

На правах рукописи



БОРОВКОВА ЕКАТЕРИНА АЛЕКСАНДРОВНА

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ С
ГАЗОФАЗНЫМИ ГЕТЕРОГЕННО-КАТАЛИТИЧЕСКИМИ
РЕАКЦИЯМИ В ПРОИЗВОДСТВАХ СИНТЕЗ-ГАЗА И
АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ**

Специальности: 05.17.04 – технология органических веществ,
05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы
программ.

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Москва 2016

Работа выполнена на кафедре информатики и компьютерного проектирования федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Научный руководитель: доктор технических наук, профессор
Гартман Томаш Николаевич,
заведующий кафедрой информатики и компьютерного проектирования ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Научный консультант: доктор химических наук, профессор
Сапунов Валентин Николаевич,
профессор кафедры химической технологии основного органического и нефтехимического синтеза ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор
Лабутин Александр Николаевич,
заведующий кафедрой технической кибернетики и автоматики ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»

доктор технических наук, профессор
Солохин Аркадий Викторович,
профессор кафедры химии и технологии основного органического синтеза Института тонких химических технологий ФГБОУ ВО «Московский технологический университет»

Ведущая организация: **федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет»**

Защита состоится « » 2016 г. в часов на заседании диссертационного совета Д 212.204.02 в РХТУ им. Д. И. Менделеева (125047 Москва, Миусская пл., 9) в аудитории 443 (конференц-зал).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-библиотечном центре и на сайте РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Автореферат диссертации разослан «__» _____ 2016 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 212.204.02

Староверов Д.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. В виду ограниченных запасов нефти и роста спроса на нефтепродукты особое значение приобретают синтезы химических продуктов из природного газа. Синтез-газ используется в качестве основы для получения углеводородов, высших спиртов, альдегидов, кетонов, карбоновых кислот и сложных эфиров. А из легких алканов методом ароматизации в последнее время получают бензол, толуол, ксилол, которые являются основой для производства красителей, взрывчатых веществ, лекарственных препаратов и т.д. Для подготовки исходных данных для проектирования этих производств требуется применение специальных подходов, а также процедур и алгоритмов компьютерного моделирования химических реакторов с гетерогенно-каталитическими реакциями в газовой фазе.

В настоящее время для решения задач компьютерного моделирования химических реакторов и сложных химико-технологических систем широко используются пакеты моделирующих программ (ПМП) Aspen, Hysys, PRO-II и CHEMCAD, которые позволяют быстро и надежно создавать компьютерные модели, как отдельных процессов, так и сложных химических производств в целом. С помощью этих пакетов программ решаются задачи анализа и оптимизации действующих производств, а также задачи синтеза энерго- и ресурсосберегающих технологических схем вновь проектируемых производств.

Однако применение вышеперечисленных пакетов программ не позволяет моделировать некоторые типы химических реакторов с гетерогенно-каталитическими реакциями в газовой фазе, а также решать для них задачи нахождения кинетических констант. Для решения таких задач необходимо использовать системы компьютерной математики (СКМ), а также разрабатывать процедуры интеграции модулей из СКМ в ПМП для расчета реакторных процессов.

В настоящее время не разработаны научно-обоснованный подход, а также процедуры и алгоритмы разработки компьютерных моделей процессов с газофазными гетерогенно-каталитическими реакциями для последующего включения данных моделей в модели химических производств. Также отсутствуют алгоритмы моделирования автотермических процессов на тонком слое

катализатора для произвольных кинетических схем процессов, а также процедура расчета высокотемпературных трубчатых реакторов.

В связи с этим задача разработки и использования совместных подходов применения СКМ и ПМП является актуальной научной задачей, решение которой имеет важное значение в химической технологии органических веществ для повышения энерго- и ресурсоэффективности действующих производств и проектирования новых технологических схем.

Цель работы заключается в разработке процедуры интеграции модулей из СКМ в ПМП для компьютерного моделирования технологических схем с газофазными гетерогенно-каталитическими реакторными процессами, а также процедур и алгоритмов моделирования процессов в газофазных гетерогенно-каталитических реакторах. При этом были решены следующие задачи: разработана модель газофазного гетерогенно-каталитического реактора с последовательно-параллельными реакциями на примере получения синтез-газа из природного газа; разработан алгоритм нахождения кинетических констант газофазных гетерогенно-каталитических реакций со сложной (на примере процесса ароматизации легких алканов из пропан-бутановой смеси) и простой (на примере получения синтез-газа из природного газа) кинетической схемой; разработаны алгоритмы расчёта «диск»-реактора и высокотемпературного трубчатого реактора с учётом тепловых балансов с применением СКМ MatLAB и процедуры их интеграции в ПМП ChemCAD; разработаны и реализованы модели технологических схем ректификации для разделения продуктов газофазных гетерогенно-каталитических реакций.

Научная новизна.

1. Разработаны и реализованы подходы к совместному применению СКМ MatLAB и ПМП ChemCAD для решения задач математического моделирования газофазных гетерогенно-каталитических реакторных процессов, позволяющие разрабатывать эффективные технологии химических производств.

2. Реализована эффективная процедура нахождения кинетических констант, применение которой возможно для произвольной кинетической схемы последовательно-параллельных и одновременно протекающих газофазных

гетерогенно-каталитических реакций в непрерывных проточных лабораторных (или опытных) реакторах.

