

УДК 66.011, 519.61

А. Н. Иванов, С. А. Мустафина

РАСЧЕТ ПРОЦЕССА ГИДРИРОВАНИЯ α -ПИНЕНА В ТРУБЧАТОМ РЕАКТОРЕ С ПРЯМОТОКОМ ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ СРЕДСТВАМИ ПАКЕТА MATHCAD PRIME

Ключевые слова: математическое моделирование, гидрирование, пинен, жесткие системы, численные методы, Mathcad.

В статье описывается разработка математической модели процесса гидрирования α -пинена в трубчатом реакторе с прямоточной подачей хладагента, а также её последующая реализация средствами пакета Mathcad Prime. Приведены математические формулы, описывающие в дифференциальной форме изменение параметров системы по относительной длине реактора.

Key words: mathematical modeling, hydrogenation, pinene, stiff equations, numerical methods, Mathcad.

The article describes the development of a mathematical model for the hydrogenation of α -pinene in a tubular reactor with a direct feed of the refrigerant, as well as its subsequent implementation by the Mathcad Prime package. The mathematical formulas describing in a differential form the change in the system parameters by the relative length of the reactor are given.

Введение

Совершенствование химико-технологических процессов сопряжено с многочисленными трудностями: выбором пути оптимизации процесса, выявлением узких мест, проведением соответствующих объемных расчетов, осуществлением лабораторных исследований и опытно-промышленных испытаний, проектированием и внедрением пилотных установок, а также верной интерпретацией полученных результатов. При этом в случае неудачно выбранной модификации процесса все вышеприведенные этапы приходится выполнять заново. Сократить как время, так и денежные затраты на проведение дорогостоящих испытаний позволяют расчеты математических моделей, эмулирующих соответствующие физико-химические превращения [1]. Составление адекватных моделей – достаточно сложная задача, требующая фундаментальных знаний в моделируемой области. Однако, получив верное математическое описание единой, специалисты могут в короткие сроки проводить многочисленные исследования и расчеты с минимальным привлечением реального технологического оборудования [2]. Именно поэтому, разработка подобных математических моделей, а также средств их реализации – важный атрибут любых научных исследований в области химической и нефтехимической промышленности [3].

Цель и объект исследования

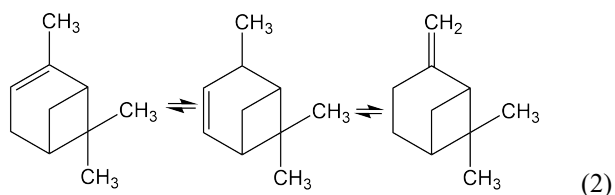
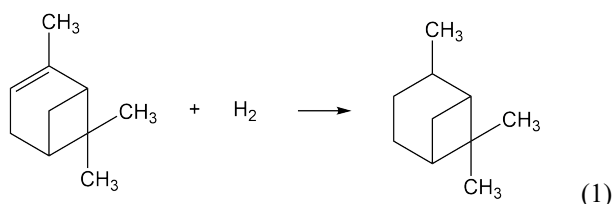
В описываемой работе предлагается составление и расчет математической модели процесса гидрирования α -пинена (2,6,6-триметилбицикло[3.1.1]гепт-2-ена). Данное химическое соединение имеет брутто-формулу $C_{10}H_{16}$ и относится к такому классу органических веществ как терпены. Пинен является основным компонентом таких природных продуктов, как скипидара, смолы хвойных деревьев, различных эфирных масел и многих других продуктов растительного происхождения. Его используют в качестве сырья для производства растворителей,

лаков и смол, красок, а также душистых композиций благодаря характерному хвойному запаху.

Так как пинен относится к непредельным соединениям, а также содержит в своей структуре бициклическую группировку, он проявляет высокую химическую активность. Данное свойство позволяет использовать α -пинен в качестве исходного соединения в процессах гидрирования, каталитического окисления, изомеризации, присоединительного гидрохлорирования и пр. Продукты превращения находят своё применение в качестве реагентов для тонкого органического синтеза, в производстве лекарственных средств, ароматизаторов, феромонов и инсектицидов, консервантов и антиокислителей.

Особый интерес представляет процесс каталитического окисления α -пинена, в процессе которого основным продуктом является цис-пинан, который также относится к терпенам, но при этом не встречается в природе. Именно цис-изомер пинана является исходным сырьём для получения продукта его окисления – гидроперекиси цис-пинана, который применяется в качестве инициатора полимеризации, например, при производстве каучуков. Из положительных сторон применения именно данного инициатора следует отметить его оптимальные значения энергии активации и константы инициирования для низкотемпературной вулканизации каучуков, высокую стабильность при хранении, улучшение эксплуатационных показателей полимера, а также то, что продуктами разложения инициатора являются представители класса терпенов, что придает полимеру приятный хвойный запах [4].

