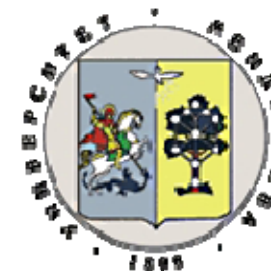


***Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева***



Факультет информационных технологий и управления

**Кафедра информационных компьютерных
технологий**



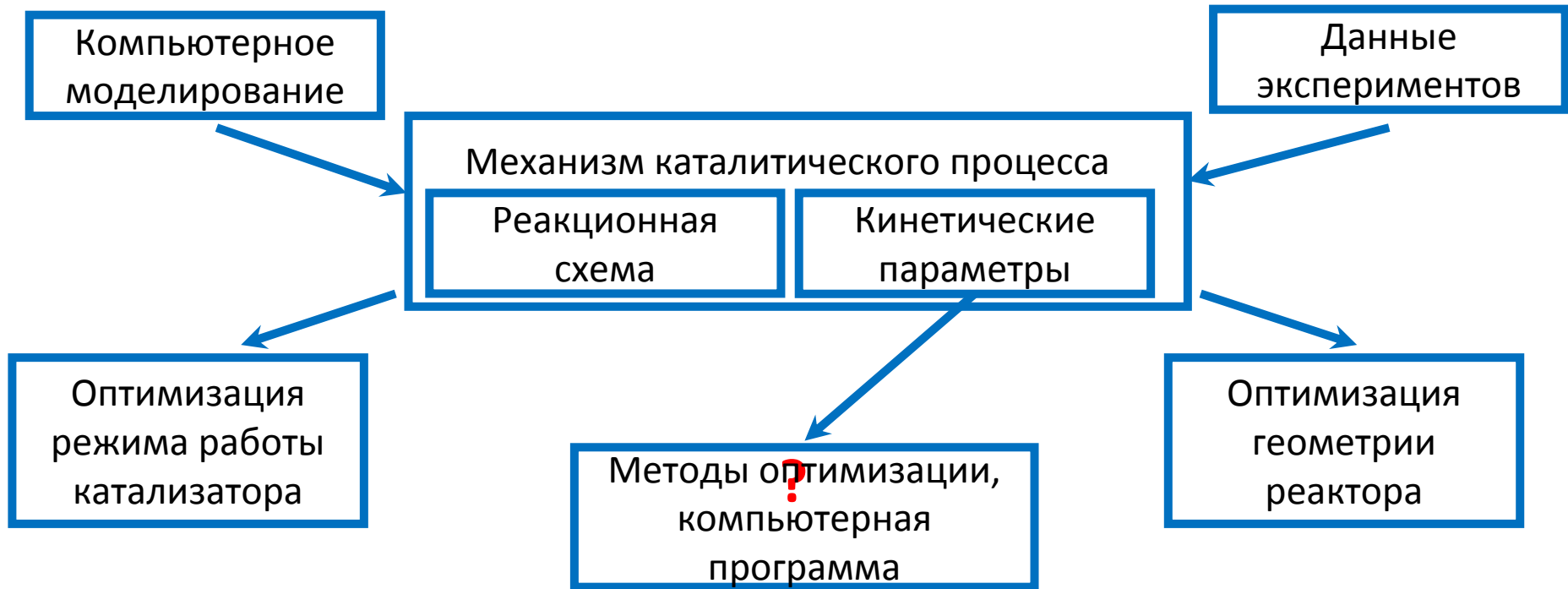
**Разработка
параллельного программного обеспечения
для нахождения параметров
детальных кинетических механизмов**

аспирант Митричев И.И.