3. Разработан алгоритм расчета автотермического «диск»-реактора, позволяющий рассчитывать автотермические процессы на тонком слое катализатора в газовой фазе.

4. Разработана процедура расчета гетерогенно-каталитических процессов с большим числом реакций, которая позволяет рассчитывать высокотемпературные трубчатые реакторы.

Практическая значимость.

1. Определены кинетические константы процесса получения синтез-газа на катализаторе NdCaCoO_4 .

2. Определены кинетические константы процесса ароматизации легких алканов на катализаторе РГУНГ-А.

3. Проведен расчет опытного и промышленного «диск»-реактора получения синтез-газа и представлены результаты.

4. Проведен расчет опытного реактора ароматизации легких алканов и представлены результаты.

5. Разработана компьютерная модель принципиальной технологической схемы получения синтез-газа из природного газа для проведения расчетных исследований технологического процесса.

6. Разработана компьютерная модель принципиальной технологической схемы ароматизации легких алканов из пропан-бутановой смеси и путем расчетных исследований определены условия разделения продукта в четырех колонной ректификационной установке.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались на IX Международном конгрессе молодых учёных по химии и химической технологии «МКХТ-2013» (Москва), X Международном конгрессе молодых ученых по химии и химической технологии «МКХТ-2014» (Москва), V-ой международной конференции Российского химического общества им. Д. И. Менделеева (Москва), XI всероссийской научно-технической конференции «Информационные системы и модели в научных исследованиях, промышленности,

образовании и экологии» (Тула), 21-м международном Конгрессе химических технологий CHISA (Чехия, Прага), XXI международной конференции по вопросам химических реакторов "Chemreactor-21" (Нидерланды), VII-ой международной конференции Российского химического общества им. Д. И. Менделеева (Москва), XI Международном конгрессе молодых ученых по химии и химической технологии «МКХТ-2015» (Москва).

Публикации. Результаты диссертационной работы отражены в 14 публикациях, в том числе 4 статьи в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК для опубликования результатов диссертации.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, выводов, списка использованных литературных источников и приложений. Работа изложена на 142 страницах, включает 47 рисунков и 34 таблицы. Список использованной отечественной и зарубежной литературы содержит 52 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность работы, сформулирована цель и комплексная задача исследования.

В первой главе представлен обзор работ в области компьютерного моделирования химических реакторов и ректификационных процессов, работ в области определения кинетических констант, а также проведен анализ технологии получения ароматических углеводородов и синтез-газа.

Вторая глава посвящена разработке и реализации математических моделей гетерогенно-каталитических реакторных процессов ароматизации легких алканов, а также получения синтез-газа.

Для реализации компьютерной модели и расчета опытного реактора (как реактора ароматизации легких алканов, так и реактора получения синтез-газа) необходимо определить какие реакции протекают в нем, и найти их кинетические константы.

Для расчета лабораторного реактора и определения кинетических констант были приняты ряд допущений (режим протекания процесса, порядок химических реакций по исходным компонентам). После этого был разработан и реализован

алгоритм нахождения кинетических констант. Затем проводилось кинетическое моделирование процессов ароматизации легких алканов и получения синтез-газа при найденных кинетических константах.

Реакции, протекающие в реакторе ароматизации, были определены на основе химизма, найденного в различных литературных источниках ($t=550\div 650^\circ\text{C}$, $p=1$ атм):

1. $C_3H_8 + H_2 \rightarrow CH_4 + C_2H_6$
2. $C_4H_{10} + 2H_2 \rightarrow 2CH_4 + C_2H_6$
3. $4C_3H_8 \rightarrow 3C_2H_4 + 2C_3H_6 + 4H_2$
4. $4C_4H_{10} \rightarrow 3C_2H_4 + 2C_3H_6 + C_4H_8 + 4H_2$
5. $C_2H_4 + H_2 \rightarrow C_2H_6$
6. $2C_3H_6 + 3H_2 \rightarrow 3C_2H_6$
7. $3C_2H_4 \rightarrow C_6H_6 + 3H_2$
8. $2C_3H_6 \rightarrow C_6H_6 + 3H_2$
9. $3C_4H_8 \rightarrow 2C_6H_6 + 6H_2$
10. $7C_2H_4 \rightarrow 2C_6H_5CH_3 + 6H_2$
11. $7C_3H_6 \rightarrow 3C_6H_5CH_3 + 9H_2$
12. $7C_4H_8 \rightarrow 4C_6H_5CH_3 + 12H_2$
13. $4C_2H_4 \rightarrow C_6H_4(CH_3)_2 + 3H_2$
14. $8C_3H_6 \rightarrow 3C_6H_4(CH_3)_2 + 9H_2$
15. $2C_4H_8 \rightarrow C_6H_4(CH_3)_2 + 3H_2$
16. $2C_3H_8 \rightarrow C_6H_6 + 5H_2$
17. $7C_3H_8 \rightarrow 3C_6H_5CH_3 + 16H_2$
18. $8C_3H_8 \rightarrow 3C_6H_4(CH_3)_2 + 17H_2$
19. $3C_4H_{10} \rightarrow 2C_6H_6 + 9H_2$
20. $7C_4H_{10} \rightarrow 4C_6H_5CH_3 + 19H_2$
21. $2C_4H_{10} \rightarrow C_6H_4(CH_3)_2 + 5H_2$
22. $5C_6H_6 \rightarrow 3C_{10}H_8 + 3H_2$
23. $10C_6H_5CH_3 \rightarrow 7C_{10}H_8 + 12H_2$
24. $5C_6H_4(CH_3)_2 \rightarrow 4C_{10}H_8 + 9H_2$
25. $C_2H_6 + H_2 \rightarrow 2CH_4$

