Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Факультет цифровых технологий и химического инжиниринга

Кафедра информационных компьютерных технологий

**ОТЧЕТ ПО ПРАКТИЧЕСКОЙ РАБОТЕ № 7**

**ПО КУРСУ**

**«ЦИФРОВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ»:**

**«Решение прямой и обратной кинетической задачи для стационарной гетерогенно-каталитической реакции в mech optimiz»**

Ведущий преподаватель

Ст. преподаватель Скичко Е.А.

**СТУДЕНТ группы КС-20** Мелехин А.А.

**Москва**

**2024**

# **Задание**

1. Необходимо **записать модель окисления CO в виде файла .inp**. Для стадий адсорбции кинетическая константа должна рассчитываться с использованием коэффициента вероятности адсорбции. Для остальных стадий – через уравнения Аррениуса.
2. **Требуется создать конфигурационный файл mech\_optimiz и подобрать в этой программе для стадий 1-8 кинетические параметры в следующих диапазонах**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Номер стадии | A, 1/с (или б/р для sticking coefficient) | E, кДж/моль |
| 1 | 0 1 | 0 |
| 2 | 1e11 1e14 | 200 400 |
| 3 | 0 1 | 0 |
| 4 | 1e11 1e14 | 80 140 |
| 5 | 1e10 1e13 | 80 160 |
| 6 | 1e12 1e15 | 30 180 |
| 7 | 1e-3 0.6 | 0 |
| 8 | 5e10 1e13 | 20 150 |

Включить критерий термодинамической непротиворечивости при подборе.

1. Построить график конверсии реагента CO (эксперимент –точками, моделирование – линией без точек). Найти среднее значение абсолютной ошибки по конверсии CO.
2. Если средняя абсолютная ошибка более 10%, то необходимо увеличить диапазон поиска по значениям энергии активации реакций и повторить поиск. Снова выполнить пункт 3.
3. Сделать выводы по работе: для какой реакции, какие кинетические параметры подбирали, какое значение абсолютной ошибки по конверсии CO удалось достичь.

Плотность активных центров (Surface site density), кмоль/м2

|  |  |
| --- | --- |
| Rh | 2.77e-08 |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Вариант | Длина реактора, мм | Диаметр реактора, мм | Катализатор | Feed (N2 до 100%) | | | **U, K** | mкат., г | SBET, м2/г |
| CO% | O2% | расход (STP), мл/мин |
| 14 | 130 | 16 | Rh | 4 | 2 | 500 | **620** | 0.2 | 80 |

Получены следующие данные эксперимента

|  |  |
| --- | --- |
| Температура, K | Конверсия CO, % |
| U | 1 |
| U+20 | 3 |
| U+40 | 7 |
| U+60 | 26 |
| U+70 | 50 |
| U+75 | 90 |
| U+80 | 99.9 |

U – см. по вариантам ниже.

Порозность катализатора 42%. Средний размер частиц 150 мкм.

Известен механизм окисления – L-H-типа с диссоциативной адсорбцией кислорода:

**Теоретическое обоснование решения**

**Катализ** – явление ускорения химической реакции в присутствии вещества – катализатора, который участвует в реакции, но не расходуется в ней.

**Гетерогенный катализ** - катализатор и участники реакции находятся в разных фазах, реакция происходит на границе раздела фаз.

**Стадии гетерогенной реакции:** адсорбция, поверхностная реакция, десорбция.

**Брутто-реакция** – суммарная реакция от реагентов до продуктов, запись которой не включает промежуточные вещества. Уравнения брутто-реакций можно получить путем сложения стадий реакции с необходимыми коэффициентами для исключения промежуточных веществ.

**Механизм реакции** – детальная последовательность шагов, приводящих к реакции (каталитическому циклу). Может быть несколько возможных механизмов у одной реакции.

**Гетерогенные катализаторы** – это обычно твердые вещества, металлы и их оксиды. К металлам, широко используемым в катализе относят благородные металлы (Pt, Pd, Rh, и, в меньшей степени – Au, Ru, Ir, Ag), переходные металлы (Ni, Со, Сu, Fe). Реагенты и продукты в гетерогенном катализе обычно находятся в газовой фазе, иногда – в жидкой. Гетерогенные катализаторы, как правило, имеют кристаллическую структуру и являются поликристаллами – то есть, их поверхность представлена различными кристаллографическими плоскостями. Кристаллы не идеальны и содержат различные дефекты.

**Результаты расчетов**

Здесь приводится результат работы программы – ответ задачи, строятся необходимые графики и даются пояснения к результатам. При необходимости, если указано в задании, даются ответы на вопросы задания и делаются выводы.

Отчет оформляется по данному образцу с полями, отступом красной строки, выравнивание по ширине, 14 пт шрифт.