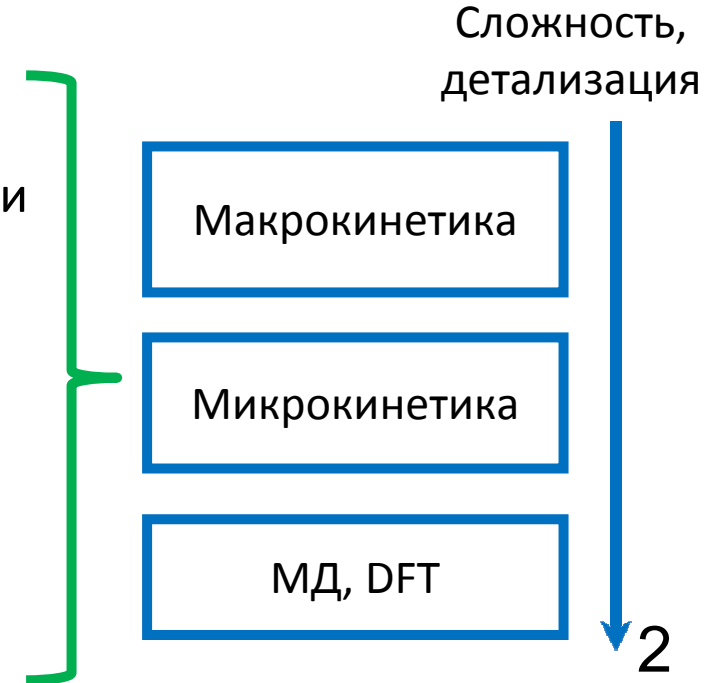
научные руководители доц. Женса А.В.,

проф. Кольцова Э.М.

Москва 2013



- степень окисления активных центров
- различная дисперсность частиц на поверхности
- образование кластеров
- образование твердых растворов
- различное количество решеточных дефектов
- различная площадь поверхности
- внутренняя диффузия в микропорах



Структура генетического алгоритма

$$X_u - ? : \Phi(X_u, X_k) = \sum_i w_i [Y_{\text{модел.},i}(X_u, X_{ki}) - Y_{\text{эксп.},i}]^2 \rightarrow \min$$

