

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук  
(УФИЦ РАН)  
Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение  
Федерального государственного бюджетного научного учреждения  
Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук  
(ИНК УФИЦ РАН)

*На правах рукописи*

**Вовденко Михаил Константинович**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА  
ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛБЕНЗОЛА**

Направление 02.06.01 – Компьютерные и информационные науки  
Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы  
и комплексы программ

**НАУЧНЫЙ ДОКЛАД**

**Уфа-2019**

Работа выполнена в Институте нефтехимии и катализа – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук

Научный руководитель:

**Губайдуллин Ирек Марсович**  
доктор физико-матем. наук

Рецензенты:

**Ахметов Арслан Фаритович**  
профессор, член-корр. АН РБ,  
заведующий кафедрой "Технология нефти  
и газа" Уфимского государственного  
нефтяного технического университета

**Еникеева Лениза Владимировна**  
старший преподаватель кафедры математики  
Уфимского государственного нефтяного  
технического университета

Защита научно-квалификационной работы (диссертации) состоится «29» августа 2019 года в 10<sup>00</sup> часов на заседании аттестационной комиссии в Институте нефтехимии и катализа – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук по адресу: 450075, г. Уфа, проспект Октября, 141.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Фенол ( $C_6H_5OH$ ) и ацетон ( $C_3H_6O$ ) на сегодняшний день являются важнейшими веществами в современной нефтехимической промышленности. Первый широко используется в качестве сырья в дальнейших нефтехимических производствах. Второй также используется в химической и нефтехимической промышленности, также широко используется в производстве растворителей и лакокрасочной промышленности. На сегодняшний день более 90% объема получаемого в мире фенола получают так называемым кумольным способом. Исходным сырьем является кумол, или изопропилбензол (ИПБ). Изопропилбензол окисляют кислородом воздуха, получая промежуточный продукт – гидропероксид изопропилбензола (ГП ИПБ). В дальнейшем происходит укрепление ГП ИПБ из реакционной массы окисления (РМО) до необходимой концентрации, и уже концентрированный гидропероксид подвергается разложению на фенол и ацетон.

Не существует какой-либо общепризнанной реакционной схемы окисления изопропилбензола. Наличие большого количества различных реакционных схем и кинетических моделей обуславливается, с одной стороны различными условиями проведения экспериментов, а с другой – различными подходами, насчет того, какие именно реакции и механизмы вносят вклад в общую реакцию. Также следует отметить, что большинство экспериментов проводились в условия, далёких от промышленных. С другой стороны, процесс окисления ИПБ является взрывоопасным, и поэтому проведение опытных пробегов в промышленных условиях является затруднительным и зачастую невозможно. Поэтому необходимо создание модели процесса, которая бы могла считать в широком диапазоне изменяемых параметров (прежде всего температуры), как во время нормальной работы реактора, так и дающая возможность предсказывать изменения в ходе процесса при отклонениях от нормы. В связи с вышеизложенным, исследования, направленные на разработку модели процесса окисления изопропилбензола являются актуальными.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-07-00341А). РФФИ Участие в гранте РФФИ: 18-07-00341А «Оптимизация и управление химико-технологическими системами на основе численного моделирования кинетики с использованием высокопроизводительной вычислительной техники»

**Цель настоящей работы** состояла в создании математической модели процесса окисления изопропилбензола кислородом воздуха.

**Задачи исследования.** Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие наиболее важные задачи:

- разработка реакционной схемы процесса окисления изопропилбензола;
- создание кинетической модели окисления изопропилбензола на основе разработанной реакционной схеме;
- изучение возможности применения полученной кинетической модели для симулирования работы реактора окисления изопропилбензола.

### **Научная новизна результатов.**

1. Автором разработана реакционная схема окисления изопропилбензола, учитывающая основные группы и типы элементарных реакций, а также учитывающая образование и расходование наиболее важных побочных веществ;

2. Проведено кинетическое моделирование процесса окисления на основе разработанной реакционной схемы;

3. Разработан программный комплекс для моделирования реакции окисления изопропилбензола в среде Matlab2014R.

**Теоретическая и практическая значимость работы.** В результате проведенных исследований разработана реакционная схема окисления изопропилбензола, разработана кинетическая модель окисления изопропилбензола.

Создан комплекс программ для моделирования процесса окисления изопропилбензола. Создан комплекс программ для упрощенного моделирования реактора окисления изопропилбензола кислородом воздуха, в широком диапазоне изменяемых параметров.

**Методология и методы исследования.** В работе автора использовались методы, базирующиеся на аппарате теории кинетики сложных химических реакций, методы решения жестких систем дифференциальных уравнений, закон действующих масс, термодинамические законы.

#### **Положения, выносимые на защиту.**

1. Разработана реакционная схема процесса окисления изопропилбензола кислородом воздуха. Данная реакционная схема включает в себя “полный” механизм инициирования, учитывающий как образование радикалов с распадом гидропероксида изопропилбензола, так и без его участия. Также данная реакционная схема

2. Разработана кинетическая модель на основе полученной реакционной схемы окисления изопропилбензола.

