

*Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України  
Національний технічний університет України «КПІ»  
Хіміко-технологічний факультет НТУУ «КПІ»  
Східноукраїнський національний університет ім. В. Даля  
Інститут хімічної технології (м. Рубіжне) СНУ ім. В. Даля  
Регіональний центр сприяння розвитку бізнесу, інвестиціям, інноваціям*

## **КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ, ТЕХНОЛОГІЯХ І СИСТЕМАХ СТАЛОГО РОЗВИТКУ**

Київ - Рубіжне, 10-12 травня 2012 року

### **ЗБІРНИК НАУКОВИХ СТАТЕЙ**

**Третєої міжнародної  
науково-практичної конференції**



*Київ – Рубіжне – 2012*

**Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку:** Збірник наукових статей Третьої міжнар. наук.-практ. конф. – Київ - Рубіжне: НТУУ «КПІ», 2012. – 284 с.

Збірка містить наукові статті міжнародної науково-практичної конференції «Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку» за такими напрямками: комп'ютерне моделювання в хімії та комп'ютерні методи синтезу нових речовин, комп'ютерне моделювання хіміко-технологічних та біохімічних процесів і систем, комп'ютерне моделювання природоохоронних процесів, комп'ютерне підтримування виробничих процесів, сталий розвиток регіонів, комп'ютерно-інформаційні технології в багаторівневій вищій освіті.

*Організатори конференції можуть не поділяти думку авторів публікацій.*

*Відповідальність за достовірність публікацій несуть автори, а за достовірність реклами – рекламодавці. Автори та рекламодавці несуть відповідальність за дотримання авторських прав і прав третіх осіб.*

*Матеріали конференції видано в авторській редакції.*

© Автори тез доповідей, 2012

© Національний технічний університет України  
«КПІ», укладання, оформлення, 2012



## Шановні колеги!

Дозвольте привітати учасників та гостей Третої міжнародної науково-практичної конференції «Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку».

Однією з передумов екологізації життя є розвиток комп'ютерного та математичного моделювання в хімії та екології, хімічній та біохімічній технологіях, технологічних систем. Проведення таких професійних заходів, як конференція «KMXT-2012», без сумніву сприятиме пошуку нових шляхів реформування та розвитку технологій. Сподіваюсь, що представлені на конференції наукові та практичні розробки у галузі комп'ютерного моделювання технологічних, виробничих та природоохоронних процесів сприятимуть переходу до екотехнологій та сталого розвитку держави.

*Бажаю ефективної спільної роботи, впевненості в своїх силах  
та успіхів у професійній діяльності.*



Ректор НТУУ "КПІ",  
Академік Національної академії наук України,  
Заслужений діяч науки і техніки України,  
доктор технічних наук, професор

**ЗГУРОВСЬКИЙ Михайло Захарович**





## *Приветственное слово*

Уважаемые участники конференции! От имени 34-тысячного коллектива студентов и преподавателей Восточноукраинского национального университета имени Владимира Даля приветствую вас на земле Луганщины.

Наш университет является крупнейшим высшим учебным заведением на востоке страны и одновременно – крупным научным центром, в котором проводятся фундаментальные и прикладные исследования в области математики, физики, химии, информатики, машиностроения, компьютерных, гуманитарных и экономических наук. Научные достижения сотрудников и преподавателей университета были отмечены в 2009 году присвоением нашему вузу статуса национального исследовательского университета.

Восточноукраинский национальный университет имени Владимира Даля, подобно Сорбонне или Иерусалимскому университету, имеет четко выраженную региональную структуру: имеется центральный университет в Луганске и региональные специализированные институты и отделения в регионах Луганской области и соседних регионов. Исследования и обучение в области химических наук и химической технологии сосредоточены в Институте химических технологий (г. Рубежное) и Технологическом институте (г. Северодонецк), в регионе, где сосредоточены крупнейшие украинские химические и нефтехимические предприятия: АО «Азот», АО «Линик», НПФ «Заря» и другие предприятия. Университет является кузницей кадров для химической науки и промышленности: в его институтах готовятся бакалавры, специалисты и магистры по базовым направлениям химии и химической технологии, экологии, автоматики и компьютерных технологий. Учебный процесс и научные исследования проводят 18 докторов наук, профессоров и более 80 кандидатов наук, доцентов. На базе институтов университета есть аспирантура, работают специализированные ученыe советы по присуждению степени кандидата технических наук по специальностям «технология продуктов органического синтеза», «Технология полимерных и композиционных материалов», «Автоматизация производственных процессов».

Проблематика III международной научно-практической конференции «Компьютерное моделирование в химии, технологиях и системах устойчивого развития» является весьма актуальной для нашего региона и университета. В институтах Восточноукраинского национального университета с начала 80-х годов развиваются научные направления, связанные с применением ЭВМ в химической технологии, в том числе, с математическим и компьютерным моделированием химических и химико-технологических процессов. В стране и за рубежом известны работы наших ученых в этой области: д.т.н., профессора Стенцеля И.И., д.т.н., профессора Каца М.Д., д.т.н., профессора Поркуян О.В., д.х.н., профессора Кондратова С.А., д.т.н., профессора Белкина Д.И., д.т.н.,

профессора Мемедляева З.Н., д.х.н., профессора Захарова И.И. Ведутся масштабные исследования в области промышленной экологии и охраны окружающей среды научными школами д.т.н. профессора Смирного М.Ф., д.т.н. профессора Попова Е.В., д.т.н. Суворина А.В. В рамках масштабного проекта Агентства США по международному развитию USAID – «Локальные инвестиции и национальная конкурентоспособность» (ЛИНК), который впервые в Украине реализуется с 2009 года в Северо-Западном регионе Луганской области (г.г. Рубежное, Северодонецк, Лисичанск и Кременской район), ученые и специалисты нашего университета принимали активное участие в разработке Стратегического плана повышения конкурентоспособности Северо-Западного «Инновационный Донбасс» до 2015 года и активно способствуют практической реализации его стратегических целей: развитию Химической промышленности, Науки, IT-технологий, образования.

Я надеюсь, что конференция даст новый толчок развитию этих передовых направлений, будет способствовать упрочнению контактов науки и бизнеса, что безусловно положительно скажется на развитии нашего региона.

Желаю Вашей конференции плодотворной работы, жарких дискуссий, успешных докладов, чтобы вокруг вас постоянно витал дух высокой Науки.

Ректор  
Восточноукраинского  
национального  
университета  
имени Владимира Даля,  
доктор технических наук,  
профессор,  
член-корреспондент  
Академии педагогических  
наук Украины,  
Заслуженный деятель  
науки и техники Украины

А.Л. Голубенко



## Уважаемые коллеги!

От имени коллектива ученых, преподавателей и студентов одного из старейших вузов Донбасса, Института химических технологий Восточноукраинского национального университета имени Владимира Даля, рад приветствовать участников конференции.

Северо-западный регион Луганской области (гг. Лисичанск, Рубежное, Северодонецк) с начала 20 века развивается, как химический комплекс державы.

Здесь сосредоточено производства нефтехимии, минеральных удобрений и продуктов неорганического синтеза, продуктов органического синтеза, полимеров, композиционных материалов и др. Химия – весьма наукоемкая отрасль, поэтому в регионе были сосредоточены мощные научно-исследовательские подразделения: НИИ, вузы, КБ. Несмотря на нелегкие для нашей молодой державы годы испытаний, в регионе пока сохраняется мощный кадровый потенциал: работают 20 докторов наук и более 100 кандидатов наук. В настоящее время большая часть кадрового потенциала прикладной науки трудится в подразделениях нашего Восточноукраинского национального университета – в Институте химических технологий (г. Рубежное) и Технологическом институте (г. Северодонецк).

Одним из направлений НИР, развивающихся в регионе, является компьютерное моделирование химико-технологических процессов. Кадры по этому направлению уже более 15 лет готовятся в нашем институте, сначала в рамках специальности «компьютерная химия», а в настоящее время – в рамках специальности «Информатика». Большое внимание в нашем регионе уделяется и экологии, как важнейшей составляющей концепции устойчивого развития. Поэтому не случайно, что ваша конференция проходит именно у нас, в нашем регионе, который по многим направлениям является пилотным.

Желаю вашей конференции успехов в работе, плодотворного общения, появления новых идей, способствующих тесному взаимодействию науки и бизнеса, новых научных контактов и связей, новых друзей и партнеров

Директор Института химических  
Технологий (г. Рубежное) Восточно-  
украинского национального  
университета  
им. В.Даля, к.х.н., доцент

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "ЕВГЕНІЙ ПОТАПЕНКО".

Э.В. Потапенко

## УСТОЙЧИВОЕ РАЗВИТИЕ: МОДЕЛИ И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЛЯ АНАЛИЗА СОСТОЯНИЯ ОБЩЕСТВА И ЕГО ПЕРСПЕКТИВ

Статюха Г.А., Martinsen Kristian\*

Национальный технический университет Украины «КПИ», gen.statyukha@mail.ru

\*Gjovik University College, Norway, kristian.martinsen@sintef.no

Распространение и реализация парадигмы устойчивого развития в мире идет семимильными шагами. Чтобы убедиться в этом, достаточно просмотреть цепочку главнейших мировых событий и документов последних 20 лет – от Rio–1992 через Иоганнесбург 2002 к Rio–2012. Подведение итогов 20–летия освоения идеи устойчивого развития совсем близко, но уже сейчас ясно, что эта идея принята обществом и делаются энергичные шаги по ее реализации. Наступил этап конкретных действий. И если раньше актуальным был вопрос что такое Устойчивое Развитие, то сейчас мы ищем ответ на вопрос как измерить устойчивое развитие и вплотную подошли к ответу на другой вопрос – как управлять устойчивым развитием.

Как всякая архисложная система, управлением которой мы занимаемся, требует применения принципов системного анализа – декомпозиции объекта, построения моделей с определенной иерархией, создания структуры взаимодействия моделей и их использования для предсказания поведения объекта и возможного управления им.

В течении последних 10 лет группа энтузиастов-ученых Киевского Политехнического Института пытается решить эту сложнейшую задачу, привлекая теоретические достижения системного анализа, моделирования, математики, технологии, теории принятия решений и многое другое. Проведена систематизация мировых достижений в исследовании устойчивого развития общества, отобраны перспективные подходы, давшие наилучшие результаты оценки и предсказания путей развития общества. Сегодня день мы видим пять основных уровней масштабирования объекта – т.е. общества, желающего двигаться по пути устойчивого развития: планетарный уровень (множество стран нашей планеты), региональный уровень (административные подразделения государства); уровень специфических территорий, объединенных некими общими для них оценками и соответствующим управлением (прибрежные морские зоны, бассейны рек, лесные массивы и т.п.); уровень отдельных городов и населенных пунктов, и, наконец, уровень отдельных предприятий, дающих обществу некие полезные продукты.

Элементарной ячейкой такой системы может служить система «технология – общество». Эта ячейка выполняет четкие функции переработки сырья в полезный продукт, а также отходы, с помощью энергии обеспечивая жизнедеятельность общества. Последняя может характеризоваться некоторой совокупностью показателей (индикаторов, индексов) таких как качество жизни, безопасность жизни (воздействие угроз на жизнедеятельность людей) или, в целом, показателями устойчивого развития. Система «технология общество» тесно связана с окружающей средой – природой, потребляет ее ресурсы и выбрасывает некоторые отходы своей жизнедеятельности.

Для оценки взаимодействия системы «технология общество» мы предлагаем совокупность моделей: прямого действия, циклических (с технологическим и природным циклами) и обобщенную модель, учитывающую как взаимодействия внутри системы «технология общество», между этой системой и природой, а также взаимодействие с космосом (по энергии и веществу).

Применение предложенных моделей к каждому из рассмотренных масштабных уровней нашего объекта открывает определенные возможности оценки этой части иерархии.

Так, применение модели прямого действия (без обратных связей) позволяет ранжировать страны, регионы, специфические территории, города по показателям (индикаторы, индексы) устойчивого развития. Анализ результатов позволяет лицам,

принимающим решения о путях развития общества определенного масштаба, найти наилучшую траекторию его движения к цели.

Хорошие результаты были получены при использовании модели прямого действия для решения задачи управления техногенным риском на уровне предприятия. Однако, более перспективной можно считать использование на этом уровне циклической модели с технологическим циклом, где учитывается степень возврата использованного материала (бывшего продукта) в природу. Предложенный коэффициент ресурсосбережения прост и удобен для управления.

Ряд ученых сделали попытку использовать циклические модели с природным циклом для анализа и возможного управления циклами углерода воды, азота, фосфора и другими как на планетарном уровне, так и на уровне специфических территорий. Полученные нетривиальные результаты укрепили позиции политиков в отношении к мировым процессам или к своим богатствам.

Более структурированная модель «технология общество» потребовала других подходов. Так, применение математических моделей системной динамики позволяет оценить развитие общества во времени по некоторым сценариям, зависящим от исходных данных. Применение таких моделей на планетарном уровне заставило пересмотреть отношение человека к природе и развитие этих отношений в обществе (работы Римского Клуба). Примененная нами на уровне регионов, такая модель позволяет прогнозировать развитие регионов на 20–30 лет вперед.

Разработанная система моделей подкрепляется использованием базы данных Мирового центра данных по геоинформатике и устойчивому развитию (КПИ). Это позволяет надеяться на достоверные результаты предсказаний развития для различных уровней масштабирования общества, а также на эффективное управление этими процессами.

Работа выполнена при поддержки Гранта «CPEurasia 2010–2014 – Project document 2011" for "CPEA-2011/10023 – Sustainable Manufacturing».

1. Згурівський, М.З. Оцінювання устойчивого розвиття оточуючої середи на субнаціональному рівні в Україні [Текст] / М.З. Згурівський, Г.А. Статюха, І.Н. Джигірєй // Системні дослідження та інформаційні технології. – 2008. – № 4. – С. 7–20.
2. Оцінювання сталості ресурсоспоживання: Монетарний підхід [Текст] / М.З. Згурівський, Г.О. Статюха, І.М. Джигірєй, Б.М. Комариста // Матеріали II Всеукр. з'їзду екологів з міжн. участию (Екологія/Ecology-2009), Вінниця, 23-26 вересня 2009 р.: збірник наукових статей / [гол. ред.: Б.І. Мокін]. – Вінниця: 2009.
3. Аналіз сталого розвитку – глобальний і регіональний контексти: моногр. / Міжнар. ради з науки (ICSU) [та ін.]; наук. кер. М.З. Згурівський. – К.: НТУУ "КПІ", 2010. – Ч. 2. Україна в індикаторах сталого розвитку. – 216 с.
4. Згурівський, М.З. Основы устойчивого развития общества [Текст]: курс лекций в 2 ч. / М.З. Згурівський, Г.А. Статюха. - К.: НТУУ "КПІ", 2010. – Ч.1. – 464 с.

**СЕКЦІЯ 1**  
**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ,**  
**КОМП'ЮТЕРНІ МЕТОДИ СИНТЕЗУ НОВИХ РЕЧОВИН**

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ  
МОЛЕКУЛЫ НОІ**

Хоменко Е.М., \*Минаев Б.Ф.

Черкасский государственный технологический университет, homenko@uch.net

\*Черкасский национальный университет им. Б. Хмельницкого, bfmin@rambler.ru

Участие галогенсодержащих соединений в фотокаталитическом цикле разложения озона в стратосфере стало объектом многочисленных исследований их структуры, спектральных характеристик, а также фотохимии и реакционной способности этих молекул. Для понимания явлений, которые связаны с разрушением озонового слоя в стратосфере, необходимой становится детальная информация о структуре и свойствах галогенсодержащих соединений. Важным элементом исследования этих свойств могут быть квантово-химические расчеты.

Поскольку гипоидная кислота, HOI, принимает важное участие в фотохимии атмосферы и в процессах разложения озона в стратосфере [1], то в данной работе проведен квантово-химический расчет электронной структуры, колебательно-вращательных констант и инфракрасных (ИК) интенсивностей для основного состояния HOI методом многоконфигурационного самосогласованного поля (МК ССП) в базисном наборе Садлея, что включал (13s10p4d)/[4s5p2d] набор орбиталей для атома йода [2]. Все расчеты методом МК ССП выполнены с использованием программы Дальтон.

В табл. 1 приведены результаты расчета основного  $X^1A'$  состояния молекулы HOI при полной оптимизации геометрии методом МК ССП с использованием разных базисных наборов и в сравнении с экспериментальными данными [3, 4].

*Таблица 1 – Результаты расчетов геометрических параметров, колебательных частот и ИК интенсивностей для основного синглетного  $X^1A'$  состояния молекулы HOI методом МК ССП*

<i>Базисный набор</i>	<i>r<sub>O-H</sub></i>	<i>r<sub>O-I</sub></i>	<i>∠HOI</i>	<i>v<sub>1,O-H</sub></i>	<i>v<sub>2, колебания</sub></i>	<i>v<sub>3,I-O</sub></i>	<i>μ</i>
3 – 21G	1,008	2,104	103,73	3329 (267)	1176 (84)	485 (0,04)	1,87
Садлей	0,977	2,017	104,45	3733 (760,5)	1137 (8,2)	566,6 (0,07)	1,31
Эксп. <sup>a</sup>	0,964	1,991	105,4	3625,84	1068	575	

*Примечание:*  $r$  – межмолекулярное расстояние, Å;  $∠HOI$  – валентный угол, °;  $v_{1,O-H}$ ,  $v_{3,I-O}$  – частоты валентного колебания, см<sup>-1</sup>;  $v_2$  – частота деформационного колебания, см<sup>-1</sup>; интенсивности полос в спектре ИК поглощения приведены в скобках, км/моль;  $μ$  – дипольный момент, D; a – экспериментальные данные [3, 4].

Из анализа табл. 1 можно сделать вывод о том, что используемый нами базисный набор 3-21G незначительно переоценивает длины связей в молекуле HOI, однако результаты расчета геометрии молекулы в более расширенном базисном наборе Садлея [2] хорошо согласуются с известными экспериментальными данными [3].

По данным работы [4], молекула HOI представляет собой симметричный вытянутый волчок с вращательными постоянными  $A_0=20,935$  см<sup>-1</sup>,  $B_0=0,27894$  см<sup>-1</sup> и  $C_0=0,27507$  см<sup>-1</sup>. Для колебательных частот HOI в работе [4] приводятся значения  $v_1=3625,84$  см<sup>-1</sup>,  $v_2=1068$  см<sup>-1</sup> и  $v_3=575$  см<sup>-1</sup>. Таким образом, частоты колебаний в ИК – спектре молекулы HOI наилучшим образом воспроизведены результатами расчетов методом МК ССП в базисе Садлея (табл. 1).

Также в работе проведен расчет методом МК ССП в базисном наборе Садлея вращательных констант для основного состояния молекулы HOI, результаты которого приведены в таблице 2 в сравнении с экспериментальными данными [4].

Таблиця 2 – Результаты расчетов вращательных констант для основного состояния молекулы HOI методом МК ССП в базисе Садлея

<i>Вращательные константы, см<sup>-1</sup></i>	<i>Расчет методом МК ССП, базис Садлея</i>	<i>Экспериментальные данные [4]</i>
A	20,172	20,935
B	0,272	0,27894
C	0,268	0,27507

Анализ полученных результатов для эффективных вращательных констант (табл. 2) показывает, что рассчитанная константа А для основного колебательного состояния молекулы HOI отличается на 0,763 см<sup>-1</sup> от экспериментального значения, а для вращательных констант В и С эта разница составляет только ~0,007 см<sup>-1</sup>.

Также в работе проведен расчет некоторых магнитных и электрических свойств для молекулы HOI при оптимизированной геометрии основного состояния методом МК ССП в базисе Садлея, результаты которого приведены в таблице 3.

Таблица 3 – Рассчитанные магнитные и электрические свойства молекулы HOI методом МК ССП (базис Садлея) при оптимизированной геометрии основного состояния

<i>Ось, ab</i>	<i>α<sub>ab</sub></i>	<i>Q<sub>aa</sub></i>	<i>e<sup>2</sup>q<sub>aa</sub>Q<sub>O</sub></i>	<i>e<sup>2</sup>q<sub>aa</sub>Q<sub>I</sub></i>	<i>χ<sub>ab</sub></i>	<i>g<sub>r</sub></i>
xx	36,14	-2,45	-1,90 (0,32)	1462,48 (-7,89)	-8,60	-0,065
yy	46,67	0,01	-9,81 (1,63)	1495,30 (-8,07)	-13,01	0,633
zz	37,76	2,43	11,71 (-1,95)	-2957,78 (15,95)	-8,73	-0,079
yz	4,07	3,70	0,67	0,01	-1,44	-0,851
изотропия	40,19	-	-	-	-10,11	0,163

Примечание.  $\alpha_{ab}$  – перпендикулярные компоненты статической поляризуемости в  $a_0^3$ ;  $Q_{aa}$  –тензоры квадрупольного момента в  $ea_0^2$ ;  $e^2q_{aa}Q_I$  –тензоры константы ядерного квадрупольного взаимодействия (ЯКВ) для атома I в Гц (в скобках приведены значения в а.е.);  $e^2q_{aa}Q_O$  –тензоры константы ЯКВ для атома O в Гц (в скобках приведены значения в а.е.);  $\chi_{ab}$  – тензор полной магнитной восприимчивости в а.е. (1 а.е.= $4,75189 \times 10^{-6}$  см<sup>3</sup>/моль);  $g$  – вращательный  $g$  - фактор в а.е. (1 а.е. =  $m_e/m_p=1/1840$ ), последний тензор приведен в главных осях системы.

Таким образом, проведенный нами квантово-химический расчет основного состояния молекулы HOI методом МК ССП дает значения геометрических параметров, колебательных частот, вращательных констант и ИК интенсивностей, что хорошо согласуются с экспериментальными данными. Рассчитанные и предсказанные некоторые магнитные и электрические свойства для молекулы HOI могут быть полезными для экспериментальных исследований.

1. Ingham T., Cameron M., Crowley J.N. Photodissociation of IO (355 nm) and OIO (532 nm): Quantum yields for O(<sup>3</sup>P)/I production // J. Phys. Chem.- 2000. – V. 104. – P. 8001-8010.
2. Sadlej A.J. Medium-size polarized basis sets for high-level-correlated calculations of molecular electric properties // Theor. Chim. Acta. - 1991. - V.79. - P.123-125.
3. Hassanzadeh P., Irikura K.K. Nearly ab initio thermochemistry: the use of reaction schemes. Application to IO and HOI // J. Phys. Chem. – 1997. – Vol.101. – P.1580-1587.
4. Klaassen J.J., Lindner J., Leone S.R. Observation of the NU(1) OH (OD) stretch of HOI and DOI by Fourier transform infrared emission spectroscopy // J.Chem.Phys. – 1996. – V. 104. – P.7403-7411.

## ТЕОРЕТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ В ТВЕРДИХ ТІЛАХ З ЛАНЦЮГОВОЮ СТРУКТУРОЮ

Гребенюк А.Г.

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, grebenyuk\_ag@ukr.net

Фазові переходи в твердих тілах на сьогодні є предметом всебічного вивчення експериментальними та теоретичними методами. З точки зору теоретичного моделювання, найбільш простими і наочними є структурні перетворення в одновимірних (ланцюгових) системах, які можуть відбуватися при зміні температури або тиску. Такими є карбін [1], діоксид ванадію, тригалогеніди титану і цирконію та інші сполуки. Особливістю розгляду таких структур є необхідність задоволення граничних умов при побудові скінчених (обмежених у просторі) ланцюгових моделей. При переході до цикліческих (кільцевих) моделей можна природним шляхом позбутися цієї незручності. Однак, очевидним недоліком таких цикліческих структур є стерична напруга через відхилення кута (наприклад, C-C-C) від розгорнутого, що вимагає наявності в моделі достатньої кількості атомів.

В роботі досліджено фазовий переход карбіну – лінійної форми вуглецю, низькотемпера-турна модифікація якої являє собою поліацетиленовий ланцюг, а високотемпературна – кумуленовий. За експериментальними даними [1], цей переход відбувається при температурі 2100 К та тиску 9 ГПа. Теоретичні оцінки [2] дають величину енергії переходу близько 32 кДж/моль.

Побудовано кільцеві моделі обох модифікацій речовини (вони складаються з 8-36 атомів). Кvantовохімічні розрахунки рівноважної просторової будови та енергетичних характеристик моделей виконано обмеженим методом Хартрі-Фока з використанням мінімального валентно-розщепленого базисного набору (3-21G) за допомогою програмного комплексу PC GAMESS [3] (версія 6.4, створена проф. А. Грановським у Московському державному університеті, Росія). Накладання зовнішнього тиску моделювалось оточенням досліджуваної структури зовнішнім кільцем із атомів гелію із фіксованою відстанню Не-Не (рис. 1); її зменшення відповідало збільшенню величини тиску [4]. При досягненні певної величини тиску, внаслідок оптимізації геометрических параметрів системи, поліацетиленова структура перетворювалася на кумуленову.

Оцінити величину енергетичного ефекту фазового переходу  $\alpha$ -карбін –  $\beta$ -карбін можна зробити навіть при використанні результатів розрахунків невеликих молекул ацетиленового ( $\text{HC}\equiv\text{CH}$  та  $\text{HC}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{CH}$ ) та кумуленового ( $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$  та  $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CH}_2$ ) типів, різниця брутто-формул (а отже, і величин повної енергії) яких відповідає двом ланкам ідеальної структури однієї або іншої форм карбіну ( $-\text{C}\equiv\text{C}-$  та  $=\text{C}=\text{C}=$ ): відповідне значення складає 26,9 кДж/моль.

Для кільцевих моделей розраховані значення енергії переходу є близькими до згаданої величини, причому зі збільшенням числа атомів у моделі вона поступово (монотонно) зменшується ( $\text{C}_8$  – 36,8;  $\text{C}_{12}$  – 29,3;  $\text{C}_{16}$  – 26,7;  $\text{C}_{24}$  – 24,7;  $\text{C}_{36}$  – 23,9 кДж/моль). Прямий розрахунок залежності величин вільної енергії Гіббса ( $\Delta G$ ) від температури для таких структур засвідчив, що очікувана температура фазового переходу сягає далеко за 4000 К і коректна її оцінка вимагає явного врахування зовнішнього тиску.

Тиск, необхідний для здійснення фазового переходу, розраховували як першу похідну повної енергії системи за її об'ємом (на рис. 2 наведено питому енергію модифікацій карбіну, а за нуль на шкалі енергій обрано питому енергію  $\alpha$ -модифікації за відсутності атомів гелію;  $P_x$  – тиск переходу). З цією метою обчислювали об'єм тора завтовшки 4 Å (згідно попередніх розрахунків, рівноважна відстань між двома паралельними ланцюгами карбіну складає 3,8-4,1 Å).

Для моделі, що складається з 8 атомів вуглецю в оточенні 8 атомів гелію, при накладанні зовнішнього тиску 22,8 ГПа питома енергія переходу зменшується з 36,8 до 34,9 кДж/моль, а температура переходу, розрахована із зміни енергії Гіббса, складає 4140 К, тоді

як розрахунок цієї величини за формулою  $T = \Delta E/R$  (де  $R$  – універсальна газова константа) дає лише 3355 К. Ці величини істотно більші за експериментальні, що свідчить про недостатність використаної моделі.



Рис. 1 – Молекулярна модель  $\text{He}_{16}\text{-C}_{16}$

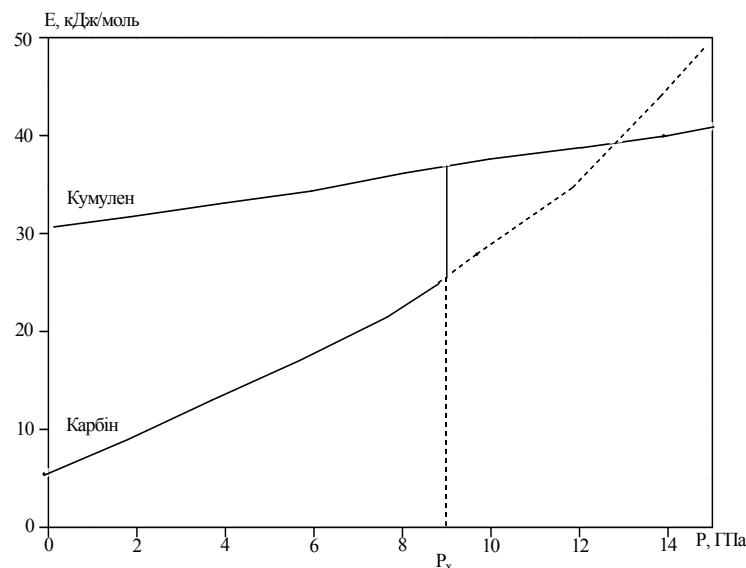


Рис. 2 – Вплив зовнішнього тиску на енергію фазового переходу в карбіні (модель  $\text{He}_{16}\text{-C}_{16}$ )

Переход до більшої моделі (12 атомів вуглецю в оточенні 12 атомів гелію) істотно поліпшує результати розрахунків: питома енергія переходу зменшується з 29,3 до 17,6 кДж/моль, що вимагає зовнішнього тиску 9,44 ГПа, а температура переходу складає 2131 К, що є дуже близьким до експериментальних даних. Ще більша модель (16 атомів вуглецю в оточенні 16 атомів гелію) дає температуру переходу 2073 К і вимагає зовнішнього тиску 8,93 ГПа. Подальше збільшення розмірів моделі (24 та 36 атомів) не вносить істотних змін до значень тиску і температури фазового переходу, що можна пояснити незначним відхиленням кута C-C-C від розгорнутого.

Отже, параметри фазового переходу в твердих тілах з ланцюговою структурою можна коректно оцінити шляхом квантовохімічних розрахунків властивостей порівняно простих цикліческих моделей. Однак моделювання твердих фаз неорганічних речовин, що містять атоми важких елементів (особливо це стосується сполук переходів металів, де, як правило, необхідно враховувати наявність високоспінових станів), які утворюють ланцюги складної будови, потребує значно більших обчислювальних ресурсів, ніж у випадку карбіну (зокрема, для розрахунку коливальних спектрів та термодинамічних характеристик обраних молекулярних моделей).

1. Лебедев Б.В. Термодинамика карбина // Изв. Академии наук. Сер. хим. – 2000. – № 6. – С.971-980.
2. Cataldo F. On the enthalpy of formation of the most known carbon allotropes // Fullerene Sci. and Technol. 1997. – V. 5, N 7. – P.1615-1620.
3. Schmidt M.W. General atomic and molecular electronic structure system: Review / M.W. Schmidt, K.K. Baldridge, J.A. Boatz et al. // J. Comput. Chem. – 1993. – V. 14, N 11. – P.1347-1363.
4. Ross N.L. A molecular orbital study of  $\text{H}_6\text{Si}_2\text{O}_7$  under simulated compression / N.L. Ross,E.P. Megher // Amer. Miner. – 1984. – V. 69, N 11-12. – P.1145-1149.

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА  
В БУФЕРНОЙ СИСТЕМЕ ХЛОРОВОДОРОДНАЯ КИСЛОТА –  
ГЕКСАМЕТИЛЕНТЕТРАМИН – ВОДА**

Чеботарёв А.Н., Хома Р.Е., Снигур Д.В., Труш Е.В.

Одесский национальный университет имени И.И. Мечникова, alexch@ukr.net

Гексаметилентетрамин (ГМТА –  $C_6H_{12}N_4$ ) широко применяется в аналитической практике в качестве компонента буферных сред при спектрофотометрическом определении  $Pd(II)$  [1],  $Pb$  [2],  $U(VI)$  [3] и  $Sc(III)$  [4]; спектрофлуорометрическом определении нуклеиновых кислот [5]; потенциометрическом определении бора в геологических материалах [6]; флуорометрическом определении  $Eu(III)$  [7] и нуклеиновых кислот [8]. При этом значение pH буферных сред колеблется в пределах 4,9 ÷ 7,6.

Целью настоящей работы было разработка методики приготовления буферных растворов с заданным значением кислотности из водных растворов ГМТА и  $HCl$  при  $20^{\circ}C$ . Потенциометрические измерения выполняли на иономере И-130 в термостатируемой ячейке при постоянном перемешивании. Погрешность иономера составляла  $\pm 0,05$  ед.рН. Индикаторным электродом служил стеклянный марки ЭСЛ-43-07; в качестве электрода сравнения использовали хлоридсеребряный ЭВЛ-1М3. Стандартизация pH-метрической установки осуществлялась с помощью стандартных буферных растворов. Каждое потенциометрическое измерение повторялось не менее 5 раз.

Зависимость pH буферной системы  $HCl$  –  $C_6H_{12}N_4$  –  $H_2O$  от соотношения компонентов в ней изучали следующим образом. В мерную колбу емкостью 50,0 мл вносили определенный объем водного раствора ГМТА с концентрацией 1,00 М. Объем колбы доводили до метки 0,10 М  $HCl$  и измеряли pH полученного раствора. Результаты эксперимента представлены в виде зависимости  $pH = f(C_{GMTA}/C_{HCl})$  (рис. 1).

Анализируя полученную графическую зависимость следует отметить, что систему  $HCl$  – ГМТА –  $H_2O$  в качестве буферной можно использовать для поддержания pH в области 4,00 ÷ 7,00. Величина pH зависит от соотношения и концентрации компонентов в системе.

ГМТА в водном растворе может существовать в молекулярной (свободной) и протонированной формах (уравнение 1).



где  $K_{\text{пр}}$  – константа протонирования;  $K_a$  – константа аprotонирования ( $pK_a = 5,13$  [9]).

Согласно условию материального баланса общая концентрация ГМТА ( $C_{GMTA}$ , М) равна сумме равновесных концентраций его молекулярной ( $[C_6H_{12}N_4]$ ) и протонированной форм ( $[C_6H_{12}N_4H^+]$ ):

$$C_{GMTA} = [C_6H_{12}N_4] + [C_6H_{12}N_4H^+]. \quad (2)$$

Учитывая процесс протонизации ГМТА (уравнение 1), связь его молекулярной формы с протонированной следует представить в виде:

$$[C_6H_{12}N_4] = \frac{[C_6H_{12}N_4H^+] \cdot K_a}{[H_3O^+]} . \quad (3)$$

Диссоциация воды описывается равновесием:



Произведение воды равно

$$K_w = [H_3O^+] \cdot [OH^-] . \quad (5)$$

Условие электронейтральности для раствора, содержащего одновременно хлороводородную кислоту и ГМТА, запишется в виде:



Так как, хлороводородная кислота является сильной:



то равновесная концентрация хлорид-ионов в растворе ( $[\text{Cl}^-]$ ) равна общей концентрации хлороводородной кислоты ( $C_{\text{HCl}}$ ). Кроме того,  $[\text{OH}^-] < [\text{H}_3\text{O}^+]$  в области  $4,0 < \text{pH} < 7,0$ ; при этом в условиях приготовления вышеуказанных буферных систем  $[\text{H}_3\text{O}^+] \ll [\text{Cl}^-]$ . Таким образом, уравнение (6) примет вид:

$$[\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4\text{H}^+] \approx C_{\text{HCl}}. \quad (8)$$

Учитывая уравнение (8), общая концентрация ГМТА определяется как:

$$C_{\text{ГМТА}} \approx \frac{C_{\text{HCl}} \cdot K_a}{[\text{H}_3\text{O}^+]} + C_{\text{HCl}}. \quad (9)$$

Поделив левую и правую часть уравнения (9) на  $C_{\text{HCl}}$  имеем:

$$\frac{C_{\text{ГМТА}}}{C_{\text{HCl}}} \approx \frac{K_a}{[\text{H}_3\text{O}^+]} + 1. \quad (10)$$

Отнимем от обеих частей уравнения (10) единицу, а затем, их прологарифмировав, получаем:

$$\lg \left( \frac{C_{\text{ГМТА}}}{C_{\text{HCl}}} - 1 \right) \approx -\lg [\text{H}_3\text{O}^+] + \lg K_a, \quad (11)$$

или после формальных преобразований:

$$\lg \left( \frac{C_{\text{ГМТА}}}{C_{\text{HCl}}} - 1 \right) \approx \text{pH} - \text{pK}_a. \quad (12)$$

Для проверки вышеуказанных рассуждений путем обработки экспериментальных данных (рис. 1) получена графическая зависимость  $\lg \left( \frac{C_{\text{ГМТА}}}{C_{\text{HCl}}} - 1 \right) = f(\text{pH})$ , представленная на

рис. 2. Согласно проведенным исследованиям зависимость  $\lg \left( \frac{C_{\text{ГМТА}}}{C_{\text{HCl}}} - 1 \right) = f(\text{pH})$  можно представить в линейном виде:

$$\lg \left( \frac{C_{\text{ГМТА}}}{C_{\text{HCl}}} - 1 \right) = B \cdot \text{pH} - A, \quad (13)$$

где  $A = 4,23$ ;  $B = 0,90$ ; величина достоверности аппроксимации  $R = 0,999$ . Как показывает сопоставление уравнений (12) и (13), величина  $A$  (4,23) на 0,90 меньше, чем  $\text{pK}_a$  (5,13); коэффициент  $B$  (0,90) отличается от 1,00 на 0,10.

Указанные несущественные отличия коэффициентов  $A$  и  $B$  в уравнении (13), полученных путем обработки экспериментальных данных, от ожидаемых  $\text{pK}_a$  и 1,00 соответственно в уравнении (12), очевидно, связаны с выше сделанными допущениями. Следует отметить, что привлечение уравнения (13) позволяет с достаточно высокой

точностью (относительная ошибка составляет  $\leq 3,20 \%$ ) приготовить буферные растворы состава  $\text{HCl} - \text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 - \text{H}_2\text{O}$  с требуемым значением pH в области  $4,50 \div 7,00$ .

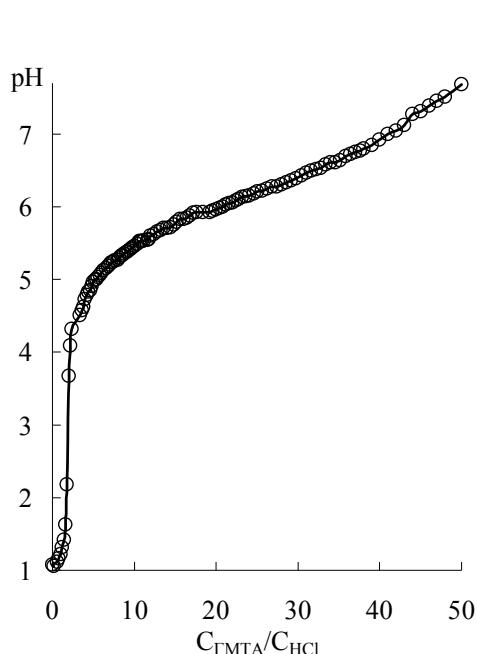


Рис. 1 - Зависимость pH буферных растворов  $\text{HCl} - \text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 - \text{H}_2\text{O}$  от соотношения концентраций компонентов ( $C_{\text{GMTA}}/C_{\text{HCl}}$ ).

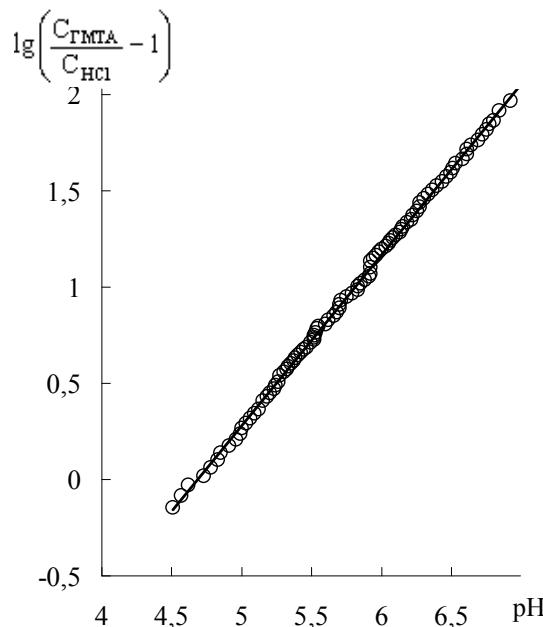


Рис. 2 – Зависимость  $\lg\left(\frac{C_{\text{GMTA}}}{C_{\text{HCl}}} - 1\right)$  от pH в буферной системе  $\text{HCl} - \text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 - \text{H}_2\text{O}$ .

1. Pérez Trujillo J.P., Sosa Z., Arias J. J. Spectrophotometric study of the complexation equilibria and the determination of palladium(II) with 4-(5'-methyl-3'-isoxazolylazo)-resorcinol // Polyhedron. – 1989. – Vol. 8, No 2. – P. 197-202.
2. Kotrlý S. Photometric microtitrations. I Chelatometric determination of lead with dithizone as indicator // Microchimica Acta 1964. – Vol. 52, No 2-4, P. 407 – 413.
3. Marsh S. F., Betts M. R., Rein J. E. Determination of submicromolar amounts of uranium(VI) by compleximetric titration with pyridine-2,6-dicarboxylic acid // Analytica Chimica Acta 1980. – Vol. 119, No 2. – P. 401-404.
4. Chan-il Park, Ki-Won Cha Spectrophotometric Determination of Scandium(III) in Monazite after Separation Using Amberlite IRC 718 Chelating Resin // Bull. Korean Chem. Soc. 1999. - Vol. 20, No 12. – P. 1409-1412.
5. Xiaoming Chen, Changqun Cai He 'an Luo, Guanghuo Zhang Study on the resonance light-scattering spectrum of anionic dye xylenol orange-cetyltrimethylammonium-nucleic acids system and determination of nucleic acids at nanogram levels // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. – 2005. – Vol. 61, No 9. – P. 2215-2220.
6. Friedrich Kluger, Christian Koeberl Determination of boron at low abundance levels in geological materials with a tetrafluoroborate-selective electrode // Analytica Chimica Acta 1985. – Vol. 175. – P. 127-134.
7. Ki-Won Cha, Chan-II Park, Kwang-Won Park Determination of Glycine Based on Fluorimetric Enhancement of Eu(III)-TTA Complex // Bull. Korean Chem. Soc. 2002. - Vol. 23, No. 4.- P. 623-625
8. Dong-Hui Li, Xian-Lan Chen, Ying Fang, Jin-Gou Xu Determination of nucleic acids based on shifting the association equilibrium between tetrasulfonated aluminium phthalocyanine and Acridine Orange // Analyst. – 2001. – 126. – P. 518–522.
9. Горновский И.Т., Назаренко Ю.П., Некряч Е.Ф. Краткий справочник по химии. Киев: Наукова Думка, 1974. – 346.

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ЦИАНИДИНА  
ПРИ ИЗМЕНЕНИИ КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ  
МЕТОДОМ ПОТЕНЦИАЛОВ НУЛЕВОГО РАДИУСА**

Чеботарёв А.Н.<sup>1</sup>, Марченко С.В.<sup>1,2</sup>, Снигур Д.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Одесский национальный университет имени И.И. Мечникова, alexch@ukr.net

<sup>2</sup> Одесский национальный медицинский университет

Одним из наиболее распространенных классов красителей растительного происхождения являются флавоноиды, а именно антоцианидины (АЦН), что обусловлено их физико-химическими характеристиками и особенностями строения. Известно, что АЦН в зависимости от кислотности среды могут находиться в нескольких кислотно-основных формах, существующих в узких интервалах pH, и характеризуются определенным значением констант ионизации. Определение констант ионизации – задача, как классических экспериментальных методов, так и перспективного на сегодняшний день метода химической цветометрии, но построение схемы динамического равновесия кислотно-основных форм красителя с использованием указанных методов является сложной и, как правило, прогностической задачей, базирующейся на целом ряде допущений. Среди существующих АЦН применение находит цианидин (ЦН) как пищевой краситель, компонент биологически активных добавок, а также в качестве кислотно-основного индикатора и является перспективным аналитическим реагентом на ряд ионов металлов. В работе [1] на основании данных спектрофотометрии, цветометрии и квантово-химических расчетов в среде программы HyperChemPro 6 предложена схема основных ионных форм ЦН, которая приведена на рис. 1.

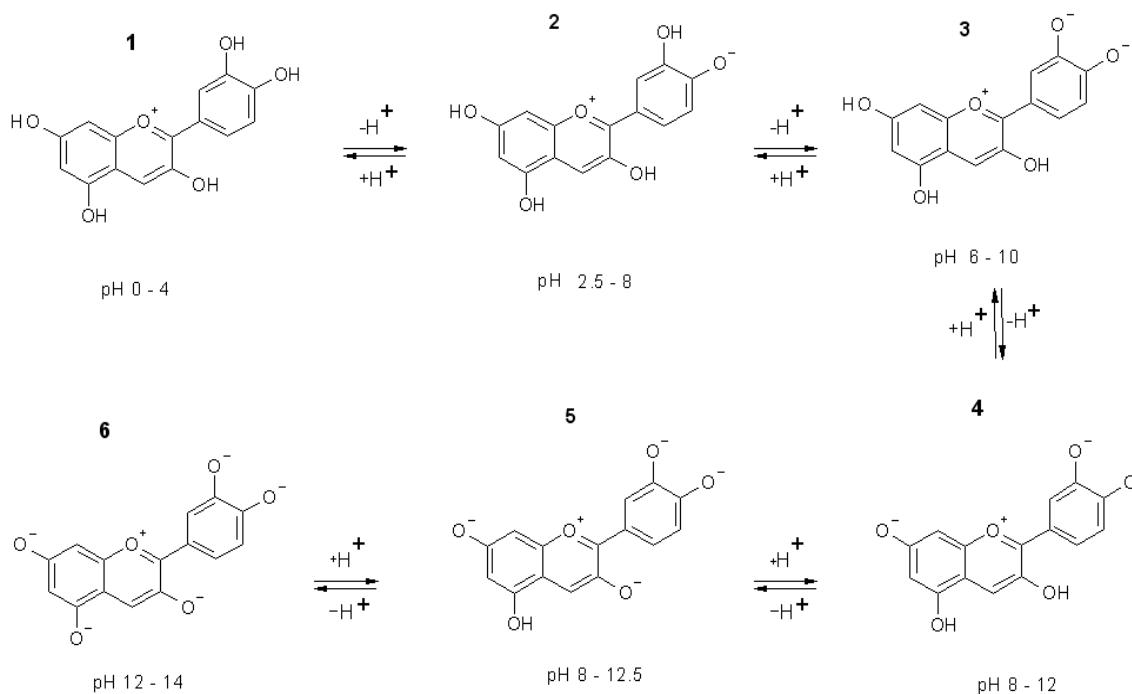


Рис. 1 – Схема ионных равновесий кислотно-основных форм цианидина

Проверить правильность, представленной выше схемы, можно используя метод потенциалов нулевого радиуса (ПНР) для расчета изменений в спектрах поглощения ЦН (рис. 2) при переходе из одной формы в другую. Метод ПНР был разработан для решения ряда задач атомной физики [2], хотя, впоследствии стал применяться в физике твердого тела при исследовании, в первую очередь, оптических свойств мезообъектов и кластеров, давая

при этом результаты лучше согласующиеся с экспериментом, чем стандартные методы квантовой химии при много меньших затратах машинного времени [3].

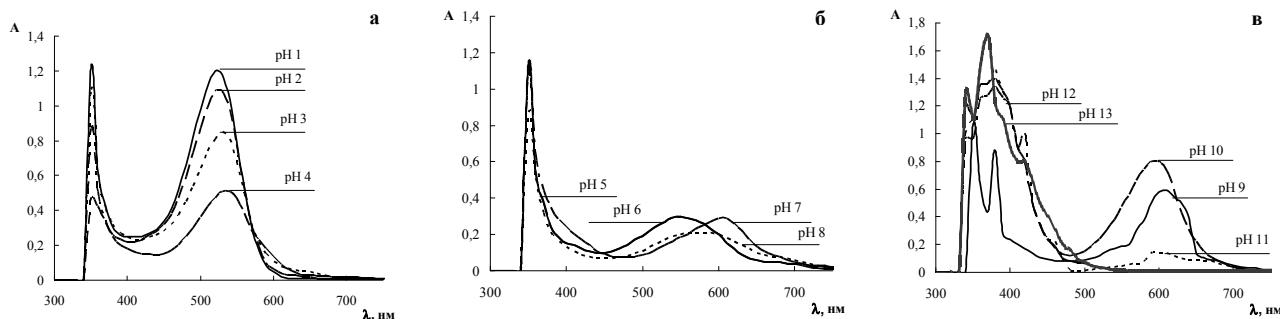


Рис. 2 – Спектри поглощення цианидина: а) pH 1÷4, б) pH 5÷8, в) 9÷13

Характер поглощения света многими органическими соединениями обусловлен электронными переходами и, соответственно, однозначно определяется существующей электронной структурой молекулы. В общем случае, для описания электронной структуры конкретной молекулы (т.е. для нахождения плотности электронных состояний) необходимо решить уравнение Шредингера в каждом из узлов молекулярной структуры, рассматривая узел как энергетическую потенциальную яму определенной глубины и конфигурации. Получая, таким образом, набор собственных значений разрешенных энергий мы имеем энергетическую схему соответствующую данному соединению. Решение такой системы уравнений Шредингера в общем случае – задача достаточно громоздкая, поэтому прибегают к использованию приближенных методов, одним из которых является метод ПНР. Кратко изложим его суть.

Рассмотрим уравнение Шредингера вида:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})]\Phi(\vec{r}) = E \Phi(\vec{r}) \quad (1)$$

Связанное состояние можно обозначить некоторым параметром расстояния  $a$  и считать, что на расстоянии от узла большем, чем этот параметр, частица свободна, т.о. получим систему уравнений вида:

$$\begin{cases} \chi''(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(\vec{r})]\chi(\vec{r}) = 0, & 0 < r < a \\ \chi''(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}E\chi(\vec{r}) = 0, & r > a \end{cases} \quad (2)$$

Второе уравнение системы (2) можно записать в виде:

$$\chi''(\vec{r}) - \lambda^2 \chi(\vec{r}) = 0 \quad (3)$$

где  $\chi(r) = r\Psi(r)$ .

Его убывающим решением будет  $\chi(r) = Ae^{-\lambda r}$ , таким образом можно записать:

$$\Psi(\vec{r}) = A \frac{e^{-\lambda r}}{r} \quad (4)$$

Причем,

$$\lambda = -\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E_0|} \quad (5)$$

где  $E_0$  - собственное значение энергии, соответствующее энергии ионизации.

Решение (4) необходимо сшить с решением первого уравнения системы (2)  $\Psi_0(\vec{r})$  в точке на расстоянии  $a$  от узла. Используя следующие граничные условия:

$$\frac{1}{r\Psi_0} \frac{d(r\Psi_0)}{dr} \Big|_a = \frac{1}{r\Psi} \frac{d(r\Psi)}{dr} \Big|_a = \lambda \quad (6)$$

Уменьшая радиус действия потенциала, одновременно увеличивая глубину потенциальной ямы, не изменяя собственные значения энергии в граничном случае, мы можем заменить действие реального потенциала граничным условием:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left[ \frac{d(r\Psi)}{dr} - \lambda r\Psi \right] = 0 \quad (7)$$

Таким образом, вместо того, чтобы решать систему дифференциальных уравнений второго порядка типа (1), необходимо разрешить систему алгебраических уравнений типа (7). Зная параметризацию для исследуемой молекулы (т.е. координаты всех ее атомов), а также потенциалы ионизации, входящие в параметр  $\lambda$  в соответствии с (5), можно получить разрешенные уровни энергии, решив систему уравнений (7).

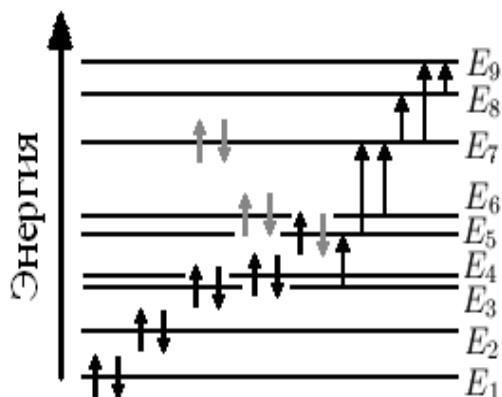


Рис. 3 – Схема электронных уровней молекулы цианидина, где серым цветом обозначены электроны, высвобождающиеся в процессе ионизации

На схеме приведенной на рис. 3 энергия перехода электрона с уровня  $E_5$  на уровень  $E_7$  соответствует полосе поглощения около 358 нм. Переход с  $E_4$  на  $E_5$  близок по энергии к 535 нм. Как можно судить из рис. 2 (а, б, в) переход  $E_5-E_7$  наблюдается при всех значениях pH. Полоса поглощения, которая соответствует переходу  $E_4-E_5$ , при повышении pH становится менее яркой. Это связано с тем, что при отрыве хотя бы одного водорода, уровень  $E_5$  (рис. 3) заполняется полностью, соответственно, переходы на него не происходят (естественно, что в растворе все еще присутствует некоторое количество неионизированного цианидина, поэтому полоса поглощения полностью исчезает только при больших значениях pH). Появляющаяся полоса поглощения около 600 нм (рис. 2 б) может быть ассоциирована с переходом  $E_7-E_8$ , который возможен при четырехкратной ионизации цианидина. Одновременно с ее появлением уровень  $E_5$  заполнен практически у всех молекул, что приводит к полному исчезновению соответствующей полосы поглощения. Также при заполнении уровня  $E_7$  появляется полоса около 375 нм (рис. 2 в), что соответствует переходу  $E_7-E_9$ . Как можно видеть из спектров приведенных на рис. 2 в, наблюдаются практически все характерные полосы поглощения, что связано с присутствием молекул разной степени ионизации. Следует отметить, что при таких значениях pH (9÷13) вследствие хотя бы однократной ионизации цианидина которая приводит к заполнению уровня  $E_4$  исчезает переход  $E_4-E_5$ .

В результате проведенной работы показана принципиальная возможность использования метода ПНР для расчета изменений в спектрах поглощения красителей при варьировании кислотности среды с предоставлением схем равновесий их кислотно-основных форм основанных на экспериментальных данных химической цветометрии.

1. Чеботарев О.М., Єфімова І.С., Борисюк Н.А., Снігур Д.В. Метод кольорометрії в дослідження кислотно-основних характеристик барвників рослинного походження //Методы и объекты химического анализа. – 2011, 6, №4. – с. 207-213.
2. Демков .Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд-во Ленинградского ун-та. 1975 г.
3. Vadim M. Adamyan, Sergey V. Tishchenko. One-electron states and interband optical absorption in single-wall carbon nanotubes, J. Phys.: Condensed Matter, 19, 186206 (18 pp.), 2007.

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОПОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ РАЗЛОЖЕНИЯ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ В ОБЛАСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

Радченко А.А., Солнцев В.П.\* , Шахновский А.М.

Национальный технический университет Украины «КПИ», ArcadyShakhn@mail.ru

\*Института проблем материаловедения НАН Украины им.И.М. Францевича

Значительный теоретический и практический интерес представляет установление закономерностей протекания неравновесных процессов и механизмов реакционного взаимодействия в порошковых реагирующих системах [1].

В частности, выяснение закономерностей разложения оксидов металлов (переходные металлы – аналоги IV-VI групп Периодической системы элементов) в области термодинамической неустойчивости является ключом к прогнозированию деструктивных процессов в экстремальных условиях эксплуатации композиционных материалов (которые применяются в производстве покрытий для корпусов в авиационной и космической промышленностях), повышения функциональных свойств (прочности, жаростойкости и тугоплавкости) и интенсификации технологии полученияnanoструктурных композиционных материалов с применением реакционного спекания [1, 2].

Решение поставленной задачи в рамках представленного исследования предусматривало:

- 1) Экспериментальное исследование механизмов активного реакционного спекания в порошковых реагирующих системах (Металл - Металл' - Газ) на основе металлических композиций.
- 2) Математическое моделирование кинетики разложения оксидов в процессе активного реакционного спекания в указанных системах (сосредоточенных и распределенных).
- 3) Разработку рекомендаций относительно улучшения условий протекания процессов программированного реакционного спекания указанных порошковых композиций.

В дифференциальной форме с учетом диффузии и теплопередачи математическая модель неравновесного процесса разложения может быть представлена системой трех нелинейных уравнений, где не только управляющие параметры (константы скоростей реакций, энталпии), но и сами переменные (концентрации и температура), определяют кинетическую траекторию. Суперпозиция химических, диффузионных процессов и конвекции и теплопередачи в порошковой среде должно приводить к неоднородному распределению, как температуры, так и концентраций компонентов в системе, возникновению тепловых и концентрационных волн.

В частности, на этапе моделирования реакционного спекания в порошковых реагирующих системах для идеальной газовой смеси систему уравнений макроскопической кинетики можно записать следующим образом:

$$\frac{d(T)}{dt} = (-g_0 \cdot T \cdot H_p + 2K_2 \cdot (X)^2 \cdot H_2 - 2K_3 \cdot (X_2) \cdot H_3) / C \quad (1)$$

$$\frac{d(X)}{dt} = g_0 \cdot T - 2K_2 \cdot (X)^2 + 2K_3 \cdot (X_2) - g_1 \quad (2)$$

$$\frac{d(X_2)}{dt} = K_2 \cdot (X)^2 - K_3 \cdot (X_2) - g_2 \quad (3)$$

где  $X$  и  $X_2$  – концентрации атомарного и молекулярного газа, соответственно;  $g_1$  и  $g_2$  – величины потоков газов, уходящих во внешнюю среду;  $T$  – температура;  $H_2$  и  $H_3$  – энталпии образования газов;  $H_p$  – энталпия реакции;  $K_2$  и  $K_3$  – константы скорости реакции;  $C$  – теплоемкость системы.

Поскольку рассматриваемый процесс необратимого разложения находится вдали от равновесия в кинетической области, где состояние газовой среды не влияет на скорость разложения, которую принимаем постоянной  $g_0$ .

В действительности разложение соединений, образованных молекулярными газами сопровождается поглощением тепла, а реакция рекомбинации является экзотермическим процессом, поэтому изменение температуры в области взаимодействия так же, как и концентрации будет иметь немонотонный характер.

Решение и анализ модели приведенной системы показали существование колебательных траекторий в области термодинамической неустойчивости бинарных соединений (рис. 1, рис. 2).

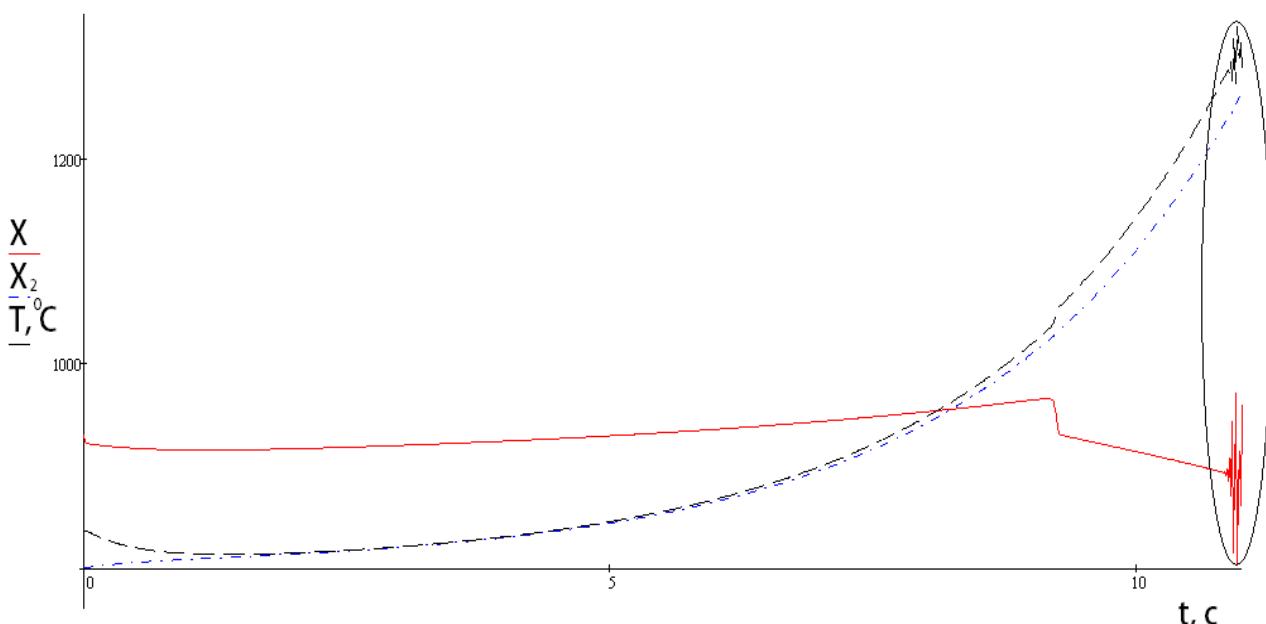


Рис. 1 – Кинетические зависимости изменения состава газовой среды и температуры

Существование колебательных траекторий предполагает возникновение термокинетических колебаний, что может приводить к ускоренной деградации материалов в среде активных двухатомных газов.

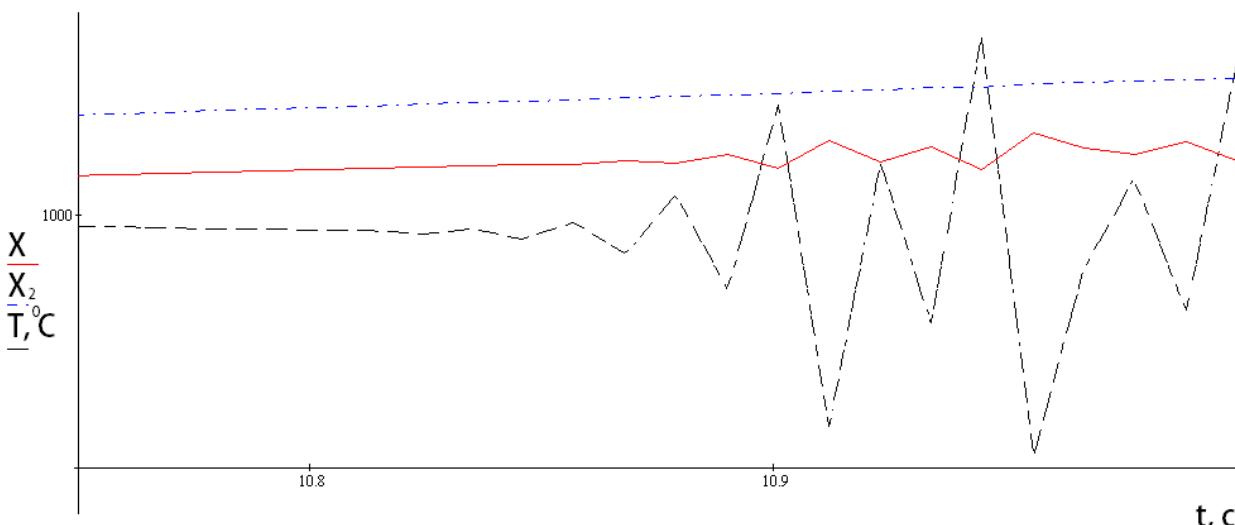


Рис. 2 – Кинетические зависимости изменения состава газовой среды и температуры (выделенная область)

При моделировании процесса открывается возможность нахождения критической температуры, при которой появляется автоколебания. Что при производстве реальных образцов позволит избежать появления неоднородности концентрации на поверхности.

1. Скороход, В.В. О динамическом характере устойчивости в порошковых реагирующих системах [Текст] / В.В. Скороход, В.П. Солнцев // Доп. НАНУ. - 2001. - № 11. - С. 74 - 80.
2. Ляхов, Н.З. Природа гетерогенности и макрокинетика топохимических реакций разложения твердых тел [Текст] / Н.З. Ляхов // Известия СО АН СССР, 1985, № 5, сер. Химические науки, выпуск 2, с. 3-18.

### **КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АКТИВАЦИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО АЗОТА В ПРИСУТСТВИИ ПЕРЕКИСИ ВОДОРОДА**

Захаров И. И.<sup>1</sup>, Лория М.Г.<sup>1</sup>, Целищев А.Б.<sup>1</sup>, Минаев Б.Ф.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Технологический институт Восточноукраинского национального института имени Владимира Даля (г. Северодонецк), zvonu@rambler.ru

<sup>2</sup>Черкасский национальный университет им. Б. Хмельницкого, г. Черкассы.

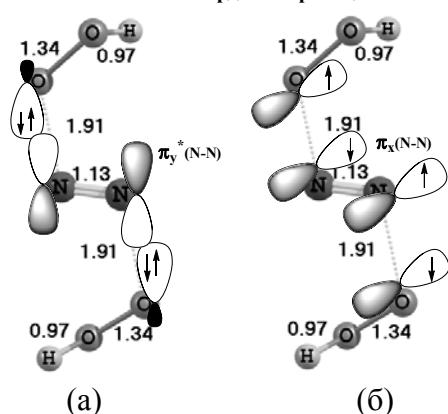
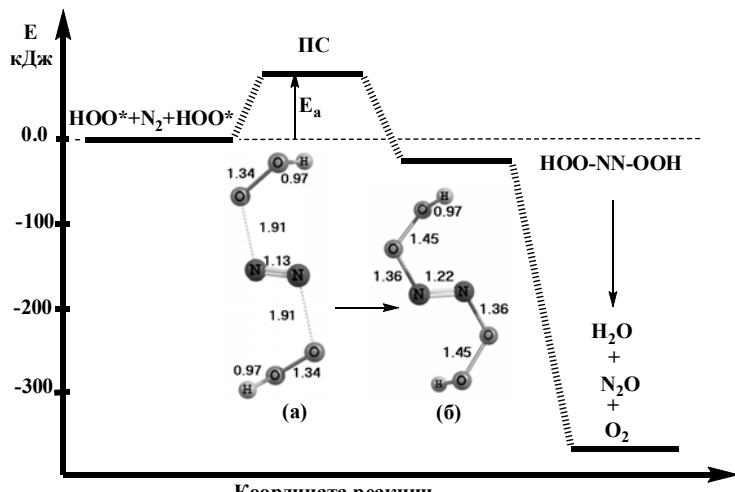
Почти 40 лет назад, азербайджанские химики, отец и сын Нагиевы преподнесли научную загадку [1] – осуществили реакцию связывания азота в виде N<sub>2</sub>O через взаимодействие N<sub>2</sub> с перекисью водорода HOOH при среднетемпературных условиях (T≈500°C, P=1 атм). В данном сообщении представлен возможный механизм такого процесса, обоснованный квантово-химическими расчетами методом теории функционала плотности на уровне B3LYP/6-311++G(3df,3pd).

Основной особенностью реализованного процесса является наличие в реакционной газовой фазе активных OH и OOH радикалов с соотношением концентраций [OOH]/[OH] ~ 10<sup>3</sup> ÷ 10<sup>7</sup> [2]. В связи с этим, нами рассмотрена возможность активации N<sub>2</sub> гидроперекисным радикалом OOH. На рис. 1 представлены результаты расчета энергетического профиля такой реакции, которая характеризуется низкоэнергетическим (E<sub>a</sub>=79,2 кДж/моль) переходным состоянием (ПС) и образованием промежуточного продукта HOO-N=N-OOH:



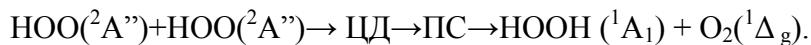
Из анализа квантово-химических результатов расчета переходного состояния (ПС) активации молекулярного азота гидропероксидными радикалами HOO· на рис. 2

представлена схема молекулярно-орбітального взаємодії  $\text{HOO}^* + \text{N}_2 + \text{HOO}^*$  через синглетное спаривание радикалов в присутствии  $\text{N}_2$ .



Из представленной молекулярно-орбитальної схеми (рис.2) слідує, що електронне становище пероксидного радикала співпадає з не основним ( ${}^2\text{A}''$ ), а відповідно з відповідним  $\text{HOO}^*({}^2\text{A}')$ , коли неспарений електрон знаходиться на  $\sigma$ -молекулярній орбіталі HOO (а не на  $\pi$ -МО, як для основного становища HOO). Таким чином в експериментальних умовах процесу активування  $\text{N}\equiv\text{N}$  можуть виникати пероксидні радикали в відповідному становищі  $\text{HOO}^*({}^2\text{A}')$ ? Важко зазначити, що енергетична розниця між цими становищами ( $\Delta E = 0,87 \text{ эВ}$  [3]) залежить від малого моменту перехіду  $X {}^2\text{A}'' - A {}^2\text{A}'$  [4] і може бути преодолена тільки з допомогою сенсибілізатора. Найбільш підходящим сенсибілізатором в цьому випадку може бути синглетний кислород  $\text{O}_2({}^1\Delta_g)$ , так як його енергія відносно основного  $\text{O}_2({}^3\Sigma_g)$  становища становить  $\Delta E = 0,98 \text{ эВ}$ , що на 0,11 еВ вище 0,87 эВ і він довго живе в газовій фазі ( $\tau \approx 45 \text{ мин}$ ).

Возможність формування синглетного кислорода  $\text{O}_2({}^1\Delta_g)$  при димеризації пероксидних радикалів HOO недавно продемонстровано в праці [5]. У табл.1 представлені B3LYP/6-311++G(3df,3pd) спин-поляризовані розрахунки димеризації гідропероксидних радикалів HOO з утворенням циклического димера (ЦД) і генерацією синглетного кислорода  $\text{O}_2({}^1\Delta_g)$ :



Важно зазначити (табл.1), що цей процес самопроизвольним ( $\Delta G^\circ_{298} \approx -40 \text{ кДж}$ ) і не потребує енергії активування.

*Таблица 1 – Данные квантово-химического DFT-расчета полной энергии  $E_{\text{total}}$ , энергии нулевых колебаний  $E_0$  и абсолютной энтропии  $S^{\circ}_{298}$  для реагентов, продуктов и переходного состояния (ПС), а также термодинамических величин  $\Delta_r G^{\circ}_{298}$ ,  $\Delta_r H^{\circ}_{298}$  и  $\Delta_r S^{\circ}_{298}$  для реакции димеризации гидропероксидных радикалов НОО с образованием циклического димера (ЦД) и генерированием синглетного кислорода  $O_2(^1\Delta_g)$ :*



Молекулярная система (симметрия, электронное состояние)	B3LYP/6-311++G(3df,3pd) спин-поляризованный расчет			
	Полная энергия $E_{\text{total}}$ (ат. ед.)	Энергия нулевых колебаний $E_0$ (кДж/моль) <sup>a</sup>	$\Delta_r H^{\circ}_{298}$ кДж/моль <sup>b)</sup>	$S^{\circ}_{298}$ Дж/(моль·К)
HOО ( $C_s - ^2A''$ ) + HOО ( $C_s - ^2A''$ ) ↓ ЦД ( $C_{2h} - ^1A$ ) Рис. 3, а ↓ ПС ( $C_1 - ^1A$ ) Рис. 3, б ↓ HOОН ( $C_2 - ^1A_1$ ) + O <sub>2</sub> ( $^1\Delta_g$ ) ----- $\Delta_r G^{\circ}_{298} =$ -69,7 кДж [-40,2 кДж]	-150,96833 -150,96833 -301,95591 $\Delta H = -39,1$ кДж/моль -301,94126 $E_a = -16,0$ кДж/моль -151,61319 ----- -----	37,1 (0) 37,1 (0) 85,6 (0) 70,3 (1) $i\omega = 1110 \text{ cm}^{-1}$ 69,8 (0) 9,8 (0) ----- $\Delta_r H^{\circ}_{298} =$ -80,0 кДж <sup>c</sup> [-46,2 кДж]	+7,2 <sup>b)</sup> [+2,1] <sup>b)</sup> +7,2 [+2,1] <sup>b)</sup> - - -107,7 [-136,1] +42,1 [+94,1] ----- - -34,6 Дж/К [-20,2 Дж/К]	228,7 [229,1] <sup>b)</sup> 228,7 [229,1] <sup>b)</sup> 357,0 - 303,7 - 227,0 [233,0] 195,8 [205,0] ----- ----- ----- -----

<sup>a)</sup> В скобках приведено число мнимых частот в колебательном спектре молекул. Отсутствие мнимых частот характеризует молекулярную структуру как стабильную (стационарную). Наличие одной мнимой частоты характеризует структуру переходного состояния (ПС).