$$X_{u,\text{нижн}} \leq X_u \leq X_{u,\text{верхн}} \quad u = 1..U$$

U – число неизвестных параметров кинетического механизма

X – вектор переменных, X_u – неизвестные, X_k – известные, X_s – вспомогательные

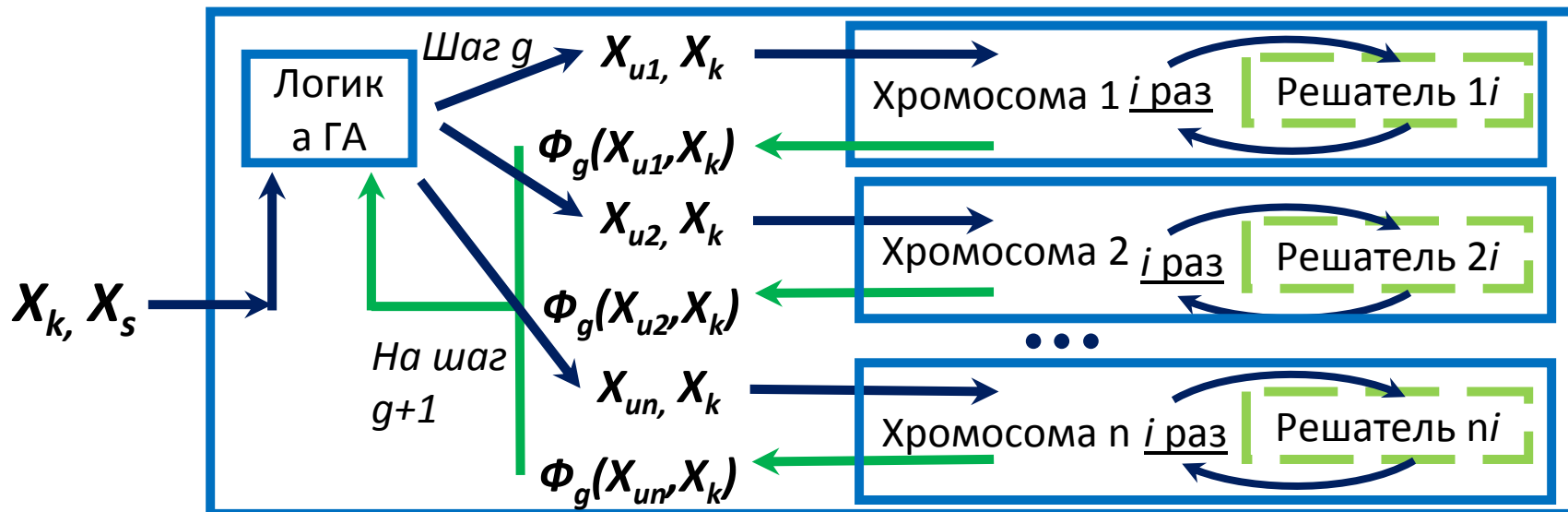


Схема работы программы

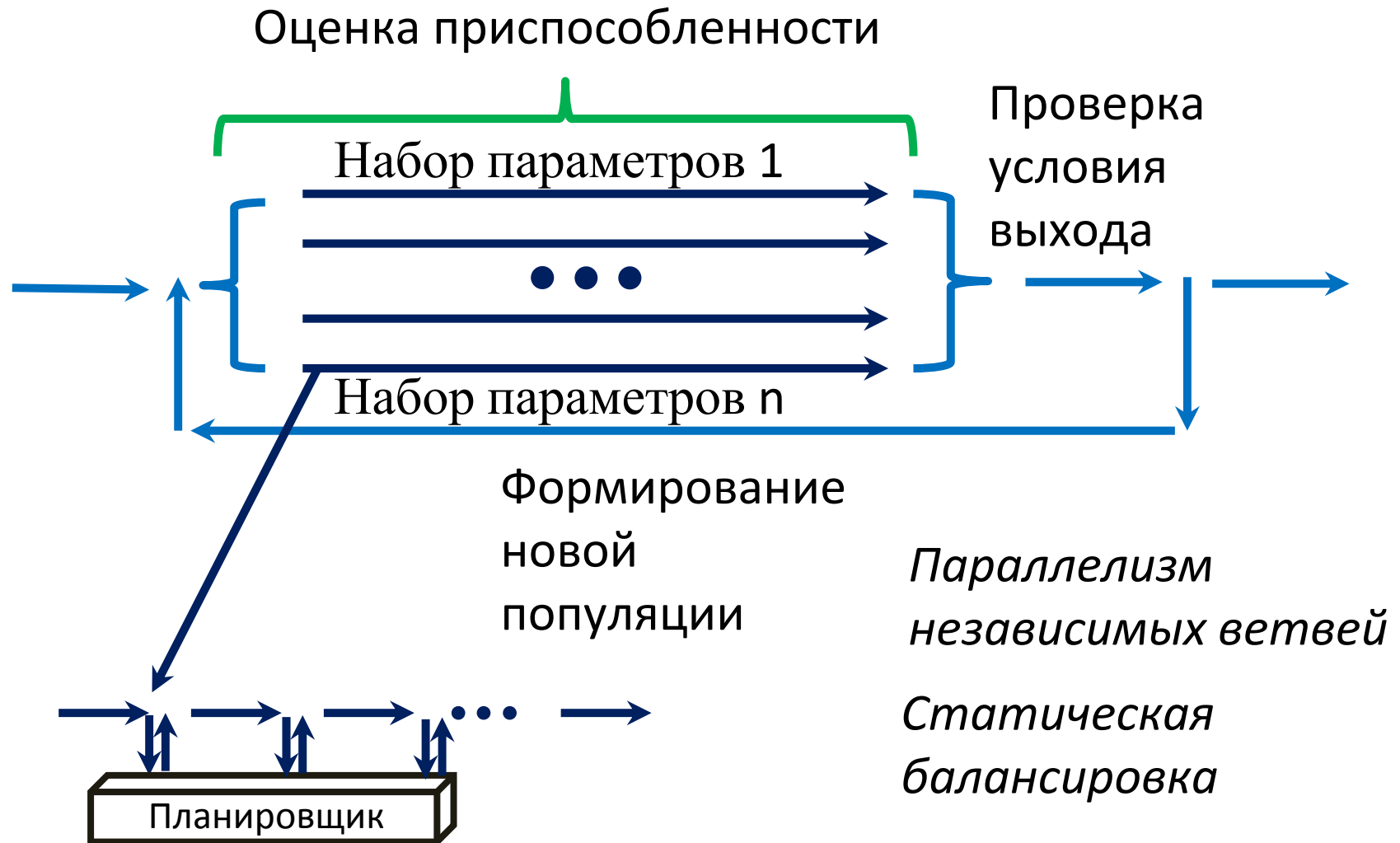
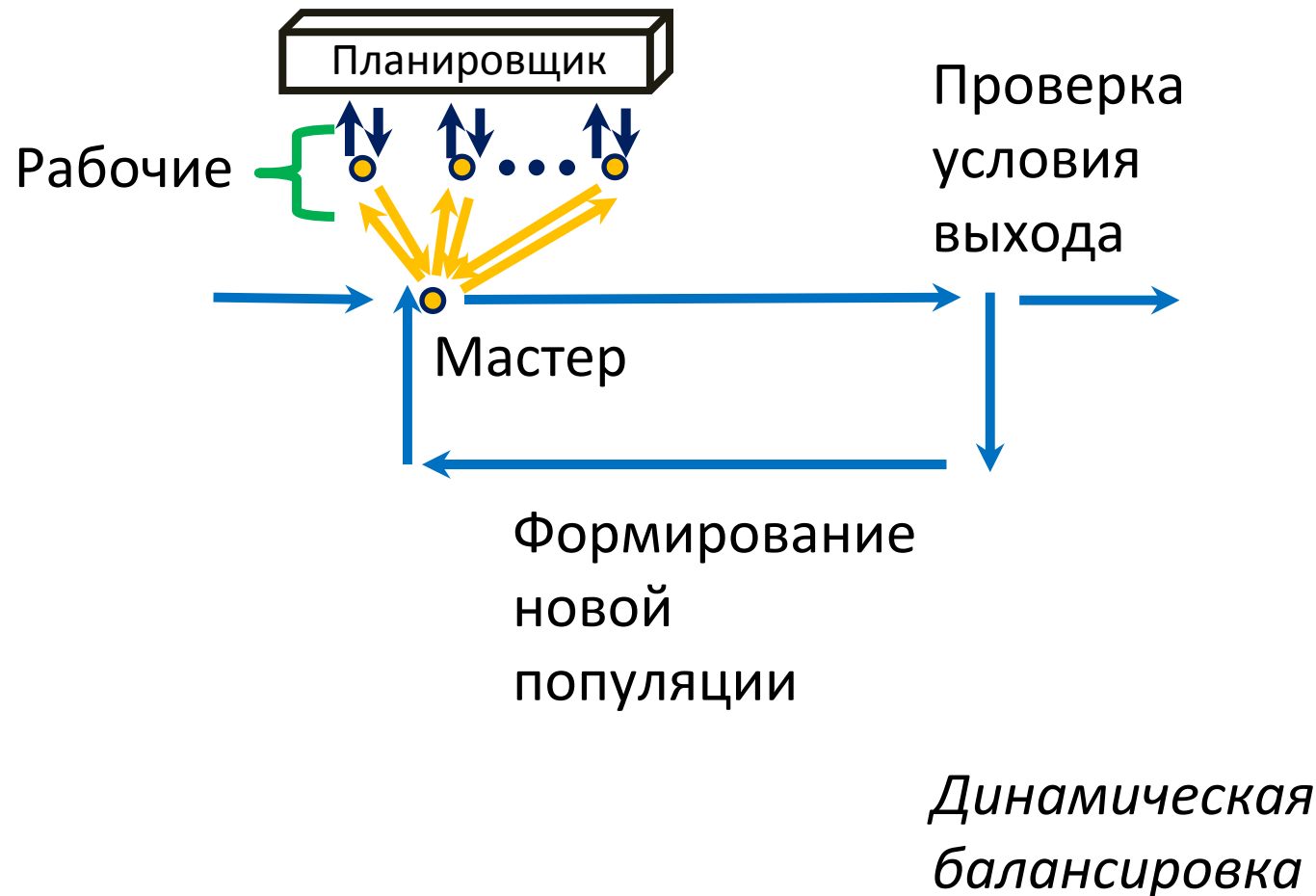


