на примере.

```
0 8 1.0 myfile.txt gas.inp mech.inp 16 44 5000 28 32 8 120
```

В строке параметров запуска указываются:

- 0 - номер начальной итерации;
- 8 - число бит в генах;
- 1.0 - требуемое значение целевой функции, когда останавливается расчет;
- myfile.txt — относительный путь к файлу с настройками расчета. Позволяет вместо считывания текущего файла с настройками, поданного на вход mech_optimiz, перейти к считыванию другого файла.
- gas.inp - имя файла с газофазным кинетическим механизмом (нужен для считывания газофазных веществ в механизмах формата CHEMKIN-II);
- mech.inp - имя файла с поверхностным кинетическим механизмом (в формате CHEMKIN-II);
- 16 - число потомков, создаваемых на каждой итерации генетического алгоритма;

•44 - максимальное число потоков, создаваемое программой. Если число рассчитываемых хромосом превысит число потоков на какой-либо итерации, будет произведено разделение популяции на части по числу потоков, и расчет целевой функции подбора будет произведен в несколько этапов;

•5000 - максимальное число итераций генетического алгоритма (ГА);

•28 - число хромосом в популяции ГА;

•32 - вероятность мутации бита при выполнении операции кроссинговера ГА, %;

•8 - вероятность инверсии бита при выполнении операции кроссинговера ГА, %;

•120 — максимальное число секунд на расчет одной экспериментальной точки. Позволяет остановить заиклившийся расчет при неудачном наборе кинетических параметров.

В случае некорректного задания одного из параметров (например, отрицательные значения), будут использованы следующие значения по умолчанию:

•число бит в генах: 8;

•требуемое значение целевой функции: 0.01;

•имя файла с газофазным кинетическим механизмом: gas.inp;

•имя файла с поверхностным кинетическим механизмом: mech.inp;

•число потомков, создаваемых на каждой итерации: 52;

•максимальное число потоков (особей ГА): 68;

•максимальное число итераций генетического алгоритма: 1000;

•вероятность мутации бита: 17;

•вероятность инверсии бита: 8;

•число хромосом в популяции ГА: 16;

•число секунд на расчет одной экспериментальной точки: 420.

Строка CASE

Строка относится к отдельной серии экспериментов. Она описывает условия эксперимента и параметры реактора.

Разберем структуру данной записи на примере:

CASE CSTRCASCADE 921 Honeycomb 1D 2 CO O2 CO2 0.01 0.02 0.00
He 0.012 0.008 2e-08 Pt(S) 0.7 O(S) 0.3 3.156e-07 1.07879E+06 0.301 30 70 120

Структура строки:

•CASE - ключевое слово. Объявляется новый набор экспериментальных данных по конверсии (внутри него одинаковые параметры реактора и исходной смеси, т.е., так называемого потока питания (feed stream));

•CSTRCASCADE - тип задачи. Для реактора с неподвижным слоем катализатора можно выбрать ячеечную модель (CSTRCASCADE).

•<ЧИСЛО> - уникальный номер серии экспериментов (выставляется пользователем по своему усмотрению, должен быть целым положительным числом (не более 2 млрд). В примере: набор данных № 921.

•Honeycomb - тип расчетной области - канальная модель.

•1D - размерность задачи.

•<ЧИСЛО> - число веществ-загрязнителей. В примере: 2 вещества. Все вещества в mesh_optimiz подразделяются на три типа:

1) Вещества, по которым будет сравниваться конверсия с экспериментальными данными. Конверсия этих веществ рассчитывается и влияет на т.н. "критерий по конверсии", то есть значение суммы квадратов отклонений по конверсии данных моделирования от данных экспериментов.

2) Другие активные вещества. Вещества, число молекул которых изменяется, но для которых конверсия не рассчитывается.

Вещества типов 1 и 2 вместе составляют "активные вещества".

3) Инерты. Эти вещества не вступают в реакции и не являются продуктами реакции, и общее содержание (число молей, молекул) вещества по длине реактора остается постоянным.

•<ВЕЩЕСТВО-1> [<ВЕЩЕСТВО-2> ...] - список веществ, по которым будет сравниваться конверсия с экспериментальными данными (основные вещества)

•В примере: CO и O₂.

•<ВЕЩЕСТВО-1> [<ВЕЩЕСТВО-2> ...] - список других активных веществ

•В примере: CO₂.

•<ЧИСЛО-1> [<ЧИСЛО-2> ...] - мольные доли x для всех активных веществ (в т.ч. - основных) в порядке их указания в списках веществ ранее в строке.

•В примере: 0.01 (x_{CO}), 0.02 (x_{O_2}), 0.00 (x_{CO_2}).

•<ВЕЩЕСТВО> - инерт или газ-носитель (carrier-gas)

Заметим, что мольная доля инерта не задается, а вычисляется как единица минус сумма мольных долей всех других веществ, которые были заданы ранее в строке.

•<ЧИСЛО> - длина каталитической секции, м (В примере, 0.012);

•<ЧИСЛО> - диаметр трубки (внутренний), м (В примере, 0.008);

•<ЧИСЛО> - плотность реакционных центров в кмоль/м² (В примере, 2e-08);

•<ВЕЩЕСТВО-1> <ЧИСЛО-1> [<ВЕЩЕСТВО-2> <ЧИСЛО-2> ...]

•начальное заполнение поверхности адсорбатами - название и доля покрытия поверхности. В сумме должны давать строго единицу.