<sup>b)</sup> Теплоты образования рассчитаны относительно энергетического уровня простых веществ N<sub>2</sub>( $^1\Sigma_g$ ), O<sub>2</sub>( $^3\Sigma_g$ ) и H<sub>2</sub>( $^1\Sigma_g$ ) с учетом энергии нулевых колебаний E<sub>0</sub>:  $\Delta H = \Delta E_{\text{total}} + \Delta E_0$ . Используемые соотношения энергетических единиц: 1 ат.ед. = 627,544 ккал; 1 ккал = 4,184 кДж.

<sup>c)</sup> В квадратных скобках приведены экспериментальные значения термодинамических параметров, взятых из базы данных NIST: [http://webbook.nist.gov/chemistry].

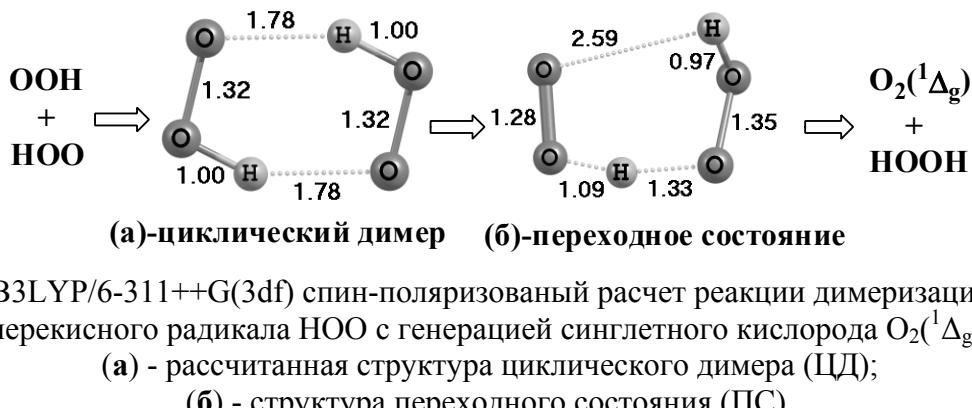


Рис.3 - B3LYP/6-311++G(3df) спин-поляризованный расчет реакции димеризации гидроперекисного радикала HOO с генерацией синглетного кислорода  $O_2(^1\Delta_g)$ :  
 (а) - рассчитанная структура циклического димера (ЦД);  
 (б) - структура переходного состояния (ПС).

Таким образом, нами обоснован процесс активации и связывания молекулярного азота в виде  $N_2O$  через взаимодействие  $N_2$  с гидроперекисными радикалами  $HOO^*$  в возбужденном состоянии, которое сенсибилизировано синглетным кислородом  $O_2(^1\Delta_g)$ . Генерирование  $O_2(^1\Delta_g)$  через димеризацию радикалов HOO с последующей сенсибилизацией возбужденного состояния  $HOO^*$  можно рассматривать как один из механизмов синергетического эффекта при окислении субстрата в присутствии перекисных радикалов.

1. Нагиев, М.Ф. Связывание азота в виде его закиси / [М.Ф. Нагиев, Т.М. Нагиев, Ф.А. Асланов и др.] - ДАН СССР. – 1973. – Т. 213. – № 5. – с.1096 – 1098.
2. Нагиев, Т. М. Сопряженные реакции окисления перекисью водорода / Т. М. Нагиев – Успехи химии. – 1985. – Т. 54. – № 10. – с.1654 – 1673.
3. Minaev, B.F. Photochemical Water Decomposition in the Troposphere: Density Functional Study with a Symmetrized Kohn–Sham Formalism / [B.F.Minaev, I.I. Zakharov, A.B. Tselishtev et al.] – ChemPhysChem – 2010. – Vol. 11. – № 18. – P. 4028–4034.
4. Минаев, Б.Ф. Расчет анизотропии g-фактора по методу ППДП с учетом СОВ / Б.Ф. Минаев – Оптика и спектроскопия – 1974. – Т. 36. – №2. – с. 275-279.
5. Xu, X. The gas phase reaction of singlet dioxygen with water: a water-catalyzed mechanism / [X. Xu, R.P. Muller, W.A. Goddard III.] – Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 2002. –Vol. 99 – № 6. – p.3376 – 3381.

## МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ФОРМУВАННЯ ЛИЦЬОВОГО ШАРУ ТРОТУАРНОЇ ПЛИТКИ

Путієнко Т.В., Статюха Г.О.

Національних технічний університет України «КПІ», taras.v@meta.ua

Найбільш ефективним способом виробництва тротуарної плитки на сьогодні є об’ємне напівсухе вібропресування. Вироби, отримані в такий спосіб, мають високі експлуатаційні характеристики при високій продуктивності виробництва. Формувальні машини, що використовуються у виробництві тротуарної плитки дозволяють формувати двохшарову плитку. Така плитка має основний шар який забезпечує високі експлуатаційні характеристики і лицьовий (фактурний) шар товщиною близько 4–6 мм, який у своєму складі додатково містить барвник. Така технологія виробництва дозволяє отримувати тротуарну плитку будь-яких кольорів без суттєвого підвищення собівартості. Крім того, за наявності відповідного обладнання, технологія вібропресування дозволяє розширити асортимент тротуарної плитки використанням технології “ColorMix”, яка полягає у не повному змішуванні кількох різнокольорових бетонних сумішей при формуванні фактурного шару тротуарної плитки. Зазвичай, для виробництва плитки “ColorMix” необхідне додаткове обладнання, яке здебільшого пропонують такі іноземні компанії як “WuerschumGmbH”, “HESSMaschinenfabrikGmbH&Co.KG” і “MasaGmbH”. Встановлення такого обладнання

потребує значних капіталовкладень, тому в більшості випадків є економічно не обґрунтованим. З іншого боку, аналіз технічних можливостей сучасного формуючого обладнання показав існування можливості отримання тротуарної плитки з властивостями наближеними до “ColorMix” використовуючи функціональні особливості деяких формуючих машин, які мають бункер для бетонної суміші фактурного шару із додатковим шибером. Недоліком такого підходу є складність прогнозування результату отриманого при такому змішуванні.

На основі результатів експериментів по отриманні плитки “ColorMix” на формуючій машині HESS MULTIMAT RH1500, для прогнозування вигляду фактурного шару сформованої тротуарної плитки було запропоновано імітаційну модель виду:

$$h = f(x, y, v, p) \quad (1)$$

де  $x, y$  – координати точки на площині сформованого зразка тротуарної плитки у кодованій формі;  $h$  – умовне значення висоти на якій у бункері розміщується зразок суміші, що ймовірно потрапить у точку з координатами  $x, y$ ;  $v$  – повний об’єм суміші у бункері,  $\text{m}^3$ ;  $p$  – випадковий параметр на відрізку  $[0, 1]$ .

Основна складність отримання такої моделі полягає в тому, що необхідно спочатку пов’язати колір кожної точки зображення тротуарної плитки, отриманої у результаті експерименту, з висотою на якій у бункері розміщується шар суміші, зразок якої ймовірніше за все потрапив у дану точку. Для цього потрібно ввести наступні припущення:

- стінки бункера вважати вертикальними (таким чином висота усіх шарів суміші буде пропорційна їх об’єму);
- знахтувати формуєю поверхні насипу суміші у бункері – вважати плоскою.

Знаючи кількість шарів кольорових сумішей, порядок їх завантаження у бункер та колір суміші кожного шару можна провести класифікацію точок зображення за кольором. Для вирішення цієї задачі у роботі використовується конкурюча нейронна мережа, яку ще називають шаром Кохонена[1]. Даний вид нейронних мереж, як правило використовується для класифікації даних. Використати дану мережу для класифікації даних дозволяє наявність режиму тренування. Отримана в результаті «треновано» нейронна мережа здатна відносити будь-яку точку зображення до одного із заданих класів. Результатом класифікації конкурючою нейронною мережею є матриця, що містить значення, які відповідають номерам шарів колір яких найбільш подібний кольору відповідної точки. Графічна інтерпретація результатів класифікації точок одного з зображень наведено на рис.1.

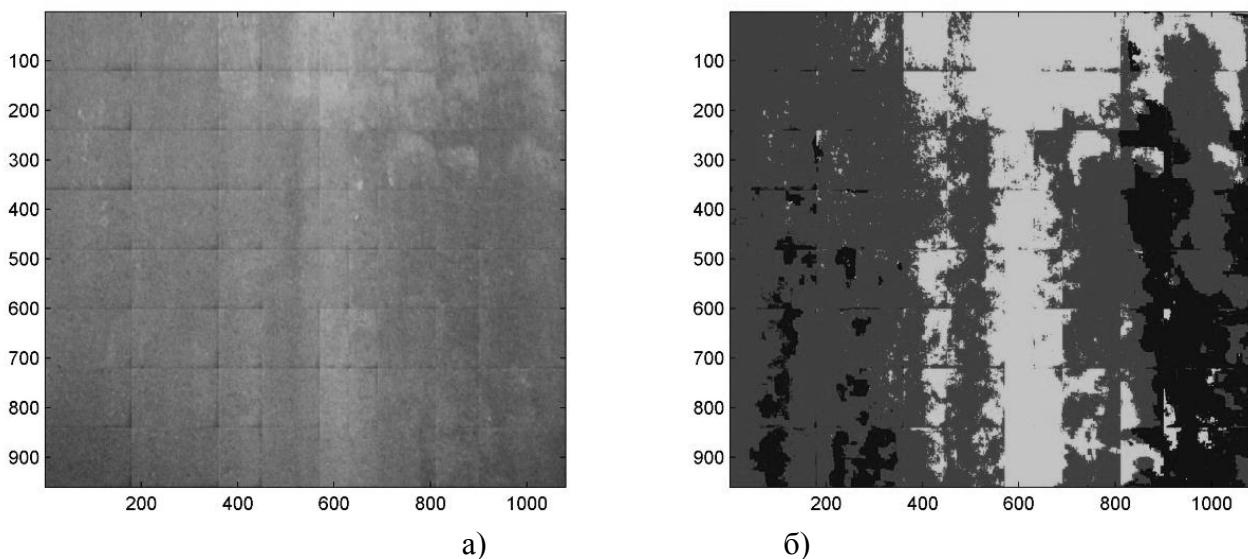


Рис. 1 – Результатів класифікації за кольором:

а – оригінал зображення; б – графічна інтерпретація результату класифікації на три групи.

На основі вибірки результатів класифікації для набору паралельних експериментів було знайдено інтервальний статистичний розподіл ймовірності потрапляння зразка суміші кожного з шарів у певну точку зображення. Для цього номери шарів попередньо було замінено на інтервали висоти  $[h_{\min}, h_{\max}]$ . Із інтервального статистичного розподілу отримано інтегральний закон розподілу ймовірностей

$$P_i = P_i(h) \quad (2)$$

де  $i$  – порядковий номер точки у вибірці, що має координати  $x, y$  при загальному об'ємі суміші в бункері  $v$ .

Для використання залежності (2) у ролі імітаційної моделі потрібно знайти обернену функцію:

$$h = f_i(P) \quad (3)$$

По суті залежність (3) можна розглядати як набір обернених функцій для кожної точки вибірки. За номером  $i$ , точки пов'язані із параметрами  $x, y$  та  $v$ , тому можна узагальнити залежності (3) привівши до вигляду (1).

Для реалізації моделі загального вигляду були використані різні методи, такі як: інтерполяція, регресійна модель, нейронна мережа і система нейро-нечіткого виведення. Порівняльні характеристики отриманих моделей наведено у табл. 1.

Нейронна мережа має найменшу похибку апроксимації експериментальних даних, при цьому вона досить гнучко описує закономірності процесу і дозволяє проводити екстраполяцію, тому вона найкраще підходить для подальшого використання. Інтерполяція і система нейро-нечіткого виведення можуть розглядатися як альтернативні варіанти, так як мають деякі корисні властивості, зокрема точність при інтерполяції чи здатність до узагальнення системою нейро-нечіткого виведення. Регресійна модель виявилася дуже грубою і не придатна для подальшого використання.

Таблиця 1 – Характеристики отриманих моделей

Тип моделі	Особливості	Похибка
Інтерполяційна	Лінійна інтерполяція реалізована вбудованими засобами MATLAB (клас TriScatteredInterp)	-
Регресійна	Регресійне рівняння другого порядку	0,12
Нейронна мережа	Двошарова нейронна мережа прямого поширення, прихованій шар складається із 40 нейронів	0,0091 (тестова вибірка)
Система нейро-нечіткого виведення	Блок фазифікації параметра $p$ містить 4 функції принадлежності, всі інші по 3; кількість правил – 108; вихідні функції лінійного типу	0,098 (тестова вибірка)

Процес імітаційного моделювання розпочинається із імітації завантаження бункеру. Для цього для кожного шару задається колір, об'єм і положення у бункері, що визначається відрізком висоти залягання даного шару  $[h_{\min}, h_{\max}]$ . Потім користувач задає бажане розширення результуючого зображення. Проводиться розрахунок координат  $x, y$  для кожного пікселя. Далі для кожного пікселя відбувається розрахунок висоти  $h$  за моделлю, при цьому кожного разу розігрується нове значення параметра  $p$ . Кожному пікселю результуючого зображення надається забарвлення, що відповідає кольору шару суміші, для якого виконується умова:

$$h_{\min} < h \leq h_{\max} \quad (4)$$

Для проведення імітаційного моделювання у системі MATLAB був створений програмний модуль, що має графічний інтерфейс і дозволяє наочно проводити імітацію завантаження бункеру і налаштовувати параметри імітаційного моделювання. Крім цього у програмі передбачена можливість завантаження користувачем власних моделей. Приклад зображення, отриманого у результаті імітаційного моделювання процесу змішування 0,4 м<sup>3</sup> червоної суміші і 0,15 м<sup>3</sup> білої суміші наведено на рис. 2.

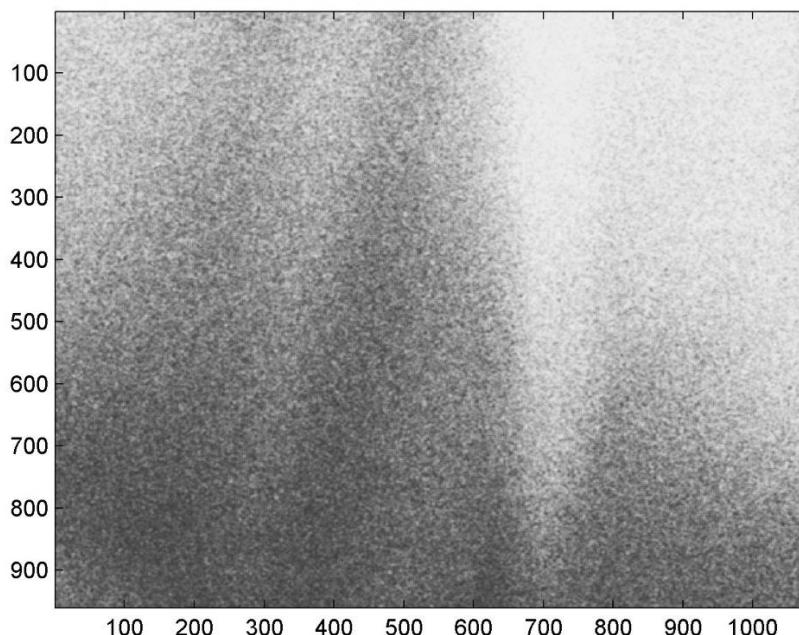


Рис. 2 – Результат імітаційного моделювання

Підводячи підсумки роботи можна зробити висновок щодо можливості математичного опису процесу змішування кольорових напівсухих бетонних сумішей при формуванні фактурного шару двохшарової тротуарної плитки.

1. Медведев В.С. Нейронные сети. MATLAB 6/ Под общ. Ред. К.т.н. В.Г. Потемкина.[Текст] / Медведев В.С., Потемкин В.Г. – М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 2002. – 496 с.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМАХ “SO<sub>2</sub> – R<sub>2</sub>NCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>NR<sub>2</sub> – H<sub>2</sub>O” Хома Р.Е.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Физико-химический институт защиты окружающей среды и человека,

<sup>2</sup>Одесский национальный университет имени И. И. Мечникова, rek@onu.edu.ua

В продолжение исследований равновесных процессов в системах “оксид серы (IV) – амины – вода” [1, 2] проведено компьютерное моделирование взаимодействия в системах “оксид серы (IV) – 1,2-диамин – вода”.

Оксид серы (IV) при растворении в воде образует моногидрат (уравнение 1), продуктами диссоциации которого являются гидросульфит-, пиросульфит- и сульфит- ионы (уравнения 2–4). Автопротолиз воды описывается уравнением (5).





В водных растворах диаминов протекает их протонирование (6) и дипротонирование (7).



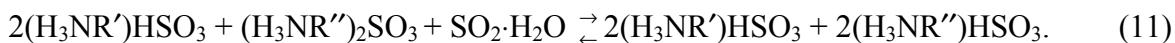
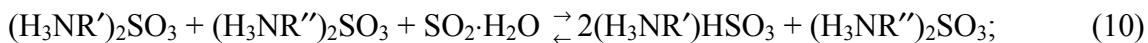
Так как  $K_{a1} \gg K_{a2}$ , то следует ожидать постадийного образования “ониевых” сульфитов, гидросульфитов и пиросульфитов.

По способности к протонированию атомы N аминогрупп не эквивалентны (сначала протонируется один, а затем – второй). Первую аминогруппу обозначим как  $\text{H}_2\text{NR}'$ , а вторую –  $\text{H}_2\text{NR}''$ , причем соотношение  $\text{H}_2\text{NR}' : \text{H}_2\text{NR}'' = 1:1$ .

Постадийное образование “ониевых” сульфитов можно описать уравнениями (8, 9):



а гидросульфитов из сульфитов – уравнениями (10, 11):



Для проверки корректности изложенных представлений проведено pH-метрическое титрование водных растворов простейшего представителя 1,2-диаминов, этилендиамина (ЭДА,  $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$ ), газообразным оксидом серы (IV) (например, рис. 1, 2).

На всех интегральных pH-метрических кривых титрования присутствуют два явных скачка, которым отвечают максимумы на дифференциальных кривых (см., например, рис. 3.a), то есть наблюдается аналогия с системами на основе этаноламинов, гексаметилентетрамина и гексаметилендиамина [1-3]. Во всех случаях положение первого максимума на дифференциальных pH-метрических кривых (например, рис. 2) совпадает и отвечает мольному соотношению  $\text{SO}_2 : \text{ЭДА} = 1,0 : 2,0$  (область pH 8,5 – 9,5 во всем изученном диапазоне концентраций ЭДА и температур), что, очевидно, соответствует образованию полусульфита этилендиаммония  $(\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3)_2\text{SO}_3$  (уравнение 8).

Во всех случаях на дифференциальных кривых pH-метрического титрования наблюдается максимум при соотношении  $\text{SO}_2 : \text{ЭДА} = 3,0 : 2,0$  (например, рис. 2). Его появление связано с образованием смешанной соли – сульфита-гидросульфита этиленаммония  $(\text{H}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3)\text{SO}_3 \cdot (\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3)(\text{HSO}_3)_2$ . То есть один N-атом связан в сульфитную форму за счет протонирования, а второй – в гидросульфитную (уравнение 10).

Ожидаемых экстремумов на дифференциальных кривых титрования при соотношении  $\text{SO}_2 : \text{ЭДА} = 4,0 : 2,0$  (отвечающему образованию гидросульфита  $(\text{H}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3)(\text{HSO}_3)_2$  либо пиросульфита  $(\text{H}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3)(\text{S}_2\text{O}_5)$  этилендиаммония) не наблюдается (уравнение 11).

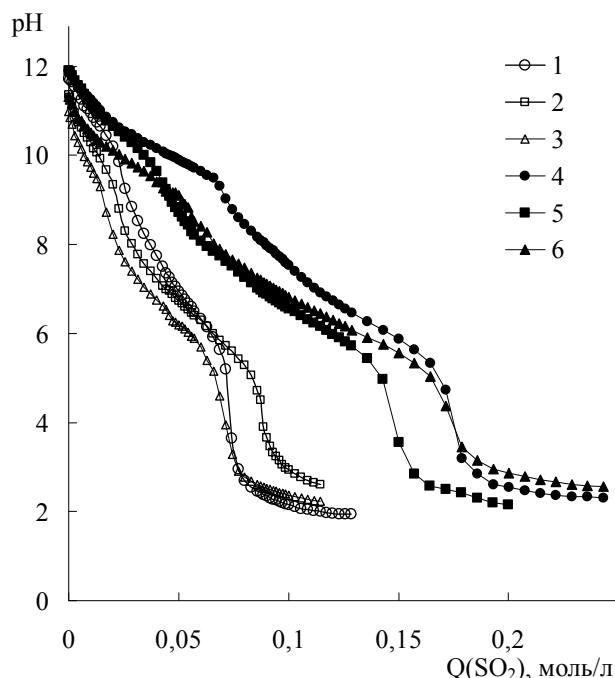


Рис. 1 – pH-метрические кривые титрования водных растворов ЭДА газообразным  $\text{SO}_2$ .  
 $C_{\text{EDA}}^0 = 0,05 \text{ моль/л}$  (1-3),  $0,10 \text{ моль/л}$  (4-6);  
 $T (\text{K})$ : 283 – 1, 4; 293 – 2, 5; 303 – 3, 6.

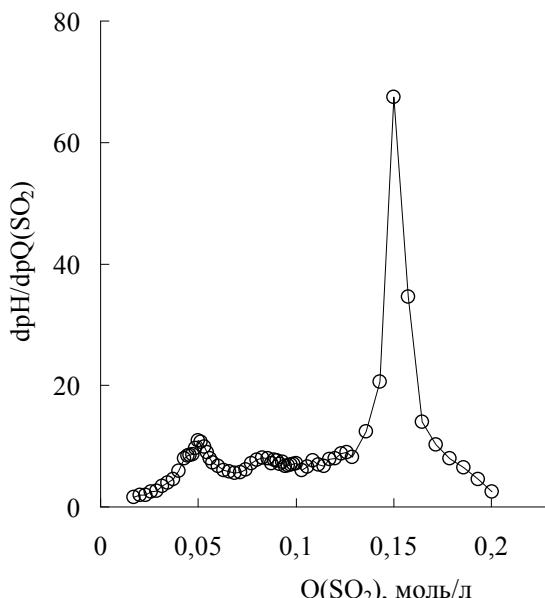


Рис. 2 – Дифференциальная pH-метрическая кривая титрования водного раствора ЭДА газообразным  $\text{SO}_2$  при  $293 \text{ K}$ .  $C_{\text{EDA}}^0 = 0,1 \text{ моль/л}$ .

Таким образом, замена гидроксильной группы у этаноламина на аминогруппу приводит к следующему: при взаимодействии ЭДА с оксидом серы (IV) в водных растворах происходит полное “срабатывание” первой  $\text{NH}_2$ -группы вплоть до связывания ее в “ониевые” гидро-, пиросульфиты (как и в случае систем с этаноламинами [1, 3]), а вторая  $\text{NH}_2$ -группа частично “срабатывает” с образованием только “ониевого”сульфита.

Как отмечено выше, в системах “ $\text{SO}_2 - \text{R}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NR}_2 - \text{H}_2\text{O}$ ” на первой стадии образуются “ониевые” полусульфиты.



Учитывая закон действующих масс (урвнения 2 – 7, 12), уравнения материального баланса по сере (13), азоту (14) и условие электронейтральности (15), получаем систему уравнений: (2 – 7, 12 – 14).

$$Q_S = [\text{SO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}] + [\text{HSO}_3^-] + 2[\text{S}_2\text{O}_5^{2-}] + [\text{SO}_3^{2-}] + [(\text{AmH})_2\text{SO}_3] \quad (13)$$

$$Q_N = 2[\text{Am}] + 2[\text{AmH}^+] + 2[\{\text{AmH}_2\}^{2+}] + 4[(\text{AmH})_2\text{SO}_3] \quad (14)$$

$$[\text{H}^+] + [\text{AmH}^+] + 2[\{\text{AmH}_2\}^{2+}] = [\text{OH}^-] + [\text{HSO}_3^-] + 2[\text{S}_2\text{O}_5^{2-}] + 2[\text{SO}_3^{2-}] \quad (15)$$

Решение приведенной выше системы уравнений с использованием данных pH-метрического титрования приводит к установлению компонентного (ионного и молекулярного) состава системы “ $\text{SO}_2 - \text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2 - \text{H}_2\text{O}$ ”. С привлечением ранее полученных данных были рассчитаны константы комплексообразования указанного “ониевого” сульфита ( $\beta$ ) (таблица).

Таблиця 1 – Характеристики, описуючі относительну устойчивість полусульфита етилендіаммонія в водних розрівах

$C_{\text{ДА}}^0$ , моль/л	T, К	$\frac{dpH}{dpQ_{SO_2}}$	$p\beta$	$\Delta G$ , кДж·моль $^{-1}$	$S_{1/2}$	$\Delta pH_{1/2}$
0,10	293	10,88	-16,61	-93,12	0,191	1,35
0,05	283	11,73	-16,72	-90,54	0,100	1,00
0,05	293	10,05	-16,34	-91,61	0,151	1,45
0,05	303	7,32	-17,03	-98,74	0,125	1,85

\* $S_{1/2}$  – площа під отрезком дифференціальної кривої, лежащим між точками відповідного максимуму та наступного мінімуму;

\*\*  $\Delta pH_{1/2}$  – висота скачка на інтегральній кривої pH-метрического титрування, що лежить між точкою середини скачка титрування та його кінцем.

Согласно отриманим даним (табл. 1), величини максимумів на дифференціальних кривих титрування змінюються антибатно з характеристиками прочності сульфітних сполук (відмінно від систем з етаноламінами [1, 3]), якими є значення  $\Delta G$ . Однак значення  $\Delta pH_{1/2}$  змінюються симбатно з вказанними характеристиками.

Получені дані можуть використовуватися для розробки методів санітарної очистки повітря від оксида сернистого (IV) з використанням органічних оснований-хемосорбентів, регенерації хемосорбентів та утилізації продуктів сорбції.

- Хома Р.Е., Шестака А.А., Гельмболдт В.О. Состав та стабільність продуктів взаємодії оксида сернистого (IV) з водними розрівами етаноламінів // Вопросы химии и химической технологии. – 2009. - № 5. – С. 86-89.
- Хома Р.Е., Шестака А.А., Сохраненко Г.П., Гавриленко М.И., Гельмболдт В.О. Комплексоутворення оксида сернистого (IV) з гексаметилентетраміном та гексаметилендиаміном в воді // Журн. прикл. химии. – 2011. – Т. 84, № 1. – С. 18-24.
- Хома Р.Е., Шестака О.О., Гельмболдт В.О. Взаємодія оксида сернистого (VI) з водними розрівами моноетаноламіна // Вісник ОНУ. – 2010. – Т.15, № 12. – С. 26-34.

### СІМПЛЕКСНИЙ МЕТОД ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ В ТЕХНОЛОГІЇ ОДЕРЖАННЯ ПІГМЕНТІВ

Фролова Л.А., Сергієва О.В., Донець Ю.В., Оніщенко А.О.

Державний вищий навчальний заклад  
«Дніпропетровський хіміко-технологічний університет», domosedi@i.ua

З розвитком цивілізації спектр областей використання різноманітних пігментів значно розширився. Сьогодні синтетичні оксиди є найбільшою групою кольорових пігментів за обсягами споживання. Кольорові пігменти на основі заліза, кобальту одні з найпоширеніших типів неорганічних пігментів. Пігменти довговічні, економічні, не роблять значного впливу на довкілля, безпечні для здоров'я і широко доступні. Крім мінеральних оксидів заліза, широко використовуються синтетичні.

У теперішній час стало питання встановлення зв'язку пігментних характеристик, в тому числі і кольору, зі структурою, дисперсним складом та хімічним складом одержуваних продуктів. Метою дослідників є одержання з'єднання не тільки визначеного складу, а й продукту з визначеною кристалічною решіткою, дисперсним складом.

В даній роботі для одержання закономірностей зміни кольорових характеристик пігментів в залежності від їх фазового складу використано метод симплекс-решітчастого планування.

При вивчені властивостей суміші в залежності від вмісту компонентів в ній, факторний простір можна подати у вигляді правильного симплекса.

При плануванні експерименту для дослідження діаграм «склад-властивості» припускається, що дослідна властивість є неперервною функцією аргументу і з достатньою точністю описана поліномом. Поверхні відгуку в багатокомпонентних системах мають складний вигляд і для адекватного їх опису необхідні поліноми високого ступеню.

Враховуючи співвідношення  $\sum_{i=1}^N x_i = 1$  можна вилучити  $q$  – й компонент і зменшити число коефіцієнтів в поліномі. Але з огляду на сутність задачі бажано ввести в модель всі  $q$  компоненти.

За допомогою спектрофотометричного методу були отримані колірні характеристики пігментів системи Fe – Al – Co до прожарювання та після. Результати представлені на рис.1 та 2.

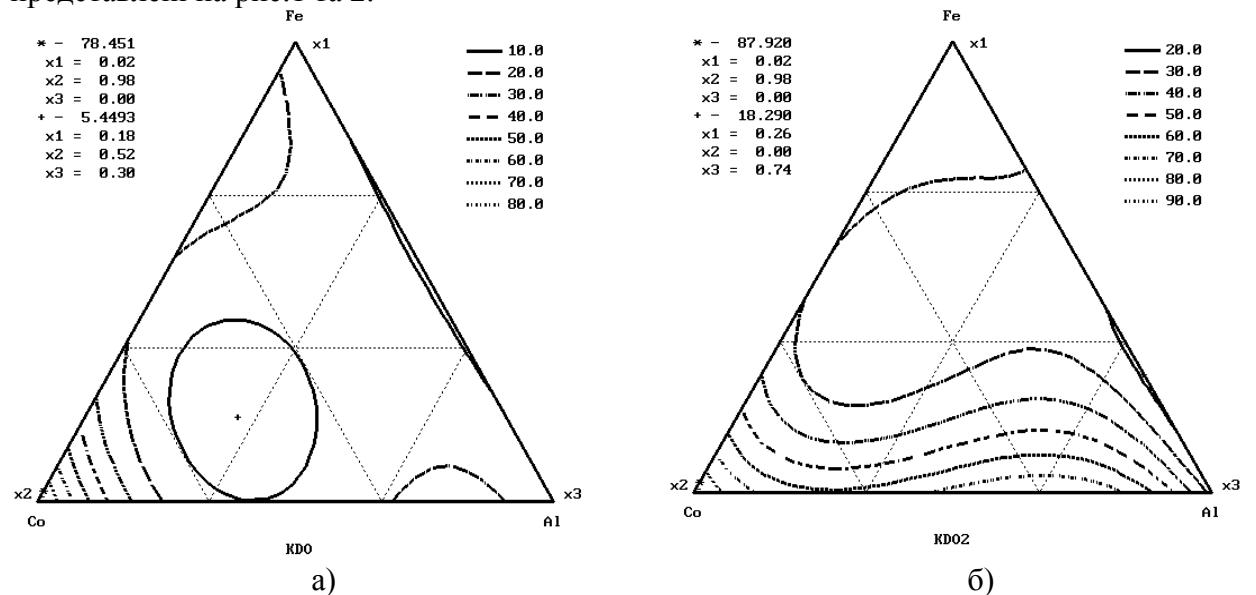


Рис. 1 – Залежність КДВ пігментів від їх хімічного складу:  
а)до прожарювання; б) після прожарювання

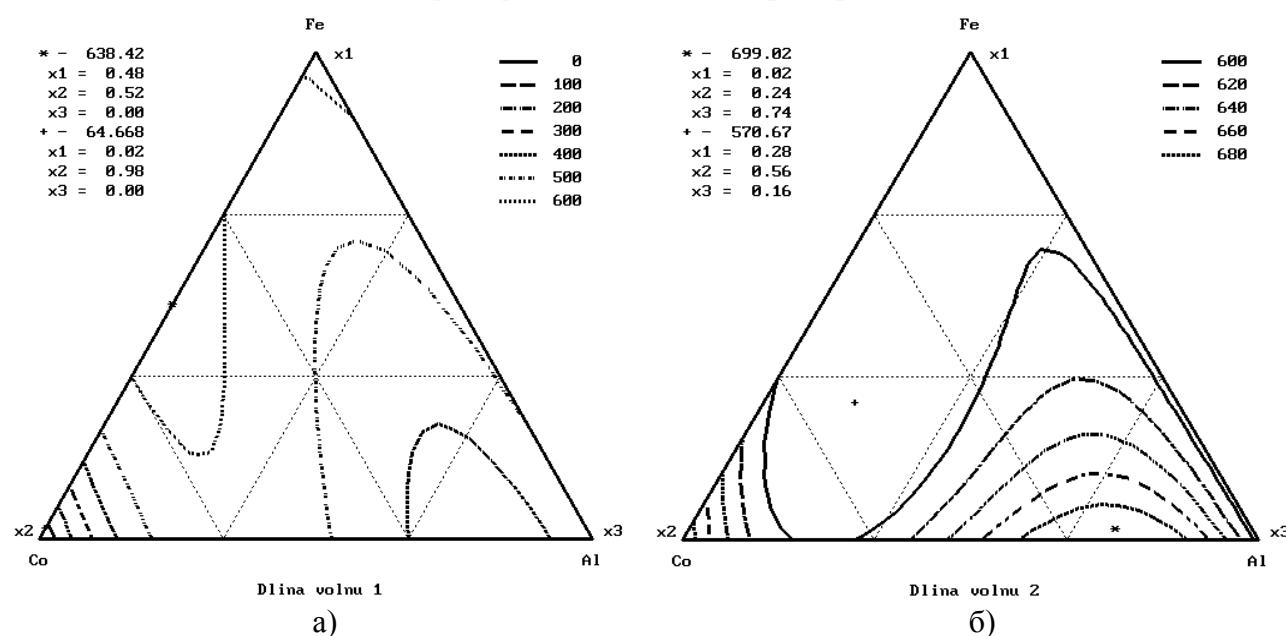


Рис. 2 – Залежність колірного тону пігментів від їх хімічного складу  
а) до прожарювання; б) після прожарювання

Аналізуючи одержані дані можна сказати, що колір зумовлено утворенням відповідних з'єднань. Колірний тон отриманих пігментів характеризується значеннями переважної довжини хвилі, яка знаходиться в межах 588-700 нм. Комбінації алюмінію з кобальтом дають рожеві відтінки. Присутність алюмінію призводе до утворення твердих розчинів оксигідроксидів заліза та алюмінію червоного кольору. Зразки, що відповідають різному вмісту кобальту та алюмінію відповідають рожево-бузковим кольорам утворених продуктів. Комбінації кобальту з залізом дають кольори коричневих відтінків, переважна довжина хвилі яких (596 нм) відповідає червоній області спектра. Більший вміст заліза робить пігмент темно-коричневого кольору. Потрійна точка (Fe – Al – Co) має теж коричневий колір.

Чистота кольору – це ступінь наближення даного кольору до чистого спектрального, що виражається в частках одиниці. Найбільшою чистотою володіють кольори спектра. Тому чистота всіх спектральних кольорів приймається за одиницю, незважаючи на їхню різну насиченість. Найбільш насичений синій колір, найменш - живтий. Особливо насичені кольори спостерігаються в спектрі, який не містить домішок білого або чорного. Було встановлено, що додавання до заліза кобальту і алюмінію збільшує чистоту кольору приблизно на 20-25%.

Для визначення впливу фазоутворення на колірні характеристики пігментів одержані пігменти прожарювали при 800 °С. Після прожарювання змінився колірний тон: в комбінаціях з алюмінієм він збільшився (579-630 нм), в комбінаціях з кобальтом – знизився(400-560 нм). Наприклад, спільна присутність у розчині заліза та алюмінію обумовила теракотово-червоний колір пігментів. Пігменти, до складу яких входили алюміній та кобальт, з рожевих перейшли в яскраво-сині. Комбінації кобальту з залізом дали сіро-коричневі відтінки.

Таким чином, для одержання пігментів з необхідними властивостями (кольором, відтінком, укривистістю, світlostійкістю, інтенсивністю та ін.) потрібно чітко витримувати технологічні параметри виробництва. При незначному відхиленні від них може утворюватись пігмент іншої структури і незадовільної якості.

1. Грач'ян, А.Н. Исследование новых пигментов для получения цветных цементов / А.Н.Грач'ян, П.П.Гайджуров, Н.В.Ротыч, С.П.Голованова // Известия вузов .Химия и химическая технология.-1972.-№1.-С.115-118.

### PROPERTIES OF ACID- AND ALKALI-TREATED CADMIUM PIGMENTS

Makarewicz E., Cysewski P., Michalik A., Ziolkowska D.

Faculty of Chemical Engineering and Technology,  
University of Technology and Life Sciences, Bydgoszcz, Poland, makar@utp.edu.pl

Properties of cadmium pigments treated with sodium hydrate or sulfuric acid water solution have been studied. Inorganic pigments received from Chemical Factory “Permedia S.C.” (Lublin, Poland) were used. The examined cadmium pigments were: Cadmium Yellow ST (CdS), Cadmium Yellow WO-2 (CdS\*0,2 ZnS), Cadmium Yellow SO-1 (CdS\*0,2 ZnS), Cadmium Orange SZ-1 (CdS\*0,1 CdSe), Cadmium Orange SW-1 (CdS\*0,2 CdSe), Cadmium Red 88-3 (CdS\*0,35 CdSe), Cadmium Red 88-4 (CdS\*0,5 CdSe), Cadmium Red 88-7 (CdS\*0,55 CdSe), Cadmium Red 88-71 (CdS\*0,65 CdSe). The purified pigments sample were put into a round-bottomed flask and flooded by 10% NaOH or H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> water solutions. Time of heating the pigment sample treated with alkaline was 15 minutes, while the one treated with acid took 30 minutes. The pigment after filtration was dried at a temperature of 85°C to constant mass. Thermal resistance of pigments was determined by thermogravimetric analysis using Derivatograph Q1500D (Paulik-Paulik-Erdey system, MOM, Hungary). The sample mass decrement was registered continuously as the temperature rose up to 700°C at the rate of 5°C per minute in air. XRD tracks were registered using Seifert diffractometer

with URD 6 goniometer, applying CuK $\alpha$  radiation and a nickel filter. The characteristic surface area has been determined by means of Methylene Blue dye adsorption. The Methylene Blue analytically pure reagent was used (Avantor<sup>TM</sup> Performance Materials, Gliwice). Thermogravimetric research shows that alkali-treated pigment surface is covered with zinc and cadmium hydroxide as amorphous body. On the other hand, X-ray study reveals that treating cadmium pigments with acid causes creation of cell-integrated zinc and cadmium sulfide. Treating pigments with alkaline results in significant surface area increase. Treating pigment with acid leads to yellow pigment surface decrease, orange and red pigments surface increase.

Table 1 – Thermal transition temperatures of purified ana alkaline/acid treated cadmium pigments

Type of pigment	Method of pigment treatment	Initial temperature of transformation $T_p$ [°C]	Final temperature of transformation $T_k$ [°C]	Mass enhancement between $T_p - T_k$ [%mas]	Temperature of the total decomposition $T_{re}$ [°C]
Cadmium yellow ST	A	503,0	753,8	30,0	836,3
	B	505,0	792,5	22,0	825,8
	C	158,8	215,68	- 4,6	-
		550,0	796,0	8,2	857,2
Cadmium yellow WO-2	A	609,4	771,5	37,3	863,0
	B	46,27	255,09	- 6,4	-
		636,3	778,0	8,5	858,9
	C	43,61	435,96	- 15,2	-
Cadmium yellow SO-1		482,6	855,4	10,0	910,9
	A	610,3	701,2	13,4	982,0
	B	40,5	454,46	- 12,7	-
		471,8	799,0	18,5	845,3
Cadmium orange SZ-1	C	39,82	628,03	- 14,6	-
		644,0	751,2	7,6	834,5
	A	540,8	754,4	31,6	764,9
	B	47,84	475,42	- 13,6	-
Cadmium orange SW-1		510,8	769,5	15,8	795,8
	C	531,3	745,6	31,9	754,8
	A	534,7	743,7	30,3	754,2
	B	51,3	484,31	- 8,4	-
Cadmium red 88-3		530,7	782,3	10,5	817,1
	C	157,43	432,77	- 6,2	-
		528,8	726,9	11,7	763,0
	A	514,0	723,9	25,4	758,0
Cadmium red 88-4	B	47,84	471,88	- 8,6	-
		505,8	718,3	11,4	761,7
	C	152,93	410,56	- 7,1	-
		436,0	677,0	7,3	739,0
Cadmium red 88-7	A	529,6	714,7	23,4	741,4
	B	46,5	491,55	- 9,4	-
		504,3	720,3	12,0	784,7
	C	55,3	417,31	- 7,9	-
Cadmium red 88-7		443,0	683,0	7,0	742,4
	A	535,0	704,3	18,6	737,4
	B	47,73	484,19	- 11,0	-
		511,8	704,7	7,4	746,3
Cadmium red 88-7	C	534,7	694,2	17,0	713,6

End of table 1

Type of pigment	Method of pigment treatment	Initial temperature of transformation $T_p$ [°C]	Final temperature of transformation $T_k$ [°C]	Mass enhancement between $T_p - T_k$ [%mas]	Temperature of the total decomposition $T_{rc}$ [°C]
Cadmium red 88-71	A	534,7	737,8	17,0	761,4
	B	41,05	490,55	- 5,7	-
		529,3	718,0	8,0	773,2
	C	71,0	491,55	- 3,4	-
		564,2	726,3	15,0	743,3

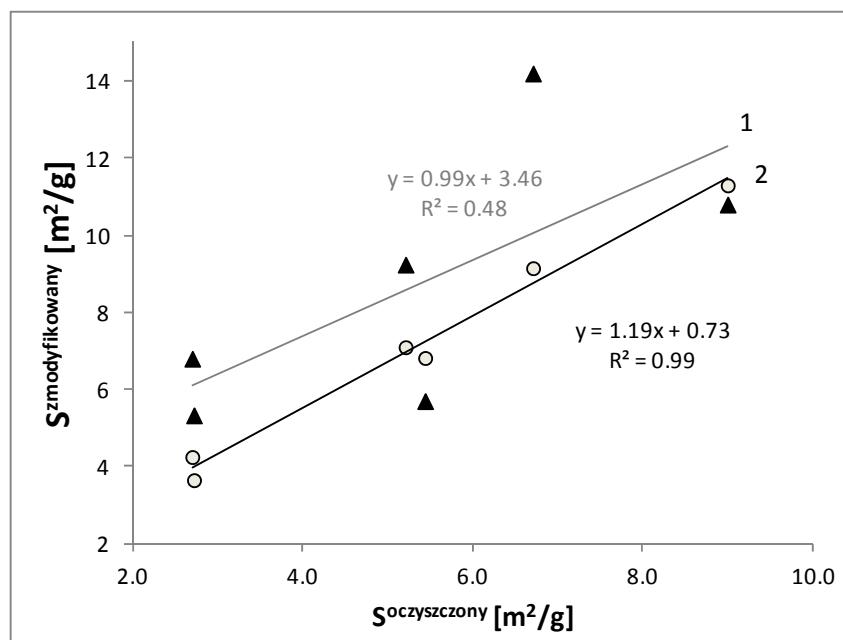


Fig. 1 – Changes of the surface area of pigments treated with acid (1) and alkali (2).

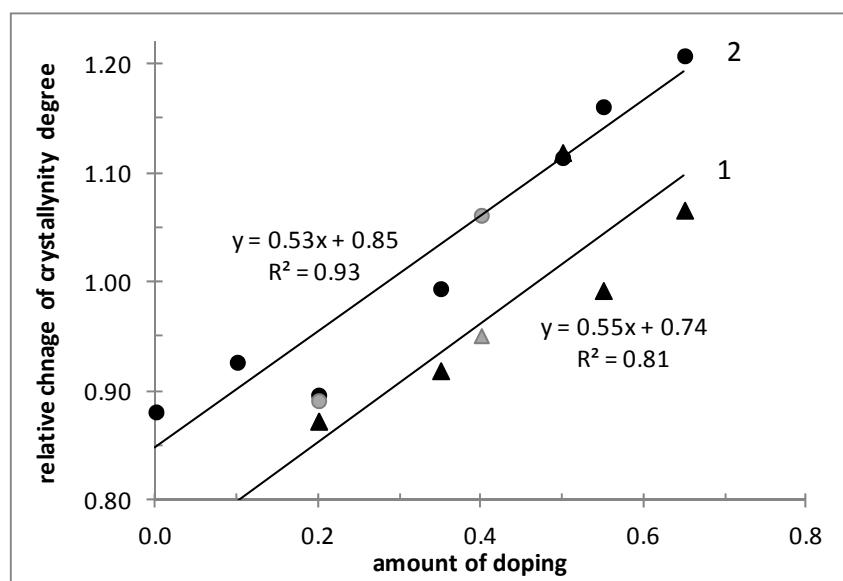


Fig. 2 – Change of crystallinity degree of pigments treated with acid (1) or alkali (2) as a function of CdSe or ZnS content. Black symbols represent CdSe, while gray symbols stands for ZnS inclusion.

*Table 2 – The values of specific surface area of cadmium-based pigments purified and after treatment in alkaline or acidic medium*

Name and symbol of pigment	Qualitative and quantitative chemical composition	Purified pigment S10 <sup>3</sup> [m <sup>2</sup> /g]	Pigment after treatment with base S10 <sup>3</sup> [m <sup>2</sup> /g]	Change of surface area %	Pigment after treatment in acid S10 <sup>3</sup> [m <sup>2</sup> /g]	Change of surface area %
Cadmium Yellow ST	CdS	5,22	6,04	15,7	2,70	-58,0
Cadmium Yellow WO-2	CdS · 0,2 ZnS	3,78	6,60	74,6	1,64	-56,6
Cadmium Yellow SO-1	CdS · 0,4 ZnS	3,16	6,14	95,2	1,40	-55,7
Cadmium Orange SZ-1	CdS · 0,1 CdSe	5,44	5,70	4,8	6,82	25,4
Cadmium Orange SW-1	CdS · 0,2 CdSe	2,72	5,33	49,0	3,65	34,2
Cadmium Red 88-3	CdS · 0,35 CdSe	9,00	10,80	20,0	11,30	25,6
Cadmium Red 88-4	CdS · 0,5 CdSe	5,21	9,24	77,4	7,10	36,3
Cadmium Red 88-7	CdS · 0,55 CdSe	2,70	6,80	152,0	4,25	57,4
Cadmium Red 88-71	CdS · 0,65 CdSe	6,71	14,20	112,0	9,15	36,4

### **КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ АЗОТ-, ФОСФОР- И СЕРОСОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТОВ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНЕЗЕМА**

Мирошниченко Ю.А., Безносик Ю.А., \*Смирнова О.В., \*Зуб Ю.Л.

Национальный технический университет Украины «КПИ», [JuLianna@ukr.net](mailto:JuLianna@ukr.net)

\*Институт химии поверхности НАН Украины, [olsmirnova2001@yahoo.com](mailto:olsmirnova2001@yahoo.com)

В настоящее время возросло применение различных форм кремнезема в качестве селективных адсорбентов, носителей активной фазы катализаторов, загустителей дисперсионных сред, носителей для газовой хроматографии и т.п. Свойства этих материалов в значительной степени зависят от природы их поверхностного слоя и структурно-адсорбционных характеристик (величины удельной поверхности, сорбционного объема и диаметра пор).

Простыми и удобными способами получения аморфных сорбционных материалов на основе диоксида кремния, содержащих в поверхностном слое комплексообразующие функциональные группы, являются золь-гель и темплатный методы [1]. Изменяя условия синтеза, можно влиять на состав, строение и свойства функционализированных кремнеземов, а также на параметры их пористой структуры. Однако достоверные данные о структуре и поведении упомянутого поверхностного слоя можно получить путем квантово-химического моделирования этого слоя и сравнения результатов с данными, полученными с помощью экспериментальных физических методов [2].

Цель этой работы – изучение методом квантовой химии азот- фосфор- и серосодержащих фрагментов, моделирующих поверхность кремнезема с комплексообразующими группами. Такие группы образуют устойчивые комплексы с ионами тяжелых металлов и перспективны для применения, например, в твердофазной экстракции. Оптимизированные геометрии некоторых фрагментов приведены на рис. 1. Оптимизация геометрии, расчет полной энергии и ИК спектров этих фрагментов проводились методом DFT/ B3LYP/6-311+g(d,p).

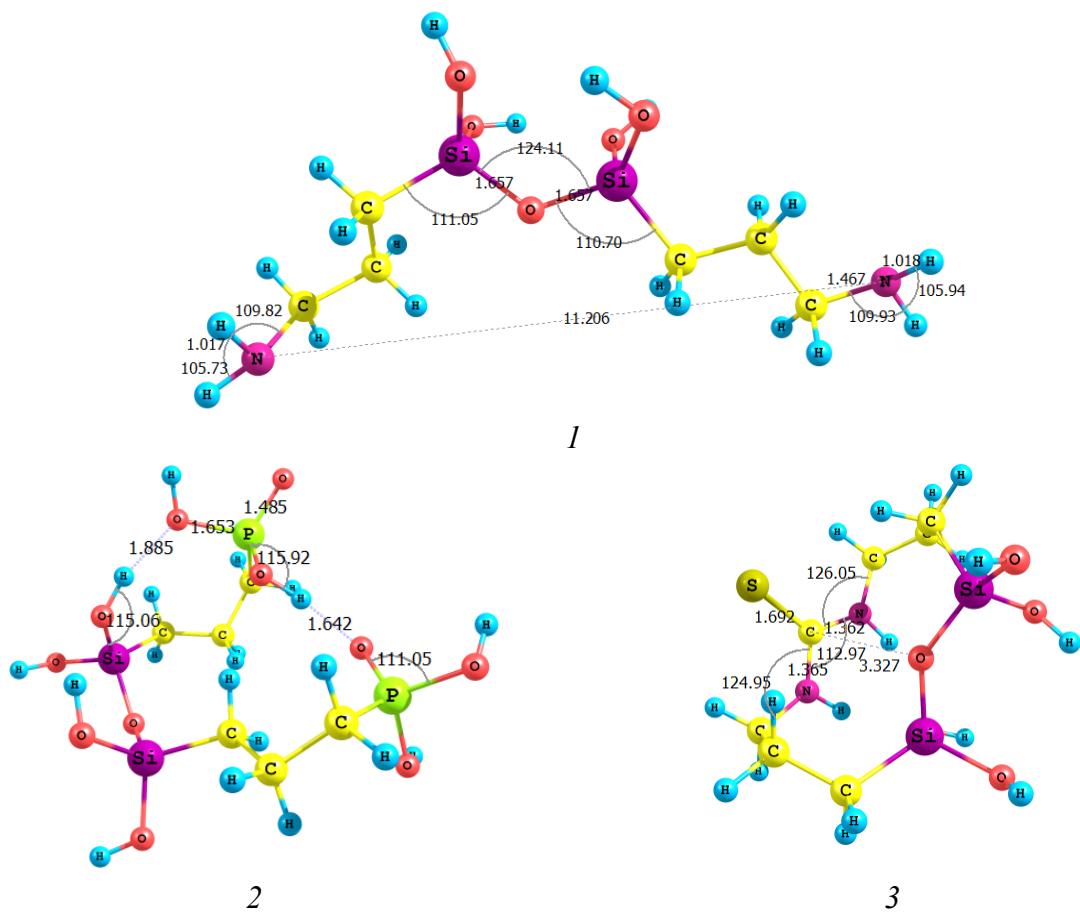


Рис. 1 – Оптимизированные геометрии азот- фосфор- и серосодержащих фрагментов состава:

1 -  $[(\text{HO})_4\text{Si}_2\text{O}][(\text{CH}_2)_3\text{NH}_2]_2$ , 2 -  $[(\text{HO})_4\text{Si}_2\text{O}][(\text{CH}_2)_3\text{P}(\text{O})(\text{OH})_2]_2$ ,  
3 -  $[(\text{HO})_4\text{Si}_2\text{O}][(\text{CH}_2)_3\text{NH}]_2\text{C}=\text{S}$

По данным квантово-химических расчетов были определены основные геометрические характеристики функциональных групп в:

азотсодержащих фрагментах (рис. 1, 1): длины связей C-N = 1.47 Å, N...N = 11.21 Å; величины валентных углов <CNH = 109,8°, <HNH = 105,7°, <SiOSi = 124.1°;

фосфорсодержащих фрагментов (рис. 1, 2): длины связей P=O = 1.49 Å, P-O = 1.65 Å, O...H = 1.64 Å; величины валентных углов <POH = 115,9°, <OPO = 111,0°, <SiOH = 115,1°;

серосодержащих фрагментов (рис. 1, 3): длины связей C-N = 1,36 Å, C=S = 1,69 Å; величины валентных углов <CNC = 125,5°, <NCN = 112,5°; расстояние от атома С в группировке NCN до атома кислорода силоксановой связи составляет 3,37 Å.

На основании сравнения расчетных и экспериментальных ИК спектров для синтезированных сорбентов, содержащих вышеупомянутые функциональные группы, было выполнено корректное отнесение основных колебательных частот, наблюдавшихся в экспериментальном ИК спектре.

1. Zub Yu. L. Design of functionalized polysiloxane adsorbents and their environmental applications // Sol-Gel Methods for Materials Processing (ARW NATO) / Eds. P.Innocenzi, Yu.L.Zub and V.G.Kessler. - Springer: Dordrecht. - 2008. - P. 1-29.
2. Лыгин В.И. Модели жесткой и мягкой поверхности. Конструирование микроструктуры поверхности кремнеземов / В.И.Лыгин // Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева). - 2002. - Т. XLVI, № 3.-С. 12-18.

## ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА КОМПОЗИЦІИ ЛЕТУЧЕГО ИНГІБИТОРА КОРРОЗІЇ ДЛЯ ЗАЩИТИ МЕТАЛЛОВ ОТ АТМОСФЕРНОЙ КОРРОЗИИ

Чигиринец Е.Э.<sup>1</sup>, Воробьева В.И.<sup>1</sup>, Митина Л.И.<sup>2</sup>, Куприенко Н.П.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный технический университет Украины «КПИ», Киев, corrosionlife@yandex.ru

<sup>2</sup>Национальная металлургическая академия Украины, Днепропетровск

Современные методы защиты металлопродукции на период транспортировки и хранения основаны на применении летучих ингибиторов коррозии (ЛИК). Испаряясь при температуре окружающей среды, такие ингибиторы в виде паров достигают металла и, адсорбируясь на его поверхности, обеспечивают надежную защиту изделия. При этом пары ЛИК проникают в щели и зазоры, недоступные контактным ингибиторам, обеспечивают торможение коррозионных процессов под слоями продуктов коррозии и отложений [1]. ЛИК в отличие от традиционных способов защиты жидкими продуктами – консервационными составами и маслами – обладают существенными преимуществами, поскольку не требуют удаления с поверхности (расконсервация) перед последующей технологической операцией или перед вводом в эксплуатацию.

Большая часть продукции ЛИК, предоставляемая потребителю, является довольно дорогостоящей и зачастую не отвечает предъявляемым экологическим требованиям. Поиском авторами альтернативного вида сырья для изготовления летучих ингибиторов коррозии установлено, что органические соединения растительного происхождения могут быть успешно использованы для разработки новых экологически безопасных летучих ингибиторов. Установлено, что пленки, формируемые из газовой фазы спиртового экстракта шишек хмеля, обеспечивает защиту стали в условиях периодической конденсации влаги в течение 20 суток, однако степень защиты является не достаточной (~70%). Вместе с тем создание композиционных ингибиторов коррозии – наиболее простой и чрезвычайно эффективный способ повышения защитной способности индивидуальных ингибирующих веществ. При этом перспективным с технологической точки зрения является разработка ЛИК, обеспечивающих защиту, как черных, так и цветных металлов.

Учитывая высказанное для создания новых ЛИК авторам работы необходимо было решить несколько задач. Во-первых, на основе растительного сырья разработать композицию летучего ингибитора коррозии с высокой эффективностью действия по отношению к стали, поскольку большая часть металлургического комплекса сосредоточена на производстве черных металлов и сплавов. Во-вторых, разработанная композиция ЛИК должна обеспечивать комплексную защиту не только черных, но и цветных металлов, таких как, медь, латунь, алюминий, что зачастую используется при защите от коррозии сложного оборудования и аппаратуры.

Для повышения эффективности действия ЛИК на основе растительного сырья были выбраны соединения класса аминов и азолов. Выбор аминов основан на том, что они известны в основном как ингибиторы черных металлов (только некоторые из них проявляют ингибирующее действие при коррозии цветных металлов)[2]. В то время как азолы широко известны, как ингибиторы цветных металлов.

Учитывая различную химическую природу компонентов ингибирующего состава, прогнозирование эффективности при их различных соотношениях с учетом химической природы поверхности достаточно затруднено. Поэтому целью настоящих исследований явилась разработка композиций ЛИК для черных и цветных металлов на основе определения оптимального соотношения компонентов с использованием метода математического планирования.

**Методика исследований.** В качестве метода математического моделирования использовали симплекс-решетчатое планирование. Для проведения исследований использовали модельную смесь, содержащую исследуемые компоненты в пропорциях согласно матрице планирования симплекс-решетчатого плана.

Модельная смесь включала 3 компонента: X1 – соединение класса аминов (далее Амин); X2 – соединение класса азолов (далее Азол); X3 – изопропанольный экстракт шишек хмеля. Количественное содержание компонентов в смеси приняли в качестве факторов, а плотность анодного тока растворения ( $A/m^2$ ) в 1 н растворе  $Na_2SO_4$  – в качестве функции отклика.

Электрохимические исследования по определению тока анодного растворения проводили на установке для поляризационных измерений, включающей потенциостат ПИ-50-1, программатор П-8 и мешалку ММ-5. В качестве рабочего электрода использовали запрессованные в тефлонобразцы стали марки Ст3, меди и латуни площадью 0,385; 0,503, 0,196  $cm^2$  соответственно. В качестве электрода сравнения использовали хлорсеребряный, а вспомогательного – платиновый электроды. Перед определением электрохимических характеристик электрод полировали на наждачной бумаге различной зернистости, обезжиривали ацетоном и выдерживали в течение 3 суток в герметично закрытом сосуде над бюксом с раствором ингибитирующей композиции.

**Результаты и их обсуждение.** В результате обработки экспериментальных данных были получены представленные в табл. 1 уравнения третьего порядка.

*Таблица 1* – Уравнения моделей, описывающих зависимость скорости коррозии Ст3, обработанной в парах композиций летучего ингибитора, в 1 н растворе  $Na_2SO_4$

Металл	Уравнения моделей
Сталь	$Y = 922x_1 + 1062x_2 + 1179x_3 - 367x_1x_2 - 642x_1x_3 - 422x_2x_3 - 723x_1x_2x_3$
Латунь	$Y = 998x_1 + 1695x_2 + 1306x_3 - 2251x_1x_2 + 585x_1x_3 - 626x_2x_3 - 48701x_1x_2x_3$
Медь	$Y = 1651x_1 + 1844x_2 + 1226x_3 + 807x_1x_2 - 1227x_1x_3 + 1299x_2x_3 - 12002x_1x_2x_3$ .

Анализ полученных уравнений моделей показывает, что наибольшему снижению скорости коррозии стали способствуют, главным образом, двойные и тройные смеси исследуемых компонентов, что видно в уравнениях по отрицательным значениям расчетных коэффициентов при  $x_1x_2$ ,  $x_1x_3$ ,  $x_2x_3$ ,  $x_1x_2x_3$ . Для латуни наибольшую эффективность проявляют двойные смеси Амина и Азола, Азола и экстракта шишек хмеля и тройная смесь. Наибольшему снижению скорости коррозии меди способствуют двойная смесь экстракта шишек хмеля с Амином и тройная композиция.

Построение оптимальной области соотношения компонентов смеси Амина, Азола и экстракта шишек хмеля осуществляли методом параллельных сечений. На рис. 1 представлены треугольники с указанными оптимальными областями трехкомпонентной смеси, обеспечивающей минимальную плотность анодного тока растворения стали, меди и латуни 1 н растворе  $Na_2SO_4$ .

Диапазоны концентраций исследованной смеси в оптимальной области составляют, (% отн.):

- для стали: Амин – 55 – 75%; Азол – 20 – 40%; шишкы хмеля – 45 – 70%;
- для латуни: Амин – 35 – 45%, Азол – 55 – 75%, шишкы хмеля – 40 – 60%;
- для меди: Амин – 82 – 96%, Азол – 2 – 15%, шишкы хмеля – 50 – 70%.

Из представленных результатов видно, что для обеспечения высокоэффективной защиты черных металлов в композиции ЛИК двумя основными компонентами являются экстракт шишек хмеля и Амин, в то время как при защите цветных металлов (латуни) – экстракт хмеля и Азол. При этом полученные данные указывают, на то, что для эффективной защиты меди необходима композиция ЛИК с большим содержанием Амина и экстракта хмеля. То есть доля вклада в эффект торможения коррозионных процессов Азола (традиционного ингибитора коррозии цветных металлов) не значительна. Вероятно, совместное применение исследуемого амина с экстрактивными соединениями шишек хмеля приводит к образованию на поверхности меди защитных слоев с более высокой стойкостью к атмосферной коррозии, чем при использовании Азола.

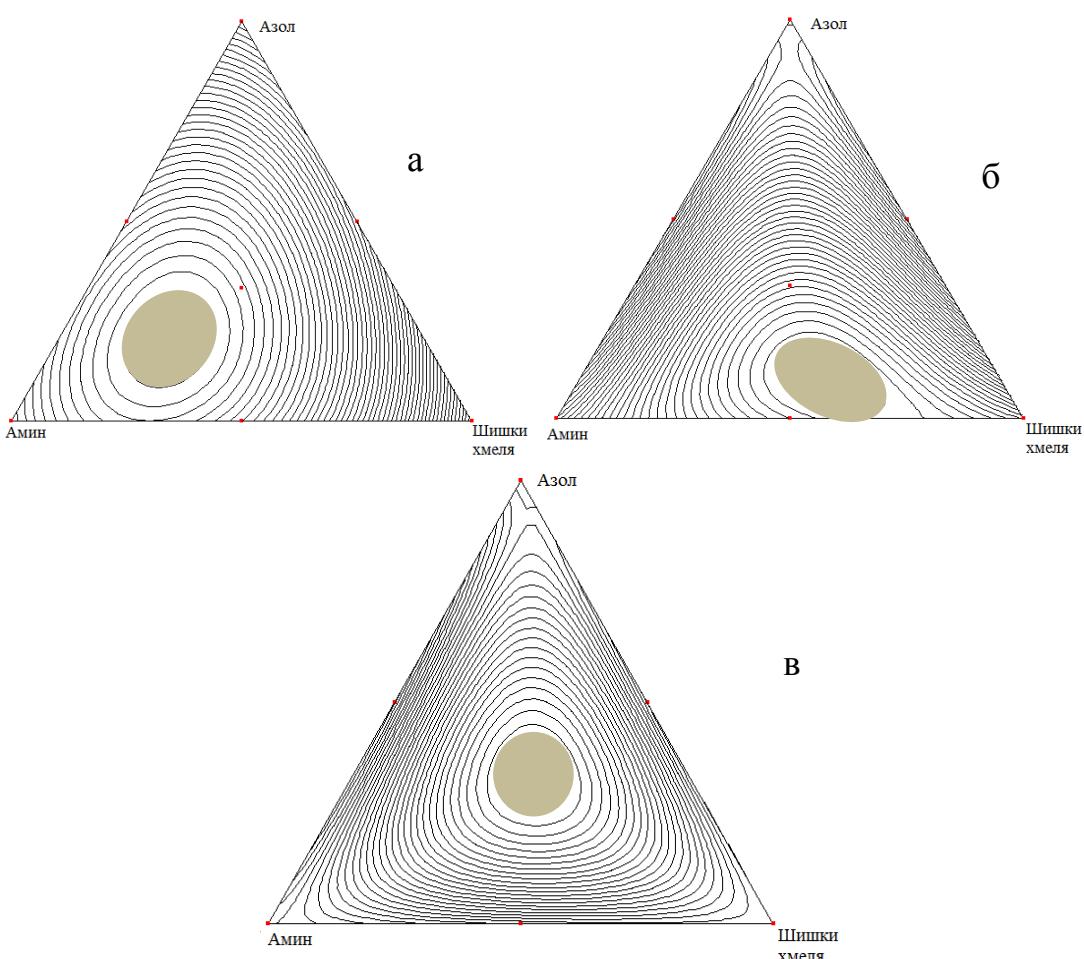


Рис. 1 – Область оптимального соотношения компонентов смеси для стали (а), меди (б), латуни (в), обеспечивающие минимальную плотность анодного тока растворения металлов, обработанных из паровой фазы ингибирующих веществ, в 1 н растворе  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ .

**Выводы.** Получены математические модели, позволяющие прогнозировать антикоррозионную способность композиции ЛИК для защиты поверхности стали, меди и латуни в зависимости от компонентного состава. Установлено, что разработанную трёхкомпонентную смесь на основе экстракта шишок хмеля, Азола и Амина можно использовать для защиты как цветных, так и черных металлов. Показано, что область оптимального соотношения исследуемых компонентов находится в зависимости от химической природы металла.

1. Кузнецов Ю.И. Современное состояние теории ингибирования коррозии металлов [Текст] // Защита металлов. - 2002. - Т. 3 8. - № 2. – 122–131.
2. Розенфельд И.Л. Ингибиторы атмосферной коррозии. [Текст] / Розенфельд И.Л., Персианцева В.П. – М.:Наука, 1985. – 281 с.

## КОМПЬЮТЕР ФОРМИРУЕТ И УРАВНИВАЕТ ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ

Суворин А.В., Шмелев А.С.

ООО «НЦИР» Ризикон», СТИ ВУНУ им.Даля, asshmel@mail.ru

Смеси M компонентов, заданной векторами названий веществ NAMES(M), их брутто-формул BF(M) и мольного состава C0(M), можно поставить в соответствие матрицу A(N,M), где число строк N равно числу разновидностей химических элементов, из которых построены все вещества смеси, а число столбцов M равно числу веществ в смеси.

Произведение  $E(N) = A(N,M)*C_0(M)$  определяет вектор количеств отдельных элементов в смеси, остающийся постоянным, если в смеси протекает химическое превращение.

Задача расчета химического реактора любой конструкции сводится к расчету мольного состава конечного продукта  $C_K(M)$ . Закон сохранения количества каждого из химических элементов системы при химическом превращении отражается равенством (1):

$$A(N,M)*C_0(M) = A(N,M)*C_K(M) = E(N) \quad (1)$$

Векторное равенство (1) определяет систему  $N$  линейных уравнений с  $M$  неизвестными, таким образом, имеется недоопределенная задача с  $M-N$  степенями свободы.

Наиболее распространенный в химии и химической технологии способ замыкания задачи – это введение понятия о химической реакции. Каждая из реакций определяется своим стехиометрическим вектором, все реакции задачи образуют стехиометрическую матрицу  $S(M,(M-N))$ , так что:

$$A(N,M)*S(M,(M-N)) = O(N,(M-N)) \quad (2)$$

Здесь  $O$  – нулевая матрица. Условие (2) имеет бесконечно большое количество решений, выбор наилучшего из которых субъективен, поскольку не найдено единого объективного критерия выбора.

Все вышеизложенное описано в [1] и является обоснованием первого правила Темкина-Хориути. Ниже представлен удобный чисто математический способ получения одного из возможных решений (2).

Введем в рассмотрение блочную квадратную матрицу  $Q$ :

$$Q = \begin{pmatrix} B_1 & B_2 \\ B_3 & B_4 \end{pmatrix}$$

Блок  $B_1(N,N)$  представляет собой квадратный минор матрицы  $A$ , образованный ее левыми столбцами, блок  $B_2(N,(M-N))$  остальную часть  $A$ , блок  $B_3((M-N),N)$  нулевой, а блок  $B_4((M-N),(M-N))$  матричная «минус единица». В случае невырожденности блока  $B_1$  его можно обратить и затем умножить  $B_1^{-1}$  слева на блок  $(B_1, B_2)$ . Таким образом получится блочная матрица  $C$ :

$$C = \begin{pmatrix} C_1 & C_2 \\ C_3 & C_4 \end{pmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} C_2 \\ B_4 \end{bmatrix}$$

Здесь блок  $C_1(N,N)$  единичная матрица, а блок  $\begin{bmatrix} C_2 \\ B_4 \end{bmatrix}(M,M-N)$  является искомой стехиометрической матрицей.

Несколько примеров для ясности.

Задача 1.

Дана смесь веществ NAMES( $H_2O$ ,  $NO_2$ ,  $NO$ ,  $HNO_3$ ). Всего веществ  $M=4$ , число разновидностей химических элементов  $N=3$ , следовательно в системе возможна  $4-3=1$  реакция. Атомно-молекулярная матрица этой смеси  $A$ , обратный минор  $B_1^{-1}$  и их произведение представлены ниже

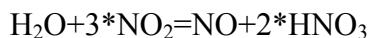
$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$B_1^{-1} = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 \\ -0.5 & 1 & 1 \\ 0.5 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$B_1^{-1}*A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0.5 \\ 0 & 1 & 0 & 1.5 \\ 0 & 0 & 1 & -0.5 \end{pmatrix}$$

Добавлением -1 в 4-й столбец  $B1^{-1} \cdot A$  образуется стехиометрический вектор  $S=(0.5, 1.5, -0.5, -1)$ , единственный в этой системе.

Произведение  $2^*S^*NAMES$  создает уравнение реакции, знакомое всем специалистам по производству азотной кислоты



Задача 2.

Добавим к рассмотренной смеси вещества Ni, N<sub>2</sub>, Ni(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> и NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub>. Эти вещества наблюдаются в реальном процессе выщелачивания активного компонента из отработанного катализатора нитрозными газами. В этой задаче число веществ 8, число разновидностей элементов 4, следовательно нужно сформировать 8-4=4 уравнения реакций.

Атомно-молекулярная матрица этой задачи и обратный минор  $B1^{-1}$  представлены ниже

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 3 & 0 & 3 & 6 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$B1^{-1} = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 & 0 \\ -0.5 & 1 & -1 & 0 \\ 0.5 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

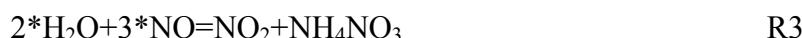
а их произведение  $B1^{-1} \cdot A = S$

**C2**

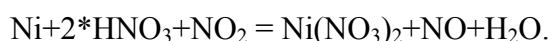
Блок **B4**, записанный для экономии места в транспонированном виде, это искомая стехиометрическая матрица:

$$S = \begin{pmatrix} 0.5 & 1.5 & -0.5 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 4 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 3 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 4 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

произведение которой на вектор имен компонентов NAMES дает список реакций:



Ортодоксальный химик шокирован такими нелепыми уравнениями, но если их использовать для расчета равновесного состава, то результат будет верным, ибо в термодинамике конечный состав не зависит от пути перехода. Для других же целей возможно получение любого желаемого уравнения. Например, если из R4 вычесть R1, то получится вполне приличное уравнение:



- Степанов Н.Ф., Ерлыкина М.Е., Филиппов Г.Г. Методы линейной алгебры в физической химии. М.: Изд. МГУ - 1976 г.

