**Лабораторная работа 8 по ЦМФХС. Подбор параметров детального кинетического механизма реакции окисления CO на металлическом катализаторе. Автор Митричев И.И.**

Исследовали окисление CO на металлическом порошковом катализаторе в трубчатом лабораторном реакторе. Конверсию CO при заданной температуре измеряли на выходе из реактора.

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:

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 |
| Ni | 2.66e-08 |
| Pt | 2.72e-08 |
| Pd | 1.95e-08 |

Данные о реакторе приведены по вариантам

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 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 |
| 1 | 40 | 10 | Ni | 10 | 5 | 4070 | **800** | 0.2 | 154.7 |
| 2 | 60 | 12 | Ni | 5 | 3 | 4000 | **770** | 0.1 | 144 |
| 3 | 50 | 10 | Pt | 2 | 1.5 | 200 | **420** | 0.1 | 100 |
| 4 | 50 | 10 | Pt | 2 | 1 | 200 | **440** | 0.12 | 100 |
| 5 | 40 | 8 | Rh | 2 | 1.5 | 400 | **600** | 0.2 | 100 |
| 6 | 30 | 8 | Rh | 2 | 1 | 400 | **620** | 0.1 | 120 |
| 7 | 40 | 12 | Pd | 2 | 1.5 | 400 | **590** | 0.2 | 100 |
| 8 | 30 | 6 | Pd | 2 | 1 | 400 | **620** | 0.1 | 120 |
| 9 | 100 | 10 | Ni | 2 | 1 | 3350 | **770** | 0.1 | 80 |
| 10 | 160 | 12 | Ni | 3 | 1 | 3800 | **760** | 0.2 | 80 |
| 11 | 150 | 10 | Pt | 2 | 1 | 200 | **420** | 0.2 | 80 |
| 12 | 120 | 10 | Pt | 2 | 2 | 200 | **440** | 0.2 | 80 |
| 13 | 140 | 15 | Rh | 1 | 0.5 | 600 | **600** | 0.1 | 80 |
| 14 | 130 | 16 | Rh | 4 | 2 | 500 | **620** | 0.2 | 80 |
| 15 | 100 | 12 | Pd | 8 | 4 | 500 | **590** | 0.1 | 80 |
| 16 | 80 | 10 | Pd | 3 | 1.5 | 400 | **620** | 0.2 | 80 |
| 17 | 140 | 10 | Ni | 10 | 20 | 400 | **680** | 0.15 | 112 |
| 18 | 130 | 10 | Ni | 2 | 12 | 400 | **700** | 0.25 | 80 |
| 19 | 100 | 10 | Pt | 10 | 5 | 400 | **400** | 0.25 | 154.7 |
| 20 | 100 | 10 | Pt | 10 | 8 | 400 | **430** | 0.25 | 80 |
| 21 | 80 | 15 | Rh | 10 | 5 | 400 | **580** | 0.15 | 154.7 |
| 22 | 80 | 15 | Rh | 14 | 7 | 400 | **610** | 0.25 | 80 |
| 23 | 150 | 15 | Pd | 4 | 2 | 400 | **570** | 0.15 | 112 |
| 24 | 120 | 15 | Pd | 10 | 10 | 400 | **600** | 0.25 | 80 |
| 25 | 100 | 10 | Ni | 5 | 2.5 | 1000 | **720** | 0.2 | 110.5 |
| 26 | 100 | 10 | Ni | 3 | 2 | 700 | **700** | 0.1 | 60.3 |
| 27 | 150 | 20 | Pt | 5 | 2.5 | 1000 | **470** | 0.1 | 110.5 |
| 28 | 150 | 20 | Pt | 3 | 2 | 700 | **450** | 0.1 | 60.3 |
| 29 | 120 | 10 | Rh | 5 | 2.5 | 800 | **550** | 0.2 | 110.5 |
| 30 | 120 | 10 | Rh | 3 | 2 | 600 | **600** | 0.1 | 60.3 |
| 31 | 80 | 5 | Pd | 5 | 2.5 | 800 | **600** | 0.1 | 110.5 |
| 32 | 80 | 5 | Pd | 3 | 2 | 600 | **620** | 0.1 | 60.3 |
| 33 | 140 | 20 | Ni | 5 | 2.5 | 450 | **720** | 0.3 | 100 |
| 34 | 130 | 20 | Ni | 3 | 2 | 450 | **700** | 0.3 | 50 |
| 35 | 100 | 20 | Pt | 5 | 2.5 | 450 | **470** | 0.3 | 50 |
| 36 | 100 | 20 | Pt | 3 | 2 | 450 | **450** | 0.3 | 100 |
| 37 | 80 | 7 | Rh | 5 | 5 | 600 | **520** | 0.3 | 100 |
| 38 | 80 | 7 | Rh | 3 | 2 | 500 | **500** | 0.3 | 50 |
| 39 | 150 | 7 | Pd | 5 | 2.5 | 420 | **580** | 0.3 | 50 |
| 40 | 120 | 7 | Pd | 3 | 2 | 350 | **550** | 0.3 | 100 |
| 41 | 40 | 7 | Ni | 5 | 8 | 600 | **750** | 0.3 | 200 |
| 42 | 50 | 7 | Ni | 6 | 8 | 500 | **720** | 0.16 | 140 |
| 43 | 200 | 10 | Pt | 5 | 5 | 420 | **390** | 0.16 | 170 |
| 44 | 60 | 10 | Pt | 5 | 5 | 350 | **460** | 0.16 | 170 |
| 45 | 200 | 15 | Rh | 5 | 5 | 370 | **520** | 0.16 | 120 |