Схема работы программы

Оценка приспособленности

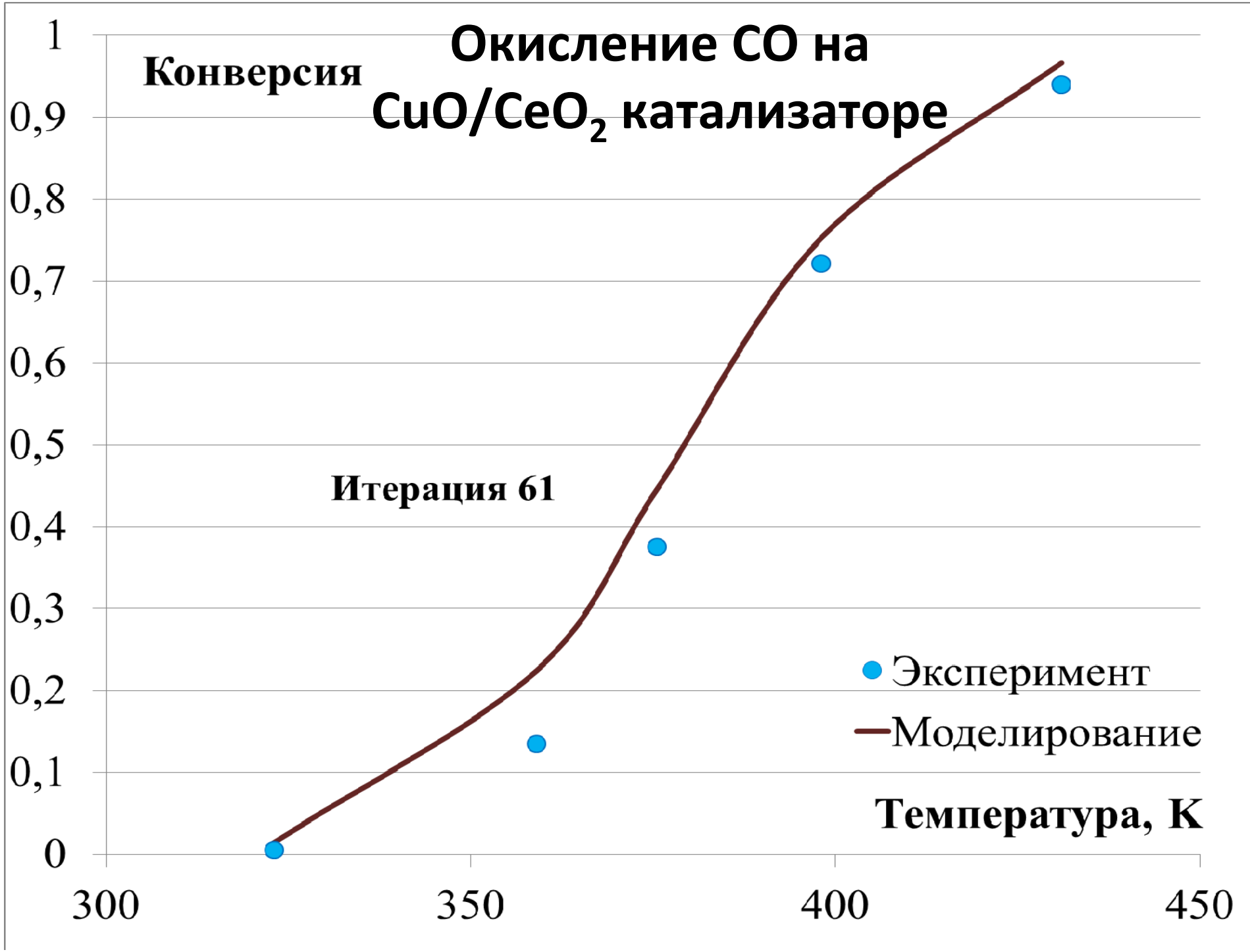


Конверсия Окисление CO на CuO/CeO₂ катализаторе

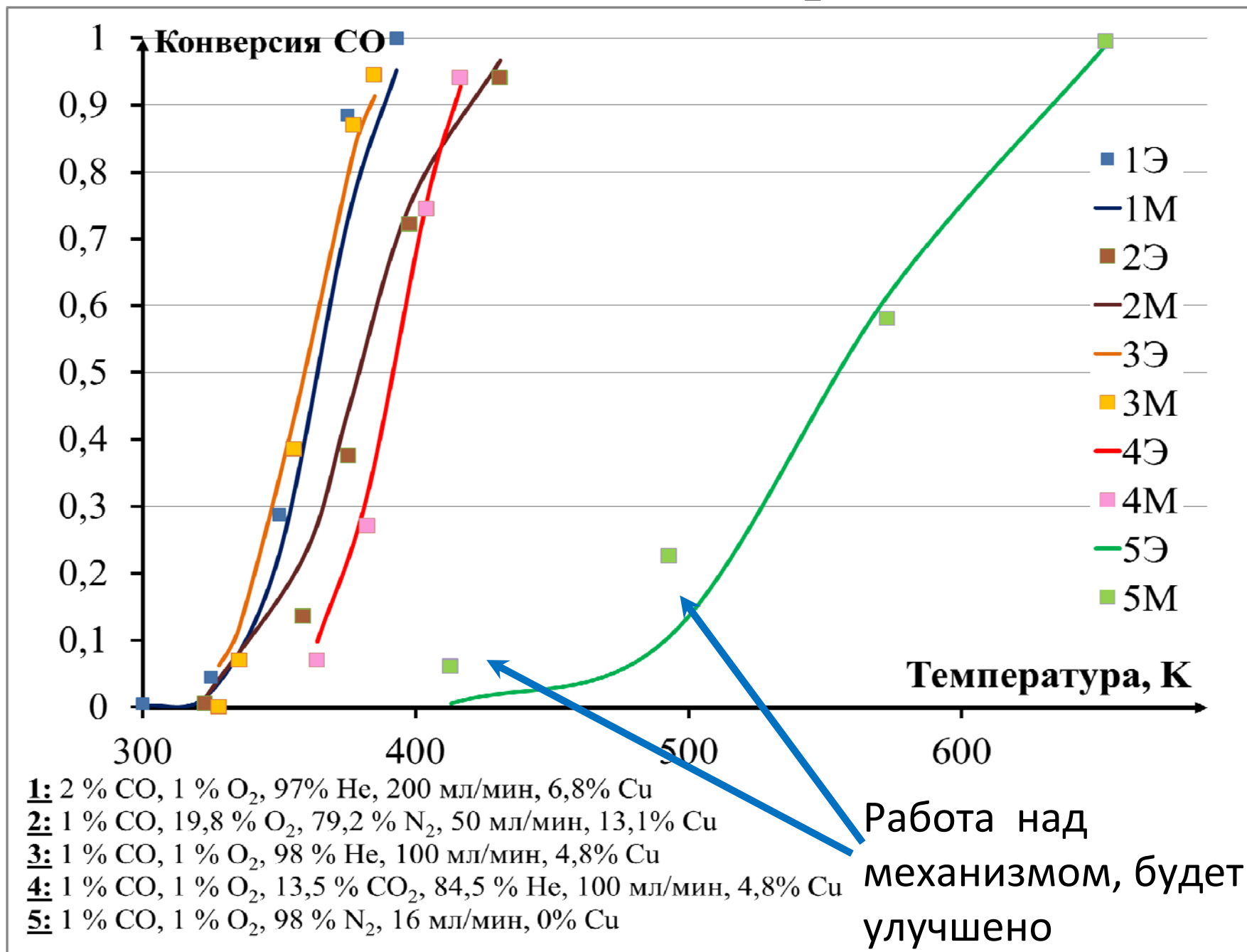
Итерация 61

● Эксперимент
— Моделирование

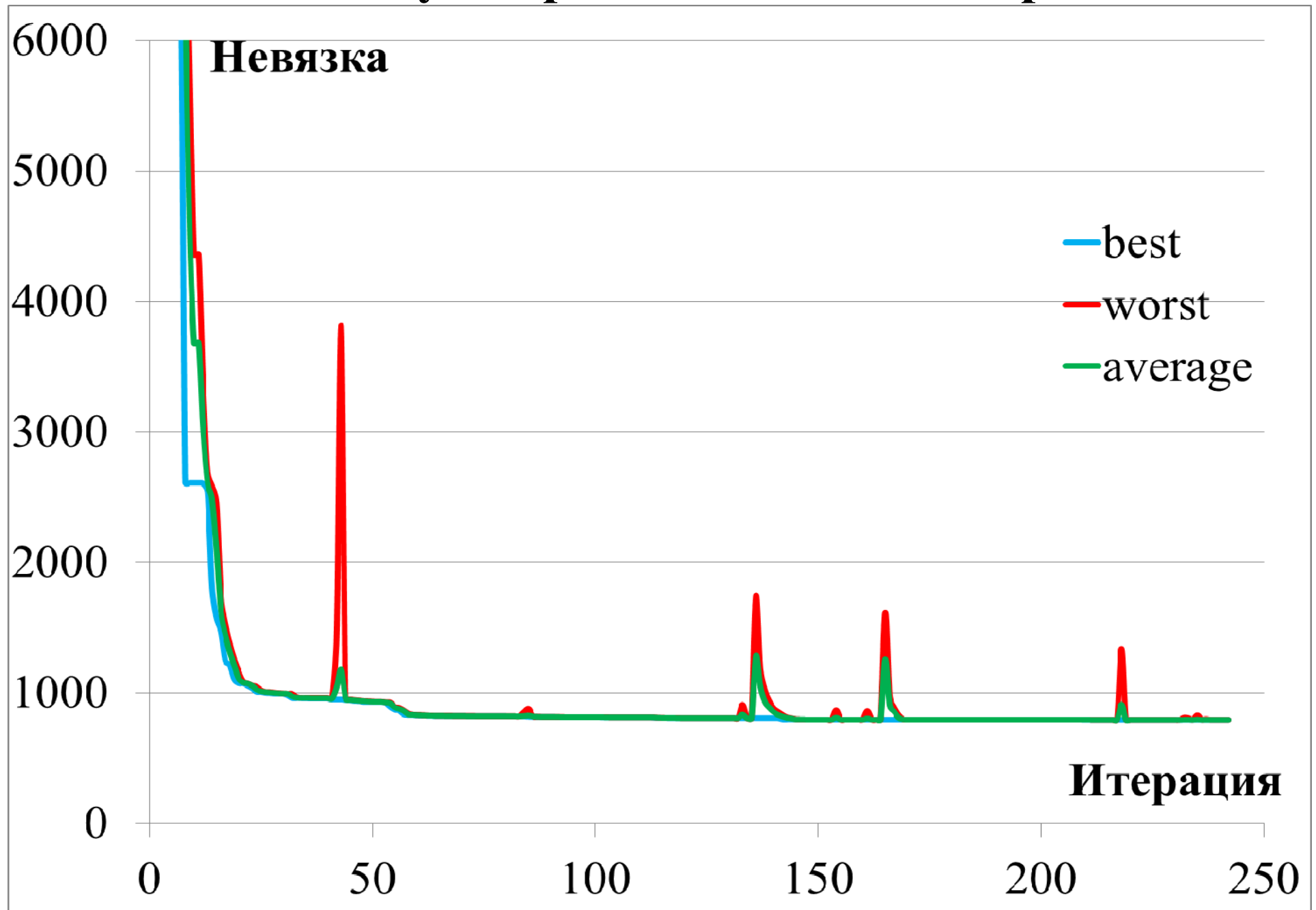
