ФЕДЕРАЛЬНОЕ?АС19А?(9ГЬ§4О15102030014

ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ ИНСТИТУТ НЕФТЕХИМИИ И КАТАЛИЗА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

Нурисламова Лиана Фануровна

РАЗРАБОТКА КОМПАКТНОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПИРОЛИЗА ПРОПАНА МЕТОДАМИ АНАЛИЗА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ

02.00.04 - Физическая химия

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук,

доцент Губайдуллин И.М.

Уфа -2015

HP 10'10'14'4'222^e^?Cdfilter~0&CWte^\_-Sam~&fedcols-1&P9offset-0&ro-filte'-=\_main.eninf\_karta\_dissertacii.svrecordidw%20%3D%202»l7nT00K... 1/2

Оглавление

Введение 4

Глава 1. Литературный обзор 10

1.1 Актуальность проблемы моделирования пиролиза пропана 10

1.2 Исследование пиролиза пропана в лабораторном реакторе 12

1.3 Обзор кинетических моделей пиролиза пропана 14

1.4 Анализ чувствительности как метод получения компактной кинетической модели 24

1.5. Выводы по главе 1: задачи диссертационной работы 30

Глава 2. Методы анализа чувствительности математической модели реакции 32

2.1 Уравнения формальной химической кинетики 32

2.2 Общее уравнение динамики и кинетики реакции в режиме идеального вытеснения 34

2.3 Методы анализа чувствительности кинетических моделей 37

2.3.1 Локальный анализ чувствительности 37

2.3.2 Глобальный анализ чувствительности Соболя И.М 40

2.4. Анализ чувствительности кинетических кривых к изменению констант скоростей реакции на примере реакции гидроалюминирования олефинов алкилаланами 45

2.5. Выводы по главе 2 48

Глава 3. Методика анализа чувствительности функционала модели 50

3.1 Описание методики 50

3.2 Выбор вида функционала математической модели 54

3.3. Апробация методики 58

з

3.3.1 Анализ чувствительности математической модели реакции окисления формальдегида 58

3.3:2 Анализ чувствительности математической модели реакции окисления водорода 63

3.3.3. Анализ чувствительности математической модели пиролиза этана 69

3.4. Выводы по главе 3 75

Глава 4. Компактная кинетическая модель пиролиза пропана: разработка и исследование 77

4.1 Экспериментальные данные по пиролиза пропана 77

4.2 Разработка компактной кинетической модели пиролиза пропана 78

4.2.1 Локальный анализ чувствительности функционала модели 80

4.2.2 Глобальный анализ чувствительности функционала 81

4.3 Исследование компактной кинетической модели пиролиза пропана 90

4.3.1 Влияние температуры и времени контакта на состав продуктов 90

4.3.2 Анализ чувствительности концентраций веществ к параметрам компактной кинетической модели 94

4.4 Расчет динамики химически реагирующего газа в реакторе 98

4.5 Выводы по главе 4 102

Заключение 103

Литература 105

Заключение

 Разработанаметодикаупрощениясхемыхимическихпревращенийоснованнаянаанализечувствительностифункционаламоделикизменениюеекинетическихпараметровгдефункционалхарактеризуетмерублизостирасчетныхзначенийпоисходнойсхемереакцииисхемеполученнойвозмущениемеепараметров

 СозданыпрограммыпозволяющиепроводитьлокальныйиглобальныйанализчувствительностивыходныхпараметровмоделикеевходнымпараметрамсцельювыявлениязначимыхпараметровидляредуцированиясхемыреакцииПрограммыреализованныеввидемодулейзарегистрированывобъединенномфондеэлектронныхресурсовНаукаиобразованиеОФЭРНиОиРоспатенте

 ПостроенакомпактнаякинетическаямодельиопределеныкинетическиепараметрымоделигазофазногопиролизапропанасприменениемметодикианализачувствительностиадекватноописывающаяэкспериментальныеданныевширокомдиапазонетемпературКприатмосферномдавлениивусловияхвнешнегонагревастенокреакторамаксимальнаяотносительнаяпогрешностьсоставиланеболее

 Исследованакинетикареакциигазофазногопиролизапропанаприразличныхтемпературахпроведенияреакциииразныхрасходахсмесисиспользованиемкомпактнойкинетическоймодели

 УстановленочтоосновнымисточникомобразованияметанаявляетсяметильныйрадикалЭтиленобразуетсяприразложенииСНиСзНрадикаловтакжеразложениеСзНрадикалаприводиткобразованиюпропиленаСведущимНрадикаломпроисходитнакоплениеводорода

 УстановленочтотемпературныйоптимумсоставляетКрасход

 лчПрипереходепристеночнойтемпературысКдоКвыходэтиленаувеличиваетсяразарасходпропанаувеличиваетсявраза

 ВпервыепроведеночисленноемоделированиетрехмернойдинамикигазовогопотокапиролизапропанавреакторевпрограммномпакетесиспользованиемкомпактнойкинетическоймоделиРезультатычисленныхрасчетовиэкспериментальныеисследованияпоконверсиипропанахорошосогласуютсямеждусобой