3. Рассмотрена возможность применения данной кинетической модели для описания реактора окисления изопропилбензола. Была составлена упрощенная модель реактора окисления изопропилбензола.

**Степень достоверности результатов.** Высокая степень достоверности представленных результатов подтверждается использованием специализированных программных продуктов для проведения высокоэффективных вычислений, а также сравнением результатов расчётов с исследовательскими данными.

**Апробация работы.** Материалы диссертационной работы докладывались и обсуждались на VII Всероссийской научной школе-семинаре «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» имени Е.В.Воскресенского (г. Саранск, 2017), V Всероссийской научно-практической конференции, приуроченной к 110-летию со дня рождения академика А.Н.Тихонова «Математическое моделирование процессов и систем» (г. Стерлитамак, 2017), XI Международной конференции «Параллельные вычислительные технологии» (г. Казань, 2017), III-ой международной конференции «Информационные технологии и нанотехнологии», (г. Самара, 2017), IV-ой международной конференции «Информационные технологии и нанотехнологии», (г. Самара, 2018), V-ой международной конференции «Информационные технологии и нанотехнологии», (г. Самара, 2019), «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2019»(АПВПМ-19) (г. Новосибирск, 2019).

**Личный вклад автора.** Автору принадлежит решение основных задач диссертации. Личный вклад автора состоит в создании комплекса программ для моделирования процесса окисления изопропилбензола, участие в разработке математических моделей и алгоритмов,

проведение вычислительных экспериментов, интерпретации результатов, подготовке результатов исследования к опубликованию в научной печати.

**Публикации.** Автор является автором 7 работ. В том числе одна статья опубликована в периодическом издании, индексируемом в базе данных Web of science и одна работа – в Scopus, 6 – в сборниках трудов всероссийских и международных конференций, подано свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

**Структура и объем работы.** Диссертация изложена на 112 страницах машинописного текста, включает схемы, 17 рисунков и 19 таблиц. Состоит из введения, литературного обзора, обсуждения результатов, экспериментальной части, заключения, выводов и списка цитируемой литературы (108 наименований).

**Благодарности.** Автор выражает глубокую благодарность д. ф.-м.н. Губайдуллину И.М. за выбор направления исследования и постоянную поддержку в ходе выполнения работы, к.ф.-м.н. Коледину К.Ф. за методическое руководство и обсуждение полученных результатов.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

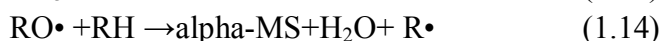
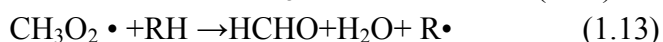
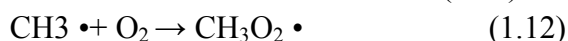
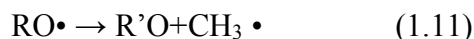
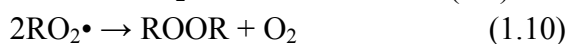
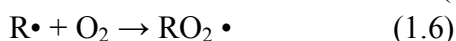
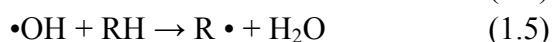
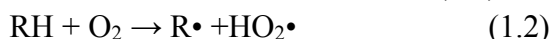
### Глава 1.

В первой главе проведён анализ и сравнение существующих реакционных механизмов, приводимых различными исследователями; описаны основные параметры, влияющие на протекание реакции и процесса окисления изопропилбензола.

Известно, что реакция окисления изопропилбензола является радикально-цепной, таким образом, по аналогии с другими радикально-цепными реакциями, можно выделить три группы элементарных реакций: реакции инициирования, реакции развития основной цепи, побочные реакции.

В работе приведен анализ и сравнение реакционных механизмов, приведённых различными исследователями. Ниже, в качестве примера приведено четыре таких реакционных схемы.

Реакционная схема (1):

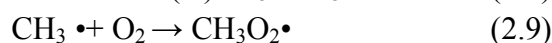
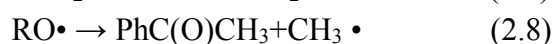
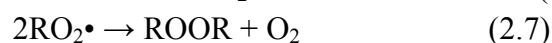
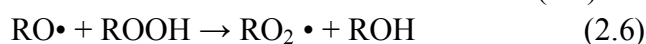
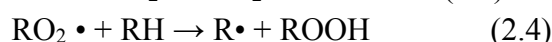
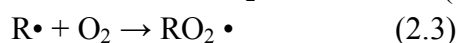
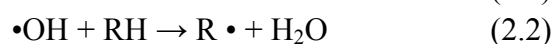


Реакционная схема (1) разработана японским исследователем К. Hattori. Реакции (1.1)-(1.5) относятся к типу иницирующих, в ходе которых от молекулы изопропилбензола (RH) отделяется кумил-радикал (R•), в последствии принимающий участие в реакциях развития цепи (1.6) и (1.7). По реакционной схеме видно, что существует два типа механизмов иницирования: без участия инициатора, и с участием инициатора. В первом случае (реакции (1.1) и (1.2)) кумилрадикал образуется из-за распада молекулы изопропилбензола или из-за взаимодействия кислорода и изопропилбензола. При разработке своей кинетической модели исследователь не учитывал реакции (1.1) и (1.2), принимая, что скорость этих реакций гораздо меньше, по сравнению с другими механизмами иницирования, что подтверждалось и другими исследователями.

