

РЕФЕРАТ

атестаційної магістерської дисертації на тему «**Моделювання гетерогенного каталітичного процесу відновлення альдегідів та кетонів**»

Дана наукова робота загальним обсягом 128 сторінок, містить 39 ілюстрацій, 22 таблиці, 2 додатки та 54 джерела за переліком посилань.

Мета і завдання дослідження. Мета досліджень полягає в моделюванні гетерогенних каталітичних процесів відновлення альдегідів та кетонів, розробці алгоритму розрахунку констант швидкості реакцій та його програмна реалізація.

Об'єктом дослідження є комп'ютерне моделювання гетерогенного каталітичного процесу відновлення альдегідів та кетонів.

Предметом дослідження є комп'ютерно – інтегровані технології дослідження гетерогенних каталітичних процесів відновлення альдегідів та кетонів за механізмом Меєрвейна-Понндорфа-Верлея з використанням у процесі різних каталізаторів.

Методи дослідження. Для розв'язання поставлених завдань в даній роботі було використано наступні методи: математичного моделювання застосовано для опису об'єкту дослідження, метод Рунге-Кутта – для вирішення диференціальних рівнянь, якими описано об'єкт дослідження, а метод мінімізації середньоквадратичного відхилення (нев'язки) – для розрахунку констант швидкості.

Наукова новизна результатів. Застосовано метод Рунге-Кутта у поєднанні з методом мінімізації середньоквадратичного відхилення для вирішення диференціальних рівнянь та знаходження констант швидкості гетерогенно-каталітичних реакцій в процесах тонкого органічного синтезу з використанням як каталізаторів нових цеолітів та складних оксидів.

Практичне значення результатів. Розраховані значення констант швидкості можуть використовуватись для розв'язання прямої задачі хімічної кінетики, а також для моделювання хімічних реакторів. Розроблений

програмний модуль можна використовувати у навчальних і науково-дослідних установах для вирішення задачі ідентифікації кінетичних параметрів моделей.

Апробація результатів дисертації. Результати дослідження, що включені до дисертації, були оприлюднені на VI Міжнародній конференції студентів, аспірантів та молодих вчених з хімії та хімічної технології (Київ, 2016), XVIII Науковій молодіжній конференції «Проблеми та досягнення сучасної хімії» (Київ, 2016), 5 Міжнародній науково-практичній конференції «Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку» (Київ, 2016), XVI All-Ukrainian Students R&D Internet Conference (Київ, 2016), 43rd International Conference of the Slovak Society of Chemical Engineering (SSCHE) (High Tatras, 2016), IX Міжнародній заочній конференції «Розвиток науки в XXI столітті» (19, 2015).

Публікації. За матеріалами роботи опубліковано 7 праць, у тому числі 2 наукові статті у збірниках міжнародних конференцій та 5 тез доповідей на міжнародних та українських конференціях.

КОМП'ЮТЕРНО-ІНТЕГРОВАНІ ТЕХНОЛОГІЇ, МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, ГЕТЕРОГЕННИЙ КАТАЛІЗ, КОНСТАНТА ШВИДКОСТІ, АЛЬДЕГІДИ, КЕТОНИ, ЦЕОЛІТИ, ВІДНОВЛЕННЯ ЗА МЕСРВЕЙНОМ–ПОНДОРФОМ–ВЕРЛЕЄМ.

РЕФЕРАТ

аттестационной магистерской диссертации на тему «**Моделирование гетерогенного каталитического процесса восстановления альдегидов и кетонов**»

Данная научная работа общим объемом 128 страниц, содержит 39 иллюстраций, 22 таблицы, 2 приложения и 54 источника по перечню ссылок.

Цель и задачи исследования. Цель исследований заключается в моделировании гетерогенных каталитических процессов восстановления альдегидов и кетонов, разработке алгоритма расчета констант скорости реакций и его программная реализация.

Объектом исследования является компьютерное моделирование гетерогенного каталитического процесса восстановления альдегидов и кетонов.

Предметом исследования является компьютерно-интегрированные технологии исследования гетерогенных каталитических процессов восстановления альдегидов и кетонов по Меервейну-Понндорфу-Верлею с использованием в процессе различных катализаторов.

Методы исследования. Для решения поставленных задач в данной работе были использованы следующие методы: математического моделирования применен для описания объекта исследования, метод Рунге-Кутта - для решения дифференциальных уравнений, которыми описывается объект исследования, а метод минимизации среднеквадратического отклонения (невязки) - для расчета констант скорости.