**MODERN SCIENTIFIC TENDENCIES  
OF USING COMPUTER EXPERIMENTS IN CHEMISTRY**

Potapenko E.V., Timoshina L.V.

Institute of Chemical Technologies, potapenko@iht.lg.ua

Modern computer modeling in chemistry is known, to aim at simulation of properties and reactivity of chemical compounds and molecular dynamics. Some computer models have such accuracy level which can be compared with one of modern chemical experiments. First of all, these are calculations of some molecular structures and spectrums and intermolecular methods of quantum chemistry and theoretical molecular spectroscopy. One also should mention problems of chemical equilibrium and chemical kinetics modeling, mathematical processing of measurement readings in some problematical cases, issues of optimum experiment planning.

Development of numerical methods of solving equations of theories of many particles enables to model and predict properties of solids, liquids, solutions, to calculate characteristics of processes on surfaces, to evaluate parameters of molecular systems, instilled inside framework complexes, inert or reaction matrices, to perform simulation in the study of materials.

The process of proceeding from structures to reaction molecular dynamics, that is, to modeling elementary chemical reactions is very problematical even for a small number of atoms in the system. Numerical solution of quantum mechanical equations, describing molecular collisions followed by redistribution of their constituent particles, that is, chemical reactions is possible only for the simplest processes, for instance, for interacting atoms with diatomic molecules. Substantial success has been achieved in the process of applying semiclassical approximation, according to which nuclei move lengthwise classical trajectories, determined by the given surface of all system potential energy.

Constructing potential energy surfaces (PES) is a major integral part of computer experiment in chemistry, which may be time-consuming (some weeks or even months) for modern computers. The common scheme of mathematical model is the following [1]. First, stationary points, that is, coordinates of minimums, maximums and saddle points should be found on the potential energy surfaces. In order to consider the existence of a stable molecule or molecular complex, on the potential surface of the main electron state there should be minimum, whose energy is less than one of any other fragments the molecule can be divided into. If there are several minimums, it is possible for a molecule to have several isomers. Nuclei coordinates answering to minimum points, determine equilibrium geometrical configurations, while energies in respect to corresponding limits of dissociation into constituent parts specify energies of chemical system bonds. The determination of the positions and energies of the saddle points is necessary for evaluation of energies activation while considering elementary chemical reactions. The existence of minimums with the energy above the dissociation limit shows the possibility of intermediates formation in the reaction molecular system. Calculating the differences of electron energies of various electron states for those nuclei geometrical configurations which answer to minimum points, one can interpret or predict electron spectrums of molecules.

After approximation of potential surface fragments in the neighborhood of minimum points one can forecast fluctuating and revolving spectrums. Found a set of electron fluctuating and revolving energies of molecule one can calculate using formulas of statistic thermodynamics, any thermodynamics functions of a given substance. When considering the molecular system where particles redistribution occurs, that is, chemical reaction, the section of potential energy along the movement of the least energy, combining reagents and products is calculated and then the constant of elementary chemical reaction rate is evaluated. The program of actions described realizes the model of calculations of substance properties without considering any empirical data.

The potential energy surface, which in quantum chemical models is calculated directly, in molecular mechanics is approximated by empirical functions of a certain extent of complexity, such as, for instance, sums of pair potentials of atom interactions. These potential functions determining

so-called molecular force field, contain some parameters whose numerical value is selected in the optimum in order to meet requirements of both calculated and experimental characteristics of a molecule. In the simplest case these parameters are equilibrium bond lengths and valence angles and also hardness coefficients of elastic forces, connecting atomic pairs. This method is based upon assumption of possibility of transferring these parameters from one molecule to another, thus numerical values of parameters found for some elementary molecules, are used further for predicting properties of more complex compounds.

Due to molecular mechanics, using PC of even low capacities one can analyze structures of large polyatomic molecules for some reasonable time.

When modeling with the help of molecular dynamics methods or Monte-Carlo method, the property involved of the system of a large number of molecules is calculated through statistic averages of positions and motions of molecules. As in molecular mechanics methods, it is necessary to enumerate all particles of the system and to set potentials of particle interactions. However, unlike molecular mechanics in the approaches mentioned the areas of setting particle potentials of interaction should be extensive enough. This fact places exacting demands upon the ways and methods of potential calculations.

Practically all equations, connecting molecular parameters and substance properties, that is, macroscopic properties, are solved numerically and efficiency of their solving substantially depends upon the capacity of a computer used.

One can mention the examples of successful Monte-Carlo method and molecular dynamics method application for modeling equilibrium compositions of mixtures at the constant pressure, phase equilibrium, adsorption at the surface of solids, liquids properties in micropores. The number of particles when being modeled by the Monte-Carlo methods and molecular dynamics methods this the help of modern generation computer system may reach its maximum.

The problems of searching for stable turning isomers of polymer molecules which are extremely important for biochemical application are also solved by these methods.

The most difficult stage is numerical solving equations of quantum theory of collision with the account of particles redistribution, that is, the most important stage for chemistry. Even with the help super computer systems, the results obtained by the present day look like classical chemistry book examples:  $\mathbf{D} + \mathbf{H}_2 \rightarrow \mathbf{HD} + \mathbf{H}$  or  $\mathbf{O} + \mathbf{H}_2 \rightarrow \mathbf{OH} + \mathbf{H}$ .

Moreover, modern experimental methods of molecular dynamics investigation enable to measure partial constants of rate and directly to compare experimental and theoretical results. Simpler, and, as a result, more practical methods of calculating rates of chemical reactions are usually found when simplifying a complete quantum model [3].

Modern computer systems with high performance and storage capacities enable to find and estimate a great number of possible variants of one or another compound synthesis and to choose the optimum plan of this synthesis. Computer synthesis is considered to be an extremely perspective trend in organic chemistry [2]. The performance of any program of computer synthesis starts with putting in some initial data about the structure of a given chemical system.

The well-known programs of computer synthesis, such as SYNGEN (J. Hendrixon, the USA), EROS (J. Gasteiger, FRG), SYNCHEM (G. Gelernter, the USA) store tables (or matrices) of atoms bonds and information about free electrons on the external valence shell of every atom. Of particular interest is the program COMPASS (N.S. Zefirov, D.L. Lushnikov, E.V. Gordeeva), based on the combination of exclusively combinatorial methods and empirical rules of retrosynthetic analysis.

1. Степанов Н.Ф. Потенциальные поверхности и химические реакции: Соросовский Образовательный Журнал. 1996. N10. - C.33 – 41.
2. Зефиров Н.С. Компьютерный синтез: Соросовский Образовательный Журнал. 1997. N 7. - C. 52 – 56.
3. Никитин Е.Е. Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах. М.: Химия, 1970. - 454 с.

## ТЕОРЕТИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОСТОРОВОЇ БУДОВИ ТА ОСНОВНОСТІ ТРИС-( $\beta$ -АМІНОЕИЛАТА) КОБАЛЬТУ(ІІІ)

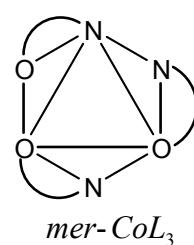
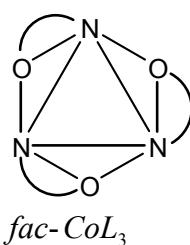
<sup>1</sup>Качоровська О.П., <sup>2</sup>Гребенюк А.Г., <sup>3</sup>Трачевський В.В.

<sup>1</sup>Національний технічний університет України «КПІ», o\_mur@ukr.net,

<sup>2</sup>Інститут хімії поверхні імені О.О. Чуйка НАН України, grebenuk\_ag@ukr.net

<sup>3</sup>Технічний Центр НАН України, trachev@imp.kiev.ua,

Внутрішньокомплексні (ВКС) ізомерні трис-( $\beta$ -аміноетилати) кобальту(ІІІ) ( $CoL_3$ ) (L -  $NH_2C_2H_4O^-$ ), *mer*- і *fac*-конфігурації, просторова будова яких доведена спектральними методами (ІЧ, ЕСП і ЯМР) [1,2] і підтверджена даними РСТА [3,4], мають симетрію координаційного поліедра близьку до  $C_2$  (*mer*-[ $CoL_3$ ]) або  $C_3$  (*fac*-[ $CoL_3$ ]) і різняться взаємним розташуванням атомів кисню та азоту координованих  $\beta$ -аміноетилат-іонів.



Нееквівалентність координованих лігандів в *mer*- $CoL_3$  дає можливість отримати продукти послідовного протонування цього ВКС. Так, експериментально встановлено [5], що при взаємодії з кислотами *mer*-трис-( $\beta$ -аміноетилат) кобальту(ІІІ) поступово перетворюється в  $CoL_3H^+$ ,  $CoL_3H_2^{2+}$ ,  $CoL_3H_3^{3+}$ , у той час, як *fac*- $CoL_3$  – в димер *fac*- $\{H_3[CoL_3]_2\}^{3+}$  та при надлишку кислоти – в *fac*- $CoL_3H_3^{3+}$ , при цьому зберігається асиметрія координаційної сфери в усіх протонованих формах *mer*-ізомеру, *fac*-форма за тих самих умов остається симетричною.

Встановлення зв'язку між просторовою будовою та властивостями координаційних сполук, а також відносна енергетична стабільність комплексів може бути достатньо надійно оцінена шляхом теоретичного моделювання, зокрема, методами квантової хімії.

Метою нашого дослідження є теоретична оцінка геометричних параметрів та енергії утворення димерних форм комплексу Co(ІІІ) з  $\beta$ -аміноетанолом, які містять протони або іони гідроксонію, молекули води та перхлорат-іони. Такі структури можна розглядати як моделі водних розчинів комплексу, оскільки з експерименту відомо, що вони виявляють основні властивості.

Всі розрахунки виконано обмеженим методом Хартрі-Фока-Рутана з використанням базисного набору SBKJC. Термодинамічні характеристики обчислено в гармонічному наближенні жорсткого ротатора з масштабуючим множником 0,89 при нормальному атмосферному тиску. Для розрахунків використано програмний комплекс GAMESS для MS Windows (версія 6.4).

Комплекс, що містить лише 3 протони в газовій фазі, є стабільний в умовах оптимізації геометрії (симетрія  $D_{3h}$ ); протони розміщуються на однакових відстанях (120,8 pm) від атомів кисню, а кут O...H...O дорівнює  $171,5^\circ$  (рис.1a). Однак, спроба розмістити навколо цього комплексу три хлорат-іони та достатньо велику кількість молекул води (до 24) призводила до того, що структура руйнувалась, причому один з протонів ковалентно приєднувався до одного з комплексів, а решта – до іншого.

Комплекс, що містить три гідроксоній-іони (рис.1b), залишається стабільним не лише в газовій фазі (відстань H...O всередині іонів гідроксонію 119,6 pm, а довжина зв'язку з

атомом кисню комплексу 121,5 пм), де зберігає симетрію  $D_{3h}$ , але і в оточенні 9 молекул води та трьох перхлорат-аніонів (рис.1c), де відбувається лише скручування структури навколо вісі третього порядку (іони гідроксонію стають більш локалізованими – відстані відповідно 104,4 та 141,8 пм), що призводить до симетрії комплексу  $S_6$ .

Утворена сполука, як видно, має високу симетрію; атоми кобальту еквівалентні, що підтверджується спектрами ЯМР на ядрах  $^{59}\text{Co}$ , де спостерігається одиночна лінія з  $\delta=10213$  м.д.

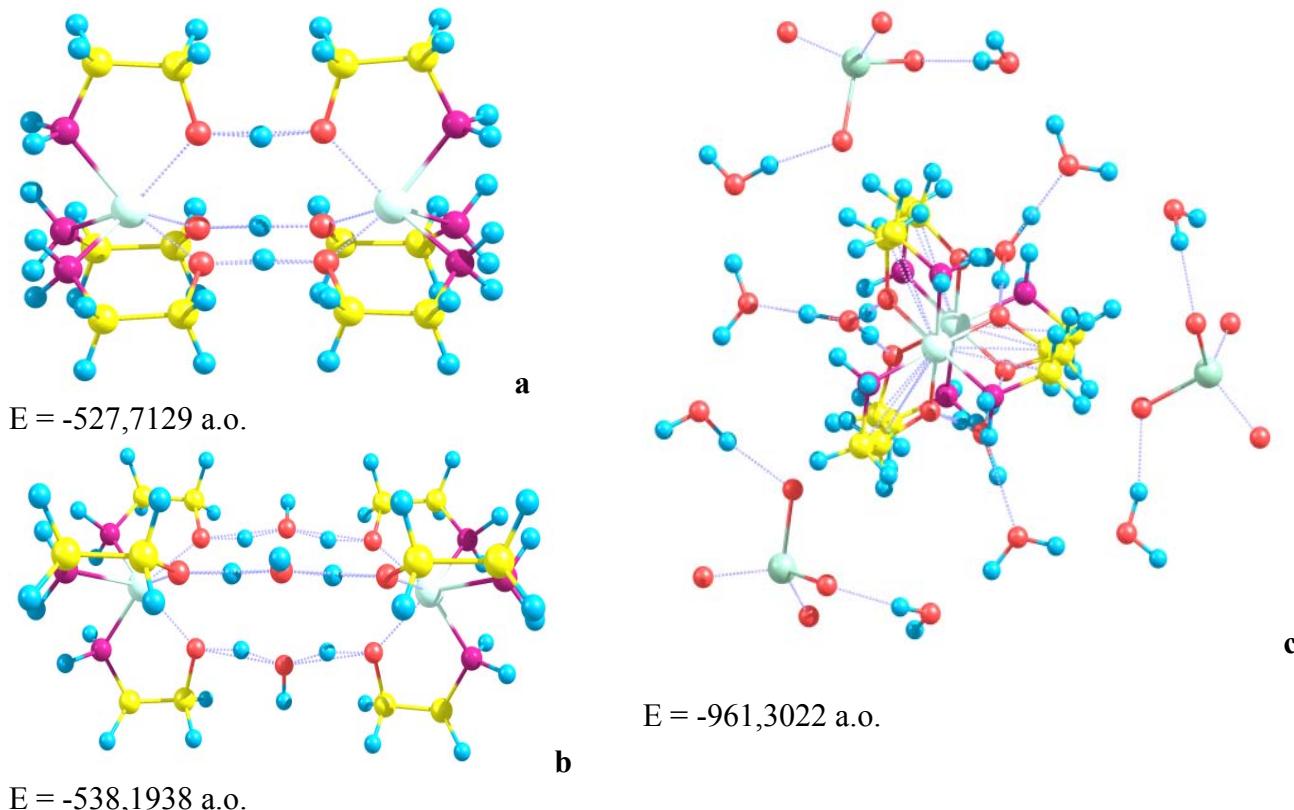


Рис. 1 – П росторова будова та енергії утворення димера  $\{H_3[CoL_3]\}_2^{3+}$ .

З одержаних результатів можна зробити висновок, що структурно обумовлені основні властивості *fac*-трис-( $\beta$ -аміноетилата) кобальту(ІІІ) в водних розчинах обумовлені формуванням димера  $\{H_3[CoL_3]\}_2^{3+}$ , у якому мономери об'єднані іонами гідроксонію, які нейтралізуються перхлорат-аніонами опосередковано через молекули води.

1. Удовенко В.В., Степаненко О.Н. //Журн. неорган. химии. –1969. – 14, №6. – С. 1581-1585.
2. Степаненко О.Н., Трачевский В.В., Качоровская О.П. //Координат. химия. – 2001. – 27, №3.- С. 193-197.
3. Гуля А.П., Кокунов Ю.В., Шова С.Г и др. // Докл. АН СССР. – 1989. – 305, №9. – С. 627- 631.
4. Потаскалов В.А., Рейтер Л.Г., Потаскарова Н.И. и др. Строение и реакционная способность изомеров (трис-аминоэтилата) кобальта(ІІІ) // XVI Українська конф. з неорг. хімії 2004. Тези доповідей.
5. Удовенко В.В., Степаненко О.Н. Ерошок Б.Г. // Журн. неорган. химии.- 1975.- 20, №1.- С.243-246.

## СЕКЦІЯ 2

### КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ

#### ПРОБЛЕМЫ ВЫБОРА КРИТЕРИЯ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Кац М.Д.

Рубежанский химико – технологический институт  
Восточноукраинского университета им. В. Даля, mdkats@is.ua

Одной из наиболее серьезных методологических трудностей, возникающих при идентификации действующего производства, является выбор выходного показателя, с помощью которого можно было бы оценить эффективность его работы. Эти трудности связаны с тем, что математическую модель можно построить только в том случае, когда выходной показатель один. Между тем, эффективность работы любого технологического процесса оценивается множеством критериев (показателями качества выпускаемого продукта, производительностью, себестоимостью, количеством отходов производства и затратами энергетических и материальных ресурсов и т.п.).

Математически правильная постановка задачи оптимизации предполагает наличие только одного критерия. [1].

Основной проблемой при решении задач многокритериальной оптимизации является способ сворачивания всех критериев в один глобальный критерий. Процесс решения многокритериальной задачи состоит в поиске и использовании дополнительной информации, с помощью которой многокритериальная задача сводится к однокритериальной. [2].

Свертка критериев всегда является актом неформальным. Анализ экспертных методов определения весовых коэффициентов позволяет сделать заключение о том, что в настоящее время не существует такого метода, который был бы свободен от недостатков: ограничивающих возможность его использования. [3].

Для эффективного и полностью формализованного подхода к решению проблемы многокритериальности разработаны три новых подхода.

**1. Свертка множества выходных показателей в обобщенный критерий, измеряемый в дискретных шкалах** [4]. Свёртка множества выходных показателей в обобщённый критерий оценки эффективности работы изучаемого технологического процесса, измеряемый в дискретных шкалах, осуществляется следующим образом.

Для каждого частного выходного показателя  $Y_j$  задаются допустимые ограничения. По некоторым критериям, например, показателям качества продукта, ограничения задаются в технологической документации (регламентом производства).

Если конкретный выходной показатель удовлетворяет заданным ограничениям он принимает значение 1, если нет – 0.

Обобщённый показатель ( $Y_{об}$ ) принимает значения 1 («хорошо») в тех строках таблицы экспериментального материала, в которых каждый частный выходной показатель  $Y_j$  удовлетворяет заданным ограничениям, и значение 0 («плохо»), если хотя бы один из частных критериев не удовлетворяет заданным ограничениям.

Экспериментальная проверка предлагаемого метода, проведенная с помощью имитационного моделирования, доказала его высокую эффективность.

В исходном экспериментальном материале (300 опытов) было только 19 строк, в которых все 3 выходных показателя удовлетворяли заданные ограничения.

После построения математической модели и оптимизации по полученному комплексному критерию только в одной строке из 300 один из выходных показателей был незначительно меньше, заданного ограничения.

**2. Свертка множества выходных показателей в обобщенный критерий, измеряемый в континуальных шкалах [5].** Свертка множества выходных показателей в обобщённый критерий оценки эффективности работы изучаемого технологического процесса, измеряемый в континуальных шкалах, осуществляется следующим образом.

**2.1.** Переходим к измерению значений каждого частного выходного показателя  $Y_j$  в диапазоне от 0 до 1. Для этого  $Y_j \text{ min}$  принимаем равным 0, а  $Y_j \text{ max}$  – 1. Тогда диапазон вариации значений каждого из выходного показателя  $\Delta Y_j$  будет равен  $Y_j \text{ max} - Y_j \text{ min}$ .

Значение обобщенного выходного показателя  $Y_j^*$  в  $k$ -ой строке таблицы исходного экспериментального материала пересчитывается по формулам:

$$Y_j^* = (Y_j - Y_j \text{ min}) / (Y_j \text{ max} - Y_j \text{ min}),$$

если по условиям задачи  $Y_j$  чем больше, тем лучше;

$$Y_j^* = 1 - (Y_j - Y_j \text{ min}) / (Y_j \text{ max} - Y_j \text{ min}),$$

если по условиям задачи  $Y_j$  чем меньше, тем лучше.

**2.2.** В качестве значения обобщенного выходного показателя для  $k$ -ой строки ( $Y^*_{\text{обк}}$ ) выбирается минимальное значение  $Y_j^*$  в этой строке:  $Y^*_{\text{обк}} = Y_j^* \text{ min}$ .

Экспериментальная проверка предлагаемого метода, проведенная с помощью имитационного моделирования, доказала его высокую эффективность

В исходном материале количество строк, удовлетворяющих заданным ограничениям, составило: по  $Y_1 < 7$  – 142 (47.3%), по  $Y_2 > 16$  – 146 (48.7%), по  $Y_3 > 81.2$  – 127 (42.3%), по комплексу ( $Y_1 < 7$ ,  $Y_2 > 16$ ,  $Y_3 > 81.2$ ) – 37 (12.3%).

После построения математической модели и оптимизации по комплексному критерию, измеряемому в континуальных шкалах, количество строк, удовлетворяющих заданным ограничениям, составило: по  $Y_1 < 7$  – 300 (100%), по  $Y_2 > 16$  – 300 (100%), по  $Y_3 > 81.2$  – 300 (100%), по комплексу ( $Y_1 < 7$ ,  $Y_2 > 16$ ,  $Y_3 > 81.2$ ) – 300 (100%).

**3. Метод компромиссной субоптимизации [6, 7].** Сущность метода компромиссной субоптимизации заключается в следующем:

**3.1.** С помощью метода восстановления одномерных зависимостей [4] по экспериментальным данным, полученным в режиме наблюдения за работой изучаемого технологического процесса, строят математические модели зависимости каждого из выходных показателей и по каждой из моделей проводят субоптимизацию: для каждого входного параметра  $X_i$  выбирается тот поддиапазон значений, которому соответствует лучшее среднее значение выходного показателя

**3.2.** Сопоставляют модели субоптимального управления, полученные для каждого из выходных показателей.

Если для какого либо входного параметра ( $X_i$ ) лучшие поддиапазоны значений совпадают – включаем его в модель компромиссной субоптимизации.

Если для какого либо входного параметра ( $X_i$ ) лучшие поддиапазоны значений находятся в 1 и 2 поддиапазонах, в модель компромиссной субоптимизации включаем значения от средины 1-ого до средины 2-ого поддиапазонов.

Если для какого либо входного параметра ( $X_i$ ) лучшие поддиапазоны значений находятся в 1 и 3 (или 1,2 и 3) поддиапазонах, в модель компромиссной субоптимизации включаем значения 2-ого поддиапазона.

Экспериментальная проверка эффективности предлагаемого подхода была проведена на доменной печи №3 Днепропетровского металлургического завода им. Петровского. [7]. За счет оптимизации расход кокса сократился с 597 до 552 кг/т.чугуна (7.6% отн), а производительность печи возросла с 1489.6 до 1678 т. чугуна/сут. (на 12.6% отн.). При стоимости кокса 1000 грн./тонна, фактический экономический эффект составил 27.6 млн. грн. / год.

**Выводы.** В настоящее время главной проблемой, возникающей при моделировании действующих производств, является проблема корректной постановки задачи исследования.

По существующей парадигме:

- Корректная постановка задачи служит ключом к успеху оптимизационного исследования и ассоциируется в большей степени с искусством, нежели с точной наукой (Г. Реклейтис, А. Рейвиндрен, К. Рэгдел. Оптимизация в технике. – М.: Мир, 1986, т. 2).
- Не существует твердых и эффективных правил относительно того, как надо формулировать задачу в самом начале процесса моделирования, т.е. сразу после первого знакомства с ней (Р. Шенон. Имитационное моделирование систем - искусство и наука. – М.: "Мир", 1987, с. 418).

Решение проблемы многокритериальности позволило вплотную приблизиться к решению главной проблемы, которая возникает при идентификации и оптимизации действующих производств. Появилась возможность формализовать постановку задачи и сформулировать ее следующим образом:

- Найти условия проведения технологического режима, которые обеспечивают получение продукта с заданным качеством и максимальным выходом. При увеличении выхода продукта однозначно решаются задачи увеличения производительности, снижения себестоимости, сокращения отходов производства.

Возможна и другая, столь же эффективная постановка задачи:

- Найти условия проведения технологического режима, которые обеспечивают получение продукта с заданным качеством и максимальной прибылью.

1. Грушко И.М., Сиденко В.М. Основы научных исследований. Харьков. Вища школа. 1983. – 224 с.
2. Рассригин Л.А. Современные принципы управления сложными объектами. -М.: Советское Радио, 1980. – 232 с.
3. Глотов В.А., Павельев В.В. Векторная стратификация. - М.: "Наука", 1984. – 94 с.
4. Давиденко А.М. Экспериментальная проверка эффективности метода восстановления одномерных зависимостей для решения многокритериальных задач с помощью имитационного моделирования. Восточно – Европейский журнал передовых технологий. № 3/1 (27) 2007. - с. 9–14.
5. Давиденко А.М., Кац М.Д. Разработка и экспериментальная проверка эффективности нового метода свертки частных показателей оценки эффективности работы технологических процессов в обобщенный критерий, измеряемый в континуальных шкалах. Восточно-европейский журнал передовых технологий, №5/4 (29), 2007. - с. 50–54.
6. Кац М.Д., Давиденко А.М. Метод компромиссной субоптимизации - методологическая основа повышения эффективности технологических процессов одновременно по энергетическим, экономическим, экологическим и другим показателям. Экология и промышленность. №4, 2008. - с. 61–67.
7. Грачев Ю.М., Кац М.Д., Давиденко А.М. Новый подход к решению задачи повышения эффективности доменной плавки одновременно по удельному расходу кокса и производительности. Металлургическая и горнорудная промышленность, №5, 2008. – с. 142–145.

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТАВА РАСТВОРОВ СОДОВОГО ПРОИЗВОДСТВА

Шмельков В.В., Цейтлин М.А., Райко В.Ф.

Национальный технический университет «ХПИ», mzeit@mail.ru

В растворах, используемых в технологии производства кальцинированной соды и сопутствующих химических продуктов, содержится большое число частиц и молекул. Сложность изучения массообменных процессов между газами и этими растворами заключается в том, что методами аналитической химии сравнительно легко могут быть определены только общие концентрации некоторых компонентов. Таких, как, например,

аммиак, карбонатные соединения в пересчете на диоксид углерода, хлорид ион и некоторые другие. При определении параметров межфазного равновесия, например, равновесных давлений аммиака, диоксида углерода и сероводорода, а также концентрации иона  $\text{OH}^-$  практический интерес представляют методы [1, 2], позволяющие рассчитывать ионный состав раствора, основываясь на данных о равновесии протекающих в растворе реакций и балансовых уравнениях. В докладе рассматривается применение таких методов к определению ионного состава растворов, характерных для содового и смежных производств.

В качестве примера рассмотрим расчет состава карбонизованного раствора сульфида бария. Полагая, что при равновесии весь диоксид углерода связан в карбонат бария, будем в первом приближении считать, что равновесный карбонизованный раствор содержит следующие ионы и молекулы:  $\text{H}^+$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ba}^{2+}$ ,  $\text{HS}^-$ ,  $\text{S}^{2-}$ ,  $\text{Ba}(\text{OH})_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , причем раствор близок по свойствам к идеальному. Допущение о наличии в растворе только перечисленных выше частиц эквивалентно представлению о том, что сульфид бария полностью диссоциирован и его недиссоциированные молекулы в растворе отсутствуют.

Для расчета концентраций компонентов раствора по результатам определения общей концентрации бария –  $[\text{Ba}_{\text{общ}}]$  и серы  $[\text{S}_{\text{общ}}]$  необходимо иметь систему из семи уравнений.

$$[\text{H}^+][\text{OH}^-] = k_u \quad (1)$$

$$[\text{H}^+][\text{HS}^-] = k_{S1}[\text{H}_2\text{S}], \quad (2)$$

$$[\text{H}^+][\text{S}^{2-}] = k_{S2}[\text{HS}^-], \quad (3)$$

$$[\text{Ba}^{2+}][\text{OH}^-]^2 = k_{b2}[\text{BaOH}], \quad (4)$$

$$[\text{Ba}^{2+}] + [\text{BaS}] = [\text{Ba}_{\text{общ}}], \quad (5)$$

$$[\text{S}^{2-}] + [\text{HS}^-] + [\text{H}_2\text{S}] = [\text{S}_{\text{общ}}] \quad (6)$$

$$2[\text{Ba}^{2+}] + [\text{H}^+] = 2[\text{S}^{2-}] + [\text{HS}^-] + [\text{OH}^-] \quad (7)$$

где:  $k_u$ ,  $k_{S1}$ ,  $k_{S2}$ ,  $k_{b2}$  – ионное произведение воды, константы диссоциации сероводорода по первой и второй ступени и гидроксида бария, соответственно.

Из всех перечисленных компонентов карбонизованного раствора сульфида бария практический интерес представляют только концентрации иона гидроксила, как определяющего скорость абсорбции диоксида углерода, и недиссоциированного сероводорода – от концентрации последнего зависит равновесное давление  $\text{H}_2\text{S}$  над раствором. Для того чтобы найти решение системы уравнений (1) – (7) введем обозначения, упрощающие запись:

$$\text{H}^+ = \kappa, \text{OH}^- = u, \text{Ba}^{2+} = \delta_2, \text{HS}^- = c_1, \text{S}^{2-} = c_2, \text{Ba}(\text{OH})_2 = \delta, \text{H}_2\text{S} = c, [\text{Ba}_{\text{общ}}] = \delta_0, [\text{S}_{\text{общ}}] = c_0. \quad (8)$$

Решение системы уравнений относительно концентрации иона водорода ( $\kappa$ ) после исключение малых величин дает уравнение пятой степени:

$$\kappa^5 k_{b2} + 2\kappa^4 k_{b2} \delta_0 + \kappa^3 k_{b2} [k_{S1}(2\delta_0 - c_0) - \kappa_u] - \kappa^2 k_{S1} \kappa_u k_{b2} - \kappa k_u 2(k_u + c_0 k_{S1}) - \kappa_u 3 k_{S1} = 0. \quad (9)$$

Аналитическое решение уравнения пятой степени невозможно, поэтому для нахождения зависимости  $\kappa = f(\delta_0, c_0)$  уравнение (9) решали численными методами на ЭВМ с использованием стандартного программного обеспечения. Физико-химические константы заимствованы из [3] и при 25 °C были приняты следующими:  $k_{b2} = 0,23$ ,  $k_{S1} = 6 \cdot 10^{-8}$ ,  $k_u = 10^{-14}$ .

Результаты решения в графической форме представлены на рис. 1. Из него видно, что расчетное значение pH раствора сульфида бария зависит от его концентрации и составляет

12,9 – 13,4. Экспериментально найденное pH раствора ниже. Расхождение вызвано, во-первых, принятими при составлении системы уравнений (1)-(7) допущениями о полной диссоциации сульфида бария в растворе и идеальности последнего; во-вторых, неточностью использованных в расчете констант. Для приведения расчета в соответствие с экспериментом

был подобран коэффициент  $k_{b2}$  таким образом, чтобы максимально приблизить расчетные значения pH к наблюдаемым. Таким значением оказалось  $k_{b2} = 2,18 \cdot 10^{-3}$

Задачи, аналогичные изложенным выше, возникают при изучении равновесия в карбонизованных аммиачных растворах. Так химико-аналитическое определение карбамата аммония в этом растворе достаточно сложная процедура, результат которой не всегда точен. В то же время знание концентрации  $\text{NH}_4\text{CO}_2\text{NH}_2$  важно в расчетах газожидкостного равновесия и кинетики кристаллизации гидрокарбоната натрия. Поэтому представляет интерес ее расчетное нахождение с использованием общих концентраций аммиака и карбонатов, которые определяются весьма просто.

Равновесие в карбонизованных аммиачных растворах определяется уравнениями



Аналогично тому, как это было сделано для карбонизованных растворов сульфида бария, комбинируя уравнения баланса аммиака и карбонатов с выражениями для констант равновесия реакций (10), (11) после исключения незначительных величин можно получить следующие уравнения для расчета искомой величины

$$[\text{NH}_2\text{CO}_2^-] = [\text{CO}_2] / \{1 + K_1 / K_2 [\text{NH}_4^+] + 2K_1 / [\text{NH}_3]\}, \quad (12)$$

где  $[\text{CO}_2]$  – общая концентрация карбонатов в пересчете на диоксид углерода,  $K_1$  и  $K_2$  – константы равновесия реакций (10) и (11), соответственно, концентрации иона аммония  $[\text{NH}_4^+]$  и  $[\text{NH}_3]$  недиссоциированного аммиака рассчитаны по формулам  $[\text{NH}_4^+] = a_1 [\text{CO}_2]$  и  $[\text{NH}_3] = a_2 [\text{NH}_4^{\text{общ}}] - a_3 [\text{CO}_2]$ ,  $a_1$ ,  $a_2$  и  $a_3$  – эмпирические коэффициенты.

Аналогичные приемы могут использоваться и для расчетов концентраций в иных системах, все компоненты которых связаны между собой обратимыми химическими реакциями.

1. Шокин И.Н., Соловьева А.С. Статика процесса карбонизации аммонизированного рассола // Журн. прикл. хим.– 1953.– Т. 26, №6. – С. 584–595.
2. Цейтлин М.А., Цейтлин Л.М. Математическое моделирование реактора смесителя для утилизации твердых отходов // Вестник Харьковского государственного политехнического университета. – Харьков: ХГПУ, 1995. – С. 95–99.
3. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий справочник химика.– Л.: Химия, 1977. – 376 с.

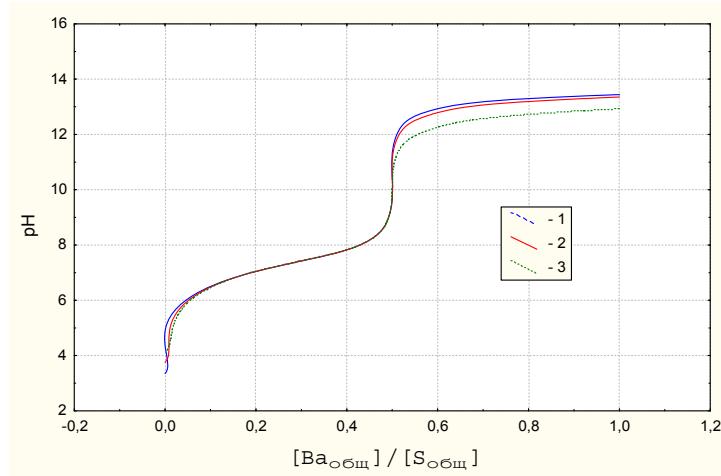


Рис. 1 – Расчетная зависимость pH карбонизованного раствора сульфида бария от отношения  $[\text{Ba}_{\text{общ}}]/[\text{S}_{\text{общ}}]$  при  $[\text{Ba}_{\text{общ}}]$  равно:  
1 – 1 моль/л, 2 – 0,5 моль/л, 3 – 0,1 моль/л.

## ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ВЫДЕЛЕНИЯ УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ

Шепелев М.Е.

ООО «Химтехнология», г. Северодонецк, sheprekt@qip.ru

Технические решения, являющиеся передовыми для своего времени, со временем устаревают. Появляются новые разработки и изменяются требования к уже построенным производствам. Эти требования касаются увеличения мощности на существующем оборудовании, снижения расходных коэффициентов, защиты окружающей среды и других аспектов хозяйственной деятельности. Для решения этих вопросов зачастую необходимы экспериментальные исследования. Ставить эксперименты в условиях действующих производств при этом не всегда представляется возможным. Здесь приходит на помощь вычислительный эксперимент. В процессе работ над проектированием технологии получения уксусной кислоты карбонилированием метанола на родиевом катализаторе также возник ряд вопросов по улучшению эксплуатационных характеристик подобных действующих производств.

В существующей технологии на выделение кислоты направляется только паровая фаза от дросселирования реакционной смеси с 30 до 1,5 атмосфер. Из этой паровой фазы выделяется товарной уксусной кислоты на уровне 66,1 % от ее содержания в ней. Остальная кислота возвращается в цикл синтеза с примесями.

Особенностью стадии выделения уксусной кислоты является то, что примеси реакционной смеси, температура кипения которых ниже чем у уксусной кислоты и образующих положительные азеотропы с уксусной кислотой, из цикла не выводятся, а возвращаются в узел синтеза для дальнейшего карбонилирования, что обуславливает их постоянное присутствие. Поэтому исходная смесь, поступающая на разделение, рассматривалась как 27 компонентная. Задачей моделирования было исследование движения примесей по схеме выделения и увеличение степени выделения уксусной кислоты из поступающей на разделение смеси. Моделирование процесса производилось на базе программы PRO II. Для описания отклонений равновесия от идеальности было выбрано уравнение NRTL. Уравнение NRTL отвечает предъявляемым требованиям: описывает отклонение от идеальности взаимодействия полярных компонентов (вода, йодистый метил, уксусная кислота) и позволяет описать фазовое равновесие для систем жидкость-жидкость-пар, которое присутствует в этом процессе. Ассоциированность в паровой фазе некоторых компонентов реакционной смеси (уксусная кислота, пропионовая кислота) учитывалась при помощи метода Хайдена-О'Конела [1]. Описание равновесие жидкость-пар ключевых пар компонентов из базы PRO II было проверено на соответствие имеющимся экспериментальным данным. Для неудовлетворительно описываемых и отсутствующих в базе пар основных компонентов обработкой экспериментальных данных были получены параметры бинарного взаимодействия (для 40 пар). Моделирование ректификационной колонны производилось при помощи алгоритма Inside-Out [2]. Теплообменная аппаратура моделировалась при помощи модели простого теплообменника для достижения необходимых параметров (температура, фазовое состояние). Технологическая схема рассчитывалась последовательным способом решения. Соответствие смоделированной схемы режимам действующего производства проверялось воспроизведением режима действующего на производстве узла окончательного выделения возвратной водной фракции (дистиллата). Расхождение составило 0.78 % абсолютных от концентрации уксусной кислоты во фракции при всех прочих одинаковых условиях.

Оптимизировалась схема выделения уксусной кислоты ЧАО «Северодонецкое объединение Азот» с проектной мощностью 150000 т/г. Процесс выделения уксусной (рис. 1) кислоты из парообразной исходной смеси (1) осуществляется в основном в три стадии: в колонне отделения легколетучих (КОЛ), в колонне обезвоживания (КОБ) и в колонне готового продукта (КГП).

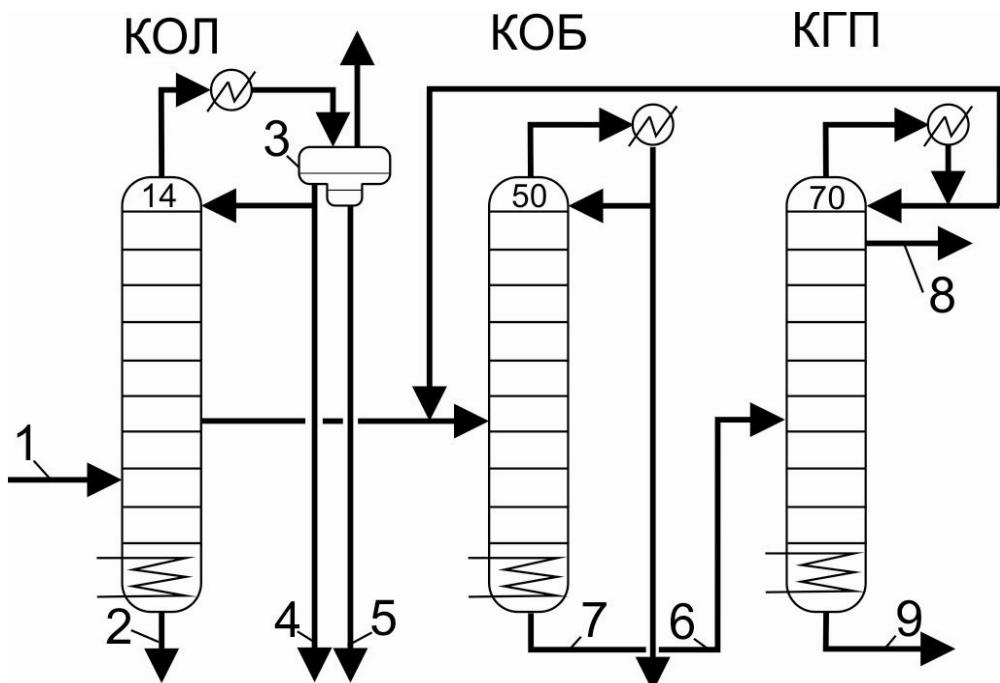


Рис. 1 – Принципиальная схема основных агрегатов существующего процесса выделения товарной уксусной кислоты

Уксусная кислота возвращается в узел синтеза с уловленным катализатором из КОЛ потоком 2, с легким (водным) слоем декантатора 3 потоком 4, с тяжелым (метилйодидным) слоем декантатора 3 потоком 5, фракцией дистиллата КОБ потоком 6. Из обезвоженной кислоты 7 в КГП выделяется товарная уксусная кислота 8 и фракция тяжелокипящих примесей 9. Оптимизации подвергалась работа первых двух стадий, поскольку возврат кислоты производится из них. В качестве рычагов влияния были приняты четыре показателя: расход тепла в КОЛ, разделительная способность (количество тарелок) КОЛ, расход флегмы в КОЛ, концентрация воды в дистиллате КОБ. За критерий оптимизации было принято увеличение степени извлечения товарной уксусной кислоты при удельной затрате тепла равной проектной.

В результате было найдено, что снижения расхода тепла можно добиться, исключив обогрев КОЛ и увеличив ее разделительную способность. Изменением расхода флегмы в КОЛ и концентрации воды в дистилляте КОБ можно изменять величину дополнительного извлечения уксусной кислоты. Дополнительные затраты тепла при этом компенсируются полученной экономией от первых двух рычагов влияния.

Полученные закономерности влияния в первых двух стадиях третьего и четвертого рычагов на дополнительное извлечение уксусной кислоты показано на рис. 2, а на удельный расход тепла на рис. 3.

Из рисунков следует, что в схеме ректификации рассматриваемого производства максимально возможное дополнительное извлечение уксусной кислоты находится на уровне 6282 кг/ч при концентрации воды в дистилляте второй стадии 67,5 % масс (рис. 2) и удельном расходе тепла 0,365 Гкал/т. При проектном удельном расходе тепла 0,328 Гкал/т максимальный дополнительный съем составляет (рис. 3) 6094 кг/ч, что составляет дополнительную годовую выработку 48754 т/год и повышение степени извлечения уксусной кислоты из парообразного потока, направляемого на разделение, с 66,1 до 86,8 %.

Таким образом, именно численным исследованием процесса выделения уксусной кислоты, был найден резерв в технологии выделения по степени извлечения кислоты на 20,7 %.

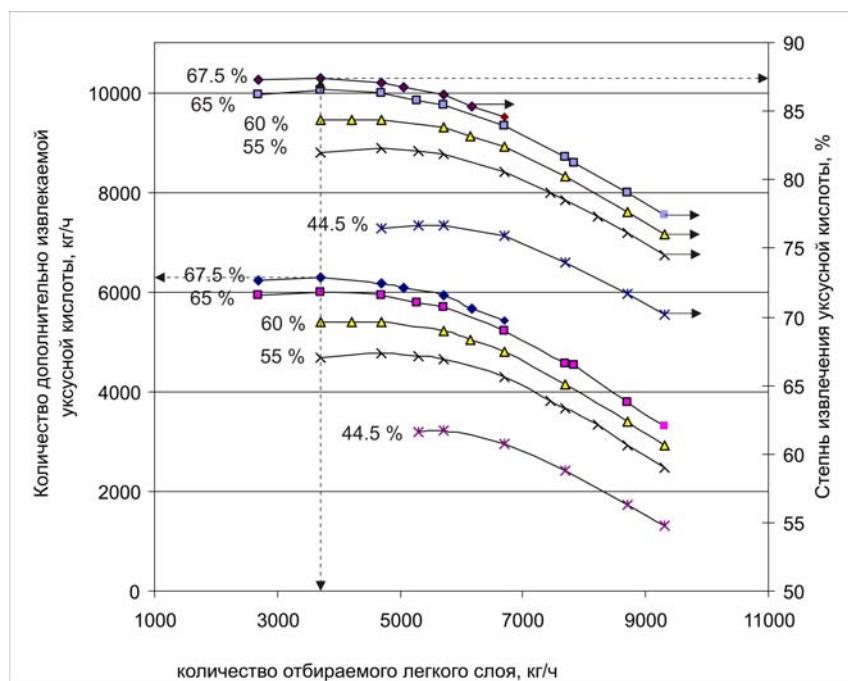


Рис. 2 – Залежність кількості додатково вилученої яблукової кислоти та ступеня вилучення яблукової кислоти від кількості отираємого легкого шару при нулевому расході тепла в КОЛ і 28 тарелок в її укріплюючій часті

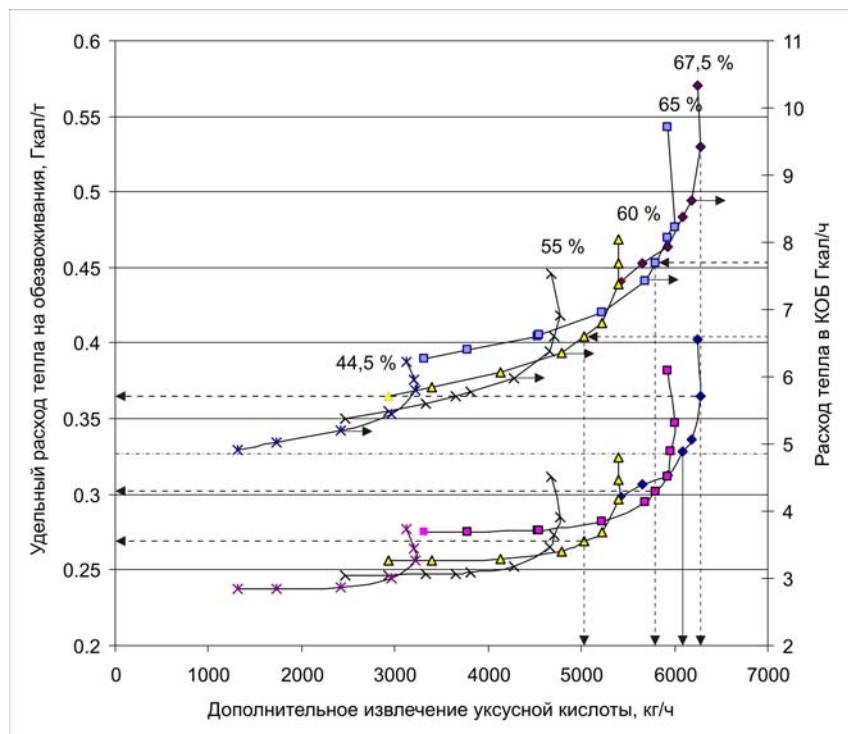


Рис. 3 – Залежність удельного расходу тепла на обезводження та расходу тепла в КОБ на додаткове вилучення яблукової кислоти

1. Hayden J.G. A Generalized Method for Predicting Second Virial Coefficients / J.G. Hayden, J.P O'Connell. // Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev. – 1975. – 14(3) – P. 209-216.
2. Russell R.A. A Flexible and Reliable Method Solves Single-tower and Crude-distillation-column Problems / Russell R.A. // Chem. Eng. – 1983. – 90(21) – P. 53-59.

## КОМП'ЮТЕРНА МОДЕЛЬ АДІАБАТИЧНОГО МОНОНІТРУВАННЯ АРОМАТИЧНИХ СПОЛУК

Красильникова А.О., Кондратов С.О.

Інститут хімічних технологій

Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля, krasina@list.ru

Адіабатичне нітрування на теперішній час вважається за найбільш прогресивний та енергоекономний метод промислового одержання ароматичних нітросполук – напівпродуктів у синтезі полімерів, барвників, вибухових речовин, антідетонаційних присадок до палива, лікарських субстанцій та ін. Сутність адіабатичного нітрування складається у тому, що процес нітрування у сульфатно-нітратної кислотної суміші перебігає у надлишку ароматичного вуглеводню без відведення тепла. За рахунок теплового ефекту реакції відбувається нагрівання до кипіння і випаровування суміші ароматичного вуглеводню, мононітропродукту і води. Внаслідок цього відбувається укріplення сульфатної кислоти, яку можна обертати у циклі, як каталітичне середовище, без додаткової регенерації. Метою нашої роботи є розробка математичної та комп'ютерної моделі адіабатичного нітрування, яку можна було б використовувати для задач проектування. На теперішній час такі моделі в літературі не розглядалися [1].

На моделі реактора ідеального перемішування, що працює в адіабатному режимі, було встановлено, що, починаючи з певних значень часу перебігу для швидких сильно екзотермічних гомогенних реакцій температура і ступінь перетворення перестають залежати від  $t$ . Це дозволяє використовувати для моделювання термодинамічний підхід.

Загальна схема матеріальних потоків неперервного адіабатичного нітрування наведена на рис. 1

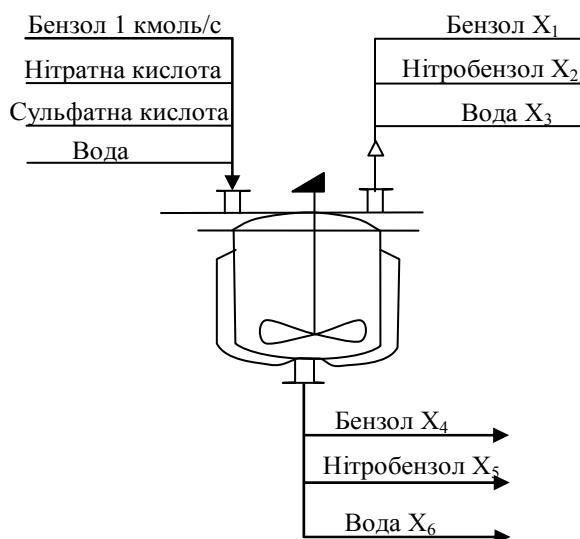
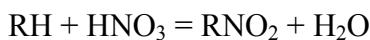


Рис. 1 – Схема матеріальних потоків адіабатичного нітрування

Розглянемо матеріальний і тепловий баланси процесу в стаціонарному стані в розрахунку на 1 кмоль/с бензолу, на нітрування якого витрачається  $\alpha < 1$  кмоль/с нітратної кислоти. Згідно [2] кислотна суміш для нітрування бензолу містить на 1 кмоль  $\text{HNO}_3$  1,2 кмоль  $\text{H}_2\text{SO}_4$  і 1,5 кмоль  $\text{H}_2\text{O}$ .

Будемо вважати, що нітратна кислота повністю витрачається на нітрування, при цьому створюється тільки мононітропродукт за реакцією:



У стаціонарному стані кількість маси в реакторі та її склад не змінюються з часом. Тому можна вважати, що вхідні речовини миттєво реагують з виділенням тепла, що втрачається на випаровування води, вуглеводню (бензолу) та нітробензолу, а залишкова частина, суміш сульфатної кислоти, води, бензолу та нітробензолу у вигляді рідини при температурі кипіння, виводиться з реактору.

Модель одержана у вигляді системи з 7 нелінійних рівнянь (відносно мольних витрат за рис. 1 і температури кипіння). З них 3 – це рівняння матеріального балансу за компонентами, 1 – теплового балансу, 1 – рівняння фазової рівноваги системи і 2 – рівняння зв'язку складу парової фази з парціальними тисками компонентів.

Для розрахунку фазової рівноваги вважали, що бензол та нітробензол створюють ідеальний розчин, який утворює азеотропну суміш з водою сульфатною кислотою [3]. При цьому, можна вважати, що при кипінні водного розчину сульфатної кислоти виділяється тільки вода. Для апроксимації парціальних тисків суміші бензолу та нітробензолу використовували рівняння Антуана. Залежність тиску парів води над розчинами сульфатної кислоти від концентрації та температури апроксимували бікубічним сплайном за даними [4].

Обговорюються результати моделювання та дослідження системи.

1. *Paulo A. Continuous adiabatic industrial benzene nitration with mixed acid at a pilot plant scale* [Текст]/ Paulo A. Quardos, Nuno M.C. Oliveira, Cristina M.S.G. Baptista// Chem. Eng. Journal, 2005. – № 108. – р.1–11.
2. *Беркман Б.Е. Промышленный синтез ароматических нитросоединений и аминов* [Текст] / Б.Е.Беркман // М.: Химия, 1964. – 344 с.
3. *Уэйлес С. Фазовые равновесия в химической технологии* [Текст] / С.Уэйлес // М.: Мир, 1989. – 304 с.
4. *Perry R.H., Green D.W. Perry's chemical engineers' handbook* // McGraw-Hill, 1999. – 2582 р.

## ПРО МОДЕЛЮВАННЯ ОСАДЖЕННЯ БОРУ НА ПОВЕРХНІ ВУГЛЕЦЕВИХ ВОЛОКОН

Скачков В.О., Іванов В.І., Єгоров Ю.П., Мосейко Ю.В.

Запорізька державна інженерна академія, colourmet@zgia.zp.ua

Перспективним напрямом сучасного матеріалознавства є створення термостійких високоміцних композиційних матеріалів з низькою питомою вагою, зокрема боровуглецевих композитів на основі вуглецевих волокон і борної матриці.

Борну матрицю одержують розкладанням діборана, що реалізується в реакторах ізобарного типу та не супроводжується появою додаткових хімічно активних продуктів.

Рівняння перенесення речовини за умов хімічного перетворення у поточному середовищі представляють у вигляді:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial \tau} + \operatorname{div} \vec{q}_{\text{диф},i} + \operatorname{div} \vec{q}_{\text{конф},i} = q_{\text{xim},i} \quad (1)$$

де  $\rho_i$  – парціальна щільність  $i$ -го реагуючого компонента середовища;  $q_{\text{xim},i}$  – питома об'ємна продуктивність процесу хімічного перетворення;  $\vec{q}_{\text{диф},i}$ ,  $\vec{q}_{\text{конф},i}$  – вектори питомого перенесення маси  $i$ -го компонента у разі дифузії та конвекції відповідно;  $\vec{q}_{\text{диф},i} = -D_{iN} \cdot \nabla \rho_i$ ,  $\vec{q}_{\text{конф},i} = \vec{U} \cdot \rho_i$ ,  $D_{iN}$  – коефіцієнт дифузії  $i$ -го компонента в газовому середовищі з  $N$  компонентів;  $\vec{U}$  – швидкість потоку газового середовища,  $\tau$  – тривалість процесу.

Для зручності розгляду рівняння (1) представляють через молярні концентрації  $C_i$  та вважаючи, що об'ємні реакції є відсутніми, записують як

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\vec{U} \cdot C_i - D_{iN} \cdot \nabla C_i) = 0. \quad (2)$$

З метою спрощення рівняння (2) вводять ряд припущень:

- розглядають круговий циліндровий реактор, для якого всі функції, що описують структуру газових потоків, не залежать від окружної координати;
- швидкість газового потоку направлена уздовж осі реактора, а швидкість дифузії газів уздовж осі нехтувано мала;
- розглядають тільки стаціонарний, сталій і ізотермічний режим роботи реактора;
- всі гомогенні та гетерогенні реакції відповідають першому порядку.

З урахуванням прийнятих припущень рівняння перенесення реакційного газу щодо реактора можна записати:

$$\frac{d(U \cdot C_i)}{dz} + k_i^e \cdot \frac{\beta_i \cdot C_i}{S_{num} \cdot k_i^e + \beta_i} = 0, \quad (3)$$

де  $U$  – швидкість потоку щодо осі реактора;  $z$  – координатна вісь, спрямована за віссю реактора;  $k_i^e$  – константа швидкості гетерогенної реакції;  $\beta_i$  – константа швидкості дифузії ( $\beta_i = D_{iN} / \delta$ );  $S_{num}$  – питома площа реакційної поверхні.

На реакційній поверхні в інтервалі температур 500...700 °C реалізується процес осадження твердого осаду у вигляді полікристалічного бору з появою газоподібного продукту – водню. Під час розкладання діборана його концентрація щодо довжини реактора зменшується як результат його розбавлення воднем.

Вводячи ступінь розкладання діборана, можна записати

$$C^{H_2} = 3\alpha \cdot C_{ex}^{B_2H_6}; \quad (4)$$

$$C^{B_2H_6} = C_{ex}^{B_2H_6} \cdot (1 - 4\alpha); \quad (5)$$

$$U = U_{ex} \cdot (1 + 2\alpha), \quad (6)$$

де  $C_{ex}^{B_2H_6}$  – концентрація діборана на вході до реактора;  $U_{ex}$  – швидкість газового потоку на вході до реактора;  $\alpha$  – ступінь розкладання діборана.

Враховуючи співвідношення (4)-(6), рівняння (3) можна переписати у вигляді

$$\left( \frac{2+16\alpha}{1-4\alpha} \right) \cdot \frac{d\alpha}{dz} + \frac{\Omega}{\theta + \beta} = 0, \quad (7)$$

де  $\Omega = k_{B_2H_6}^e \cdot \beta / U_{ex}$ ;  $\theta = S_{num} \cdot k_{B_2H_6}^e$ .

Для рівняння (7) граничну умову задавали як

$$\alpha|_{z=0} = 0. \quad (8)$$

Тоді його вирішення має вигляд:

$$4\alpha - 1,5 \ln(1 - 4\alpha) = \frac{\theta \cdot z}{\theta + \beta}. \quad (9)$$

Оскільки ступінь розкладання діборана є величиною достатньо малою, то, розкладаючи логарифм у співвідношенні (9) в ряд Макларена та нехтуючи членами другого порядку мализни, одержують

$$\alpha = \frac{\Omega \cdot z}{10(\theta + \beta)}. \quad (10)$$

З рівняння (6) виходить

$$\alpha|_{z=L} = 0,5 \left( \frac{U_{ex}}{U_{aux}} - 1 \right), \quad (11)$$

де  $L$  – довжина реакційної зони;  $\frac{U_{aux}}{U_{ex}}$  – швидкість реакційних газів на виході з реактора.

Виходячи з рівності співвідношення (10), записаного для  $z = L$ , і співвідношення (11), після нескладних перетворень можна одержати

$$k_{B_2H_6}^e = \frac{5D_U \cdot \beta}{(\beta \cdot \alpha - 5D_U \cdot S_{num})}, \quad (12)$$

де  $D_U = U_{aux} - U_{ex}$ .

Рівняння (12) задає значення константи швидкості розкладання діборана на поверхні вуглецевих волокон.

Вимірюне  $W_{vim}$  і розрахункове  $W_{pozp}$  значення лінійної швидкості осадження бору на поверхні вуглецевих волокон можна визначити як

$$W_{vim} = \frac{\Lambda m \cdot (z + \Delta z)}{\rho_B \cdot S_{num} \cdot \Delta z \cdot \tau}; \quad (11)$$

$$W_{pozp} = \frac{k_{B_2H_6}^e \cdot \beta \cdot C_{ex}^{B_2H_6} \cdot [1 - \alpha(z)] \cdot S_{num}}{S_{num} \cdot k_{B_2H_6}^e + \beta}, \quad (12)$$

де  $\Delta m$  – маса осадженого бору на довжині  $\Delta z$ ;  $\rho_B$  – питома вага бору.

Тоді, прирівнюючи праві частини співвідношень (13) і (14), одержують

$$\beta = \frac{\Delta m}{[C_{ex}^{B_2H_6} \cdot (1 - \alpha) \cdot \rho_B \cdot S_{num} \cdot \Delta z \cdot \tau] - \frac{\Delta m}{k_{B_2H_6}^e \cdot S_{num}}}. \quad (13)$$

Співвідношення (13) задає значення швидкості дифузії з об'єму реактора на реакційну поверхню. З урахуванням залежності  $\beta$  від коефіцієнта дифузії досить просто визначити товщину дифузійного шару.

На основі вирішення задачі перенесення газового середовища у проточному реакторі ізобарного типу з розкладанням діборана на нагрітій поверхні вуглецевих волокон розроблено програму для ПЕОМ на мові TURBO-PASKAL, що дозволяє виконувати розрахунки констант швидкостей його розкладання та дифузії з об'єму реактора на поверхню вуглецевих волокон, а також товщину дифузійного шару.

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СИНТЕЗУ ОЛІГОМЕРІВ МЕТОДОМ  
РІВНОВАЖНОЇ ПОЛІКОНДЕНСАЦІЇ З ВІДГОНКОЮ НИЗЬКОМОЛЕКУЛЯРНИХ  
КОМПОНЕНТІВ**

Олійник В.В., Кондратов С.О.

Інститут хімічних технологій

Східноукраїнського національного університету ім. В.Даля, valerija-olejnik@rambler.ru

Технологія одержання олігомерів методом рівноважної поліконденсації більшою частиною включає дистиляцію. Процеси нарощування ступеня полімеризації та зворотної реакції деградації, що перебігає під впливом побічних низькомолекулярних продуктів, які відганяють і дистиляцію слід розглядати системно, в їх єдності.

Споживацькі властивості олігомерів визначаються їх молекулярно-масовим розподілом (ММР), що повинен знаходитись у обмежених рамках. Для контролю ММР та управління технологічним процесом необхідна розробка комп'ютерної моделі, яка б відображала основні особливості процесів. Метою цієї роботи є розробка моделі перебігу процесів рівноважної поліконденсації, що супроводжуються дистиляцією, вивчення на даній моделі властивостей реальної системи.

Для створення моделі був використаний системний підхід [1]. З загальної системи «Технологія поліконденсації» було виділено дві підсистеми «Поліконденсація» та «Дистиляція».

Для підсистеми «Поліконденсація» ми вивчали властивості математичного опису, що складається з безкінечної системи рівнянь матеріального балансу та рівноваг. За умовою виконання принципу Флорі про незалежність реакційної знадості олігомерів від довжини полімерної ланки [2], в системі буде спостерігатися геометричний розподіл за ступенем полімеризації, зі знаменником прогресії

$$\gamma = \frac{x_1 \cdot x_2}{b^2} \cdot K^2 \quad (1)$$

Завдяки цьому безкінечну систему для процесів гетерополіконденсації вдається згорнути до системи з 3 нелінійних рівнянь (2).

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{x_1 + K^2 \frac{x_2^2 x_1}{b^2} + K \frac{x_1 x_2}{b}}{(1-\gamma)^2} + \sum_j j K_j^{(c)} K^{2j-1} \frac{x_1^j x_2^j}{b^{2j-1}} = \bar{v}_A \left[ \sum_{i=1}^{3m} a_i + \sum_j a_j^{(c)} \right] \\ \frac{x_2 + K^2 \frac{x_2 x_1^2}{b^2} + K \frac{x_1 x_2}{b}}{(1-\gamma)^2} + \sum_j j K_j^{(c)} K^{2j-1} \frac{x_1^j x_2^j}{b^{2j-1}} = \bar{v}_B \left[ \sum_{i=1}^{3m} a_i + \sum_j a_j^{(c)} \right] \\ \frac{x_1 + x_2 + K \frac{x_1 x_2}{b}}{(1-\gamma)} + b = \sum_{i=1}^{3m} a_i + C_{HX}^0 \end{array} \right. \quad (2)$$

де  $x_1$  – рівноважна концентрація мономеру, моль/кг;  $b$  – рівноважна концентрація низькомолекулярного побічного продукту, моль/кг;  $K$  – константа рівноваги;  $K_j^{(c)}$  – константа рівноваги реакції циклоутворення;  $\bar{v}_A$ ,  $\bar{v}_B$  – середня ступінь полімеризації в системі фрагментів А та В;  $C_{HX}^0$  - сумарна концентрація побічного продукту НХ в початковий момент часу, моль/кг.

Чисельним моделюванням методом растрової візуалізації [3] було встановлено, що система (2), в залежності від співвідношення констант рівноваг поліконденсації й циклізації може мати від одного до трьох позитивних коренів. Встановлено критерій відбору кореню, що має фізичний зміст: істинним коренем є такий, що приводить до знаменнику (1)  $\gamma < 1$ . Розроблено метод знаходження початкового наближення, що забезпечує збіжність ітераційного процесу розв'язання системи (2) до істинного кореню. Analogічні закономірності виявлено для процесів лінійної гомополіконденсації.

Підсистему «Дистиляція» розглянуто для практично важливого процесу деградації-поліконденсації поліетилентерефталату (ПЕТФ) під впливом дієтиленгліколю (ДЕГ). До основи моделі були покладені такі припущення. Внаслідок структурної близькості припущенено, що гліколі та продукти поліконденсації утворюють ідеальні розчини, а константа рівноваги поліконденсації буде близькою до 1 і внаслідок цього, практично не буде залежить від температури. У зв'язку з цим температура кипіння ( $t_b$ , °C) та парціальні тиски компонентів ( $P_1$  і  $P_2$ , мм рт.ст.) для системи з двох летючих гліколей, можуть бути розраховані у відповідності з законами Рауля та Антуана по рівнянню:

$$P_{am} = P_1 + P_2 = \mu_1 \cdot \exp\left(A_1 + \frac{B}{t_b + c}\right) + \mu_2 \cdot \exp\left(A_2 + \frac{B}{t_b + c}\right) \quad (3)$$

де  $\mu_1$ ,  $\mu_2$  - мольні частки гліколей в рідкій фазі;  $A$ ,  $B$ ,  $C$  – параметри рівняння Антуана для опису залежностей тиску парів індивідуальних речовин від температури;  $P_{at}$  – тиск у системі, мм рт.ст.

На основі цього було створено скінчено-різницеву модель процесу періодичної поліконденсації, що супроводжується дистиляцією, яка дозволяє врахувати зміну стану рівноваги і ММР під час відгонки.

Виявлені наступні закономірності процесу деградації та поліконденсації в умовах рівноваги:

- а) в умовах рівноважного гліколізу спостерігається різке зменшення середнього ступеня полімеризації: від 50-100 до 2, що відповідає експериментальним даним;
- б) при дистиляції з самого початку відганяється суміш етиленгліколю і ДЕГ, що було підтверджено експериментально;
- в) по мірі відгонки спостерігається зростання ступеня полімеризації. Останній нарощається різко наприкінці процесу. При цьому у складі полімеру є залишки обох гліколів. Підібрано початкову кількість ДЕГ для забезпечення практично повного вилучення етиленгліколю зі складу полімеру;
- г) виявлено зв'язок між кількістю молів гліколю, що відігнано, і середнім ступенем полімеризації.

Одержану модель можна використовувати для вирішення задач вдосконалення технологічного процесу гліколізу ПЕТФ і автоматизації управління ним.

1. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. - М.: Высшая школа, 1985. с. 10-15.
2. Flory P.J. Principles of polymer chemistry [Text] / P.J. Flory// Ithaka: Cornell University. – 1953. - 676 p.
3. Кондратов С.А. Растворная визуализация области оптимума многомерных зависимостей // Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля. – Луганськ: СНУ ім. В.Даля, 2007. – Вип. 11[117], часть 2. – С. 92–98.

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТОДА ВОССТАНОВЛЕНИЯ  
ОДНОМЕРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ**

Кондратов С.А.

Институт химических технологий

Восточноукраинского национального университета имени Владимира Даля,  
kondratovsa@gmail.com

В 70-90 гг М.Д. Кац [1, 2] разработал метод локализации экстремума многомерных экспериментальных зависимостей, названный им методом восстановления одномерных зависимостей (МВОЗ). Этот метод, основанный на сведении задачи поиска интервала локализации экстремума многомерной точечной зависимости к последовательности двумерных задач, хорошо зарекомендовал себя на практике для поиска оптимальной области производственных процессов по результатам наблюдений. Вместе с тем, теоретические основы метода не исследованы, что сдерживает широкое применение этого метода. Целью настоящей работы является исследование теоретических основ этого метода, выявление его особенностей, возможностей и ограничений.

Доказана следующая теорема, которую можно рассматривать, как основание для метода МВОЗ:

*Теорема.* Пусть имеется выборка из  $3N$  элементов с выборочным средним  $S_0$ . Разделим произвольно эту выборку на три подвыборки одинакового объема  $N$  со средними  $S_1, S_2, S_3$ . Тогда для средних из подвыборок выполняются следующие неравенства:

$$S_{max} = \max\{S_1, S_2, S_3\} \geq S_0; \quad S_{min} = \min\{S_1, S_2, S_3\} \leq S_0$$

Для доказательства рассмотрим сумму элементов выборки:

$$3N \cdot S_0 = N \cdot (S_1 + S_2 + S_3) \leq 3N \cdot S_{max}$$

После сокращения на  $3N$ , получаем искомое:  $S_{max} > S_0$ . Аналогично доказывается второе высказывание. Это доказывает, что если многомерную выборку из детерминированной функции нескольких независимых переменных в ограниченной области  $D$ , рассматривать, как совокупность одномерных связанных выборок фактор-отклика, то, после упорядочения каждой выборки по возрастанию аргумента, можно найти такой интервал, где среднее значение отклика будет больше или меньше среднего по совокупности. Возникает вопрос, в каких случаях этот интервал содержит оптимум в случае детерминированных функций многих переменных.

Методом растровой визуализации для графического исследования поверхности отклика многомерных зависимостей по их проекциям [3], в сочетании с методом Монте-Карло было установлено, что если на проекциях в ограниченной области линии верхних и нижних границ целевой функции изменяются качественно одинаково (например для квадратичной зависимости), то в этом случае интервал с наибольшим (наименьшим) значением среднего совпадает с интервалом локализации оптимума и выявляется устойчиво при проведении большой серии случайных испытаний при достаточно большом количестве точек. Если характер изменения верхней и нижней границ качественно различаются (например для функции Розенброка  $y = 100(x_1^2 - x_2)^2 + (1 - x_2)^2$  или экспоненциальной функции  $y = x_1 \exp(-x_1^2 - x_2^2)$ ) то результаты определения интервала локализации оптимума оказываются неустойчивыми. Например, для экспоненциальной функции в интервале аргументов от -2 до 2 и числе точек выборки 300 только в 40 % случаях интервал локализации указывался верно.

Исследованы причины, порождающие неустойчивость. Показано, что для функции Розенброка и экспоненциальной при определении интервала локализации минимума точки верхней границы проекции вносят искажения и приводят к неверным результатам

усреднения. Показано, что надежные значения определения области минимума получаются, если пожертвовать «плохими» точками, например, путем отсечения значений выше предельного (при определении области минимума). В этом случае верхняя граница проекции становится прямой, параллельной абсциссе, и ее влияние на положение интервала локализации минимума нивелируется. Разумеется, для решения задачи надо иметь большую выборку точек, не менее нескольких сотен

Для стохастических задач верхняя и нижняя границы «размываются» и возникает вопрос нахождения соответствующих статистических критериев надежности определения интервала локализации экстремума. Для решения этой задачи нужно построить статистические критерии значимости различий средних по интервалам. Данный критерий должен быть составным, так как априори возможны 9 отношений между средними:

- |                             |                      |                         |
|-----------------------------|----------------------|-------------------------|
| 1) $S_1=S_2=S_3$ ;          | 2) $S_1>S_2=S_3$     | 3) $S_1<S_2=S_3$        |
| 4) $S_1=S_2>S_3$ ;          | 5) $S_1=S_2<S_3$     | 6) $S_1>S_2; S_2 < S_3$ |
| 7) $S_1 < S_2; S_2 > S_3$ ; | 8) $S_1 > S_2 > S_3$ | 9) $S_1 < S_2 < S_3$    |

Для построения критериев необходимо использовать порядковые статистики, нечувствительные к типу функции распределения. На первом этапе можно проверить статистическую гипотезу об однородности всех трех подвыборок по критерию Краскелла-Уоллеса. Если эта гипотеза принимается – нет оснований считать, что в данной области  $D$  есть экстремум. Если гипотеза отвергается – проверяются гипотезы о парной однородности подвыборок из интервалов интервал, например, по критерию Лемана-Розенблatta. Эти процедуры позволяют выделить типы отношений, которые могут реализовываться в системе. К сожалению, непараметрические ранговые критерии могут ответить только на вопрос об однородности выборок, но не позволяют проверить гипотезы о числовых значениях средних. Поэтому на последнем этапе следует прибегнуть к процедурам компьютерного моделирования выборок методом бутстрепа, чтобы выделить наиболее вероятный случай. Поэтому, для получения надежных результатов необходимо иметь большие наборы данных.