Реакции (1.6) и (1.7) относятся к реакциям основной цепи, в ходе которой образуется основное количество гидропероксида изопропилбензола.

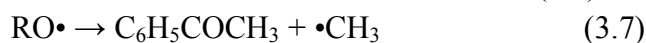
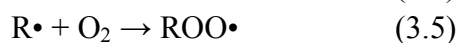
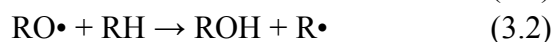
Реакции (1.8)-(1.14) относятся к побочным реакциями, среди которых можно выделить такие типы реакций, как обрыв основной цепи (прим. – (1.8),(1.9),(1.10)), образование ацетофенона с одновременным образованием метилрадикала и последующим окислением метилрадикала (1.11-1.13), реакция образования альфаметилстирола (1.14).

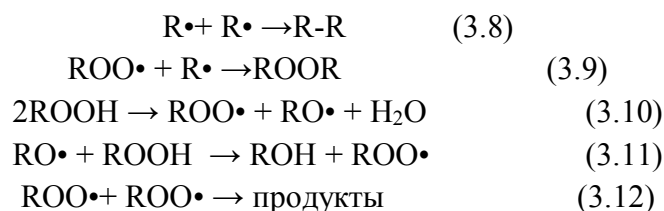
Реакционная схема (2):



Существенным отличием реакционной схемы (2) от схемы (1) является упрощённый механизм иницирования, где остаются только реакции, связанные с распадом гидропероксида. Также в некоторой степени отличаются побочные реакции.

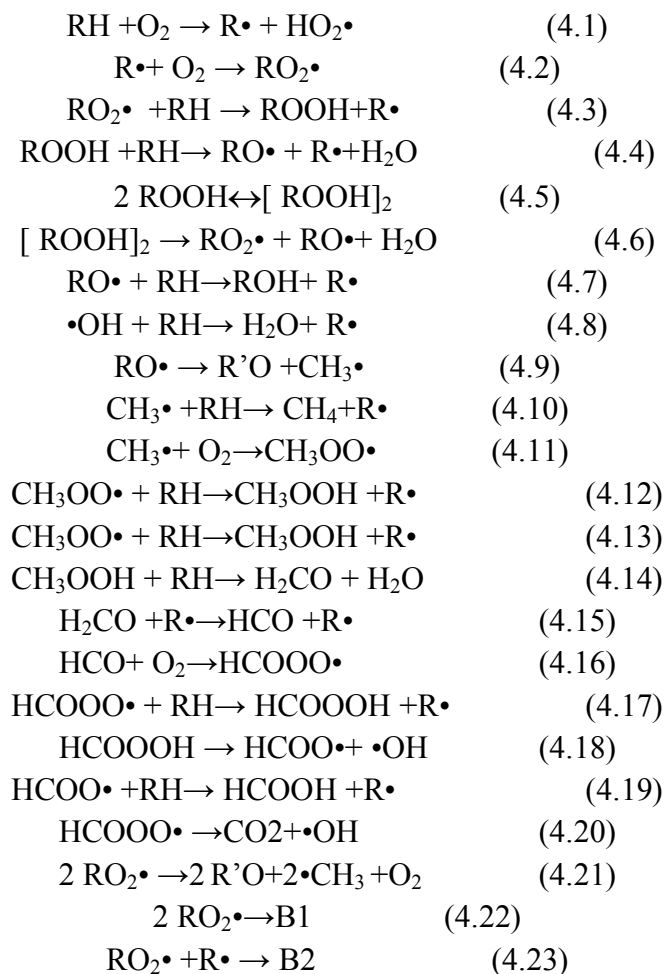
Реакционная схема (3):





Данная реакционная схема не включает в себя механизм инициирования без участия гидропероксида изопропилбензола, аналогично с реакционной схемой 2. При этом исследователь в реакционной схеме (3) не стал ясно указывать продукты взаимодействия пероксид-радикалов (3.12), указывая на различные варианты образующихся побочных продуктов. Существенным отличием от предыдущих двух моделей также является наличие реакций (3.11) и (3.10), в которых происходит распад гидропероксида изопропилбензола.

Реакционная схема (4):



Реакционная схема (4) содержит больше всего стадий по сравнению с другими, вышеописанными реакционными схемами. При этом большая часть элементарных реакций связана с окислением метилрадикала.

Прочие рассмотренные выше в ходе исследования реакционные схемы ничем принципиально не отличаются от приведённых выше четырёх реакционных схем. Основные различия между существующими реакционными схемами заключаются, прежде всего, в различных механизмах инициирования и реакций с образованиями побочных продуктов.

## Глава 2.

Во второй главе проводится разработка реакционной схемы и ведётся последующая работа по созданию кинетической модели процесса окисления изопропилбензола.