Научная новизна результатов. Применен метод Рунге-Кутта в сочетании с методом минимизации среднеквадратического отклонения для решения дифференциальных уравнений и нахождения констант скорости гетерогенно-каталитических реакций в процессах тонкого органического синтеза с использованием в качестве катализаторов новых цеолитов и сложных оксидов.

Практическое значение результатов. Полученные значения констант скорости могут использоваться для решения прямой задачи химической кинетики, а также для моделирования химических реакторов. Разработанный программный модуль можно использовать в учебных и научно-исследовательских институтах для решения задачи идентификации кинетических параметров моделей.

Апробация результатов диссертации. Результаты исследования, включенные в диссертации, были обнародованы на VI Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по химии и химической технологии (Киев, 2016), XVIII Научной молодежной конференции «Проблемы и достижения современной химии» (Киев, 2016), 5 Международной научно-практической конференции «Компьютерное моделирование в химии и технологиях и системах устойчивого развития» (Киев, 2016), XVI All-Ukrainian Students R&D Internet Conference (Киев, 2016), 43rd International Conference of the Slovak Society of Chemical Engineering (SSCHE) (High Tatras, 2016), IX Международной заочной конференции «Развитие науки в XXI веке» (Харьков, 2015).

Публикации. По материалам работы опубликовано 7 работ, в том числе 2 научные статьи в сборниках международных конференций и 5 тезисов докладов на международных и украинских конференциях.

КОМПЬЮТЕРНО - ИНТЕГРИРОВАННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ,
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ГЕТЕРОГЕННЫЙ КАТАЛИЗ,
АЛЬДЕГИДЫ, КЕТОНЫ, ЦЕОЛИТЫ, ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПО
МЕЕРВЕЙНУ-ПОННДОРФУ-ВЕРЛЕЮ.

SUMMARY

of attestation master's degree work on “**Modeling of heterogeneous catalytic reduction process of aldehydes and ketones**”

This research work on 128 pages containing 39 illustrations, 22 tables, 2 applications and 54 sources by the list of literature links.

The purpose and objectives of the study. The purpose of research is modelling of heterogeneous catalytic reduction process of aldehydes and ketones, development of rate constants calculation algorithm and its software implementation.

The object of the study is computer modelling of heterogeneous catalytic reduction process of aldehydes and ketones.

The subject of the study is the computer integrated research technologies of heterogeneous catalytic reduction process of aldehydes and ketones according to Meerwein-Ponndorf-Verley mechanism with using of various catalysts in the process.

Research methods. The set of methods has been used to solve the tasks in this work. The mathematical modeling has been used to describe the object of research and the Runge-Kutta method in combination with the method of minimizing the standard deviation (residual) has been used to solve the differential equations that describe the object of study and to calculate the rate constants of reactions.

Scientific novelty. The Runge-Kutta method in combination with the method of minimizing of the standard deviation has been apply to the solution of differential equations and to finding the reaction rate constants of heterogeneous catalytic processes of fine organic synthesis with using the new zeolites and complex oxides.

The practical significance of the results. The calculated values of the rate constants can be used to solve the direct problem of chemical kinetics, as well as for modelling of chemical reactors. The programme module that has been

developed can be used at the educational and research institutions to identification the kinetic parameters of the models.

Approval of the research. Results of the research has been included in the thesis had been presented at the VI International Conference of students, graduate students and young scientists (Kyiv, 2016), XVIII Scientific Youth Conference «Problems and achievements of the modern chemistry» (Kyiv 2016), 5th International Scientific Practical Conference «Modeling and simulation for chemistry, technologies and sustainable development systems» (Kyiv 2016), XVI All-Ukrainian Students R&D Internet conference (Kyiv, 2016), 43rd International conference of the Slovak Society of Chemical Engineering (SSCHE) (High Tatras, 2016), IX International correspondence conference «Development of science in the XXI century» (Kharkov, 2015).

Publications. According to the materials of the work has been published 7 papers, including 2 articles in collections of international conferences and 5 abstracts at international and Ukrainian conferences.

COMPUTER INTEGRATED TECHNOLOGIES, MATHEMATICAL MODELLING, HETEROGENEOUS CATALYSIS, RATE CONSTANT, ALDEHYDES, KETONES, ZEOLITES, REDUCTION BY THE MEERWEIN-PONNDORF-VERLEY.