Температура, К



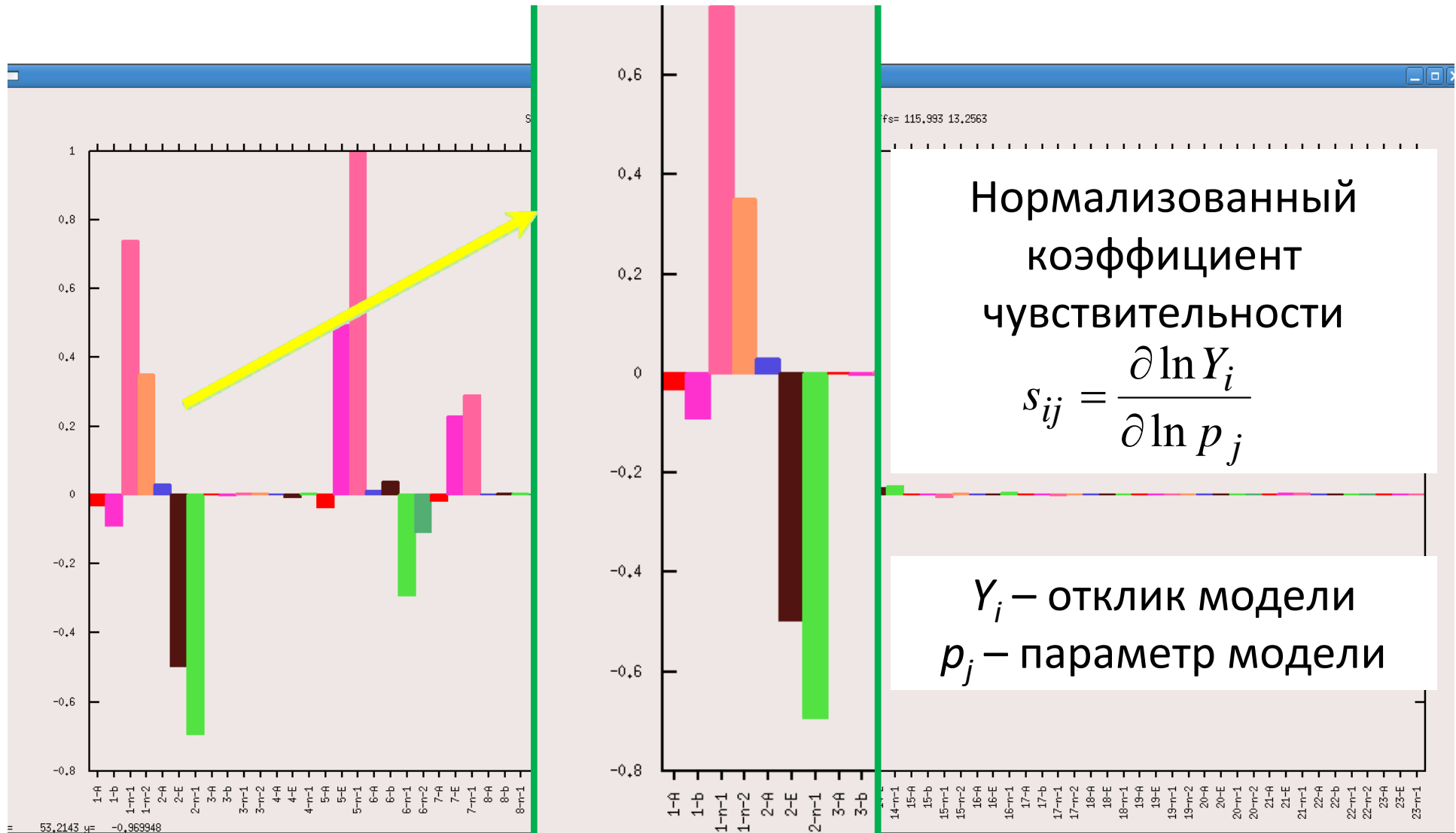
Окисление CO на CuO/CeO₂ катализаторах



Зависимость суммарной невязки от итерации ГА 8



Анализ чувствительности



Термодинамическая совместность

$$\frac{k_{fk}}{k_{rk}} = K_{pk} \prod_i (c_i^0)^{\nu_{ik}} \quad - \quad \text{термодинамическая связанность прямой и обратной реакции}$$

$$K_{pk} = e^{-\Delta_k G^0 / RT} \quad - \quad \text{константа равновесия}$$

$$\Delta_k G^0 = \sum_i \nu_{ik} G_i^0(T) \quad - \quad \text{изменение энергии Гиббса химической реакции}$$

Энергия Гиббса вещества при конкретной температуре, для газофазных веществ – табулированы, для поверхностных интермедиатов – неизвестны.

Оценка с помощью МНК, модификация кинетического механизма

Спасибо за внимание