

ПРИМЕНЕНИЕ MATLAB-7 ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Велиева Ф.М., Рагимова Н.М., Алиева В.Ф.

Национальная Академия Наук Азербайджана Азербайджан, AZE 1025, пр.Ходжалы 30,
тел: (994 12) 490-24-76, E-mail: firuza1@aport2000.ru

Научно-технический прогресс химической промышленности стал возможным благодаря одновременному развитию теории и практики катализа и химической технологии. Применение методов математического моделирования ознаменовало новый подход к проблемам промышленного катализа. Программа MATLAB предназначена для выполнения научных расчетов и высококачественной визуализации полученных результатов. Пакет Statistics Toolbox позволяет проводить статистические вычисления и обработку экспериментальных данных для построения регрессионной модели процесса. Расширение optimization toolbox используется для решения оптимизационных задач методами нелинейного программирования при нахождении оптимальных условий проведения процесса. Команды и графический интерфейс пакета Partial differential equations toolbox могут быть использованы для математического моделирования процессов в условиях стационарности и нестационарности, расчета тепло- и массопереноса. Пакет Control System предназначен для моделирования систем автоматического управления непрерывных и дискретных. Пакет позволяет построить передаточную функцию на входе и на выходе и решить задачу устойчивости процесса. Графический интерфейс позволяет построить двух и трехмерные графики функции.

В докладе приводятся результаты кинетических исследований процесса окислительного дегидрирования 4-винилциклогексена в этилбензол ЭБ и стирол СТ. Основные кинетические параметры рассчитаны на Matlab-7 варьированием исходных парциальных давлений 4-ВЦГ и O₂ при различных температурах и объемных скоростях. Полученные результаты свидетельствуют об образовании ЭТ и СТ в качестве основных продуктов реакции. Математическая модель процесса была дополнена уравнением материального и теплового баланса, которые позволили с помощью графического интерфейса получить многообразие концентрационных и температурных изменений происходящих в реакторе. Расчеты по теоретической оптимизации сводилась к определению оптимального температурного профиля реакции $W(t)=f(P)$, обеспечивающей максимальный выход этилбензола и стирола с наибольшей избирательностью с единицы объема катализатора. Полученные результаты показали, что проведение процесса в двухсекционном адиабатическом реакторе позволяет получить максимальный съем целевого продукта с единицы поверхности катализатора.