**Сыщикова, Ирина Григорьевна.**

## Математическое моделирование противоточного реактора окисления углеводородов : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 02.00.04. - Москва, 1984. - 274 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Сыщикова, Ирина Григорьевна

Введение.

Глава I. Литературный обзор.

§1.1, Основы математического моделирования промышленных реакторов.

§1.2. Общие закономерности жидкофазного окисления углеводородов

§1.3. Методы нелинейного оценивания кинетических параметров и идентификации кинетических моделей.

Глава 2. Автоматизированная система моделирования кинетики жидкофазного окисления углеводородов.

§2.1, Общая структура системы

§2.2. Программа K1NBT , реализующая решение прямой и обратной задач химической кинетики.

Глава 3. Разработка методики применения автоматизированной системы моделирования жидкофазного окисления углеводородов

§3.1. Исследование информативности различных планов экспериментов /на примере реакции жидкофазного окисления тетралина/.

1. Постановка задачи. Кинетические закономерности окисления тетралина

2. Моделирование кинетики жидкофазного окисления тетралина.

§3.2. Анализ критериев соответствия модели эксперименту /на примере реакции жидкофазного окисления изопро-пилбензола/.

1. Постановка задачи. Кинетические закономерности окисления изопропилбензола.

2. Моделирование кинетики жидкофазного окисления изопропилбензола.

§3.3. Особенности решения обратной задачи моделирования жидкофазного окисления углеводородов на гетероге-низированных комплексах переходных металлов

1. Постановка задачи

2. Моделирование жидкофазного окисления изопропил-бензола в присутствии пиридинсодержащих ионитных комплексов меди.

3. Моделирование жидкофазного окисления циклогексена в присутствии гетерогенизированного на кремнеземе иминодиацетата хрома.III

Глава 4. Математическое моделирование противоточного реактора.

§4.1. Постановка задачи. Описание химического реактора.

§4.2. Прямая задача моделирования противоточного реактора.

§4.3. Построение математической модели процесса окисления изопропилбензола.

1. Описание реактора окисления ИПБ

2. Кинетическая схема процесса окисления ИПБ в про-тивоточном реакторе

3. Особенности решения прямой задачи

3.1. Учет изменения температуры по высоте реактора.

3.2. Пересчет концентрации кислорода по высоте реактора с учетом градиентов давления газа и температуры.

3.3. Модификация метода.

3.4. Анализ единственности решения.

4. Решение обратной задачи

5. Влияние температурного профиля на характеристики процесса.

6. Влияние изменения концентрационного профиля кислорода на характеристики процесса окисления ИПБ.

7. Преимущества и ограничения модели.

Обсуждение результатов.

Выводы.