При разработке реакционной схемы были приняты следующие требования:

1. Поскольку элементарные реакции, относящиеся к основной цепи, остаются неизменными во всех рассмотрённых реакционных схемах, то и в разработанной реакционной схеме они также будут представлены без изменений;

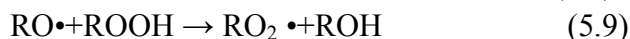
2. В реакциях должны быть чётко обозначены исходные вещества и получающиеся продукты;

3. При включении тех или иных побочных реакций в схему нужно руководствоваться следующими положениями:

2.1 Необходимо определить какие побочные вещества являются наиболее важными, чтобы определить, образование каких именно побочных веществ надо учесть в реакционной схеме;

2.2 С одной стороны, необходимо чтобы реакционная схема включала в себя все основные типы побочных реакций, происходящих в процессе. С другой стороны, необходимо избегать излишнего усложнения схемы, с одной стороны, ввиду отсутствия данных о протекании тех или иных реакций, а с другой из-за относительно небольшого их вклада в общий процесс.

Первоначально была разработана следующая реакционная схема (A1):



Не смотря на то, что механизм инициирования без участия гидропероксида изопропилбензола вносит относительно меньший вклад в общую реакцию, тем не менее, было решено включить его в реакционную схему.

В качестве основы для математической модели была взята система дифференциальных уравнений:

$$\frac{dc_i}{dt} = \sum_{j=1}^J v_{ij} w_j(k_j, k_{0j}, E_j, T, c_i), \quad i = 1, \dots, I$$



где  $C_i$  – концентрация  $i$ -того компонента ( $i=1..I$ ) [моль/л],  $t$  – время [мин],  $V_{ij}$  – стехиометрические коэффициенты  $i$ -того компонента в  $j$ -той реакции ( $j=1..J$ ),  $k_j$  – константа скорости  $j$ -той элементарной химической реакции,  $k_{0j}$  – предэкспоненциальный множитель для определения  $k_j$  по уравнению Аррениуса,  $T$  – температура (К),  $E_j$  – энергия активации той элементарной химической реакции,  $w_j$  – скорость  $j$ -той элементарной химической реакции,  $J$  – количество элементарных реакций в модели ( $J=16$ ),  $I$  – количество компонентов в модели.

Для включения в модель массообменной составляющей, обусловленной наличием межфазного взаимодействия, включаем в модель дополнительное уравнение:

$$\frac{d[O_2]}{dt} = R_{Ox} + \frac{k_l a'}{1 - \varepsilon_g} \left( \frac{p_{O_2}}{H} - [O_2] \right)$$

Где  $k_l$  – коэффициент массопереноса через фазу газ-жидкость,  $a'$  – площадь межфазного соприкосновения,  $\varepsilon_g$  – газосодержание,  $H$  – коэффициент Генри,  $p_{O_2}$  – парциальное давление кислорода,  $[O_2]$  – концентрация кислорода,  $R_{Ox}$  – скорость изменения концентрации кислорода в химической реакции.

В работе по математическому моделированию применялся программный комплекс Matlab2014R и C++. В данном программном комплексе для решения обратных и были применены следующие математические методы: метод Рунге-Кутты 4-ого порядка, метод Гира, метод имитации отжига, генетический алгоритм.

Полученные результаты сравнивались с результатами расчёта других моделей, приведённых различными исследователями. Одной из таких моделей является модель, составленная на основе реакционной схемы (4), но при этом упрощённая настолько, что в ней не учитывается механизм инициирования без ГП ИПБ, и распад ГП ИПБ (модель Б1). Для исследования насколько сильно влияет механизм инициирования на общий результат расчёта модели проводился расчёт при разных значениях начальной концентрации инициатора (ГП ИПБ).

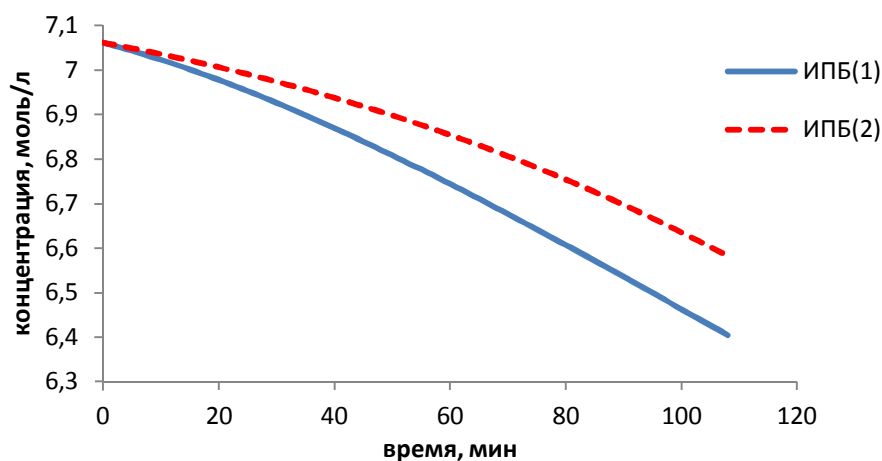


Рисунок 1. Результаты расчёта кинетических моделей А1 (кривая ИПБ(1)) и Б1 (кривая ИПБ(2)) при 118 °С и  $[ROOH]_0=1$  % масс.