Еще одной из проблем метода МВОЗ является возможность наличия линейной зависимости между независимыми переменными. На основе метода главных компонент и методов нечеткой логики разработана процедура выделения базиса линейно–независимых переменных на фоне множественных корреляционных связей.

Таким образом, метод восстановления одномерных зависимостей является, по сути, статистическим методом, и для его применения необходимо использовать статистические процедуры, на основании которых делать выводы о наличии и местоположении интервала локализации экстремума.

1. Кац М.Д. Новый метод моделирования химико-технологических процессов по экспериментальной информации / М.Д. Кац [Текст] // "Автоматизация химических производств". – М.: НИИТЕХИМ, 1982 – вып. 2. – С.13–19.
2. Кац М.Д. Новый метод решения задач идентификации, диагностики, прогноза и оптимизации сложных систем / М.Д. Кац [Текст] // Восточно – Европейский журнал передовых технологий, 2011, № 3/12 (51). – С.17–28.
3. Кондратов С.А. Растворная визуализация области оптимума многомерных зависимостей / С.А. Кондратов. [Текст]// Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля. – Луганськ: СНУ ім. В. Даля, 2007. – Вип. 11[117], ч. 2. – с. 92–98.

## МОДЕЛЮВАННЯ НІТРУВАННЯ БЕНЗОЛУ У ПРОМИСЛОВОМУ РЕАКТОРІ

Кондратов С.О., аль Хамадані М.Д., Савяк Р.П.

Інститут хімічних технологій

Східноукраїнського національного університету ім. В.Даля, kondratovsa@gmail.com

Нітробензол, один з багатотоннажних продуктів органічного синтезу, виробляють шляхом нітрування бензолу сірчано-азотною кислотною сумішшю в реакторі перемішування безперервної дії. Наведена робота присвячена моделюванню закономірностей протікання процесу нітрування в промисловому безперервному реакторі ідеального перемішування.

Показано, що в процесі нітрування відбувається помітна зміна щільності гетерофазної реакційної маси. Розроблено модель реактора ідеального перемішування зі змінним часом перебування, обумовленим зміною щільності реакційної маси в залежності від глибини реакції. Отримано рівняння (1):

$$\frac{dC_I}{dt} = \frac{I}{\tau_0} \left\{ C_0 - C_I \cdot \frac{\left[ C_0 - W(C_I) \tau_0 \right] \cdot \left[ \frac{d\rho(C)}{dC} \Big|_{C=C_I} - \rho(C_0) \right]}{C_I \cdot \left[ \frac{d\rho(C)}{dC} \Big|_{C=C_I} - \rho(C_I) \right]} \right\} - W(C_I), \quad (1)$$

де  $C_0, C_I$  - концентрації бензолу на вході і виході з реактора,  $\tau_0$  - початковий час перебування в реакторі вихідної маси,  $\rho(C)$  - залежність щільності реакційної маси від концентрації бензолу в процесі нітрування,  $W(c)$  - швидкість реакції.

Шляхом моделювання з урахуванням літературних даних показано, що в стаціонарному режимі ступінь перетворення бензолу слабко залежить від зміни часу перебування за рахунок зміни щільності і цим ефектом в першому наближенні можна знехтувати

Отримано систему диференціальних рівнянь реактора у вигляді співвідношень матеріального балансу і теплового балансу (2):

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(T_0 - T)}{\tau} + \Delta H \cdot \frac{W(C)}{\rho \cdot C_p} + \frac{Q_{fx}}{\tau \cdot \rho \cdot C_p} - \alpha \cdot (T - \bar{T}), \quad (2)$$

де  $T_0, T, \bar{T}$  - температура маси на вході, виході і середня температура теплоносія в системі теплообміну,  $\Delta H$  - теплота нітрування в розрахунку на 1 кмоль бензолу,  $Q_{fx}$  - теплота фізико-хімічних процесів розбавлення кислотних сумішей,  $C_p$  - питома теплоємність суміші,  $\alpha = k \cdot F / V \cdot \rho \cdot C_p$ , де  $k$  - коефіцієнт тепlop передачі,  $F$  - поверхня теплообміну,  $V$  - робочий об'єм реактора.

У рівнянні (2) врахована теплота реакції нітрування та розведення сірчаної кислоти та нитросуміші водою і теплообмін.

Встановлено, що система рівнянь має тільки один стаціонарний стан, який є стійким. Досліджено зміну температури і ступеня перетворення в реакторі в залежності від часу перебування і параметра  $\alpha$  в рівнянні (2). Виділена область оптимальних температур ( $60-70^\circ \text{C}$ ), встановлено, що із зменшенням часу перебування величина  $\alpha$  з (2), що відповідає цій області, не лінійно зростає.

При часу перебування 120-420 с в діапазоні оптимальних температур ступінь перетворення в реакторі складає 93-96%, що відповідає даним, які спостерігаються в промислових нітраторах. Отримані результати можуть бути використані для оптимального проектування технологічної схеми і систем управління процесом.

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
КИСЛОТООБРАЗОВАНИЯ HNO<sub>3</sub> В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ**

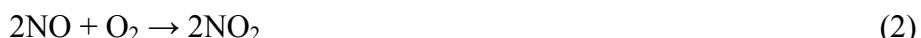
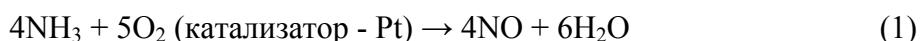
Захаров И. И., Федотов Р.Н., Лория М.Г., Целищев А.Б.

Технологический институт

Восточноукраинского национального института им. В. Даля (г. Северодонецк),

zvonu@rambler.ru

В настоящее время синтез HNO<sub>3</sub> производят способом, основанным на катализитическом окислении синтетического аммиака [1]:



Из процесса (1–3), видно, что стадия абсорбции NO<sub>2</sub> является наиболее не сбалансированной, из-за её не селективности по конечному продукту (реакция 3). В связи с этим, многие технологические решения направлены на увеличение реакционного объема и количества тарелок в абсорбционной колонне. Кроме того, ведутся и другие работы по интенсификации данной стадии [2].

С нашей точки зрения, модернизацию процесса кислотообразования HNO<sub>3</sub> следует рассматривать не только через оптимизацию жидкофазной абсорбции NO<sub>2</sub>, а и через возможность кислотообразования в газовой фазе. Ведь второй продукт реакции (3) – азотистая кислота образуется только в газовой фазе и сразу распадается на воду иmonoоксид азота NO.

Однако, химикам хорошо известно, что NO не является солеобразующим окислом, поэтому его необходимо опять подвергать окислению в NO<sub>2</sub>. А мономер NO<sub>2</sub> в газовой фазе не проявляет достаточную реакционную способность при гидратации водой. Чтобы выяснить причину этого обстоятельства, мы провели квантово-химическое моделирование реакции (3) в газовой фазе.

Рассчитанная методом теории функционала плотности (DFT) структура переходного состояния (ПС) реакции (3) в процессе кислотообразования из мономеров NO<sub>2</sub> представлена на рис. 1. Результаты расчета показывают, что процесс кислотообразования характеризуется очень высокой энергией активации ( $E_a=130,8$  кДж/моль).

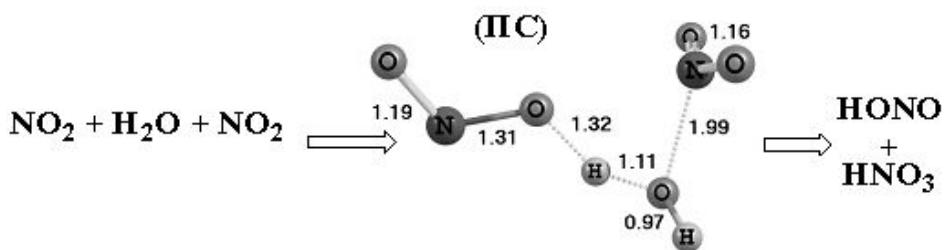
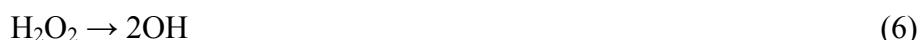


Рис. 1 – B3LYP/6-311++G(3df,3pd) рассчитанная структура переходного состояния (ПС) реакции кислотообразования HNO<sub>3</sub> из мономеров NO<sub>2</sub>:  $\text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O} + \text{NO}_2 \rightarrow \text{ПС} \rightarrow \text{HNO}_2 + \text{HNO}_3$

Таким образом, из результатов расчета можно сделать вывод, что процесс кислотообразования HNO<sub>3</sub> в газовой фазе следует организовывать по другому механизму. Осуществить такой процесс в газовой фазе можно с помощью применения перекиси водорода [3]. В отличие от реакции (3), где гидролиз NO<sub>2</sub> идет по «поверхностному» механизму, на тонких пленках воды [4], предложенный нами процесс **кислотообразования** HNO<sub>3</sub> полностью проходит в газовой фазе. Такое протекание процесса возможно через взаимодействие окислов азота NO<sub>x</sub> с радикалами OH и OOH, по реакциям (4) и (5):



Источником таких радикалов является перекись водорода при ее термической диссоциации [5]:



Для экспериментального моделирования такого механизма **кислотообразования**  $\text{HNO}_3$  была разработана лабораторная установка (рис. 2). В качестве сырья для генератора оксидов азота использовалось металлическое железо (Fe) и нитратная кислота (56 %). Такое сочетание компонентов, согласно [6] дает эквивалентные количества NO и  $\text{NO}_2$ . Для получения OH и OOH радикалов, перекись водорода (33%) капали на сильно нагретую ( $300^\circ\text{C}$ ) поверхность дна реактора. При помощи компрессора (9) оксиды продувались через реактор (2), содержащий OH и OOH радикалы. Полученная реакционная смесь газов через теплообменник (7) поступала в мерную емкость (8) для анализа.

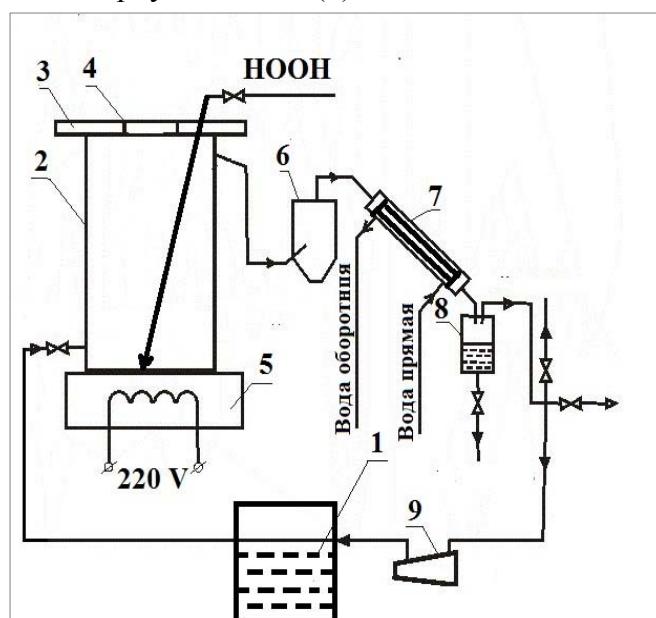


Рис. 2 – Лабораторная установка «Получение азотной кислоты, при взаимодействии оксидов азота с пероксидом водорода в газовой фазе»:

1 – генератор оксидов азота; 2 – реактор, объемом 3 л.; 3 – крышка; 4 – кварцевое стекло КУ 1, толщиной 4 мм; 5 – электрическая печь с металлической поверхностью; 6 – холодильник-конденсатор; 7 – теплообменник (для сбора конденсата); 8 – ёмкость для отбора на анализ; 9 – компрессор

Количество кислоты в генераторе оксидов азота было подобрано таким образом, чтобы прореагировала вся масса железа (около 5 г.). Концентрация кислоты, при этом, снижалась с 56 % до 34 %. Время проведения эксперимента составило ~ 30 мин. За этот промежуток времени железо успело полностью «раствориться», а компрессор прокачать около 14 л. воздуха. Время контакта газовой смеси в реакторе составило около 5 минут.

Анализ полученного количества азотной кислоты проводился стандартным методом нейтрализации. На основе предложенного механизма кислотообразования  $\text{HNO}_3$  составлен теоретический материальный баланс в предположении, что относительное количество образующихся радикалов в реакционной смеси составляет  $\text{OH}/\text{OOH} \approx 1$  (см. уравнения 6 и 7) и реальный материальный балансы. В табл. 1 приведены также полученные данные проведенного эксперимента. Из таблицы видно, что теоретическое и реально полученное

значение количества  $\text{HNO}_3$  существенно различаются. Из 3,10 л газовой смеси  $\text{NO}_x$  в ходе эксперимента образовалось 0,45 л  $\text{HNO}_3$ .

Для сравнения, необходимо отметить, что при замене, подаваемой в реактор перекиси водорода на воду – даже «следовых» количеств азотной кислоты не обнаружено. Это подтверждает выше упомянутый факт, что  $\text{NO}$  не является солеобразующим окислом, а мономер  $\text{NO}_2$  в газовой фазе не проявляет реакционную способность при гидратации водой.

Количество азотной кислоты, полученное в ходе эксперимента с использованием перекиси водорода соответствует ~14,5% количеству улавливаемых газообразных выбросов  $\text{NO}_x$ . Потери такого количества кислоты (~85,5%) можно, объяснить несколькими путями. Наиболее вероятно, что проблема заключается в неравномерном поступлении окислов азота в реактор. В дальнейших исследованиях следует выбрать более контролируемый их источник генерирования.

Таким образом, полученные результаты эксперимента подтвердили предположение о том, что образование азотной кислоты из окислов азота ( $\text{NO} + \text{NO}_2$ ) возможно и в газовой фазе. Результативное использование перекиси водорода в процессе кислотообразования  $\text{HNO}_3$  можно интерпретировать как новый способ модернизации абсорбции окислов азота, который способен существенно снизить их выброс в окружающую среду и увеличить концентрацию конечного продукта  $\text{HNO}_3$ .

*Таблица 1 – Теоретический\* и экспериментальный материальный баланс кислотообразования  $\text{HNO}_3$  в газовой фазе*

Приход		Выход			
		Теоретический мат. баланс		Реальный мат. баланс	
Вещество	Масса, г.	Вещество	Масса, г.	Вещество	Масса, г.
Fe	5,18	$\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$	22,39	$\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$	22,39
$\text{HNO}_3$	47,32	$\text{H}_2\text{O}$	40,93	$\text{H}_2\text{O}$	40,93
$\text{H}_2\text{O}$	37,18	$\text{HNO}_3$	21,1	$\text{HNO}_3$	21,1
$\text{H}_2\text{O}_2$	55,44	( $\text{HNO}_3$	8,74)**	$\text{HNO}_3$	1,26
$\text{H}_2\text{O}$	112,56	$\text{H}_2\text{O}$	127,24	$\text{H}_2\text{O}$	127,24
		OH	12,68	OH	13,69
		OOH	24,61	OOH	26,56
				NO	1,78
				$\text{NO}_2$	2,73
		OH	1,18		
		OOH	2,29		
		NO	2,08		
		$\text{NO}_2$	3,19		
ИТОГО	257,68	ИТОГО	257,68	ИТОГО	257,68

\* ) при условии, что  $\frac{1}{2}$  OH радикалов идёт на реакцию (4), и столько же на реакцию (7).

\*\*) теоретическое количество возможного образования  $\text{HNO}_3$ , согласно реакциям (4) и (5) из реагентов, указанных в четырех нижних строчках таблицы.

1. Атрощенко В.И. Производство азотной кислоты. / Атрощенко В.И., Каргин С.И. – М., ГОССТИХИМЛИТ, 1962. – 524 с.
2. Вісник Національного технічного університету "Харківський політехнічний інститут". Збірник наукових праць Тематичний випуск "Хімія, хімічна технологія та екологія" / [Мороз Н.А., Гармаш Б.К., Ворожбян М.И. и др.]. - Харків: НТУ "ХПІ". – 2010. – №13. – 52–58 с.

3. Технологія-2011 : Матеріали XIV Всеукр. наук.-практ. конф. студ., асп. та молод. вчен. з між нар. участю, / [Тюльпинов К.А., Олейник Ю.А., Тюльпинов А.Д., Захаров И.И.] Ч. I / Сєверодонецьк: ТІ СНУ ім. В. Даля (м. Сєверодонецьк), 2011. – с. 120–121.
4. Захарова О.И. Квантовая химия азотной кислоты. / Захарова О.И., Захаров И.И. – Saarbrucken: LAMBERT Academic Publishing GmbH & Co., Germany, 2011. – 124 с.
5. Patent. 6793903 B1 USA, C01B 21/36. High temperature decomposition of hydrogen peroxide / Clybe F. Parrish, Randall M. Heald, Gary G. Borda, Guy Miller – The USA as represented by the Administrator of the NASA Washington, DC, filed date 12. 08. 2004, published date 18. 10. 2005, Appl. No.: US 10/923152
6. Красицкий В. А. Взаимодействие азотной кислоты с металлами / Химия и химики.– 2009. – № 6 – с. 45–62.

## МОДЕЛЮВАННЯ ПАРОГЕНЕРАТОРА У СКЛАДІ АЕС ІЗ РЕАКТОРОМ ТИПУ ВВЕР-1000 ЗАСОБАМИ МОДЕЛЮЮЧОЇ СИСТЕМИ UNISIM

Медведев Р.Б., Сангінова О.В., Мердух С.Л.

Національний технічний університет України «КПІ», merdukh.svetlana@yandex.ru

Комп'ютерні системи моделювання широко використовуються для дослідження хіміко-технологічних процесів, у тому числі, для дослідження процесів атомної енергетики. Проведення модельних експериментів дозволяє підвищити надійність та стабільність експлуатаційних характеристик та досягти оптимальних режимів технологічних процесів із мінімальними ризиками [1].

Метою даної роботи є створення комп'ютерної моделі парогенератора (ПГ), що входить до складу реакторної установки атомної електростанції (АЕС) із реактором типу ВВЕР-1000. За допомогою цієї моделі можуть бути досліджені та оцінені технологічні ситуації, що виникають у другому контурі АЕС за умови, що такі ситуації є нетиповими, тому інформація про поведіння процесу при їх виникненні відсутня.

ПГ виробляє «сировину» для другого контуру АЕС, тому від різних властивостей цієї сировини залежить режим роботи технологічного устаткування. Дано установка представляє собою горизонтальний теплообмінний апарат поверхневого типу. Принципова технологічна схема апарату представлена на рис. 1.

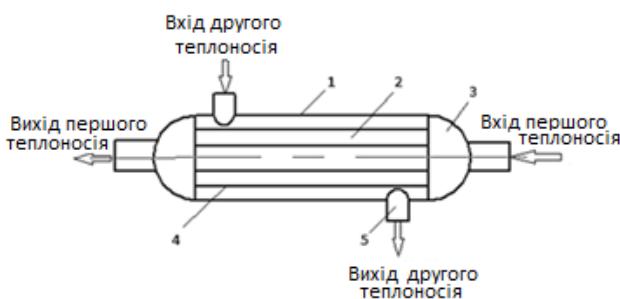


Рис. 1 – Схема поверхневого теплообмінника

1 – корпус теплообмінника; 2 – поверхня теплообміну;

3 – камери (підводу та відводу одного із теплоносіїв); 4 – трубні дошки; 5 – патрубки

Розглянемо моделювання технологічного процесу утворення насиченого пару у ПГ. У відповідності до законів термодинаміки, для однозначного опису потоку окрім витрат та складу необхідно та достатньо задати лише температуру та тиск.

Нехай відомі температура та тиск першого і другого теплоносіїв. Необхідно розрахувати витрати потоків.

Для моделювання було обрано середовище UniSimDesignSuite, так як у майбутньому, при керуванні процесом, передбачається використання засобів фірми Honeywell [2].

# Комп'ютерне моделювання хіміко-технологічних та біохімічних процесів і систем

На першому етапі потрібно задати набір одиниць вимірювань та хімічні компоненти, що присутні у процесі (рис. 2).

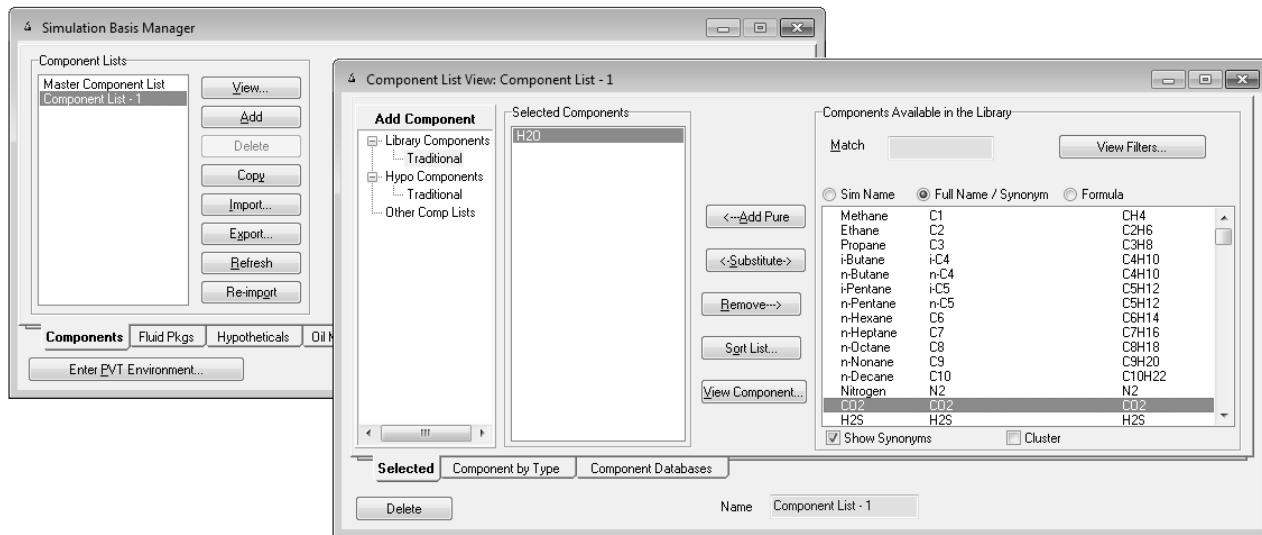


Рис. 2 – Вікно вибору та перегляду компонентів

Наступним етапом є вибір термодинамічного пакету, у відповідності до якого будуть розраховуватись фізико-хімічні властивості компонентів (рис. 3). У даному випадку був обраний пакет Пенга-Робінсона, так як він застосовується при наявності газорідинних сумішей.

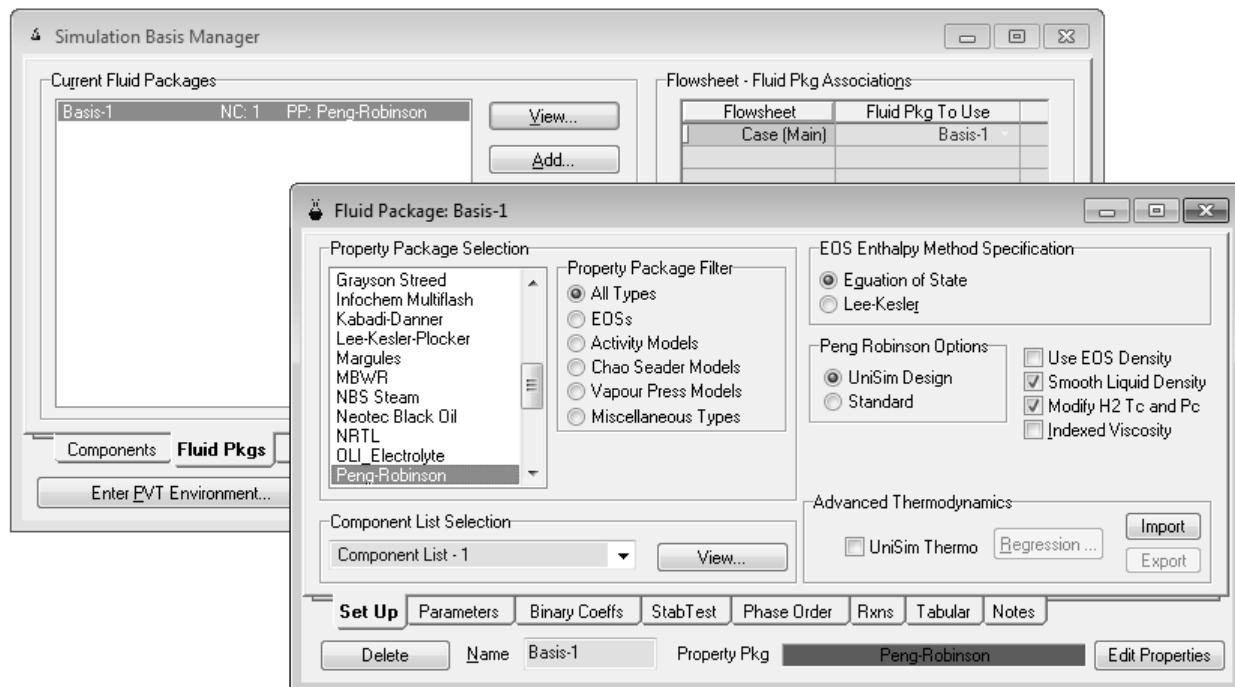


Рис. 3 - Вікно вибору термодинамічного пакету властивостей

Третій етап включає вибір модульної операції (додавання необхідного апарату). Скористаємося вкладкою Flowsheet->AddOperation, оберемо категорію теплообмінного обладнання та вкажемо теплообмінний апарат або відповідний апарат із палітри об'єктів (HeatExchanger).

Спеціалізоване вікно апарату представлена на рис. 4. Дане вікно містить усю інформацію, необхідну для того, щоб задати апарат.

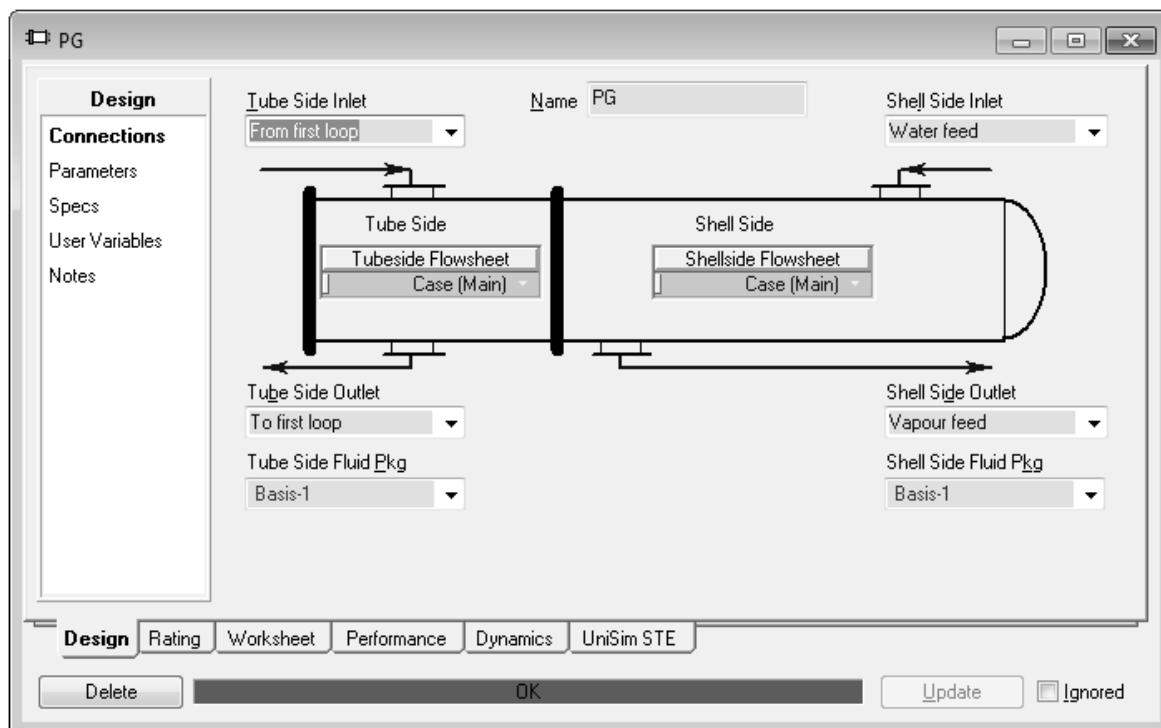


Рис. 4 – Спеціалізоване вікно теплообмінного апарату

Принципова технологічна схема, створена у середовищі UniSimDesign, наведена на рис. 5.

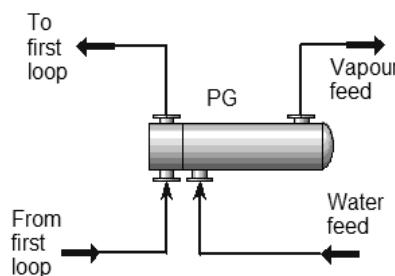


Рис. 5 – Апаратна схема процесу у середовищі UniSimDesign

Теплоносій першого контуру підводиться від ПГ через вертикальні циліндричні колектори – вхідний (Fromfirstloop) та вихідний (Tofirstloop). Між вхідним та вихідним колекторами розміщені горизонтальні теплообмінні трубки.

Вода підживлення (Waterfeed) подається через нижній патрубок та рівномірно розподіляється уздовж ПГ. Пар (Vapourfeed) відводиться із ПГ через паровідвідний патрубок у паропровід. Результати моделювання за потоками представлени на рис.6.

Name	From first loop	To first loop	Water feed	Vapour feed
Vapour Fraction	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	1.0000 *
Temperature (C)	320.0 *	289.0 *	220.0 *	278.0 *
Pressure (kPa)	1.569e+004 *	1.765e+004 *	7845 *	6276 *
Molar Flow (kgmole/h)	6.991e+005	6.991e+005	8.157e+004	8.157e+004
Mass Flow (tonne/h)	1.259e+004	1.259e+004	1469	1469
Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1.262e+004	1.262e+004	1472	1472
Heat Flow (kJ/h)	-1.817e+011	-1.845e+011	-2.204e+010	-1.925e+010
Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-2.600e+005	-2.640e+005	-2.702e+005	-2.360e+005

Рис. 6 – Звіт про стан потоків парогенератора

У даній роботі реалізовано комп'ютерне моделювання статичного режиму ПГ із застосуванням системи UniSimDesignSuite. Також обґрутовано вибір термодинамічного пакету властивостей потоків та математичної моделі ПГ.

Перевірку адекватності моделі виконано із застосуванням даних реальної експлуатації АЕС із реактором типу ВВЕР-1000. Отримані результати дозволяють зробити висновок, що розроблена модель із достатнім степенем адекватності описує реальні дані та може бути використана у складі математичної моделі другого контуру АЕС[3].

1. Гартман, Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов [Текст] / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006 – 416 с.
2. Бугаєва, Л.М. Аналіз та синтез хіміко-технологічних систем: Навч. посіб. [Текст] / Л.М. Бугаєва, Ю.О. Безносик, Г.О. Статюха – Київ.: Політехніка, 2006 – 104 с.
3. Медведев, Р.Б. Программно-технический комплекс для управления водно-химическим режимом второго контура АЭС [Текст] / Р.Б. Медведев, О.В. Сангинова, А.А. Евтушенко, С.Л. Мердух // Восточно-европейский журнал передовых технологий. – №2/10 (44) – 2010. – С. 33-36.

## ОТПИМІЗАЦІЯ ПРОТОЧНОЇ ЧАСТИНИ ПНЕВМОКЛАСIFIКАТОРА МЕТОДОМ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Стороженко В.Я., Смирнов В.А., Білодід А.В.  
Сумський державний університет, Суми, smirnov@pohnp.sumdu.edu.ua

Найпоширенішими методами розділення є механічні, гіdraulічні і пневматичні, кожний з яких має свою область застосування. Пневматичний метод заснований на різниці швидкостей витання частинок різних фракцій в потоці повітря, що дозволяє розділяти суміші з частинками від 0,06 до 5 мм, що часто зустрічаються в технології виробництв мінеральних добив, електродної, харчової, зернопереробної та ін.

Проведені раніше дослідження показали, що раціональним є принцип організації процесу гравітаційної класифікації - переведення процесу на несталий режим руху пилоповітряної суміші за рахунок розміщення усередині каналу сепарації каскаду контактних елементів спеціальної конструкції.

В ході дослідження було розроблено декілька 3D моделей проточних частин апарату за допомогою САПР SolidWorks 2012 (<http://www.solidworks.com>). Комп'ютерне моделювання гідродинаміки руху повітря й руху твердих частинок проводилося в програмних комплексах ANSYS 14 (<http://www.ansys.ru>) та FlowVision 2.3 (<http://www.flowvision.ru>). По кожній з моделей були отримані значення основних параметрів (швидкість руху газу, твердих частинок та гіdraulічний опір). Шляхом порівняння та аналізу, було обрано оптимальну конструкцію серед розроблених 3D моделей, котра забезпечувала формування потоку, в котрому виникають стабільні великомасштабні вихори.

Отримано модель класифікатора (рис. 1) полічної конструкції з коробчастою проточною частиною, що розширюється догори, в котрому розділовий повітряний потік створюється за допомогою газодувки шляхом протягування повітря крізь апарат. Матеріал подається через камеру нижньої подачі 3. Дрібнодисперсна фракція підхоплюється потоком повітря, що обтікає похилі перфоровані полки 5, осаджуючись на їх поверхню і відводиться з апарату через бічні відводи 4. Полицеі встановлюються під кутом, що регулюється. Крупнодисперсна фракція не підхоплюється потоком повітря, тому падає в нижню частину і через розділовий пристрій виводиться з апарату.

Результатом моделювання є епюри тиску та профілі швидкостей, що дозволили зробити висновок про можливість інтенсивної дії на полідисперсний матеріал на зразках кромок полицеї в центральній частині і організації низхідного потоку крупної фракції уздовж стінок. Встановлено можливість використання додаткових вводів для забезпечення стабілізації вихорів з твердих частинок з найменшим гіdraulічним опором. Був визначений характер розподілу швидкості руху потоку повітря в перерізі проточної частини апарату.

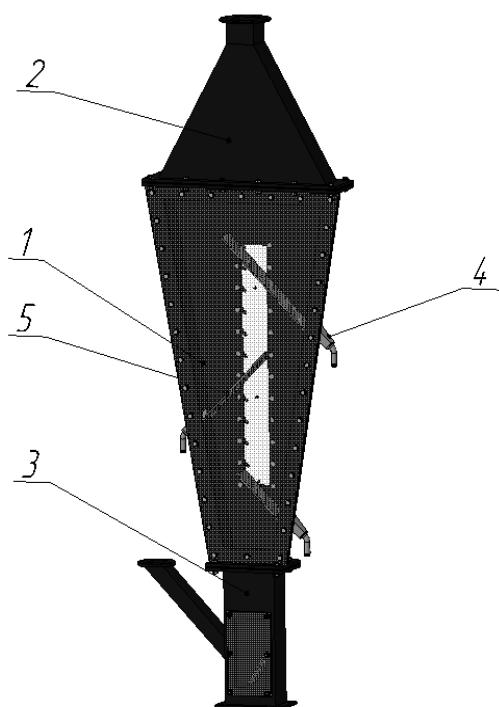


Рис. 1 – Пневмокласифікатор

Для перевірки результатів моделювання, розрахованих розмірів, конструкції проточної частини пневмокласифікатора та спрогнозованої якості розділення сипких матеріалів було створено лабораторну установку пневмокласифікації (рис. 2). Результати фізичного експерименту, виконаного на установці, відображені на рис.3.

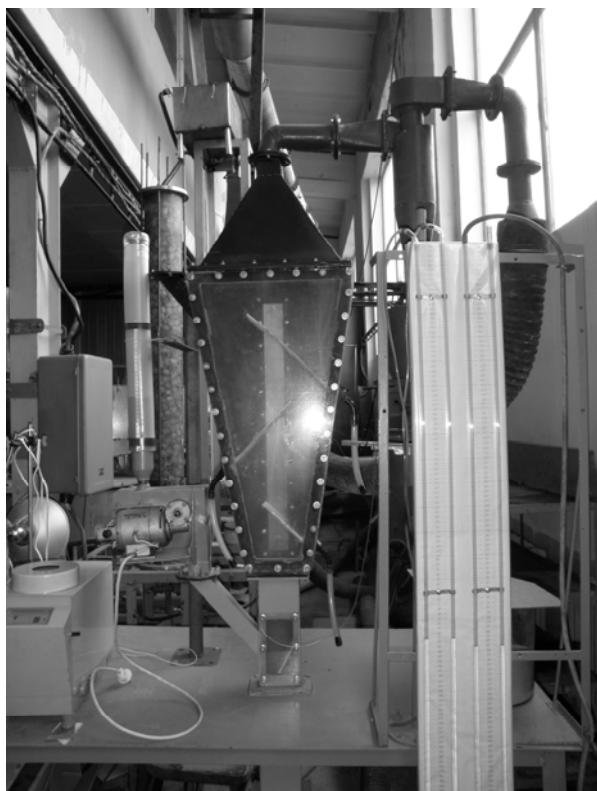


Рис. 2 – Установка пневмокласифікації

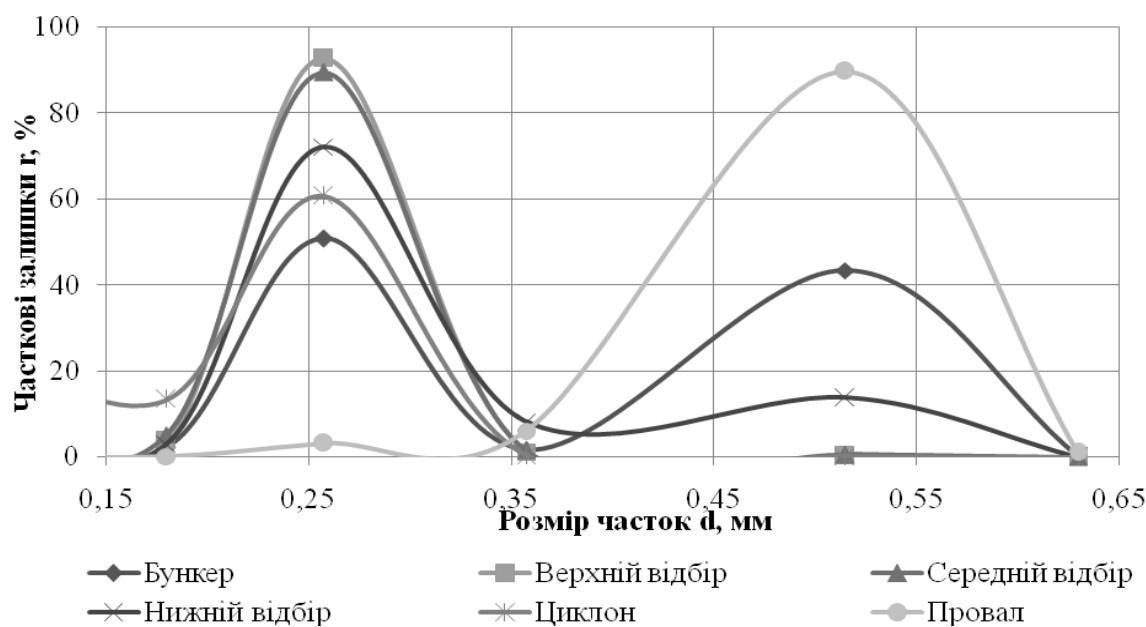


Рис. 3 – Результати фізичного експерименту

Комп'ютерне моделювання дозволило спростити проведення наукового дослідження, значно скоротило час впровадження перспективного методу розділення сипких матеріалів та допомогло прийняти і проаналізувати конструкторські рішення. Ефективність і точність комп'ютерного моделювання була підтверджена експериментально, що в свою чергу дозволить проводити фізичний експеримент лише на останніх етапах розробки нового обладнання без необхідності перевірки проміжних розрахунків та оптимізувати варіант та розміри виробничої установки.

### ВИЗНАЧЕННЯ ТРИВАЛОСТІ ПРОЦЕСУ ФЕРМЕНТАЦІЇ У ВИРОБНИЦТВІ БІОЕТАНОЛУ

Ярощук Л. Д., Раухвергер І. А.

Національний технічний університет України «КПІ», I\_M\_T\_R@mail.ru

Зацікавленість у біоетанолі, як альтернативному виді палива, щорічно зростає. Це пояснюється тим, що обмежена кількість власної нафти в Україні та висока вартість її імпорту роблять актуальну задачею пошук нетрадиційних палив, які змогли б частково замінити паливо нафтового походження при його використанні в існуючих двигунах.

Біоетанол – зневоднений етанол, який виробляють з біологічної відновлюваної сировини і застосовують, головним чином, як моторне паливо. Перехід на його використання дозволяє зменшити споживання нафти й раціонально використовувати рослини [1]. Найважливішим етапом виробництва біоетанолу є ферментування (бродіння), який є анаеробним метаболічним процесом, під час якого регенерується аденоцитофосфат, а продукти розщеплення органічного субстрату можуть бути одночасно донорами та акцепторами водню. У роботі розглянуто неперервно-періодичну організацію цього хіміко-технологічного процесу, яка передбачає заповнення очищеного апарату певною кількістю дріжджів та сусла, саме бродіння впродовж певного часу і виведення отриманих речовин для подальшої переробки.

Через нестабільні властивості сировини (вони залежать від її виду, місця та умов вирощування та зберігання) та складність метаболізму дріжджів, як організмів, задачі систем керування процесом ферментації стають досить складними, а саме передбачає підтримання визначених умов перебігу процесу бродіння в апараті та вчасне його припинення [2].

Якісним продуктом на виході є такий продукт, у якому співвідношення концентрацій спирту та цукрів буде дорівнювати 1 (див. рис. 1) [3].

Було визначено, що є сучасні засоби вимірювання зазначених концентрацій, зокрема це ультразвуковий прилад PIOX S, який розташовують на зовнішній поверхні ферментера.

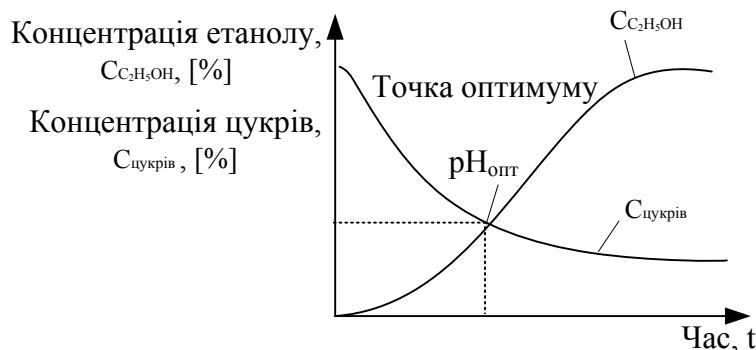


Рис. 1 – Графік залежності концентрацій етанолу та цукрів у біомасі від тривалості процесу бродіння

Про оптимальний рівень  $pH$  ( $pH_{\text{опт}}$ ) свідчить час, коли концентрація цукрів почне зменшуватись, виходячи на усталений режим, а концентрація етилового спирту – збільшуватись. Тому метою даної роботи є визначення тривалості процесу ферментації у виробництві біоетанолу.

На рис. 2 подано систему керування, яка надає можливість припинити процес при досягненні однакових значень обома концентраціями.

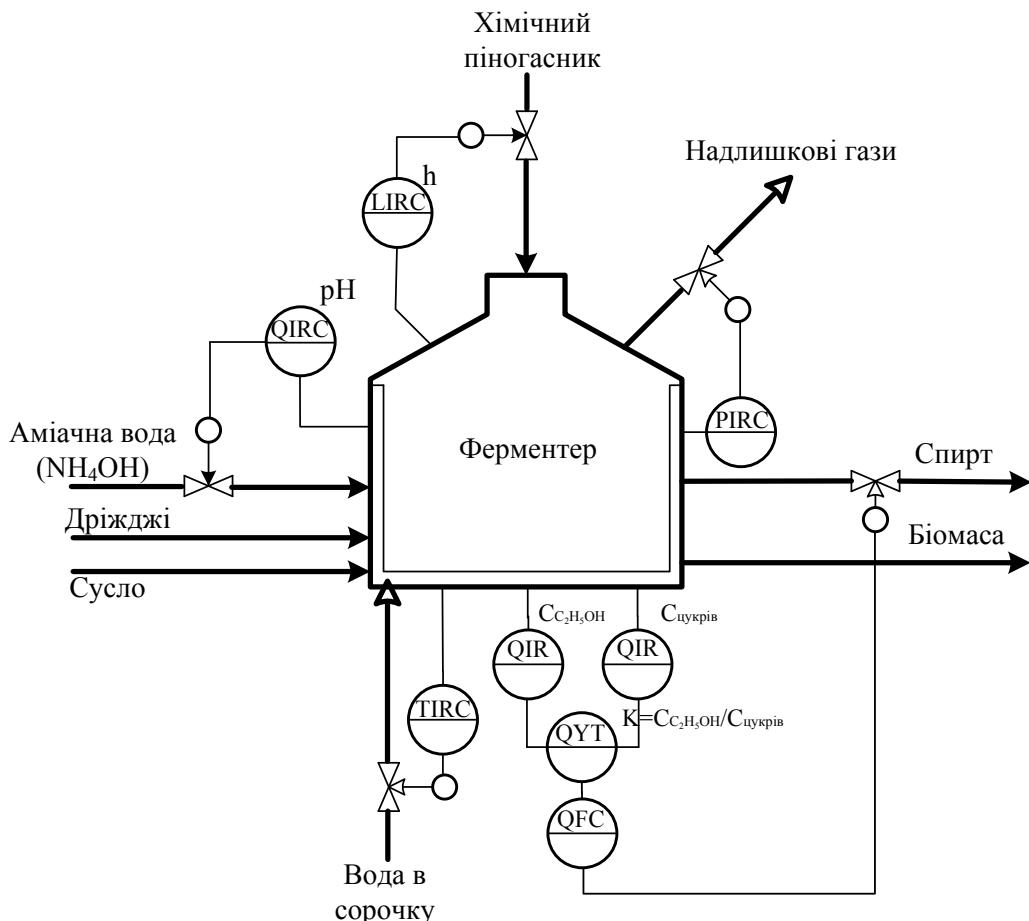


Рис. 2 – Схема керування процесу ферментації

Автори пропонують також застосувати комп'ютерне моделювання процесів утворення біоетанолу та розкладання цукрів за допомогою статистичної обробки інформації про їх концентрації. У результаті моделювання будуть отримані вирази  $C_{C_2H_5OH} = \phi(t)$  та  $C_{\text{цикру}} = f(t)$ , на основі яких здійснюватиметься прогнозування обох концентрацій на різні глибини прогнозу  $\tau$  для передбачення часу завершення процесу.

Розв'язування поставлених вище задач дозволить визначити заздалегідь тривалість процесу бродіння для того, щоб підготувати апарати цієї схеми до подальших технологічних операцій і виконати це ретельно.

1. Ярощук Л.Д., Раухвергер І.А. Визначення тривалості ферментації біоетанолу [Текст]: Тези доповідей п'ятої науково-практичної конференції студентів. – К.: НТУУ «КПІ», – 2011. – С. 26 – 27.
2. Fermentation of Ethanol(Highlighted by Environmental Microbiology – 2008 – №10(1) – С. 278–279.
3. Спосіб керування процесом ферментації у виробництві біоетанолу [Текст] : пат. 64618 Україна : МПК<sup>I</sup> C12M 1/36, Л.Д. Ярощук, І.А. Раухвергер ; заявник і патентовласник Л.Д. Ярощук, І.А. Раухвергер. - № U201105180 ; заявл. 26.04.2011 ; опубл. 10.11.2011, Бюл. № 21. – З с. : іл.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОЛЯ ВЛАГОСОДЕРЖАНИЯ В СТАЦИОНАРНОМ СЛОЕ ПРИ ФИЛЬТРАЦИОННОЙ СУШКЕ

Гумницький Я.М., Атаманюк В.М.

Национальный университет "Львовская политехника", atamanyuk@ukr.net

Сушка является сложным тепломассообменным и технологическим процессом, который определяет качество и себестоимость готового продукта. Известно, что фильтрационная сушка относится к экологически чистым и высокоинтенсивным методам, поэтому моделирование происходящих при сушке процессов, является актуальной задачей. Тепло- и массообменные процессы при фильтрационной сушке происходят на движущейся границе массообмена. Слой материала, который первым контактирует с тепловым агентом, со временем высыпывается, и граница массообмена перемещается в нижние слои влажного дисперсного материала в направлении движения теплового агента. Механизмы нагрева и испарения влаги существенно отличаются. Нагрев частицы происходит конвективно и за счет теплопроводности (внутренние слои частицы), а испарение влаги происходит только с поверхности частицы в поток теплового агента. С целью прогнозирования кинетики сушки дисперсных капиллярно-пористых влажных материалов (гранулированный аммофос, суперфосфат, технический углерод) важно знать распределение концентраций влаги в стационарном слое в первом периоде сушки. Распределение поля концентраций влаги при массообмене, учитывающего молекулярную и конвективную диффузию, а также в среде с источником массы, в общем случае записывается дифференциальным уравнением конвективного массообмена, которое имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_x \cdot \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \cdot \frac{\partial c}{\partial y} + v_z \cdot \frac{\partial c}{\partial z} = D \cdot \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) + j, \quad (1)$$

где  $c$  – концентрация влаги в поверхностном слое твердой фазы,  $\text{кг}/\text{м}^3$ ;  $D$  – коэффициент молекулярной диффузии влаги в воздухе,  $\text{м}^2/\text{с}$ ;  $v_x, v_y, v_z$  – проекции скорости движения теплового агента на оси координат  $x, y, z$ ;  $j$  – источник влаги, размерность которого соответственно членам уравнения (1) будет  $\text{кг H}_2\text{O}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$ .

В случае фильтрационной сушки имеем одномерное концентрационное поле, в следствии движения теплового агента только в направлении оси, а зависимость (1) без учета молекулярной диффузии можно представить в виде:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + v_z \frac{\partial c}{\partial z} = j. \quad (2)$$

Источник влаги для единицы объема слоя может быть выражен с одной стороны уравнением материального баланса системы:

$$j = -(1 - \varepsilon) \cdot \rho_s \cdot \frac{\partial w^c}{\partial \tau}, \quad (3)$$

а с другой - уравнением массоотдачи:

$$j = \beta \cdot \sigma \cdot (x_{nac} - x) \cdot \rho, \quad (4)$$

где  $\beta$  – коэффициент массоотдачи от поверхности частицы к тепловому агенту,  $m/c$ ;  $x, x_{nac}$  – текущее влагосодержание теплового агента и его значение в состоянии насыщения,  $kg H_2O/(kg сух.м.)$ ;  $\rho$  – плотность воздуха,  $kg/m^3$ .

Тогда поле влагосодержания высушиваемого материала и влагосодержание теплового агента  $x = x(z, \tau)$  можно представить в виде системы дифференциальных уравнений с частичными:

$$\begin{cases} (1 - \varepsilon) \cdot \rho_s \cdot \frac{\partial w^c}{\partial \tau} = -\beta \cdot \sigma \cdot (x_{nac} - x) \\ v \cdot \frac{\partial x}{\partial z} + (1 - \varepsilon) \cdot \rho_s \cdot \frac{\partial w^c}{\partial \tau} = 0 \end{cases} \quad (5)$$

Первое уравнение системы (5) определяет скорость сушки частиц слоя в первом периоде, отнесенное к единице высоты слоя, на которой влагосодержание теплового агента равно  $x$ , а второе - баланс влаги на единице высоты слоя дисперсного материала.

Для решения системы (5) дополним ее граничными условиями:

$$\begin{cases} x(0, \tau) = x_n \\ x(\infty, \tau) = x_{nac} \\ w^c(z, 0) = w^c_{zn} \end{cases} \quad (6)$$

Тогда с первого уравнения системы (5) определяем изменение влагосодержания на поверхности дисперсного материала:

$$w^c(0, \tau) = w^c_{zn} - \frac{\beta \cdot \sigma \cdot (x_{nac} - x_n) \cdot \rho}{(1 - \varepsilon) \cdot \rho_s} \cdot \tau, \quad (7)$$

а со второго уравнения - изменение влагосодержания теплового агента  $x$ :

$$x = x_{nac} + \frac{(1 - \varepsilon) \cdot \rho_s}{\beta \cdot \sigma \cdot \rho} \cdot \frac{\partial w^c}{\partial \tau}. \quad (8)$$

Тогда распределение влагосодержания дисперсного материала, сквозь который фильтруется тепловой агент, определяется:

$$1 - \frac{w_3^c}{w_{3n}^c} = \frac{\beta \cdot \sigma \cdot (x_{nac} - x_n) \cdot \rho}{w_{3n}^c \cdot (1 - \varepsilon) \cdot \rho_s} \cdot \tau \cdot e^{-\frac{\beta \cdot \sigma}{v} \cdot z}. \quad (9)$$

Сравнение расчетных зависимостей с экспериментальными данными фильтрационной сушки вышеуказанных материалов в первом периоде сушки подтверждают их адекватность и достоверность определенных кинетических коэффициентов.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КОНВЕРСИИ МЕТАНА

Колпаков В.В.

Национальный технический университет Украины “КПИ”, Kolpakov@kpi.ua

Технология получения конверсии метана в производстве уксусной кислоты предполагает поддержание константы равновесия процесса на уровне максимального выхода окиси углерода. Трубчатый реактор конверсии представляет собой систему реакционных труб, в которые помещается армированный никелевый катализатор. Тепло для конверсии природного газа формируется благодаря сжиганию топлива в капельных горелках, которые расположенные в нескольких ярусах для обеспечения равномерного подогрева. Производительность горелок регулируется изменением расхода топливного газа в коллекторе перед горелками.

Предложена математическая модель процесса, которая учитывает влияния на профиль температурного поля в режиме изменения нагрузки свойств экзотермической составляющей комплекса реакций конверсии и отражает особенности конвективного теплообмена при нескольких автономных ярусах подвода тепла по длине вертикально установленных реакционных труб.

Предлагаемая математическая модель отличается от используемых, учетом дрейфа зоны первоначальной ламинарности потока сырьевой газовой смеси на поведение температурной волны вдоль реакционной зоны, при изменении расхода сырья.

Повышение качества модели достигалось с помощью идентификации коэффициента конвективного перераспределения влияния ярусов горелок, который идентифицировался в процессе исследования. Для решения задачи идентификации коэффициента конвективного теплообмена был применен вариационный метод с градиентной процедурой. Адекватность математической модели анализировалась методами статистического анализа:

- по критерию Фишера - адекватность полученного температурного профиля и зафиксированного пиromетрами излучения в узловых точках безразмерной длины реакционной зоны;
- по критерию Стьюдента – адекватность конечной температуры реакционной газовой смеси на выходе конвертора;
- по критерию Стьюдента – полученные по результатам моделирования и измеренные в узловых точках температурные максимумы.

Погрешность расчета температуры конвертируемого газа на выходе из реакционной зоны печи рифформинга не превышала 1,6% .

Максимальная относительная погрешность распределения температуры в продольном направлении реакционных труб по отношению к экспериментальным данным составляла 3,8 %. По результатам экспериментальных исследований был сделан вывод об адекватности математической модели

## КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ АВТОТЕРМІЧНОГО ПРОЦЕСУ ТРИ-РІФОРМІНГУ

Ткаченко А. А., Безносик Ю. О., Ткач В.В.

Національний технічний університет України «КП», mojjjj@yandex.ru

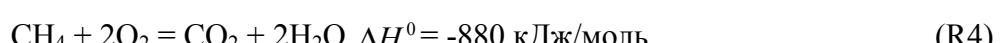
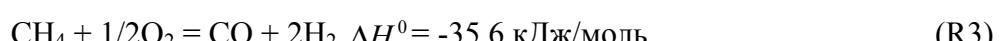
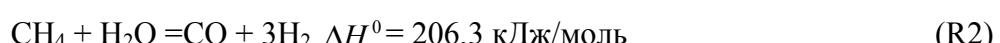
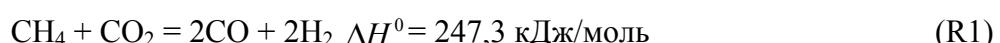
Існуючі на сьогоднішній день три методи окисної конверсії метану: парціальне окислення (ПОМ), вуглекислотний риформінг (ВКМ) та паровий риформінг метану і природного газу (ПРМ) є енергоємними в процесі підтримки реакції, співвідношення  $H_2/CO$  далеко від необхідного для синтезу та мають ще ряд недоліків. Так, наприклад паровий риформінг, який застосовується в газовій промисловості, дає високе відношення  $H_2/CO$  ( $\geq 3$ ), яке непридатне для синтезу Фішера-Тропша і для синтезу метанолу.

Запропонований процес три-риформінгу метану (TPM) дозволяє уникнути або знизити вплив цих недоліків. Три-риформінг - це комбінація риформінгу, парового риформінгу та часткового окислення метану у реакторі для виробництва синтез-газу. Так, процес  $CO_2$  риформінгу та парова конверсія метану не дозволяє отримати співвідношення  $H_2/CO$  потрібне для основних синтезів, або потребує подальшої обробки синтез-газу на відміну від TPM. Процес TPM на підставі показників меншої кількості затрачуваної енергії і меншої кількості чистого  $CO_2$  є найкращим процесом для отримання синтез-газу зі співвідношенням  $H_2/CO$  1,5 – 2. Поєднання ПОМ, ПРМ та ВКМ дає можливість вирішити проблему утворення вуглецю, яка є характерною для вуглекислотного риформінгу.

Процес три-риформінгу метану є багатокомпонентним цільовим процесом отримання водню та монооксиду вуглецю, що поєднує екзо- та ендотермічні процеси. Оскільки варіативність умов перебігу забезпечує різноманітний склад газової суміші то актуальною є проблема моделювання (розрахунку) рівноважного складу газової суміші. Також є дуже важливим питання розрахунку умов процесу (склад газової суміші та температура), які б забезпечували перебіг процесу наближеного до автотермічного. На даний момент не існує жодної моделі процесу три-риформінгу метану на структурованих блочних каталізаторах.

В даній роботі було досліджено структуровані блочні каталізатори шляхом проведення експериментальних досліджень. В результаті чого було підібрано оптимальний каталізатор за експериментальними результатами конверсії метану, для процесу три-риформінгу. Запропонована математична модель реалізована в комп'ютерно - інтегрованому середовищі, вона описує алгоритм розрахунку рівноважного складу компонентів в процесі в умовах близьких до адіабатичних.

Три-риформінг це синергетична комбінація ендотермічного  $CO_2$  риформінгу, парового риформінгу і екзотермічного парціального окислення метану в простому реакторі [1, 2]:



Поєднання вуглецевого риформінгу та парової конверсії дає можливість отримати синтез-газ із заданим співвідношенням  $H_2/CO$  для синтезу метанолу і Фішера-Тропша. Інтеграція парового риформінгу і часткове окислення метану з  $CO_2$  риформінгом може значно зменшити або усунути завуглецовування каталізатора, таким чином збільшиться тривалість роботи каталізатора та ефективність процесу. Таким чином, запропонований процес три-риформінгу може вирішити дві важливі проблеми, які присутні в процесах. При включені кисню підвищиться температура процесу, що дозволить більш ефективно використовувати енергію. Три-риформінг дозволяє використовувати природний газ та димові гази з електростанцій в якості вихідної сировини. Експерименти та чисельний аналіз

показують, що три-риформінг може не тільки утворювати синтез-газ  $\text{CO} + \text{H}_2$  з бажаними співвідношеннями  $\text{H}_2/\text{CO}$ , але й може виключити утворення вуглецю, що є зазвичай серйозною проблемою при  $\text{CO}_2$  риформінгу метану.

**Експериментальне дослідження процесу три-риформінгу метану.** Лабораторні дослідження проводились на лабораторній установці, змонтованій у відділі «Оксисновіднових процесів» на базі Інституту фізичної хімії ім. Л.В.Писаржевського Національної Академії Наук України.

Дослідження проводили в проточному реакторі при атмосферному тиску. Реакційну суміш пропускали крізь каталізатору. Експеримент проводився на нікелевих каталізаторах, в яких носій представляє собою синтетичний кордієрит у вигляді блоків стільникової структури. Хімічний склад кордієриту:  $2\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{MgO} \cdot 5\text{SiO}_2$ .

В процесі експерименту, шляхом визначення степені перетворення метану при різних температурах, було досліджено каталітичну активність різних зразків каталізаторів (табл. 1).

Таблиця 1 – Кatalізатори, що використовувались в експерименті

№ зразка	Склад каталізатора
1	4,7%NiO+3,8%Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /кордієрит
2	5%NiO+4%Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> +0,9%Na <sub>2</sub> O/кордієрит
3	4,8%NiO+3,9%Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> +0,9%MgO/кордієрит
4	5%NiO+4%Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> +1%La <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /кордієрит
5	5,1%NiO+4,1%Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> +0,9%CeO <sub>2</sub> /кордієрит

Об'ємна швидкість реактивної суміші складала  $12000\text{год}^{-1}$ . При вивчені процесів окиснення метану використовували газову суміш наступного складу (% об.): 5% –  $\text{CH}_4$ , 0÷2% –  $\text{O}_2$ , 0÷9% –  $\text{H}_2\text{O}$ , 0÷6% –  $\text{CO}_2$  та Ar. Аналіз продуктів реакцій виконували на газовому хроматографі «Цвет-800».

Досліджували залежність конверсії метану і конверсії діоксиду карбону від температури, складу вихідної газової суміші, від концентрації водяної пари в вихідній газовій суміші. Далі приведені експериментальні залежності для каталізатора 4 (табл. 1) [3].

На рис. 1 приведені отримані експериментальні залежності конверсії метану ( $X(\text{CH}_4)$ ) та конверсії діоксиду карбону ( $X(\text{CO}_2)$ ) від температури в процесі три-риформінгу метану на 5%NiO+4%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>+1%La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/кордієрит зразку каталізатора.

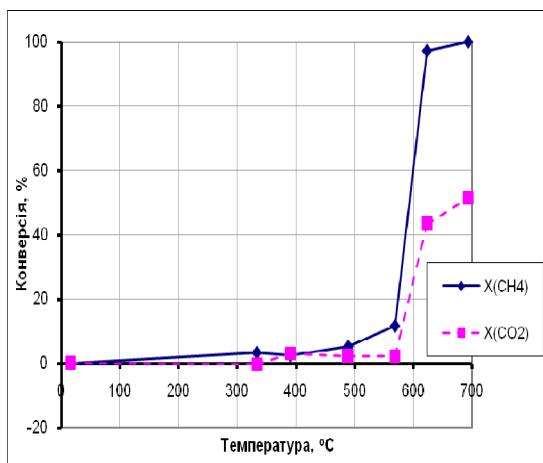


Рис. 1 - Залежності конверсії метану  $X(\text{CH}_4)$  та конверсії діоксиду карбону  $X(\text{CO}_2)$  від температури в процесі три-риформінгу метану

На рис. 2 приведені експериментальні дані конверсії метану від складу вихідної газової суміші в процесі три-риформінгу метану на каталізаторі 5%NiO+4%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>+1%La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/кордієрит.

На рис. 3 приведені експериментальні дані конверсії метану від концентрації водяної пари в вихідній газовій суміші.

На рис. 4 приведені експериментальні дані для побудови залежності співвідношення  $H_2:CO$  на виході від концентрації водяної пари в вихідній газовій суміші.

На рис. 5 приведені експериментальні дані конверсії метану від температури для різних катализаторів. В процесі три-риформінгу метану за наявності навіть невеликої кількості кисню (концентрація близько 1% об.) при низьких температурах 4,7 % NiO+3,8 % Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/кордієрит катализатор є малоактивним (рис. 5).

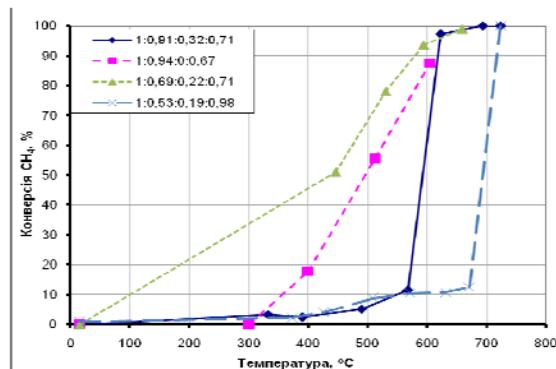


Рис.2 - Залежності конверсії метану від складу вихідної газової суміші

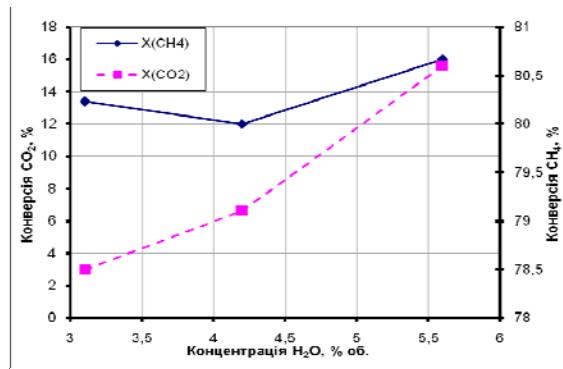


Рис.3 – Залежності конверсії метану та діоксиду карбону від концентрації водяної пари в вихідній газовій суміші при 6,05 % об. CH<sub>4</sub>; 3,74 % об. CO<sub>2</sub>; 1,36 % об. O<sub>2</sub>, T=558°C

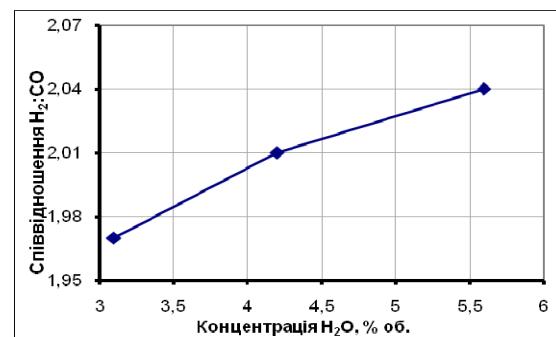


Рис.4 - Залежність співвідношення H<sub>2</sub>:CO від концентрації водяної пари в вихідній газовій суміші а при 6,05 % об. CH<sub>4</sub>; 3,74 % об. CO<sub>2</sub>; 1,36 % об. O<sub>2</sub>, T=558°C

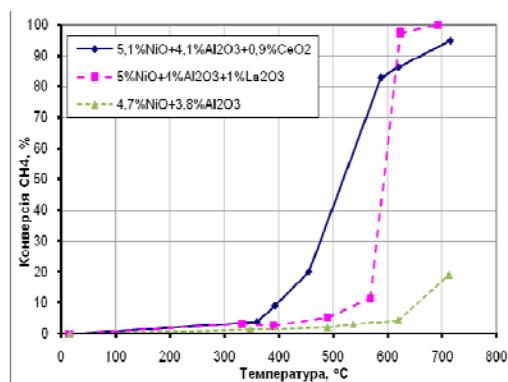


Рис. 5 - Залежності конверсії метану від температури для різних катализаторів

Експериментальні дослідження показали, що максимальна конверсія метану склала 19,8% при температурі 712°C. Падіння активності катализатора можна пов'язати з окисленням металічного нікелю, при якому відбувається дисоціативна адсорбція метану. Додавання водяної пари сприяє росту конверсії метану та профілактиці завуглецовування поверхні катализатора. Тому для стабільної роботи катализатора та досягнення високих степенів перетворення метану необхідно звести до мінімуму концентрацію кисню в вихідній газовій суміші. Зменшення концентрації кисню в вихідній газовій суміші сприяє підвищенню концентрації водню на виході та підвищенню селективності по H<sub>2</sub>. При на дуже високих температурах (>720°C) катализатор працює нестабільно, що може бути пов'язано з протіканням реакції крекінгу метану.

Дослідження процесу на La- вмисному катализаторі показали, що при зростанні концентрації кисню в реакційній суміші від 0 до 1,92% об. зростала конверсія метану від 87

до 100%, та конверсія CO<sub>2</sub> – від 45,9 до 51,4%. Зміна концентрації водяної пари практично не впливалася на конверсію метану. При сумарному надлишку окисників 20% відносно стехіометричної суми каталізатор проявляє високу активність і концентрації реагентів близькі до рівноважних. Збільшення співвідношення CO<sub>2</sub> / CH<sub>4</sub> та відсутність кисню у вихідній газовій суміші сприяють зниженню температури запалювання каталізатору.

Як показали дослідження різних зразків каталізаторів, найкращим є 5%NiO + 4%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 1%La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/кордієрит каталізатор, оскільки в процесі три-риформінгу метану на ньому досягалася практично 100% конверсія метану, він достатньо стабільно працював протягом 6 годин (конверсія метану коливалася в межах 88 – 89%), при достатньому вмісті CO<sub>2</sub> в суміші каталізатор починає працювати при температурі 300°C.

Створення математичної моделі дозволить визнати склад синтез-газу в умовах при яких неможливо було провести експериментальне дослідження за рядом причин.

**Кінетика процессу.** Кінетика процесу три-риформінгу основана на законі:

$$r(i) = A \exp\left(\frac{-E_{app,i}}{RT}\right) (P_{CO_2})^{\alpha,i} (P_{H_2O})^{\beta,i} \quad (1)$$

де  $i$  – CH<sub>4</sub> чи CO<sub>2</sub>;  $r(i)$  – швидкість перетворення; ( $\alpha,i$ ), ( $\beta,i$ ) – порядок реакцій.

Рівняння кінетики може включати в себе елементи, які містять парціальні тиски CH<sub>4</sub> та O<sub>2</sub>. В нашому випадку приймемо парціальні тиски константами і будемо знаходити тільки CO<sub>2</sub>.

Суть моделювання процесу три-риформінгу полягає у розрахунку рівноважних концентрацій компонентів  $K_p$ . За постійного тиску концентрації компонентів замінюються їх парціальними тисками і константа рівноваги має вигляд

$$K_p = e^{-\frac{\Delta G^o}{RT}} = e^{-\frac{\Delta H^o}{RT} + \frac{\Delta S^o}{R}} \quad (2)$$

де  $\Delta G^o$ ,  $\Delta H^o$  та  $\Delta S^o$  – зміна стандартної енергії Гібса, ентальпії і ентропії реакції.

В логарифмічних координатах формула (2) для обчислення  $K_p$  має вигляд:

$$\ln K_p = -\frac{\Delta H^o}{RT} + \frac{\Delta S^o}{R} \quad (3)$$

Величини термодинамічних параметрів реакцій ( $\Delta H^o$  та  $\Delta S^o$ ) розраховують на підставі довідниковых значень ентальпії утворення і ентропії окремих сполук відповідно до стехіометричного рівняння реакції. Знання термодинамічних параметрів реакцій дозволяє розрахувати рівноважні концентрації всіх речовин, які в такій реакції приймають участь.

Залежність ентальпії реакції від температури виражається законом Кірхгофа

$$\Delta H_T^o = \Delta H_o^o + \int_o^T \Delta C_p dT \quad (4)$$

а ентропія реакції – відомим термодинамічним рівнянням

$$\Delta S_T^o = \int \frac{\Delta C_p}{T} dT \quad (5)$$

де  $\Delta C_p$  – зміна теплоємності в результаті реакції.

В обмеженому інтервалі температур теплоємність можна представити в вигляді

$$C_p = a + bT + cT^2 \quad (6)$$

де  $a$ ,  $b$  и  $c$  – емпіричні константи.

