**Декомпозиция схем протекания сложных реакций при построении кинетических моделей**

**Спивак Семен Израилевич**

Башкирский государственный университет, профессор, зав. каф. математического моделирования. Адрес: 450074, г.Уфа, ул.Заки Валиди, 32; тел. раб. 8(347)2299635.

E-mail: semen.spivak@mail.ru

**Исмагилова Альбина Сабирьяновна**

Башкирский государственный университет, докторант каф. математического моделирования. Адрес: 450074, г.Уфа, ул.Заки Валиди, 32; тел. раб. 8(347)2299635.

E-mail: ismagilovaas@rambler.ru

Нефтекамский филиал БашГУ, доцент кафедры математического моделирования и информационной безопасности

Тел. раб. 8(34783)21710

**Ключевые слова**: обратная задача, информативность, параметры модели, базис нелинейных параметрических функций, маршрут реакции.

**Реферат**. Исследованы обратные задачи химической кинетики, решаемые на основе системы нелинейных обыкновенных дифференциальных, дифференциально-алгебраических и алгебраических уравнений, которые отвечают нестационарным, стационарным и равновесным условиям эксперимента. Построен алгоритм анализа информативности кинетических измерений при решении обратных задач химической кинетики многомаршрутных реакций. Построение системы автоматизации анализа информативности опирается на декомпозицию сложной химической системы на ряд подсистем существенно меньшей размерности. Основой декомпозиции является теория независимых маршрутов. Построенные алгоритмы иллюстрируются на примере механизма синтеза винилхлорида на катализаторе «сулема-активированный уголь».

**Кинетическая модель – основа моделирования**

**химических процессов и реакторов**

**Быков Валерий Иванович**

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН,

ведущий научный сотрудник, д.ф.-м.н.,

Адрес: 119334, Москва, ул. Косыгина, 4

Раб. тел.: +7 (499) 135 78 94

e-mail: vibykov@mail.ru

**Цыбенова Светлана Батожаргаловна**

Московский городской педагогический университет

профессор кафедры информационных систем и технологий, д.ф.-м.н.

Адрес:115191, Москва, 2-й Тульский переулок, 4;

e-mail: tsybenova@mail.ru

**Ключевые слова**: кинетическая модель, параметрический анализ, каталитические процессы, химический реактор

**Реферат.** Показано, что кинетическая модель является основой математического моделирования каталитических процессов и реакторов. При варьировании условий осуществления процесса возникает проблема параметрического анализа кинетической модели, содержащей большое число параметров. Предложена эффективная процедура качественного и численного анализа соответствующей кинетической модели. В качестве примера проведен параметрический анализ математической модели Вольтера-Сальникова для неизотермического реактора идеального смешения. Построены зависимости стационарных состояний от безразмерных параметров, бифуркационные кривые стационарных состояний, параметрические и фазовые портреты, временные зависимости.

**Моделирование процесса горения древесной частицы с учетом его стадийности**

**Колесник Василий Васильевич**

Национальный технический университет Украины (КПИ), доцент

Адрес: Украина, 03056, г. Киев, Проспект Победы, д. 37

Тел. раб.: +380 (44) 406 80 86

E-mail: kolesnyk@email.ua

**Орлик Владимир Николаевич**

Институт газа Национальной академии наук Украины, ведущий научный сотрудник

Адрес: Украина, 03113, г. Киев, ул. Дегтяревская, д. 39

Тел. раб.: +380 (44) 456 03 24

E-mail: orlyk-v@mail.ru

**Чумаченко Виктор Анатольевич**

Институт катализа им. Г.К.Борескова Сибирского отделения Российской академии наук, старший научный сотрудник

Адрес: РФ, 63090, г. Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, д.5

Тел. раб.: +7 (383) 32 69 412

E-mail: vachum@catalysis.ru

**Ключевые слова:** математическая модель,горение,древесная частица, летучие компоненты, время сгорания.

**Реферат.** Рассмотрена внутренняя задача процесса горения частицы древесных отходов, которая соответствует сжиганию частицы в проточном высокотемпературном кислородсодержащем газовом потоке. Проведено детальное исследование основных процессов и предложено соответствующее математическое описание процессов разогрева, удаления свободной и связанной влаги, выделения и сгорания летучих компонентов, горения углеродного остатка частицы. Разработанная математическая модель позволяет исследовать динамику одновременного протекания указанных процессов в отдельных зонах частицы с изменяющимися во времени границами. Полученное программное обеспечение может служить основой для исследования процессов сгорания мелких частиц древесных отходов в реальных условиях в зависимости от выбранной технологии сжигания.

**Моделирование процесса окисления метанола в формальдегид в трубчатом реакторе с учетом неравномерности потока**

**Овчинникова Елена Викторовна**

Институт катализа им. Г.К.Борескова Сибирского отделения Российской академии наук, старший научный сотрудник, к.т.н.

Адрес: РФ, 63090, г. Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, д.5

Тел. раб.: +7 (383) 32 69 412

E-mail: evo@catalysis.ru: ava@ngs.ru

**Кленов Олег Павлович**

Институт катализа им. Г.К.Борескова Сибирского отделения Российской академии наук, старший научный сотрудник, к.т.н.

Адрес: РФ, 63090, г. Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, д.5

Тел. раб.: +7 (383) 330 62 78

E-mail: klen@catalysis.ru

**Верниковская Надежда Викторовна**

Институт катализа им. Г.К.Борескова Сибирского отделения Российской академии наук, научный сотрудник, к.т.н.

