**Применение качественных методов анализа дифференциальных уравнений, описывающих физико-химические процессы**

**Акрамов Талгат Акрамович**, д.ф.-м.н., профессор

кафедры информационных технологий УИ(ф) РЭУ

450080, г. Уфа, ул. Менделеева 177\3,

 Уфимский институт (филиал)

Российского Экономического Университета (УИ(и) РЭУ).

Факс: 8 (347) 2 52 99 77; телефон: 8 (347) 2 73 12 73

e-mail: talgataa@hotbox.ru

**Ключевые слова:** математические модели, химические процессы, реактора, прямо и противоточные колонны, устойчивость, стационарные и периодические режимы, бифуркация Хопфа.

**Реферат.** Статья посвящена обзору результатов по качественной теории дифференциальных уравнений, которые не только нашли применение в моделировании физико-химических процессов, но и стимулировались ими. Рассмотрены вопросы числа и устойчивости стационарных решений, получены условия бифуркации периодических режимов из них. Показано, что в отличие от прямоточного потока веществ при их химическом взаимопревращении в противотоке возможно возникновение периодических по времени решений около стационарных. Численными расчетами модели противоточного реактора (на примере кинетики Лотка-Вольтера) показано, что периодические режимы могут дать больший выход полезного продукта по сравнению со стационарным режимом в прямоточном реакторе или реакторе идеального смешения при одной и той же кинетике.

**Структурная и параметрическая идентификация кинетических моделей химических реакций с участием металлоорганических соединений на основе информационно-вычислительной**

**аналитической системы**

**Губайдуллин Ирек Марсович**

Институт нефтехимии и катализа РАН, с.н.с. лаборатории математической химии

Адрес: 450075, г. Уфа, проспект Октября, 141

Тел. раб: +7 347 284-27-50

e-mail: irekmars@mail.ru

**Коледина Камила Феликсовна**

Уфимский государственный университет экономики и сервиса, и.о. заведующего кафедрой информатики и информационно-коммуникационных технологий.

Адрес: 450078, г. Уфа, Чернышевского, 145

e-mail: koledinakamla@mail.ru

**Спивак Семен Израилевич**

Башкирский государственный университет, заведующий кафедрой математического моделирования.

Адрес: 450076, г. Уфа, Заки Валиди, 32

Тел. раб: (347)-2299635

e-mail: semen.spivak@mail.ru

**Ключевые слова:** информационно-вычислительная аналитическая система, металлорганические соединения, индукционный период, база данных кинетических исследований, автоматизированная система.

**Реферат.** Рассматривается методология проектирования, разработки и реализация информационно-вычислительных аналитических систем для построения кинетических моделей (ИВАС КМ). Описание компонентов ИВАС КМ таких как, база данных кинетических исследований, комплексы программ решения прямой и обратной кинетической задачи с использованием технологии параллельных вычислений представлены на примеры исследования механизмов реакции гидроалюминирования (ГА) олефинов с алюминийорганическими соединениями в присутствии сокатализатора Cp2ZrCl2. Определены числовые характеристики индукционного периода рассматриваемой реакции, зависимость реакционной способности ряда ацетиленов в реакции ГА олефинов.

**Определение условий безопасного ведения**

**процесса окисления этилена в окись этилена**

**Чесноков Борис Борисович**, д.т.н.

ЗАО «СИНПЕТ», директор

Тел . 8(495) 930-34-51

e-mail olches@olches.ps.msu.su

**Ключевые слова**: окись этилена, промышленные каталитические реактора, аварийные остановки, тепловые срывы, запас технологических параметров к срыву.

**Реферат.** Статья посвящена моему учителю, хорошо известному учёному Михаилу Гавриловичу Слинько. Наше научное содружество в области процесса окисления этилена в окись этилена продолжалось более 50 лет. В статье рассмотрен механизм возникновения и развития тепловых срывов в промышленных каталитических реакторах на основе теории самоорганизованной критичности. Проанализированы тепловые срывы и аварийные остановки промышленных трубчатых реакторов производства окиси этилена и условия их возникновения. В опытных трубках – элементе промышленного реактора проведены специальные эксперименты в реальных условиях по изучению возникновения и развития теплового срыва. Определены потенциально опасные области работы реакторов, а также медленные переменные, позволяющие в большинстве случаев зафиксировать появление локальных тепловых срывов в отдельных трубках промышленного реактора, определять величину запаса технологических параметров и предотвратить распространение теплового срыва на весь реактор.

**Влияние гидроксида натрия на кристаллизацию солей**

**в системе HCOONa – NaCl – H2O**

**Кудряшова Ольга Станиславовна**

Естественнонаучный институт Пермского государственного национального исследовательского университета, д.х.н., профессор, главный научный сотрудник

Адрес: 614990, г. Пермь, ул. Генкеля, 4,

Тел. раб. 8(342)239-65-31

е-mail: oskudr@ psu.ru,

**Матвеева Ксения Романовна**

ООО «Пермский лакокрасочный завод», к.х.н.

Адрес: 614022, г. Пермь, ул. Левченко, 1.