Відповідно, для хімічної реакції можна записати:

$$\Delta C_p = \Delta a + \Delta b T + \Delta c T^2 \quad (7)$$

Підстановка (7) у рівняння (4) і (4) та інтегрування отриманих виразів призводить до отримання рівнянь:

$$\Delta H_T^o = \Delta H_o^o + \Delta a T + \frac{\Delta b}{2} T^2 + \frac{\Delta c}{3} T^3 \quad (8)$$

$$\Delta S_T^o = \Delta a \cdot \ln T + \Delta b T + \frac{\Delta C}{2} T^2 + I' \quad (9)$$

де  $I'$  – стала інтегрування.

Підстановка (8) і (9) в (3) дає:

$$\begin{aligned} \ln K_p &= -\frac{\Delta H_o^o}{RT} - \frac{\Delta a}{R} - \frac{\Delta b}{2R} T - \frac{\Delta c}{3R} T^2 + \frac{\Delta a}{R} \ln T + \frac{\Delta b}{R} T + \frac{\Delta c}{2R} T^2 + I' = \\ &= -\frac{\Delta H_o^o}{RT} + \frac{\Delta a}{R} \ln T + \frac{\Delta b}{2R} T + \frac{\Delta c}{6R} T^2 + \left(-\frac{\Delta a}{R} + I'\right) = \\ &= -\frac{\Delta H_o^o}{RT} + \frac{\Delta a}{R} \ln T + \frac{\Delta b}{2R} T + \frac{\Delta c}{6R} T^2 + I \end{aligned} \quad (10)$$

де

$$I = -\frac{\Delta a}{R} + I' \quad (11)$$

тобто

$$\ln K_p = -\frac{\Delta H_o^o}{RT} + \frac{\Delta a}{R} \ln T + \frac{\Delta b}{2R} T + \frac{\Delta c}{6R} T^2 + I \quad (12)$$

Для числового розрахунку константи рівноваги потрібно знати значення сталих  $\Delta a$ ,  $\Delta b$ ,  $\Delta c$ ,  $\Delta H_0^o$  і  $I$  в рівнянні (12) [31, 32].

Процес три-риформінгу метану включає в себе основні реакції (R1 – R4) та побічні реакції (R5 – R11):



Кінетика цих реакцій описується наступними кінетичними рівняннями:

$$r_1 = k_+ p_{\text{CH}_4} p_{\text{CO}_2} - \frac{k_+}{K_{p1}} p_{\text{CO}}^2 p_{\text{H}_2}^2 \quad r_2 = k_+ p_{\text{CH}_4} p_{\text{H}_2\text{O}} - \frac{k_+}{K_{p2}} p_{\text{CO}} p_{\text{H}_2}^3 \quad r_3 = k_+ p_{\text{CH}_4} p_{\text{O}_2}^{1/2} - \frac{k_+}{K_{p3}} p_{\text{CO}} p_{\text{H}_2}^2$$

$$r_4 = k_+ p_{\text{CH}_4} p_{\text{O}_2}^2 - \frac{k_+}{K_{p4}} p_{\text{CO}_2} p_{\text{H}_2\text{O}}^2 \quad r_5 = k_+ p_{\text{CH}_4} - \frac{k_+}{K_{p5}} p_{\text{C}} p_{\text{H}_2}^2 \quad r_6 = k_+ p_{\text{CO}}^2 - \frac{k_+}{K_{p6}} p_{\text{CO}_2} p_{\text{C}}$$

$$r_7 = k_+ p_{\text{CO}}^2 p_{\text{O}_2} - \frac{k_+}{K_{p7}} p_{\text{CO}_2}^2 \quad r_8 = k_+ p_{\text{C}} p_{\text{H}_2\text{O}} - \frac{k_+}{K_{p8}} p_{\text{CO}} p_{\text{H}_2} \quad r_9 = k_+ p_{\text{C}} p_{\text{O}_2} - \frac{k_+}{K_{p9}} p_{\text{CO}_2}$$

$$r_{10} = k_+ p_{CO} p_{H_2O} - \frac{k_+}{K_{p10}} p_{CO_2} p_{H_2}$$

$$r_{11} = k_+ p_{H_2}^2 p_{O_2} - \frac{k_+}{K_{p11}} p_{H_2O}^2$$

де  $k_+$  – константа швидкості прямої реакції;  $K_{pi}$  – константи рівноваги реакцій R1 – R11.

Зміна концентрацій компонентів реакційної суміші залежно від часу описується наступною системою диференційних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dC_{CH_4}}{dt} = -r_1 - r_2 - r_3 - r_4 - r_5 \\ \frac{dC_{CO_2}}{dt} = -2r_1 + r_4 + r_6 + 2r_7 + r_9 + r_{10} \\ \frac{dC_{CO}}{dt} = 2r_1 + r_2 + r_3 - 2r_6 - 2r_7 + r_8 - r_{10} \\ \frac{dC_{H_2}}{dt} = 2r_1 + 3r_2 + 2r_3 + 2r_5 + r_8 + r_{10} - 2r_{11} \\ \frac{dC_{H_2O}}{dt} = -r_2 + 2r_4 - r_8 - r_{10} + 2r_{11} \\ \frac{dC_{O_2}}{dt} = \frac{1}{2}r_3 - 2r_4 - r_7 - r_9 - r_{11} \\ \frac{dC_C}{dt} = r_5 + r_6 - r_8 - r_9 \\ \frac{dC}{dt} = \sum \frac{dC_i}{dt} = r_1 + 2r_2 + \frac{3}{2}r_3 + 2r_5 - r_7 - r_9 - r_{11} \end{cases}$$

з початковими умовами  $C(0) = C_0$ .

Зазначимо, що

$$C_i = C \cdot m_i = C \cdot P_i / P,$$

де  $P$  – загальний тиск;  $m_i$  та  $P_i$  – мольні частки та парціальний тиск компонентів, відповідно;  $C$  – загальна концентрація компонентів в суміші. Тоді з урахуванням таких співвідношень отримуємо для  $P=const$ :

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{d(C \cdot P_i)}{dt} \cdot \frac{1}{P} = \frac{P_i}{P} \cdot \frac{dC}{dt} + \frac{C}{P} \cdot \frac{dP_i}{dt} = \frac{P_i}{P} \cdot (r_1 + 2r_2 + \frac{3}{2}r_3 + 2r_5 - r_7 - r_9 - r_{11}) + \frac{C}{P} \cdot \frac{dP_i}{dt}$$

Звідки:

$$\frac{dP_i}{dt} = \frac{P}{C} \cdot \frac{dC_i}{dt} + \frac{P_i}{C} \cdot r_1 + 2r_2 + \frac{3}{2}r_3 + 2r_5 - r_7 - r_9 - r_{11}$$

В результаті отримуємо наступну систему диференційних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dP_{CH_4}}{dt} = \frac{P(-r_1 - r_2 - r_3 - r_4 - r_5) - P_{CH_4}(r_1 + 2r_2 + 1.5r_3 + 2r_5 - r_7 - r_9 - r_{11})}{C} \\ \frac{dP_{CO_2}}{dt} = \frac{P(-2r_1 + r_4 + r_6 + 2r_7 + r_9 + r_{10}) - P_{CO_2}(r_1 + 2r_2 + 1.5r_3 + 2r_5 - r_7 - r_9 - r_{11})}{C} \\ \frac{dP_{CO}}{dt} = \frac{P(2r_1 + r_2 + r_3 - 2r_6 - 2r_7 + r_8 - r_{10}) - P_{CO}(r_1 + 2r_2 + 1.5r_3 + 2r_5 - r_7 - r_9 - r_{11})}{C} \\ \frac{dP_{H_2}}{dt} = \frac{P(2r_1 + 3r_2 + 2r_3 + 2r_5 + r_8 + r_{10} - 2r_{11}) - P_{H_2}(r_1 + 2r_2 + 1.5r_3 + 2r_5 - r_7 - r_9 - r_{11})}{C} \\ \frac{dP_{H_2O}}{dt} = \frac{P(-r_2 + 2r_4 - r_8 - r_{10} + 2r_{11}) - P_{H_2O}(r_1 + 2r_2 + 1.5r_3 + 2r_5 - r_7 - r_9 - r_{11})}{C} \\ \frac{dP_{O_2}}{dt} = \frac{P(1/2r_3 - 2r_4 - r_7 - r_9 - r_{11}) - P_{O_2}(r_1 + 2r_2 + 1.5r_3 + 2r_5 - r_7 - r_9 - r_{11})}{C} \\ \frac{dP_C}{dt} = \frac{P(r_5 + r_6 - r_8 - r_9) - P_C(r_1 + 2r_2 + 1.5r_3 + 2r_5 - r_7 - r_9 - r_{11})}{C} \\ \frac{dC}{dt} = r_1 + 2r_2 + 1.5r_3 + 2r_5 - r_7 - r_9 - r_{11} \end{cases}$$

У такій системі величина  $t$  у фізичному сенсі є часом перебування реакційної суміші всередині проточного реактора. Рішення системи диференційних рівнянь дає залежності парціального тиску компонентів реакційної суміші від часу її перебування в реакторі.

Залежності констант рівноваги для реакцій ( $R_1 - R_1$ ) отримують згідно виразу (12).

Розроблена математична модель дозволяє отримати склад суміші при рівноважному процесі три-риформінгу метану. Розрахунок кількості теплоти на вході і на виході з реактору дозволяє визначити умови зміну теплоти в процесі автотермічного три-риформінгу та температури на виході з реактору.

Використання моделі дозволяє визначити зміну концентрації компонентів на виході з реактору, ступінь перетворення  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  та константи рівноваги.

**Висновки.** Проведені експериментальні дослідження процесу три-риформінгу на різних каталізаторах. Розроблена математична модель кінетики три-риформінгу метану для каталітичних систем у реакторі інтегрального проточного типу, яка дозволяє оцінювати вплив факторів (тиску, температури, концентрації компонентів) на процес та порівнювати експериментальні результати роботи з метою впливу різних факторів на активність та селективність процесу.

1. *Chunshan S., Wei P.* Tri-reforming of methane: a novel concept for catalytic production of industrially useful synthesis gas with desired  $\text{H}_2/\text{CO}$  ratios. - Catalysis Today, 2004. – р. 128-131.
2. *Ткаченко, А.* Моделювання процесу каталітичного три-риформінгу метану [Текст] / Ткаченко А., Безносик Ю. - Перша міжнародна наукова конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Хімія та хімічні технології 2010» (CCT-2010). 25-27 листопада 2010. – Львів, 2010. – 196–197.
3. *Ткаченко А.* Експериментальні дослідження та моделювання автотермічного процесу три-риформінгу [Текст] / Ткаченко А., Безносик Ю. - Друга міжнародна наукова конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Хімія та хімічні технології 2011» (CCT-2011). 24 – 26 листопада 2011. – Львів, 2011.

## ЗАСТОСУВАННЯ ПРОГРАМНИХ ЗАСОБІВ КОМП'ЮТЕРНОЇ ГІДРОДИНАМІКИ ДЛЯ РІШЕННЯ ЗАДАЧІ МОДЕЛЮВАННЯ ОТОЛОТОВОЇ СТРУКТУРИ

Бугаєва Л.М., Бочкор І.І., Кондратчук О.В.

Національний технічний університет України «КПІ», bugaeva\_l@ukr.net

Отолітовий орган відповідає за сприйняття живими істотами лінійних прискорень, в тому числі, гравітації, і таким чином визначає їх просторову орієнтацію та поведінку. Математичне моделювання – один із методів дослідження функції отолітової структури та її можливих змін під впливом різних механічних умов. Отоліт може бути спрощено описаний як тонка м'яка пластинка змінної товщини і густини. Тобто він може розглядатись як отолітова мембрana (ОМ), що лежить на дещо викривленій епітеліальній поверхні – макулі із пучками волоскових рецепторів. Під дією інерціального прискорення верхній більш щільний отоконіальний шар ОМ зміщується відносно макули. Це призводить до виникнення зсувних сил в об'ємі отолітової мембрани, що викликають деформацію гелевидного шару, який примикає до макулярної поверхні, та розміщених в ньому волоскових клітин, що ініціює процес обробки інформації на цьому рівні [1].

Модель просторово неоднорідної поверхні отоліта було побудовано в програмному середовищі Solidworks Standard 2009, загальний вигляд якої можна бачити на рис. 1.

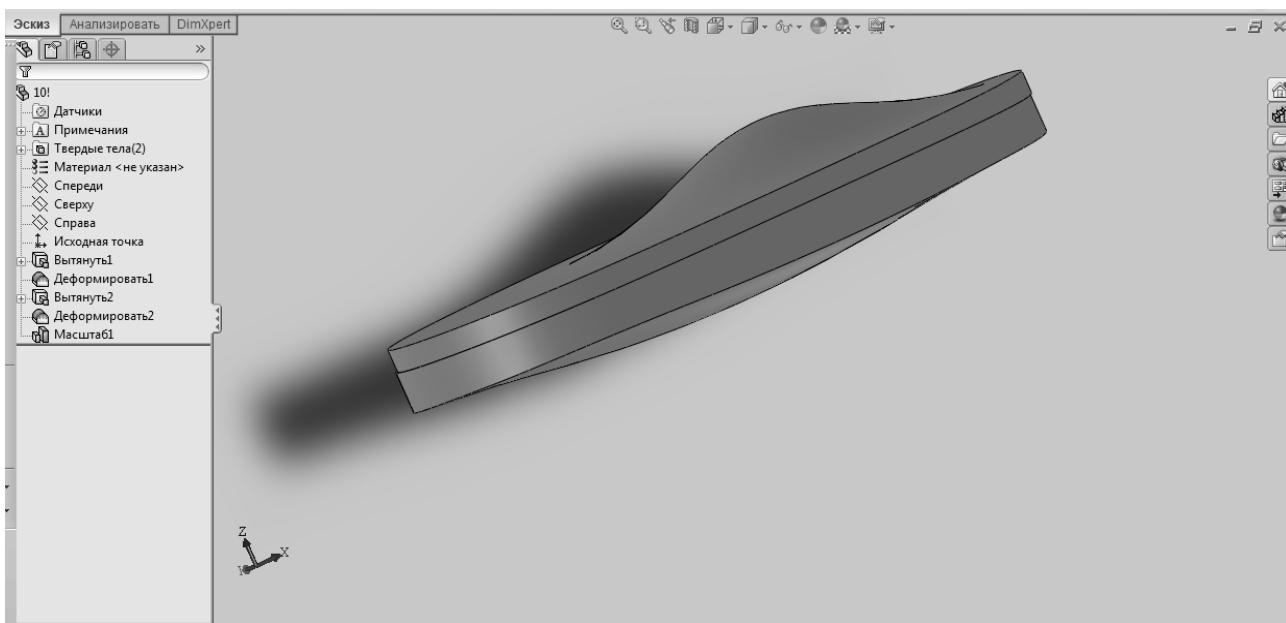


Рис. 1 – Модель отолітого органу людини

Для вирішення задачі розподілення зміщень статичних навантажень - гравітації та відцентрової сили був використаний програмний пакет COMSOL Multiphysics 4.0a, призначений для рішення задачах із розподіленими параметрами в різних наукових дослідженнях. При цьому було не розглядались в'язкоеластичної властивості отоліта, оскільки вони проявляються в динаміці.

Створена в Solidworks модель отоліта завантажується в програму COMSOL Multiphysics за допомогою команди *Import* у меню *Model Builder*. Далі задаються властивості верхнього та нижнього шару отоліта на вкладці *Material*. Після цього на вкладці *Solid Mechanics (solid)* необхідно визначити початкові умови. У меню *Study* обираємо стаціонарне вирішення задачі (*Stationary*).

Залежність зміни деформації у випадку гравітації зображенено на рис. 2.

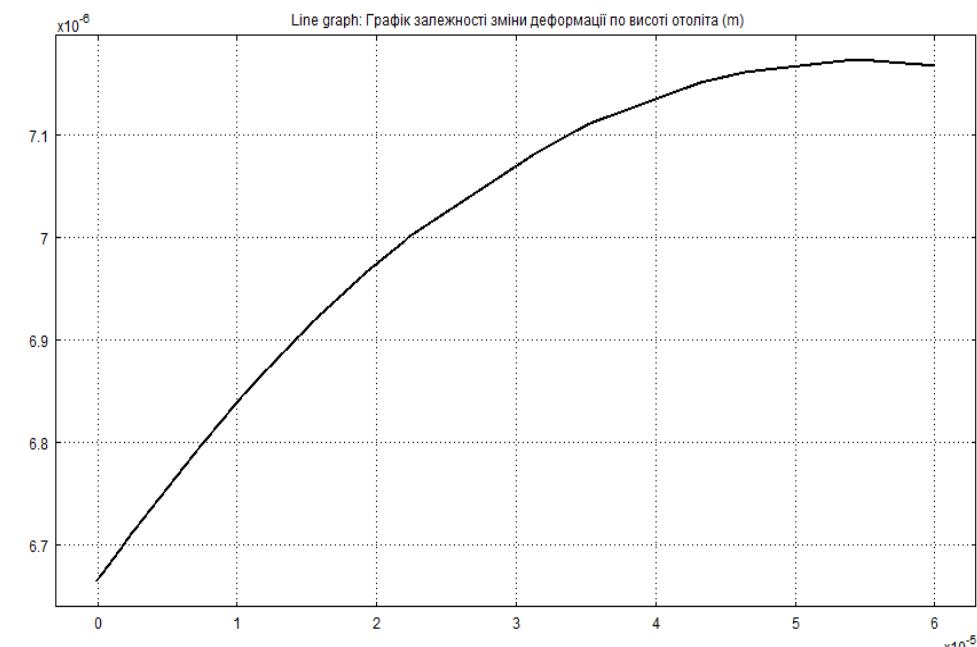


Рис. 2 – Залежність зміни деформації по висоті отоліта

Залежність зміни деформації від кутової швидкості зображенено на рис. 3.

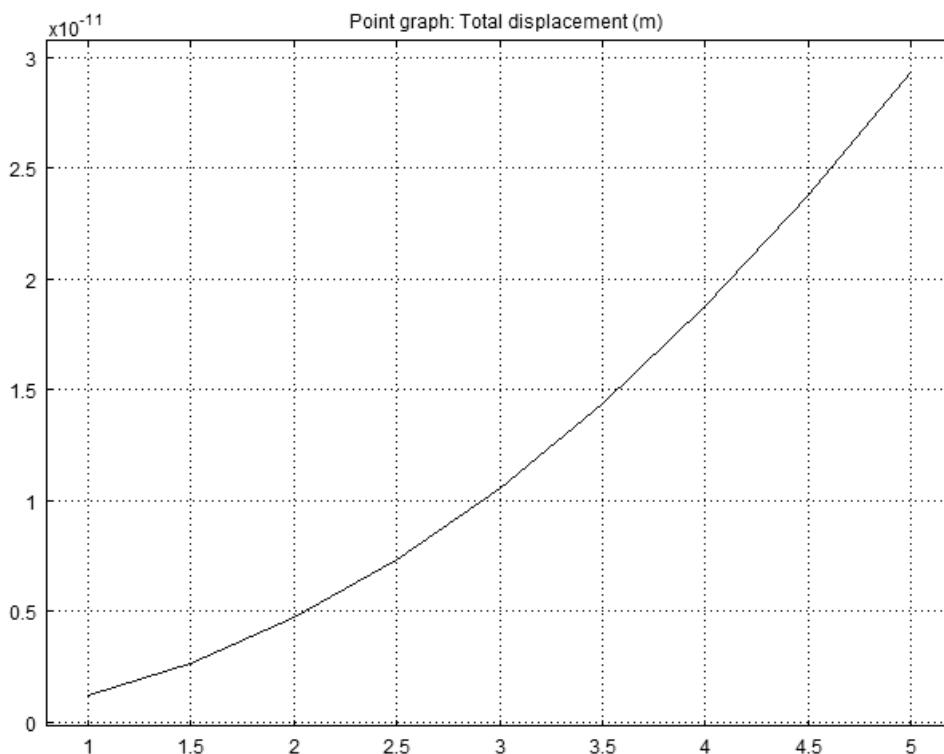


Рис. 3 – Залежність зміни деформації від кутової швидкості

У роботі було отримано розподіл зміщень отоліта у випадку статичних навантажень сил гравітації та центробіжних сил. Отримані результати моделювання доповнили теоретичні та експериментальні відомості про поведінку отоліту в умовах невагомості.

1. Jaeger I R., Haslwanter T. Otolith responses to dynamical stimuli: results of a numerical investigation Springer-Verlag, J. Biol. Cybern. 2004, V. 90. – pp.165–175.

### ТЕОРЕТИЧНА ТЕМПЕРАТУРА АДІАБАТИЧНОГО РЕАКТОРА

Супрунчук В.І., Іванюк Р.Р.

Національний технічний університет України «КПІ», link.irr@gmail.com

Теоретичну температуру процесу доцільно розрахувати складаючи термохімічне рівняння відносно 1 моль базового компонента  $A$

$$A + bB + iI = rR + sS + iL + Q_p \quad (1)$$

де  $b, i, r, s$  – коефіцієнти, що визначаються нестехіометричним складом реакційної суміші;  $Q_p$  – теплота реакції, перерахована на 1 моль базового компонента  $A$ .

Розрахунок виконується з використанням поняття фізичної теплоти ітераційним методом з використанням системи комп’ютерної алгебри Mathcad, враховуючи температурну залежність теплоємності та теплоти реакції.

Розглянутий метод громіздкий для обчислення часу перебування реакційної суміші в адіабатичному реакторі

$$\tau = C_{A_0} \int_{x_{AI}}^{X_f} \left( \frac{I}{k_0 \exp - \frac{E_a}{RT}} \right) f(C_A) dx_A \quad (2)$$

Обчислення суттєво спрощується, якщо теоретичну температуру процесу  $T$  на кожному відрізку числового інтегрування представити у вигляді функціональної залежності від ступеня перетворення ( $X_A$ ) і початкової температури реакційної суміші  $T=f(T_0, X_A)$ .

Виходячи з визначення молярної теплоємності і фізичної теплоти можна записати

$$dT = dH/C_p = dQ/C_p ,$$

або для реакції з врахуванням ступеня перетворення компонента  $A$

$$T = T_0 + Q_p X_A / C_p , \quad (3)$$

де  $Q_p$  - питома теплota реакції на 1 моль компонента  $A$ .

В адіабатичному реакторі  $Q_p$  витрачається на підвищення або зниження температури  $n$  моль реакційного середовища, кількість яких змінюється при протіканні реакції за формулою, яка виводиться з математичного виразу стехіометричного закону [1]

$$n = n_0 + \Delta n X_A \quad (4)$$

Таким чином, враховуючи (3), (4) вираз для розрахунку часу перебування реакційної суміші в адіабатичному реакторі (2) набуває вигляду, придатного для числового інтегрування

$$\tau = C_{A_0} \int_0^X \frac{dX_A}{k_0 \exp(-E_A / R) \left[ T_0 + \frac{Q_p X_A}{(n_0 + \Delta n X_A) \bar{C}_p} \right]} f(C_A),$$

де  $\bar{C}_p$  - середня молярна теплоємність реакційної суміші при значенні 0.5  $X_A$  в інтервалі температур  $(273 \div T)$ .

1. Пригожин И., Дефэй Р. Химическая термодинамика.- Новосибирск: Издательство «Наука» Сибирское отделение., 1966.- 510с.

## ДОСЛІДЖЕННЯ ГІДРОДИНАМІКИ ПРИСТРОЇВ ДЛЯ СТВОРЕННЯ МОНОДІСПЕРСНИХ МІКРОКРАПЕЛЬ

Скіданенко М.С., Склабінський В.І., Артюхов А.Є., Лугова С.О.

Сумський державний університет, skidanenko@pohnp.sumdu.edu.ua

В останні роки сфера застосування мікрокрапель монодисперсного складу поширюється в різноманітних галузях. Аналіз результатів, отриманих в [1] дозволяє визначити, що спосіб вимушеної капілярного розпаду струменя (ВКРС) є найбільш екологічним, технологічно керованим, та найменш енерго- і матеріалоємним.

Ступень монодисперсності крапель, які отримані способом ВКРС, залежить від ряду параметрів: режиму та швидкості витікання рідини із отвору, геометрії отвору, поверхневого натягу рідини, частоти та амплітуди вимушених коливань та ряду інших параметрів [2]. Недоліком сучасних пристрій є не можливість роботи в широкому діапазоні навантажень по розплаву, забивання отворів витікання при диспергуванні рідини з домішками.

В даній роботі розглянуто один із варіантів усунення зазначених недоліків, шляхом підвищення швидкості витікання рідини з отворів пристрою. Збільшення швидкості витікання рідини з пристрою досягається шляхом монтажу в нижню частину вже існуючої конструкції обертового пристрою напірних лопатей, які повторюють форму днища.

Вказане дослідження проводилося за допомогою створеної моделі програмним продуктом “KOMPAS-3D (<http://ascon.ru/>), та чисельного моделювання програмним забезпеченням ANSYS CFX (<http://www.ansys.ru/>).

Моделювання гідродинаміки потоку пристрою проведено для різної кількості напірних лопатей (3,4,5,6,7 та без лопатей) і з різною обертовою швидкістю (від 50-80 об/хв). Частоту обертання пристрою вибрано згідно практичних рекомендацій [3]. Кількість напірних лопатей прийнято з урахуванням забезпечення рівномірного розпаду рідини на краплі. Для коректного моделювання умов роботи пристрою при створенні монодисперсних мікрокрапель використовувалась двохзв'язна розрахункова область, яка складалася з корпусу та корзини. Розрахунок параметрів течії рідини виконано шляхом чисельного розв'язання системи рівнянь, котрі описують загальний випадок руху рідкого середовища - рівнянь Нав'є-Стокса та нерозривності.

Отримані результати чисельного моделювання гідродинаміки потоку в досліджених конструкціях наведено на рис. 1.

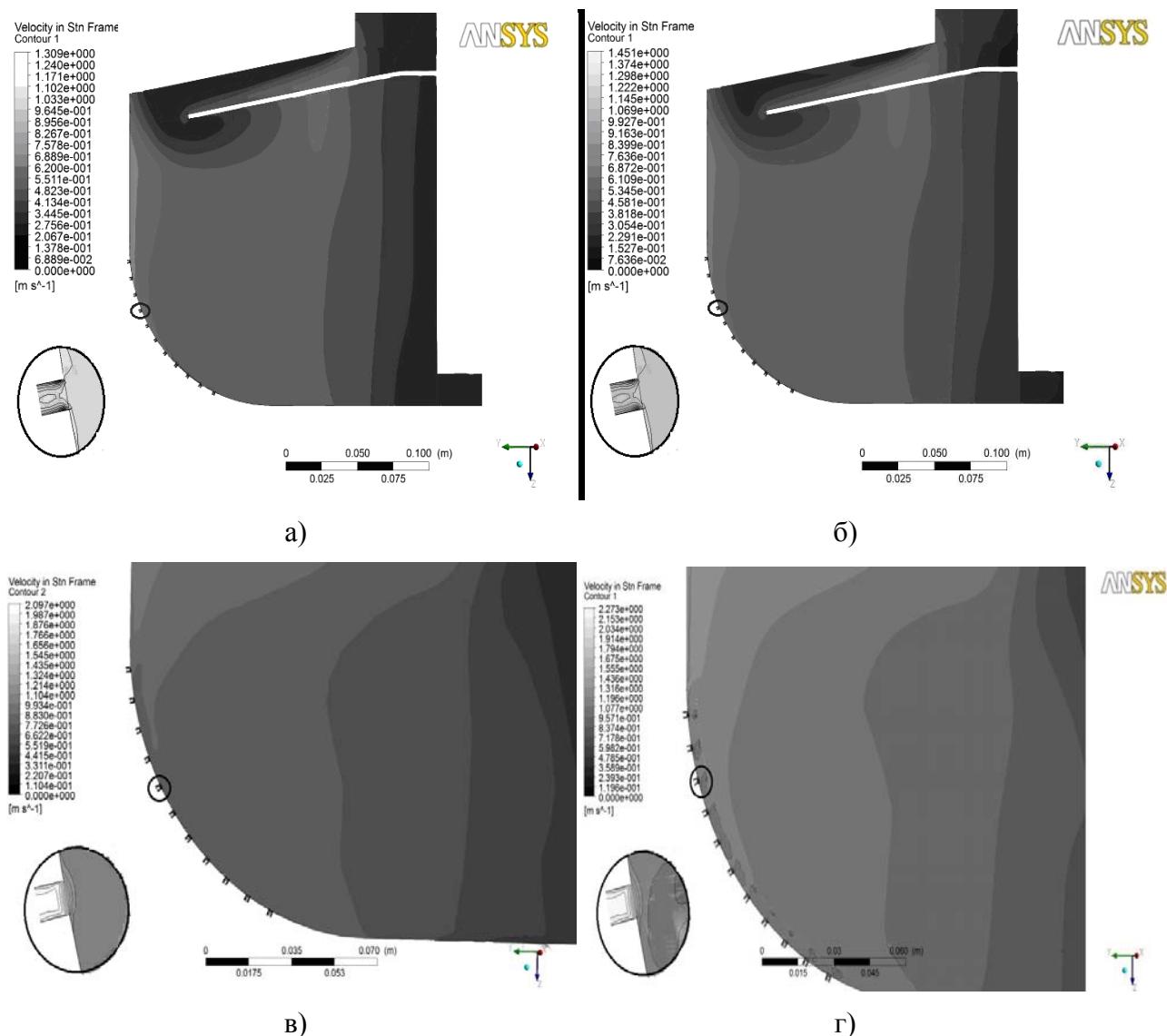


Рис. 1 – Результати комп'ютерного моделювання при дослідженні залежності швидкості витікання рідини з отворів від кількості лопатей:  
а) без лопатей; б) 3 лопаті; в) 6 лопатей; г) 7 лопатей

Наведено розподіл полів швидкостей в поздовжньому перерізі приладу в якому відсутні напірні лопаті (рис. 1 а). Аналіз показує, що поблизу вала знаходиться область низької швидкості. Під дією відцентрових сил швидкість потоку рідини збільшується в напрямку від вала до отворів витікання. Зі збільшенням кількості напірних лопатей, при постійній обертовій швидкості, спостерігається лінійне збільшення швидкості витікання

потоку рідини, в середньому на 7%. (рис 1.). Максимальна кількість напірних лопатей в пристрої повинна бути 6, тому що при подальшому збільшенні елементів, в прикордонному шарі. Перед отворами витікання спостерігається утворення вихорів (рис. 1г), які створюють додаткові слабкі коливання. При таких умовах спостерігається нерівномірний режим розпилення рідини на мікрокраплі однієї фракції.

В результаті проведення чисельного експерименту було отримано оптимальну кількість лопатей, встановлено залежність швидкості витікання рідини з отворів від кількості напірних лопатей.

Удосконалена конструкція пристрою дозволяє покращити режим його роботи за рахунок:

- утворення додаткового напору рідини перед отворами витікання, робота в більш широкому діапазоні навантажень по рідині та функціонування пристрою без коливань напору;
- зменшенню вірогідності забивання і зміни геометричних розмірів отворів витікання рідини завдяки створенню додаткового тиску перед отворами витікання рідини, збільшення монодисперсності гранул що підвищить якість готової продукції;
- зменшення втрат готової продукції у вигляді пилу, скорочення викидів в атмосферу.

Застосування комп'ютерного моделювання являється одним з ефективних методів відпрацювання нових конструктивних параметрів пристрою. Дозволяє у декілька разів зменшити терміни проектування нової техніки, підібрати оптимальні гідромеханічні показники пристрій для отримання гранульованого продукту з заданими характеристиками. Намічені шляхи щодо подальшого покращення характеристик пристрою для створення монодисперсних мікрокрапель, які необхідно досліджувати в майбутньому.

1. Аметистов Е.В. Монодисперсные системы и технологии [Текст]/ Е.В. Аметистов, А.С. Дмитриев - М.: МЭИ. 2002.- 250 с.
2. Скіданенко М.С., Складінський В.І., Артюхов А.Є., Іванія А.В. Визначення впливу фізико-хімічних властивостей середовищ на якість монодисперсних мікрогранул [Текст] / Друга міжнародна наукова конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Хімія та хімічні технології 2011» (СХТ-2011). 24 – 26 листопада 2011. – Львів, 2011. – с. 196 – 197.
3. Холін Б.Г. Центробежные и вибрационные грануляторы плавов и распылители жидкости [Текст]/ Б.Г. Холін - М.: Машиностроение. 1977. - 182 с.

## АНАЛІЗ ПАРАМЕТРІВ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ АДСОРБЦІЇ ТЕТРАФТОРЕТАНУ НА ЦЕОЛІТІ NaY

Кваско М. З., Жураковська О.С., Жураковський Я. Ю.

Національний технічний університет України «КПІ», zhurakovsky@bigmir.net

**Вступ.** Тетрафторетан ( $\text{CH}_2\text{FCF}_3$ ) – (1,1,2,2-тетрафторетан) є хладагентом для холодильників та кондиціонерів. Він був розроблений для заміни хлорфторуглеводів, таких як діхлордіфторметан (Фреон R12), шкідливих для навколишнього середовища. Розв'язання задач пов'язаних із виробництвом, використанням та утилізацією цієї речовини є актуальними для сучасної інженерної науки.

Ізомер HFC-134 ( $\text{CHF}_2\text{CHF}_2$ ) (1,1,1,2-тетрафторетан), який не використовується як хладагент, є побічним продуктом виробництва HFC-134a [3]. Вимірювання ізотерм адсорбції HFC-134 і HFC-134a на ряді цеолітів необхідне для дослідження можливого застосування способу розділення цих газів за допомогою адсорбції.

**Постановка задачі.** У попередній роботі [1] були наведені дані експериментально отриманих ізотерм адсорбції ізомерів тетрафторетану HFC-134a та HFC-134 на цеоліті NaY при різних температурних режимах. Після отримання результатів вимірювань, постає

питання обрання відповідного математичного рівняння, що адекватно описує ці результати. Існує багато моделей різного ступеня складності - від повністю емпіричних до переважно теоретичних. У рамках цієї роботи розглянуто та перевірено відповідність деяких моделей адсорбційних ізотерм результатам практичних вимірювань.

**Використані моделі.** Була розглянута модель Тота (Toth) [2], що описується формулово:

$$n = \frac{n^0 p}{(1/K_1^* + p^m)^{1/m}}, \quad (1)$$

де  $1/K_1^*$  - константа;  $n^0$  - навантаження насичення;  $m$  – емпіричний параметр ( $0 < m < 1$ ).

Рівняння Тота було змінено із додаванням можливості підбирати параметри для функції, що описує залежність навантаження насичення від температури:

$$n^0 = n^* (1 - \alpha(T - T_{nbp})), \quad (2)$$

де  $T_{nbp}$  - температура кипіння;  $\alpha$ ,  $n^*$  - емпіричні параметри.

Константа  $K_1^*$  була описана функцією

$$K_1^* = \frac{1}{K_b} \exp\left(\frac{U_0}{RT}\right), \quad (3)$$

$$K_b = 2.346\sqrt{MT} \times 10^8, \quad (4)$$

де  $M$  – молярна маса;  $R$  – універсальна газова константа;  $U_0$  – емпіричний параметр.

Для параметра  $m$  використано рівняння

$$m = m_1 - \frac{m_2}{T}, \quad (5)$$

де  $m_1$ ,  $m_2$  - емпіричні параметри.

Критерієм підбору параметрів була мінімізація відносного квадратичного відхилення, що розраховане за формулою:

$$\Delta = \frac{(n(i)_{\text{обч}} - n(i)_{\text{вим}})^2}{n(i)_{\text{вим}}^2}, \quad (6)$$

де  $n(i)_{\text{обч}}$  – кількість адсорбованої речовини, що була розрахована;  $n(i)_{\text{вим}}$  - кількість адсорбованої речовини за результатами експерименту.

**Результати досліджень.** Досліди проводилися для адсорбенту NaY при двох значеннях температури: 51 та 92°C. В результаті досліджень були отримані ізотерми адсорбції HFC-134a та HFC-134 [1].

На рис. 1 представлена результати перевірки моделі Тота для отриманих експериментальних даних. Значення параметрів для (1) були отримані шляхом мінімізації відносного квадратичного відхилення (6). Для даного випадку  $n^0=3,8$ ;  $1/K_1^*=5,47$ ;  $m=0,57$ ; середнє  $\Delta=0,004$ .

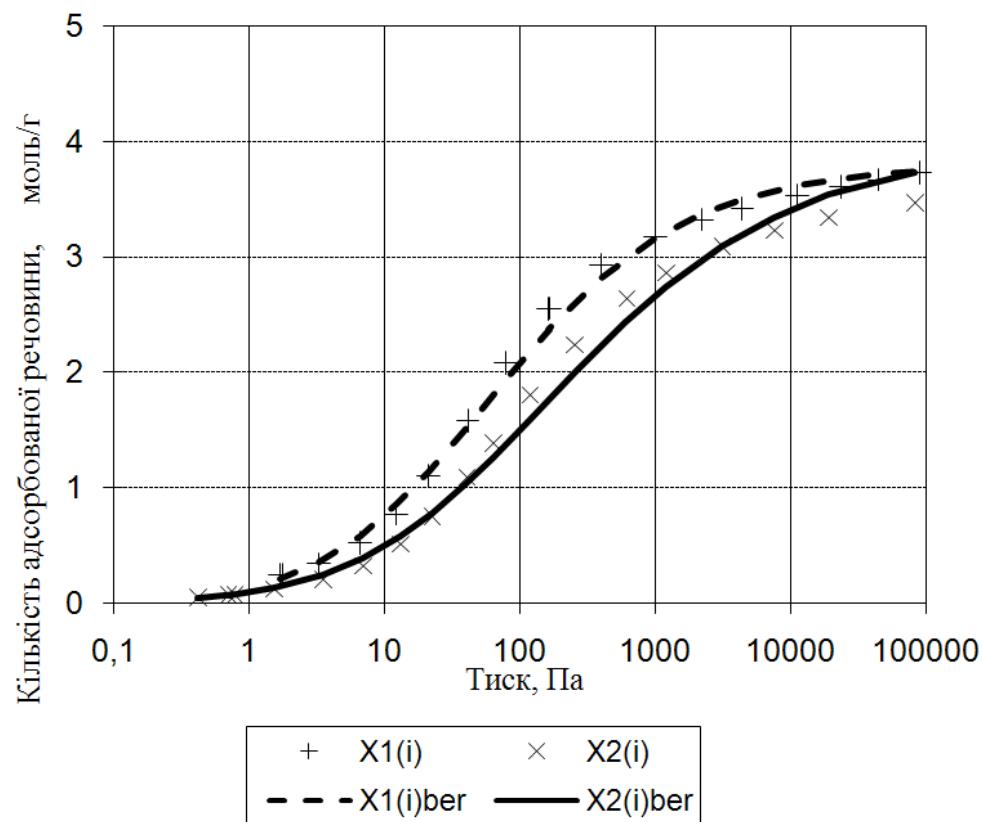


Рис. 1 – Ізотерми адсорбції HFC-134 та HFC-134a на NaY при  $T=51^{\circ}\text{C}$ :  
 X1(i), X2(i) – експериментальні дані для HFC-134 та HFC-134a відповідно;  
 X1(i)ber, X2(i)ber – дані, отримані за рівнянням Тота

**Висновки.** Були проведені експерименти та отримані ізотерми адсорбції ізомерів тетрафторетану HFC-134a та HFC-134 на NaY в різних температурних режимах. Отримані ізотерми показують, що цеоліт NaY може бути застосований для розділення ізомерів тетрафторетану при їх виробництві, оскільки має чітко виражену селективність до HFC-134a. Крім того даний адсорбент може бути використаний в процесах пов’язаних із утилізацією даних фреонів і зменшення їх викидів у атмосферу. Отримані результати можуть бути використані для синтезу систем управління процесами адсорбції як вихідні дані для розробки математичної моделі процесу, а також як складова бази знань про адсорбцію [3]. Була розглянута математична модель Тота процесу адсорбції, показано, що вона добре описує експериментально отримані дані для однокомпонентної адсорбції.

1. Кваско М. З., Жураковська О.С., Жураковський Я.Ю. Дослідження ізотерм адсорбції тетрафторетану на цеоліті NaY. - Рибне господарство України. – 2011. - № 2. – С. 48-52.
2. Mersmann A. Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Methoden/ A. Mersmann, M. Kind, J. Stichlmair// Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, – 2005. – 644p.
3. Savitz S. Adsorption of Hydrofluorocarbons HFC-134 and HFC-134A on X and Y Zeolites: Effect of Ion-Exchange on Selectivity and Heat of Adsorption/ S. Savitz, F. R. Siperstein, R. Huber, S. M. Tieri, R. J. Gorte, A. L. Myers, C. P. Grey, D. R. Corbin// J. Phys. Chem. B. – 1999. – Vol. 103. – №39. – P. 8283-8289.

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕЧІЇ ГАЗУ  
В ІНЕРЦІЙНО-ФІЛЬТРУЮЧОМУ (ІФ) ГАЗОСЕПАРАЦІЙНОМУ ЕЛЕМЕНТІ**

Логвин А.В., Аль Раммахі Мустафа М.М.

Сумський державний університет, logvin@pohnp.sumdu.edu.ua

Розвиток технологій комп'ютерного моделювання все більше входить до наукової практики, так як алгоритми стають більш точними та прогресивними. Застосування віртуального моделювання при проектуванні газосепараційних апаратів дозволяє зменшити час та витрати для досягнення високого ступеня розділення газорідинних сумішей.

Завдання досліджень — моделювання двовимірних течій газового потоку в каналі ІФ сепаратора з метою візуалізації цих течій методами комп'ютерної графіки в існуючих конструкціях [1-4] та розробка рекомендацій, щодо профілювання каналу.

Для створення 3D геометричних моделей на даному етапі розвитку комп'ютерної техніки може застосовуватися багато різноманітних продуктів. Нами була обрана програма компанії АСКОН Kompas 3D V8 plus. Після чого за допомогою програмного продукту COSMOS FlowWorks 2006 Pre-Release (<http://www.cosmosm.com/>) CAD-системи SolidWorks 2006 (<http://www.solidworks.com/>) було проведено моделювання течії газового потоку.

Для моделювання було вибрано дві жалюзі, які розташовані на відстані. Для проведення дослідження потрібно адаптувати отриману модель. Для цього всі вільні входи і виходи заміняються так званими «кришками». Після цього задаюся граничні умови (Boundary conditions). В нашому випадку був заданий тиск при вході протока до жалюзі, а також масова витрата газу на виході із елемента. Також для запуску розрахунку треба виділити цілі розрахунку (Goals). Після виділення цілей розрахунку треба запустити програму розрахунку. Після закінчення розрахунку можна вже дивитися і оцінювати отримані результати. Це можливо за рахунок побудови графіків, а також заливання різними кольорами всього об'єму елементу або вибраних поверхонь.

При використанні автоматичного способу побудови графіків зміни будь-яких величин застосовується метод ітерацій.

Приклади отриманих графіків наведені нижче.

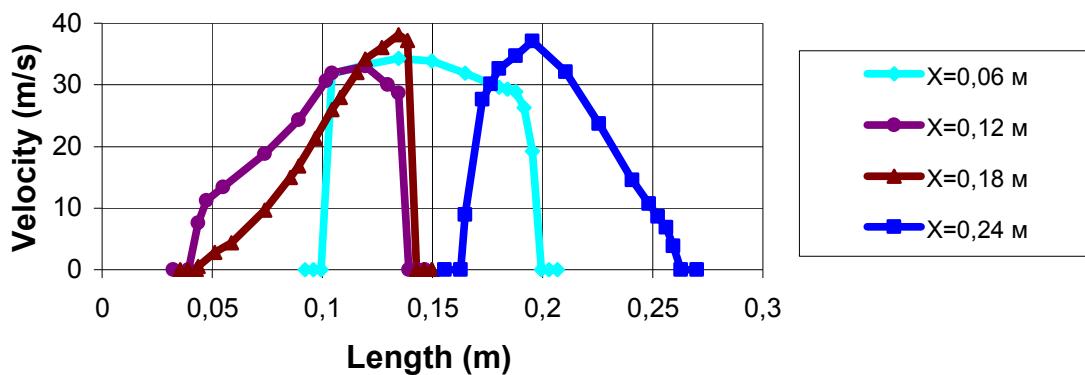


Рис. 1 – Графіки зміни складових швидкості по перерізу каналу.

Візуалізацію результатів розрахунку здійснено за допомогою постпроцессора. Аналіз може вироблятися як у процесі розрахунку, так і після його закінчення. Постпроцессор надає великий вибір методів візуалізації скалярних і векторних змінних на різних геометричних об'єктах, а також дозволяє зберігати дані у файл для обробки іншими засобами.

Отримавши вигляд поля швидкостей можна побачити, що у впадинах жалюзі швидкість майже дорівнює нулю. Тобто при використанні даної конструкції потрібно мати гофри трохи іншої форми, аби потік заповнював весь поперечний переріз. Зі збільшенням кількості гофр поле швидкостей поступово вирівнюється, тобто при використанні достатньо

великої кількості гофр в жалюзі ми можемо отримати ламінарний режим течії потоку, а це приведе до значного зниження ефективності роботи елемента.

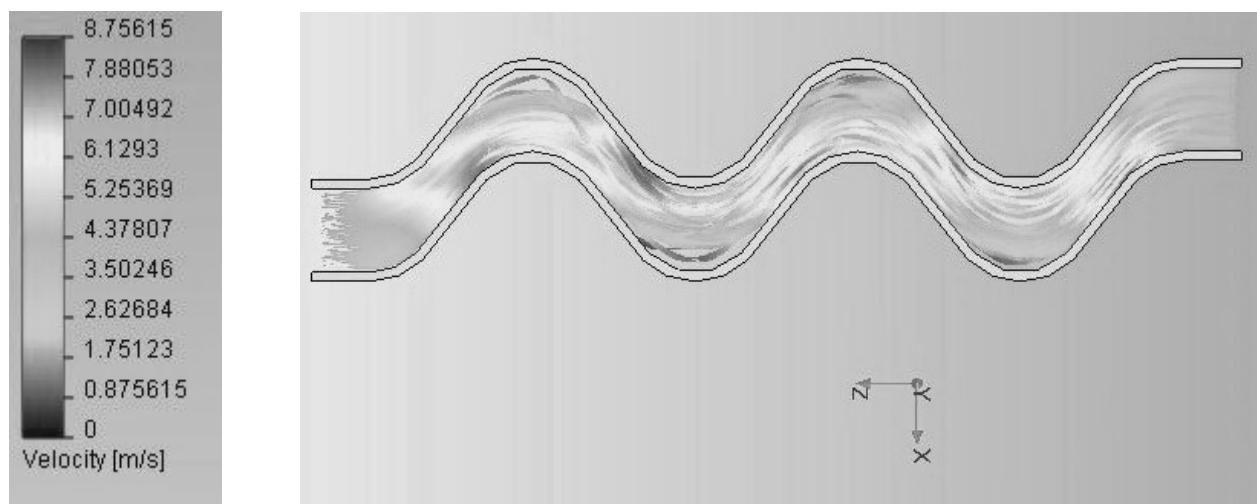


Рис. 2 — Візуалізація результатів моделювання двовимірної течії потоку природного газу по криволінійному сепараційному каналу жалюзійного елемента:  
зміна поля швидкостей

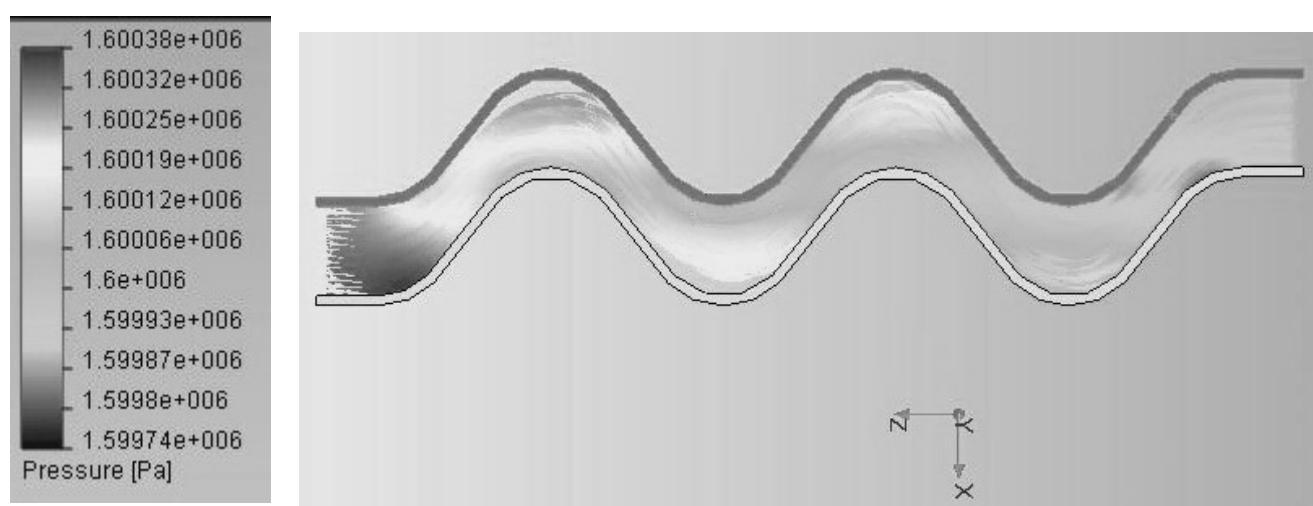


Рис. 3 - Візуалізація поля тисків по всьому перерізу жалюзі

В результаті отримання результатів розподілення поля тиску можна побачити, що поступово значення локальних тисків майже вирівнюється по всьому перерізу. Але також проаналізувавши отримані дані ми побачили, що при набіганні потоку на гофру утворюється зона підвищеної тиску, а після її огинання з іншої сторони гофри утворюється зона пониженої тиску. Це дає змогу покращити геометрію елементу, а також за рахунок цього підвищити його ККД.

Аналізуючи векторні зображені локальні швидкості можна побачити. Як вони змінюються при русі потоку на кожному відрізку руху по елементу. Це дає змогу побудувати ізолінії однакових швидкостей. При такому завданні швидкостей руху можливо більш ретельно побачити зони вихроутворень та аномальної поведінки потоку, якщо таке має місце.

При використанню продукту COSMOS FlowWorks ми отримали ряд переваг. По-перше в цьому продукті можна задавати лише геометрію того пристрою який досліджується, на відміну від інших продуктів, де потрібно задавати трьохвимірну модель самого потоку руху потоку. При отриманні візуалізації результатів ми маємо змогу отримати значення всіх параметрів, які нас цікавлять в кожній точці потоку. Це дає змогу більш точно проводити сам процес дослідження і згідно цього покращувати конструкцію елементу.

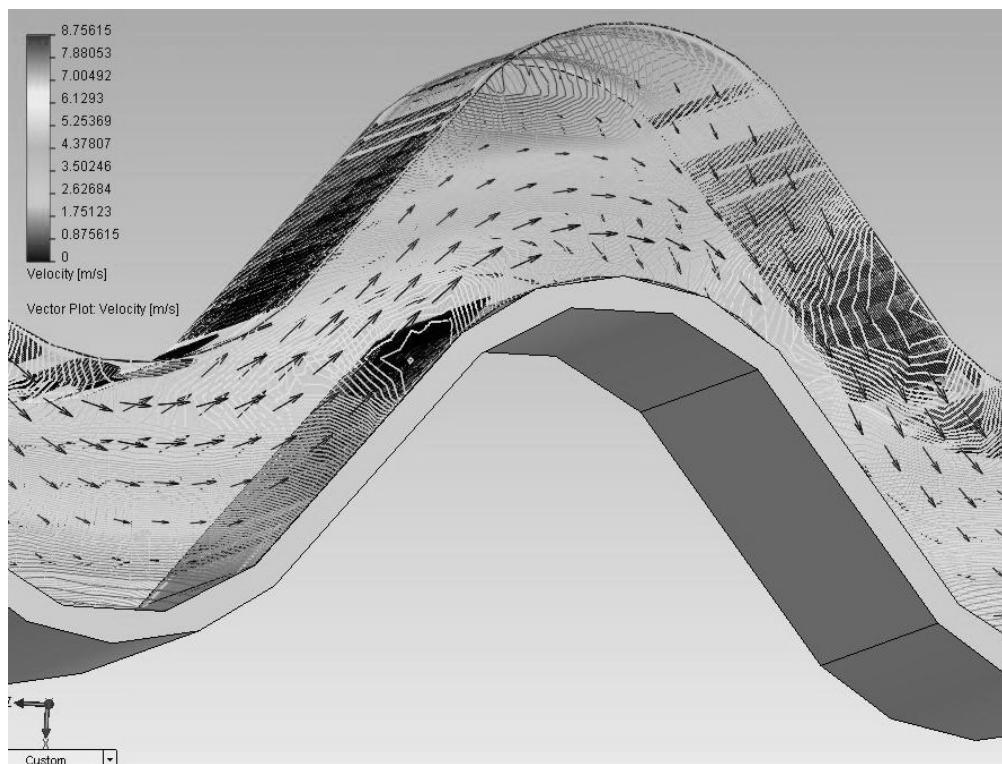


Рис. 4 - Візуалізація векторного показання напряму локальних швидкостей, а також ізоліній швидкостей

Отримані дані оброблені в масиви даних, що характеризують зміну швидкості газу при зміні геометрії каналу (радіус гофри, прямолінійна ділянка, кут розкриття). Поліноми, що апроксимують дані, будуть в подальшому використовуватися для розрахунку швидкості крапель та вирахування координат розташування фільтра.

1. *Ляпощенко О.О.* Гідродинаміка інерційно-фільтруючих сепараційних пристрій очищення природного газу. [Текст] : дис. ... канд. техн. наук : 05.17.08 : захищена 18.05.06 : затв. 04.07.06 / Ляпощенко Олександр Олександрович. – Суми, 2006. – 152 с. – Бібліогр.: с. 137–149.
2. *Декл. пат. №69701* А Україна, МПК 7 B01D45/04. Спосіб вловлювання високодисперсної краплинної рідини з газорідинного потоку і пристрій для його здійснення / В.І. Склабінський, О.О. Ляпощенко. - №20031110451; заявлено 20.11.2003; надрук. 15.09.2004, Бюл. №9, 2004 р.
3. *Пат. на винахід №88558* С2 Україна, МПК B01D45/04. Спосіб вловлювання високодисперсної краплинної рідини з газорідинного потоку і пристрій для його здійснення / Склабінський В.І., Ляпощенко О.О., Логвин А.В., Міщенко О.С. – №200802372; заявлено 25.02.2008; надрук. 26.10.2009, Бюл. №20, 2009.
4. *Пат. на корисну модель №56067* У Україна, МПК B01D45/04. Спосіб вловлювання високодисперсної краплинної рідини з газорідинного потоку / Склабінський В.І., Ляпощенко О.О., Артюхов А.Є, Логвин А.В., Коробченко К.В. – №201007411; заявлено 14.06.2010; надрук. 27.12.2010, Бюл. №24, 2010.

## ДВИЖЕНИЕ И СЕПАРАЦИЯ ТВЕРДОЙ ЧАСТИЦЫ В ЦИКЛОННОМ АППАРАТЕ

Шкварун К.Б., Безносик Ю.А., Ткач Н.А.

Национальный технический университет Украины «КПИ», k0styan@ukr.net

Циклоны являются наиболее характерными представителями сухих инерционных пылеуловителей, которые, как правило, имеют простую конструкцию, обладают большой пропускной способностью и несложные в эксплуатации.

В циклонных аппаратах формируются сложные потоки, аэродинамические параметры которых (скорости, давления, концентрации частиц загрязнителей и их фракционный состав) непрерывно меняются. Методы теоретического определения коэффициентов очистки из-за значительного расхождения результатов с опытом неприменимы для практического использования. Из эмпирических методов наиболее надежны расчеты по парциальным коэффициентам очистки, найденным экспериментально. В процессе работы *циклонные аппараты* подвергаются интенсивному износу вследствие абразивного воздействия частиц пыли на стенки, особенно при улавливании частиц крупных размеров. В наибольшей степени износу подвержены коническая часть циклона и бункер. Для их предохранения применяют покрытия из синтетических материалов и высокопрочных сплавов с высокой стойкостью к истирающему действию пыли. Анализ движения частиц дисперсной фазы в *циклонном аппарате* оказывается весьма сложным из-за непростого характера сил, действующих на частицы. Действительно, центробежная сила инерции при криволинейном движении частицы прижимает ее к внутренней стенке циклона. Со стороны стенки на частицу действует центростремительная сила нормальной реакции стенки. Эти две силы направлены по радиусу кривизны траектории частицы в каждой ее точке. В направлении движения частицы на нее действует сила трения со стороны стенки, причем величина этой силы зависит от нормального давления частицы на стенку и от величины коэффициента трения между ними. Коэффициент трения является функцией свойств материала частицы, ее формы и состояния поверхности стенки циклона.

Определяющими характеристиками циклонных пылеуловителей являются эффективность сепарации и гидравлическое сопротивление. Известные методы расчета, основанные на использовании эмпирических вероятностных функций, описывающих параметры фракционной эффективности циклонных пылеуловителей и дисперсный состав пыли, не отличаются большой точностью. Это обусловлено тем, что функции массового распределения частиц по размерам многих промышленных пыли не удовлетворяют логарифмически-нормальному закону из-за действия нескольких механизмов пылеобразования. Использование некоторых методов затруднительно из-за их многоэтапной, сложности и трудоемкости получения исходных данных для расчета.

Выделение частиц из запыленного газа при его криволинейном движении широко распространено в практике газоочистки. Имеется большое количество публикаций по вопросу сепарации частиц из газовзвеси, известно большое количество устройств с приемлемыми технико-экономическими показателями. Процесс пылеотделения состоит из нескольких этапов: закрутка потока, концентрирование и вывод частиц из сепарационной зоны, формирование слоя в приемнике, удаление уловленной пыли из приемника. Нарушение любого из этапов приводит к неудовлетворительной работе пылеуловителя. Большое распространение получили аппараты с дополнительными (выносными) устройствами для осаждения, образующегося в них пылевого концентрата. Они компактны, позволяют размещать выносное устройство в добном для выгрузки уловленной пыли месте. В качестве выносного устройства чаще всего применяют противоточные циклоны с собственными приемниками пыли. Центробежные пылеуловители условно можно разделить на следующие группы:

- аппараты с повышенной транспортирующей способностью потока концентрата пыли, в которых транспортирующая скорость вблизи стенки равна окружной скорости потока (спирально-вихревые аппараты);

- аппараты, в которых скорость транспортирования концентрата частиц к пылевыводному каналу соизмерима с окружной скоростью потока (ротоклоны, прямоточные циклонные пылеотделители);

- аппараты, в которых скорость транспортирования концентрата частиц к пылевыодному каналу намного ниже тангенциальной скорости (высокоэффективные противоточные циклоны).

В условиях производства пылеуловители работают в иных, нежели в испытательных лабораториях условиях. В практике аппараты работают в условиях абразивного износа, залипания пыли, зависания пыли, сводообразования в выгрузных устройствах, изменений условий сепарации при нестационарности концентраций пыли в потоках. Существует большое разнообразие центробежных пылеуловителей. Выбор осуществляется на основе экспериментальных, эксплуатационных данных применения аппаратов. В процессе выделения пыли из газонесущего потока дисперсная среда из аэрозольного состояния с порозностью  $\epsilon > 0.999$  переходит в состояние насыпного слоя с  $0.95 > \epsilon > 0.4$ . Порозность - это отношение объема газа к выделенному объему, занимаемому двухфазной средой. Для порозности, близкой к единице, полагают, что присутствие частиц не влияет на движение газа. Движение частиц определяется воздействием массовых и поверхностных сил со стороны несущего газа. Величина  $\epsilon$  для дисперсной среды в насыпном состоянии зависит от размеров частиц, свойств газа и поверхности частиц: толщины адсорбированной газовой оболочки, величины поверхностного электрического заряда частиц, капиллярных взаимодействий и т.д. Рассмотрим характеристики потока подлежащего очистке, а также свойства дисперсного материала в насыпном состоянии. Далее кратко рассмотрим, как частицы взаимодействуют между собой.

Поступающий в систему газоочистки дисперсный материал состоит из совокупностей первичных частиц, агрегированных частиц, и представляет вместе с несущей средой аэрозоль. В другом состоянии он находится в виде отложений или представляет насыпное тело. Агломераты образуются в результате турбулентной коагуляции, при срыве потоком отложений с поверхностей, при пересыпках материалов, при сегрегации частиц в результате его транспортировки в различных устройствах. Прочность агломератов зависит от прочности индивидуальных контактов частиц  $F$ , координационного числа, пористости  $\Pi$ , а также размера исходных частиц  $d_a$ . Агломерат в виде шара, состоящий из множества частиц, обтекаемый потоком, испытывает раздавливающее воздействие перепада давления в лобовой части. Возникающие при этом боковые усилия способствуют разъединению частиц, причем напряжения разъединения пропорционально перепаду давления, поскольку частицы связаны аутогезионными силами. При обтекании агломерата более мелкими частицами возможно эрозийное разрушение его тела или, наоборот, захват мелких частиц агломератом.

Время релаксации частиц - это время, в течении которого частица, попавшая в поток, последует за потоком. Изменение скорости течения газа приводит к тому, что частица либо ускоряется, либо замедляется, приспосабливаясь к несущему ее потоку. Поэтому сила инерции  $F_{ин}$  может быть приближенно определена как скорость относительного движения  $\Delta U$ , умноженного на массу  $m$  и деленная на время релаксации  $t_r$ ,  $F_{ин} \sim m\Delta U/t_r$ . Механизм переноса количества движения и массы в турбулентном потоке идентичен, поэтому коэффициент турбулентной диффузии газа принимают равным коэффициенту турбулентной вязкости. Для потока в цилиндрической трубе коэффициент турбулентной диффузии частиц определяется диффузией энергоемких вихрей, частота пульсаций которых пропорциональна скорости потока и обратно пропорциональна размеру потока (радиусу трубы).

Приводится решение уравнения движения частицы в циклоне с учетом инерционных эффектов относительного движения частиц. Уравнение составлено в неподвижных цилиндрических координатах с учётом сил инерции, сопротивления и внешней силы для нисходящего потока, обусловленной радиальным стоком. Математическая модель (1) - (6) описывает движение и скорость движения твердой частицы в циклонном аппарате.

$$\frac{dw_r}{d\tau} = \frac{w_\varphi^2}{r} + Q(w_{rz} - w_r) \quad (1)$$

$$\frac{dw_\varphi}{d\tau} = -\frac{w_r \cdot w_\varphi}{r} + Q(w_{\varphi z} - w_\varphi) \quad (2)$$

$$\frac{dw_z}{d\tau} = Q(w_{zr} - w_z) \quad (3)$$

$$\frac{dr}{d\tau} = w_r \quad (4)$$

$$\frac{d\varphi}{d\tau} = \frac{w_\varphi}{r} \quad (5)$$

$$\frac{dz}{d\tau} = w_z \quad (6)$$

Решение данной системы происходит при начальных условиях (7) - (12):

$$w_\varphi = w_{\varphi z} = r_{\text{нач}} \quad (7)$$

$$w_r = w_{rz} = 0 \quad (8)$$

$$w_z = w_{zr} = -0.32 \quad (9)$$

$$r_{\text{нач}} = r_1, r_2 \quad (10)$$

$$z_{\text{нач}} = -z_1, -z_2 \quad (11)$$

$$\varphi_{\text{нач}} = 0 \quad (12)$$

где  $w_{rz}$ ,  $w_{\varphi z}$ ,  $w_{zr}$  - составляющие скорости газа в цилиндрической системе координат;  $w_r$ ,  $w_\varphi$ ,  $w_z$  - составляющие скорости частицы;  $r_{\text{нач}}$ ,  $\varphi_{\text{нач}}$ ,  $z_{\text{нач}}$  - начальные координаты частицы;  $Q$  - множитель который учитывает физические свойства процесса пылеулавливания и частиц;  $r$  - начальный радиус траектории газа;  $r_1$ ,  $r_2$  - границы движения частицы по  $r$  составляющей;  $-z_1$ ,  $-z_2$  - границы движения частицы по  $z$  составляющей;  $dw_{rz}$ ,  $dw_{\varphi z}$ ,  $dw_{zr}$  - составляющие скорости газа в дифференциальной форме;  $dw_r$ ,  $dw_\varphi$ ,  $dw_z$  - составляющие скорости частицы в дифференциальной форме.

В результате решения данной системы мы получаем набор данных, которые описывают скорость и положение частицы в циклонном аппарате. Далее по этим данным строим график, на котором можно проследить, что частица двигается внутри газового потока и вылет за пределы него не наблюдается. В конце траектории частица покидает газовый поток, и чистый газ двигается далее к выходу. Это показывает, что математическая модель составлена правильно, и ее можно использовать для расчета аналогичных процессов и определения эффективности циклонного аппарата до его конструирования. Математическая модель выведена таким образом, что все соотношения, входящие в нее безразмерны, т.е. модель подлежит масштабирование, или другими словами, ее можно применить к другим циклонным аппаратам, так как при вводе необходимых данных все зависимости будут пересчитаны и модель будет подстроена уже под другой аппарат. Далее представлены графики движения частиц в рабочей зоне циклонного аппарата и график составляющих скоростей газа в циклоне.

Для решения представленной системы был написан программный модуль в программном продукте Visual Studio 2010. В программу вводятся начальные данные, и нажимается кнопка пуск, после чего выводятся результаты расчета. На рис.1 изображена форма ввода начальных данных:  $dt_{\text{max}}$  – максимальный диаметр частицы, м;  $ro_g$  – плотность газа, кг/м<sup>3</sup>;  $w_{\text{max}}$  – максимальная скорость газа, м/с;  $ds$  – средний диаметр частицы, м;  $ws$  – средняя скорость частицы, м;  $ro_t$  – плотность частицы, м;  $nu_g$  – вязкость газа, мПа\*с;  $F_{vh}$  – площадь сечения входного патрубка, м<sup>2</sup>;  $F_{kol}$  – площадь сечения рабочей зоны аппарата, м<sup>2</sup>;  $R$  – радиус частицы, мкм.

Графическая интерпретация результатов счета представлена на рис. 2 – 4.

На рис. 2. показан график движения частиц в цилиндрической системе координат. На нем видно, что угловая составляющая ( $a_4(z_2)$ ) постоянна, а радиальная и  $z$  составляющая изменяются, как и должно быть исходя из математической модели.

Как видно из рис. 3 осуществлен переход от цилиндрической системы координат в прямоугольную и более наглядно показано как двигаются частицы. Частицы движутся к нижней части циклона, и на графике где их концентрация уплотняется, они покидают циклон.

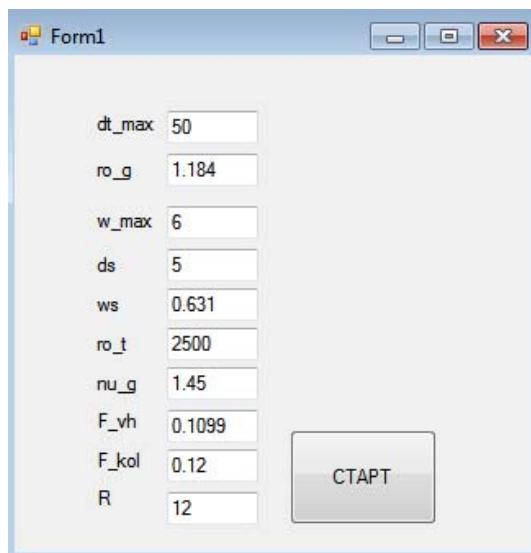


Рис. 1 – Форма ввода начальных данных для расчета движения и сепарации частиц

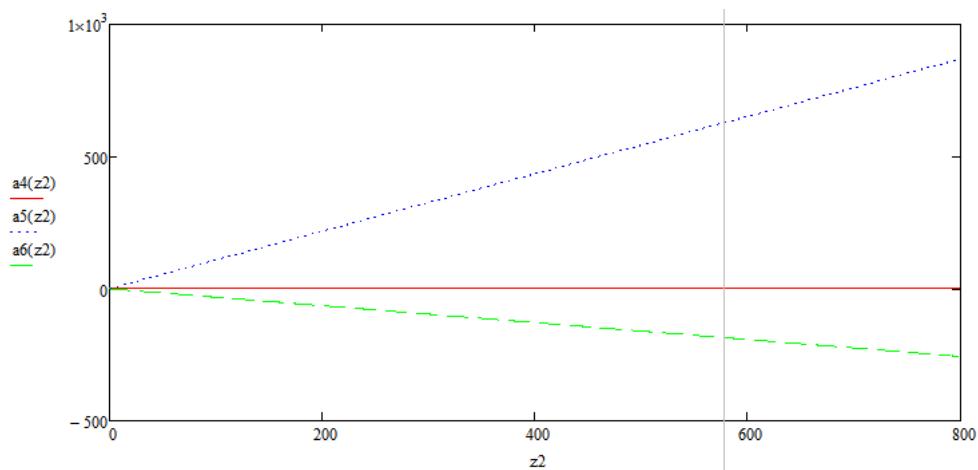


Рис. 2 – График движения и сепарации частиц в циклонном аппарате

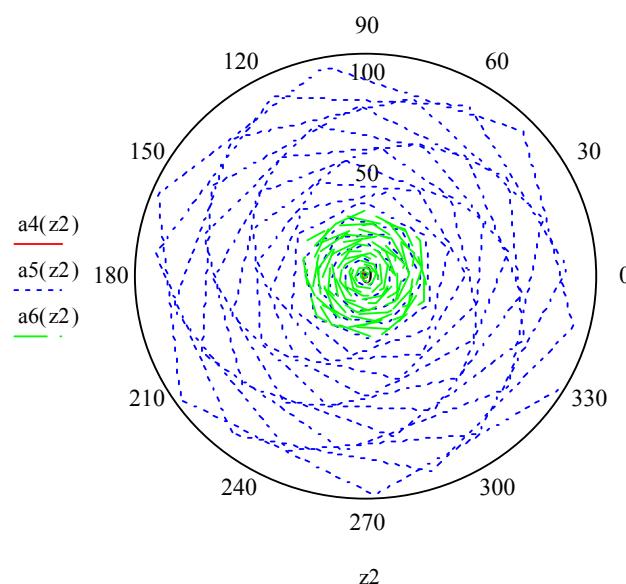


Рис. 3 – График движения частицы в циклонном аппарате

На рис.4. видно, что скорость газа по всем составляющим не меняется, т.е. газ в рабочей зоне движется с постоянной скоростью, и значит частицы не будут покидать газовый поток до того времени как они достигнут нижней части циклона и будут отсеяны.

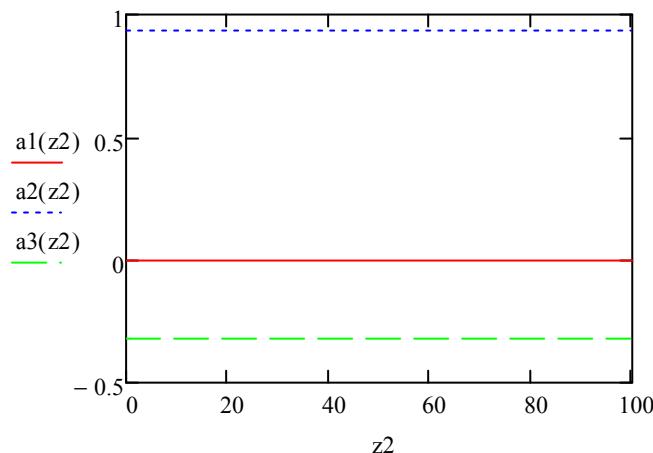


Рис.4 – График скорости газа в рабочей камере циклона

Частицы в циклонном аппарате удаляются достаточно хорошо при росте газового потока, и размера частиц до 100 мкм. Хотя при некоторых скоростях наблюдается вынос частиц из запыленного потока и попадание их в чисты поток (обычно происходит если частица не последовала за потоком, т.е. не было времени релаксации частицы).