Адрес: РФ, 63090, г. Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, д.5

Тел. раб.: +7 (383) 32 69 438

E-mail: vernik@catalysis.ru

**Чумаченко Виктор Анатольевич**

Институт катализа им. Г.К.Борескова Сибирского отделения Российской академии наук, руководитель группы, к.т.н.

Адрес: РФ, 63090, г. Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, д.5

Тел. раб.: +7 (383) 32 69 412

E-mail: vachum@catalysis.ru

**Ключевые слова:** математическое моделирование, аэродинамическое моделирование, трубчатый реактор, неравномерность скорости потока, коэффициент радиальной теплопроводности, синтез формальдегида, оксидный катализатор.

**Реферат.** В статье приведены результаты аэродинамического и математического моделирования трубчатого реактора, в котором протекает окисление метанола в формальдегид. CFD-моделирование с помощью пакета FLUENT показало наличие существенных неоднородностей распределения газового потока в надслоевом пространстве трубчатого реактора. Математическое моделирование процесса на железо-молибденовом катализаторе с учетом степени неоднородности в различных трубках позволило оценить влияние неравномерности потока на температурные и концентрационные режимы работы реактора, а также на общую производительность реактора. Полученные результаты представляют интерес для анализа эксплуатационных характеристик реальных трубчатых аппаратов.

**Нестационарный катализ - путь увеличения эффективности осуществления реакций**

**Решетников Сергей Иванович**

Институт катализа СО РАН, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник.

Адрес: 630090 Новосибирск, Проспект ак. Лаврентьева, 5;

Тел. сл. 8-(383)-333-16-18;

e-mail: reshet@catalysis.ru

**Ключевые слова:** математическое моделирование, нестационарное состояние катализатора, кинетика реакции

**Реферат.** На основе простейшей кинетической схемы селективной реакции, включающей два типа активных центров, проведен анализ ее протекания в двухреакторной системе с циркуляцией катализатора. Показано, что основными параметрами, влияющими на увеличение эффективности протекания реакции в условиях нестационарного катализа, является температура в реакторах и интенсивность циркуляции катализатора между ними. Проведено моделирование реакции окисления *о*-ксилола во фталевый ангидрид, протекающей в реакторе с псевдоожиженным слоем катализатора, разделенном по высоте слоя на две зоны с разной температурой. Показано, что целенаправленное регулирование нестационарного состояния катализатора посредством его циркуляции между зонами позволяет существенно увеличить выход целевого продукта.

**Моделирование процесса ароматизации углеводородов С5 в полочных реакторах с неподвижным слоем**

**Балаев Александр Всеволодович**

Уфимский государственный нефтяной технический университет, доктор химических наук, профессор кафедры нефтехимии и химической технологии.

Адрес: 450062, г.Уфа, ул. Космонавтов, 1.

Телефон: 8-962-5379481

e-mail: avbalaev@gmail.com

**Вяткин Юрий Леонидович**

Российский химико-технологический университет имени Д.И.Менделеева, кандидат технических наук, доцент кафедры общей химической технологии.

Адрес: 125047, Москва А-47, Миусская пл., 9

Телефон: 8-965-2548820

yuris-vtk@mail.ru

**Ключевые слова.** Реакция ароматизации, кинетические уравнения, константы скорости реакции, математическая модель, вычислительный эксперимент, адиабатический реактор с неподвижным слоем катализатора.

**Реферат.** В настоящей работе приведены результаты, полученные при разработке кинетической модели каталитического превращения широкой фракции углеводородов С2-С5 в целевые продукты: бензол, толуол и ксилолы. Предложена 18-стадийная схема превращений, решена обратная кинетическая задача и найдены численные значения кинетических параметров, описывающие экспериментальные данные в пределах погрешности количественного анализа. Проведено моделирование процесса в трех- и четырехслойных реакторах с неподвижным слоем. Проведен вычислительный эксперимент и найдены зависимости выхода бензола, толуола и ксилолов при вариации давления, температуры и объема катализатора. Показано, что максимальный выход целевых продуктов достигается в четырехслойном реакторе с распределением катализатора по слоям в пропорции 1:1:1:2.

**Компьютерный помощник технолога**

**в процессе полимеризации пропилена**

**Островский Николай Михайлович,**

Хипол а.д.,

Директор по качеству и развитию,

Профессор, д.т.н.,

Грачачки пут б.б., 25250 Оджаци, Сербия,

тел.: +381-25-464-760, факс раб.: +381-25-464-702,

e-mail: nikolaj.ostrovski@hipol.rs

**Ключевые слова:** компьютерный помощник технолога; Полимеризация пропилена.

**Реферат.** Представлен компьютерный помощник технолога (КПТ) на примере процесса полимеризации пропилена, разработанный в программной среде Excel - VBA. Выбор такого подхода продиктован тем, что каждый инженер - технолог уже владеет программой Excel и может сам создавать и развивать КПТ в соответствии с особенностями процесса и личным опытом использования компьютера. Описана структура КПТ. Представлен упрощённый вариант модели процесса для стационарных режимов. Модель и программа использованы для анализа максимальной производительности реаторов; для проектирования закрытой системы охлаждения; для обоснования трёхреакторной схемы (2+1), позволяющей удвоить производительность реакторного блока.