Кинетические уравнения в общем виде: $r_j = k_{jT_0} c_{C_xH_y}^p$,

где $j=1, \dots, 25$; $p=1$ (для реакций 19-21 $p=2$); $y=2x+2, 2x, 2x-6$.

$$k_{jT} = k_{jT_0} / \gamma, \quad \gamma = \exp\left(-B\left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right),$$

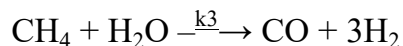
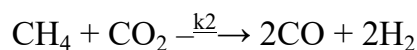
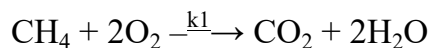
где $T_0=813\text{K}$, γ – коэффициент температурной зависимости, B – константа температурной зависимости, К.

Кинетические константы определены методом деформируемого многогранника:

$$\begin{aligned} k_1^{(0)} &= 0.02 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_2^{(0)} = 0.05 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_3^{(0)} = 0.04 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_4^{(0)} = 0.01 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_5^{(0)} = 0.04 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_6^{(0)} = 0.09 \frac{1}{\text{ч}}, \\ k_7^{(0)} &= 0.05 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_8^{(0)} = 0.05 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_9^{(0)} = 0.11 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_{10}^{(0)} = 0.03 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_{11}^{(0)} = 0.02 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_{12}^{(0)} = 0.05 \frac{1}{\text{ч}}, \\ k_{13}^{(0)} &= 0.005 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_{14}^{(0)} = 0.004 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_{15}^{(0)} = 0.09 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_{16}^{(0)} = 5.75 \cdot 10^{-7} \frac{1}{\% \text{масс} \cdot \text{ч}}, \quad k_{17}^{(0)} = 1.25 \cdot \\ &10^{-5} \frac{1}{\% \text{масс} \cdot \text{ч}}, \quad k_{18}^{(0)} = 4.75 \cdot 10^{-7} \frac{1}{\% \text{масс} \cdot \text{ч}}, \quad k_{19}^{(0)} = 2.95 \cdot 10^{-6} \frac{1}{\% \text{масс} \cdot \text{ч}}, \quad k_{20}^{(0)} = 9 \cdot 10^{-5} \frac{1}{\% \text{масс} \cdot \text{ч}}, \\ k_{21}^{(0)} &= 1.95 \cdot 10^{-5} \frac{1}{\% \text{масс} \cdot \text{ч}}, \quad k_{22}^{(0)} = 0.003 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_{23}^{(0)} = 0.003 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_{24}^{(0)} = 0.004 \frac{1}{\text{ч}}, \quad k_{25}^{(0)} = 0.32 \frac{1}{\text{ч}}, \end{aligned}$$

$B=6000$.

Реакций, протекающие в реакторе получения синтез-газа:



Кинетические уравнения:

$$r_1 = k_1 p_{\text{CH}_4} p_{\text{O}_2}, r_2 = k_2 p_{\text{CH}_4} p_{\text{CO}_2}, r_3 = k_3 p_{\text{CH}_4} p_{\text{H}_2\text{O}}.$$

$$k = k_2 = k_3 = \exp\left(A - \frac{B}{T}\right), k_1 = ak = a \exp\left(A - \frac{B}{T}\right).$$

Кинетические константы определены методом деформируемого многогранника: $A=1.76$, $B=17075$ и $a=1.18$.

Результаты кинетического моделирования процесса ароматизации лёгких алканов (массовые доли компонентов на выходе из лабораторного реактора) приведены в табл. 1. Изменения концентраций компонентов по длине трубки реактора (по массе катализатора) при найденных кинетических константах приведены на рис. 1.

Результаты кинетического моделирования процесса получения синтез-газа (массовые доли компонентов на выходе из лабораторного реактора) приведены в табл. 2. Изменения концентраций компонентов по массе катализатора, так называемые профили концентраций, при найденных кинетических константах приведены на рис.2.

Таблица 1. Сравнение результатов расчёта свойств выходного потока с экспериментальными значениями для экспериментальной точки № 1.