Процесс гидрирования α -пинена происходит при предварительном нагреве реакционной смеси, а реакция сопровождается выделением тепла. Химизм процесса, а именно целевая реакция гидрирования (1) и побочные реакции изомеризации (2) α -пинена, представлены ниже:



При этом следует отметить, что при перегреве реакционной массы наблюдается интенсивное протекание побочных реакций, в связи с чем данный процесс следует проводить в режиме, близком к изотермическому. С этой целью гидрирование ведут в реакторах теплообменного типа – кожухотрубчатых или типа «труба в трубе» [5]. В межтрубное пространство подается вода в качестве теплоносителя для отвода тепла реакции, а внутритрубное пространство заполнено соответствующим пористым катализатором гидрирования.

Математическая модель процесса гидрирования пинена

С целью дальнейшего совершенствования и интенсификации процесса необходимо подготовить и реализовать адекватную математическую модель, учитывающую:

- 1) кинетику химических реакций, протекающих как в жидкой, так и в газовой фазе;
- 2) термодинамику процесса в жидкой и газовой фазах;
- 3) процессы межфазного массообмена – испарения и конденсации компонентов смеси;
- 4) процесс теплопереноса между жидкой и газовой фазой, а также теплопередачи через стенку теплоносителю.

Для реализации поставленной задачи на этапе проектирования и отладки был выбран математический пакет Mathcad Prime 4.0, позволяющий проводить численное решение систем дифференциальных уравнений и визуализировать результаты расчета.

Математическое описание материального баланса процесса основано на уравнениях неразрывности потоков жидкости и газа, а также на уравнениях химической кинетики [6]. Значения энергий активации и предэкспоненциальных множителей в уравнении Аррениуса для вышеприведенных реакций были получены путём решения обратной кинетической задачи на основе имеющихся справочных данных. Направление подачи воды для охлаждения совпадает с направлением подачи сырья, то есть аппарат представляет собой теплообменник прямоточного типа.

Материальный баланс включает следующие зависимости параметров процесса в форме дифференциальных уравнений:

- уравнение неразрывности потока жидкости:

$$dL := FI \cdot Vp,$$

где dL – скорость изменения мольного расхода жидкости, кмоль/ч; FI – объемная скорость испарения, кмоль/ч·м³; Vp – реакционный объем (межтрубное пространство за вычетом объема, занимаемого катализатором, м³).

- скорости изменения концентраций компонентов в жидкой фазе:

$$dx(i) := \frac{F(i) - p_{i+1} \cdot FI}{p_i} \cdot Vp,$$

где $dx(i)$ – скорость изменения мольной доли i -го компонента в жидкой фазе; $F(i)$ – скорость изменения количества i -го компонента в жидкой фазе в единице объема аппарата, кмоль/ч·м³; p – вектор параметров процесса, а именно: p_{i+1} – мольная доля i -го компонента в жидкой фазе, p_i – мольный расход жидкости, кмоль/ч.

Компоненты жидкой фазы: 1 – α -пинен, 2 – цис-пинан, 3 – изомеры пинена. Компоненты газовой фазы: 1 – α -пинен, 2 – цис-пинан, 3 – изомеры пинена, 4 – водород.

- уравнение неразрывности потока газов:

$$dG := \Phi G \cdot Vp,$$

где dG – скорость изменения мольного расхода газа, кмоль/ч; ΦG – объемная скорость изменения количества газовой фазы, кмоль/ч·м³.

- скорости изменения концентраций компонентов (за исключением водорода) в газовой фазе:

$$dy(i) := \frac{\Phi(i) - p_{i+5} \cdot \Phi G}{p_5} \cdot Vp,$$

где $dy(i)$ – скорость изменения мольной доли i -го компонента в газовой фазе; $\Phi(i)$ – скорость изменения количества i -го компонента в газовой фазе в единице объема аппарата, кмоль/ч·м³; p_{i+5} – мольная доля i -го компонента в газовой фазе, p_5 – мольный расход газа, кмоль/ч.