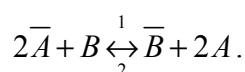
1. Арсеньев, В.В. Математическая модель процесса пылеулавливания в циклонном аппарате [Текст] / В.В. Арсеньев, С.А. Богатых. — Ленинград, 1983. — 15 с. — Библиогр.: с. 14-15.

## МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІКИ РІВНОВАЖНОГО ОБМІНУ РІЗНОЗАРЯДНИХ ІОНІВ

Концевой А.Л., Концевой С.А., Таргонська О.О.

Національний технічний університет України «КПІ», kontsev@xtf.kpi.ua

**Рівновага іонного обміну.** Реакції обміну, наприклад,  $2RNa + Ca^{2+} = R_2Ca + 2Na^+$  за участю двовалентних (двозарядних) іонів, наприклад, обмін іонів  $Mg^{2+}$ ,  $Ca^{2+}$  (далі позначено як B) на  $H^+$  (знесолення води) або  $Na^+$  (пом'якшення води) — (позначено A) — це найпоширеніші випадки при обробці води, при цьому частина іонів  $\bar{A}$  в іоніті заміняється іонами  $\bar{B}$ :



В стані рівноваги швидкості прямої і оборотної реакцій рівні і згідно закону діючих мас:

$$k_1 \cdot Q_A^2 \cdot C_B = k_2 \cdot Q_B \cdot C_A^2 \quad (1)$$

де  $k_1$ ,  $k_2$  — константи швидкості прямої і оборотної реакцій;  $Q_A = \frac{q_A}{q_0}$ ,  $Q_B = \frac{q_B}{q_0}$  — відносні

концентрації іонів A та B, що обмінюються, у фазі іоніту;  $C_A = \frac{c_A}{c_0}$ ,  $C_B = \frac{c_B}{c_0}$  — відносні

концентрації іонів A та B у фазі розчину, при цьому концентрації A і B у розчині  $c_A + c_B = c_0$ ,

а в іоніті  $q_A + q_B = q_0$ . Якщо взяти до уваги, що  $Q_A + Q_B = 1$  та  $C_A + C_B = 1$ , то у стані рівноваги рівняння швидкості прямої і зворотної реакцій (1) можна записати у вигляді:

$$k_1 \cdot (1 - Q_B)^2 \cdot C_B = k_2 \cdot Q_B \cdot (1 - C_B)^2 \quad (2)$$

Розв'язок рівняння (2) відносно  $Q_B$  (константа рівноваги обміну  $k = k_1/k_2$ ) має вид:

$$Q_B = 1 + \frac{(1 - C_B)^2}{2kC_B} - \sqrt{\left(1 + \frac{(1 - C_B)^2}{2kC_B}\right)^2 - 1}. \quad (3)$$

Виходячи із рівності:

$$k_1 \cdot Q_A^2 \cdot (1 - C_A) = k_2 \cdot (1 - Q_A) \cdot C_A^2. \quad (4)$$

Отримано аналогічне рівняння для компонента  $A$ :

$$Q_A = \frac{-C_A^2 + C_A \sqrt{C_A^2 + 4k \cdot (1 - C_A)}}{2k \cdot (1 - C_A)}. \quad (5)$$

Таким чином, рівняння (3) і (5) є, відповідно, рівняннями випуклої (дволентні іони) та увігнутої (однолентні іони) ізотерми обміну різновалентних (різномарядних) іонів, при цьому в обох рівняннях використано одне значення константи  $k = k_1/k_2$ . Відмітимо, що рівняння подібне рівнянню (5), отримано авторами [1] для процесу регенерації фільтру. Отримане нами рівняння (3) встановлює зв'язок безрозмірної концентрації двозарядного іону в іоніті від його безрозмірної концентрації у воді, що важливо саме для практичних цілей і умов. Нижче за текстом рівняння (3) використано вперше для аналізу динаміки іонного обміну.

Можливий варіант застосування рівняння увігнутої ізотерми на підставі рівняння (4) і нової константи рівноваги обміну  $k^* = k_2/k_1$ :

$$Q_A = \frac{-k^* C_A^2}{2(1 - C_A)} + \sqrt{\left(\frac{k^* C_A^2}{2(1 - C_A)}\right)^2 + \frac{k^* C_A^2}{1 - C_A}}. \quad (6)$$

Це відповідає звичному підходу –  $k > 1$  для опуклої ізотерми згідно рівняння (3),  $k^* < 1$  для увігнутої ізотерми згідно рівняння (6), тобто  $k^* = 1/k$ .

За даними ізотерм обміну  $\text{Cu}^{2+}/\text{Na}^+$  на катіоніті Дауекс-50Х8 (рис. 40 монографії [2]) складено наступну таблицю і розраховано значення константи  $k$  згідно рівняння (3). Розрахунок  $k$  проведено в середовищі Excel за допомогою надбудови «Пошук рішення», критерій пошуку – мінімальне значення суми квадратів відхилення експериментальних і розрахункових значень  $Q_B$ .

Результати розрахунку  $k$  наведено в таблиці, в якій також надано середнє відхилення, %, експериментальних і розрахункових значень  $Q_{\text{Cu}^{2+}}$ . Точність опису в даному випадку визначається точністю переводу графічних даних [2] у табличні. Залежність константи обміну від нормальності розчину Н з високою точністю апроксимується рівнянням:

$$\ln k = 0.9436 - 1.1783 \cdot \ln H.$$

Запропонований метод розрахунку є універсальним і може бути використаний і для обміну однозарядних іонів.

*Таблиця 1 – Залежність Q<sub>Cu2+</sub> від C<sub>Cu2+</sub> при різних концентраціях (нормальності Н) розчину CuCl<sub>2</sub> + NaCl*

<b>0,01Н</b>		<b>0,1Н</b>		<b>0,5Н</b>		<b>1Н</b>	
C <sub>Cu2+</sub>	Q <sub>Cu2+</sub>						
0	0	0	0	0	0	0	0
0,002	0,007	0,007	0,2	0,05	0,21	0,05	0,11
0,03	0,017	0,017	0,3	0,1	0,33	0,1	0,2
0,14	0,04	0,04	0,5	0,2	0,48	0,2	0,35
0,23	0,07	0,07	0,59	0,3	0,59	0,3	0,46
0,4	0,14	0,14	0,69	0,4	0,67	0,4	0,56
0,5	0,23	0,23	0,77	0,5	0,74	0,5	0,64
0,6	0,5	0,5	0,89	0,6	0,8	0,6	0,72
0,7	0,7	0,7	0,94	0,7	0,85	0,7	0,8
0,84	0,84	0,84	0,965	0,8	0,9	0,8	0,87
1	1	1	1	0,9	0,95	0,9	0,94
k=572,4		k=40,6		k=5,68		k=2,56	
%сервіdx=1,17		%сервіdx=2,38		%сервіdx=1,17		%сервіdx=0,69	

**Динаміка іонного обміну.** Динаміка обміну рівнозарядних іонів описана за допомогою моделі динаміки рівноважної ізотермічної адсорбції, що реалізована в середовищі MathCad [3]. Математичною моделлю роботи фільтра, що працює у рівноважних умовах, є система рівнянь, що складається з рівняння матеріального балансу і статики обміну. У випадку обміну різноварядних іонів рівнянням статики є рівняння (3), а рівняння матеріального балансу в безрозмірній формі має вид [3]:

$$\frac{\partial C(Z,t)}{\partial t} + V_{wave}(C) \frac{\partial C(Z,t)}{\partial Z} = 0. \quad (7)$$

Розрахунок хвильової швидкості  $V_{wave}$  здійснюється за наступним рівнянням, в якому враховано першу похідну від рівняння (3):

$$V_{wave}(Z,k) := \frac{rat}{\frac{-(1-C(Z)) - \frac{1}{2} \cdot \frac{(1-C(Z))^2}{k \cdot C(Z)}}{k \cdot C(Z)} - \frac{1}{\left[ 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{(1-C(Z))^2}{k \cdot C(Z)} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \left[ \frac{-(1-C(Z)) - \frac{1}{2} \cdot \frac{(1-C(Z))^2}{k \cdot C(Z)}}{k \cdot C(Z)} \right] + p \cdot rat}}. \quad (8)$$

У рівняннях (7) і (8);  $p$  – об’ємна частка води (порозність іоніту);  $Z$  - незалежна змінна – координата в безрозмірній і відносній формі  $Z=z/L$ ; незалежна змінна – час в безрозмірній формі  $t=\tau w/L$ ;  $z$  – направлення осі фільтру;  $L$  – висота завантаження іоніту;  $w$  – швидкість руху розчину у вільному перетині фільтру;  $\tau$  - час роботи фільтра у міжрегенераційний період;  $rat$  – безрозмірне розподільче співвідношення:  $rat = \frac{c_0}{q_0}$ .

Рівняння (7), до якого зводиться математична модель іонітного фільтра, являє собою квазілінійне однорідне рівняння в частинних похідних гіперболічного типу. Його рішення за допомогою метода характеристик в середовищі MathCad [3] використано нами з врахуванням особливості обміну різноварядних іонів, тобто з урахуванням рівнянь (3) і (8), з наступними вихідними даними: порозність іоніту:  $p:=0,6$ ; концентрація іону  $B(\text{Ca}^{2+})$  у воді,  $\text{г-екв}/\text{м}^3$ ,  $c_0:=6$ ; повна обмінна ємність катіоніту,  $\text{г-екв}/\text{м}^3$ ,  $q_0:=2000$ ; константа рівноваги для опуклої ізотерми  $k:=40,6$ ; лінійна швидкість води  $w:=10 \text{ м/год}$ ; висота шару іоніту  $L:=2,5 \text{ м}$ ; час роботи фільтра у міжрегенераційний період  $\tau := 20 \text{ год.}$ ;  $rat := 6/2000 = 0,003$ .

Границі значення координат точок  $Z$ :  $Z_{min}:=0$ ;  $Z_{max}:=1$ . Згідно вихідних даних час в безрозмірній формі  $t_{min}:=0$ ;  $t_{max}:=20 \cdot 10 / 2,5 = 80$ . Початкове розподілення концентрації

вздовж фільтра  $C(Z)$  задається як:

$$C(Z) := 0.99 \cdot e^{-(3 \cdot Z)^2}.$$

З урахуванням останнього виразу побудовано (рис. 1) дво- і тривимірні залежності концентрації двозарядного іону вздовж осі фільтру. Цифри 0, 40, 80 відповідають моментам безрозмірного часу  $t$ .

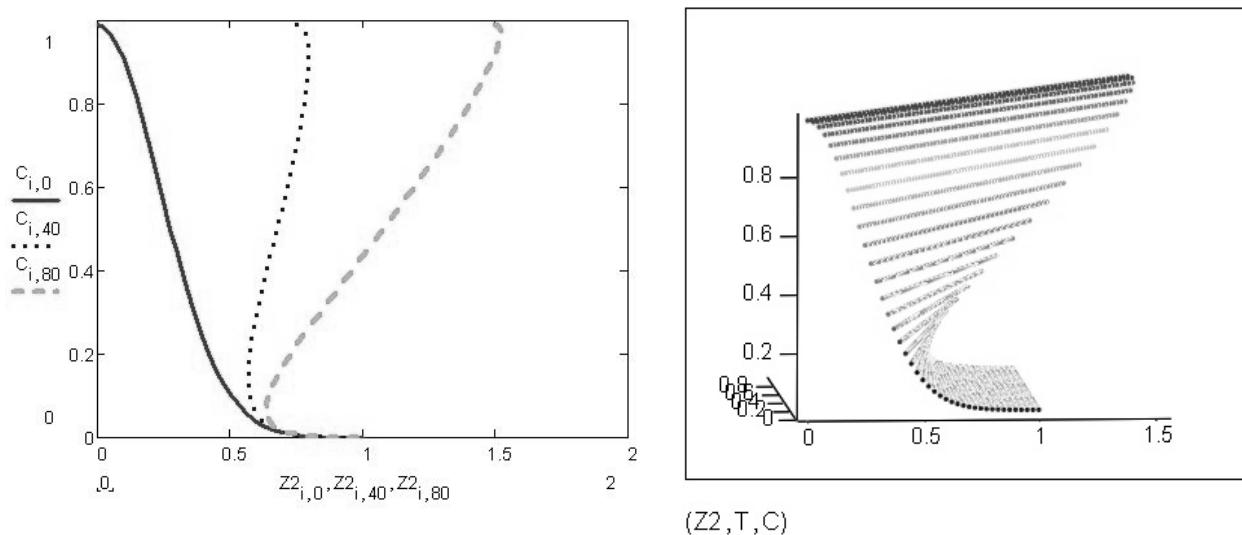


Рис. 1 – Двовимірна та тривимірна залежність концентрації двозарядного іону вздовж осі фільтру  $C_{i,0}$ ,  $C_{i,40}$ ,  $C_{i,80}$  від  $Z2_{i,0}$ ,  $Z2_{i,40}$ ,  $Z2_{i,80}$

Аналіз ходу кривих показує більш крутій характер обривного фронту (більше затиснення фронту обміну) для різнозарядних іонів в порівнянні з однозарядними [3]. Зі збільшенням константи обміну  $k$  (за даними таблиці) спостерігається ще більше затиснення фронту обміну для різнозарядних іонів. При  $k=1$  початковий розподіл зберігає свою конфігурацію в часі як для однозарядних, так і для різнозарядних іонів. Більш того, криві для всіх моментів часу в обох випадках співпадають. Розрахунки згідно вказаних вище вихідних даних і запропонованої математичної моделі свідчать про цілковиту можливість якісного очищення від двозарядних іонів в границях координати  $Zmax=1$  (висота завантаження іоніту  $L=2,5$  м).

- Громогласов, А.А. Водоподготовка: процессы и аппараты. [Текст] / А.А. Громогласов, А.С. Копылов, А.П. Пильщиков – Энергоатомиздат, 1990. – 272 с.
- Гельферих Ф. Иониты. Основы ионного обмена. [Текст] / М.: Изд-во иностранной литературы, 1962. – 491 с.
- Очков, В.Ф. Анализ изотерм ионного обмена в среде Mathcad. / В.Ф. Очков, А.П. Пильщиков, А.П. Солодов, Ю.В. Чудова // Теплоэнергетика, №7, 2003, с. 13 - 18.

## МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ЗОВНІШНЬОГО ТЕПЛООБМІНУ ПІДЧАС ФІЛЬТРАЦІЙНОГО СУШІННЯ

Барна І.Р., Атаманюк В.М.

Національний університет «Львівська політехніка», barnairuna@ukr.net

Серед промислових відходів одне з перших місць за обсягами займають золи та шлаки від спалювання твердих видів палива (вугілля різних видів, горючі сланці, торф) на теплових електрических станціях. Величезні кількості золи та шлаку нагромаджуються у відвалах, що займають цінні земельні угіддя. У той же час золи і шлаки теплових електрических станцій можна ефективно використовувати у виробництві теплоізоляційних будівельних матеріалів як вторинна сировина, що підтверджується науковими дослідженнями і практичним досвідом. В даний час одним з перспективних напрямків утилізації золошлакових відходів є виробництво з

них шлакового гравію. Технологія виробництва шлакового гравію передбачає попереднє сушіння сировини (шлаку та глини), а також сирцевих гранул утворених з шихти (86% шлаку та 14% глини). Як відомо, існуючі методи сушіння характеризуються значними енергетичними затратами, що відповідно впливає на собівартість отриманих будівельних виробів.

Відомо, що фільтраційний метод сушіння є високоінтенсивним, відповідає вимогам, які ставляться до сучасних технологій, а також екологічно безпечним. Фільтраційне сушіння характеризується рухом потоку теплового агенту в каналах зернистого шару складної форми, тому коефіцієнти тепловіддачі визначають на основі експериментально отриманих залежностей.

Експерименти проводилися на установці та за методикою наведеною в [1]. Для визначення усереднених коефіцієнтів тепловіддачі від теплового агенту до сухих частинок через шар профільтровували із заданою швидкістю і температурою тепловий агент.

Зафіксовані значення температури теплового агенту на виході із шару сухого матеріалу наведені на рис. 1.

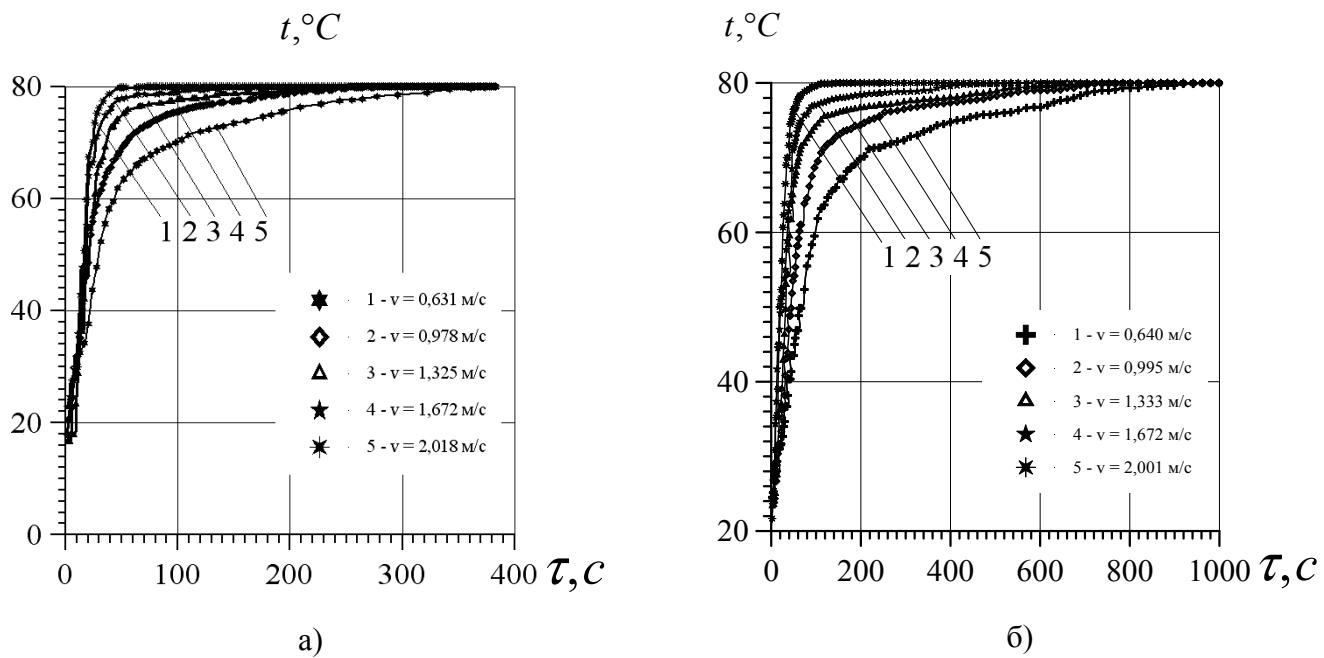


Рис. 1 – Зміна температури теплового агенту на виході із шару  
а) сухого шлаку та б) сухої глини

На основі отриманих експериментальних значень розраховували значення коефіцієнтів тепловіддачі  $\alpha$  для досліджуваних матеріалів згідно з рівнянням тепловіддачі [2]:

$$\alpha = \frac{\Delta Q}{F \cdot (\bar{t} - \bar{T}_{n.}) \cdot \Delta \tau} \quad (1)$$

Кількість теплоти, яка залишина в шарі  $\Delta Q$  розраховували згідно теплового балансу,  $\bar{t}$  - приймалося як середньоарифметична температура теплового агенту на вході і виході з шару згідно із замірами, наведеними на рис. 1,  $\bar{T}_{n.}$  - середня температура поверхні твердих частинок.

Температура поверхні є більшою від середньої температури частинки, проте виміряти температуру поверхні частинок шлаку та глини практично неможливо. З метою визначення температури на поверхні частинки розраховували середню температуру частинок шару з рівняння теплового балансу:

$$\Delta Q = m \cdot c_s \cdot (\bar{T} - T_0) \quad (2)$$

Вважали, що температура теплового агенту однаакова з усіх сторін частинки. Приймали, що розподіл температурного поля по об'єму частинки має параболічний характер, і температуру на поверхні частинки визначали із залежності [2]:

$$\bar{T} = \bar{t} - \left( \bar{t} - T_0 \cdot e^{-\mu_n^2 \cdot Fo} \right) \cdot \left( 1 - \frac{r}{R} \right) \cdot e^{-\mu_n^2 \cdot Fo} \quad (3)$$

де  $\bar{t}$  – середня температура теплового агента;  $R, r$  – радіус частинки і біжучий радіус відповідно ( $0 < r \leq R$ );  $\mu_n$  – корінь характеристичного рівняння;  $Fo$  – критерій Фур'є.

Залежність коефіцієнту тепловіддачі  $\alpha$  від дійсної швидкості фільтрування теплового агенту для шлаку та глини наведені на рис. 2.

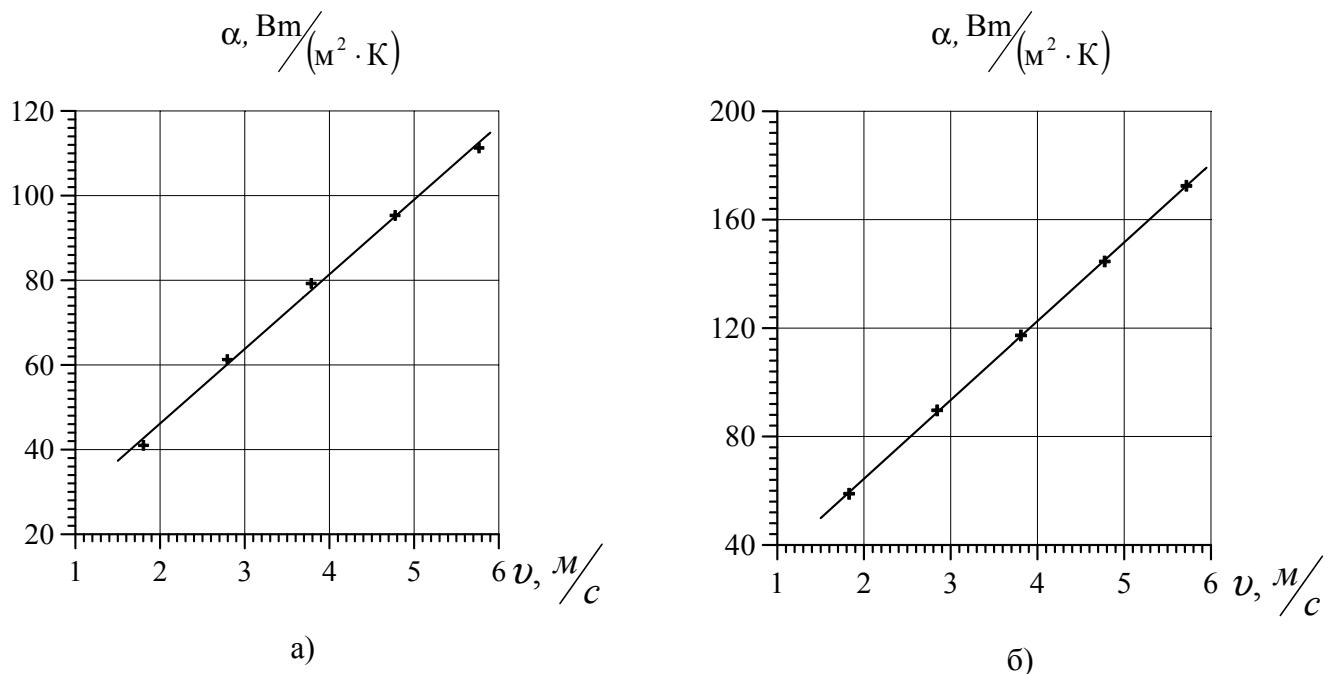


Рис. 2 - Залежність коефіцієнту тепловіддачі  $\alpha$  від дійсної швидкості  $v$  теплового агенту для а) сухого шлаку та б) сухої глини

Узагальнення експериментальних результатів наведених на рис. 2 проводили за рівнянням [3]:

$$Nu = A \cdot Re_e^n \cdot Pr^m \quad (4)$$

де  $Nu = \frac{\alpha \cdot d_e}{\lambda}$  – критерій Нусельта;  $Re_e = \frac{v \cdot d_e}{\nu}$  – критерій Рейнольдса;  $Pr = \frac{\nu}{a}$  – критерій Прандтля;  $\nu$  – коефіцієнт кінематичної в'язкості;  $a$  – коефіцієнт температуропровідності;  $v$  – дійсна швидкість фільтрування теплового агенту;  $d_e$  – еквівалентний діаметр каналів між частинками.

Для визначення невідомих коефіцієнтів "A" та "n" в залежності (4) експериментальні значення представляли у логарифмічній системі координат у вигляді:

$$\frac{Nu}{Pr^{0.33}} = f(Re), \quad (5)$$

кожна точка є середнім арифметичним значенням мінімум трьох експериментів.

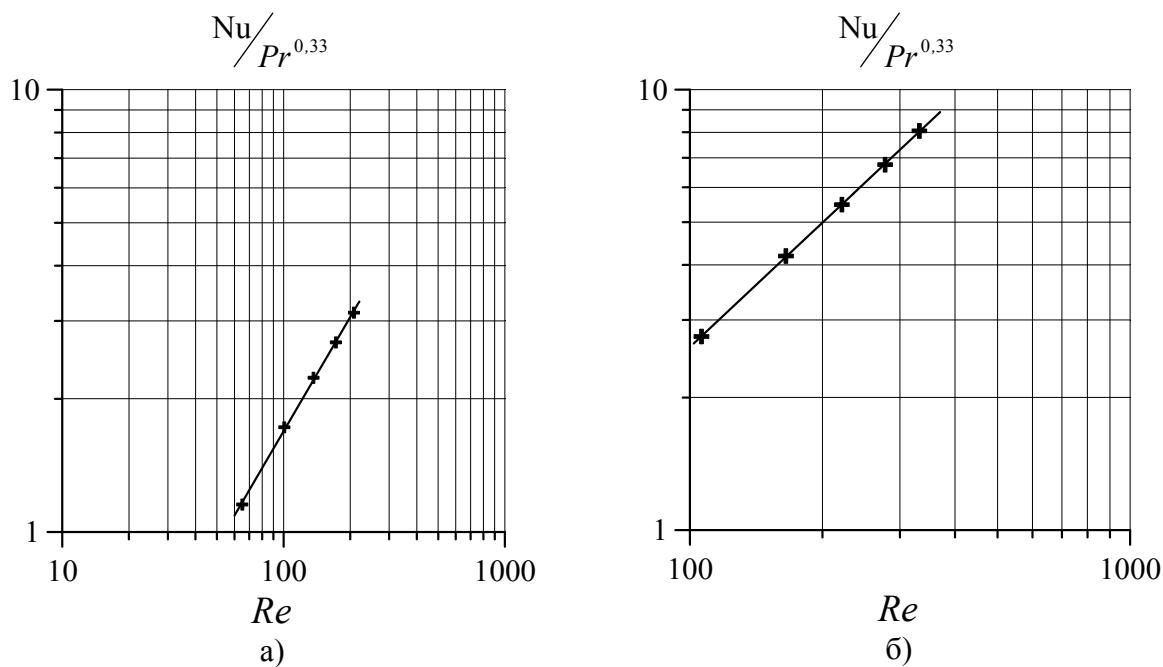


Рис. 3 - Залежність  $\text{Nu}/\text{Pr}^{0.33} = f(\text{Re})$  для  
а) сухого шлаку ( $H=10$  мм), б) сухої глини ( $H=15$  мм), за температури  $80^{\circ}\text{C}$

Визначивши невідомі коефіцієнти "A" та "n" рівняння (4) можна представити у вигляді:

$$- \text{для шлаку} \quad \text{Nu} = 0,03 \cdot \text{Re}^{0,9} \cdot \text{Pr}^{0,33} \quad (6)$$

$$- \text{для глини} \quad \text{Nu} = 0,05 \cdot \text{Re}^{0,9} \cdot \text{Pr}^{0,33} \quad (7)$$

Отримані залежності дають змогу науково обґрунтувати технологічні параметри теплового агенту залежно від теплофізичних характеристик шлаку та глини, і відповідно зменшити енергетичні затрати на процес сушіння.

1. Атаманюк В.М. Зовнішній тепломасообмін під час фільтраційного сушіння /В.М. Атаманюк/ Промышленная теплотехника. –К.: –2006, Т. 28, –№5, –С.47-54.
2. Лыков А.В. Теория тепло- и массопереноса /А.В. Лыков, Ю.А. Михайлов/ –М.: ГЭИ, 1963. – 353с.
3. Гельперин Н.И. Основные процессы и аппараты химической технологии./Н. И.Гельперин / В двух книгах. – М.: Химия, 1981. –812 с.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ КОНВЕРСИИ УГЛЕВОДОРОДОВ ВОДЯНЫМ ПАРОМ

Караванов А.А., Рыжов Д.А., Лаптева Т.В., Зиятдинов Н.Н.

Казанский национальный исследовательский технологический университет, k.ant@mail.ru

В связи с постоянным ростом цен на углеводородные энергоносители, во всем мире разрабатываются эффективные технологии получения синтез-газа/водорода с использованием нескольких видов сырья (природный газ, сжиженный газ, и др.). Поэтому актуальной является задача создание моделей, используемых для выявления оптимальных рабочих режимов, а также используемых в разработке АСУТП и имитационном моделировании ТП.

Наиболее совершенные технологии каталитической конверсии включают в себя несколько стадий (рис. 1). Здесь мы рассматриваем технологию, предназначенную для получения водорода. Достаточно высокое молярное соотношение  $\text{CH}_4/\text{H}_2\text{O} = 1/2$  позволяет избежать закоксовывание катализатора печи. Реактор предриформинга преобразует

углеводороды  $C_2$  и выше в метан на никелевом катализаторе, что также снижает коксообразование в печи.

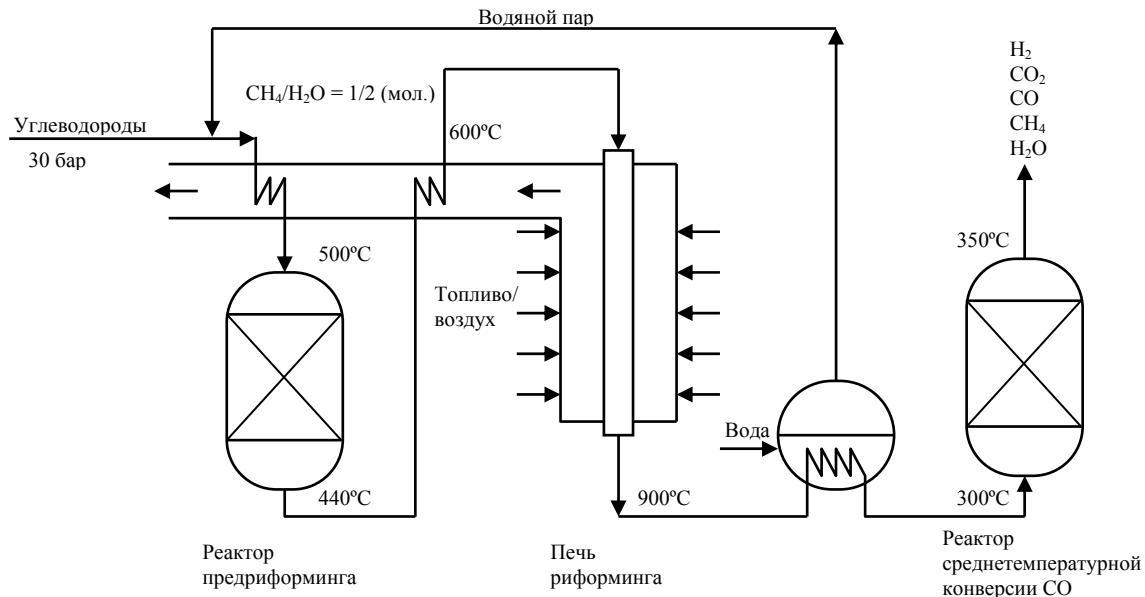


Рис. 1 – Схема каталитической конверсии природного/сжиженного газа водяным паром для получения водорода

Процесс каталитической конверсии углеводородов водяным паром включает в себя ряд обратимых химических реакций:



Для углеводородов с числом углеродов в молекуле  $\geq 2$ , уже при условиях в реакторе предриформинга, равновесие в реакции 1 полностью смещено вправо, а реакции протекают со значительными скоростями. Таким образом, считаем обратимыми только следующие три реакции:



Скорости для обратимых химических реакций (2)-(4) (рис. 2) на никелевом катализаторе (допускаем, что лимитирующая стадия процесса определяется химической кинетикой реакций) описываются уравнениями [1]:

$$r_1 = k_{f_1} \cdot c_{CH_4} \cdot c_{H_2O}^2 - k_{b_1} \cdot c_{H_2}^{0.25} \cdot c_{CO}, \quad (5)$$

$$r_2 = k_{f_2} \cdot c_{CO}^{0.85} \cdot c_{H_2O}^{0.65} - k_{b_2} \cdot c_{CO_2}, \quad (6)$$

$$r_3 = k_{f_3} \cdot c_{CH_4} \cdot c_{H_2O}^{1.25} - k_{b_1} \cdot c_{H_2} \cdot c_{CO_2}. \quad (7)$$

где  $k_{f_i}$  и  $k_{b_i}$  – скорости прямой и обратной реакций:

$$k_f(T)_i = A_i \cdot T^{\alpha_i} \cdot \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right), \quad (8)$$

$$k_{b_i} = \frac{k_{f_i}}{K_{p_i}}. \quad (9)$$

Константы равновесия  $K_{p_i}$  реакций в газовой фазе определялись через энергию Гиббса и уравнение Вант-Гоффа

$$K_p(T)_i = \exp\left(-\frac{\Delta G_{298}}{R \cdot 298} + \int_{298}^T \frac{\Delta H(T)}{RT^2} dT\right), \quad (10)$$

где  $\Delta H(T) = \Delta H_{298} + \int_{298}^T c_p dT$  – тепловой эффект реакции, кДж/кмоль, при температуре Т, К.

Кинетика процесса описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{d}{dV} c_{CH_4} = \frac{1}{v} (-r_1 - r_3), \quad (11)$$

$$\frac{d}{dV} c_{H_2O} = \frac{1}{v} (-r_1 - r_2 - 2r_3), \quad (12)$$

$$\frac{d}{dV} c_{CO} = \frac{1}{v} (r_1 - r_2), \quad (13)$$

$$\frac{d}{dV} c_{CO_2} = \frac{1}{v} (r_2 + r_3), \quad (14)$$

$$\frac{d}{dV} c_{H_2} = \frac{1}{v} (3r_1 + r_2 + 4r_3). \quad (15)$$

где  $r_i$  – скорости химических реакций кмоль/ч;  $c_n$  – молярные концентрации веществ кмоль/м<sup>3</sup>;  $v$  – объемный расход, м<sup>3</sup>/ч;  $V$  – объем реактора, м<sup>3</sup>, может быть выражен через его длину L, м:  $V = \frac{\pi \cdot d_V^2}{4} \cdot N_{кол.труб} \cdot L$ .

Для адиабатического реактора (реакторы предриформинга и среднетемпературной конверсии) изменение температуры связано с выделение/поглощением теплоты реакций  $\Delta H(T)$  и с изменением теплоемкости среды  $c_p(T)$ :

$$\frac{d}{dV} T = \frac{-\sum_i \Delta H(T)_i \cdot r_i}{v \cdot \sum_x (c_x \cdot c_p(T)_x)}; \quad (16)$$

Для политропического реактора (печь риформинга) также учитывается теплообмен:

$$\frac{d}{dV} T = \frac{-\sum_i \Delta H(T)_i \cdot r_i}{v \cdot \sum_x (c_x \cdot c_p(T)_x)} - \frac{4 \cdot K_A \cdot (T - T_C)}{d_V \cdot \sum_x (c_x \cdot c_p(T)_x)}, \quad (17)$$

где  $d_V$  – внутренний диаметр труб, м;  $K_A$  – коэффициент теплопередачи, кДж/(кг·К);  $(T - T_C)$  – разность температур между температурой реагентов и постоянной температурой стенки реактора, К.

Поскольку система дифференциальных уравнений (11)-(15) является жесткой, что характерно для катализитических реакций, для ее решения применялся неявный метод Эйлера.

Для различных температур (рис. 3) по кинетическим уравнениям получены равновесные данные, которые показывают оптимальный интервал температур (850-920°C) с максимальным выходом водорода. При этом также образуется значительное количество CO.

Реактор среднетемпературной конверсии позволяет конвертировать большую часть CO в водород на медном катализаторе.

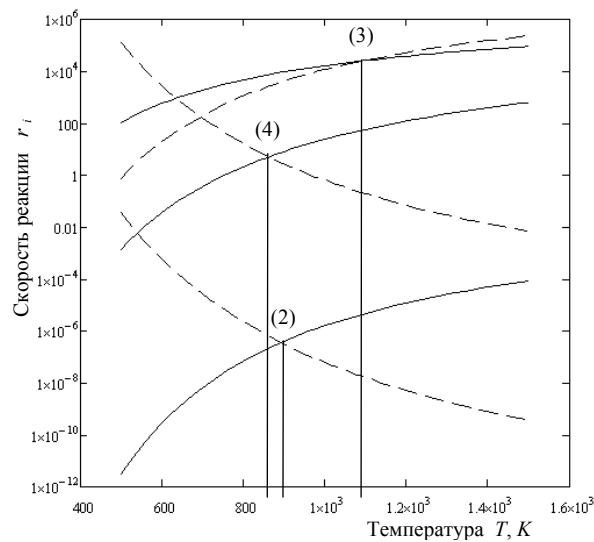


Рис. 2 – Залежність швидкостей прямої і оберненої (пунктирна лінія) реакцій від температури

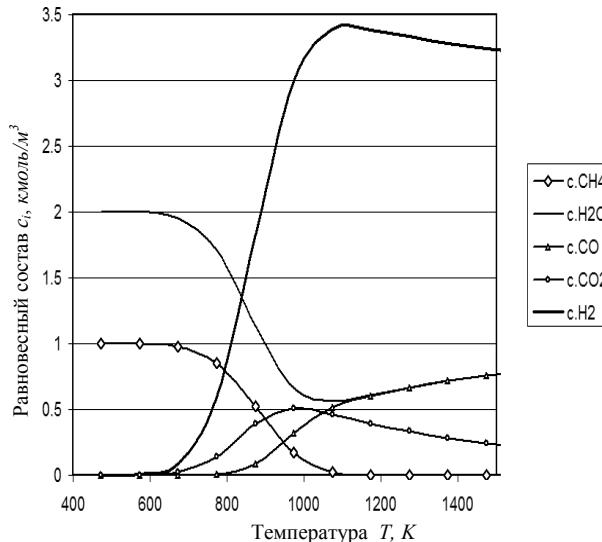


Рис. 3 – Рівноважний мольний склад реакційної суміші при заданій температурі (исходний склад  $\text{CH}_4/\text{H}_2\text{O} = 1/2 \text{ кмоль}/\text{м}^3$ )

Для політропіческого реактора печі риформинга, по приведеній нами моделі, построены температурный (рис. 4) и концентрационный (рис. 5) профили. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными [1].

Температурный профиль (рис. 4) был вычислен при постоянной температуре стенки труб реактора (1260 К). На следующее стадии работы предусмотрено введение уравнения, учитывающего распределение подводимой тепловой нагрузки по длине реактора риформинга, что позволит оптимизировать температурный профиль.

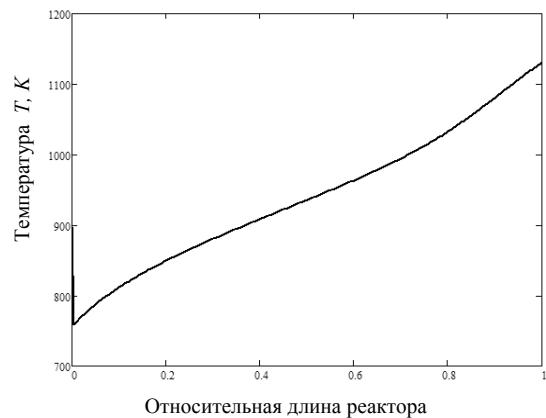


Рис. 4 - Температурний профіль по ділянці труби реактора печі риформинга

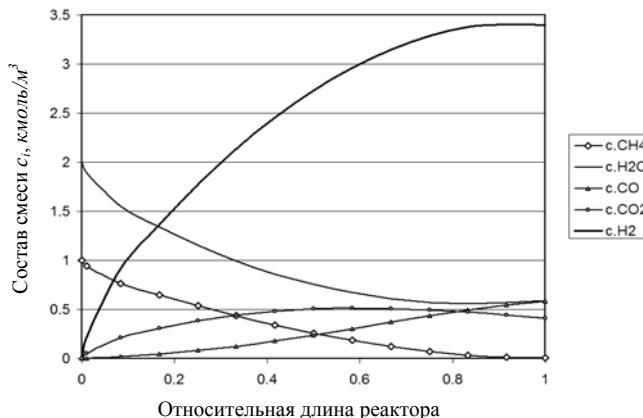


Рис. 5 - Мольний склад реакційної суміші по ділянці труби реактора печі риформинга (исходний склад  $\text{CH}_4/\text{H}_2\text{O} = \text{кмоль}/\text{м}^3$ )

Полученная простая модель в дальнейшем будет использована для решения оптимизационных задач рассмотренного процесса.

- Xu J., Froment G. F. Methane steam reforming, methanation and water-gas shift. I. Intrinsic kinetics // AIChE Journal, 1989, Vol.35, No.1, p.88-96.

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ БЕНЗОЛА

Смирнова Д.А., Федоров В.И., Лисицын Н.В.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт, gti@restech.ru

При анализе и оптимизации сложных технических комплексов, таких как объекты нефтеперерабатывающей промышленности, основополагающим методологическим приемом является системный подход, который позволяет оценивать влияние различных факторов на эффективность функционирования химико-технологической системы (ХТС). Задача оптимизации может решаться как для системы в целом, так и для ее отдельных элементов с учетом внутренних связей между отдельными составляющими ХТС. Одной из важнейших составляющих технологического цикла современных химических и нефтехимических производств являются процессы разделения.

Целью рассматриваемой работы является оптимизация ХТС выделения бензола на установке каталитического бензольного риформинга [1] ЛГ-35-8-300/Б, направленная на увеличение выработки товарной продукции с учетом возможности использования различных видов углеводородного сырья. **Объект исследования** представляет собой промышленную ХТС выделения бензола, входящую в состав технологической установки каталитического бензольного риформинга и состоящую из трех подсистем – блока стабилизации катализата риформинга, блока экстракции ароматических углеводородов и блока вторичной ректификации многокомпонентной смеси (рис. 1).

Для проведения анализа системы и оптимизационных расчетов при помощи программного продукта AspenHysys разработан набор моделей элементов ХТС на базе известных фундаментальных зависимостей и фактических данных, полученных на промышленном объекте. Подтверждена адекватность моделей путем сравнения расчетных и фактических показателей, полученных с промышленного объекта. Режим работы установки, параметры которого использованы в качестве исходных данных для моделирования, назван базовым. С использованием расчетных моделей установлено, что увеличить производительность процесса по бензолу можно за счет оптимизации только на двух блоках – стабилизации и вторичной ректификации.

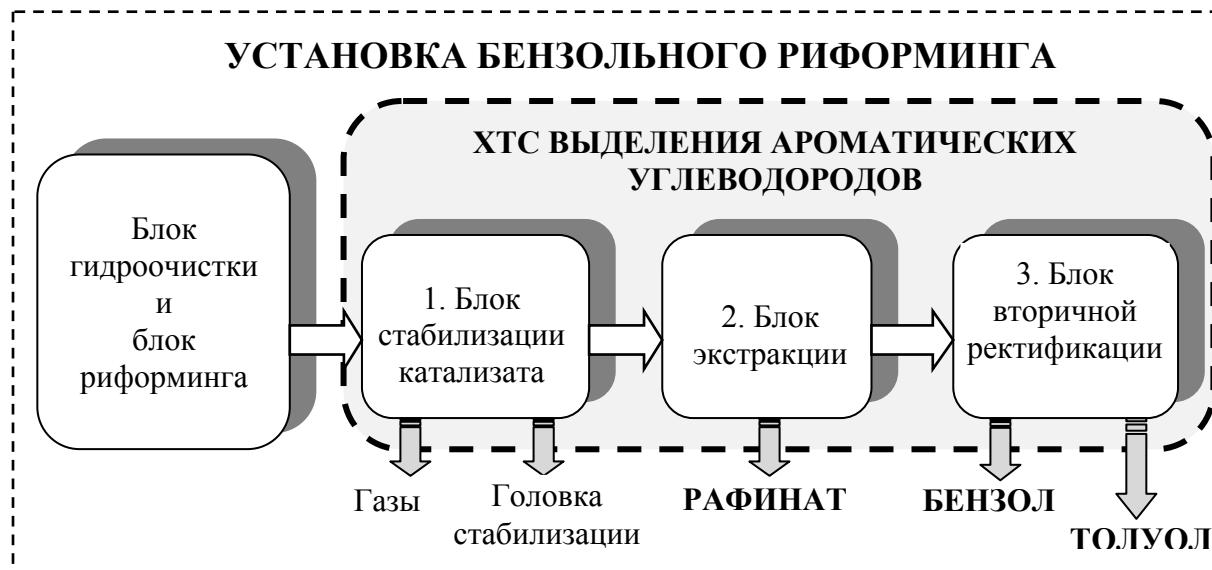


Рис. 1 – Схема ХТС выделения бензола

По данным с установки для первой задачи в условиях действующего производства наблюдалось несоответствие качества побочных продуктов нормативно-технической документации, что приводило к потерям углеводородов, входящих в состав бензинов, в

объеме около 3000т в год. Кроме того существовала необходимость оценки целесообразности изменения структуры блока (рис.2). Таким образом, решение задачи оптимизации подсистемы должно обеспечивать минимум потерь углеводородов  $C_{6+}$  с головкой стабилизации при фиксированных тепловых ресурсах и соблюдении норм по качеству стабильного катализата.

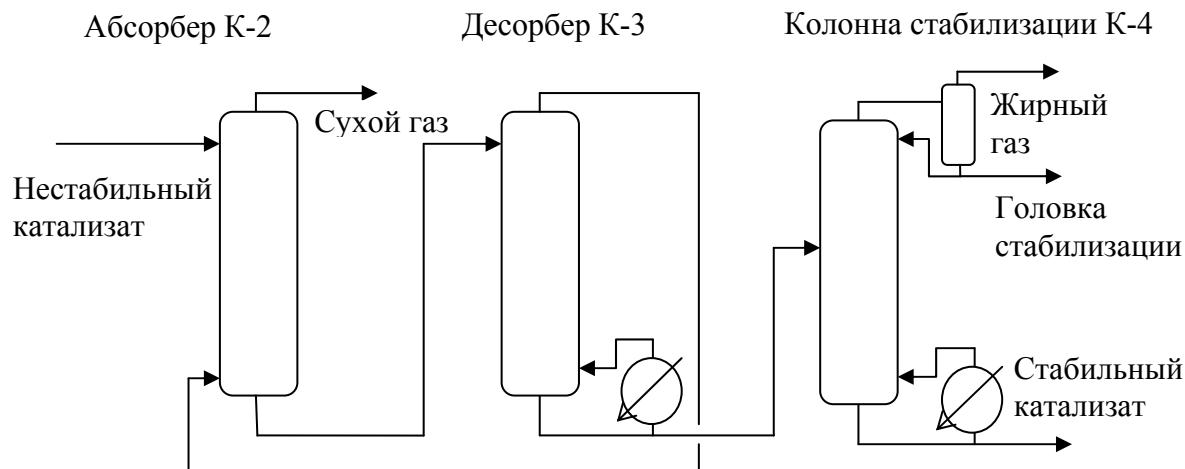


Рис. 2 – Принципиальная схема блока стабилизации катализата риформинга установки ЛГ-35-8-300/Б

Исследования ХТС блока стабилизации катализата на модели: установлено, что требуемая четкость деления обеспечивается при поддержании расхода орошения на уровне  $10\text{-}12\text{ м}^3/\text{ч}$  при производительности по стабильному катализату  $48\text{т}/\text{ч}$ . Общие тепловые потребности колонны при увеличении потока орошения составят около  $2\text{ МВт}/\text{ч}$ . Подвод требуемого дополнительного количества тепловой энергии в размере  $0,3\text{ МВт}/\text{ч}$  полностью обеспечивается потоком тепла, высвобождающимся при исключении из схемы абсорбционно-десорбционного узла. Однако при этом вся газовая фаза должна выделяться в колонне стабилизации, что приведет к изменению парожидкостных нагрузок аппарата и может создать трудности из-за присутствия в сухом газе стабилизации значительных количеств водорода. Поэтому на модели была проведена проверка допустимых парожидкостных нагрузок, которая показала наличие запаса устойчивости работы колонны при разделении в ней всего потока сырья и поддержании необходимого уровня расхода орошения. На модели определено, что суммарные резервы тепла на блоке стабилизации составляют  $2,3\text{-}2,4\text{ МВт}/\text{ч}$ .

Результаты исследований подтверждены в ходе промышленного испытания на действующем производстве. Таким образом, была показана возможность извлечения из катализата риформинга дополнительного количества углеводородов  $C_{6+}$ , а также способность существующего оборудования обеспечить увеличение загрузки блока на  $7\text{т}/\text{ч}$ , что приведет к повышению выработки товарной продукции, в частности бензола, а значит отвечает критерию оптимизации, и обеспечивает ожидаемое повышение прибыли, которое составляет около 20 млн.руб./г.

При оптимизации блока вторичной ректификации (рис.3) параметры сырья определяются исходя из результатов, полученных для блока стабилизации. Проведенный анализ технологических режимов и качества продуктов блока вторичной ректификации для различных составов сырья выявил узел, ограничивающий выработку бензола в рамках системы вторичного разделения – колонну выделения бензола. Здесь наблюдались периодические нарушения четкости ректификации, в результате чего не соблюдалось качество товарного бензола (превышение нормы по содержанию толуола более 0,1% мас.), снижался объем выпуска кондиционной продукции. Отсюда можно сделать вывод, задача

параметрической оптимизации блока вторичной ректификации формулируется как обеспечение максимизации выработки товарного бензола за счет повышения загрузки блока стабилизации при соблюдении норм по качеству продукции.

Далее в ходе анализа процесса ректификации на блоке вторичной ректификации при помощи модели установлена основная причина нарушения четкости деления в колонне выделения бензола и установлено, что стабильная работа колонны К-103 гарантирована при поддержании паровой нагрузки на уровне базового режима. Из условия теплового баланса в колонне выведено соотношение для расчета оптимального значения первого параметра регулирования колонны - расхода орошения – с учетом изменчивости температуры острого орошения.

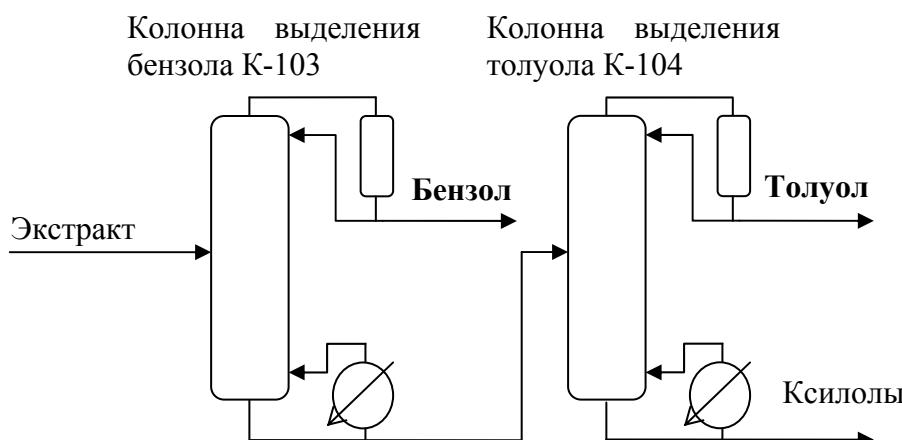


Рис. 3 – Принципиальная технологическая схема блока вторичной ректификации

Второе управляющее воздействие колонны выделения бензола – расход потока горячей струи на нижнюю тарелку колонны. В результате его воздействия изменяется температурный профиль колонного аппарата. Произведен анализ эффективности ведения технологического процесса выделения бензола. Помимо существующего положения термопары на контрольной тарелке 22 колонны К-103 имеется техническая возможность использовать в качестве контрольной тарелки номер 17 и 27. Для выбора наиболее эффективного положения датчика введено понятие «ширина рабочей области», под которым понимается диапазон значений регулируемого параметра (в данном случае, температуры), при которых выполняются ограничения на качество получаемой продукции. На качество продукции, в свою очередь, наложен запас, равный 10%. Для одних и тех же составов сырья определены размеры рабочей области для тарелки 17, 22 и 27. Было показано, что наиболее широкую область изменений допустимых значений температур обеспечивает схема регулирования с использованием термопары, расположенной на тарелке номер 17, что соответствует и повышению устойчивости работы колонны относительно других положений датчика температуры.

Подтвержденная расчетным путем возможность повышения качества продуктовых потоков испытана на действующем промышленном объекте. После завершения промышленного эксперимента принято решение о коррекции режимов работы технологического блока, а также переводе контрольного датчика температуры на тарелку 17. Температура по всему профилю колонны была снижена на  $4\div7^{\circ}\text{C}$ , в частности значение температуры на контрольной тарелке 17 поддерживается в пределах  $115\div119^{\circ}\text{C}$  вместо  $111\div116^{\circ}\text{C}$  до проведения эксперимента. При этом качество выпускаемой продукции неизменно остается в рамках норм, стабильное среднее содержание толуола в бензоле достигает значения менее 0,03% мас.

**Основные результаты работы.** Получено решение задачи структурной и параметрической оптимизации промышленной установки каталитического риформинга ЛГ-35-8-300/Б, обеспечивающее увеличение выработки бензола до 15% при соблюдении

действующих норм на качество продуктов и условия эксплуатации оборудования. Экономический эффект составил около 20 млн руб./год.

Основные результаты внедрения:

- изменена структура технологической схемы подсистемы стабилизации катализата – из ХТС исключен адсорбционно-десорбционный блок, выделение газов стабилизации полностью производится в колонне стабилизации;
- произведена оптимизация режимов работы колонны выделения бензола – значение расхода орошения и температуры на контрольной тарелке рассчитываются по найденным экспериментальным зависимостям;
- изменено расположение контрольной термопары для колонны выделения бензола К-103 блока вторичной ректификации, контрольный датчик перенесен на 17-ю тарелку.

Кроме того, разработана методика определения оптимального местоположения датчика контроля температуры в колонне выделения бензола на основании величины допустимого температурного интервала на контрольной тарелке при управлении процессом вторичной ректификации.

1. Сулимов А.Д. Производство ароматических углеводородов из нефтяного сырья. – М.: «Химия», 1975.

## АНАЛИЗ И ОПТИМИЗАЦИИ ХТС ПРОЦЕССА СИНТЕЗА МЕТАНОЛА С ПОМОЩЬЮ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Осипенко У.Ю.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт, gti@restech.ru

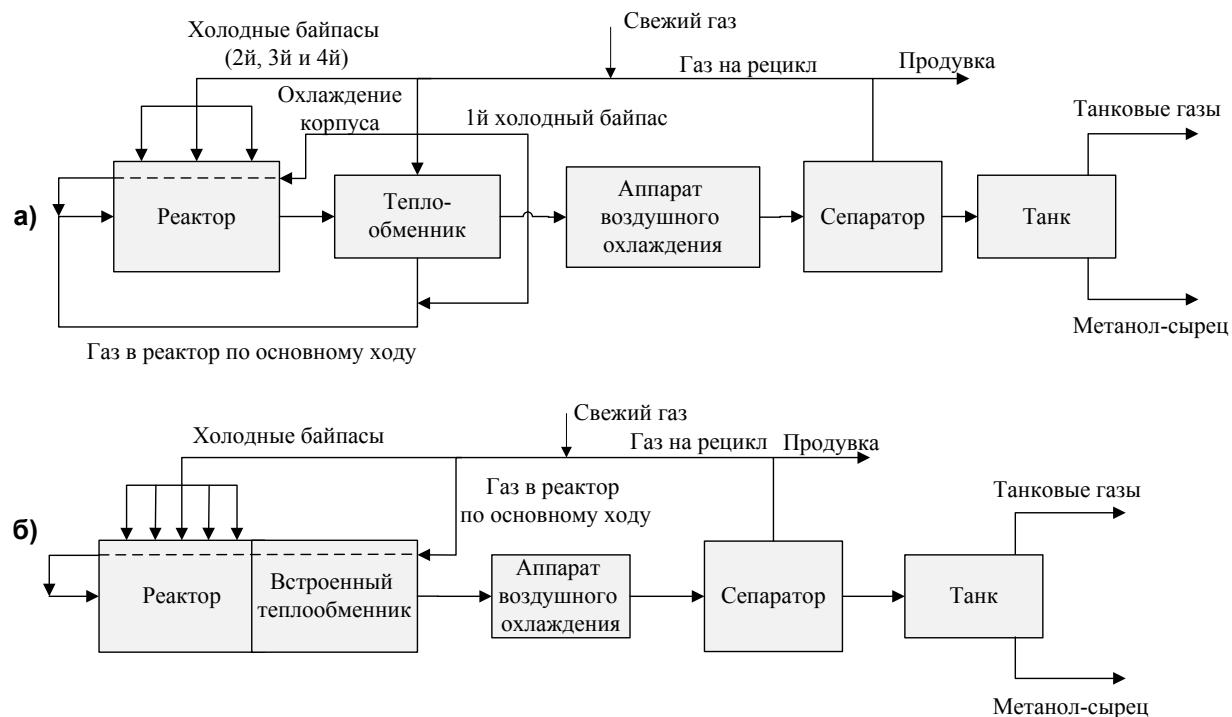
Синтез метанола – один из широко применяемых в промышленности способов переработки углеводородного сырья и в частности природного газа. Ежегодно растет спрос на метanol как сырье для получения формальдегида, аминов, уксусной кислоты, растворителей и др. Важной задачей является проблема повышения технологической и экономической эффективности этого процесса.

Наряду со способами решения этой проблемы за счет внедрения новых катализаторов и совершенствования конструкций реакторных устройств, большое практическое применение находит оптимизация технологических параметров процесса синтеза метанола с помощью имитационного моделирования. При этом необходимо решать следующие задачи:

- выработка оптимальной стратегии изменения технологических параметров промышленного синтеза метанола с учетом дезактивации катализатора;
- своевременное изменение технологических параметров с целью недопущения перегрева катализатора
- учитывая ограниченность анализов по составом потоков на производстве, возникает задача определения значений составов всех потоков схемы синтеза, для оперативного принятия решения по изменению расхода продувочных газов с целью уменьшения инертов в рециркуляционном газе.

Целью настоящей работы является решение перечисленных задач для промышленного производства.

Процессы синтеза метанола проводятся в проточных реакторах, используемых в циркуляционной схеме. Одним из наиболее часто применяемых является реактор полочного типа с байпасом холодного газа. На рис. 1 представлены две возможные блок-схемы с таким реактором. Катализатор в нем размещен в виде отдельных слоев, между которыми расположены устройства для распределения вводимого холодного газа.



а) – схема с четырехполочным реактором синтеза, б) – схема синтеза с пятиполочным реактором.

Рис. 1 – Блок-схема процесса синтеза метанола

Следует учесть, что при производстве метанола из синтез-газа наряду с синтезом метанола протекает восстановление  $\text{CO}_2$  в  $\text{CO}$ , сопровождающееся выделением воды, рост концентрации которой усиливает торможение синтеза метанола.

Перед построением модели ХТС была изучена кинетика синтеза метанола и проведен выбор наиболее подходящих для данных условий синтеза кинетических моделей. Для этого были проанализированы существующие описания процесса, основанные на различных представлениях о механизме синтеза метанола [1–2].

Анализ моделей, основанных на различных представлениях о механизме синтеза, показал, что они практически одинаково удовлетворительно описывают наблюдаемую кинетику в рабочем интервале изменения концентраций компонентов, поэтому могут быть использованы при моделировании кинетических процессов, протекающих в реакторе. Для моделирования была выбрана кинетическая модель синтеза из  $\text{CO}$  как теоретически наиболее обоснованная:

- 1)  $\text{CO} + 2\text{H}_2 = \text{CH}_3\text{OH}$
- 2)  $\text{CO}_2 + \text{H}_2 = \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$

Для синтеза метанола было выбрано уравнение Померанцева [1], приведенное к виду (1), для реакции конверсии оксида углерода – уравнение Караваева (2).

$$u_c = k_1 \cdot \left[ C_{\text{H}_2} \cdot P \cdot \left( \frac{C_{\text{CO}}}{C_{\text{CH}_3\text{OH}}} \right)^{0.25} - \frac{1}{\sqrt{K_{p,c}}} \cdot \left( \frac{C_{\text{CH}_3\text{OH}}}{C_{\text{CO}}} \right)^{0.25} \right], \quad (1)$$

$$u_k = k_2 \cdot (P_{\text{H}_2} \cdot P_{\text{CO}_2} - \frac{P_{\text{CO}} \cdot P_{\text{H}_2\text{O}}}{K_{p,k}}), \quad (2)$$

где  $C_{CO}, C_{H_2}, C_{CH_3OH}$  – мольные доли водорода, оксида углерода,  $P$  – давление газа,  $k_1$ ,  $k_2$  – константы реакции,  $K_{p,c}$  и  $K_{p,k}$  – константы равновесия реакции синтеза и реакции конверсии соответственно,  $P_{H_2}$ ,  $P_{CO_2}$ ,  $P_{CO}$  и  $P_{H_2O}$  – парциальные давления реагентов.

В литературе предложено множество вариантов для расчета констант равновесия синтеза метанола. Для моделирования были выбраны константы равновесия (3), выведенные для условий высокого давления [3]:

$$\lg K_{p,c} = 3749 \cdot \frac{1}{T} - 9.281 \cdot \lg T + x \cdot T^2 + y, \quad (3)$$

$$\lg K_{p,k} = -2167 \cdot \frac{1}{T} + 0.521 \cdot \lg T - m \cdot T^2 + h,$$

где  $x, y, m$  и  $h$  – коэффициенты, меняющиеся с изменением давления газа,  $T$  – температура,  $^{\circ}\text{C}$ .

Корректировка кинетических коэффициентов проводилась сопоставлением состава газа, рассчитанного по модели с составом газа, полученным экспериментально на промышленной колонне. Расчет дифференциальных уравнений проводился методом Эйлера с пересчетом.

При разработке модели сепаратора использовалось уравнение (4) для расчета константы фазового равновесия:

$$k_i = \lambda_i(T)/P, \quad (4)$$

в котором для расчета летучестей компонентов, были получены температурные зависимости (5) для условий промышленного синтеза:

$$\lambda_i(T) = \lambda_i(28,6) \cdot (1 + \alpha_i \cdot \Delta T + \beta_i \cdot \Delta T^2), \quad (5)$$

где  $T$  – температура,  $^{\circ}\text{C}$ ,  $\Delta T = T - 28,6$ ;  $P$  – давление, МПа;  $\alpha$ ,  $\beta$  – температурные коэффициенты, рассчитанные для рабочего диапазона давлений и температур.

При моделировании многополочная колонна синтеза была представлена в виде последовательно соединенных реакторов идеального вытеснения.

Для расчета теплообменников и построения модели теплообмена использовались уравнения теплопередачи и теплового баланса, учитывалась неадиабатичность реактора, то есть рассчитывалось количество теплоты, отдаваемое охлаждающему газу.

Расчет циркуляционной схемы проводился методом простых итераций. В качестве начального приближения для рециркулирующего газа были взяты усредненные за несколько месяцев значения.

Разработанная модель ХТС синтеза метанола была программно реализована с помощью среды программирования Delphi. В разработке используется "легковесная" СУБД SQLite, поскольку для данной задачи не требуется работа с распределенной БД. СУБД SQLite – это простая, быстрая и надежная система, при этом БД физически размещается в одном файле, что облегчает доступ к ней.

Разработанное программное обеспечение включает в себя следующие модули:

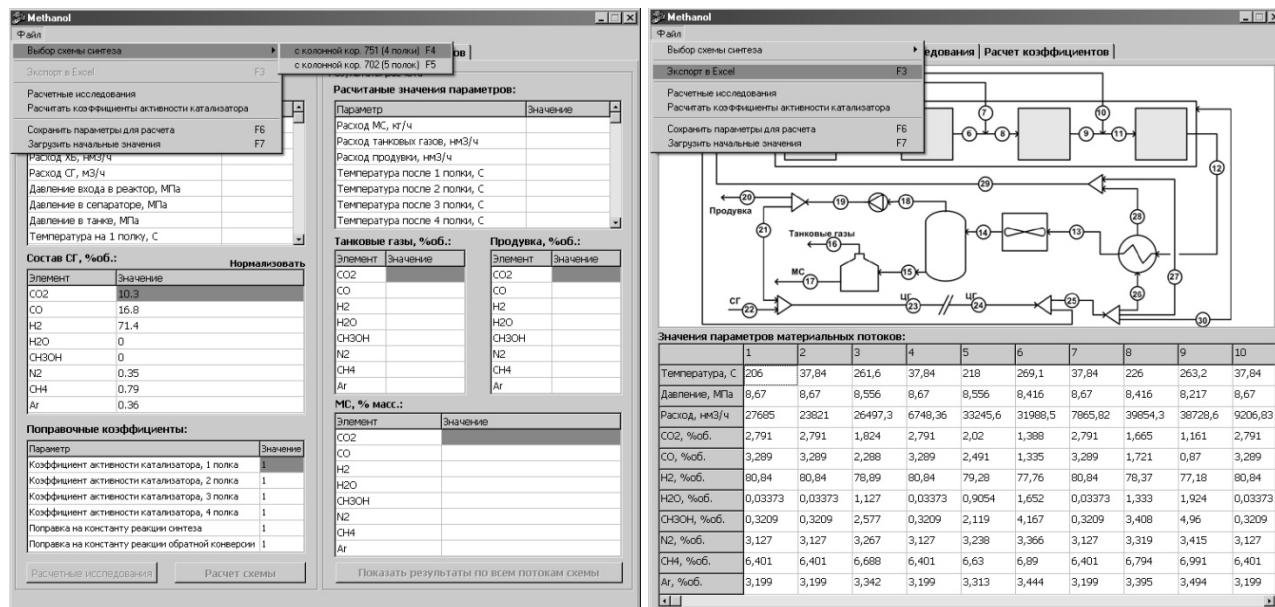
1. Модуль расчета выбранной циркуляционной схемы синтеза метанола.

Перед работой с программой необходимо в меню выбрать схему синтеза. Расчет осуществляется по входным параметрам, таким как свежий газ на установку, температуры, заданные на регуляторах (в том числе температуры входов на полки реакторов), начальные приближения состава газа в рециркуляционном потоке и другие. На рисунке 2(а) показано окно программы для расчета схемы синтеза по входным параметрам.

# Комп'ютерне моделювання хіміко-технологічних та біохімічних процесів і систем

Значения входных параметров могут быть заданы вручную, или загружены из файла базы данных.

Результаты расчета по основным параметрам (расход и состав метанола-сырца на выходе, температуры в колонне синтеза, состав и расход продувочных газов и другие) отображаются в том же окне, где указывались значения входных параметров. Для вывода значений параметров всех потоков схемы предусмотрена отдельная вкладка, на которой данные по всем потокам сведены в таблицу. На рисунке 2(б) приведено окно с вкладкой «Все потоки схемы». Для удобства на вкладке отображается выбранная при расчете схема синтеза метанола с пронумерованными потоками, которым соответствуют столбцы таблицы.



а) вкладка «Расчет схемы»

б) вкладка «Все потоки схемы»

Рис. 2 – Окно программы

Для возможности дальнейшей работы с полученными данными предусмотрен их экспорт в MSExcel.

2. Модуль, позволяющий проводить исследования влияния изменения различных варьируемых параметров на работу всей ХТС. Данный модуль позволяет для каждого режима работы схемы найти оптимальные значения технологических параметров.

ПО позволяет выбрать варьируемый параметр из довольно обширного списка, куда входят и температуры потоков, и расходы холодных байпасов, и данные по свежему газу, и другие. Расчет проводится в заданном пользователем диапазоне значений. Сначала схема рассчитывается для нижнего заданного значения, далее делаются шаги по варьируемому параметру и на каждом шаге снова рассчитывается схема, как если бы этот параметр изменился дискретно. Возможное количество шагов от 1 до 500. Результаты расчета представляются в табличном и графическом виде. Для того, чтобы не перегружать график, доступен выбор параметров для отображения (рис. 3).

Предусмотрена возможность экспорта результатов расчета в MSExcel.

Это позволяет самостоятельно выбрать наиболее подходящие параметры процесса для заданного режима работы установку синтеза метанола.

В результате исследований на модели была выявлена зависимость активности катализатора от температурного профиля колонны, а именно, установлено, что активность на первой полке может быть оценена по разогреву на этой полке, а средняя активность катализатора на второй, третьей и четвертой полках – по температуре входа на четвертую полку.

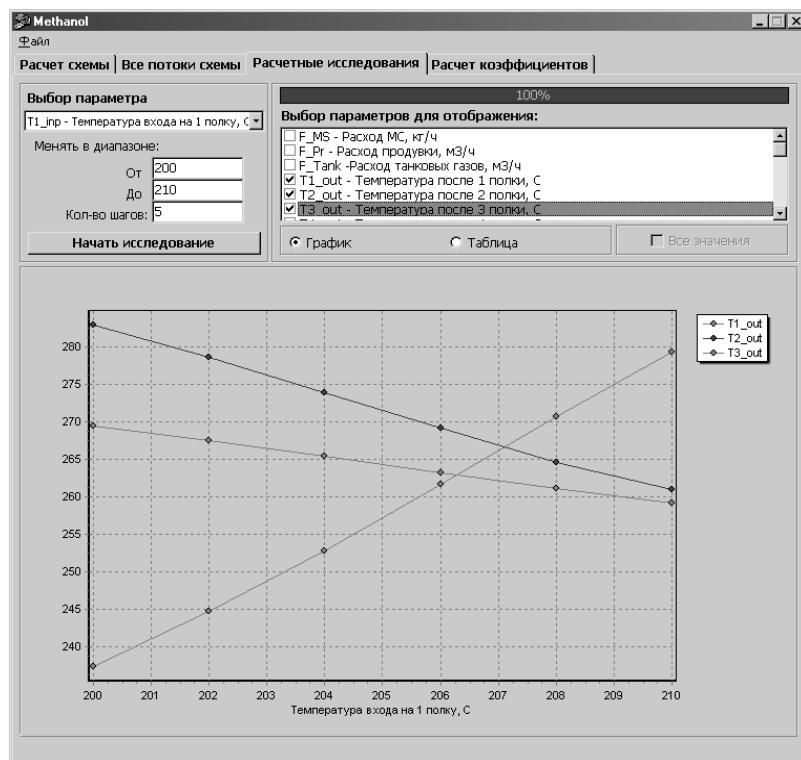


Рис. 3 – Окно программы вкладка «Расчетные исследования»

В связи с этим был разработан:

3. Модуль расчета коэффициента активности катализатора (рис. 4). Который позволяет решать обратную задачу, состоящую в определении коэффициента активности по дополнительной информации об объекте, то есть по значениям температуры после 1-й полки и температуры входа на 4-ю полку реактора. Решение обратной задачи проводилось методом деления шага пополам.