Свойство потока			
p; кПа	100		
W; г/(ч*г.кат)	11.84		
G; г/ч	23.68		
t; °C	555		
	На входе	На выходе	
ω	Расчётные данные	Расчётные данные	Экспериментальные данные
CH ₄	0.68	3.97	4.01
C ₂ H ₆	1.99	6.85	3.8
C ₃ H ₈	76.54	48.98	49.32
C ₄ H ₁₀	18	14.39	13.56
C ₂ H ₄	0	7.22	3.59
C ₃ H ₆	2.24	7.69	4.65
C ₄ H ₈	0.56	0.2	2.24
H ₂	0	1.29	1.69
C ₆ H ₆	0	2.91	2.28
C ₇ H ₈	0	5.38	5.11
C ₆ H ₄ (CH ₃) ₂	0	0.86	2.49
C ₁₀ H ₈	0	0.26	1.77

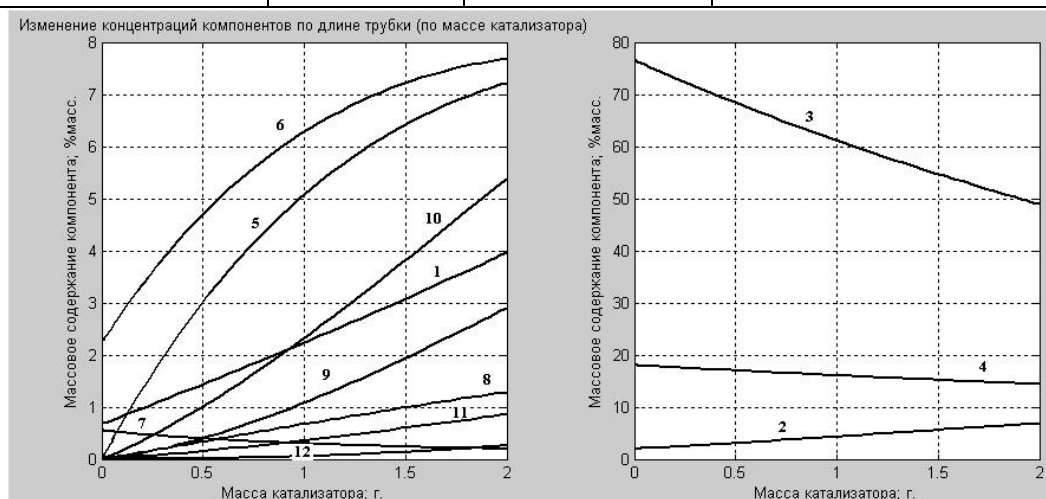


Рисунок 1. Изменение концентраций компонентов по длине трубки (по массе катализатора) для экспериментальной точки № 1. 1 – метан, 2 – этан, 3 – пропан, 4 – бутан, 5 – этилен, 6 – пропилен, 7 – бутилен, 8 – водород, 9 – бензол, 10 – толуол, 11 – ксилол, 12 – нафталин.

Таблица 2. Сравнение результатов расчёта свойств выходного потока с экспериментальными значениями для экспериментальной точки № 15.

Свойство потока			
p ; кПа	100		
t ; °C	957		
G ; г/ч	1.83		
	На входе	На выходе	
ω	Расчётные данные	Расчётные данные	Экспериментальные данные
CH ₄	0.56	0.11	0.12
CO ₂	0	0	0.01
CO	0	0.78	0.76
H ₂	0	0.11	0.11
O ₂	0.44	0	0
H ₂ O	0	0	0

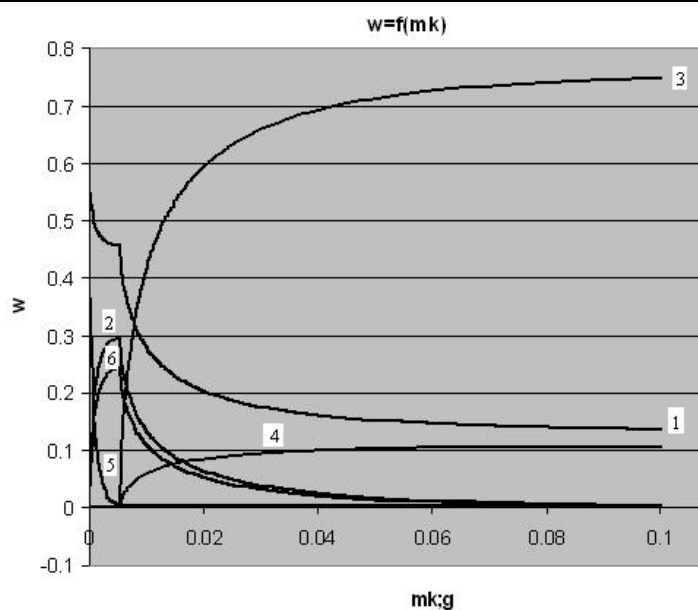


Рисунок 2. Изменение массовых долей компонентов по длине трубки (по массе катализатора) для экспериментальной точки № 15 при найденных кинетических константах $A=1.76$, $B=17075$ и $a=1.18$. Обозначения: 1 – метан, 2 – диоксид углерода, 3 – монооксид углерода, 4 – водород, 5 – кислород, 6 – водяной пар.

После нахождения кинетических констант переходим к расчету реакторов. Результаты расчёта реактора ароматизации приведены в табл. 3.