В примере: Pt(S) 0.7 O(S) 0.3;

•<ЧИСЛО> - массовый расход газа (кг/с) (В примере, 3.156e-07);

•<ЧИСЛО> - коэффициент, учитывающий величину активной поверхности на м³ реактора (м²/м³) (В примере, 1.07879E+06);

•0.301 - порозность - доля пустот в каталитическом слое, через которые протекает газ (безразмерная) (В примере, 0.301);

•<ЧИСЛО> - максимальное число итераций по газофазным веществам на 1 реактор (В примере, 30);

•<ЧИСЛО> - число реакторов ИС (идеального смешения) в каскаде (В примере, 70);

•<ЧИСЛО> - средний диаметр частиц, мкм (В примере, 120);

Строка CONVERSION

Далее в файле объявлены значения конверсии при различных значениях температуры из эксперимента (пример):

CONVERSION_molar_conc_e_o 921 473.15 40.75 16.53

•CONVERSION ключевое слово; Обязательно должен быть указан один из трех модификаторов:

1) molar_conc - конверсия рассчитана на основе мольной концентрации (как в примере);

2) mole_fr - конверсия рассчитана на основе мольной доли;

3) mass_fr - конверсия рассчитана на основе массовой доли.

•921 — номер CASE (должен соответствовать описанному выше CASE, иначе точка будет проигнорирована при дальнейшем моделировании);

•473.15 - температура (K);

•40.75 16.53 - конверсия объявленных в секции CASE веществ, по которым будет сравниваться конверсия (в данном случае это — CO и O₂);

Строка ENTROPY PRODUCTION

Используется для указания, какие обратимые реакции мы используем при расчете критерия по производству энтропии (т.е., указав часть реакций, можно производить минимизацию производства энтропии по данным реакциям). Пример:

ENTROPY_PRODUCTION 1 3 5 19

Данная строка указывает программе рассчитывать производство энтропии для обратимых реакций, которые в качестве прямой или обратной стадии имеют 1, 3, 5 или 19 стадию. Следует указывать одну любую стадию из пары стадий, входящих в обратимую реакцию. Следующая строка определяет критерии, которые мы используем при подборе кинетических параметров (в общей сумме), y - использовать критерий, n - не использовать:

(y,n) (y,n) (y,n)

В этой записи первый критерий — есть критерий по конверсии, второй — по термодинамической непротиворечивости, третий — по производству энтропии.

Строка ADDEQUATIONS

Данная строка подключает дополнительные уравнения к математической модели решателя CSTRCASCADE.

•dPdVr — учитывать изменение давления за счет сопротивления пористой среды.

Для расчета гидравлического сопротивления используется уравнения Эргана:

$$dP/dx = a\mu u_{sup} + b\rho u_{sup}^2$$

Если указана эта опция, в рабочей директории должен присутствовать файл формата CHEMKIN Transport Properties Database "tran.dat", содержащий транспортные свойства (свойства, относящиеся к переносу) веществ. Это, в том числе, параметры потенциала Леннарда-Джонса (12-6):

$$u(r) = 4\epsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$$

где σ - характеристическая длина, на которой потенциал становится равным нулю, ϵ - глубина потенциальной ямы. Расчет свойств веществ (вязкость) на основе энергетических параметров производится в объекте Cantera::Transport, инициализированном с типом "Mix".

- dVdVr - учитывать изменение объема (числа молей) смеси в ходе химической реакции / при изменении температуры.

- CONVERSION_REL_ERROR - если указан этот параметр, то вклад точки в критерий по конверсии рассчитывается не на основе абсолютного отклонения, а на основе относительного отклонения. Эту опцию полезно указывать для всех/части точек, если нужна одинаковая относительная точность подбора для различных экспериментальных точек. Например, в случае эксперимента в дифференциальном реакторе (конверсия менее 10%), только использование этой опции позволяет произвести хороший (модель адекватна эксперименту) подбор.

Строка RESPECT_BOUNDARIES

Данная строка заставляет алгоритм модификации кинетических параметров обратных стадий обратимых реакций принудительно соблюдать границы, объявленные для поиска параметров в файле настроек.

Строка UNITS

Позволяет задавать единицы по умолчанию для некоторых величин.

- UNITS E (KJOULES/MOLE, JOULES/KMOLE) позволяет задать единицы энергии активации, в которых она приводится в конфигурационном файле и save-файлах. Значение по умолчанию – KJOULES/MOLE.

Строка PARAMETERS

Заметки

Секция PARAMETERS должна следовать после объявления всех экспериментальных установок (CASE) и экспериментальных значений конверсии (CONVERSION). Общий вид записи элементов секции:

- (номер_реакции (y,n) (y,n) (y,n) число число число [число])
- ...

Номер реакции должен соответствовать номеру реакции в файле с поверхностным кинетическим механизмом.

Три опции y/n означают, будет ли подбираться предэкспоненциальный множитель A, степень при температуре β и энергия активация E, соответственно. Каждый выбранный «у» обязывает написать ниже строку, в которой указать первым параметром нижнюю границу поиска параметра, вторым параметром – верхнюю границу поиска. Третьим необязательным параметром может быть число бит, используемое для кодирования значений параметра – так, можно задать большее число бит для кинетических параметров, которые необходимо подобрать наиболее точно. К числу

последних следует отнести сильно влияющие на конверсию реагентов параметры. Пример:

```
1 y n y 0 0 0
1e+13 1e+14
105 144 10
```

Энергия активации в данном случае будет искаться в пределах 105–144 ед. (по умолчанию – кДж/моль) с использованием 10 бит для кодирования.