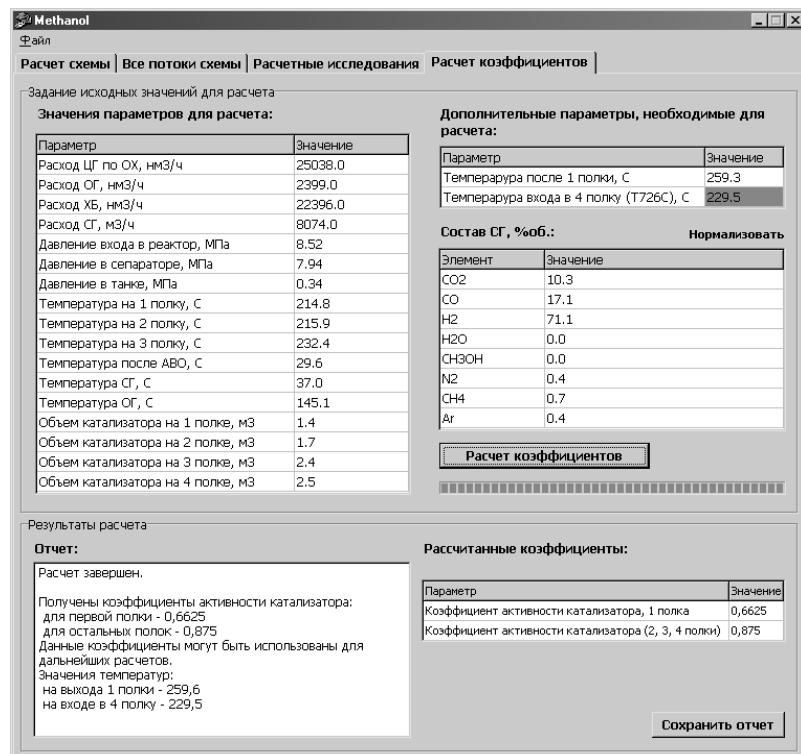


Рис. 4 – Окно программы вкладка «Расчет коэффициентов»

По результатам расчетов коэффициентов активности было установлено, что при загрузке нового катализатора в течение первых месяцев его активность на первой полке уменьшается с более высокой скоростью, чем на остальных, а далее до конца срока службы катализатора (два года) наблюдается равномерное падение активности на всех полках.

Можно сказать, что получаемые в результате расчетов данные могут быть использованы для оптимизации процесса замены катализатора.

Разработанное ПО позволяет: оперативно отслеживать и предсказывать изменения, происходящие в системе синтеза, снизить вероятность перегрева катализатора, отследить снижение его активности по каждой из полок реактора, своевременно решать задачу изменения расхода продувки для снижения инертов в рециркулирующем газе и, при проведении на нем расчетных исследований, дает возможность найти оптимальные значения технологических параметров.

ПО используется на действующем производстве.

1. *Померанцев В.Н.* Кинетика и механизм синтеза метанола и окисления диоксида углерода на окисных катализаторах: Дис...д-ра техн.наук/СПбГТИ(ТУ). – СПб, 1973. – 273 с.
2. *Караваев М.М., Мастеров А.П.* Производство метанола. М.: Химия, 1973. – 160 с.
3. *Померанцев В.М., Редин А.В., Туболкин А.Ф.* Равновесие синтеза метанола при повышенных давлениях // Химическая промышленность. – 1998. – №6. – С. 53–64.

## ОПТИМИЗАЦІЯ РЕЖИМНЫХ ПАРАМЕТРОВ КОЛОННИ К-2 УСТАНОВКИ ПЕРВИЧНОЇ ПЕРЕРАБОТКИ НЕФТИ

Семикин К.В.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт, gti@restech.ru

Первичная переработка нефти является первым этапом производства товарной продукции нефтеперерабатывающего завода. На промышленных установках АТ и АВТ осуществляется разделение нефти на фракции, различающиеся температурными пределами кипения, а полученные продукты служат сырьем для других технологических процессов. В связи с этим оптимизация режимов работы установок первичной переработки нефти является актуальной задачей для оптимизации всего процесса нефтепереработки.

Целью работы является оптимизация парожидкостного профиля ректификационной колонны К-2 установки первичной переработки нефти.

Чаще всего рассматриваемая схема представлена ректификационной колонной с 3-мя боковыми стриппинг – секциями (рис. 1). В ряде случаев продукт стриппинга К-3/3 фракция 300-360°C атмосферного газойля (АГО) не поступает на вторичную переработку, а используется как прямогонный компонент товарных мазутов и дизельных топлив. В таких случаях энергия, затраченная на разделение фракций АГО и мазута, используется неэффективно, так как на следующих этапах производственного процесса эти две фракции вновь смешиваются. В качестве более эффективного режима предлагается снизить отбор фракции атмосферного газойля без изменения нагрузки на холодильники колонны. А балансовый избыток жидкости на тарелке отбора питания стриппинга К-3/3 использовать в качестве орошения нижерасположенных секций №1 и №2 колонны К-2. Прежде всего, это позволит увеличить эффективность работы секций №2 вследствие поднятия соотношения встречных расходов жидкости и пара (L/V соотношение) на тарелках, тем самым отдалив рабочие концентрации на тарелках данной секции от равновесных.

На основе фактических данных по работе промышленной установки первичной переработки нефти ЭЛОУ АВТ-2 была разработана её компьютерная модель, обеспечивающая высокую скорость и устойчивость расчёта в широком диапазоне исходных данных. Адекватность модели была проверена по всему комплексу параметров (составы фракций, температуры, давления, расходные показатели).

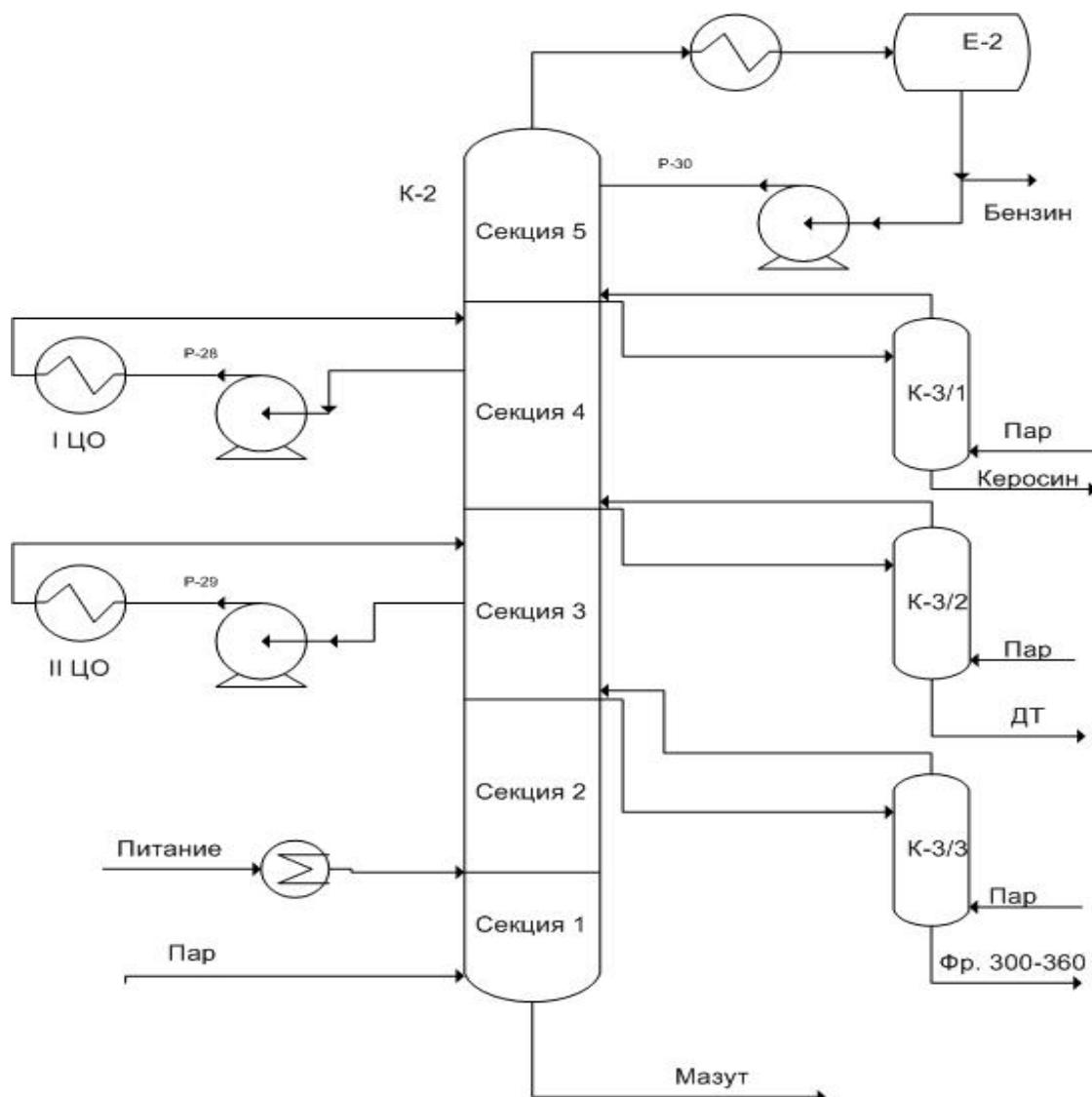


Рис. 1 – Принципиальная технологическая схема колонны К-2 установки АВТ-2

В базовом режиме L/V соотношение расхода жидкости к расходу пара секции 2 составляет 0,22, что вдвое меньше соотношений на вышележащих секциях (рис. 2).



Рис. 2 – Парожидкостной профиль колонны К-2

После уменьшения отбора АГО с 13,7% масс (по отношению к питанию колонны) до 4,6% наблюдается увеличение L/V соотношения до 0,52 (рис.2).

Это приводит к увеличению четкости деления продуктов и уменьшению перекрытия кривых истинных температур кипения продуктов. Следовательно, улучшилось качество бензиновой, керосиновой и дизельных фракций, при сохранении их отборов. Кубовый продукт – мазут по химико-физическому показателям стал удовлетворять требованиям на топливо технологическое экспортное, улучшив товарные и транспортные свойства.

Также качество продукта стриппинга К-3/3 (фракции атмосферного газойля) изменилось в лучшую сторону. Конец кипения уменьшился с 362 до 329 °С. Из-за снижения количества тяжелокипящих компонентов уменьшилось содержание серы. Таким образом, атмосферный газойль в дальнейшем может быть использован в качестве сырья установки извлечения парафинов C16-C19, или как более качественный прямогонный компонент дизельного топлива. В связи с перераспределением отбора фракции стриппинга К-3/3 температура низа колонны К-2 уменьшилась с 351 °С до 340 °С, что также положительно влияет на качество продукции, из-за уменьшения процессов крекинга нефти в кубе колонны.

Для определения времени переходного режима, и доказательства положительного эффекта от предложенных оптимальных условий ведения процесса, в программе Aspen Hysys была создана динамическая модель колонны К-2. В качестве первичных приближений были взяты технологические параметры статической модели. В связи с невозможностью решения проблемы создания модели интегрально, построение модели велось ступенчатым добавлением новых блоков.

Модель состоит из 4 дистилляционных колонн, 7 насосов, 5 сепараторов и 18 регуляторов. Коэффициент ускорения расчетов равен 20. Адекватность рассматриваемой модели была проверена на данных полученных с установки ЭЛОУ АВТ-2 во время переходного режима. Расхождения между фактическими и экспериментальными данными не превышают 5%, что позволяет использовать полученную модель для дальнейших исследований.

Предложенные ранее мероприятия по оптимизации подачи пара были проверены на полученной динамической модели. Время переходного режима не превышает 1 часа, что позволяет сделать вывод о том, что представленные выше мероприятия по оптимизации, возможно, использовать на действующем производстве.

### **МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ РАВНОВЕСИЯ ДИСПЕРСНОЙ ФАЗЫ В МАЛОГАБАРИТНЫХ ВИХРЕВЫХ АППАРАТАХ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ГРАНУЛ С ОСОБЫМИ СВОЙСТВАМИ**

Артиухов А.Е, Демченко А.Н.

Сумський національний університет, artemijar@yandex.ru

При проектировании малогабаритных вихревых аппаратов для создания гранул с особыми свойствами (в частности, пористой структуры) особое внимание уделяется гидродинамическим режимам движения гранул в рабочем пространстве аппарата под действием закрученного газового потока и определению их условий равновесия. В зависимости от конструктивных особенностей вихревого аппарата производится выбор параметров газового потока, которые позволяют грануле пребывать в рабочем объеме устройства необходимое количество времени. Управляя гидродинамикой движения гранул, необходимо обеспечить получение ними заданных свойств без разрушения их структуры.

Для расчёта гидродинамики газового потока и визуализация результатов исследований в данной работе использован комплекс COSMOSFloWorks ([www.solidworks.com](http://www.solidworks.com)).

Компьютерное моделирование включает такие этапы:

- исследование влияния конфигурации рабочего пространства на гидродинамику движения сплошной фазы;
- исследование влияния конструкции завихрителя на гидродинамику движения сплошной фазы;
- подбор оптимальной конструкции вихревого аппарата в соответствии с требованиями к гранулам.

Результаты моделирования, демонстрирующие характер распределения скорости газового потока в рабочем пространстве вихревого аппарата в зависимости от его конфигурации приведены на рис. 1.

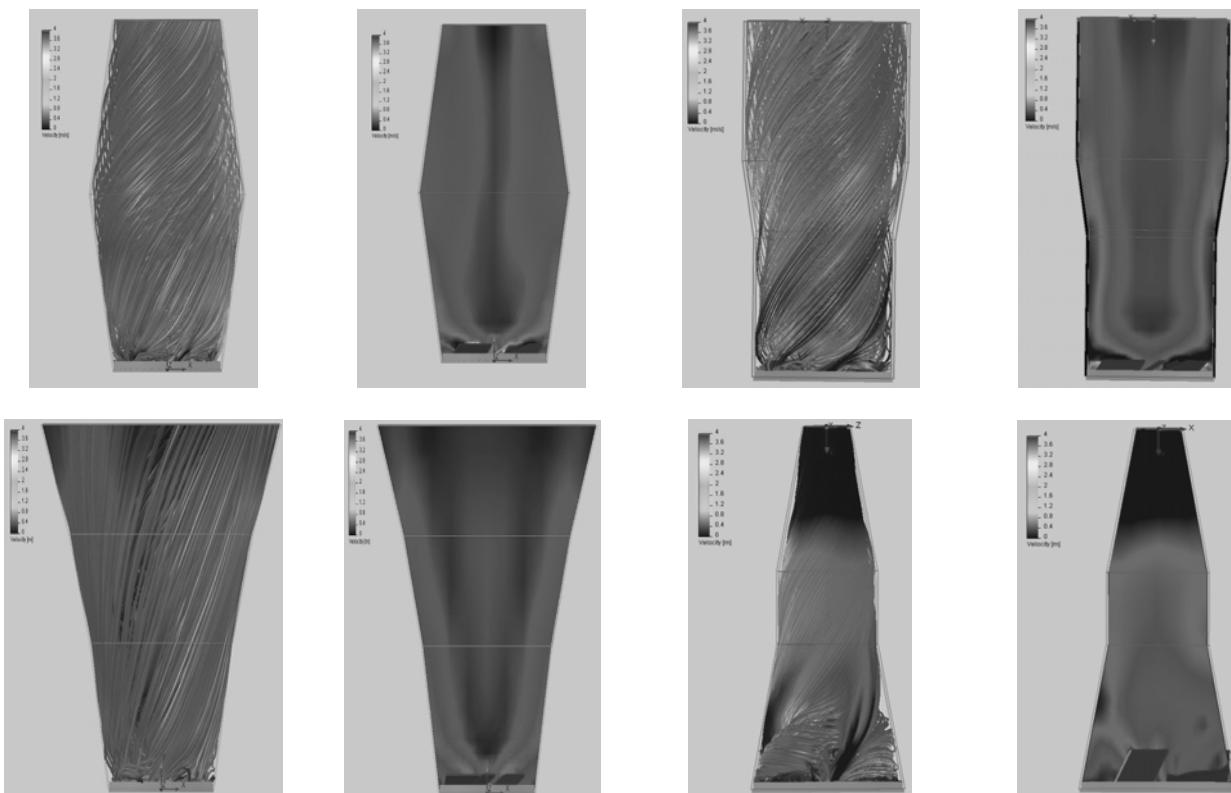


Рис. 1 – Влияние способа закрутки газового потока (количество лопаток перфорированного завихрителя  $n=6$ , угол наклона лопаток  $\alpha=30^\circ$ ) на характер распределения радиальной скорости сплошной фазы для различных конфигураций рабочего пространства вихревого аппарата

В дальнейшем по результатам компьютерного моделирования гидродинамики движения закрученного газового потока для нескольких конфигураций рабочего пространства и способа закрутки газового потока (рис. 2) исследуется характер распределения полей скорости сплошной фазы по высоте и радиусу аппарата. Одновременно с этим определяются места возможного образования застойных зон, зон снижения скорости движения газового потока, зон, где распределение скоростей газового потока становится неравномерным (рис. 3). После этого проводится корректировка конструктивных параметров вихревого гранулятора с определением оптимальной конфигурации рабочего пространства.

Таким образом, использование компьютерного моделирования при исследовании гидродинамики вихревых потоков позволяет произвести подбор оптимальной конфигурации рабочего пространства и конструкции завихрителя для вихревого аппарата. При этом обеспечивается необходимое качество готовой продукции в зависимости от требований к термообработке и прочности.

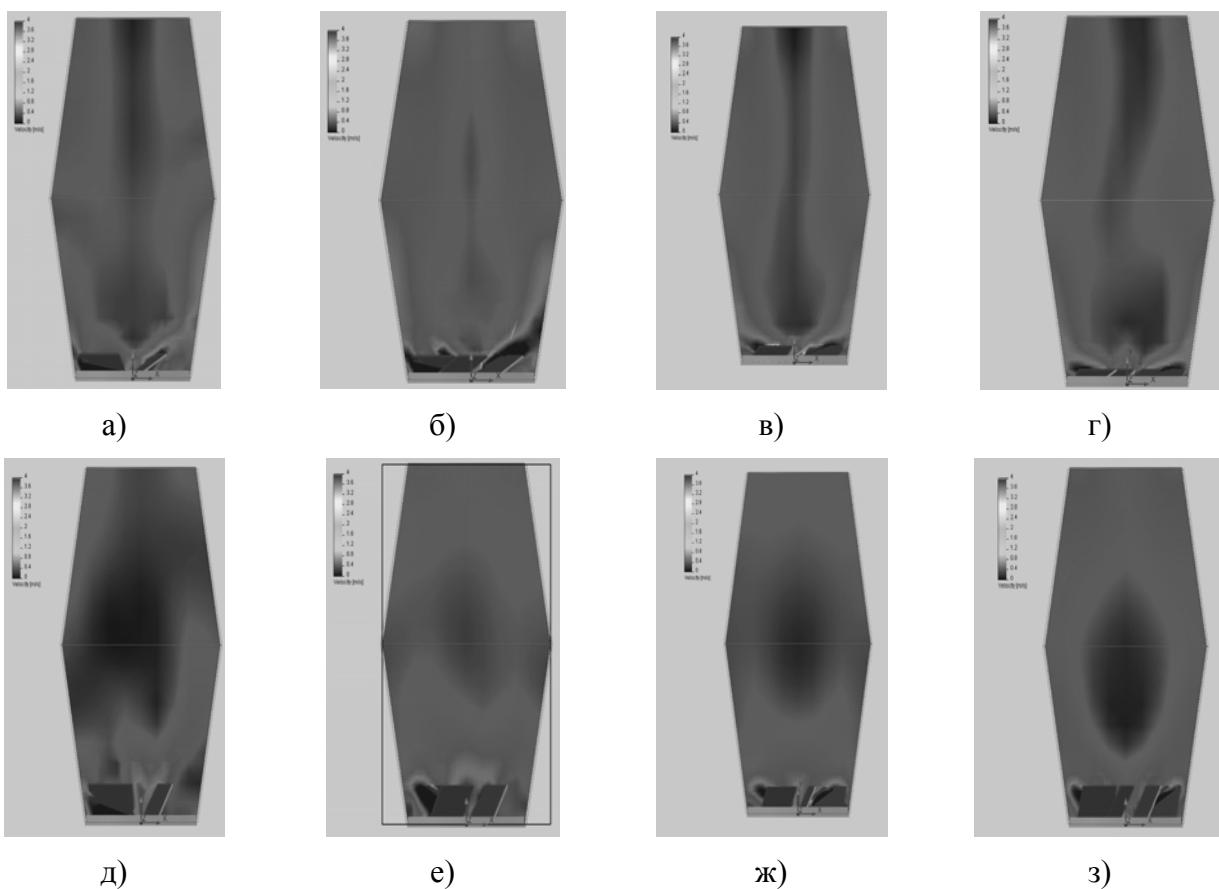


Рис. 2 – Влияние конструктивных характеристик завихрителя на характер распределения радиальной скорости сплошной фазы в рабочем пространстве вихревого аппарата (для термостабильных материалов с высокой прочностью):

а) количество лопаток перфорированного завихрителя  $n=3$ , угол наклона лопаток  $\alpha=30^\circ$ ;  
 б)  $n=5$ ,  $\alpha=30^\circ$ ; в)  $n=6$ ,  $\alpha=30^\circ$ ; г)  $n=8$ ,  $\alpha=30^\circ$ ; д)  $n=3$ ,  $\alpha=60^\circ$ ; е)  $n=5$ ,  $\alpha=60^\circ$ ; ж)  $n=6$ ,  $\alpha=60^\circ$ ;  
 з)  $n=8$ ,  $\alpha=60^\circ$

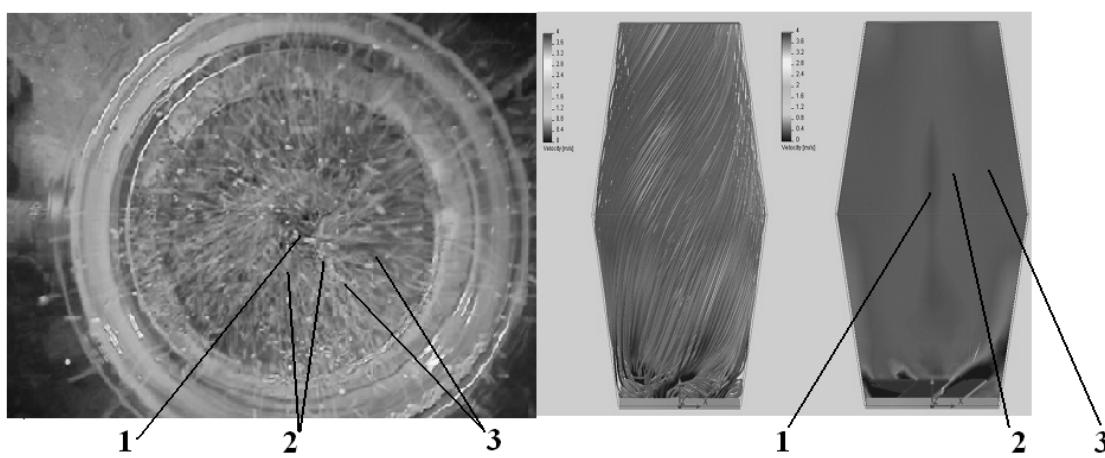


Рис. 3 – Определение характерных зон движения дисперсной фазы на основании анализа и сопоставления результатов компьютерного моделирования гидродинамики движения сплошной фазы и экспериментальных исследований гидродинамики движения дисперсной фазы:

- 1 - зона пониженной скорости движения гранул;
- 2 - зона фонтанирующего движения гранул;
- 3 - зона вихревого движения гранул

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ ДВИЖЕНИЯ ПОТОКОВ В МАССООБМЕННО-СЕПАРАЦИОННЫХ ЭЛЕМЕНТАХ ВИХРЕВЫХ ТАРЕЛОК

Артюхов А.Е, Смелянская О.Ю.

Сумський державний університет, artemijar@yandex.ru

Изучение гидродинамики движения потоков в массообменно-сепарационных элементах (МСЭ) вихревых тарелок (рис. 1) является важным этапом при определении оптимальной конструкции контактной ступени, которая должна обеспечить:

- минимальное значение брызгоуноса с тарелки;
- развитую поверхность контакта фаз;
- минимальное значение гидравлического сопротивления.

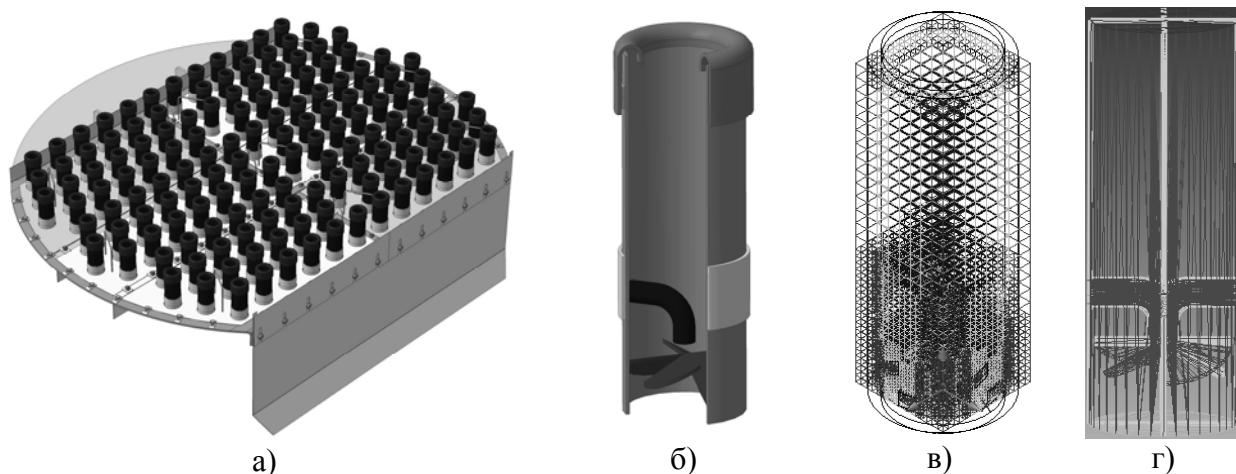


Рис. 1 – Тарелка с прямоточно-центробежными массообменно-сепарационными элементами:

- общий вид тарелки;
- прямоточно-центробежный МСЭ;
- расчётная сетка МСЭ для моделирования в программном комплексе COSMOSFloWorks;
- расчётная сетка МСЭ для моделирования в программном комплексе FlowVision

Использование компьютерного моделирования наряду с теоретическими и экспериментальными исследованиями гидродинамических условий формирования и движения газожидкостного потока внутри МСЭ [1, 2] позволяет провести комплексный анализ работы вихревой тарелки с возможностью усовершенствования отдельных её узлов.

В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования движения газового и газожидкостного потоков в объеме МСЭ с помощью программных комплексов COSMOSFloWorks ([www.solidworks.com](http://www.solidworks.com)) и FlowVision ([www.thesis.com](http://www.thesis.com)).

Результаты моделирования гидродинамики газового потока в объеме МСЭ (рис. 2) позволяют установить закономерности распределения скоростей по высоте и радиусу патрубка с целью определения характерных зон повышенной скорости в окрестностях завихрителя и у стенок и пониженной скорости в центре. Установленные в МСЭ трубы для подачи жидкости с полотна тарелки несколько уменьшают равномерность распределения скорости над завихрителем, что позволяет говорить о снижении интенсивности взаимодействия газового и жидкостного потока в этой зоне. Анализ распределения скорости газового потока у стенок патрубка МСЭ позволяет выделить также зону искажения потока, которое также объясняется наличием трубы для подачи жидкости. По результатам моделирования на этом этапе можно предположить, что основными зонами контакта газа с жидкостью будут участки МСЭ над завихрителем и внутренняя поверхность стенки над трубками для ввода жидкости. Пониженное значение скорости газового потока в центральной части МСЭ объясняется действием центробежной силы, которая создается лопатками завихрителя и приводит к вихревому движению сплошной фазы по

спиралеобразной траектории по направлению к верхнему сечению патрубка. По мере продвижения газового потока вверх по патрубку скорость его несколько уменьшается за счёт воздействия сил трения о внутреннюю стенку МСЭ.

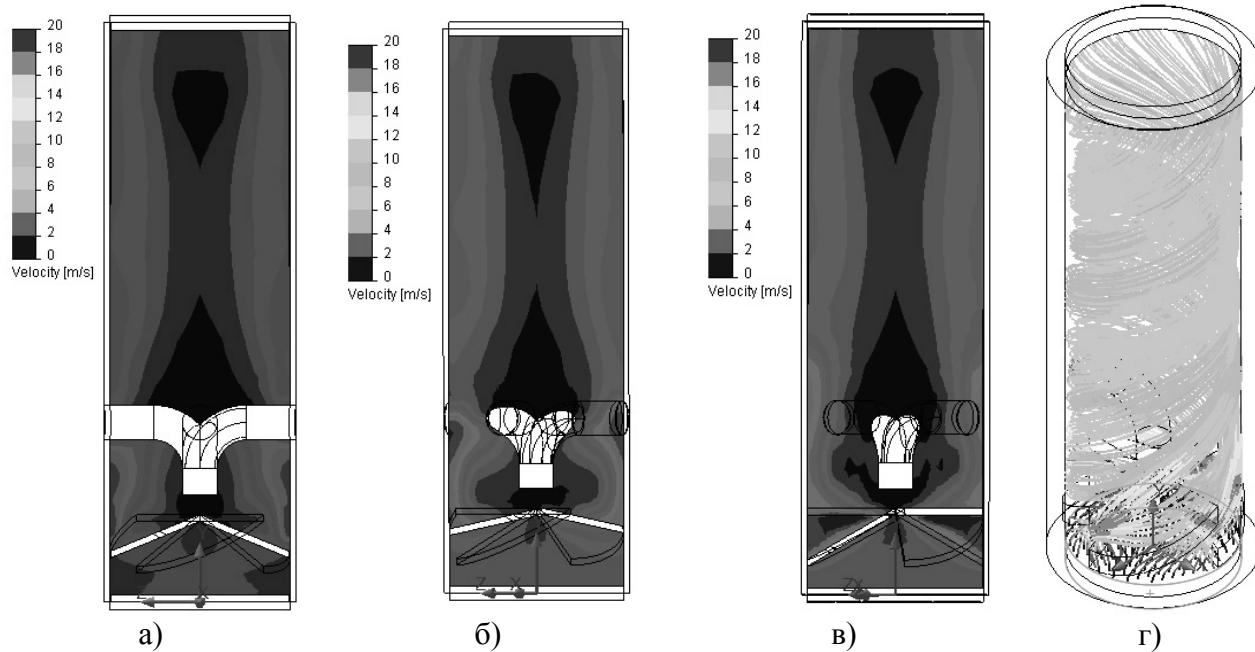


Рис. 2 – Распределение скорости газового потока в МСЭ:

а – плоскость сечения параллельна плоскости YZ;

б – плоскость сечения расположена под углом  $22,5^0$  к плоскости YZ;

в – плоскость сечения расположена под углом  $45^0$  к плоскости YZ;

г) траектория движения газа

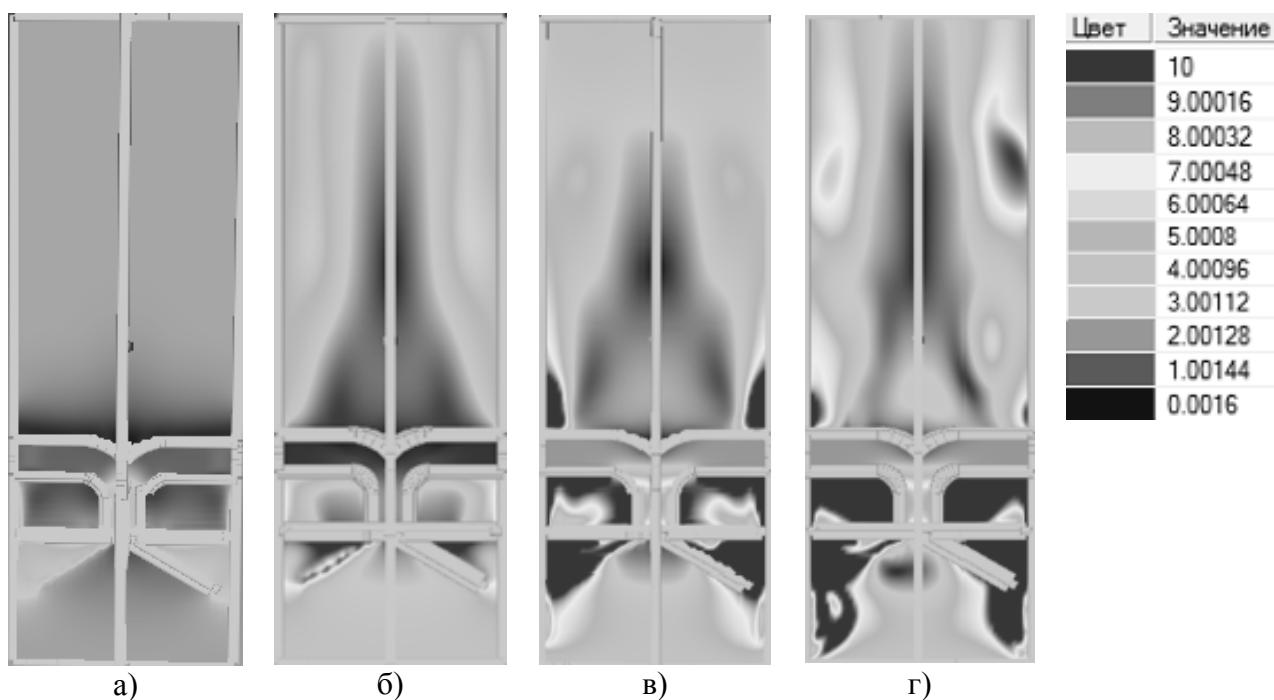


Рис. 3 – Эволюция распределения скорости газожидкостного потока в МСЭ

Данные, полученные в результате моделирования движения газожидкостного потока (рис. 3, 4) подтверждают предположения о расположении зон интенсивного контакта между фазами. Поверхность контакта фаз образуется в окрестностях завихрителя в начальный

момент поступления жидкости через трубку с полотна тарелки внутрь патрубка. Высокая скорость движения газового потока, обусловленная уменьшением свободного сечения и одновременной закруткой направляющими элементами завихрителя, в этом случае определяет начало процесса перемещения жидкости к периферии. При дальнейшей подаче жидкости в патрубок МСЭ она вовлекается во вращательное движение и отбрасывается к внутренней его стенке, образуя вторую зону контакта фаз. Геометрически площадь контакта фаз во второй зоне определяется внутренней поверхностью патрубка МСЭ и толщиной плёнки жидкости.

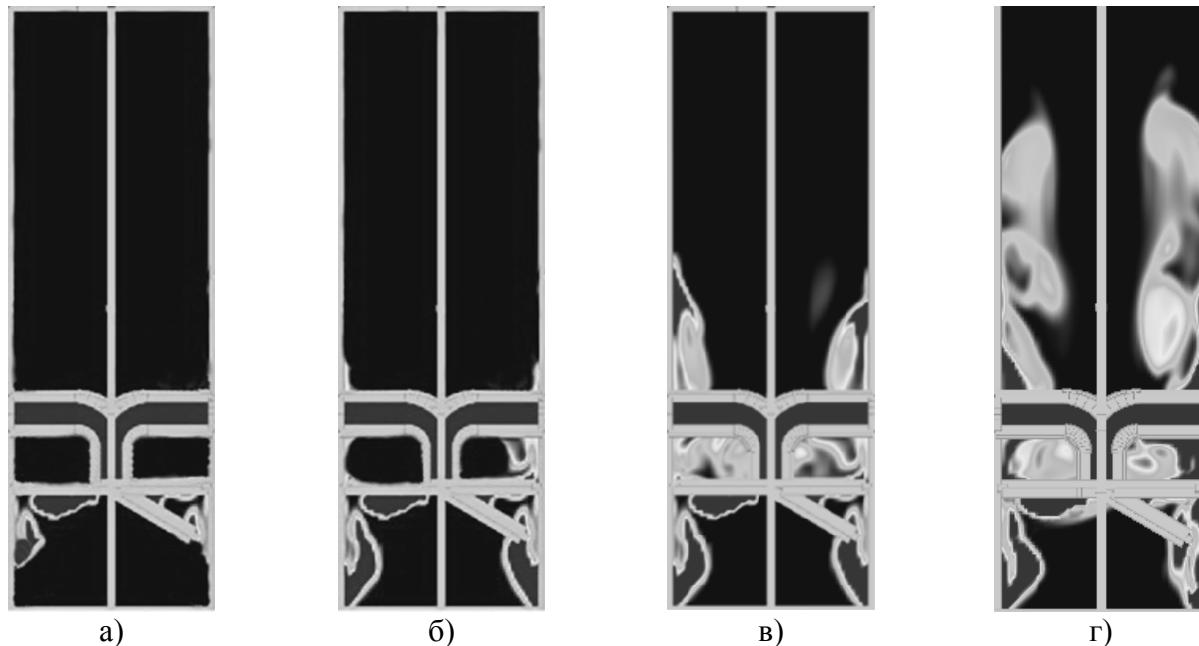


Рис. 4 – Эволюция процесса распределения жидкости в МСЭ

Сопоставление результатов компьютерного моделирования гидродинамики газового и газожидкостного потоков, а также распределение жидкости по объему МСЭ и характер её движения позволяет определить такие значения диаметра и высоты контактного патрубка, которые обеспечивают равномерное движение плёнки жидкости с минимальным значением брызгоноса.

Компьютерное моделирование гидродинамики движения газожидкостного потока и характера распределения жидкости по объему МСЭ позволяет подобрать его оптимальную конструкцию уже на начальном этапе исследований до проведения эксперимента на натурном образце.

1. Артюхов А.Є. Дослідження технологічних та конструктивних параметрів роботи багатофункціональних абсорберів [Текст] / Артюхов А.Є., Коробченко К.В., Ляпощенко О.О. / Хімія та хімічні технології: Матеріали І міжнародної конференції молодих вчених ССТ 2010. – Львів. – 2010. – С.96–97.
2. Артюхов А.Є. Розробка методики інженерного розрахунку енергоефективних абсорберів з масообмінно-сепараційними контактними ступенями [Текст] / Артюхов А.Є., Ляпощенко О.О., Коробченко К.В., Смілянська О.Ю. / Наукові праці ОНАХТ. – Одеса. – 2011. – Випуск 39. – С.62–65.
3. Коробченко К.В. Подбор оптимальных конструкций массообменных и сепарационных элементов для секций многофункционального абсорбера [Текст] / Коробченко К.В., Артюхов А.Є., Ляпощенко О.О. // «Сучасні технології в промисловому виробництві»: Матеріали Всеукраїнської міжвузівської науково-технічної конференції. – Суми: Вид-во СумДУ, 2010. – С. 147.

## ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ КСИЛОЛОВ

Мануйлова Е.В.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт, gti@restech.ru

Ароматические соединения относятся к наиболее крупнотоннажным продуктам основного органического и нефтехимического синтеза, уступая по масштабам производства лишь непредельным углеводородам. На долю аренов приходится 21% мировой нефтехимической продукции. Одним из основных продуктов нефтехимии являются ксилолы. Они широко применяются для производства пластических масс, синтетических волокон и других высокоценных продуктов. С каждым годом растет общий объем их потребления как ключевых соединений органического синтеза. В связи с этим актуальна задача повышения эффективности процессов производства ксилолов из нефтяного сырья.

Цель представленной работы заключается в разработке виртуального анализатора, позволяющего прогнозировать качество получаемой продукции и устанавливать оптимальные параметры для поддержания штатного режима работы промышленного объекта. В качестве объекта управления рассматривается блок ректификационных колонн, функционирующий в составе установки по выделению суммарных ксилолов (рис. 1) на действующем нефтеперерабатывающем заводе ООО «ПО «Киришинефтеоргсинтез» [1].

Согласно результатам анализа экспериментальных данных, полученных на промышленной установке, при неизменной загрузке и фиксированной выработке целевой фракции 105-127°C вариации содержания ароматических углеводородов C<sub>8</sub> в катализате риформинга достигают  $\pm 5\%$  масс. (что эквивалентно изменению выработки суммарных ксилолов на  $\pm 1,5$  т/ч, рис. 2). При условии стабильной работы установки каталитического риформинга основная причина этого явления – колебание количества ксилолообразующих компонентов в целевой фракции 105-127°C.

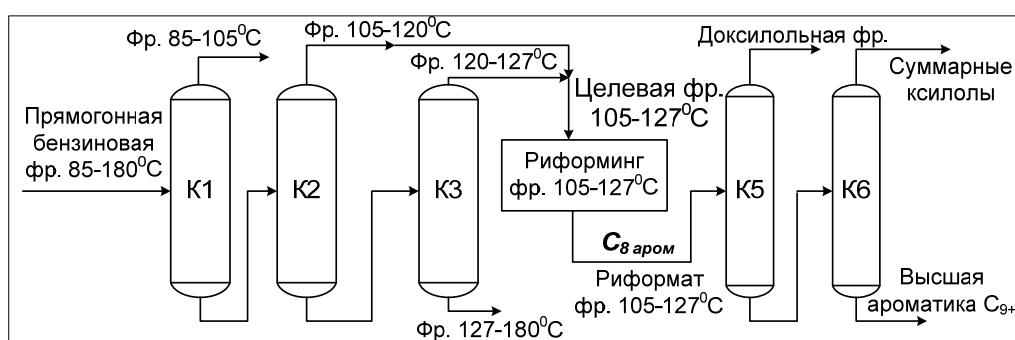


Рис. 1 – Принципиальная схема установки суммарных ксилолов

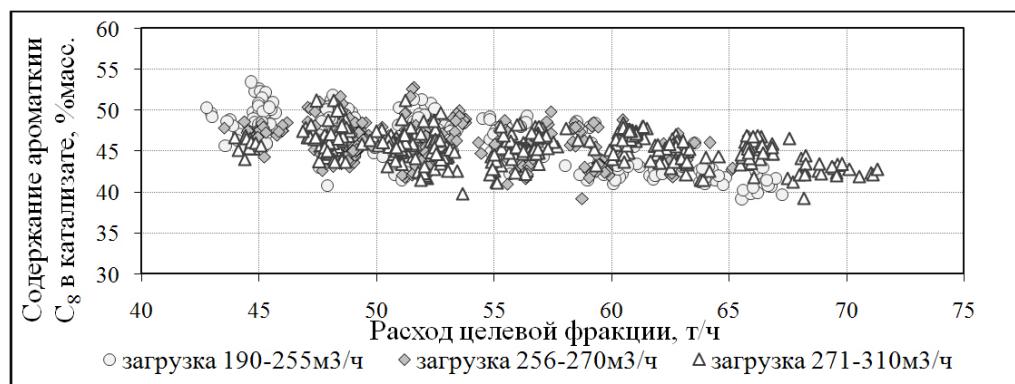


Рис. 2 – Содержание C<sub>8</sub> arom в стабильном катализате риформинга

Для выявления закономерностей ведения технологического процесса разработана модель блоков ректификационных колонн (рис. 1). Потарелочный расчет проводился на основании уравнений материального и теплового балансов, условий фазового равновесия для каждой тарелки с учетом неидеальности контактных устройств:

$$\begin{aligned} L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_jz_{i,j} - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)y_{i,j} &= 0, \\ y_{i,j} = \eta K_{i,j}x_{i,j} + (1-\eta)y_{i,j-1}, \quad \sum_{i=1}^m y_{i,j} - 1 &= 0, \quad \sum_{i=1}^m x_{i,j} - 1 = 0, \\ L_{j-1}H_{L_{j-1}} + V_{j+1}H_{V_{j+1}} + F_jH_{F_{j+1}} - (L_j + U_j)H_{L_j} - (V_j + W_j)H_{V_j} \pm Q_j &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $j$  – номер стадии;  $i$  – номер компонента;  $m$  – число компонентов;  $V_{j+1}$ ,  $V_j$  и  $L_{j-1}$ ,  $L_j$  – потоки пара и жидкости на входе и выходе из  $j$ -й стадии;  $F_j$  – поток питания, поступающий на  $j$ -ю стадию;  $W_j$ ,  $V_j$  – потоки пара и жидкости, которые выводятся с  $j$ -й стадии ректификационной колонны;  $H_{V_{j+1}}$ ,  $H_{L_{j-1}}$  и  $H_{V_j}$ ,  $H_{L_j}$  – энталпии пара и жидкости на входе и выходе из  $j$ -й стадии;  $y_{i,j+1}$ ,  $x_{i,j-1}$  и  $y_{i,j}$ ,  $x_{i,j}$  – концентрации  $i$ -го компонента в паре и в жидкости на входе и выходе из  $j$ -й стадии;  $z_{i,j}$  – концентрации  $i$ -го компонента в потоке питания, поступающем в  $j$ -ю стадию;  $Q_j$  – поток теплообмена на  $j$ -й стадии;  $K_{i,j}$  – константы фазового равновесия;  $\eta$  – КПД тарелки.

Система уравнений (1) для каждой из колонн решалась с помощью программного продукта Aspen Hysys. Параметрическая настройка модели проводилась путем подбора КПД контактных устройств таким образом, чтобы обеспечить наилучшую сходимость расчетных и фактических данных. Результаты проверки адекватности модели представлены в таблице 1 на примере данных о групповом составе нижнего продукта колонны К3. Показано, что модель блока ректификационных колонн К1-К3 и К5-К6 обеспечивает расчет составов продуктовых потоков с погрешностью, не превышающей 0,5% масс.

Таблица 1 – Углеводородный состав фракции 127–180°C, % масс.

Параметр	Значение		Расхождение
	Фактическое	Расчетное	
Нафтеновые углеводороды C <sub>8</sub>	6,32	5,94	0,38
Парафиновые углеводороды C <sub>8</sub>	3,26	3,15	0,11
Ароматические углеводороды C <sub>8</sub>	5,73	5,45	0,28
Нафтеновые углеводороды C <sub>9+</sub>	18,10	18,22	0,12
Парафиновые углеводороды C <sub>9+</sub>	54,49	54,66	0,17
Ароматические углеводороды C <sub>9+</sub>	12,10	12,19	0,09
Сумма	100	100	

Согласно данным лабораторного контроля в кубовом продукте колонны К3 в момент исследования содержалось 0,7–1,5 % масс. нафтенов C<sub>8</sub> и 1,5–3 % масс. н-октана, что при расходе этого потока, равного 80 т/ч, составило достаточный потенциал для увеличения содержания ксилолообразующих компонентов в целевой фракции на 1,8–3,6 т/ч.

Корреляция лабораторных данных по содержанию ароматических углеводородов C<sub>8</sub> и толуола в стабильном катализате риформинга (коэффициент корреляции 0,91) подтвердила гипотезу о необходимости утяжеления состава целевой фракции 105–127 °C. В этом случае толуолообразующие компоненты C<sub>7</sub> попадают во фракцию 85–180 °C без 105–127 °C, которая используется для приготовления высокооктанового бензина марок АИ–92,95. Это является дополнительным преимуществом, поскольку в штатном режиме работы ароматические углеводороды C<sub>7</sub>, содержащиеся в стабильном катализате риформинга, в качестве дистиллята колонны К5 идут на приготовление низкооктанового бензина марки АИ-80.

Модельные расчеты показали, что для такого изменения состава целевой фракции 105-127°C (минимальное вовлечение толуола и толуолобразующих компонентов C<sub>7</sub> и максимальный отбор нафтенов C<sub>8</sub> и н-октана) необходимо изменить следующие параметры работы блока колонн K1-K3:

- увеличить отбор дистиллята колонны K1 на 2-3 м<sup>3</sup>/ч;
- орошение в колонне K2 поддерживать на уровне не ниже 190 м<sup>3</sup>/ч;
- орошение в колонне K3 поддерживать на уровне не ниже 170 м<sup>3</sup>/ч.

Увеличение расхода орошений в колоннах K2, K3 необходимо для обеспечения четкого деления между углеводородами C<sub>8</sub> (нафтеновые и н-октан) и этилциклогексаном (соответствия выпускаемой продукции стандартам качества).

Предложения по изменению режимов работы были проверены и подтверждены в ходе опытно-промышленного пробега; при этом содержание ароматических углеводородов C<sub>8</sub> выросло с 46-47 до 51-52% масс. (рис. 3). Результаты опытной проверки подтвердили целесообразность выдвинутого предположения о необходимости утяжеления фракционного состава целевой фракции 105-127°C.

Далее для выработки рекомендаций по оптимальному ведению технологического процесса были решены следующие задачи:

- разработана статистическая модель, позволяющая рассчитывать содержание ароматических углеводородов C<sub>8</sub> в стабильном катализате риформинга в зависимости от основных режимных параметров при различных плановых показателях;
- разработан программный комплекс, позволяющий прогнозировать содержание компонентов C<sub>8</sub>аром. в катализате;
- рассчитаны оптимальные режимные параметры блока ректификационных колонн K1-K3 для различных вариантов работы ХТС производства ксилолов.



Рис. 3 – Содержание C<sub>8</sub>аром. в стабильном катализате риформинга

*Разработка статистической модели.* Для прогноза содержания ароматических углеводородов C<sub>8</sub> в катализате риформинга использовалась нелинейная регрессионная модель вида

$$C_8 = F(\bar{x}, \bar{a}) \equiv \sum_{j=1}^m a_j \zeta_j(\bar{x}), \quad (2)$$

где  $\bar{x}$  – вектор режимных параметров работы колонн K1-K3 (факторы);  $\bar{a}$  – вектор констант модели;  $m$  – число базисных функций;  $\zeta_j$  – базисные функции.

Для различных наборов базисных функций  $\{\zeta_j\}$  соответствующий вектор констант модели  $\bar{a}$  определялся по методу наименьших квадратов:

$$\bar{a} = \min_a \sum_{i=1}^n \left[ F_i(\bar{x}, \bar{a}) - F_i^{\text{експ}} \right]^2, \quad (3)$$

где  $n$  – число точек выборки, использованной для построения модели ( $n=180$ ; в ходе предварительной обработки данные АСУТП усреднялись за сутки на часовом тренде);  $F_i^{\text{эксп}}$  – данные лабораторного контроля по содержанию ароматических углеводородов  $C_8$  в стабильном катализате риформинга.

Итоговая модель содержит 11 регрессионных коэффициентов  $a_j$ , значимость которых проверена по критерию Стьюдента. Коэффициент корреляции расчетных и экспериментальных данных составил 0,97, стандартное отклонение – 0,72%масс., относительная погрешность – 1,6% (рис. 4).

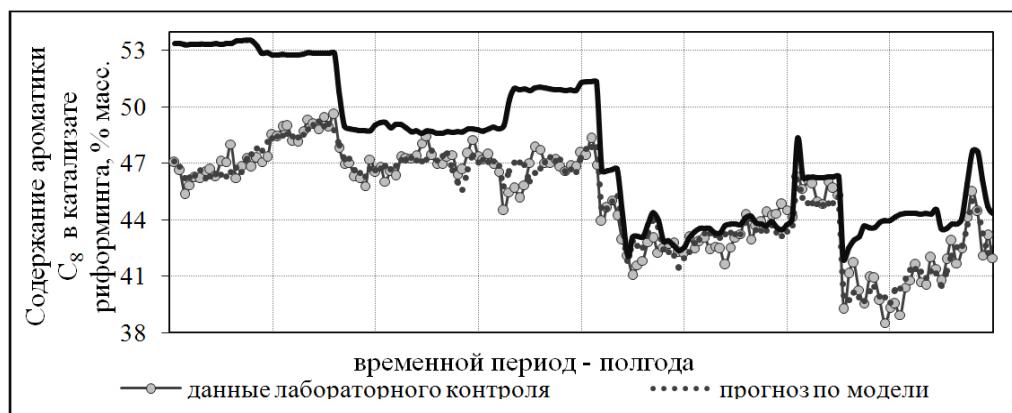


Рис. 4 – Содержание углеводородов  $C_8$  аром в катализате риформинга

*Оптимизационные расчеты.* Задача оптимизации сформулирована следующим образом:

$$\begin{aligned} \bar{x} = & \begin{cases} \max_x F(\bar{x}, \bar{a}) \\ \varphi_i(\bar{x}) \geq 0, i = 1, 2, \dots, 9, \\ \xi_j(\bar{x}) \geq 0, j = 1, 2, \dots, 9 \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

где линейные функции  $\varphi_i(\bar{x})$  формируются согласно ограничениям по ведению технологического процесса (расходы дистиллятов, орошений, паровые нагрузки ректификационных колонн К1-К3), а линейное ограничение  $\xi_j(\bar{x}) \geq 0$  задает область применимости статистической модели с учетом наблюдаемых корреляций первичных факторов (загрузка, отбор целевой фракции и т.д.).

Для всех точек выборки задача условной оптимизации численно решалась методом проекции градиента. Результаты расчетов свидетельствуют о том, что для большей части рассмотренных точек выборки имелся резерв для увеличения содержания ароматики  $C_8$  в катализате риформинга (рис. 4).

На основе статистической модели и оптимизационных расчетов разработан алгоритм поддержки принятия решений при ведении технологического процесса производства ксиолов (рис. 5).

*Описание алгоритма.* Основными исходными данными являются плановые показатели  $G, C$ , которые должны лежать в изученной области  $M_1$ . На их основе формируется множество  $M_2$  допустимых режимных параметров, в пределах которого рассчитываются оптимальные значения. Прогноз содержания ароматических углеводородов  $C_8$  осуществляется как для текущих режимных параметров, так и для оптимальных. Разработанный алгоритм функционально решает две задачи: виртуального анализа и оптимизации.

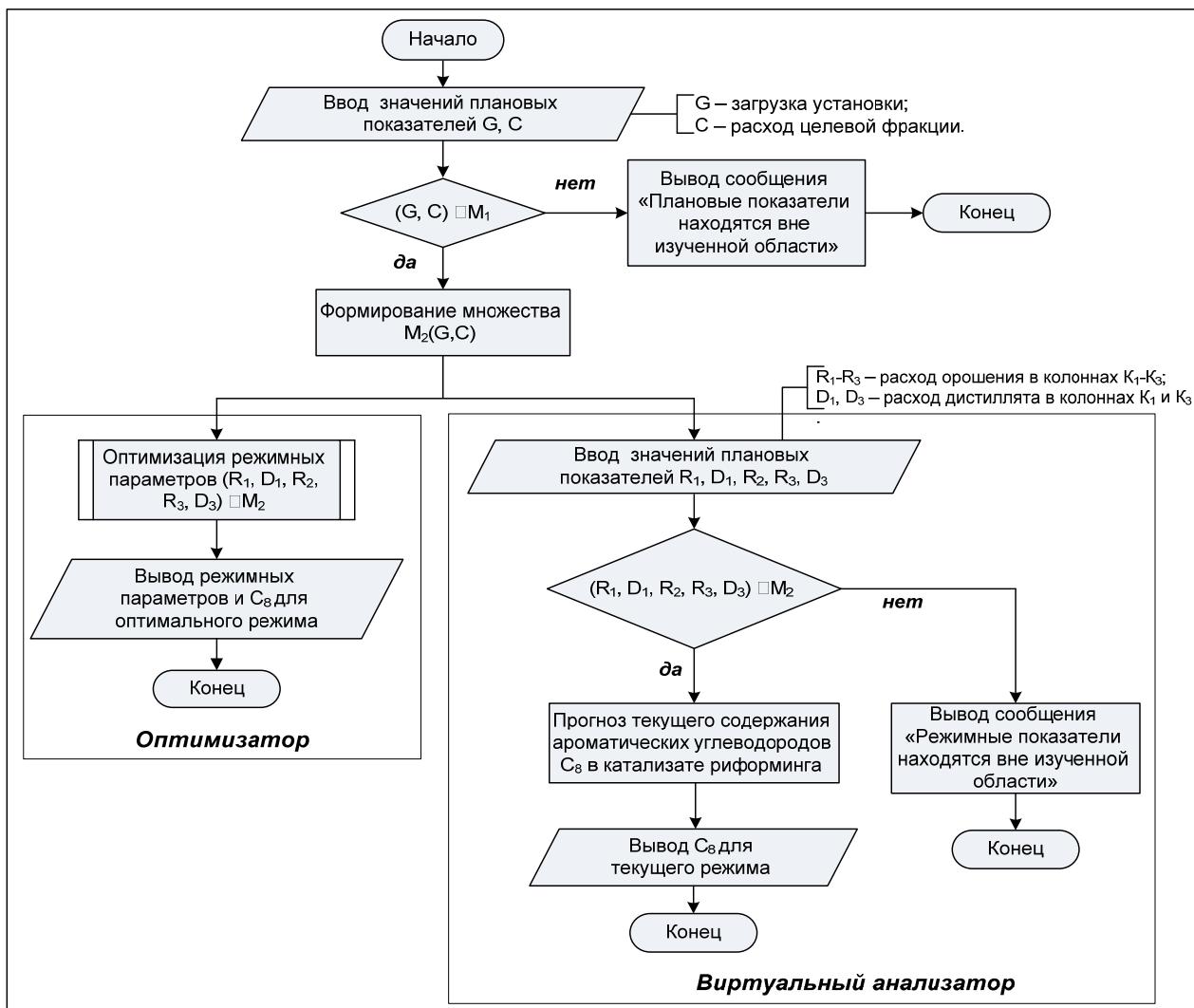


Рис. 5 – Алгоритм поддержки принятия решений при ведении технологического процесса производства ксилолов

*Разработка программного комплекса.* Статистическая модель и алгоритм поддержки принятия решений программно реализованы и позволяют решать следующие задачи:

- выдавать прогнозную оценку содержания ароматических углеводородов  $C_8$ , а также толуола и высшей ароматики  $C_{9+}$  в стабильном катализаторе риформинга по режимным показателям работы колонн К1–К3;
- проводить расчет оптимальных режимных параметров работы К1–К3, позволяющих повысить содержание ароматики  $C_8$  в стабильном катализаторе риформинга при заданных плановых показателях.

Корректность работы программного комплекса была подтверждена в ходе опытно-промышленной проверки на действующей установке в течение 2 месяцев. Содержание ароматики  $C_8$  в риформате увеличилось с 44 до 48,6 % масс., а выработка фракции суммарных ксилолов при неизменных плановых показателях выросла на 1,2 т/ч (на 8 %).

1. Баннов П.Г. Процессы переработки нефти. М.: ЦНИИТЭнефтехим, 2001. – 415 с.

**СЕКЦІЯ 3**  
**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРИРОДООХОРОННИХ ПРОЦЕСІВ**

**ИССЛЕДОВАНИЕ РАБОТЫ ПОЛИМЕРНЫХ СОЛНЕЧНЫХ КОЛЛЕКТОРОВ  
НА ОСНОВЕ СОТОВЫХ ПОЛИКАРБОНАТНЫХ ПЛАСТИКОВ**

Козлов Я.Н., Сухой М.П., Сухой К.М.

ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»,  
and8705@yandex.ru

Преобразование солнечной энергии в тепловую энергию на покрытие таких нужд как производство низкопотенциального тепла для системы горячего водоснабжения, отопление, кондиционирования воздуха и других технологических нужд является целесообразным с экономической и экологической точки зрения [1].

Перспективным направлением в гелиотехнике является использование полимерных материалов в качестве основных конструктивных элементов солнечных коллекторов (СК) [2]. При этом возможно решить ряд проблем, которые характерны для гелиосистем с металлическими СК. Использование полимерных СК позволяет существенно снизить затраты на изготовление, монтаж и обслуживание гелиосистем, повысить срок их эксплуатации.

Для внедрения и коммерциализации новых конструкций СК необходим теоретический и экспериментальный аппарат для нахождения теплотехнических характеристик СК. Для этого необходимо создание и сертификация комплексных лабораторных испытаний СК, которые бы позволили проводить оценку эффективности данных систем с точки зрения промышленного внедрения.

На основе фотометрического анализа нами разработаны конструкции полимерных СК, где в качестве основных конструкционных элементов использованы сотовые поликарбонатные пластики [3].

Для повышения степени черноты, а соответственно и КПД СК, в соты пластиков внедрялись, в ряде конструкций, в качестве поглотителей углеродная лента (рис. 1), активированный уголь и, собственно, одноярусный сотовый поликарбонатный пластик различных цветовых оттенков.

Для объективной и быстрой оценки тепловой эффективности СК в непостоянных погодных условиях, на практике применяют методы математического моделирования. Поэтому нами были построенные математические модели расчета теплотехнических характеристик полимерных СК на основе модели Хоттеля-Уилера-Бл исса. Которые позволяют с достаточной точностью описывать производительность СК в различных условиях работы и рационализировать конструкции СК на стадии проектирования.

Энергетический баланс коллектора в целом можно представить в виде:

$$A_c \{[S \cdot (\tau\alpha)]_b + [S \cdot (\tau\alpha)]_d\} = Q_u + Q_L + Q_s, \quad (1)$$

где  $A_c$  - площадь коллектора,  $m^2$ ;  $S$  - плотность потока солнечного излучения (прямого –  $b$  или рассеянного –  $d$ ), которое падает на единицу площади поверхности СК,  $Bm/m^2$ ;  $(\tau\alpha)$  - приведенная эффективная поглощающая способность абсорбера СК, с учетом прозрачной изоляции;  $Q_u$  - тепловой поток, который передается теплоносителю в СК (полезное тепло),  $Bm$ ;  $Q_L$  - общие тепловые потери (излучением, теплопроводностью, конвекцией),  $Bm$ ;  $Q_s$  - тепло, которое аккумулирует СК,  $Bm$ .

В качестве управляющих параметров в математических моделях использовались: температура окружающей среды, скорость ветра, интенсивность солнечного излучения, угол наклона СК к горизонту, толщина теплоизоляции и толщина воздушного зазора.

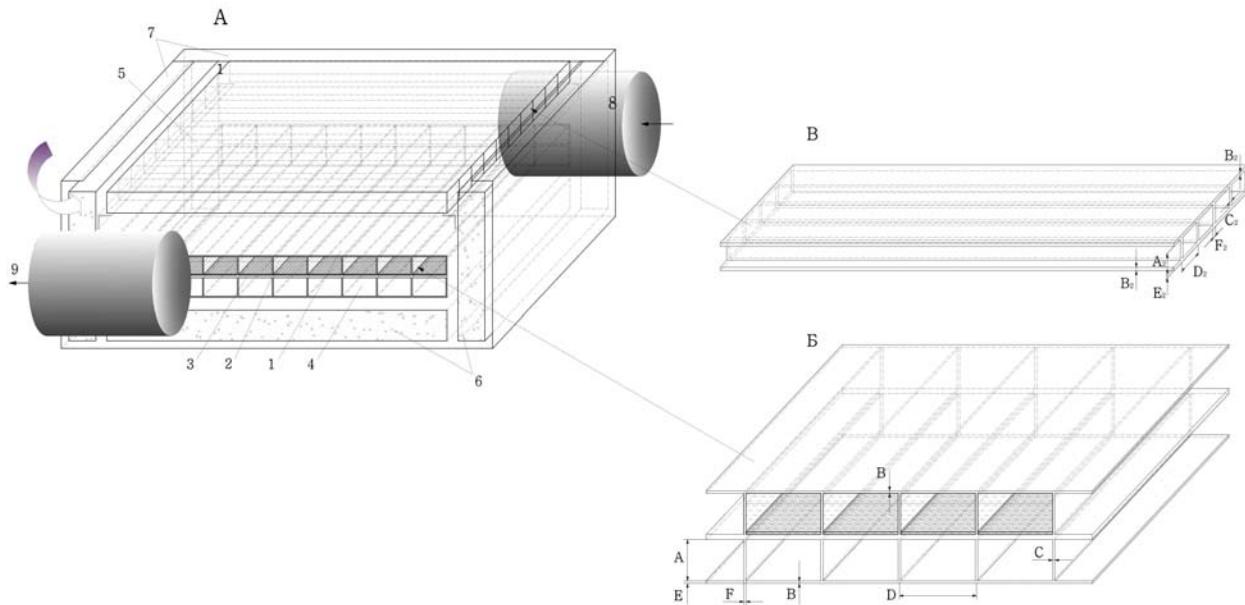


Рис. 1 – Схема полимерного СК ПСК-ВС2-2

1 – абсорбер; 2 – верхний ярус абсорбера; 3 – поглотитель солнечного излучения, выполненный из углеродной ленты; 4 – нижний ярус абсорбера; 5 – прозрачная изоляция; 6 – тепловая изоляция; 7 – корпус; 8 – входной канал для теплоносителя; 9 – канал для отвода теплоносителя

В качестве объектов моделирования рассмотрены элементы гелиосистем: прозрачная изоляция, поглощающие поверхности и теплоизоляционные покрытия.

В качестве функции отклика используется КПД СК.

Согласно результатам математического моделирования работы разных модификаций полимерных СК можно указать, что теплотехнические параметры СК существенно зависят от скорости ветра - повышение скорости ветра до 8 м/с приводит к росту общих тепловых потерь на 1,88–1,9 Вт/(м<sup>2</sup>·К) и к снижению КПД на 3,5–3,9 %. Толщина воздушного зазора между прозрачной изоляцией и абсорбера полимерных СК не существенно влияет на КПД и тепловые потери СК (при увеличении толщины с 0,01 до 0,10 м КПД изменяется не более чем на 0,3%). Рациональная толщина тепловой изоляции составляет 0,05 м, практически для всех исследуемых конструкций СК.

Экспериментально полимерные СК были исследованы на разработанных теплогидравлических стендах для натурных и лабораторных испытаний СК.

На рис. 2 представлены результаты этих исследований в виде зависимостей мгновенного КПД СК от приведенной температуры.

Результаты математического моделирования исследуемых полимерных СК хорошо согласовываются с результатами натурных и лабораторных испытаний полимерных СК, при этом относительная погрешность не превышает 5–7 %.

Разработанные нами конструкции полимерных СК по теплотехническим параметрам не уступают полимерным СК разных производителей, а коллекторы конструкций ПСК-АВ1-2, ПСК-АВ2-1, ПСК-ВС2-2 и ПСК-ВС1-2 превышают их.

Так оптический КПД  $F(\tau\alpha)$  для исследуемых конструкций полимерных СК находится в диапазоне от 0,59 до 0,86, а приведенный коэффициент тепловых потерь  $F'U_L$  составляет от 0,75 до 8,65 Вт/(м<sup>2</sup>·К). Оптический КПД уже существующих полимерных СК составляет 0,62–0,78, лучших металлических 0,72–0,76, а вакуумных – 0,60–0,81.

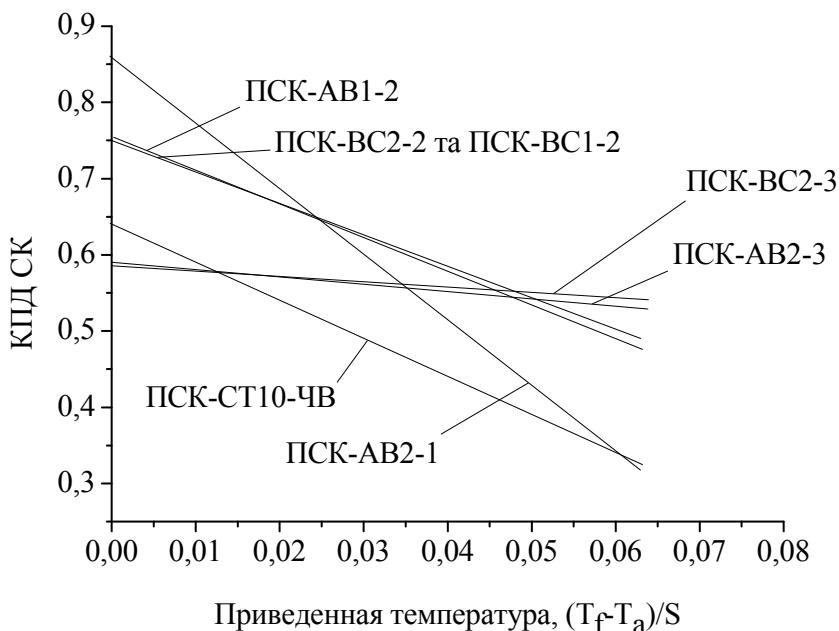


Рис. 2 – Залежність КПД СК від приведеної температури  $(T_f - T_a)/S$  розроблених полімерних СК

Учитывая изложенное, можно сделать выводы о том, что разработаны новые технические решения и технологии изготовления солнечных коллекторов, которые позволяют кардинально снизить их вес и стоимость, а теплотехнические характеристики оставить на высоком уровне.

1. Голицын М.В. Альтернативные энергоносители [Текст] / М.В. Голицын, А.М. Голицын, Н.В. Пронина – М.: Наука, 2004. – 159 с.
2. Воробьев В.М. Использование полимерных материалов в солнечной энергетике [Текст] / В.М. Воробьев, Ю.А. Селихов, С.И. Бухкало // Экотехнологии и ресурсосбережение. - 2003. - № 6 - с.31-34.
3. Фотометричні дослідження стільникових полікарбонатних пластиків з метою їх ефективного використання в якості конструктивних елементів сонячних колекторів [Текст] / Я.М. Козлов, М.П. Сухий, К.М. Сухий, М.В. Бурмістр // Металлургическая теплотехника. – 2010. – Вып. 2(17) - с. 113-123.

## ОПТИМИЗАЦІЯ ПРОЦЕССА СОРБЦІЇ ПАВ ПОЛІМЕРНИМИ СОРБЕНТАМИ

Тымчук А.Ф., Ласкорунская Л.А.

Одесский национальный университет имени И.И. Мечникова, Tymchuk@onu.edu.ua

Сорбция поверхностно-активных веществ из водных растворов и сточных вод предприятий является довольно сложной практической задачей. Кроме практического, изучение закономерностей сорбции имеет теоретическое значение для разработки многих физико-химических и биологических процессов. Современные технологии сорбционной очистки воды предусматривают поиск новых недорогих, экологически безопасных сорбентов. К числу таких сорбентов могут быть отнесены полимерные сорбенты - хитин и хитозан. Хитин – второй по распространенности в природе биополимер после целлюлозы. Наиболее доступными источниками хитина являются отходы промысла морских беспозвоночных.

Целью исследований явилась оптимизация процесса сорбции поверхностно-активных веществ полимерными сорбентами путем использования наиболее подходящих сорбционных моделей.

В качестве сорбента использовали высокомолекулярный хитин, полученный из панцирей ракообразных, в качестве сорбатов ионогенные поверхности-активные вещества (ПАВ) (пределные одноатомные спирты с длиной углеводородного радикала от 8 до 10 атомов углерода). Сорбенты предварительно измельчали с последующим рассеиванием на фракции, для исследований отбирали фракцию с размером частиц  $(1-5)\cdot10^{-5}$  м. Сорбцию проводили в статических условиях, для установления сорбционного равновесия было достаточно одного часа. Математическую обработку экспериментальных изотерм сорбции осуществляли путем их линеаризации с последующим использованием различных моделей сорбции. Исследования показали, что в изучаемых системах мономолекулярный слой не может полностью скомпенсировать излишнюю поверхностную энергию, поэтому влияние поверхностных сил распространяется на последующие сорбционные слои, что приводит к образованию полимолекулярных слоев ПАВ на поверхности сорбента. Подобные случаи физической сорбции невозможно пояснить с точки зрения теории мономолекулярной сорбции Лэнгмюра, поэтому для их описания использовали принципиально другой подход, который отражен в положениях теории полимолекулярной сорбции Поляни и БЭТ.

