

Reakciókinetikai modellezés

Turányi Tamás

beadandó: 2020. október 7., szerda, 24:00

1. A CHEMKIN-II programcsomag „ckinterp” programja a szövegfileban megadott mechanizmusfile-ból binárisan tárolt reakciómechanizmust készít. Futtassa le a ckinterp-et Windows operációs rendszer alatt, a command (cmd) ablakban:

> ckinterp

input: chem.inp (a mechanizmust tartalmazó szövegfile)
output 1: chem.out (ezt értette meg a ckinterp; szövegfile)
output 2: chem.bin (a mechanizmust tartalmazó bináris file)

2. A CHEMKIN-II programcsomag „senkin” programja térben homogén gázkinetikai szimulációt végez. Futtassa le a senkin-t Windows operációs rendszer alatt, a command (cmd) ablakban:

> senkin <senkin.inp >senkin.out

input1: chem.bin (a mechanizmust tartalmazó bináris file)
input2: senkin.inp (a szimulációs körülményeket leíró szövegfile)

output 1: senkin.out (a bemenő adatok kiírása + számított t - T adatpárok)
output 2: tign.out (számított t , p , T és koncentráció adatok)
output 3: save.bin (a megoldás bináris fileként elmentve)

Origin-ábrázoláshoz létrehozott file-ok (az első sor a fileban a változók neve):

output 4: konc_c_molcm3.txt (a koncentrációk mol cm⁻³ egységben)
output 5: konc_c_x.txt (a koncentrációk móltörtben)
output 6: konc_c_dbcm3.txt (a koncentrációk molekula cm⁻³ egységben)

A „senkin.inp” jelentése:

CONV	állandó térfogatú adiabatikus rendszer szimulációja
TEMP 1200	a kezdeti hőmérséklet 1200 K
PRES 1	a kezdeti nyomás 1 atm
REAC H2 2	a H ₂ , O ₂ és N ₂ kezdeti koncentrációk aránya
REAC O2 1	
REAC N2 3.76	
TIME 1	a végső idő 1 másodperc
DELT 1E-9	a kezdeti időlépcső 10 ⁻⁹ másodperc
ATOL 1E-20	abszolút tolerancia (= megengedett hiba) a számított koncentrációkra
ATLS 1E-20	abszolút tolerancia (= megengedett hiba) a számított érzékenységi együtthatókra
RTOL 1E-09	relatív tolerancia (= megengedett hiba) a számított koncentrációkra
RTLS 1E-09	relatív tolerancia (= megengedett hiba) a számított érzékenységi együtthatókra
END	

3. Személyre szabott feladat megoldása:

Végezzen el szimulációkat a következő modellezési körülményekre (állandó térfogatú adiabatikus rendszer):

A reakcióelegy csak H_2 és O_2 (kezdetben nem tartalmaz egyéb anyagfajta).

A végső idő 1 másodperc.

ϕ a tüzelőanyag ekvivalenciaarány: $\phi = (n_T/n_O)_{\text{elegyben}} / (n_T/n_O)_{\text{sztöchiometrikus}}$

T: tüzelőanyag, O: oxidálószer

Név	Neptun kód	T K	p atm	ϕ
Baglyas Márton	W8E8MU	1000	1	0,5
Forray Dániel András	VZSTAB	1000	1	0,7
Kozma Balázs	E3ZBMN	1000	1	1,0
Széles Bence	ABFUBF	1000	1	1,2
Varga Péter Tibor	VBGDE2	1000	1	1,5
Szirmai Ádám Barnabás	AMSRPY	1000	1	2,0
Tulipán Levente Zsolt	J7NFRD	1000	1	3,0

Beadandó:

1. Origin ábrarozat, amely bemutatja az „idő – hőmérséklet” és az összes „idő – anyagfajta móltörtje” függvényét. A tengelyeket úgy kell megválasztani, hogy legyenek jól láthatók a változások. Értelmezze a kapott függvényalakokat! Egyes koncentráció – idő függvények több szélsőértéket is mutathatnak. Mi ennek a kémiai oka?

2. Végezze el a számításokat úgy, hogy az oxidálószer

a) 100 % O_2

b) 21% O_2 , 79% N_2

c) 21% O_2 , 79% Ar

d) 21% O_2 , 79% He

e) 21% O_2 , 79% H_2O

Használja minden esetben a kapott T kezdeti hőmérsékletet, p nyomást és ϕ ekvivalenciaarányt!

Hogyan változik a gyulladási idő és a végső hőmérséklet a kezdeti elegyösszetétellel és miért?

Az eredmények értelmezésénél használja ezeket az adatokat:

A hígítógázok állandó térfogaton vett moláris hőkapacitása ($\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$):

N_2 : 24.37, Ar: 12.48, He: 12.48, H_2O : 32.98

A hígítógázok relatív ütközési hatékonysági együtthatója a $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$ reakciólépésben: $m(\text{N}_2) = 1$, $m(\text{Ar}) = 0.54$, $m(\text{He}) = 0.65$, $m(\text{H}_2\text{O}) = 12.03$

3. Mi a legalacsonyabb kezdeti hőmérséklet, ahol még bekövetkezik a gyulladás 1 másodpercen belül az a)-e) oxidálószer elegynél?

10 K pontossággal elég megadni.

4. Hogyan változik a végső hőmérséklet és hogyan a gyulladási idő az eredetileg kapott elegyösszetételnél és kezdeti hőmérsékletnél, ha a nyomást változtatja (logaritmikus skálán) a 10^{-3} atm – 100 atm tartományban? Vegyen fel logaritmikus skálán egyenletes felosztásban 15 nyomáspontot! Mi a kapott eredmények magyarázata?

Kérem küldjék el a turanyi@chem.elte.hu e-mail címre az eredeti feladathoz tartozó „konc_c_molcm3.txt” file-t és ezen kívül az egyetlen Word (vagy .pdf) file-t, amely tartalmazza az összes ábrát és azok értelmezését.