Три числа далее указывают число модификаторов η , μ , ϵ для учета влияния степени покрытия поверхности тем или иным адсорбатом на кинетику реакции (учет латеральных взаимодействий, см. [1]). Каждое значение k , отличное от нуля, для этих чисел влечет за собой необходимость указания строк k описания влияния адсорбатов на кинетические параметры. Параметры η , μ изменяют предэкспоненциальный множитель, а параметр ϵ - энергию активации реакции в зависимости от покрытия поверхности.

Пример:

```
1 n n y 0 1 1
105 144
CO(S) -0.5 0.5
O(S) -30 -10
```

В данном случае параметр μ учитывает заполнение поверхности CO(S) и изменяется от -0.5 до 0.5, а параметр ϵ изменяется от -30 до -10, вводя учет влияния заполнения поверхности адсорбатом O(S). Как видно, эти три параметра допускают отрицательные значения, и пределы поиска задаются в порядке возрастания значений.

Для каждой реакции может быть еще задан и седьмой, опциональный параметр, где указывается число подбираемых частных порядков реакции, не равных стехиометрическим коэффициентам. Это дает возможность подбирать кинетические параметры брутто-реакций, а не элементарных стадий.

```
1 n n y 0 0 0 1
105 144
CO(S) 1.0 2.0
```

Этот пример показывает поиск частного порядка реакции по веществу CO(S) в границах от 1.0 до 2.0. Подробнее, см. [1].

Для **режима подбора кинетических параметров для жидкофазных реакций** файл имеет следующую структуру (курсив — пояснения, не входящие в конфигурационный файл, круглые скобки — выбор одного из вариантов, квадратные скобки — необязательный параметр):

```
[RKP]
[строка_параметров_запуска]
CASE ...
...
CONVERSION_(molar_conc,mole_fr,mass_fr) ...
```

[ENTROPY PRODUCTION ...номер_реакций ...
 (y,n) (y,n) (y,n)]
 [ADDEQUATIONS (dPdVr dVdVr CONVERSION_REL_ERROR)]
 [RESPECT_BOUNDARIES]
 [REFSOLVENTCONC число число число число]
 [UNITS E KJOULES/MOLE]
 PARAMETERS

номер_реакции (y,n) (y,n) (y,n) число число число

k строк вида

число число [число]

где *k*=сумма значений, начиная со второго, из предыдущей строки, причем у считается за 1, *n* за 0.

Пример файла:

RKP

0 12 1e-11 work334.txt gas.inp mech.inp 6 12 1300 6 65 12 120
 CASE LIQUIDCSTRCASCADE 1600 liquid_periodic 1D 1 C7H6O C4H9OK KC1
 C7H7OH C3H6O C4H9OH C3H7OK 0.099497537 -0.000994975 -1 -1 -1 -1 -1
 C3H7OH 1.05e-06 0.01 1.0833e-07 Ir2Cl4(S) 1.0 10 1.5e+04 0.5 65 15 200
 CONVERSION_molar_conc_sec 1600 333.15 run_1 0 0.0 3600 12.366 7200 23.00
 run_2 0 0.0 3600 11.409
 ACTIVATION 1600 3600 0 0.000994975 0 0 0 0 0 13.014655
 ENTROPY_PRODUCTION 1 3 5 7 9 11 13 15 17 19 21 23 25 27 29 31 33

y y n

ADDEQUATIONS dVdVr

REFSOLVENTCONC 13078.9 0.000824 1.2

UNITS E KJOULES/MOLE

CHECK_LIMITATIONS_LEVEL 0

PARAMETERS

1 y n y 0 0 0

5e14 1e15

81 91

Первые две строки неизменны по сравнению с файлом для исследования газофазных процессов. В третьей строке, CASE, тип решателя всегда имеет значение LIQUIDCSTRCASCADE, а тип расчетной области может быть либо реактор периодического действия с мешалкой (liquid_periodic), либо реактор непрерывного действия трубчатый (liquid_continuous). Вместо названий газов записываются названия жидких компонентов реакционной смеси, далее следуют их молярные концентрации в кмоль/м³. Если задано отрицательное число, оно означает, что концентрация будет оставлено равной значению после этапа активации катализатора (должна присутствовать строка ACTIVATION в этом случае). Вещество, указанное отдельно после ряда концентраций (C3H7OH) - растворитель, его концентрация не задается в этой строке.

1.05e-06 - объем смеси в реакторе для периодического реактора (м^3). В случае непрерывного реактора – длина каталитической секции (м).

0.01 - в этом месте указывается диаметр реактора (непрерывный реактор), м или диаметр мешалки (периодический реактор), м;

1.0833e-07 - плотность активных центров, $\text{кмоль}/\text{м}^2$ поверхности катализатора;

Далее перечисляются частицы для начального заполнения катализатора ($\text{Ir}_2\text{Cl}_4(\text{S})$) и их молярные доли (1.0).

10 - средняя скорость жидкости в реакторе, м/с (непрерывный реактор) / частота вращения мешалки, 1/с (периодический реактор);

1.5e+04 - Величина активной поверхности, $\text{м}^2/\text{м}^3$ реактора;

0.5 - порозность;

65 - максимальное число секунд на расчет одной кинетической кривой (значений конверсии);

15 - число реакторов идеального смешения в каскаде, которыми аппроксимируется реактор идеального вытеснения (используется только для непрерывного реактора);

200 - средний диаметр частиц гетерогенного катализатора, мкм (0 — гомогенный катализатор).