- скорости изменения концентрации водорода в газовой фазе:

$$dyh := \frac{-(1 - \varphi) \cdot W(1) - \varphi \cdot \omega(1) - p_9 \cdot \Phi G}{p_5} \cdot Vp,$$

где dyh – скорость изменения мольной доли водорода в газовой фазе; φ – мольная доля газовой фазы; $W(i)$ – скорость i -ой реакции в жидкой фазе; $\omega(i)$ – скорость i -ой реакции в газовой фазе; p_9 – мольная доля водорода в газовой фазе,

Приложения к материальному балансу:

- расчет мольной доли газовой фазы – фактической и для равновесной системы жидкость-газ:

$$\varphi := \frac{p_5}{p_1 + p_5},$$

$\varphi_2 := 0.5$ – начальное приближение для равновесной системы.

$$alfa(i) := \frac{p_1 \cdot p_{1+i} + p_5 \cdot p_{5+i}}{p_1 + p_5},$$

где $alfa(i)$ – мольная доля i -го компонента в жидкой и газовой фазах.

$$F\varphi_2(\varphi_2) := \sum_{i=1}^3 \frac{alfa(i) \cdot (kisp(i) - 1)}{1 + \varphi_2 \cdot (kisp(i) - 1)} + \frac{p_9}{(p_1 + p_5) \cdot \varphi_2},$$

где $kisp(i)$ – константа равновесия процесса испарения для i -го компонента.

Значение равновесной мольной доли газовой фазы вычисляется численным способом с помощью функции *root*. Предварительно производится проверка на наличие действительного корня в интервале [0, 1]:

$$\varphi_2 := \text{if } (F\varphi_2(\text{TOL}) \cdot F\varphi_2(1) \leq 0) \\ \parallel \text{root}(F\varphi_2(\varphi_2), \varphi_2, \text{TOL}, 1) \\ \text{else} \\ \parallel \text{if } F\varphi_2(\text{TOL}) > 0 \\ \parallel \parallel \text{if } F\varphi_2(\text{TOL}) > F\varphi_2(1) \\ \parallel \parallel \parallel 1 \\ \parallel \parallel \text{else} \\ \parallel \parallel \parallel 0 \\ \parallel \text{else} \\ \parallel \parallel \text{if } F\varphi_2(\text{TOL}) > F\varphi_2(1) \\ \parallel \parallel \parallel 0 \\ \parallel \parallel \text{else} \\ \parallel \parallel \parallel 1$$

где TOL – точность расчета в среде Mathcad.

- скорость испарения $V_{пар}$ (кмоль/ч):

$$V_{пар} := \varphi_2 \cdot (p_1 + p_5) - p_5,$$

$$Fl := \frac{-V_{пар}}{Vp},$$

$$Y(i) := \text{if } V_{пар} > 0$$

$$\parallel p_{i+1} \\ \text{else} \\ \parallel p_{i+5}$$

где $Y(i)$ – мольная доля i -го компонента в жидкой фазе при испарении или в газовой фазе при конденсации.

$$u := \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{— матрица}$$

стехиометрических коэффициентов для основной и побочной реакций.

$$F(i) := (1 - \varphi) \cdot \sum_{j=1}^2 (u_{j,i} \cdot \omega(j)) + \frac{V_{пар}}{Vp} \cdot Y(i),$$

$$\Phi G := -(1 - \varphi) \cdot W(1) - \varphi \cdot \omega(1) + \frac{V_{пар}}{Vp},$$

$$\Phi(i) := \varphi \cdot \sum_{j=1}^2 (u_{j,i} \cdot \omega(j)) + \frac{V_{пар}}{Vp} \cdot Y(i).$$

Тепловой баланс:

- изменение температуры реакционной смеси:

$$1000 \cdot Vp \cdot \sum_{j=1}^2 (-Q(j) \cdot ((1 - \varphi) \cdot W(j) + \varphi \cdot \omega(j))) \\ dT := \frac{CpL \cdot p_1 + CpG \cdot p_5}{-V_{пар} \cdot \sum_{j=1}^3 (dHV(j) \cdot Y(j)) + \alpha x \cdot Sx_1 \cdot (p_{11} - p_{10}) \cdot Vp} + \frac{CpL \cdot p_1 + CpG \cdot p_5}{},$$

где dT – скорость изменения температуры реакционной смеси, К; $Q(j)$ – тепловой эффект для j -ой реакции, кал/моль; CpL – молярная теплоемкость жидкой фазы, кал/моль·К; CpG – молярная теплоемкость газовой фазы, кал/моль·К; αx – коэффициент теплопередачи, ккал/(м²·ч·К); p_{10} – температура реакционной смеси, К; p_{11} – температура теплоносителя, К; Sx_1 – внутренняя поверхность теплообмена на единицу объема, м⁻¹; $dHV(j)$ – теплота испарения j -го компонента, кал/моль.

- изменение температуры теплоносителя:

$$dT_x := \frac{\alpha x \cdot Sx_2 \cdot (p_{10} - p_{11}) \cdot Vp}{Cx \cdot Gx},$$

где dT_x – скорость изменения температуры теплоносителя, К; Sx_2 – внешняя поверхность теплообмена на единицу объема, м⁻¹; Cx – теплоемкость хладагента (воды), ккал/(кг·К); Gx – массовый расход хладагента, кг/ч.