На рисунке 2 представлены результаты расчёта, аналогичные тем, что представлены на рисунке 1, то для гидропероксида изопропилбензола.

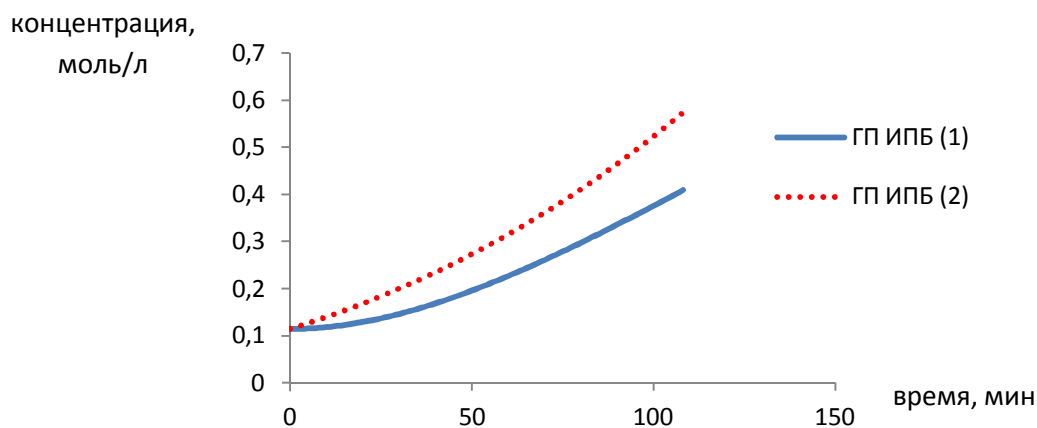


Рисунок 2. Результаты расчёта кинетических моделей А1 (кривая ГП ИПБ(1)) и Б1 (кривая ГП ИПБ(2)) при 118 °С и  $[ROOH]_0=1\%$  масс.

На рисунке 3 показано изменение результата расчёта (изменение концентрации гидропероксида с течением времени) модели А1 при разном содержании инициатора в смеси.

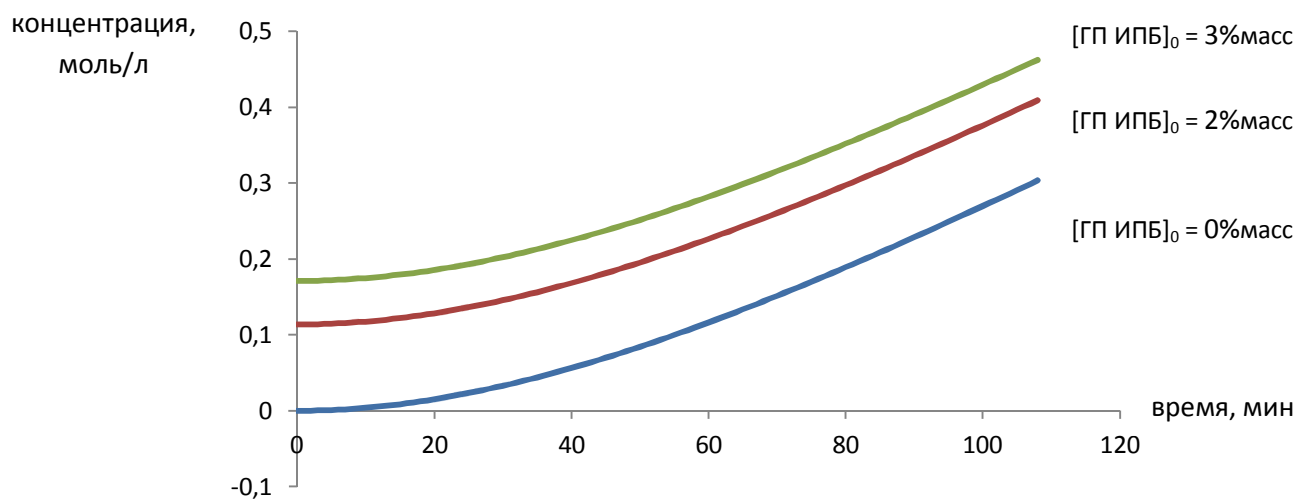


Рисунок 3. Результаты расчёта кинетической модели А1 при 118 °С.

На рисунке 4 показано изменение результата расчёта модели Б1 (изменение концентрации гидропероксида с течением времени) при разном содержании инициатора в смеси.