CONVERSION_molar_conc_sec или CONVERSION_molar_conc_hrs указывает единицы, в которых измерено время (секунды или часы, соответственно).

run_1 0 0.0 3600 12.366 7200 23.00 run_2 0 0.0 3600 11.409 - означает, что выполнена два последовательных пробега (две серии экспериментов) с такими концентрациями жидкости, как были использованы в начале реакции после этапа активации катализатора. После каждого слова run... идут множества чисел - время в указанных ранее единицах и значения конверсии всех веществ, по которым сравнивается конверсия (в данном примере = 1, как видно из участка файла 1D 1 C7H6O).

ACTIVATION 1600 3600 0 0.000994975 0 0 0 0 13.014655 - строка, указывающая начальные концентрации компонентов жидкости перед этапом активации (0 0.000994975 0 0 0 0 13.014655). Порядок веществ тот же, что в строке CASE с совпадающим номером (в примере, 1600). 3600 – это время этапа активации в секундах.

REFSOLVENTCONC 13078.9 0.000824 1.2 - строка обязательна и содержит концентрация растворителя в $\text{моль}/\text{м}^3$, его вязкость в $\text{Па}\cdot\text{с}$ и коэффициент ассоциативности (здесь, 1.2).

2) Файл с кинетическим механизмом

Синтаксис этого файла соответствует формату "Surface CHEMKIN - II input file" [1], и имеет также несколько дополнений.

Имя по умолчанию - mech.inp.

В этом файле указываются все реакции. Каждая строка реакции предваряется указанием номера, например, !#1. Нумеровать реакции следует последовательно от единицы.

Пример файла:

```

MATERIAL TWC3
SITE/PLATINUM/ SDEN/2.07E-9/
Pt(S) O(S) CO2(S) CO(S) C(S) NO(S) N(S) N2O(S)
END
!ALIAS (S) Pt:1
THERMO ALL
300.0 1000.0 5000.0
CO 121286C 1O 1 G 0300.00 5000.00 1000.00 1
0.03025078E+02      0.01442689E-01-0.05630828E-05      0.01018581E-08-
0.06910952E-13 2
-0.01426835E+06      0.06108218E+02      0.03262452E+02      0.01511941E-01-
0.03881755E-04 3
0.05581944E-07-0.02474951E-10-0.01431054E+06 0.04848897E+02 4
.....
.....
Pt(S) REF ELEME T08/10PT 1. 0. 0. 0.S 298.150 2042.000 1000. 1
2.85793043E+00      1.02169438E-03-5.90389244E-07      2.63911729E-10-
5.65925560E-15 2
-8.95793150E+02-1.15728164E+01      2.60343622E+00      2.37670693E-03-
3.28073455E-06 3
2.61765836E-09-7.69578918E-13-8.57676172E+02-1.04182748E+01
0.00000000E+00 4
END
REACTIONS KJOULES/MOLE
!***** TC residuals *****
! Reaction 1 for deltaH 1.04257e+06
...
! Total for deltaH: 7.04801e+06
! Total for deltaS: 65.402
! Total for deltaG: 3.28243e+07
!*****
!#1
Pt(S) + CO => CO(S) 8.591465e-01 0.000000e+00 0.000000e+00
STICK
.....
.....
END

```

•В первой строке указывается название материала: например, MATERIAL TWC3.

•Секция SITE должна содержать указание всех поверхностных частиц:

Pt(S) O(S) CO2(S) CO(S) C(S) NO(S) N(S) N2O(S)

Указанное здесь общее число активных центров SDEN используется для термодинамического согласования параметров.

- С восклицательного знака '!' начинается комментарий. Дополнительные ключевые слова, не используемые CHEMKIN, для обратной совместимости синтаксиса являются комментариями.

- ALIAS позволяет задать, какое количество активных центров (здесь принимается равным числу атомов некоторого вещества) занимают частицы данного типа. Например, запись

!ALIAS (S) Pt:1

указывает, что все частицы, содержащие (S) в конце названия, содержат 1 атом платины (занимают 1 активный центр на платине). Таким образом, если вы хотите объявить частицу C₂H₄ на поверхности катализатора, занимающую два активных центра, вы создаете псевдоним S1:

!ALIAS (S) Pt:1(S1) Pt:2

Частицу при этом следует назвать C2H4(S1).

- Секция THERMO ALL должна содержать объявление всех частиц, для которых термодинамические свойства считаются известными. Это:

- 1) газофазные частицы (также, они могут быть объявлены в файле thermo.dat);

- 2) частицы, относящихся к чистому катализатору.

Секция заканчивается ключевым словом 'END'.

- Далее, обязательно следует объявление REACTIONS. второй столбец содержит информацию о единицах, в которых в файле приводятся энергии активации реакционных стадий (KJOULES/MOLE — кДж/моль, JOULES/MOLE — Дж/моль).

- Строки записи кинетической стадии:

Pt(S) + CO => CO(S) 8.591465e-01 0.000000e+00 0.000000e+00
STICK

Первый численный параметр - значение предэкспоненциального множителя. Второй параметр - значение показателя степени при температуре (для стадий адсорбции этот параметр здесь отдельно не выделяется, указывается равным 0.0). Третий параметр - значение энергии активации.