Приложения к тепловому балансу:

- площадь поверхности теплообмена на единицу объема аппарата:

$$Sx_1 := \frac{S_1}{Vp},$$

$$Sx_2 := \frac{S_2}{Vp},$$

где S_1 и S_2 – внутренняя и внешняя поверхности теплообмена, м².

- тепловой эффект химических реакций:

$$Q(j) := -\sum_{i=1}^3 (u_{j,i} \cdot dH0_i),$$

где $dH0_i$ – стандартная теплота образования i -го компонента, ккал/моль.

Вычисление кинетических констант

Обозначим константы скорости реакции в жидкой фазе:

k_1 – константа скорости реакции гидрирования в жидкой фазе;

k_2 – константа скорости реакции изомеризации в жидкой фазе;

k_3 – константа скорости реакции, обратной реакции изомеризации в жидкой фазе;

и аналогично для процессов, протекающих в газовой фазе:

k_4 – константа скорости реакции гидрирования в газовой фазе;

k_5 – константа скорости реакции изомеризации в газовой фазе;

k_6 – константа скорости реакции, обратной реакции изомеризации в газовой фазе.

В таблице 1 приведены значения кинетических параметров на основании известных экспериментальных данных [7].

Таблица 1 – Данные кинетики процесса гидрирования α -пинена

Константа скорости реакции	Температура, °C			Энергия активации E_i ккал/моль
	70	100	130	
в жидкой фазе				
$k_1, \text{ч}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$	0,0792	0,1792	0,3588	6,92
$k_2, \text{ч}^{-1}$	0,0350	0,1088	1,2454	9,63
$k_3, \text{ч}^{-1}$	0,5488	1,2454	2,5058	6,96
в газовой фазе				
$k_4, \text{ч}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{м}^3$	436,83	1580,6	4723,1	10,9
$k_5, \text{ч}^{-1}$	32,102	207,07	1012,1	15,8
$k_6, \text{ч}^{-1}$	64,966	449,81	2335,1	16,4

Зависимость константы скорости реакции от температуры определяется уравнением Аррениуса:

$$k_i := A_i \cdot e^{-\frac{E_i}{RT}},$$

где A_i – предэкспоненциальный множитель для i -ой реакции; E_i – энергия активации i -ой реакции, Дж/моль; T – абсолютная температура, К; $R = 8,314$ – универсальная газовая постоянная, Дж/моль·К.

Переведя значения температуры из шкалы Цельсия в шкалу Фаренгейта, и значения энергии активации в Дж/моль, стало возможным вычислить значение предэкспоненциального множителя для каждой из реакций с целью получения непрерывной зависимости между скоростью реакции и температурой смеси (табл. 2).

Таблица 2 – Численные значения кинетических параметров процесса гидрирования α -пинена

Константа скорости реакции	Предэкспоненциальный множитель	Энергия активации E_i , Дж/моль
k_1	$2,037 \cdot 10^3$	28972,656
k_2	$4,799 \cdot 10^4$	40318,884
k_3	$1,496 \cdot 10^4$	29140,128
k_4	$3,867 \cdot 10^9$	45636,120
k_5	$3,772 \cdot 10^{11}$	66151,440
k_6	$1,841 \cdot 10^{12}$	68663,520

Выбор метода решения системы дифференциальных уравнений

Вышеприведенная математическая модель процесса гидрирования α -пинена в конечном счете представляет собой систему из 11 дифференциальных уравнений – 9 уравнений материального и 2 уравнений теплового балансов. Для вычисления профилей изменения параметров модели по длине аппарата был начат поиск эффективного численного метода её решения.

Как видно из таблиц 1-2, кинетические параметры реакций, протекающих в жидкой и газовой фазах, отличаются на порядки, что является признаком жесткой системы дифференциальных уравнений [8]. Это доказывает и тот факт, что при использовании стандартных решателей – *rkfixed* (метода Рунге-Кутты 4-го порядка с фиксированным шагом), *rkadapt* (метода Рунге-Кутты 4-го порядка с адаптивным размером шага), а также решателей *Adams* (метода Адамса) и *Bulstoer* (метода Булишера-Штера) не принесло результатов – происходит резкое возрастание погрешности уже в начале вычислений.

Для решения жестких систем дифференциальных уравнений в пакете Mathcad Prime 4.0 предусмотрены несколько решателей:

- 1) *Radau* – метод Radaus для жестких систем;
- 2) *BDF* (backward differentiation formulas) – метод дифференцирования назад;
- 3) *Stiffb* – метод Булишера-Штера для жестких систем;
- 4) *Stiff* – метод Розенброка.

