

# Praca dyplomowa inżynierska

## Wyznaczanie obszarów występowania oscylacji okresowych i chaosu dla autokatalitycznej reakcji chemicznej.

**Autor: Agata Rogala**

Nr albumu: 268691

Promotor: dr inż. Mariusz Zalewski

Rok akademicki: 2020/2021

### Wprowadzenie

Występowanie oscylacji podczas zachodzenia reakcji jest jednoznaczne ze zmianą stężenia reagentów w czasie. Badanie wpływu poszczególnych parametrów na przebieg reakcji ma na celu dokładne wyznaczenie najbardziej optymalnych warunków prowadzenia cyklu pracy reaktora, tak aby osiągnąć jak najwyższe stężenie produktu pożądanego

### Cel i zakres pracy

Celem pracy jest wyznaczenie występowania oscylacji oraz ich charakteru (okresowe bądź chaosu) w przypadku autokatalitycznej reakcji chemicznej.

Zakres pracy obejmuje:

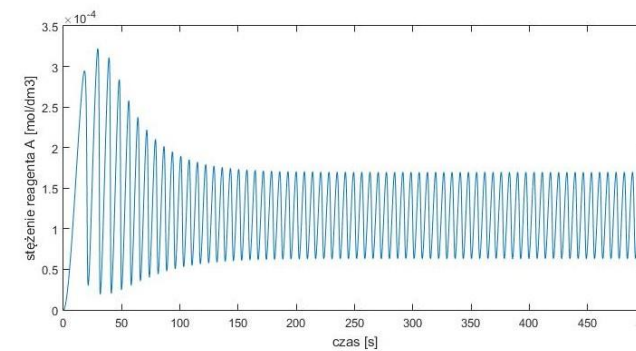
- Analiza wpływu wielkości stałej szybkości  $k_0$
- Analiza wpływu wielkości stałej szybkości  $k_1$
- Analiza wpływu wielkości stałej szybkości  $k_2$
- Analiza wpływu wielkości stałej szybkości  $k_3$
- Analiza wpływu wielkości strumienia i stężenia początkowego substratu

### Część teoretyczna

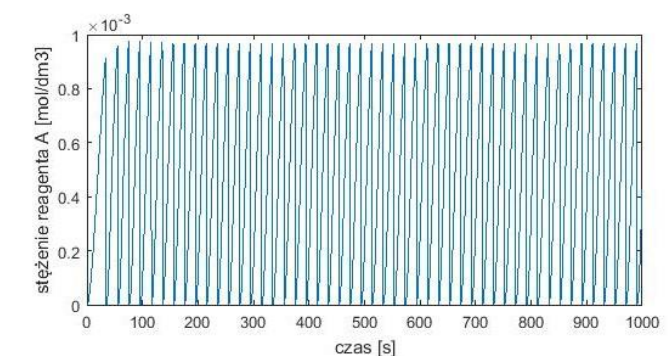
W tej części pracy przedstawiono zagadnienia dotyczące katalizy, autokatalizy, reakcji oscylacyjnych, reaktora CSTR oraz programu MATLAB, w którym prowadzono symulacje numeryczne. Ponadto, opisano rozważaną reakcję autokatalityczną.

### Analiza badanej reakcji

Wykorzystując program wykonany w Matlabie na podstawie dokonano serii symulacji numerycznych, gdzie zmieniano wartości stałych szybkości, szybkości strumienia i stężenia początkowego reagenta P. Celem tej zmiany była analiza wpływu zmiany parametrów na występowanie oscylacji. Czas trwania procesu został dobrany w taki sposób, by można było określić charakter występujących oscylacji oraz umożliwić łatwe odczytanie wykresów.



Rys. 1. Stężenie substancji A od czasu dla danych literaturowych.



Rys. 2. Stężenie substancji A od czasu przy zmianie stałej szybkości  $k_1$  do wartości 0.005 [1/s].

### Wnioski

Na podstawie wykonanych symulacji numerycznych stwierdzono, że zastosowane zmiany wielkości stałych szybkości reakcji nie doprowadzają do występowania oscylacji chaosu. Zmiany w wartościach stałych szybkości reakcji prowadzą do wytłumienia istniejących oscylacji, a nawet ich zaniku. Wyjątkiem jest zmniejszenie stałej  $k_1$ , kiedy to oscylacje okresowe występują dla reagentów A, B, C. Mają one wtedy zwiększoną amplitudę oraz są powtarzalne przez cały okres trwania procesu. Zmniejszenie strumienia  $Q$  skutkuje wydłużeniem czasu potrzebnego do uzyskania niezmienności występujących oscylacji oraz zwiększenia częstotliwości ich występowania natomiast jego zwiększenie skraca czas potrzebny do osiągnięcia niezmienności, a częstotliwość występowania pików pozostaje niezmienna. Zmiany strumienia  $Q$  nie powodują tłumienia bądź zanikania występujących oscylacji stężeń. Zmniejszenie wartości stężenia substratu  $C_{p0}$  prowadzi do całkowitego zaniku oscylacji, natomiast jego zwiększenie powoduje początkowe wytłumienie występujących oscylacji, aż do ich całkowitego wygaśnięcia.