- Строка STICK указывается только после стадий адсорбции. Тогда первый параметр (вместо предэкспоненциального множителя) будет распознан как коэффициент вероятности адсорбции, а показатель степени при температуре в уравнении для константы скорости будет эффективно равен 0.5. Коэффициенты, учитывающие латеральные взаимодействия могут быть указаны в отдельной строке после любой стадии:

COV /CO(s) 0 0 30.0/

Указывается вещество, степень покрытия которым поверхности изменяет кинетические параметры, а величина изменения задается с помощью трех численных параметров: η , μ , ϵ . Параметр ϵ наиболее важен, он определяет величину изменения энергии активации при полном заполнении поверхности адсорбатом данного вида. Т.е., в примере указано, что при полном заполнении

поверхности адсорбатом CO(S) (его доля покрытия, coverage, = 1.0) энергия активации стадии увеличится на 30.0. Отрицательные значения свидетельствуют об уменьшении энергии активации кинетической стадии с увеличением степени покрытия поверхности указанным адсорбатом. За подробной информацией об их значении обратитесь к документации Surface Chemkin [1].

- TC residuals - комментарий, создаваемый mech_optimiz, указывает величины невязок по термодинамической согласованности (для отдельных обратимых реакций и суммарные).

3) Файл настроек термодинамической непротиворечивости

Пример файла:

THERMCON

400 750

7 3D 0 0 0

1 1

2 1

3 5

11 1

В первой строке указывается ключевое слово THERMCON. В первой строке может быть указан также второй параметр: коэффициент масштабирования невязок. На этот коэффициент будут поделены суммарные значения невязок, характеризующие степень термодинамической согласованности кинетических параметров.

THERMCON 1e+08

Значение по умолчанию равно 1e+07.

Во второй строке указываются границы диапазона температуры (K), на котором будет проверяться и/или обеспечиваться термодинамическая непротиворечивость.

В третьей строке осуществляется управление алгоритмами TC.

- 7 - число коэффициентов полиномов NASA (не может быть иным на данный момент);

- 3D - размерность пространства (при использовании решателя CSTRCASCADE - указывать 3D);

- 0 - невязки рассчитывается по стандартному изменению энтальпии и энтропии отдельно (1 - только по энергии Гиббса, не рекомендуется, см. дискуссию в нашей статье [2]);

Далее идут два необязательных параметра (значения по умолчанию для них: 0 и 5).

- 4ый параметр позволяет выбрать алгоритм поиска кинетических параметров обратных стадий

- по стандартному изменению энтальпии и энтропии отдельно с использованием метода Ньютона (0)
- только по стандартному изменению энергии Гиббса с использованием метода Ньютона + генетического алгоритма в случае расхождения метода Ньютона (1),
- так, как и (1), но только с использованием генетического алгоритма (2).

•5ый параметр позволяет задать число запусков генетического алгоритма (со второго - с сужением границ). Может быть задано любое неотрицательное число.

В случае, если метод Ньютона расходится, и другой алгоритм не используется, значение кинетического параметра также будет оставлено на границе диапазона поиска.

С 4ой строки указываются:

- в первом столбце - номер прямой стадии;
- во втором столбце - весовой коэффициент для данной обратимой реакции.

Большие значения весового коэффициента обеспечивают лучшую термодинамическую согласованность данной реакции (в ущерб другим реакциям).

Для приведенного выше примера все стадии, кроме 3, имеют одинаковые весовые коэффициенты, стадия 3 имеет весовой коэффициент равным 5.

4) Файл с термодинамическими данными

Синтаксис этого файла соответствует формату "CHEMKIN - II thermodynamic database file" [1].

Имя по умолчанию - thermo.dat

В этом файле указываются термодинамические свойства для всех поверхностных частиц и компонентов реакционной смеси (газ/жидкость), которые встречаются в файле с кинетическим механизмом. Если вы не имеете информации о свойствах некоторой частицы (для большинства частиц они на данный момент не табулированы), заполните коэффициенты в строках нулями.

Пример файла:

```

THERMO
300.0 1000.0 3000.0
O(S) 92491O 1Pt 1 I 300.00 3000.00 1000.00 1
0.19454180E+01          0.91761647E-03-0.11226719E-06-0.99099624E-10
0.24307699E-13 2
-0.14005187E+05-0.11531663E+02-0.94986904E+00          0.74042305E-02-
0.10451424E-05 3
-0.61120420E-08 0.33787992E-11-0.13209912E+05 0.36137905E+01 4
C2H3O(S) C 2H 3O 1Pt 1I 300.0 3000.0 1000.0 1
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 2
  
```

```

0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 3
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 4
END

```

Входные данные. Режим моделирования каталитических превращений

Входные данные в режиме моделирования для каталитических превращений в газофазных каталитических реакторах с гетерогенным катализатором вводятся так же, как в режиме подбора кинетических параметров, при этом максимальное число итераций подбора ставится равным 1, а в разделе PARAMETERS параметров выбирается любой один кинетический параметр, диапазон поиска для которого устанавливается в точности от номинального значения до того же номинального значения (минимальное и максимальное значения совпадают и равны номинальному).