Однако для 2-х последних методов якобиан системы является обязательным аргументом [9], тогда как для методов *Radau* и *BDF* он необязателен, хотя и повышает точность численных вычислений. Вычисление якобиана системы дифференциальных уравнений по данной математической модели в символьном виде не представляется возможным по двум причинам. Во-первых, из-за присутствия вычислений равновесной мольной доли газовой фазы, решение которой в символьном виде не найдено. Во-вторых, из-за использования фазовых ограничений на процесс и, как следствие, присутствия условных конструкций в математической модели.

Так как якобиан вычислен не был, то была произведена оценка жесткости системы на основе соотношения между константами скоростей реакций в жидкой и газовой фазе. Таким образом оценочное значение числа жесткости при $l = 0$ составляет порядка 10^8 при режимных условиях. При этом по мере перемещения по длине реактора число жесткости системы дифференциальных уравнений, описывающих процесс, постепенно снижается.

Результаты, полученные при использовании решателей *Radau* и *BDF*, совпадают в пределах точности численного решения методов, однако отличаются по времени. Была произведена оценка зависимости времени решения системы двумя методами в зависимости от количества точек разбиения интервала. Вычисления производились на компьютере со следующими характеристиками: Intel

Core i-3-2330M 2,20 ГГц, 8 ГБ ОЗУ, Windows 8.1, PTC MathCAD Prime 4.0 64-bit выпуск F000. Результаты анализа представлены на рисунке 1. Для наглядности шкала числа интервалов дана в логарифмическом масштабе.

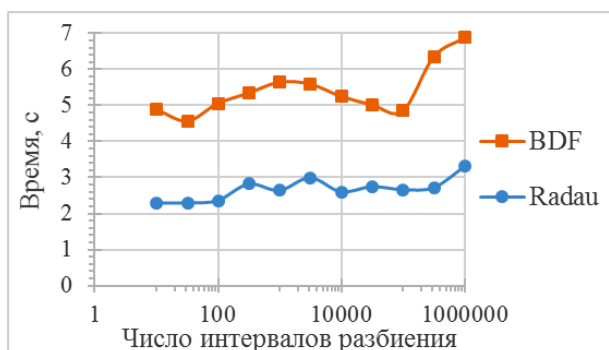


Рис. 1 – Время численного решения системы с помощью методов *Radau* и *BDF*

Как видно из графика, наиболее эффективным по времени решателем при одинаковой точности является метод *Radau*, который впервые появился в Mathcad 2001i. При этом наблюдается высокая устойчивость алгоритма даже при большом числе разбиений.

Результаты и обсуждение

В результате использования решателя *Radau* была получена матрица решения, которая впоследствии визуализировалась с помощью средств пакета MathCAD. Результаты численного решения дифференциальных уравнений представлены на рисунках 2-4.

Как видно из рисунка 2, на протяжении порядка 45% длины аппарата происходит снижение мольного расхода газовой фазы без изменения мольного расхода жидкой фазы (за исключения небольшой просадки в самом начале):

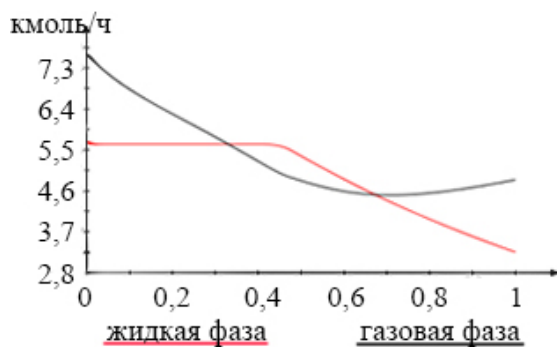


Рис. 2 – Профили мольного расхода жидкой и газовой фаз по относительной длине реактора

Это объясняется тем, что реакция гидрирования протекает на границе раздела фаз (в диффузионной области). Одна молекула α -пинена из жидкой фазы вступает в реакцию с водородом из газовой фазы. Продукт синтеза – цис-пинан, возвращается обратно в жидкость. В результате происходит уменьшения количества молекул в газе при постоянном количестве в жидкости.

Однако, после 45% длины аппарата вследствие разогрева реакционной смеси возникает интенсивное испарение жидкости и, в частности, α -пинена, который реагирует с водородом уже в газовой фазе. Таким образом процесс переходит в кинетическую область. При этом в газовой фазе число молекул уравнивается притоком в результате испарения,

Изменение молярных концентраций в аппарате с учетом как жидкой, так и газовой фаз, представлено на рисунке 3.