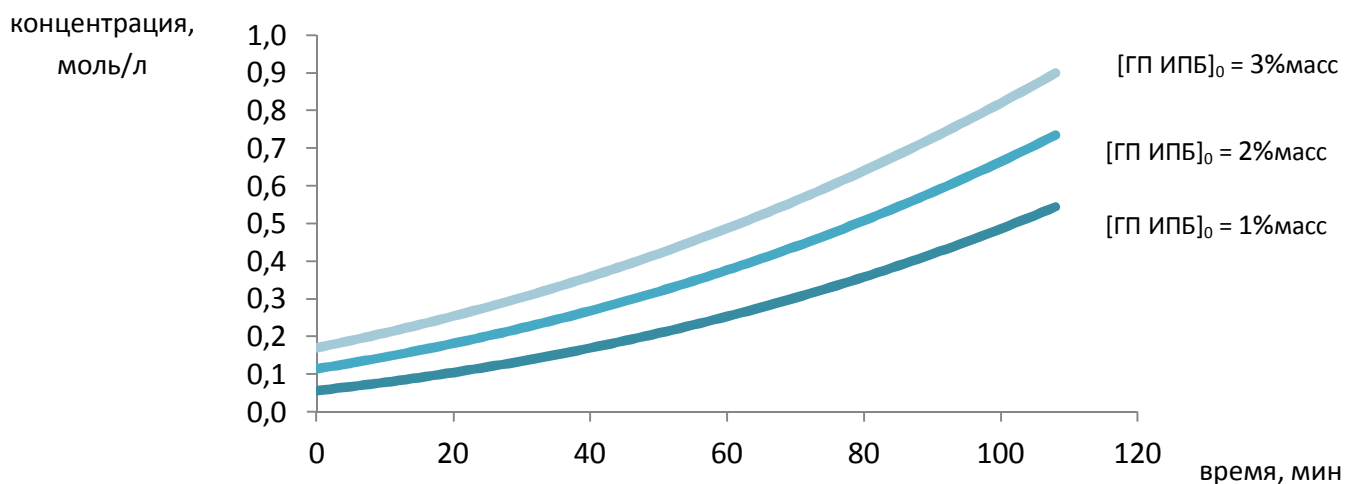


Рисунок 4. Результаты расчёта кинетической модели Б1 при 118 °С.

На рисунке 3 явно виден период инициирования (ориентировочно от 0 до 20 минут) и развития цепи. Период затухания в указанном временном промежутке не наступает. На рисунке 4 видно, что период инициирования практически отсутствует. Вместе с этим кривые на рисунке 3 получились практически параллельны между собой, что не совпадает с характером изменения кривых на рисунке 4, и с данными различных исследователей.

Из вышесказанного были обнаружены недостатки реакционной схемы А1, а значит и соответствующей ей кинетической модели.

При повторном рассмотрении различных реакционных схем окисления изопропилбензола было решено изменить в модели следующее:

1. Изменить механизм инициирования. Было решено изменить в схеме механизм инициирования без участия ГП ИПБ, убрав из него реакцию (5.1), поскольку ни в каких больше исследованиях, данная элементарная стадия не представлена.

2. Усложнить реакционную схему, дополнив группу побочных реакций, прежде всего добавив реакции распада гидропероксида изопропилбензола на побочные продукты, а также дополнив механизм окисления метил-радикала.

Полученная реакционная схема (А2) представлена

Таблица 1. Реакционная схема (А2).

№	Тип реакции	Реакция
1	Инициирование	$RH + O_2 \rightarrow R\cdot + HO_2\cdot$
2	Инициирование	$RH + HO_2\cdot \rightarrow R\cdot + H_2O_2$
3	Инициирование	$ROOH \rightarrow RO\cdot + HO\cdot$
4	Инициирование	$RO\cdot + RH \rightarrow R\cdot + ROH$
5	Инициирование	$\cdot OH + RH \rightarrow R\cdot + H_2O$
6	Основная цепь	$R\cdot + O_2 \rightarrow RO_2\cdot$
7	Основная цепь	$RO_2\cdot + RH \rightarrow R\cdot + ROOH$

8	Побочная	$RO\bullet \rightarrow R'O+CH_3\bullet$
9	Побочная	$2 RO_2\bullet \rightarrow 2R'O+2CH_3\bullet+O_2$
10	Побочная	$CH_3\bullet+O_2 \rightarrow CH_3O_2\bullet$
11	Побочная	$CH_3O_2\bullet+RH \rightarrow CH_3OOH+R\bullet$
12	Побочная	$CH_3OOH \rightarrow H_2CO+OH_2$
13	Побочная	$CH_3O_2\bullet+RO_2\bullet \rightarrow ROH+HCOH+O_2$
14	Побочная	$2 R\bullet \rightarrow R-R$
15	Побочная	$R\bullet + RO_2\bullet \rightarrow ROOR$
16	Побочная	$2RO_2\bullet \rightarrow ROOR + O_2$
17	Побочная	$2RO_2\bullet \rightarrow 2RO\bullet + O_2$
18	Побочная	$RO\bullet+ROOH \rightarrow ROH+ RO_2\bullet$
19	Побочная	$RO\bullet+RH \rightarrow \alpha\text{-MS}+H_2O+ R\bullet$
20	Побочная	$2ROOH \rightarrow RO_2\bullet+ RO\bullet+H_2O$

Были проведены исследования кинетической модели (A2) по определению кинетических параметров, аналогичные расчётам, проведённым для определения кинетических параметров модели (A1). В результате решения прямой и обратной кинетических задач в программном комплексе Matlab2014R, с использованием методов Рунге-Кутты 4-ого порядка и генетического алгоритма, были получены следующие параметры кинетической модели (A2):

Таблица 2. Параметры кинетической модели (A2).

