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 № 1**

**ПО КУРСУ**

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

**«Энтальпия»**

Ведущий преподаватель

к.т.н., доцент: Митричев И.И.

**СТУДЕНТ группы КС-24** Стариковский Е.Д

**Москва**

**2025**

# **Задание**

Проверка термодинамической согласованности данных термодинамики и кинетики

44. Cu(s) + 2CeO2(s) => OCu(s) + Ce2O3(s4)

Необходимо рассчитать значения энтальпии реакции с помощью полинома NASA при 9 значениях температуры, выбранных равномерно на интервале 300-700 K

Построить график, показывающий, как согласуются рассчитанные значения с данным в задаче средним значением энтальпии реакции.

Данное среднее значение: 44. -146608

# **Теоретическое обоснование решения**

Чтобы рассчитать изменение энтальпии реакции с помощью полинома NASA, нам изначально необходимо рассчитать значения энтальпии каждого вещества в реакции:



где - стандартная энтальпия при заданной температуре, Дж/моль,

- универсальная газовая постоянная (8, 314) Дж/(моль\*K)

- коэффициенты NASA

-температура, К

Далее определяем, какие вещества являются реагентами, а какие продуктами, чтобы рассчитать изменение энтальпии реакции:



Где - стехиометрический коэффициент вещества j, претерпевающего фазовый переход, в реакции его образования из простых веществ

Для получения среднего значения энтальпии рассчитываем при 9 равномерно выбранных температурах в диапазоне 300–700 К.

# **Код**

Необходимые входные данные:

1. Химическая реакция
2. Коэффициенты NASA
3. Диапазон температур, количество разбиений
4. Среднее значение энтальпии (для сравнения)

H\_CALC = -146608  
  
 r = Reaction('Cu(s) + 2CeO2(s) => OCu(s) + Ce2O3(s4)')

nasa\_db.add\_NASA\_data(['Cu(s) 1.26197231e+00 4.26967664e-02 1.30712943e-04 3.68506950e-07 5.30399514e-10 6.96301194e+04 2.63361694e+01','CeO2(s) -1.63411394E+00 5.66371664E-02 -1.19093012E-04 1.15302125E-07 -4.19956349E-11 -1.32290149E+05 4.27394897E+00','OCu(s) 1.36115275e+00 5.02199263e-02 1.13048080e-04 3.88756174e-07 5.21858896e-10 3.41161831e+04 3.11076831e+01', 'Ce2O3(s4) -3.40581257e+00 1.04207810e-01 -2.16250767e-04 2.05489755e-07 -7.33505319e-11 -2.46529303e+05 6.79746734e+00'])

n = 8  
 step = int(700 - 300) // n

for kelvin in range(300, 700 + 1, step):

...

Выходные данные:

1. График зависимости энтальпии от температуры
2. Рассчитанная средняя энтальпия
3. Абсолютная ошибка
4. Относительная погрешность

# **Результаты расчетов**

Результаты расчётов показали, что среднее значение энтальпии реакции составляет-145985.85 Дж/моль, что отличается от значенияполученного исследователем = -146608 Дж/моль на 622 Дж/моль. Относительная погрешность составила - 0.42%

Графический анализ зависимости энтальпии от температуры показал, что рассчитанные значения изменяются в соответствии с теоретическими ожиданиями, демонстрируя стабильное поведение во всём диапазоне температур. Относительная погрешность свидетельствует о точности используемой методики и возможности её дальнейшего уточнения. Чем более сложной и изогнутой является зависимость (например, при нелинейном поведении), тем выше ошибка при расчете среднего значения.

Таким образом, практическая работа подтвердила применимость полиномов NASA для расчёта термодинамических свойств веществ и дало количественную оценку точности метода.