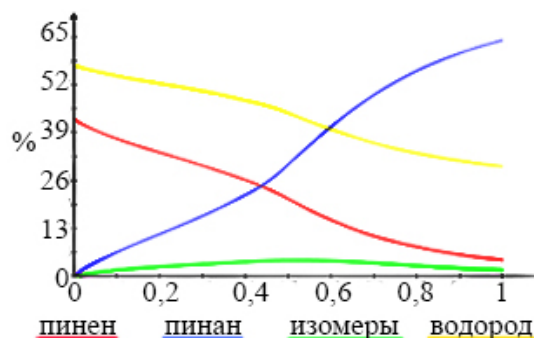


Рис. 3 – Профили молярных концентраций компонентов по относительной длине реактора

Как видно из графика исходный α -пинен практически полностью вступает в реакцию. Выход цис-пинана немногим превышает 90%. Продукты побочной реакции – изомеры пинана, образуются в достаточно небольшом количестве, к концу синтеза их концентрацию снижается практически до нуля.

Температурные профили процесса представлены на рисунке 4.

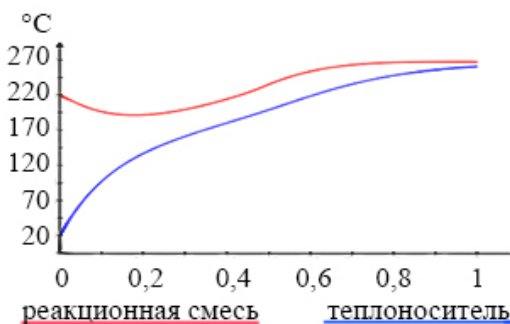


Рис. 4 – Профили температур по относительной длине реактора

Благодаря оптимальным параметрам теплосъема и подачи теплоносителя [10, 11] удается поддерживать процесс в состоянии, близком к изотермическому, что наиболее благоприятно для каталитических процессов.

Полученные результаты показывают удовлетворительное согласование с аналитическим решением.

Заключение

Полученные результаты сходятся с экспериментальными данными на действующем реакторе гидрирования α -пинена. Полученная математическая модель может быть использована

для выявления общих закономерностей процесса, поиска путей его оптимизации, для расчетов при модификации оборудования и изменении технологического режима.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 17-47-020068 и проекта №13.5143.2017/БЧ, выполняемого вузом в рамках государственного задания Минобрнауки РФ.

Литература

1. А.Н. Иванов, С.А. Мустафина, Е.А. Шулаева, Н.С. Шулаев, Объектно-ориентированное моделирование химико-технологических систем с целью повышения безопасности производства, *Математическое моделирование процессов и систем, V Всероссийская научно-практическая конференция, приуроченная к 110-летию со дня рождения академика А.Н. Тихонова* (Стерлитамак, Россия, 17-19 ноября, 2016), Стерлитамак, 2016, часть 1, С. 137-142.
2. С.А. Мустафина, Р.С. Давлетшин, Некоторые алгоритмы поиска оптимального управления каталитического процесса, *Журнал Средневолжского математического общества*, **8**, 2, 152-158 (2006).
3. В.И. Быков, В.М. Журавлев, *Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов*. ИПЦ КГТУ, Красноярск, 2002. 298 с.
4. Р.С. Давлетшин, С.А. Мустафина, А.В. Балаев, С.И. Спивак, О моделировании процесса гидрирования а-пинена, *Катализ в промышленности*, **6**, 34-40 (2005).
5. С.А. Мустафина, Р.С. Давлетшин, А.В. Балаев, С.И. Спивак, Выбор типа реактора для проведения каталитического процесса гидрирования а-пинена, *Обозрение прикладной и промышленной математики*, **12**, 2, 446-447 (2005).
6. Р.С. Давлетшин, С.А. Мустафина, С.И. Спивак, Исследование процесса гидрирования а-пинена в реакторе с неподвижным слоем катализатора, *Вестник Башкирского университета*, **10**, 2, 15-18 (2005).
7. С.А. Мустафина, А.В. Балаев, Р.С. Давлетшин, С.И. Спивак, У.М. Джемилев, Моделирование процесса газожидкостного гидрирования а-пинена в трубчатых реакторах, *Доклады Академии наук*, **406**, 5, 647-650 (2006).
8. Д. Каханер, К. Моулер, С. Нэш, *Численные методы и программное обеспечение*. Мир, Москва, 1998. 575 с.
9. М.В. Тихонова, И.М. Губайдуллин, С.И. Спивак, Численное решение прямой кинетической задачи методами Розенброка и Мишельсена для жестких систем дифференциальных уравнений, *Журнал Средневолжского математического общества*, **12**, 2, 26-33 (2010).
10. S.A. Mustafina, Yu.A. Valieva, R.S. Davletshin, A.V. Balaev, S.I. Spivak, Optimization of catalytic processes and reactors, *Kinetics and Catalysis*, **46**, 5, 705-711 (2005).
11. С.А. Мустафина, Р.С. Давлетшин, С.И. Спивак, Математическое моделирование и оптимизация процесса гидрирования а-пинена, *Обозрение прикладной и промышленной математики*, **11**, 2, 376 (2004).