Входные данные в режиме моделирования для каталитических превращений в жидкофазных каталитических реакторах с гомогенным или гетерогенным катализатором можно вводить двумя путями:

- 1) с использованием `mech_optimiz` — как в режиме моделирования для каталитических превращений в газофазных каталитических реакторах;
- 2) с использованием только модулей `LiqKinetics` - путем ввода через консоль (программа может задавать вопросы по одному, и пользователь должен вводить в строку ввода число или массив, рис. 3). Список параметров для ввода представлен в таблицах 1 и 2.

```

ENTRY RULES. The array is entered in the format [10, 20, 30] Multidimensional array
is entered in the format [10, 20, 30; 10, 40, 50], where rows are separated
by semicolon. The number is entered as: 10
Enter the pre-exponential factors of direct reactions in 1/s (ARRAY): [1e13]
Enter the pre-exponential factors of reverse reactions in 1/s (ARRAY): [1e11]
Enter the activation energies of direct reactions in KJ/mol (ARRAY): [34.0]
Enter the activation energies of reverse reactions in KJ/mol (ARRAY): [11.2]
Enter molar masses of liquids in kg/mol (ARRAY): [0.106 0.166]
Enter molar volumes at normal boiling point for liquids in cm3/mol (ARRAY): [0.1
0.1]
Enter the number of active centers occupied for each particle on the surface (AR
RAY): [1]
Enter the amount of liquids: 2
Enter an ARRAY of molar masses, one adsorbing substance for each of the direct r
eactions. If there are no such substances, set 0: [0.106]
Enter an ARRAY of molar masses, one adsorbing substance for each of the reverse
reactions. If there are no such substances, set 0: [0.166]
Enter the concentration of liquids in kmol/m3, for surface particles - the surfa
ce coverage fraction (b/r) for the activation phase (ARRAY): [0.1 0.0 1.0]
Enter the concentration of liquids in kmol/m3, for surface particles - the surfa
ce coverage fraction (b/r) for the reaction phase. If a negative number, take th
e final concentration of the substance after activation (ARRAY): [-1 -1 -1]

```

Рис. 3. Ввод данных через консольный интерфейс `LiqKinetics`

Таблица 1. Параметры, вводимые для моделирования жидкофазного каталитического реактора непрерывного действия

Название переменной	Назначение переменной	Тип переменной
A_p_1_s	Предэкспоненциальные множители прямых реакций	Массив
A_m_1_s	Предэкспоненциальные множители обратных реакций	Массив
E_p	Энергии активации прямых реакций	Массив
E_m	Энергии активации обратных реакций	Массив
M_liquid	Молярные массы жидкофазных компонентов, кг/моль	Массив
molar_volume	молярные объемы при нормальной температуре кипения для жидкофазных веществ, см ³ /моль	Массив
sigma_sites	Числа активных центров, занимаемых частицами	Массив
N_liquid	Число жидкофазных компонентов	Число
M_p	массив молярных масс, по 1 адсорбирующемуся веществу для каждой из прямых реакций	Массив
M_m	массив молярных масс, по 1 адсорбирующемуся веществу для каждой из обратных реакций.	Массив
y0_I	концентрации жидкофазных веществ в кмоль/м ³ , для поверхностных частиц - доли покрытия поверхности (б/р) для этапа активации	Массив
y0_II	концентрации жидкофазных веществ в кмоль/м ³ , для поверхностных частиц - доли покрытия поверхности (б/р) для этапа реакции	Массив
conversion_subst_indices	индексы веществ, по которым идет расчет конверсии	Массив
a_index	порядковый номер вещества для модели равновесия	Число
y0_wash	концентрации веществ жидкой фазы (кмоль/м ³), подаваемые в реактор на этапе промывки	Массив

y_rho_p	Индексы веществ, входящих в уравнение прямой реакции как реагенты	Массив
y_rho_m	Индексы веществ, входящих в уравнение обратной реакции как реагенты	Массив
number_run	количество пробегов	Число
runs_for_output	номера пробегов	Массив
cat_type	катализатор: 0 - гомогенный, 1 - гетерогенный	Число
segments	число сегментов реактора вдоль осевой координаты	Число
use_equilibrium_calculation	использовать ли расчет равновесия (логич.)	Булевый
temperature	температура, К	Число
viscosity	вязкость смеси, Па*с	Число
porosity	порозность каталитического слоя	Число
volume_of_reactor	объем реактора, м ³	Число
tau	время пребывания смеси в реакторе, с	Число
linear_v	линейная скорость смеси в реакторе, м/с	Число
M_solvent	молярная масса растворителя, кг/моль	Число
c0_ref	опорная концентрация растворителя (для пересчетов), моль/м ³	Число
assoc_factor	коэффициент ассоциативности растворителя	Число
d_characteristic	средний диаметр частиц, м	Число
t_activation	время активации катализатора, с	Число
t_washing	время промывки катализатора после активации, с	Число
tspan_II	массив отсчетов времени от начала реакции для вывода значений конверсии, с	Массив
Flow	поток инертного газа при продувке, мл/мин	Число
ftov	отношение внутренней поверхности частиц катализатора к их объему, м ² /м ³	Число
Gtot	общее число активных центров катализатора на единицу его поверхности, кмоль/м ²	Число

Таблица 2. Параметры, вводимые для моделирования жидкофазного каталитического реактора периодического действия