№	$\ln(k_0)$	$E_a$ кДж/моль
1	$17.31 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	199.08
2	$15.42 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	111.02
3	24.66 с-1	104.76
4	$27.75 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	21.84
5	$25.43 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	20.15
6	$25.28 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	15.04
7	$27.93 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	97.90
8	28.71 с-1	75.55
9	$24.48 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	40.31
10	$22.67 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	39.43
11	$22.82 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	41.28
12	30.75 с-1	124.87
13	$33.68 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	33.11
14	$33.56 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	33.11

15	$30.07 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	33.11
16	$28.16 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	33.11
17	$23.67 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	28.29
18	$28.13 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	14.62
19	$29.33 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	14.47
20	$33.56 \cdot 10^{-3}$ мЗ/кмоль/с	15.30

### Глава 3.

В третьей главе рассматривается возможность применения разработанной кинетической модели для описания реактора окисления изопропилбензола. Для этого на основе полученной кинетической модели была разработана упрощённая модель реактора окисления изопропилбензола. Данные по работе реактора были взяты из открытых исследовательских источников. Для упрощения модели, на данном этапе, были приняты следующие допущения:

1. При расчёте по высоте реакционной зоны реактора была взята усреднённая температура.

2. Среднее время пребывания смеси в реакторе определялось на основании данных, представленных в открытых источниках. В данном расчёте время пребывания принималось 108 минут, при длине реакционной зоны 12.5 м.

3. Продольным перемешиванием пренебрегаем.

На рис.5 представлено схематичное изображение 9-секционного реактора окисления изопропилбензола. Красным выделена реакционная зона. Существуют различные вариации реакторов с различными геометрическими характеристиками. В данном случае примем длину реакционной зоны 12,5 м.

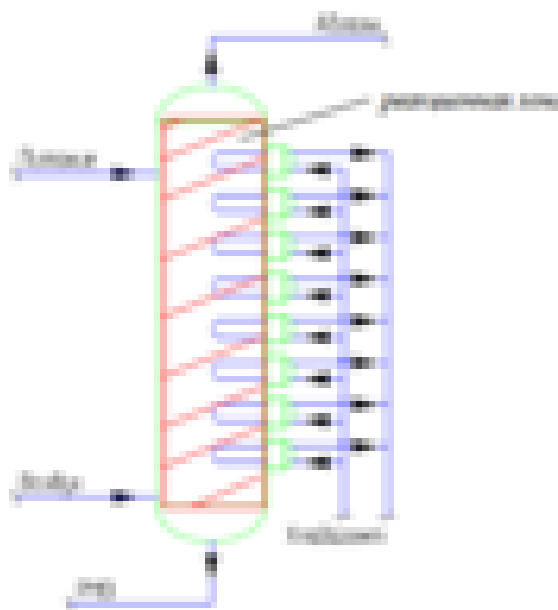


Рис. 5. Схематическое изображение реактора окисления изопропилбензола.

На рисунке 6 представлено изменение концентрации изопрропилбензола по высоте реактора, при усреднённой температуре по секциям 120 °С, при использовании кинетической модели А2.

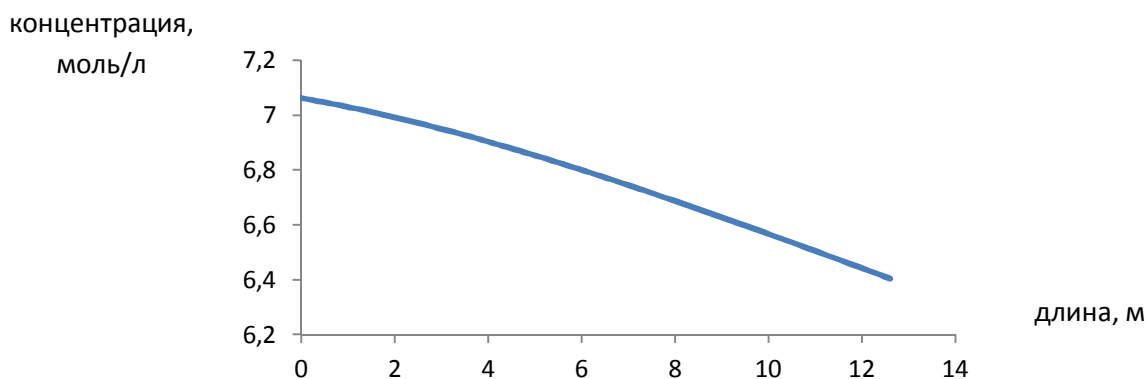


Рисунок 6. Изменение концентрации изопрропилбензола по высоте реакционной зоны реактора окисления.

Однако на практике, в технологическом исполнении, перед реактором окисления стоит теплообменник, сообщающий поступающему сырью определённое тепло. Можно считать, что в нём будут происходить реакции, которые не требуют кислорода для протекания, пусть и в течение короткого промежутка времени. Прежде всего это реакции инициирования с участием гидропероксида и распад гидропероксида на побочные продукты. На рисунке 7 представлено изменение концентрации изопрропилбензола по высоте реактора, при усреднённой температуре по секциям 120 °С, при использовании кинетической модели А2, и при учёте наличия теплообменника перед реактором, при температуре в теплообменнике 120 °С и средним временем пребывания 5 минут.