© **А. Н. Иванов** - магистрант кафедры математического моделирования Стерлитамакского филиала ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет», sanekclubstr@mail.ru; **С. А. Мустафина** - д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой математического моделирования Стерлитамакского филиала ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет», mustafina_sa@mail.ru.

© **A. N. Ivanov** - graduate student of the department of mathematical modeling, Sterlitamak Branch of Bashkir State University, sanekclubstr@mail.ru; **S. A. Mustafina** - doctor of Science, Professor, head of chair of mathematical modeling, Sterlitamak Branch of Bashkir State University, mustafina_sa@mail.ru.

СОДЕРЖАНИЕ

ХИМИЯ

<i>Чачков Д.В., Михайлов О.В.</i> Молекулярные структуры полиядерных металлокластеров по данным расчета методом DFT. XVI. (Гетероби)пентаядерный кластер Al_2Zn_3	5
<i>Доснязова А.Г., Маликова Р.Н., Ишбаева С.М., Насретдинова Р.Н.</i> Синтез и электрохимические свойства циклопентенофуллеренов, содержащих малеопимароимидный фрагмент	9
<i>Гуревич П.А., Литин К.В.</i> Антипролиферативная активность некоторых представителей 2-оксопиридин-3,4-дикарбонитрилов	14
<i>Евгеньев М.И., Ермолаева Е.А., Валитова Я.Р., Евгеньева И.И.</i> Влияние кислотности замещенных 5,7-динитробензофуразановых и нитробензодифуразановых производных ароматических аминов на их элюирование в условиях ОФ-ВЭЖХ	16
<i>Захарьева А.Т., Карякин М.Е., Лапаев Д.В., Молостова Е.Ю., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.</i> Определение относительного квантового выхода люминесценции растворов мезогенных комплексов европия в толуоле	19
<i>Тунцева С.Н., Гайфуллин Р.А., Бадрутдинова А.И., Тухбатов Б.Р., Гайфуллин А.А.</i> Катализатор эпоксидирования олефинов на основе молибденовой сини	22
<i>Гуревич П.А., Федосеев С.В., Григорьева А.О.</i> Противотуберкулезная активность аммониевых солей 3-амино-8-гидрокси-1,6-диоксо-4-циано-2,7-диазаспиро[4.4]нон-3-ен-2-идов	25

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

<i>Ванчаков М.В., Смолин А.С., Канарский А.В.</i> Интенсификация роспуска макулатуры в воде	27
<i>Годунов Е.Б., Кузнецова И.А., Клевлеев В.М.</i> Современные проблемы и пути решения комплексной утилизации отработанной серной кислоты и химических источников тока марганцево-цинковой системы	31
<i>Морозова Н.Н., Майсурадзе Н.В., Клоков В.В.</i> Исследование гидрофобизации гипсовых и композиционно-гипсовых материалов	34
<i>Ванчаков М.В., Смолин А.С., Канарский А.В.</i> Очистка макулатурной массы от липких включений	38
<i>Тихонов А.С., Чапайкин Д.Н., Суворова И.А., Анисимова В.И.</i> Обзор промышленных методов производства пероксида водорода	42
<i>Тучкова О.А.</i> Структурообразователи для обеспечения экологической безопасности при разливах нефти и нефтепродуктов	44
<i>Шабиев Р.О., Семенов Р.В., Смолин А.С., Дойнеко В.А., Канарский А.В.</i> Перспектива применения флотации для облагораживания полиграфической макулатуры	47

ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ И ИЗДЕЛИЙ ТЕКСТИЛЬНОЙ И ЛЕГКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