Таблица 3. Результаты расчёта реактора ароматизации лёгких алканов

Свойство потока	Входной поток		Выходной поток	
W; г/(г.кат·ч)	0.83			
G; г/ч	830			
p;бар	1			
t;0C	550		604	
Компонент	г/ч	ω; % масс	г/ч	ω; % масс
CH ₄	0	0	199.32	24.01
C ₂ H ₆	14.46	1.74	45.61	5.50
C ₃ H ₈	669.27	80.64	111.53	13.44
C ₄ H ₁₀	124.16	14.96	52.93	6.38
C ₂ H ₄	0	0	35.73	4.30
C ₃ H ₆	19.56	2.36	31.74	3.82
C ₄ H ₈	2.55	0.31	0.54	0.07
H ₂	0	0	24.43	2.94
C ₆ H ₆	0	0	107.20	12.92
C ₇ H ₈	0	0	153.59	18.50
C ₆ H ₄ (CH ₃) ₂	0	0	26.56	3.20
C ₁₀ H ₈	0	0	40.81	4.92

Блок-схема алгоритма расчета «диск»-реактора представлена на рис.3. Результаты расчёта «диск»-реактора (мольное соотношение метан/кислород при подаче на технологическую схему $\beta = 2.2$) представлены в табл. 4.

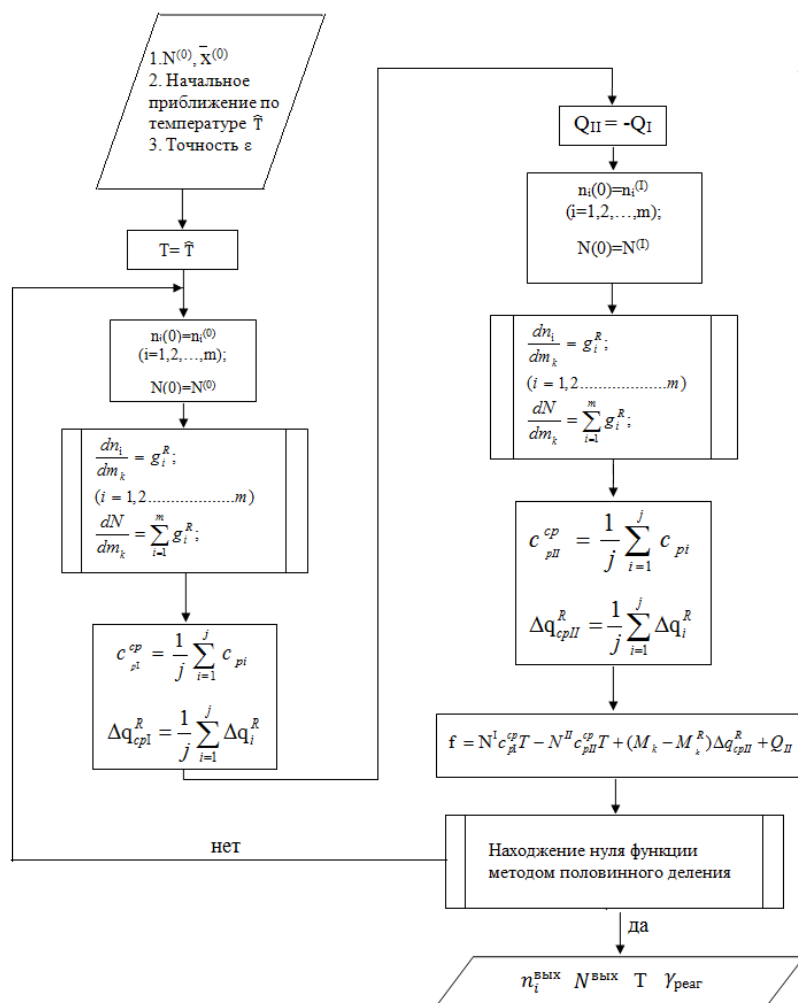


Рисунок 3. Блок-схема алгоритма расчёта «диск»-реактора.

Таблица 4. Результаты расчёта «диск»-реактора

	Входной поток	Выходной поток
p ; кПа	100	
t ; °C	489	842
N ; кмоль/ч	0.98	1.61
x_i		
CH₄	0.67	0.12
CO₂	0.01	0.03
CO	—	0.26
H₂	—	0.52
O₂	0.29	0
H₂O	0.03	0.06
X_{CH_4} ; %	70	

Третья глава посвящена разработке компьютерной модели принципиальной технологической схемы ароматизации легких алканов из пропан-бутановой смеси. Поскольку технологическая схема состоит из трех узлов (реакторный узел (рис.4), узел сепарации (рис.5), узел ректификации (рис.6)), в этой главе описывается моделирование каждого из них. В работе были рассмотрены все возможные варианты технологического оформления узла разделения.