Название переменной	Назначение переменной	Значение переменной
A_p_1_s	Предэкспоненциальные множители прямых реакций	Массив
A_m_1_s	Предэкспоненциальные множители обратных реакций	Массив
E_p	Энергии активации прямых реакций	Массив
E_m	Энергии активации обратных реакций	Массив
M_liquid	Молярные массы жидкофазных компонентов, кг/моль	Массив
molar_volume	молярные объемы при нормальной температуре кипения для жидкофазных веществ, см ³ /моль	Массив
sigma_sites	Числа активных центров, занимаемых частицами	Массив
N_liquid	Число жидкофазных компонентов	Число
M_p	массив молярных масс, по 1 адсорбирующемуся веществу для каждой из прямых реакций	Массив
M_m	массив молярных масс, по 1 адсорбирующемуся веществу для каждой из обратных реакций.	Массив
y0_I	концентрации жидкофазных веществ в кмоль/м ³ , для поверхностных частиц - доли покрытия поверхности (б/р) для этапа активации.	Массив
y0_II	концентрации жидкофазных веществ в кмоль/м ³ , для поверхностных частиц - доли покрытия поверхности (б/р) для этапа реакции. Отрицательное число - взять итоговую концентрацию вещества после активации	Массив
conversion_subst_indices	индексы веществ, по которым идет расчет конверсии	Массив
a_index	порядковый номер вещества для модели равновесия	Число
y0_wash	концентрации веществ жидкой фазы (кмоль/м ³), подаваемые в реактор на этапе промывки	Массив
y_rho_p	Индексы веществ, входящих в уравнение прямой реакции как реагенты	Массив

y_rho_m	Индексы веществ, входящих в уравнение обратной реакции как реагенты	Массив
number_run	количество пробегов	Число
runs_for_output	номера пробегов	Массив
cat_type	катализатор: 0 - гомогенный, 1 - гетерогенный	Число
use_equilibrium_calculation	использовать ли расчет равновесия (логич.)	Булевый
temperature	температура, К	Число
viscosity	вязкость смеси, Па*с	Число
porosity	порозность каталитического слоя	Число
total_volume_mixture	общий объем смеси в реакторе, м ³	Число
M_solvent	молярная масса растворителя, кг/моль	Число
c0_ref	опорная концентрация растворителя (для пересчетов), моль/м ³	Число
assoc_factor	коэффициент ассоциативности растворителя	Число
rot_speed	скорость вращения мешалки, с ⁻¹	Число
d_stirrer	диаметр мешалки, м	Число
d_characteristic	средний диаметр частиц, м	Число
t_activation	время активации катализатора, с	Число
tspan_II	массив отсчетов времени от начала реакции для вывода значений конверсии, с	Массив
Flow	поток инертного газа при продувке, мл/мин	Число
ftov	отношение внутренней поверхности частиц катализатора к их объему, м ² /м ³	Число
Gtot	общее число активных центров катализатора на единицу его поверхности, кмоль/м ²	Число

Выходные данные

1) Файлы с кинетическими схемам и параметрами

Файлы производятся только при поиске кинетических параметров (режим RKP).

Файлы с кинетическими механизмами для каждой хромосомы создаются на каждой итерации ГА, но при сохранении всех этих файлов в рабочей директории уже по истечении нескольких сотен итераций ГА скорость работы программы значительно падает. Это связано с тем, что для выполнения некоторых команд оболочки (которые выполняются между итерациями)

система осуществляет построение дерева файлов директории, что выполняется крайне медленно при числе файлов более 1000-3000. Поэтому, текущая версия программы `mesh_optimiz`:

1. Оставляет файлы с кинетическими механизмами только при улучшении функции приспособленности (уменьшении целевой функции);

2. Делает это только для лучшей особи (1 файл);

3. Переносит этот файл в директорию `Gbest`. Файлы с кинетическими механизмами имеют вид

`G-номер_итерации-номер_хромосомы.inp`

2) Файл со значением критериев подбора

В файле `"criteria.txt"` сохраняется информация о значениях критериев, участвующих и не участвующих в подборе.

Файл сохраняется на тех итерациях ГА, где произошло улучшение целевой функции по сравнению с предыдущим лучшим (минимальным) по популяции значением. Все три критерия подбора (см. строку `ENTROPY_PRODUCTION`) выводятся последовательно по столбцам. В столбце `"fitness"` показывается значений целевой функции. Целевая функция содержит сумму только используемых критериев. Остальные критерии также рассчитываются, но их значения (выводимые в данный файл) имеют информационный характер.

3) Файлы со значениями экспериментальной конверсии и рассчитанной по модели конверсии

Сохраняются только для наилучшей особи на итерации, где произошло улучшение целевой функции (по сравнению с предыдущим лучшим значением по популяции).

Название файла содержит номер итерации метку `best` и номер особи ГА.

Расширение файла – `'csv'`, но в качестве разделителя использованы пробелы, что воспринимается по умолчанию верно большим числом утилит текстовой обработки.

Сохраняются в папке `temp` в рабочей директории расчета:

пример файла `temp/194-best-19conv-194-19.csv`

0 10 428.35 CO 0 0.000119013 O2 0 0.000134881

1 10 563.15 CO 10.22 1.80611 O2 18.63 3.98334

2 10 583.15 CO 29.06 19.1053 O2 52.83 39.6317

- Первый столбец - номер экспериментальной точки;
- Второй столбец - номер CASE;
- Третий столбец - температура, K;
- Четвертый столбец и далее (по три столбца) - газ, экспериментальное значение конверсии, значение конверсии из моделирования.

