МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ КИНЕТИКИ КАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

@ К.Ф. Коледина, С.Н. Коледин, И.М. Губайдуллин
koledinakamila@mail.ru, koledinsrg@gmail.com, irekmars@mail.ru

УДК 517.977.58

DOI: 10.33184/mnkuomsh2t-2021-10-06.80.

Математическое описание кинетики каталитических реакций позволяет поставить и решить задачу определения кинетических параметров и механизма химической реакции, то есть разработать кинетическую модель

Ключевые слова: кинетическая модель, системы дифференциальных уравнений, математическое описание

Mathematical description of the kinetics of catalytic reactions

The mathematical description of the kinetics of catalytic reactions makes it possible to formulate and solve the problem of determining the kinetic parameters and the mechanism of a chemical reaction, that is, to develop a kinetic model

Keywords: kinetic model, systems of differential equations, mathematical description

Основными терминами кинетического моделирования каталитических реакций является:

- 1) реагенты процесса: исходные компоненты, катализатор, промежуточные вещества, продукты реакции (целевые и побочные).
- 2) переменные процесса: независимые (имеют детерминированное значение для каждого эксперимента – время протекания реакции, начальные значения по реагентам, температура и т.д.), зависимые (характеризуют течение реакции – текущие концентрации реагентов, температура (для неизотермического процесса) и др.);

Работа выполнена по теме «Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами» (Регистрационный номер: АААА-А19-119022290011-6).

Коледина Камила Феликсовна, к.ф.-м.н., н.с. ИНК УФИЦ РАН (Уфа, Россия), доцент УГНТУ (Уфа, Россия); Kamila Koledina (Institute of petrochemistry and catalysis RSA, Ufa, Russia, Ufa State Technological Petroleum University, Ufa, Russia)

Коледин Сергей Николаевич, к.ф.-м.н., доцент УГНТУ (Уфа, Россия); Sergey Koledin (Ufa State Technological Petroleum University, Ufa, Russia)

Губайдуллин Ирек Марсович, д.ф.-м.н., в.н.с. ИНК УФИЦ РАН (Уфа, Россия), профессор УГНТУ (Уфа, Россия); Irek Gubaydullin (Institute of petrochemistry and catalysis RSA, Ufa, Russia, Ufa State Technological Petroleum University, Ufa, Russia)

- 3) параметры процесса: параметры, включенные в кинетическую модель – энергии активации стадий, предэкспоненциальные множители, константы скоростей стадий, параметры адсорбции процесса;
- 4) кинетические уравнения – уравнения скоростей стадий;
- 5) механизм реакций – представление химической реакции через элементарные или брутто стадии;
- 6) кинетическая модель – сочетание схемы химических превращений реакции, значений кинетических параметров, физико-химических выводов по реакции.

Уравнения химической кинетики, составленные для описания реакций – система обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений для модели изотермической нестационарной реакции, протекающей без изменения объема реакционной смеси в закрытой системе по закону действующих масс (1). Для гомогенных реакций, и в случае, если реакция протекает при невысоких давлениях и температурах, допускается, что процесс описывается Аррениусовской кинетикой [1, 2]:

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{j=1}^J \nu_{ij} w_j, i = 1, \dots, I; w_j = k_j \prod_{i=1}^I x_i^{|\alpha_{ij}|} - k_{-j} \prod_{i=1}^I x_i^{\beta_{ij}}; k_j = k_j^0 \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right); \quad (1)$$

с начальными условиями: при $t = 0, x_i(0) = x_i^0; t \in [0, t^*]$; где ν_{ij} – стехиометрические коэффициенты; J – количество стадий, x_i – концентрации веществ участвующих в реакции, моль/л; I – количество веществ; w_j – скорость j -ой стадии, 1/мин; E_j – энергии активации прямой и обратной реакций, ккал/моль; R – газовая постоянная, равная 8,31 Дж/(моль $\times$ К); T – температура, К; α_{ij} – отрицательные элементы матрицы (ν_{ij}), β_{ij} – положительные элементы (ν_{ij}), k_j^0 – предэкспоненциальные множители, 1/с; t^* – время проведения реакции, с.

Для каталитических реакций, протекающих с изменением температуры необходим учет термодинамических параметров. При исследовании гетерогенных процессов математическая модель разрабатывается на основе механизма Ленгмюра-Хиншельвуда по закону действующих поверхностей с допущением о равномерном распределении активных центров и их равномерной активности). Для нестационарной реакции в математическое описание вводится учет изменения объема реакционной смеси.

Литература

1. Димитров В.И. Простая кинетика // Новосибирск: Наука и жизнь, 1982, 380 с.
2. Спивак С.И., Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М. Инфор-

мационно-вычислительная аналитическая система теоретической оптимизации каталитических процессов // Прикладная информатика (2017). Т. 12 №1 (67) — С. 39-49.