

СЕКЦІЯ 28. КОМП'ЮТЕРНИЙ МОНІТОРИНГ І ЛОГІСТИКА

ОБЗОР КИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ УГАРНОГО ГАЗА

Ведь Е.В.

*Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт», г. Харьков*

Исследование проблем каталитического окисления угарного газа стало одним из краеугольных камней в современной науке. Связано это не только с высоким значением этого процесса для промышленности как, например, защита окружающей среды от вредных выбросов со значительным содержанием СО, а также экономия энергоресурсов, необходимых для обеспечения адекватных очистных мероприятий.

Проблема эффективного протекания таких химических реакций на поверхностях металлических катализаторов охватывает достаточно широкий спектр научных задач. К сожалению, до сих пор нет универсальных физических моделей, которые позволяли бы одновременно точно и легко связать результаты теоретических и практических исследований на основе простой для применения математической модели. Одним из важных аспектов, что, в частности, определяет существенную сложность моделирования, является численное решение поставленных задач. Поэтому данная тема является одинаково актуальной с точки зрения и физики, и химии, и математики.

Целью данной работы является представление ряда математических моделей каталитического окисления угарного газа, в основе которых лежит известный механизм Лангмюр-Гиншелвуда и Илли-Риддела.

Рассмотренные модели демонстрируют очень большой спектр явлений, которые требуют детального и комплексного исследования. Каждая из моделей в частности отражает некоторые важные аспекты процесса каталитического окисления угарного газа на поверхности катализатора. Однако ни одна из них не дает исчерпывающего ответа как все эти различные явления объединить в единую целостную модель. Довольно часто исследователи обращаются к моделям на основе методов Монте-Карло для построения и анализа более широкого комплекса исследуемых явлений. Но, несмотря на очевидную простоту в их реализации, все же вероятностные модели такого типа скорее указывают на возможность или невозможность такого развития реальных событий, который заложен исследователем, чем позволяют достоверно описать явление. Поэтому гораздо больший интерес представляют результаты полученные на основе описанных моделей, которые позволяют делать однозначные выводы о природе и характере явлений, которые исследуются.