

РЕФЕРАТ

магістерської дисертаційної роботи на тему

«Комп'ютерне моделювання кінетики процесів органічного синтезу несиметричних ефірів»

Пояснювальна записка містить: 111 стор., 31 рис., 16 табл., 3 дод., 16 посилань.

Проблема ідентифікації кінетичних моделей є однією з кардинальних в будь-якій області хімії - фізичній, органічній, біологічній. Це пояснюється, зокрема, тим, що вирішення цієї проблеми багато в чому визначає стан і рівень розвитку теорії реакційної здатності хімічних сполук, яка дозволяє в свою чергу прогнозувати перебіг різних процесів і встановлювати шляхи спрямованого синтезу нових хімічних речовин із заданими властивостями. Проблема ідентифікації кінетичних моделей має і важливе практичне значення, бо як швидке і ефективно впровадження нових процесів в промисловості, так і проектування окремих хімічних виробництв неможливо без встановлення структури і динаміки хімічного перетворення, причому чим детальніше вивчена кінетика хімічної реакції і, тим точніші результати всіх наступних промислових прогнозів. Однак не дивлячись на своє значення для визначення механізму хімічної реакції, ця проблема залишається досі вивченої недокінця.

Предмет дослідження – комп'ютерно-інтегровані технології дослідження кінетики процесів органічного синтезу

Об'єкт - комп'ютерне моделювання кінетики процесів органічного синтезу несиметричних ефірів.

Мета роботи: розроблення математичної моделі кінетики процесів органічного синтезу несиметричних ефірів для різних каталізаторів та алгоритму проектування реакторів для промислового впровадження.

Наукова новизна.

Застосування промислових гететоренних цеолітних каталізаторів, що володіють високою вибірковістю. Врахування побічних продуктів реакції при проведенні параметричної ідентифікації. Застосування сучасних методів математичного моделювання кінетики хімічних реакторів, тестування розроблених алгоритмів та сходження результатів обчислень з відомими результатами натурних експериментів. Проведення комплексного дослідження кінетики органічного синтезу на основі параметричної ідентифікації

Практичне значення результатів. Співставлення результатів, отриманих за розрахунками за моделлю та експериментальних досліджень, показало можливість використання розроблених моделей для практичних задач.

АНІСОВИЙ АЛЬДЕГІД, ЕТЕРИФІКАЦІЯ, ЦЕОЛІТ, КАТАЛІЗАТОР,
МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ, ПАРАМЕТРИЧНА ІДЕНТИФІКАЦІЯ,
АДЕКВАТНІСТЬ, РЕАКЦІЯ МЕСРВЕЙНА – ПОННДОРФА – ВЕРЛЕЯ

РЕФЕРАТ

магистерской диссертационной работы на тему
**«Компьютерное моделирование кинетики процессов органического
синтеза несимметричных эфиров»**

Пояснительная записка содержит: 111 стр., 31 рис., 16 табл., 3 прилож., 16 ссылок.

Проблема идентификации кинетических моделей является одной из кардинальных в любой области химии - физической, органической, биологической. Это объясняется, в частности, тем, что решение этой проблемы во многом определяет состояние и уровень развития теории реакционной способности химических соединений, которая позволяет в свою очередь прогнозировать течение различных процессов и устанавливать пути направленного синтеза новых химических веществ с заданными свойствами. Проблема идентификации кинетических моделей имеет и важное практическое значение, так как быстрое и эффективное внедрение новых процессов в промышленности, так и проектирования отдельных химических производств невозможно без установления структуры и динамики химического превращения, причем чем подробнее изучена кинетика химической реакции и, тем более точные результаты всех последующих промысловых прогнозов. Однако несмотря на свое значение для определения механизма химической реакции, эта проблема остается до сих пор изученной недоконца.

Предмет исследования – компьютерно - интегрированные технологии исследования кинетики процессов органического синтеза.

Объект - компьютерное моделирование кинетики процессов органического синтеза несимметричных эфиров.

Цель работы: разработка математической модели кинетики процессов органического синтеза несимметричных эфиров для различных катализаторов и алгоритма проектирования реакторов для промышленного внедрения.

Научная новизна.

Применение промышленных гетерогенных цеолитных катализаторов, обладающих высокой избирательностью. Учет побочных продуктов реакции при проведении параметрической идентификации. Применение современных методов математического моделирования кинетики химических реакторов, тестирование разработанных алгоритмов и восхождение результатов вычислений с известными результатами натуральных экспериментов. Проведение комплексного исследования кинетики органического синтеза на основе параметрической идентификации.

Практическое значение результатов. Сопоставление результатов, полученных по расчетам по модели и экспериментальных исследований, показало возможность использования разработанных моделей для практических задач.

АНИСОВЫЙ АЛЬДЕГИД, ЭТЕРИФИКАЦИИ, ЦЕОЛИТ, КАТАЛИЗАТОР, МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ, АДЕКВАТНОСТЬ, РЕАКЦИЯ МЕЕРВЕЙНА - ПОННДОРФА - ВЕРЛЕЯ

ABSTRACT

Master's thesis on the subject

“Computer modeling kinetics of the process of organic synthesis of asymmetrical esters“

Explanatory note: 111 pages, 31 figs, 16 tables, 3 app., 16 references.

The problem of identification of kinetic models is one of the fundamental in any field of chemistry - physical, organic, biological. This is because, in particular, the solution of this problem largely determines the state and level of development of the theory of the reactivity of chemical compounds, which allows in turn to predict the course of various processes and set the way for the directed synthesis of new chemicals with given characteristics. The problem of identification of kinetic models has important practical significance, because the rapid and effective implementation of new industrial processes and designing of chemical plants is impossible without establishing the structure and dynamics of chemical transformations, and the more detailed the kinetics of chemical reactions and, the more accurate the results of all the following industrial forecasts. However, despite its importance in determining the mechanism of a chemical reaction, this problem is still in the process of studying.

Scope of the study: computer-integrated technologies of research of kinetics of processes of organic synthesis

Subject matter of the study: computer simulation of kinetics of processes of organic synthesis of unsymmetrical esters

Objective of the study: development of a mathematical model of kinetics of processes of organic synthesis of asymmetrical esters for various catalysts and algorithm design for industrial reactors introduction.

Scientific newness

The use of industrial heterogeneous zeolite catalysts which have high selectivity.

Accounting of side products of the reaction during the carrying out parametric identification. The use of modern methods of mathematical modeling of the kinetics of chemical reactors, testing the developed algorithms and the convergence of calculation results with known results of field experiments. A comprehensive study of the kinetics of organic synthesis based on parametric identification.

Practical meaning of results. The comparison of the results obtained by model calculations and experimental investigations showed the possibility of using the developed models to practical problems.

ANISALDEHYDE, ESTERIFICATION, ZEOLITE, THE CATALYST,
MATHEMATICAL MODEL, PARAMETRIC IDENTIFICATION,
THE ADEQUACY, MEERWEIN-PONNDORF-VERLEY (MPV) REDUCTION