Тел. раб. 8(342)280-28-35

е-mail: ksu-ksu8@yandex.ru

**Ключевые слова:** водно-солевая система, формиат натрия, хлорид натрия, гидроксид натрия.

**Реферат.**Исследовано влияние гидроксида натрия на кристаллизацию солей в системе HCOONa – NaCl – H2O с целью определения температурно-концентрационных параметров процесса получения формиата натрия с минимальной примесью хлорида натрия. Изучена растворимость в трехкомпонентной системе HCOONa – NaOH – H2O и четырех разрезах системы HCOONa – NaCl – NaOH – H2O при 25 и 50°С. Установлено, что повышение концентрации щелочи приводит к высаливанию хлорида натрия и получению более чистого формиата натрия. Полученные экспериментальные результаты для модельных систем проверены на реальных технологических смесях. При проведении лабораторных испытаний установлены особенности процесса кристаллизации солей.

**Технологические основы процесса синтеза N-оксипропилированного анилина**

**Линькова Татьяна Сергеевна**

Старший преподаватель кафедры Химическая технология органических веществ Нижнекамского химико-технологического института (филиала) ФГБОУ ВПО «КНИТУ»

Адрес: 423570, г. Нижнекамск, Строителей 47.

E-mail: tatiana-Linkova@yandex.ru

**Земский Дмитрий Николаевич**

Заведующий кафедрой Химическая технология органических веществ Нижнекамского химико-технологического института (филиала) ФГБОУ ВПО «КНИТУ»

Адрес: 423570, г. Нижнекамск, Строителей 47.

E-mail: zemski08@pochta.ru

**Земский Николай Иванович**

Старший преподаватель кафедры Химическая технология органических веществ Нижнекамского химико-технологического института (филиала) ФГБОУ ВПО «КНИТУ»

Адрес: 423570, г. Нижнекамск, Строителей 47.

**Курлянд Сергей Карлович**

Заведующий лабораторией №5 ФГУП «НИИСК»

Адрес: 198035, г. Санкт-Петербург, Гапсальская, 1.

**Долганов Андрей Викторович**

Заместитель директора по АРИ Нижнекамского химико-технологического института (филиала) ФГБОУ ВПО «КНИТУ»

Адрес: 423570, г. Нижнекамск, Строителей 47.

**Ключевые слова**: N-оксипропилированный анилин, технология синтеза оксипропилированных аминов, оптимизация технологии синтеза оксипропилированного анилина.

**Реферат**. Ароматические аминоспирты находят широкое применение во многих областях народного хозяйства, в том числе и для производства стабилизаторов. Промышленная реализация процессов получения стабилизаторов и модификаторов каучуков позволит решить проблему импортозамещения по важным направлениям тонкого органического синтеза. В работе рассматривается технология получения N-оксипропилированного анилина, применение и свойства. Разрабатывается технологическая схема и определяются оптимальные параметры процесса, позволяющие достичь максимальный выход целевого продукта при минимальных удельных энергозатратах и материальных затратах. Предложена схема рекуперации тепла экзотермической реакции, которая характеризуется 3-5 % меньшими энергозатратами по сравнению с исходной схемой.

**Изучение влияния полиэфиримида на свойства связующего на основе эпоксидного олигомера ЭД-20 методом динамического механического анализа[[1]](#footnote-1)**

**Сопотов Ростислав Игоревич**

Российский химико-технический университет им. Д.И. Менделеева, факультет НПМ, кафедра переработки пластмасс, аспирант

Адрес: 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 9.

e-mail: rostislav-sopotov@yandex.ru.

**Зюкин Сергей Владимирович**

Российский химико-технический университет им. Д.И. Менделеева, факультет НПМ, кафедра переработки пластмасс, аспирант

Адрес: 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 9.;

**Бродский Владимир Андреевич**

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, к.х.н.,научный сотрудник кафедры технологии электрохимических процессов

Адрес: 125047, Москва, Миусская пл., 9

Тел. раб. 8(499)978-61-70

е-mail: vladimir\_brodsky@mail.ru

**Кербер Михаил Леонидович**

Российский химико-технический университет им. Д.И. Менделеева, факультет НПМ, кафедра переработки пластмасс, профессор, д.х.н.

Адрес: 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 9.

e-mail: kerber32@mail.ru

**Дорошенко Юлий Евсеевич**

Российский химико-технический университет им. Д.И. Менделеева, факультет НПЬ, кафедра технологии пластмасс, главный научный сотрудник, д.х.н.,

Адрес: 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 9.;

**Горбунова Ирина Юрьевна**

Российский химико-технический университет им. Д.И. Менделеева, факультет НПМ, кафедра переработки пластмасс, профессор, д.х.н.

Адрес: 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 9.

Тел: (499) 978-97-96

e-mail: giy161@ya.ru

**Ключевые слова:** эпоксидное связующее, эпоксидный олигомер, ЭД-20, полиэфиримид, метод ДМА.

**Реферат.** В последнее время композиционные материалы находят широкое применение в различных областях промышленности. Используемые термореактивные связующие имеют ряд недостатков: низкая теплостой­кость и невысокая стойкость к ударным нагрузкам. Целью данной работы являлось изучение релаксационных свойств композиции на базе эпоксидного олигомера ЭД-20 и ДАДФС, модифицированного ПЭИ. Для систем, отверждаемых при различных температурных режимах, было определено изменение модуля упругости, тангенса угла механических потерь и температуры стеклования (Тс) методом ДМА. Показана перспективность введения полиэфиримида для модификации эпоксидного связующего.

1. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках базовой части задания на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности №2014/171 [↑](#footnote-ref-1)