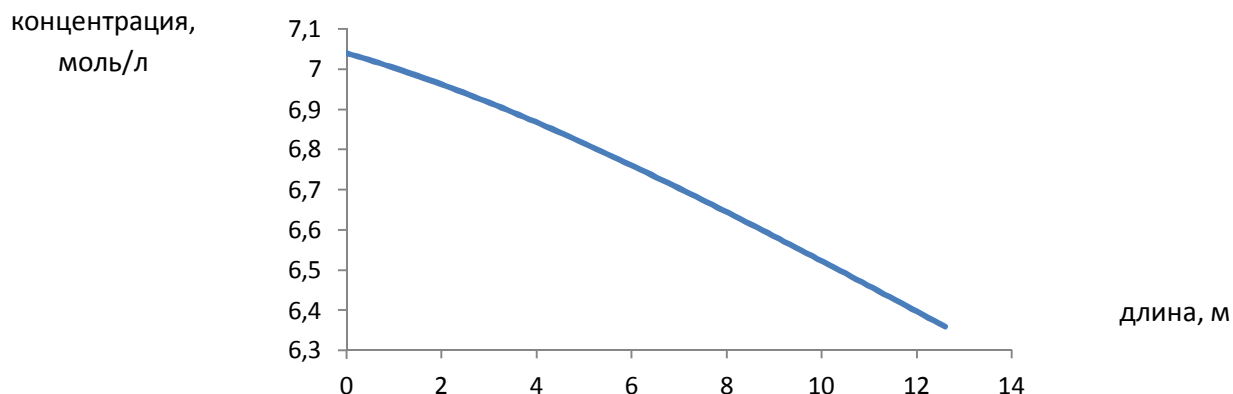


Рисунок 7. Изменение концентрации изопрропилбензола по высоте реакционной зоны реактора окисления с расчётом предварительного теплообменника.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ И ВЫВОДЫ

1. Проведён обзор различных существующих реакционных механизмов и кинетических моделей окисления изопропилбензола кислородом воздуха. Определены основные различия между рассмотренными реакционными схемами.

2. Проведено кинетическое моделирование процесса окисления на изопропилбензола. Разработано две реакционные схемы, для которых в последствии разработаны рабочие кинетические модели.

3. Разработан программный комплекс для моделирования процесса окисления изопропилбензола.

4. Проведено исследование по возможности использования разработанной кинетической модели для упрощённого описания реактора окисления изопропилбензола.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ОПУБЛИКОВАНО В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ:

1. Губайдуллин И.М., **Вовденко М.К.** Комплексы программ и численные методы при математическом моделировании химико-технологических процессов-история и стратегия развития // Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ материалы VII Всероссийской научной молодежной школы-семинара имени Е.В. Воскресенского с международным участием. 2016. С. 38-39.

2. **Вовденко М.К.**, Габитов С.А., Губайдуллин И.М. Применение существующих математических моделей окисления кумола к описанию промышленного реактора. В сборнике: Математическое моделирование процессов и систем // Материалы V Всероссийской научно-практической конференции, приуроченной к 110-летию со дня рождения академика А.Н. Тихонова. 2016. С. 156-160.

3. С.А. Габитов, **М.К. Вовденко**, К.Ф. Коледина, И.М. Губайдуллин Параллельные вычисления при моделировании реактора окисления кумола / Параллельные вычислительные технологии-XII международная конференция, ПАВТ'2018. 2018. С. 402 (РИНЦ).

4. **Вовденко М.К.**, Габитов С.А., Коледина К.Ф., Ахмеров Э.А., Санников А.Д. Моделирование реакции окисления изопропилбензола и реактора окисления // В сборнике: Информационные технологии и нанотехнологии Сборник трудов ИТНТ-2018. Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева. 2018. С. 1790-1793 (РИНЦ).

5. Ахмеров Э.А., **Вовденко М.К.**, Губайдуллин И.М. Математическое моделирование реакции получения МТБЭ // Материалы VIII Межд. молодежн. науч.-практ. конф. «Математическое моделирование процессов и систем». 2018. С. 69-71 (РИНЦ).

6. **Vovdenko M.K.**, Gubaidulin I.M., Koledina K.F., Koledin S.N. Isopropylbenzene oxidation reaction computer simulation // CEUR Workshop Proceedings 3. Сер. "M-ITNT 2017- Proceedings of the Computer Modeling Session at the International Conference on Information Technology and Nanotechnology". 2017. С. 20-23.

7. Koledina K.F., Gubaydullin I.M., **Vovdenko M.K.**, Koledin S.N., Karpenko A.P. MULTI-OBJECTIVE OPTIMIZATION OF CHEMICAL REACTION CONDITIONS BASED ON A KINETIC MODEL // Journal of Mathematical Chemistry. 2019. Т. 57. № 2. С. 484-493. (Web of Science).

8. **Вовденко М.К.**, Габитов С.А., Коледина К.Ф., Ахмеров Э.А., Санников А.Д. Моделирование реакции окисления изопропилбензола и реактора окисления // В сборнике: Информационные технологии и нанотехнологии Сборник трудов ИТНТ-2018. Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева. 2018. С. 1790-1793 (РИНЦ).