<i>Тихонова В.П., Рахматуллина Г.Р., Ахвердиев Р.Ф., Баширова А.</i> Исследование влияния неравновесной низкотемпературной плазмы на отмочно-зольные процессы производства кожи из шкур кеты	51
<i>Бугаева А.И., Илюшина С.В., Красина И.В., Антонова М.В.</i> Применение биотехнологий в модификации хлопка	54
<i>Ибрагимов Р.Г., Вознесенский Э.Ф., Нефедьев Е.С., Вишневская О.В., Хайруллин А.К.</i> Исследование структуры модифицированных в плазме беспористых мембранных покрытий текстильных материалов	57
<i>Панкова Е.А., Фукина О.В., Рахматуллина Г.Р.</i> Исследование влияния плазмохимической модификации биополимеров активными газами на свойства натуральных меховых материалов	61
<i>Иевлева В.В., Хамматова В.В.</i> Анализ технического текстиля, применяемого для автомобильных шин	64
<i>Тихонова В.П., Рахматуллина Г.Р., Ахвердиев Р.Ф., Гатауллина К.</i> Исследование влияния неравновесной низкотемпературной плазмы на отмочно-зольные процессы производства пергамента из шкур козы	69
<i>Фаткуллина Р.Р., Новичугов И.А.</i> Подбор материала полимерного состава при проектировании жилета работника страховой компании	72

ИНФОРМАТИКА, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА И УПРАВЛЕНИЕ

<i>Дуев С.И.</i> Математическое моделирование режимов функционирования рециркуляционной системы реактор – ректификационная колонна	75
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----

<i>Будникова И.К., Сокова А.О., Приймак Е.В.</i> Автоматизация маркетингового анкетирования	78
<i>Иванов А.Н., Мустафина С.А.</i> Расчет процесса гидрирования α -пинена в трубчатом реакторе с прямотоком теплоносителя средствами пакета Mathcad Prime	81
<i>Ахмадиев Ф.Г.</i> Математическое моделирование течения неньютоновских сред в цилиндрических каналах произвольного поперечного сечения	87
<i>Макаров В.Г., Горбачевский Н.И., Аббазов А.Т., Каримов Д.А.</i> Модель разомкнутой мехатронной системы трехуровневый автономный инвертор напряжения – трехфазный асинхронный двигатель с короткозамкнутым ротором в пакете MatLab	90
<i>Тумаева Е.В., Горбачевский Н.И.</i> Модернизация системы управления диагонально-резательного агрегата на базе оборудования «Mitsubishi Electric»	96
<i>Хасанов Р.М., Лиштаков А.А., Чистов Ю.С.</i> Влияние розлива горячей жидкости, ограниченного стеной на интенсивность теплового излучения в зависимости от расстояния до очага пожара	99
<i>Тутубалин П.И., Кирпичников А.П.</i> Подход к сокрытию данных в распределённой системе	102
<i>Хасанов Р.М., Лиштаков А.А., Чистов Ю.С.</i> Исследование интенсивности теплового излучения в зависимости от очага пожара и площади розлива легко воспламеняющихся жидкостей и горючих веществ	110
<i>Якимов И.М., Кирпичников А.П., Мокшин В.В., Яхина З.Т.</i> Сравнение систем структурного и имитационного моделирования по модели М/М/5	113

ОБЩАЯ БИОЛОГИЯ

<i>Зиганишина Э.Э., Мохаммед В.Ш., Шулаев Н.В., Беспятых А.В., Зиганишин А.М.</i> Особенности бактериального сообщества кишечника личинок жуков-ксилофагов (<i>Cerambycidae</i>)	120
<i>Иванова Г.А., Сысоева М.А., Серова К.Е.</i> Экстракция веществ полифенольной природы из семян лядвенца рогатого (<i>Lotus corniculatus</i>)	125
<i>Романова Н.К.</i> Сукцинаты – перспективные добавки в технологиях продуктов из растительного сырья	128
<i>Старостина И.В., Свергузова С.В., Столяров Д.В., Порожнюк Е.В., Аничина Я.Н., Шайхиев И.Г.</i> Отработанный кизельгуровый шлам маслоэкстракционного производства – сырье для получения сорбционного материала	133
<i>Степанова С.В.</i> Очистка модельных вод от ионов трехвалентного железа сточными водами производства целлюлозы из отходов злаковых культур	137
<i>Тунакова Ю.А., Файзуллин Р.И., Валиев В.С., Габдрахманова Г.Н., Кузнецова О.Н.</i> Создание фильтро-минерализационной смеси для обеспечения безопасности и физиологической полноценности питьевых вод, доходящих до потребителя на примере г.Казани	142
<i>Цыганов М.С., Никитина Е.В.</i> Гистологические свойства тапиоковых крахмалов, модифицированных амилосубтилином или амилазой <i>Bacillus licheniformis</i>	145
<i>Шамсутдинов И.И., Баязитова Л.Т., Гребеничкова М.М., Миронов М.М.</i> Антимикробные свойства наноструктурированных плазменных конденсатов для медицинских имплантатов	149
Правила для авторов	152