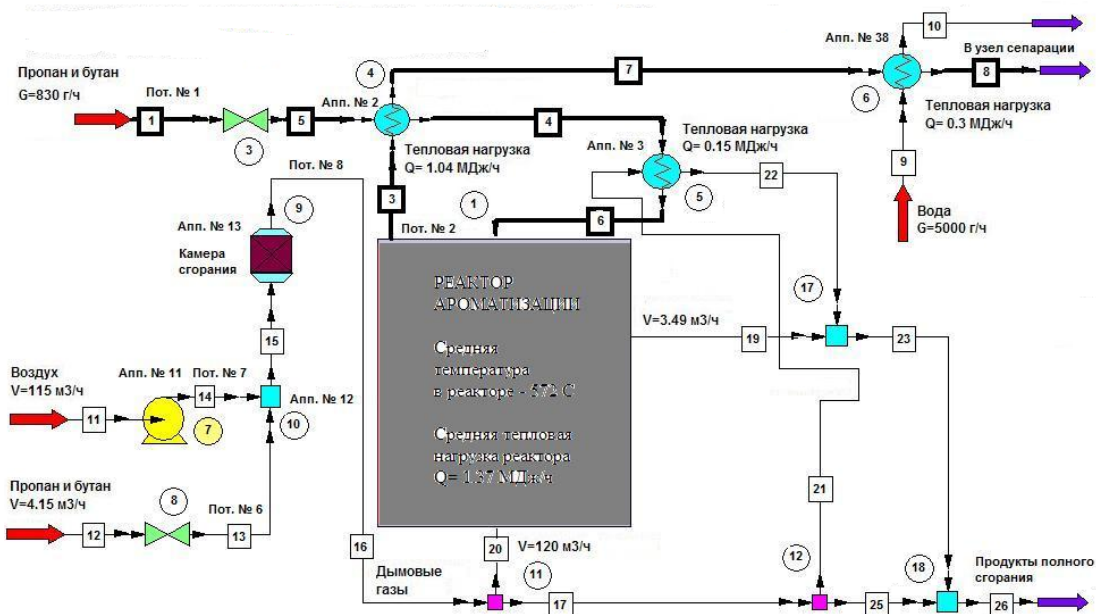


Рисунок 4. Технологическая схема реакторного узла ароматизации лёгких алканов, реализованная в среде ChemCAD.

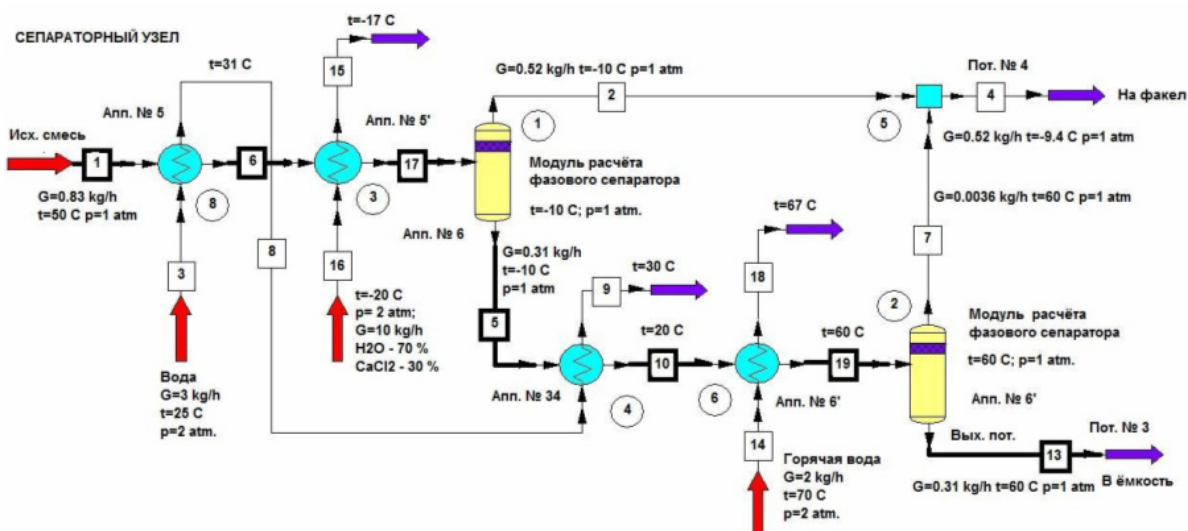


Рисунок 5. Технологическая схема узла сепарации, реализованная в среде ChemCAD.

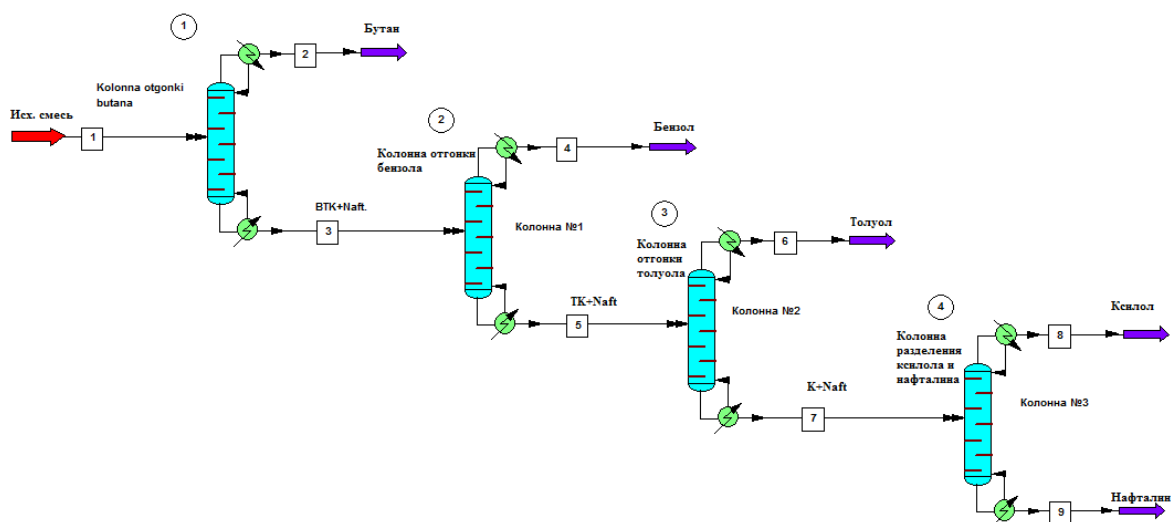


Рисунок 6. Технологическая схема узла ректификации, реализованная в среде ChemCAD.