5. Сообщения

Сообщения, выдаваемые программисту или оператору в ходе выполнения программы, подразделяются на сообщения об ошибках и предупреждения.

Первый тип сообщений выдается перед аварийным завершением программы. Второй тип сообщений выдается, когда программа определяет, что некоторые введенные параметры имеют неправдоподобные значения, или когда присутствуют некоторые факторы, которые могут снизить точность расчета.

Приведем список сообщений об ошибках и их описание.

Error: Wrong file path or type: ... - ошибка означает, что указан неправильный путь к конфигурационному файлу;

Error: No forward reaction with num ... found in scheme – указывает, что алгоритм термодинамического согласования не смог найти реакцию с заданным номером в механизме поверхностных реакций. Следует изменить mech-tc.txt.

Error: No reverse reaction for reaction ... Change settings file – указывает, что нет обратной реакции для реакции с заданным номером, поэтому термодинамическое согласование невозможно (оно определено только для пар реакций из прямой и обратной);

Error: Wrong thermofile (no THERMO line specified) – указывает, что файл с термодинамическими данными имеет некорректный формат (не найден соответствующий заголовок);

Error: Mechanism scheme file is missing:"+mechfile – указывает, что не найден файл с механизмом поверхностных каталитических реакций;

Error: Substance was not declared in .inp initial file: - указывает, что вещество-частица на поверхности катализатора, встречающееся в одной из реакций, не описано в заголовке файла .inp;

Error: Size of coverage modifiers and coverage substances doesn't agree – указывает, что число данных строк с модификацией кинетических параметров в зависимости от степени покрытия поверхности адсорбатами, не согласовано;

Error: CASE/mesh number was not specified as integer for case line – указывает, что номер серии экспериментов в строке CASE не указан;

Error: More than one inert appeared in one CASE. Currently, not supported – специфицировано более одного инерта. Необходимо изменить строку CASE, оставив один инертный газ или псевдоматериал со свойствами смеси всех инертных газов.

Error: Bad conversion data length,file line ..., is ..., should be ... - неправильная длина строки со значениями конверсии. Проверьте указанную строку, число значений конверсии веществ в ней.

Error: CONVERSION lines without concentration basis units are denied: use CONVERSION_mass_fr, CONVERSION_mole_fr or CONVERSION_molar_conc instead - в строке CONVERSION не указан принцип расчета конверсии, что запрещено.

Error: Can't use honeycomb domain type for liquids - нельзя использовать расчетную область типа "honeycomb" для жидкофазных процессов;

Error: Can't use liquid_periodic domain type for gases - нельзя использовать расчетную область типа "liquid_periodic" для газофазных процессов;

Error: Can't use liquid_continuous domain type for gases - нельзя использовать расчетную область типа "liquid_continuous" для газофазных процессов;

Error: Unknown type of domain - неизвестный тип расчетной области.

Error reading cti file! Check permissions, disk space, disk system availability/responce time - нельзя считать файл cti, вероятные проблемы с чтением/местом на устройстве.

Error: Unknown conversion units - неизвестные единицы конверсии. Допустимы только CONVERSION_mass_fr, CONVERSION_mole_fr и CONVERSION_molar_conc.

Error: Cannot mix Gas solvers and Liquid solvers - нельзя смешивать газофазные и жидкофазные эксперименты в одном расчете из-за текущих ограничений.

Error: Reference solvent concentration [mol/m3] is not specified. Use REFSOLVENTCONC keyword in settings file - не указана опорная концентрация растворителя.

Error: Wrong solver ..., datapoint_num ... - неверный тип решателя.

Error: Not found four parameters after REFSOLVENTCONC keyword. To be specified: reference solvent concentration [mol/m3], solvent viscosity [Pa s], solvent association factor, solvent molar mass [kg/mol] - число параметров не равно 4 для строки REFSOLVENTCONC.

Error: Reference solvent concentration [mol/m3] is not a positive real value - концентрация растворителя не является положительным действительным числом.

Error: solvent viscosity [Pa s] is not a positive real value - вязкость растворителя не является положительным действительным числом.

Error: solvent association factor is not a positive real value - коэффициент ассоциативности растворителя не является положительным действительным числом.

Error: solvent molar mass is not a positive real value - молярная масса растворителя не является положительным действительным числом.

Error: Bad units file line ..., currently only KJOULES/MOLE & JOULES/KMOLE E units are supported - неверные единицы энергии активации для строки с указанным номером.

Error: CHECK_LIMITATIONS_LEVEL is not in 0-2 range - неправильно указано число, задающее уровень проверки диффузионных ограничений.

Error: ACTIVATION, USE_EQUIL_CALC and WASHING lines are applicable only to LIQUIDCSTRCASCADE cases - строки ACTIVATION, USE_EQUIL_CALC или WASHING назначены для газофазных процессов, что не поддерживается.

Error: Unknown type of lines before PARAMETERS section ... - неизвестное ключевое слово до строки PARAMETERS.

Error: Too many parameters in reaction parameter boundaries line (max. 4 allowed) - слишком много параметров (свыше четырех) в границах диапазона поиска параметра.

Error: Thermodynamic consistency file is missing - отсутствует файл mech-
tc.txt.

Error: Reaction ... reactant ... name ... have no thermo coeffs, though it is surf sub - нет термодинамических данных для реагента указанной реакции.

Error: Reaction ... product ... name ... have no thermo coeffs, though it is surf
sub - нет термодинамических данных для продукта указанной реакции.