Четвертая глава посвящена разработке компьютерной модели принципиальной технологической схемы получения синтез-газа из природного газа и нахождению оптимальных условий проведения процесса (рис. 7).

Были проведены многократные расчетные исследования технологической схемы (на модели) при варьировании расходов метана и кислорода. Критерием оптимальности была выбрана конверсия метана, ресурсами оптимизации – расход метана и кислорода, подаваемых на технологическую схему. Для решения задачи оптимизации использовался алгоритм Хука-Дживса. Результаты исследований представлены в табл.5.

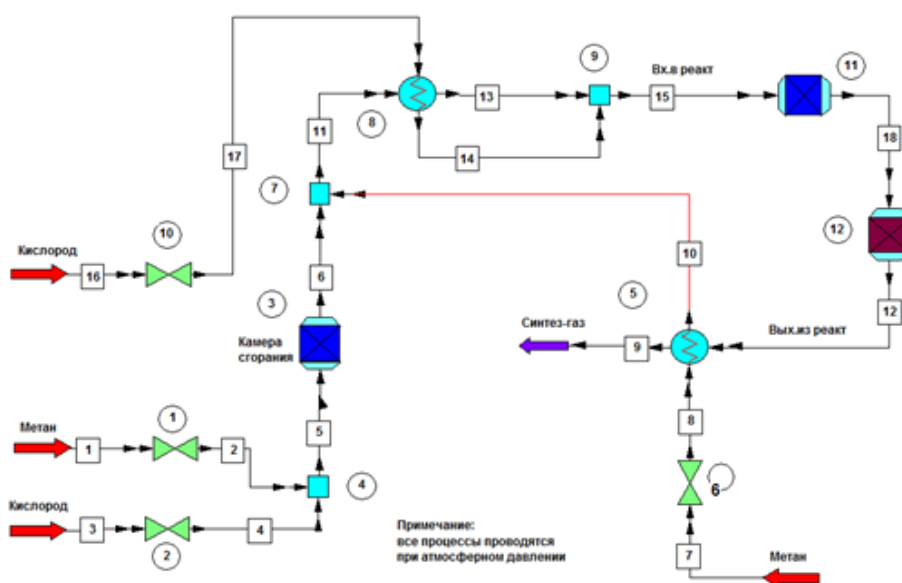


Рисунок 7. Технологическая схема получения синтез-газа, реализованная в среде ChemCAD.

Таблица 5. Сводная таблица результатов расчета принципиальной технологической схемы.

№ эксперимента	Расход CH_4	Расход O_2	Конверсия CH_4	Расход синтез-газа, кмоль/час
1	341	125	65.336	575.021
2	410	1175	64.709	715.526
3	477	225	64.202	856.057
4	545.5	275	63.766	996.700
5	613.6	325	63.397	1139.090
6	681.8	375	63.083	1281.025
7	750	425	62.792	1423.416
8	818	475	62.551	1567.218
9	886	525	62.319	1711.704
10	954.5	575	62.118	1858.846
11	1023	625	61.940	2006.272

Из таблицы видно, что максимального значения конверсия метана достигает в эксперименте №1. Следовательно, оптимальными параметрами являются: расход метана равный 341 кмоль/ч, расход кислорода равный 125 кмоль/ч, при этом конверсия метана составляет 65,336 %.

Основные результаты работы и выводы:

1. Реализован алгоритм параметрической идентификации газофазных гетерогенно-каталитических реакций с квазигомогенным описанием кинетических зависимостей, дающий удовлетворительный результат при решении задачи нахождения коэффициентов кинетических уравнений.
2. Реализован эффективный алгоритм нахождения кинетических констант газофазных гетерогенно-каталитических реакций, как с большим, так и с малым числом определяемых параметров.
3. Реализованы алгоритмы расчета «диск»-реактора для получения синтез-газа, а также высокотемпературного трубчатого реактора ароматизации легких алканов.

4. Реализована модель принципиальной технологической схемы ароматизации легких алканов из пропан-бутановой смеси. Разработаны компьютерные модели непрерывного реакторного процесса ароматизации технического пропана и технического бутана, сепараторного узла и узла ректификации.

5. Реализована модель принципиальной технологической схемы получения синтез-газа из метана методом кислородной конверсии. Проведены исследования технологической схемы на ее модели и установлены оптимальные параметры проведения процесса.

Основные результаты работы изложены в следующих публикациях:

1. Гартман Т.Н., Советин Ф.С., Проскуро Е.А., Швец В.Ф., Козловский Р.А, Сучков Ю.П., Сапунов В.Н., Локтев А.С., Дедов А.Г. Алгоритм расчёта автотермических режимов гетерогенно-каталитических процессов на тонком слое катализатора // Теоретические основы химической технологии. 2014 г. Том 48, № 3. Стр. 294-300.
2. Gartman T.N, Sovetin F.S., Proskuro E.A., Shvets V.F., Kozlovskiy R.A., Suchkov Y.P, Sapunov V.N., Loktev A.S., Levchenko D.A., Dedov A.G. Computation of the Solid Catalyzed Gas Phase Reactions with a Simultaneous Choice of the Scheme of the Reactions for Different Composition of the Initial Reaction Mixture // Chemical engineering transactions. Vol. 39. 2014. p.1009-1014.
3. Гартман Т.Н., Советин Ф.С., Боровкова Е.А., Швец В.Ф., Козловский Р.А., Локтев А.С., Лебедев Ю.В., Дедов А.Г., Моисеев И.И. Получение синтез-газа кислородной конверсией метана в присутствии катализатора на основе NdCaCoO_4 : кинетическое моделирование автотермического процесса // Нефтехимия. 2015. Т. 55, № 4. С. 302-309.
4. Боровкова Е.А., Советин Ф. С., Рамазанова А.А., Гартман Т.Н. Разработка энергосберегающей подсистемы ректификации в производстве ароматических углеводородов из легких алканов. // Химическая промышленность сегодня. 2015. №8. с. 39-50.
5. Гартман Т.Н., Проскуро Е.А., Советин Ф.С. Алгоритм параметрической идентификации газофазных гетерогенно-каталитических реакций с

- квазигомогенным описанием кинетических зависимостей // Сборник трудов IX Международного конгресса молодых учёных по химии и химической технологии МКХТ 2013. XXVII, № 8 (148). 30 октября – 1 ноября. Москва 2013 г. стр. 134-135.
6. Гартман Т. Н., Проскуро Е. А., Советин Ф.С. Моделирование газофазных гетерогенно-каталитических реакций с квазигомогенным описанием кинетических зависимостей // Сборник трудов IX Международного конгресса молодых учёных по химии и химической технологии МКХТ 2013. XXVII, № 8 (148). 30 октября – 1 ноября. Москва 2013 г. стр. 135-136.
7. Гартман Т. Н., Проскуро Е.А., Советин Ф.С. Алгоритм параметрической идентификации газофазных гетерогенно-каталитических реакций с квазигомогенным описанием кинетических зависимостей с использованием модели идеального вытеснения // Сборник тезисов докладов V-ой международной конференции Российского химического общества им. Д. И. Менделеева. Москва, 29–30 октября 2013 г. Стр. 16–18.
8. Гартман Т.Н., Проскуро Е.А., Советин Ф.С. Алгоритм расчёта адиабатических реакторов с тонким слоем катализатора, работающих в автотермическом режиме. // Сборник тезисов докладов XI всероссийской научно-технической конференции «Информационные системы и модели в научных исследованиях, промышленности, образовании и экологии». Тула. 15 октября 2013 г. Стр. 17–19.
9. Gartman T.N, Sovetin F. S., Proskuro E. A., Shvets V. F., Kozlovskiy R. A., Suchkov Y. P, Sapunov V.N., Loktev A. S., Levchenko D. A., Dedov A.G. Computation of the solid catalyzed gas phase reactions with a simultaneous choice of the scheme of the reactions for different composition of the initial reaction mixture // 21st International Congress of Chemical and Process Engineering CHISA. Prague. Czech Republic. 23-27August 2014. p. 1422.
10. Gartman T.N., Sovetin F.S., Proskuro E.A., Shvets V.F.,Kozlovskiy R.A., Suchkov Y.P., Sapunov V.N., Loktev A.S., Komissarenko D.A., Dedov A.G. Kinetics of consecutive-parallel reactions in a thin layer of a heterogeneous catalyst.// XXI International Conference on Chemical Reactors "Chemreactor-21". Delft. The Netherlands, September 22-25, 2014. p. 224.
11. Аленчикова А.А., Проскуро Е.А., Сафонова В.Д. Разработка компьютерной модели четырёхколонной технологической схемы ректификации смеси

ароматических углеводородов. // Сборник материалов X международного конгресса молодых ученых по химии и химической технологии «МКХТ-2014». Т. 28. № 2 (151). Москва, РХТУ. 28-31 октября 2014. с. 31-33.

12. Басос А.Г., Проскуро Е.А., Сафонова В.Д. Разработка компьютерной модели технологической схемы получения синтез-газа окислительной конверсией метана. // Сборник материалов X международного конгресса молодых ученых по химии и химической технологии «МКХТ-2014». Т. 28. № 2 (151). Москва, РХТУ. 28-31 октября 2014. с. 24-27.

13. Гартман Т.Н., Боровкова Е.А., Советин Ф.С. Процедура стыковки пакетов прикладных программ и пакетов моделирующих программ при моделировании химических реакторов с газофазными гетерогенно-каталитическими реакциями. // Сборник тезисов докладов VII-ой международной конференции Российского химического общества им. Д. И. Менделеева. Москва, 28 октября 2015 г. Стр.41-43.

14. Медведев А.Ю., Боровкова Е.А., Сафонова В.Д. Разработка компьютерной модели процесса сепарации смеси ароматических углеводородов в производстве аренов методом ароматизации легких алканов. // Сборник материалов XI международного конгресса молодых ученых по химии и химической технологии «МКХТ-2015». Т. 29. № 2. Москва, РХТУ. 18-20 ноября 2015. с. 15-17.