Согласно теории Поляни, за меру интенсивности сорбционного взаимодействия принимали адсорбционный потенциал Е. Величина потенциала для исследуемых систем находится в пределах от 2 до 14 кДж/моль, убывает с увеличением толщины сорбционного слоя, что согласуется с данными, приведенными в литературе. Для расчетов параметров сорбции использовали величину удельной поверхности сорбента, ( $47\text{ m}^2/\text{г}$ ). Значения площади, приходящейся на одну молекулу в сорбционном слое, полученные с применением уравнений теории БЭТ, составили от  $22,6\cdot10^{-20}\text{ m}^2$  до  $16,2\cdot10^{-20}\text{ m}^2$ , соответственно для октилового и децилового спиртов, что практически совпадает с величиной площади, приходящейся на одну молекулу ПАВ в сорбционном слое, представленной в литературе -  $21,6\cdot10^{-20}\text{ m}^2$ .

Исследования проводили в интервале температур 293-318 К. Как показал эксперимент, повышение температуры в исследуемом интервале приводит к снижению величины сорбции ПАВ хитином, что соответствует физическому механизму сорбции. Такой механизм сорбции подтверждают экспериментальные данные по десорбции. Величина десорбции становится постоянной, начиная с небольшого промежутка времени 60 минут, и выражается как остаточная насыщенность сорбента. В исследуемых системах диаметр микропор составляет около 4 нм, поэтому молекулы ПАВ, имеющие размеры молекул в до 7 нм могут заполнять микропоры сорбента и задерживаться в них.

Математическая обработка массива экспериментальных данных по сорбции ПАВ полимерными сорбентами показала, что сорбцию ионогенных ПАВ (катионных и анионных) целесообразно проводить с использованием сорбента хитозана, который благодаря своему строению более реакционноспособен. Наиболее подходящим для данных систем является уравнение Хилла – Де Бура. Оно позволяет учесть ассоциацию сорбированных молекул ПАВ в поверхностном слое, выполнимо при степенях заполнения сорбента до 0,6-0,8 и связывает количество сорбированного вещества (выраженное через степень заполнения монослоя) с равновесной относительной концентрацией:

$$\frac{C}{C_0} = k_2 \frac{\Theta}{1-\Theta} e^{\frac{\Theta}{1-\Theta}} e^{-k_1 \Theta}, \quad (1)$$

где  $\Theta$  – степень заполнения поверхности сорбента;  $k_1$  – константа, учитывающая взаимодействие сорбат – сорбент;  $k_2$  - константа, учитывающая взаимодействие сорбат – сорбат.

В модифицированной для сорбции ПАВ из растворов форме уравнение имеет вид :

$$\frac{\Theta_i}{1-\Theta_i} + \ln \frac{\Theta_i}{1-\Theta_i} - \ln C_i = \ln K_1 \left( \frac{\omega_i}{\omega_{H_2O} \cdot 55,5} \right) + K_2 \Theta_i , \quad (2)$$

где  $\Theta_i$  - степень заполнения поверхности сорбента сорбатом;  $K_1$  – константа, отражающая взаимодействие молекул сорбата с сорбентом;  $K_2$  – константа, отражающая межмолекулярное притяжение в сорбционном слое;  $\omega_i$  и  $\omega_{H_2O}$  - соответственно площади, занимаемые на поверхности сорбента молекулой органического компонента и молекулой воды.

Линеаризация сорбционных уравнений показала, что уравнение Фрейндлиха достаточно хорошо описывает сорбцию в интервале концентраций, не превышающих  $(4-5) \cdot 10^{-5}$  моль/л. Уравнение Лэнгмюра справедливо в более широком интервале концентраций, описывает сорбцию на однородной поверхности без учета взаимодействия сорбированных молекул друг с другом.

Для всех исследуемых систем были рассчитаны параметры процесса сорбции (табл. 1), что показано на примере анионных ПАВ – алкилсульфатов натрия.

*Таблица 1 – Параметры сорбции АСН хитозаном*

Система АСН - хитозан	По ур Фрейндлиха		По ур. Ленгмюра		По ур. Х-Де Бура	
	1/n	$\beta \cdot 10^4$ , л/г	$K \cdot 10^4$ , л/моль	$A_\infty \cdot 10^4$ , моль/г	$K_1 \cdot 10^4$ , л/моль	$K_2$
ДДСН	0,34	1	5,9	1,04	1,9	5,90
ТДСН	0,37	1	6,0	1,05	2,8	6,13
ГДСН	0,48	1	6,4	1,15	4,4	7,03
ОДСН	0,55	2	6,8	1,62	12,0	3,55

## КОМП'ЮТЕРНИЙ РОЗРАХУНОК ПРОЦЕСУ ЗНЕШКОДЖЕННЯ ГАЗОВИХ ВИКІДІВ ВИРОБНИЦТВА КАВИ

Приміська С.О., Безносик Ю.О., \*Решетіловський В.П., Ткач В.В.

Національний технічний університет України «КПІ», primiska@rambler.ru

\*Institut fur Technische Chemie Technische Universität Dresden, Germany,  
Wladimir.Reschetilowski@chemie.tu-dresden.de

**Вступ.** Технологічні процеси на підприємствах різноманітні й супроводжуються виділенням в атмосферу значних кількостей забруднюючих речовин. Основну їхню частину становлять різні види пилу: органічна (борощняна, цукрова, тютюнова, зернова, какао, горіхів, сухого лома й кормових дріжджів, вітаміну В<sub>12</sub>, синтетичних мийних засобів і ін.) і неорганічна (утримуючий двоокис кремнію, вапнякова, вугільна й т.п.). Крім того, від основного виробництва підприємств переробної промисловості в атмосферу надходять оксиди сірки, азоту та вуглецю, пари спиртів і складних ефірів, жирні кислоти, вуглеводні (парі органічних розчинників), мікроорганізми, аміак, пари кислот і ін. Серед них на частку кавових жаровень припадає значна частина викидів оксидів азоту [1].

**Опис процесу.** Процес жаріння кавових бобів складається з наступних процесів. Температура жаріння знаходитьться в межах 200–500 °C протягом 5–20 хвилин, в залежності від бажаного кольору кавового боба і аромату. Жаровні - горизонтальні барабани, що обертаються, наповнені зеленими кавовими бобами, під дією гарячих горючих газів. Значна частина газоподібних емісій припадає на оксиди азоту. Емісії твердих частинок від жаровні, регулюються високоефективними циклонами. Очистка ж від оксидів азоту за звичай не виконується не дивлячись на його значний вміст в викидних газах. Так при продуктивності жаровні 1 кВт/год, або 1 т зеленої кави/години, часу роботи в рік 4160 годин та потужності 1,8 кВт/год маємо такі показники (табл. 1) [2].

Таблиця 1 – Потужність жаровні кавових зерен

Об'єкт	кВт/год	год/рік	кВт/рік
Жаровня	1,8	4160	7488
На виході з пальника	2	4160	8320
Загалом			15,808

Таблиця 2 – Питомі викиди шкідливих речовин від жаровні

Забруднювач	Коефіцієнт викидів кг/кВт	кВт/рік	т/рік
NO <sub>x</sub>	0,1	15,808	1,58
SO <sub>2</sub>	0,0003	15,808	0,0047

$$\frac{dy_{out,i}}{dt} = \frac{2RT}{\varepsilon \cdot V_i \cdot P_t} \left[ \frac{FP_t}{RT} (y_{in,i} - y_{out,i}) - K \cdot \bar{y}_i \cdot \theta_v \cdot q_o \cdot w_i \right], \quad (1)$$

$$\theta_{v_i} = \frac{FP_t M}{w_i RT} (1.5 y_{in,i} t_H + 0.5 y_{out,i} t_H - \sum_0^{t_H} \bar{y}_i \Delta t), \quad i = \overline{1, k},$$

де  $F$  – витрата газу, м<sup>3</sup>/год;  $R$  – газова стала, (Па·м<sup>3</sup>)/(моль·К);  $T$  – температура, К;  $P_t$  – загальний тиск, Па;  $\bar{y}_i = (y_{in,i} - y_{out,i})/2$  – середня мольна частка газу в  $i$ -ому об'ємі;  $M$  - молярна маса NO, кг/моль;  $K$  – постійний коефіцієнт, с<sup>-1</sup>;  $\varepsilon$  – порожність;  $\theta_v$  – адсорбційна здатність;  $t_H$  – час насичення адсорбенту, год;  $q_o$  – поглинена кількість адсорбуємого NO на одиницю маси адсорбенту, моль/кг;  $V$  – об'єм цеоліту, м<sup>3</sup>;  $w$  – маса цеоліту, кг;  $k$  – кількість об'ємів.

Початкові умови:

Процесу адсорбції

$$t = t_0, \quad y(t_0) = y_0, \quad (2)$$

$$\theta_V(0) = 1.$$

Процесу десорбції

$$t = t_H, \quad y(t_H) = y_H, \quad (3)$$

$$\theta_V(t_H) = 0.$$

Для розрахунку за математичною моделлю було розроблено програмний пакет ZEOAD, в основу якого покладено різницева схема задачі Коші. В результаті розрахунку по моделі, отримано значення концентрації оксиду азоту в адсорбенті у часі, для кожного нового обчислення, масу адсорбованого оксиду азоту та час насичення адсорбенту.

Так згідно розрахунків за математичною моделлю (табл. 3), при даних технологічних параметрах, маса адсорбенту, необхідна для поглинання річної кількості викидів оксидів азоту від кавової жаровні, становить 4,78 тон цеоліту 13Х.

Таблиця 3 – Маса поглинутоого оксиду азоту (II) на цеоліті 13Х

Параметр розрахунку	Температура		
	298 К	308 К	318 К
$t_{tot}$ , год	0,005	0,005	0,005
$\int_{t_{tot}}^{t_H} \Delta C dt$	0,122	0,06	0,08
$m_{NO}$ , г	14,034	11,421	9,034
$m_{NO}$ , г на 100 г цеоліта	40,097	32,631	25,811
$g$ , г/г	0,401	0,326	0,258

**Висновки.** Нова технологія очистки викидних газів від оксидів азоту може знайти широке застосування в харчовій промисловості, зокрема для очистки газових викидів кавових жаровень, коптильних та ін.

1. *Ostendorf R. G. (ed.), "Coffee Processing", Air Pollution Engineering Manual, Van Nostrand Reinhold, New York, NY, 1992.*
2. *Source Test Report For Volatile Organic Compounds And Carbon Monoxide Emissions From The Coffee Roaster 7D Thermal Oxidizer At General Foods-Maxwell House Division, Hoboken, New Jersey, Air Consulting and Engineering, Inc., Gainesville, FL, May 9, 1991.*
3. *Prymyska S. Simulation of the behavior of the dynamic adsorption of NO<sub>x</sub> over synthetic zeolites [Електронний ресурс] / Prymyska S., Beznosyk Yu., Reschetilowski W. et. al.// ACHEMA – 2009, Frankfurt am Main.*

## ВСТАНОВЛЕННЯ ОСОБЛИВОСТЕЙ СОРБЦІЇ ЦЕЗІЮ-137 ГЛІНИСТИМИ МІНЕРАЛАМИ З ВИКОРИСТАННЯМ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛОВАННЯ

Колябіна Д.О, Жигір О.М.

Національний технічний університет України «КПІ», amimo@i.ua

Україна знаходиться на початкових стадіях реалізації програми створення геологічного сховища (ГС), тому має можливість використовувати передовий міжнародний досвід для вибору оптимального типу конструкції ГС. Більшість систем геологічної ізоляції передбачають створення сховища на глибині кількох сотень метрів у певних вміщуючих породах у сприятливому геологічному оточенні. Типовою складовою радіоактивних відходів (РАВ), що підлягають захороненню у сховищах геологічного типу є цезій-137, значна кількість якого утворюється в реакціях ядерного ділення, характеризується періодом напіврозпаду 30,17 років [1]. Виходячи з хімічних властивостей цезію слід очікувати, що у разі порушення цілісності контейнеру він буде надходити безпосередньо до геологічної складової сховища, оскільки він не буде утворювати важко розчинних сполук після виходу із матриці [1].

Таким чином, дослідження особливостей фіксації цезію глинистими мінералами надасть додаткові дані, які можуть бути використані при виконанні оцінки безпеки сховища. При оцінці сорбційної здатності глин як потенційного матеріалу системи інженерних бар'єрів сховищ РАО, важливо врахувати наявність двох основних механізмів сорбції радіонуклідів - іонообмінної і необмінної ( в результаті якої радіонукліди міцно фіксуються природним сорбентом.). Експериментальне дослідження кінетики обмінної та необмінної адсорбції <sup>137</sup>Cs раніше було проведено на зразках бентоніту Черкаського родовища (2-й продуктивний горизонт Дащуківського кар'єру) та каоліну Глуховецького родовища. [2].

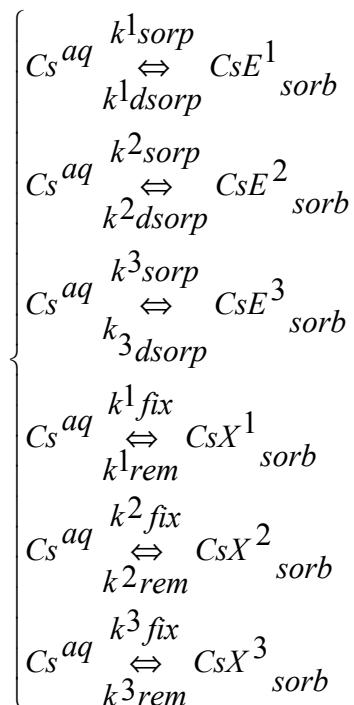
Загалом на поверхні каолініту виділяються п'ять типів поверхневих груп: дітригональні порожнини на поверхні тетраедричних шарів; алюмінольні групи на поверхні октаедричних шарів; сіланольні та алюмінольні групи, розташовані на краях шарів та Льюїсові кислотні центри на краях. Проте, реакційно здатними є тільки три із перерахованих вище типів груп: сіланольні та алюмінольні групи, розташовані на краях шарів, та Льюїсові кислотні центри на краях [3].

Особливості будови бентоніту зумовлюють виділення як мінімум трьох типів реакційних центрів на його поверхні: слабко кислі гідроксильні сіланольні (>SiOH) та алюмінольні (>AlOH) групи на бокових гранях та ребрах [3].

Виходячи із особливостей мінерального складу глинистих мінералів та структури бентоніту та каолініту, були зроблені наступні припущення [3]:

- обмінна та необмінна адсорбція  $^{137}\text{Cs}$  протікає одночасно на трьох типах активних центрів;
- на кожному типі центрів протікає два протилежно спрямованих процеси: адсорбція-десорбція на обмінних центрах та фіксація-ремобілізація на необмінних;
- загальний розподіл  $^{137}\text{Cs}$  як між обмінними, так і необмінними центрами зумовлюється конкуренцією між зазначеними процесами;
- на першому етапі поглинання цезію протікає тільки на першому типі сорбційних центрів, на другому етапі - одночасно на двох типах сорбційних центрів, на третьому – на всіх типах одночасно;
- процеси сорбції/десорбції описуються кінетичними рівняннями першого порядку.

В загальному вигляді процес поглинання цезію формально можна формально описати наступною системою реакцій:



де  $\text{Cs}^{aq}$  – позначено цезій у розчині;  $\text{CsE}_{sorb}^1, \text{CsE}_{sorb}^2, \text{CsE}_{sorb}^3$  – концентрація обмінного цезію на центрах першого, другого та третього типів відповідно;  $k_{sorp}^1, k_{sorp}^2, k_{sorp}^3$  – константи швидкостей обмінної сорбції, відповідно, на першому, другому та третьому типах сорбційних центрів, моль/(г·дoba);  $k_{dsorp}^1, k_{dsorp}^2, k_{dsorp}^3$  – константи швидкості обмінної десорбції на першому, другому та третьому типах сорбційних центрів, моль/(г·дoba);  $\text{CsE}_{sorb}^1, \text{CsE}_{sorb}^2, \text{CsE}_{sorb}^3$  – концентрація необмінного цезію на центрах першого, другого та третього типів відповідно;  $k_{fix}^1, k_{fix}^2, k_{fix}^3$  – константи швидкостей фіксації цезію на центрах першого, другого та третього типу відповідно, моль/(г·дoba);  $k_{rem}^1, k_{rem}^2, k_{rem}^3$  – константи швидкостей ремобілізації цезію з необмінних центрів першого, другого та третього типу відповідно, моль/(г·дoba). Враховуючи закон збереження маси (в даному випадку розглядається закрита система) можна записати:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_{CsE^1sorb}}{dt} = k^1_{sorp} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^1_{dsorp} \cdot C_{CsE^1sorb} \\ \frac{dC_{CsE^2sorb}}{dt} = k^2_{sorp} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^2_{dsorp} \cdot C_{CsE^2sorb} \\ \frac{dC_{CsE^3sorb}}{dt} = k^3_{sorp} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^3_{dsorp} \cdot C_{CsE^3sorb} \\ \frac{dC_{CsX^1sorb}}{dt} = k^1_{fix} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^1_{rem} \cdot C_{CsX^1sorb} \\ \frac{dC_{CsX^2sorb}}{dt} = k^2_{fix} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^2_{rem} \cdot C_{CsX^2sorb} \\ \frac{dC_{CsX^3sorb}}{dt} = k^3_{fix} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^3_{rem} \cdot C_{CsX^3sorb} \\ C_{CsE} = C_{CsE^1sorb} + C_{CsE^2sorb} + C_{CsE^3sorb} \\ C_{CsX} = C_{CsX^1sorb} + C_{CsX^2sorb} + C_{CsX^3sorb} \\ C_{Cs}^0 = C_{Cs}^{aq} + C_{CsX} + C_{CsE} \\ \frac{dC_{CsE^2sorb}}{dt} = 0 \quad \text{при } t < t^1_E \\ \frac{dC_{CsE^3sorb}}{dt} = 0 \quad \text{при } t < t^2_E \\ \frac{dC_{CsX^2sorb}}{dt} = 0 \quad \text{при } t < t^1_X \\ \frac{dC_{CsX^3sorb}}{dt} = 0 \quad \text{при } t < t^2_X \\ k^i_{sorp}, k^i_{dsorp}, k^i_{fix}, k^i_{rem}, C_{CsX^isorb}, C_{CsE^isorb}, C_{Cs}^{aq} \succ 0, i = 1, 2, 3 \end{array} \right.$$

де  $C_{Cs}^0$  - початкова концентрація цезію;  $C_{Cs}^{aq}$  - концентрація цезію у розчині на момент часу  $t$ , (моль/л);  $C_{CsX^1sorb}, C_{CsX^2sorb}, C_{CsX^3sorb}$  - концентрація необмінного цезію, сорбованого, відповідно, на першому, другому та третьому типах сорбційних центрів на момент часу  $t$ , (моль/г);  $C_{CsE^1sorb}, C_{CsE^2sorb}, C_{CsE^3sorb}$  - концентрація обмінного цезію, сорбованого, відповідно, на першому, другому та третьому типах сорбційних центрів на момент часу  $t$ , (моль/г);  $C_{CsE}$  - загальна концентрація обмінного цезію на всіх трьох типах центрів;  $C_{CsX}$  - загальна концентрація необмінного цезію на всіх трьох типах центрів.

Оскільки:

$$C_{Cs}^{aq} = C_{Cs}^0 - C_{CsE^1sorb} - C_{CsE^2sorb} - C_{CsE^3sorb} - C_{CsX^1sorb} - C_{CsX^2sorb} - C_{CsX^3sorb},$$

математичну модель можна записати у вигляді:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_{CsE^1sorb}}{dt} = k^1_{sorp} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^1_{dsorp} \cdot C_{CsE^1sorb} \\ \frac{dC_{CsE^2sorb}}{dt} = k^2_{sorp} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^2_{dsorp} \cdot C_{CsE^2sorb} \\ \frac{dC_{CsE^3sorb}}{dt} = k^3_{sorp} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^3_{dsorp} \cdot C_{CsE^3sorb} \\ \frac{dC_{CsX^1sorb}}{dt} = k^1_{fix} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^1_{rem} \cdot C_{CsX^1sorb} \\ \frac{dC_{CsX^2sorb}}{dt} = k^2_{fix} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^2_{rem} \cdot C_{CsX^2sorb} \\ \frac{dC_{CsX^3sorb}}{dt} = k^3_{fix} \cdot C_{Cs}^{aq} - k^3_{rem} \cdot C_{CsX^3sorb} \\ C_{Cs}^{aq} = C_{Cs}^0 - C_{CsE^1sorb} - C_{CsE^2sorb} - C_{CsE^3sorb} - C_{CsX^1sorb} - C_{CsX^2sorb} - C_{CsX^3sorb} \end{array} \right.$$

Початкові умови ( $t=0$ ):

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{CsE^0sorb}, C_{CsE^0sorb}, C_{CsE^0sorb}, C_{CsX^0sorb}, C_{CsX^0sorb}, C_{CsX^0sorb} = 0 \\ C_{Cs}^{aq,0} = C^0_{Cs} \end{array} \right.$$

де  $C_{CsX^1sorb}^0, C_{CsX^2sorb}^0, C_{CsX^3sorb}^0$  – концентрація не обмінного цезію, сорбованого на трьох типах центрів, відповідно, (моль/г) та  $C_{CsE^1sorb}^0, C_{CsE^2sorb}^0, C_{CsE^3sorb}^0$  – концентрація обмінного цезію, сорбованого на трьох типах центрів, відповідно (моль/г) при  $t=0$ ;  $C_{Cs}^{aq,0}$  – концентрація цезію у розчині (моль/л) при  $t=0$ ;  $t^1_E, t^2_E, t^1_X, t^2_X$  – час початку другого та третього етапів для обмінного та необмінного цезію, год.

Зворотна задача кінетики полягає у визначенні параметрів кінетичного рівняння при відомому профілі концентрацій, що отримано експериментально [2].

Для вирішення системи диференційних рівнянь був використаний метод Річардсона [4]. Перевагою методу є змінний крок і можливість змінювати порядок опорного чисельного методу (Рунге-Кута), що дозволяє отримувати результати з високою точністю. Ідея методу полягає в багаторазовому подрібненні кроку інтегрування, і також в багаторазовому застосуванні процесу обчислення. Алгоритм, що реалізовано для визначення значень констант швидкостей :

1. Задається приблизне значення констант швидкостей згідно раніш отриманим даним у [2].
2. Задаються діапазони, в яких може відбуватися зміна значень констант [3].
3. Задається кількість розіграшів і крок зміни констант.
4. Відбувається генерація набору значень констант швидкостей в заданому діапазоні.
5. Далі задається система диференційних рівнянь
6. Системи диференційних рівнянь вирішуються з використанням методу Річардсона [4].

7. Отримані значення концентрацій для кожного набору порівнюються з експериментальними. Відбувається розрахунок середньоквадратичного відхилення. На графік виводяться кольорове зображення пар констант з набору. Дляожної пари значень виводиться точка кольору, який відповідає діапазону значення похибки для цієї пари. Це наведено на рис1. Діапазон середньоквадратичного відхилення і номера констант обираються користувачем при натисненні кнопки *Customise*.

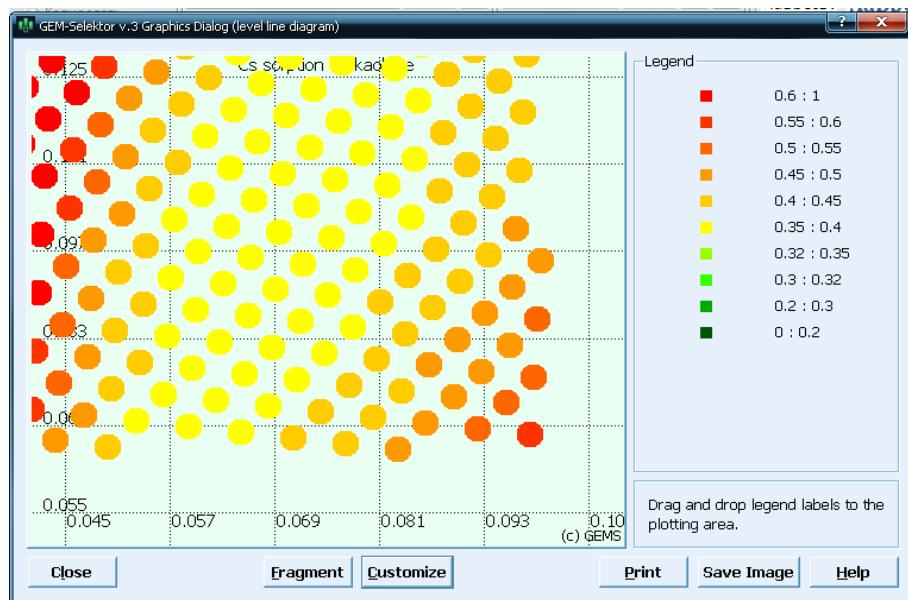


Рис. 1 – Вікно графічного виводу

Алгоритм реалізовано у програмі StartKinetic[5]. На рис.2 наведено вікно графічного виводу програми, де представлено зміну концентрації  $^{137}\text{Cs}$  з часом за результатами розрахунків (суцільна лінія) та експериментальні дані для випадку сорбції  $^{137}\text{Cs}$  каолінітом Глуховецького родовища.

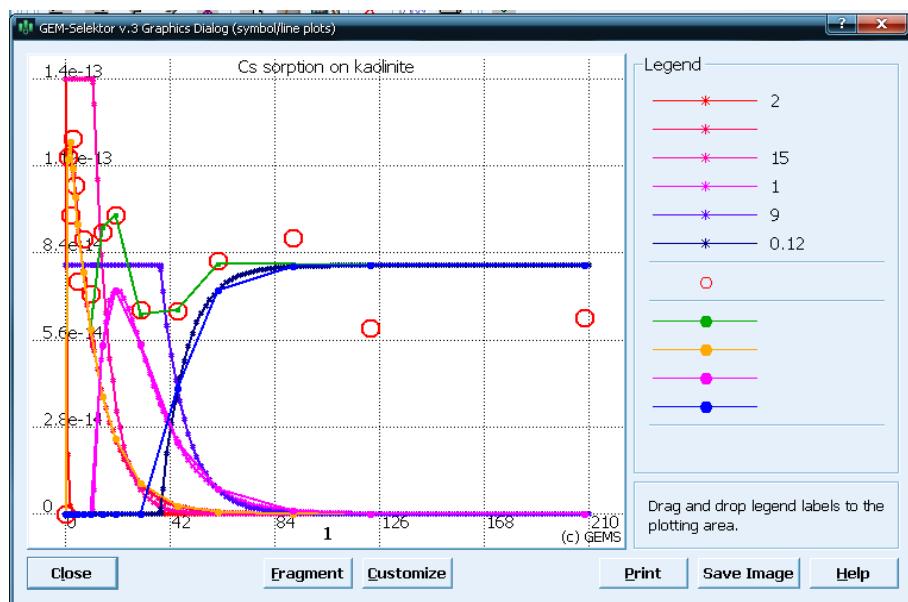


Рис. 2 – Вікно графічного виводу

Результати дослідження сорбції  $^{137}\text{Cs}$  глинистими мінералами, що є потенційним матеріалом засипки геологічного сховища а саме каоліном та бентонітом показали, що поглинання  $^{137}\text{Cs}$ , як каоліном так і бентонітом протікає по двом механізмам : обмінне та

необмінне поглинання. Обидва типи поглинання протікають у три етапи, що відповідає наявності трьох типів активних центрів на поверхні.

Встановлено, що необмінна сорбція  $^{137}\text{Cs}$  ефективніше відбувається на бентоніті. Виявлено ефект ремобілізації  $^{137}\text{Cs}$  у фіксованій формі, тобто спостерігається зворотній перехід  $^{137}\text{Cs}$  із фіксованої форми в іонообмінну, яка є потенційно здатною до міграції. Процеси тимчасової ремобілізації характерні навіть для сорбції  $^{137}\text{Cs}$  бентонітом на тлі його потужної сорбційної здатності.

1. Бревитц В. Изоляция радиоактивных отходов в недрах Украины (проблемы и возможные решения) [Текст] / В.Бревитц, Ю.А.Шибецкий, Ю.Ф.Руденко, Н.Б.Кастельцева.- Киев, 2006. – 398 с.
2. Кононенко Л.В.. Кинетика обменного и необменного поглощения цезия-137 дерново-подзолистой подвой [Текст] / Кононенко Л.В., Колябина И.Л., Маничев В.И., Коромыслченко Т.И / Збірник наукових праць Інституту геохімії навколишнього середовища. - К.,2007.-вип.14. – с. 48-55.
3. Колябіна I Мінеральні сорбенти для захисного шару при поверхневих сховищах радіоактивних відходів [Текст] / Колябіна I., Субботін А., Деревська К, Шумлянський В.-К.:Логос,2011 - 208с
4. Фельдман Л.П. Параллельные алгоритмы экстраполяционных методов решения задач Коши для компьютеров с распределенной памятью [Текст] / Л.П. Фельман, И.А. Назарова. - Наукові праці ДонНТУ. 2010. – 180с.
5. Koliabina I.. Kinetic parameters of elementary processes of Cs-137 sorption on clay minerals [Текст] / Book of Abstracts of European Clay Conference-EUROCLAY 2011, I.Koliabina, D.Koliabina, S.Dmitrieva, L.Kononenko.- June 26-July 1, 2011, Antalya, Turkey - p. 391.

## ДО ПИТАННЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ВПЛИВУ ХІМІЧНИХ ЧИННИКІВ НА ЗАБРУДНЕННЯ ГРУНТІВ

Статюха Г.А., Бойко Т.В., Запорожець Ю.А.

Національний технічний університет України «КПІ», kxtp@list.ru

Головною метою нашого суспільства має бути прагнення захисту навколишнього природного середовища від будь-яких забруднень, особливо хімічних. Мінімізація хімічних викидів в навколишнє природне середовище можливо на підґрунті концепції сталого розвитку суспільства[1], який передбачає помірне і обмежене використання природних ресурсів, використання альтернативних джерел енергії з метою оптимізації життя майбутніх і сучасних поколінь.

З трьох основних складових природного середовища - ґрутового шару, атмосфери та ґідросфери, складніше за все піддається відновленню порушений забруднений ґрунт. Що є складною гетерогенною системою, при оцінці якості якої необхідне використання часто не визначеної інформації.

Особливо важливим є оцінювання внесення хімічних забруднювачів із водою, що виходять з промислового об'єкта. Одним з факторів забруднення ґрутового шару є просочування поверхні ґрунту сумішами. Процес фільтрації компонентів речовин в ґрунті залежить від багатьох факторів: кліматичних умов, температури, в'язкості, пористості, складу ґрунту і т.п. Фільтраційна і/або сорбційна спроможність ґрунтів, є одним з головних факторів при оцінюванні змін гідрогеологічних умов під впливом людської діяльності. Для оцінювання впливу людської діяльності на порушення існуючого і формування нового гідродинамічного і гідро-геохімічного режимів підземних вод, потрібно дослідити основні характеристики будови територій [2].

Виділення зон з різними геофільтраційними умовами дозволить розділити території за типами і визначити стратегію гуртування вихідної інформації для побудови алгоритму.

Тип схеми геофільтрації відіграє вирішальну роль в формуванні тих або інших закономірностей режиму водонасичення ґрунту, ґрутових вод та нижче розташованих водоносних горизонтів. В свою чергу основні елементи зони активного водообміну є визначальними факторами при типізації схеми фільтрації.

Володіючи даними інформацією, про типи ґрунтів України, можливо розрахувати ризик впливу промислового об'єкту на екологічну систему, і на сам перед ґрунту. Одним з методів вирішення геофільтраційної задачі є метод просторово-часової суперпозиції аналітичних рішень для свердловин, що працюють в необмеженому ізольованому пласті. Дано модель представлена у таблиці 1.

*Таблиця 1 – Метод просторово-часової суперпозиції*

<i>Для однієї свердловини</i>	<i>Для декількох свердловин</i>
$S = \frac{Q}{4\pi T} W\left(\frac{r^2}{4aT}\right)$	$S = \sum_{j=1}^J \frac{Q_j}{4\pi T} W\left(\frac{r_j^2}{4aT}\right)$
$V_x = \frac{\partial S}{\partial x} = \frac{Qx}{2\pi m r^2} e^{-u}$	$V_x = \sum_{j=1}^J \frac{Q_j(x - x_j)}{2\pi m r^2} e^{-\frac{r_j^2}{4at}}$
$V_y = \frac{\partial S}{\partial y} = \frac{Qy}{2\pi m r^2} e^{-u}$	$V_y = \sum_{j=1}^J \frac{Q_j(y - y_j)}{2\pi m r^2} e^{-\frac{r_j^2}{4at}}$
$r^2 = x^2 + y^2$	$r_j^2 = (x - x_j)^2 + (y - y_j)^2$

де  $V_{x,y}$  – швидкість фільтрації вздовж осі  $x$  та  $y$ ;  $S$  – підвищення натиску підземних вод, м;  $Q$  - дебіт закачування(об'ємні витрати рідини), м<sup>3</sup>/сут.;  $T$  – провідність, м<sup>2</sup>/сут.;  $r$  – відстань від свердловини, м;  $a$  – п'єзопровідність, м<sup>2</sup>/сут.;  $t$  – час, сут.;  $W(u)$  – функція колодязя або інтегральна показова функція;  $x_j$ ,  $y_j$  – координати нагнітальних свердловин;  $m$  – потужність пласта, м;

$$Q = \frac{V}{t} = \frac{M}{\sum_{i=1}^n C_i \cdot t}$$

где  $V$  – об'єм рідини, м<sup>3</sup>;  $C_i$  – концентрація домішок в рідині, г/л;  $M$  – маса рідини, кг;  $i$  – й компонент домішок;  $n$  – кількість домішок.

Вирішення даної моделі дає можливість візуально, на графіку, і кількісно представити забруднення ґрунту, а саме отримати об'єктивне уявлення про процеси розповсюдження забруднень, стічних вод, в глибокозаллягаючих горизонтах. Результат розрахунку зміни швидкості фільтрації стічних вод, за даною моделлю, представлено на рис. 1.

Таким чином виникають наступні задачі для побудови автоматизованої системи проектування стану ґрунтів під впливом техногенного об'єкта.

Використовуючи математичні методи вирішення геофільтраційної задачі можливо розрахувати зміну швидкості фільтраційного процесу для різних типів ґрунту, використовуючи такий коефіцієнт фільтрації, який характерний для складу шару ґрунту певної території України. Також розраховується можливість зміни складу ґрунту під впливом шкідливих домішок стічних вод небезпечних промислових об'єктів.

Математичні моделі дають можливість проаналізувати вплив техногенного інфільтраційного навантаження, а також кількісно оцінити ризик впливу стічних вод на зміну складу ґрунту, по різній його глибині, а також ґрутових вод, використовуючи метод «індекс-ризик» [3].

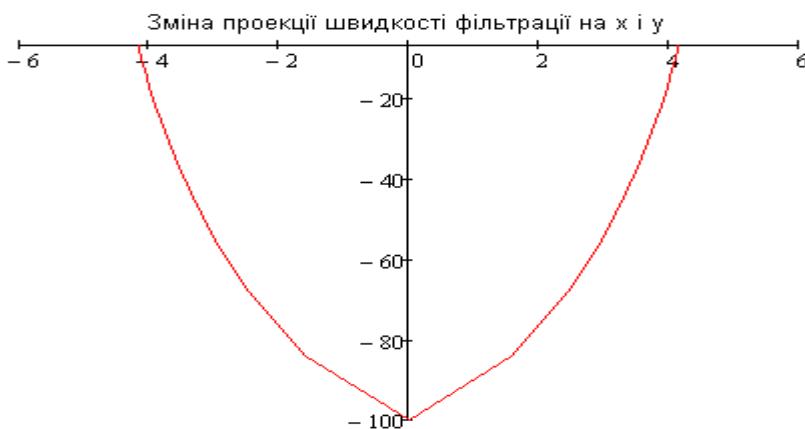


Рис. 1 – Роз одлення води у ґрутовому шарі при моделюванні

Отже вплив небезпечних промислових об'єктів призводить до небезпечних геологічних процесів і явищ, таких як підтоплення, засолення, заболочення та ін.

1. Дырда, В. Устойчивое развитие и проблемы глобальной безопасности [Текст] /Дырда В., Осипенко В.// Проблемы безопасности при чрезвыч. ситуациях. — 1995. — № 12. — С. 3—22.
2. Абрамов И.Б. Оценка воздействия на подземные воды промышленно-городских агломераций[Текст] /И.Б.Абрамов – Харьков, 2007. – 285с.
3. Бойко Т.В. Особливості використання метода «індекс-ризик» для оцінки техногенної безпеки об'єктів [Текст]/ Бойко Т.В. // Восточно-европейский журнал передовых технологий. Информационные технологии.-2009.- №6/5 (42).- с.44-47.

## РОЗРОБКА ЗАСОБІВ ОПТИМІЗАЦІЇ СХЕМ ВОДОСПОЖИВАННЯ НА ОСНОВІ МОДЕЛЕЙ У НЕЯВНОМУ ВИГЛЯДІ

Квітка О. О., Шахновський А. М., Семенюта О. М.

Національний технічний університет України «КПІ», kxtp@list.ru

Представлена робота присвячена дослідженню шляхів збільшення ефективності процедур автоматизованого проектування та модернізації схем водоспоживання (СВС) промислових підприємств на основі методів структурної оптимізації. Структурна оптимізація (СО) схем водоспоживання, водовідведення та водоочищення спрямована на максимально повне використання ресурсу СВС без заміни основного обладнання, за рахунок організації системи рециклів і полягає у раціональному перерозподіленні потоків між процесами СВС [1]. Такий підхід є поширеним внаслідок відносно низької вартості впровадження пропонованих на його основі технічних рішень.

Переважна більшість поширених нині процедур СО СВС передбачає досягнення задачі проектування шляхом формулування, параметричної ідентифікації та вирішення числовими методами задачі математичного програмування певного вигляду. При цьому задача оптимізації зазвичай включає цільову функцію, що має технологічний або економічний зміст і забезпечує рушійну силу процесу оптимізації та систему обмежень технологічного характеру, які надають результатам оптимізації належного фізичного сенсу.

Зазначена система обмежень формулюється на основі математичних моделей елементів СВС (моделей процесів-водоспоживачів, процесів водоочищення, змішувачів та дільників потоків, тощо). Специфіка числових методів, що застосовуються для розв'язання задач оптимізації, вимагає формулувати обмеження у вигляді системи алгебраїчних рівнянь та нерівностей явного вигляду. Під час пошуку оптимуму на кожній з ітерацій цієї процедури реалізується підстановка даних в математичну модель із отриманням результуючих модельних величин (зокрема, концентрацій забруднювачів на виході з

процесу). Такий розрахунок являє собою частковий випадок процесу математичного моделювання. В результаті виключається використання у процесі СО математичних залежностей неявного вигляду (диференційних рівнянь, тощо).

В той же час, процеси, що протікають у СВС, зокрема, при водоспоживанні та водоочищенні, мають складну природу, і традиційні спрощені моделі вказаних процесів не завжди забезпечують достатню точність опису цих явищ у потрібному обсязі. В результаті, при традиційному підході до СО СВС (рис. 1, а) може виникати додаткова похибка результатів проектування.

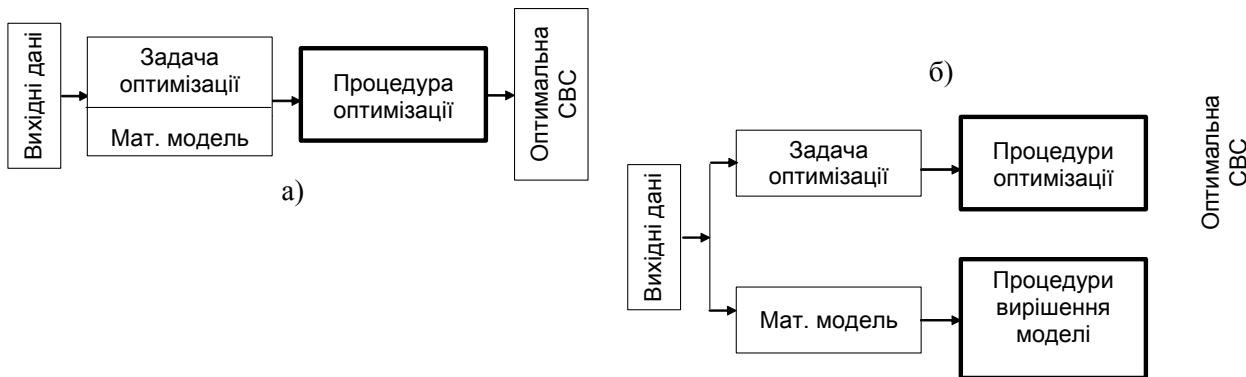


Рис. 1 – Процедури проектування СО СВС:  
а – традиційний підхід; б – «одночасний розрахунок-оптимізація»

Застосований авторами підхід, умовно названий «одночасний розрахунок-оптимізація» (рис. 1, б) відкриває можливість використання при СО СВС математичних моделей заданого дослідником ступеню точності. Складність використовуваної математичної моделі обмежується лише наявними обчислювальними ресурсами (наявністю в дослідника програмно-алгоритмічного забезпечення для вирішення обраної моделі, потужністю комп’ютера, тощо).

Процедура оптимізації базується на лінеаризованій задачі математичного програмування, що є спрощенням формульованого раніше [2]:

$$z = \sum_{j=1}^n F_{jw} \rightarrow \min \quad (1)$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{C_f F_{fi} + \sum_{j=1}^n C_j F_{ji}}{F_{i\max}} \leq C_{i\max} \\ F_{fi} + \sum_{j=1}^n F_{ji} \geq F_{inom} \\ \sum_{j=1}^n F_{ij} \leq F_j \end{array} \right\} \quad (2)$$

де  $F_{ij}$  – витрата повторно використаної води, що надходить з  $i$ -го в  $j$ -й водоспоживач,  $\text{m}^3/\text{год}$ ;  $C_i$  – концентрація домішки у воді, що виходить з  $i$ -го процесу,  $\text{г}/\text{л}$ ;  $F_{iw}$  – витрата стічної води, що виходить з  $i$ -го апарату,  $\text{m}^3/\text{год}$ ;  $F_{fi}$  – витрата свіжої води, що надходить до  $i$ -го процесу-водоспоживача,  $\text{m}^3/\text{год}$ ;  $C_f$  – концентрація забруднювача у свіжій воді,  $\text{г}/\text{л}$ ;

$C_{i\max}$  – максимально припустима концентрація забруднюючої домішки на вході в  $i$ -й водоспоживач, г/л;  $F_{i\text{nom}}$  – номінальна витрата води для  $i$ -го процесу, м<sup>3</sup>/год;  $n$  – кількість процесів-водоспоживачів.

Розмірність задачі оптимізації (1)-(2) визначається граничною кількістю потоків свіжої води на кожен апарат –  $F_{fi}$  (кількість:  $n$ ) та повторно використаної води –  $F_{ij}$  (кількість:  $n^2$ ): загальна кількість змінних оптимізації  $(n + n^2)$ .

У коло задач дослідження входило також обґрунтування ефективних засобів реалізації представленого вище алгоритму. На нинішньому етапі у якості програмного середовища використана мова програмування Python та бібліотека PuLP. Такий вибір обумовлений значною популярністю Python у сфері наукових та інженерних обчислень, а також появою великої кількості бібліотек відкритого програмного коду для вирішення інженерних задач.

Архітектура розроблюваного обчислювального модуля включає використання шаблону проектування «Стратегія», який дозволяє замінити способи реалізації алгоритму, незалежно від реалізації інших компонентів програмної системи. Таким чином, можна замінювати як особливості алгоритму, так і звертатись до різних бібліотек програмного коду (наприклад PuLP, OpenOpt, PuIport, PyEvolve та ін.).

1. Шахновский, А.М. Структурная оптимизация схем промышленного водопотребления [Текст] / А.М. Шахновский, Г.А. Статюха, А.А. Квитка // Вісник Черкаського державного технологічного університету. – 2004. – №3. – с. 149-153.
2. Статюха, Г.О. Моделювання схем промислового водоспоживання на основі методу структурних параметрів [Текст] / А.А. Квитка, Г.А. Статюха, А.М. Шахновский // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 2003. – №5. – с.57-62.

## КОМП'ЮТЕРНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ЦИКЛОНІВ ІЗ СПРАЛЬНИМ НАПРАВЛЯЮЧИМ АПАРАТОМ

Дубинін А.І., Майструк В.В., Гаврилів Р.І.

Національний університет «Львівська політехніка», atamanyuk@ukr.net

В промисловості використовується велика кількість різних конструкцій циклонів. Однак внаслідок динамічного розвитку промисловості вимагає створення нових і вдосконалення існуючих пиловловлюючих апаратів, які б ефективно працювали в умовах сучасного виробництва.

На даний час така задача вирішується декількома способами:

- 1) імітацією виробничих умов під час експериментальних досліджень;
- 2) використанням сучасних CFD програм.

В циклонах різних конструкцій, відбувається дуже складний турбулізований завихрений рух газового потоку. Експериментальні дослідження дозволяють точно визначити структуру газового потоку в апараті, але траекторії пилових частинок не завжди співпадають із траекторією газу. Крім того результати досліджень однієї конструкції апарату не можна застосувати на інших моделях. Також цей метод є дорогий і довготривалий в часі.

Останніми роками, у зв'язку з потужним розвитком комп'ютерної техніки та програмного забезпечення, істотно розширилися можливості числового аналізу завдяки CFD - програмам (Computational Fluid Dynamics), що призначенні для комп'ютерного аналізу задач гідрогазодинаміки. До цього класу належать такі програми, як Cosmos Flow Simulation, Fluent, Flowvision та інші. CFD-програми добре себе зарекомендували під час наукових досліджень у різних галузях промисловості. Застосування CFD-програм можуть значно скоротити час проектування та дослідження нових конструкцій апаратів, відкинути на етапі проектування заздалегідь невдалі конструкції. Проте вадами пакетів програмного забезпечення прикладної гідрогазодинаміки є універсальність програмного забезпечення, яке призводить до того, що особливості роботи циклона розглядаються неповною мірою.

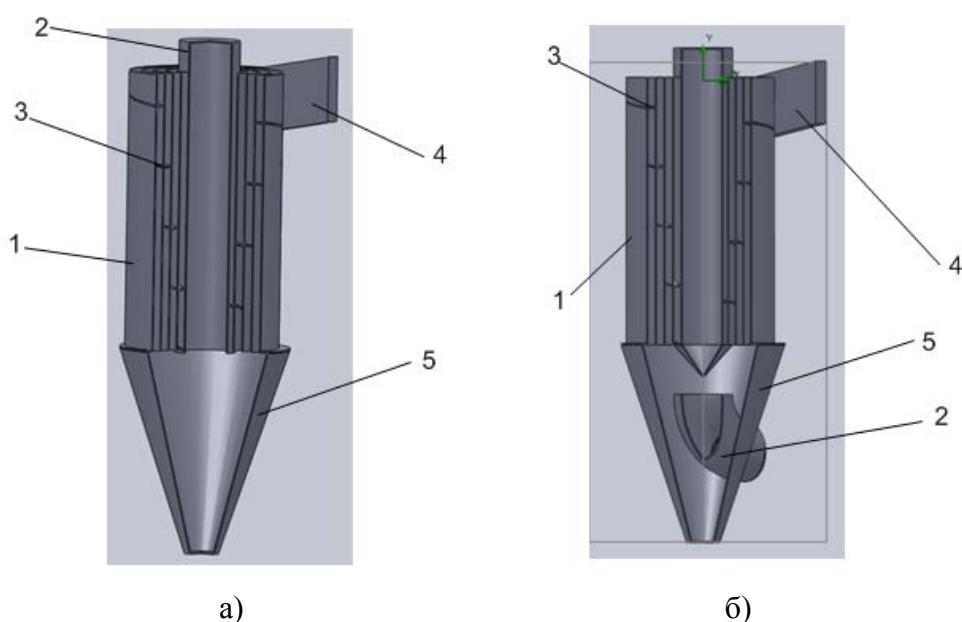


Рис. 1 – Твердотільні моделі циклонів зі спіральним направляючим апаратом:  
а) протиточний; б) прямоточний.

кою 3 у вигляді конусоподібного шнека з кутом підйому витків відносно горизонтальної площини 15. У верхній частині апарату під кутом розміщення плоскої кришки під'єднується вхідний патрубок 4. До нижнього торця спіралі під'єднується конічний бункер 5, в нижній частині якого розміщений патрубок для відведення вловленого пилу. Необхідно відмітити, що апарати можуть мати будь-яку кількість витків спіралі.

Дані апарати працюють наступним чином. Запилене повітря через вхідний патрубок попадає у сепараційний простір, закручується і рухається вздовж спіралі до центральної випускної трубы. Очищений газ виходить через центральну випускну трубу, а осаджений пил під дією сили тяжіння осідає в конічному бункері.

Дослідження аеродинамічних процесів у спіральному циклоні проводили за допомогою програми Cosmos Flow Simulation, яка дозволяє використовувати твердотільні моделі виконані в SolidWorks. Математичну структуру пакета наведено в роботі [1]. Даний програмний пакет дозволяє імітувати візуалізацію руху твердих частинок в апараті. На рис. 2 представлена схема руху пилових частинок кварцового пилу розміром 3 мкм в апараті із об'ємними витратами повітря  $0,127 \text{ м}^3/\text{s}$ .

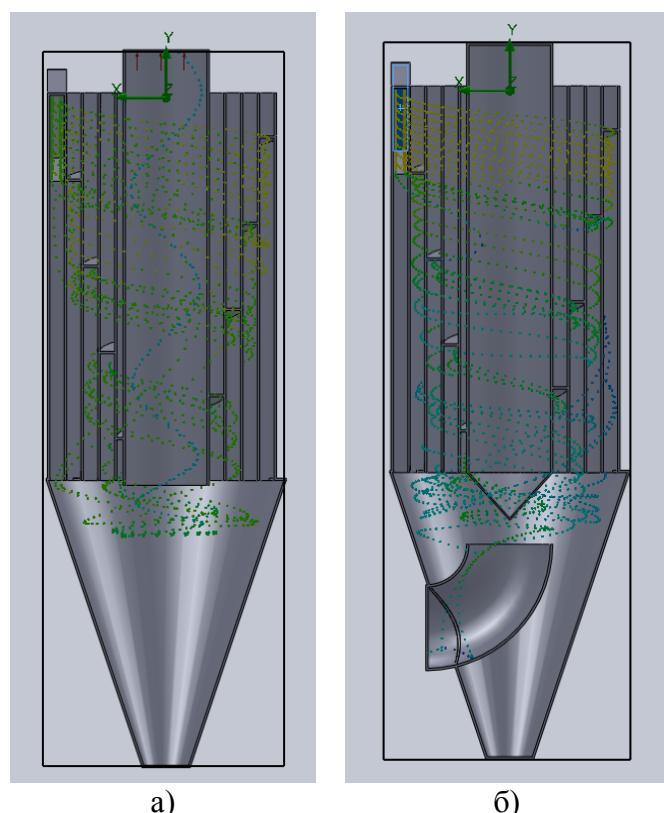


Рис. 2 – Схема руху пилових частинок кварцового пилу в циклонах зі спіральним направляючим апаратом:  
а) протиточному; б) прямоточному.

Авторами розроблені циклони із спіральним направляючим апаратом. Твердотільна модель даних апаратів, представлена на рис. 1, виконана в CAD – програмі SolidWorks. Циклон має спіральний канал, утворений сталевим листом 1, нарізаним навколо центральної трубы 2. Зовнішній кінець замикається до останнього витка. Верхній торець спіралі закритий кришкою 3. Вхідний патрубок 4 під'єднується до верхньої частини апарату під кутом розміщення плоскої кришки. Конічний бункер 5 під'єднується до нижнього торця спіралі. Патрубок 6 для відведення вловленого пилу розміщений в нижній частині конічного бункера. Необхідно відмітити, що апарати можуть мати будь-яку кількість витків спіралі.

Візуалізація траєкторії руху пилових частинок дозволяє оптимізувати конструкцію апарату.

На основі результатів комп'ютерних досліджень передбачається експериментальне дослідження найбільш вдалих конструкцій апаратів.

1. *SolidWorks*. Компьютерное моделирование в инженерной практике / Авторы: Алямовский А. А., Собачкин А. А., Одинцов Е. В., Харитонович А. И., Пономарев Н. Б. — СПб.: БХВ-Петербург, 2005. — 800 с.: ил.

## **ОПТИМІЗАЦІЯ ДВОСТАДІЙНОЇ ЗВОРОТНЬООСМОТИЧНОЇ УСТАНОВКИ ДЕМІНЕРАЛІЗАЦІЇ МОРСЬКОЇ ВОДИ ДЛЯ ПРОМИСЛОВОГО ПІДПРИЄМСТВА**

Квітка О.О., Малецький З.В., Таракюк В. А.

Національний технічний університет України «КПІ», Vitaminka\_c@meta.ua

В сучасному світі однією з глобальних проблем є постійне скорочення запасів прісної води, тому задача отримання додаткових водних ресурсів, в першу чергу, за рахунок опріснення морської води, є дуже актуальною. Це стосується також і частини південних регіонів України. Опріснення морської води передбачає зниження загального вмісту розчинених твердих речовин до концентрації, меншої ніж 200 мг/л. Це дозволяє застосовувати дану воду для потреб промисловості. Найбільш перспективними для опріснення морської води є мембрани технології, які складають на сьогодні 44% світових потужностей по демінералізації морської води.

В даній роботі розглянуто двостадійну зворотньоосмотичну мембральну установку для демінералізації морської води (рис.1).

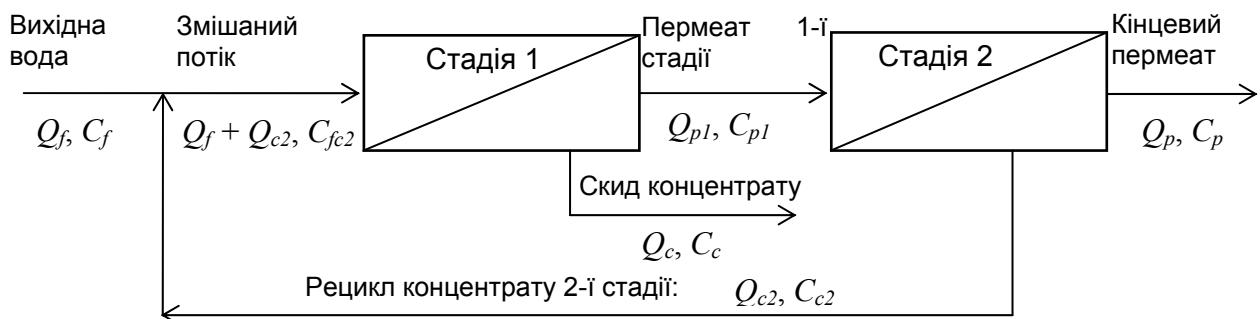


Рис. 1 – Принципова схема двостадійної системи демінералізації води

Для опису процесів, що відбуваються на мембрані, використано модель дифузійну модель Кімури–Соуріраджана [1], яка описується наступними основними рівняннями:

$$Q_p = F_e \cdot a(\pi_c) \cdot FF \left( \Delta P - \pi_f - \left[ \frac{C_{fc}}{C_f} \cdot p_f - (1-R) \right] \right), \quad (1)$$

$$a(\pi_c) = \begin{cases} 0.125, & \pi_c = 25 \\ 0.125 - 0.011 \cdot \left( \frac{\pi_c - 25}{35} \right), & 25 \leq \pi_c \leq 200 \\ 0.07 - 0.0001 \cdot (\pi_c - 200), & 200 \leq \pi_c \leq 400 \end{cases} \quad (2)$$

$$\Delta P = P_f - \frac{\Delta P_{fc}}{2} - P_p, \quad (3)$$

$$\Delta P_{fc} = 0.04 \cdot \left( \frac{Q_f - Q_c}{2} \right)^2, \quad (4)$$

$$\frac{C_{fc}}{C_f} = \frac{1}{2} \cdot \left( 1 + \frac{1 - Y \cdot (1 - R)}{1 - Y} \right), \quad (5)$$

$$p_f = \exp(0.7 \cdot Y), \quad (6)$$

$$\pi_f = 1.12 \cdot (273 + T) \cdot \sum m_i, \quad (7)$$

$$\pi_c = \pi_f \cdot \frac{C_{fc}}{C_f} \cdot p_f, \quad (8)$$

$$\pi_p = \pi_f \cdot (1 - R), \quad (9)$$

$$R = 1 - \frac{C_p}{C_f}, \quad (10)$$

$$Y = 1 - (1 - Y_i)^N, \quad (11)$$

$$C_p = b \cdot C_{fc} \cdot p_f \cdot \frac{N_e \cdot F_e}{Q_p}, \quad (12)$$

де  $Q_p$  – витрата пермеата на виході з системи,  $\text{кг}/\text{год}$ ;  $F_e$  – площа мембраниого елемента,  $\text{м}^2$ ;  $a(\pi)$  – коефіцієнт проникності по воді,  $\text{м}^3/\text{Па}\cdot\text{год}$ ;  $\Delta P$  – робочий тиск,  $\text{Па}$ ;  $\Delta P_{fc}$  – перепад тиску,  $\text{Па}$ ;  $C_f$  – концентрація вхідного потоку,  $\text{кг}$  солей на  $\text{кг}$  розчинника;  $p_f$  – концентраційна поляризація;  $\pi_f$  – осмотичний тиск,  $\text{Па}$ ;  $\pi_c$  – перепад осмотичного тиску з боку концентратору,  $\text{Па}$ ;  $\pi_p$  – перепад осмотичного тиску з боку пермеату,  $\text{Па}$ ;  $R$  – коефіцієнт солезатримки, %;  $Y$  – коефіцієнт конверсії води, %;  $C_p$  – концентрація вихідного потоку пермеату,  $\text{кг}$  солей на  $\text{кг}$  розчинника.

Модель дозволяє описати процес на рівні мембраниого елемента та отримати всі необхідні дані для вихідного потоку ґрунтуючись на параметрах вхідного потоку та даних для тих чи інших мембран, що надаються виробником [2].

Система матеріальних балансів, що описує досліджувану систему, має вид:

$$\begin{cases} Q_f = Q_c + Q_{p1} \\ Q_{p1} = Q_{c2} + Q_p \\ Q_f \cdot C_f = Q_c \cdot C_c + Q_{p1} \cdot C_{p1} \\ Q_{p1} \cdot C_{p1} = Q_{c2} \cdot C_{c2} + Q_p \cdot C_p \\ Q_f \cdot C_f + Q_{c2} \cdot C_{c2} = (Q_f + Q_{c2}) \cdot C_{fc2} \\ \frac{Q_{c2}}{Q_{p1}} = \left( \frac{C_{c2}}{C_{p1}} \right)^{-Y_R} \\ Q_p = Y \cdot Q_f \end{cases} \quad (13)$$

Кожна стадія системи може мати різну кількість секцій, які складаються з модулів, що з'єднуються по паралелі. В межах секції модулі можуть мати різну кількість мембраних елементів (не більше шести). В межах стадії використовуються однакові мембрани елементи, але використання більш дешевих елементів на другій стадії системи дозволяє зекономити кошти.

Оптимізація зворотньоосмотичної системи включає в себе структурну оптимізацію кожної окремої стадії процесу з врахуванням особливостей кожної секції, кількість елементів в яких може бути різною, та оптимізацію експлуатаційних параметрів.

Метою оптимізації є оптимальна вартість пермеату на виході системи. Цільова функція може бути визначена як сума капітальних та поточних (експлуатаційних) витрат з врахуванням строку експлуатації установки. Капітальні витрати залежать від структури та застосовуваних в системі типів елементів, на що, у свою чергу, впливає концентрація вихідного потоку, та визначаються вартістю і кількістю мембраних елементів та мембранотримачів в системі. А поточні витрати складаються з витрат на електроенергію та вихідну воду та коштів на утримання мембрани. Функція, що визначає приведені витрати однієї стадії, може бути представлена наступним чином:

$$Z = \frac{0.33 \cdot C_{ME} + C_{MT} + 0.1 \cdot C_{OM} + C_{EE} + C_{BB}}{Q_p}, \quad (14)$$

де

$$C_{ME} = N_e \cdot c_{el} = \sum_{i=1}^N (n_i \cdot m_i) \cdot c_{el}, \quad (15)$$

$$C_{MT} = N_m \cdot c_{mm} = \sum_{i=1}^N n_i \cdot c_{mm}, \quad (16)$$

$$C_{OM} = N_e \cdot c_{om} = \sum_{i=1}^N (n_i \cdot m_i) \cdot c_{om}, \quad (17)$$

$$C_{EE} = W \cdot c_{ee} \cdot 8400 = Q_f \cdot \frac{P_f}{\eta \cdot 36} \cdot c_{ee} \cdot 8400, \quad (18)$$

$$C_{BB} = Q_f \cdot c_{bb} \cdot 8400, \quad (19)$$

де  $Q_p$  – продуктивність установки по пермеату,  $m^3/rіk$ ;  $W$  – потужність насосу,  $kBm$ ;  $N_e$  – кількість елементів стадії;  $N_m$  – кількість мембранотримачів стадії;  $N$  – кількість підстадій у стадії;  $m_i$  – кількість послідовно з'єднаних елементів в модулі  $i$ -ої підстадії;  $n_i$  – кількість паралельно з'єднаних модулів у підстадії;  $c_{el}$  – приведена вартість мембраниого елемента,  $\$/rіk$ ;  $c_{mm}$  – приведена вартість мембранотримача,  $\$/rіk$ ;  $c_{ee}$  – вартість електроенергії,  $\$/kBm \cdot год$ ;  $c_{om}$  – вартість обслуговування мембрани,  $\$/rіk$ ;  $c_{bb}$  – вартість сирої води,  $\$/m^3$ .

Отже, задача оптимізації може бути представлена наступним чином:

$$\min Z(Q_f, m_i) = \frac{0.33 \cdot C_{ME} + C_{MT} + 0.1 \cdot C_{OM} + C_{EE} + C_{BB}}{Q_p}. \quad (20)$$

При обмеженнях:

$$\begin{cases} 1 \leq m_i \leq 6 \\ C_p(Q_f, m_i) \leq C_{p \max}, \quad i = 1, \dots, N \\ Q_f \cdot \frac{Y_i(m_i)}{100\%} = Q_p \end{cases} \quad (21)$$

Як видно з постановки задачі, цільова функція є нелінійною; параметри оптимізації можуть приймати дискретні значення (кількість елементів – ціличислові параметри) та неперервні (витрата вихідного потоку та відсоток концентрату, що йде на рецикл – раціональні параметри). Це дозволяє класифікувати поставлену задачу як задачу ціличислового нелінійного математичного програмування (ЦНЛП).

Таблиця 1 – Результати розрахунків системи з використанням мембран SW30HRLE-400i

<b>Витрати пермеату, <math>Q_p, \text{м}^3/\text{год}</math></b>	<b>Концентрація вихідного потоку, <math>C_f, \text{г/л}</math></b>	<b>Обмеження на концентрацію пермеату, <math>C_p, \text{г/л}</math></b>	<b>Уточнена концентрація пермеату, <math>C_p, \text{мг/л}</math></b>	<b>Кількість мембраних елементів</b>
200	10	< 80	77.79	122
200	12	< 100	93.96	98
200	15	< 130	121.45	102

Для розв'язання задачі був використаний метод генетичних алгоритмів [3]. Приклад результатів розрахунків для системи з продуктивністю по пермеату 200  $\text{м}^3/\text{год}$  при використанні морської води з загальним солевмістом 10–15  $\text{г}/\text{дм}^3$  наведений в табл. 1. Отримані результати показали, що собівартість системи можна зменшити більш ніж на 10%, порівняно з аналогічною існуючою установкою, що свідчить про ефективність застосування даного методу.

1. Kimura S. Analysis of data in reverse osmosis with porous cellulose acetate membranes used / S. Kimura, S. Sourirajan // AIChE J. – 1967. – Vol. 13 – p. 497–503.
2. FILMTEC Reverse osmosis membranes: Technical Manual; Dow Liquid Separations – 2004. – 179 c.
3. Guria C., Bhattacharya K., Gupta K. Multi-objective optimization of reverse osmosis desalination units using genetic algorithm. Computers and Chemical Engineering 29 – 2005 – 14 c.

## ОПТИМІЗАЦІЯ ОПРІСНЕННЯ МОРСЬКОЇ ВОДИ МЕТОДОМ ЗВОРОТНОГО ОСМОСУ З ПОВТОРНИМ ВИКОРИСТАННЯМ МІСЬКИХ СТІЧНИХ ВОД

Малецький З.В., Мітченко Т.Є., Квітка О.О.

Національний технічний університет України «КПІ», mail@zahar.info

Нестача питної води є одним із чинників, які викликають нестійкість людського розвитку. Вона посилюється із зростанням населення і, відповідно до прогнозів ООН та ВООЗ, ситуація не стане стабільною без застосування цілеспрямованих дій [1]. Враховуючи, що 96,5% світових запасів води знаходяться в морях і океанах з загальним солевмістом (ЗСВ) 30–45  $\text{г}/\text{л}$ , проблема отримання прісної води з морської є вкрай актуальною. На цьому тлі мембрани технології опріснення морської і солонуватої води викликають величезний інтерес, особливо в посушливих прибережних зонах. Але високе споживання енергії залишається основним недоліком технології зворотного осмосу (ЗО) і сильно впливає на ціну опрісненої води.

На даний час для знесолення морської води широкого розповсюдження набули зворотноосмотичні технології, засновані на застосуванні мембран низької проникності типу SW (SWRO) і насосів високого тиску з рекуперацією енергії [2], які забезпечують можливість зниження мінералізації морської води з вихідним ЗСВ  $\sim 40 \text{ г}/\text{дм}^3$  до значень  $\sim 100 - 500 \text{ мг}/\text{дм}^3$  в одну стадію. З економічної точки зору найбільш вразливим місцем такої технології є велика витрата електроенергії, в основному споживаної насосами високого тиску, а також значні капітальні та експлуатаційні витрати, зумовлені високою вартістю мембран типу SW. Як було показано раніше [3], використання для знесолення морської води, змішаної з міськими стічними водами меншого ЗСВ, мембраних елементів (МЕ) високої і середньої проникності (BW, LE, NF), замість традиційних SW, дозволяє суттєво знизити собівартість пермеату.

В даній роботі розглянуто розв'язання вказаної задачі на прикладі опріснення води Середземного моря (ЗСВ 37  $\text{г}/\text{л}$ ), розбавленої в різних співвідношеннях міськими стічними

водами міста Монастір, Туніс (ЗСВ 8 г/л). При оптимізації двохстадійної системи мембральної демінералізації (СМД) морської води (рис. 1) продуктивністю 200 м<sup>3</sup>/ч було розглянуто різні типи МЕ фірми Filmtec (Dow Chemical), одно та двоступінчасте розміщення стадій з різним числом секцій, а також періодичний і безперервний процеси. Кожна стадія СМД складається з певної кількості МЕ, розміщених в спеціальних мембранотримачах (МТ). Кожний МТ може мати до 8 МЕ, поєднаних послідовно по концентрату. При цьому МТ між собою підключаються паралельно.

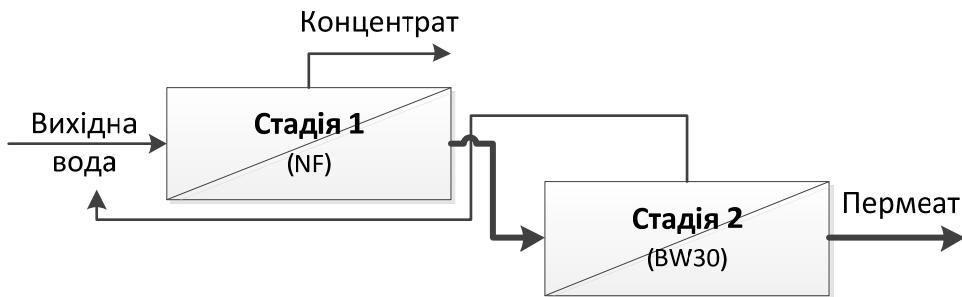


Рис. 1 – Приклад компонування двохстадійної СМД морської води з використанням елементів високої і середньої проникності.

Розрахунки проводилися на основі комплексної фізико-статистичної моделі МЕ [4], яка була перевірена експериментально на основі одного елементу мембральної системи. Отримані результати підтвердженні розрахунками за допомогою програми системного аналізу зворотного осмосу (ROSA, Dow Chemical).

В загальному вигляді, задачу оптимізації можна сформулювати наступним чином: для заданих характеристик входного потоку та характеристик МЕ, які використовуються на кожній стадії СМД, необхідно знайти таку структуру системи (кількість МЕ, кількість МТ і підстадій, їх компонування), щоб характеристики потоку пермеата на виході відповідали заданим вимогам, а застосування отриманої структури на практиці дозволило звести виробничі витрати до мінімуму:

$$\min Z = \sum_{i=1}^N (n_i(Q_f) \cdot m_s \cdot c_{el} + E_i(Q_f) \cdot c_e + n_i(Q_f) \cdot m_i \cdot S_e \cdot c_{oe}) \quad (1)$$

При обмеженнях:

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 \leq m_i \leq 8 \\ \frac{C_{fc} \cdot B \cdot pf \cdot S_e \cdot \rho}{Q} \leq C_{p\max} \\ Q_p \cdot \frac{Y_i(m_i)}{100\%} = Q \\ i = 1, \dots, N \end{array} \right. \quad (2)$$

де  $n_i$  – кількість паралельно з'єднаних МТ у стадії;  $Q_f$ ,  $Q_p$ ,  $Q_c$  – витрати вхідної води, пермеату та концентрату, відповідно, м<sup>3</sup>/год;  $C_p$ ,  $C_{fc}$  – концентрації розчинених речовин у пермеаті та у приповерхневому шарі мембрани, відповідно, мг/дм<sup>3</sup>;  $c_{el}$  – приведена вартість МЕ, \$/рік;  $c_e$  – вартість електроенергії, \$/кВт;  $c_{oe}$  – вартість обслуговування мембран, \$/м<sup>2</sup>;  $pf$  – коефіцієнт концентраційної поляризації;  $Y_i$  – показник конверсії для  $i$ -ої підстадії, %;  $E_i(Q_f)$  – кількість електроенергії, що витрачається на одиницю об'єму кінцевого продукту, кВт·год/м<sup>3</sup>;  $S_e$  – ефективна площа мембраниного елемента, м<sup>2</sup>;  $B$  – проникність солей через мембрану, кг/м<sup>2</sup>·с;  $\rho$  – густина розчинника, кг/м<sup>3</sup>.

Для розв'язання задачі оптимізації застосовано модифікований алгоритм, який передбачає уточнення оптимуму, знайденого за допомогою генетичного алгоритму, методом градієнтного пошуку [4]. Запропонований алгоритм оптимізації на базі моделі двохстадійної СМД морської води було реалізовано у вигляді програмного продукту в середовищі MATLAB.

Отримані результати показали, що зменшення солоності вихідної води шляхом попереднього змішування міських стічних вод з морською водою в межах 30-50%, забезпечує можливість використання МЕ з високою і середньою проникністю і суттєво зменшує енерговитратність СМД. Показано, що двостадійна СМД, побудована з вказаних МЕ, є найкращим рішенням з економічної точки зору і дозволяє зменшити витрати на 37-70%.

Запропонований підхід забезпечує втілення принципів сталого розвитку як з точки зору економії енергоресурсів, так і з точки зору ефективної утилізації міських стічних вод. Цей підхід вносить вклад у сталий розвиток, пропонуючи новий спосіб економії енергії в мембраний технології для опріснення води, роблячи опріснену воду доступною в критично важливих галузях.

1. <http://www.un.org/russian/millenniumgoals/environ.shtml>
2. *Richard L. Stover. Energy recovery devices for seawater reverse osmosis. ERI Technology office, November 2006*
3. *Fendri F., Mitchenko T., Maletskyi Z. Varying seawater salinity as optimization factor in water demineralization and efficient way of municipal waste water utilization. Proceedings of IWA Regional Conference and Exhibition on Membrane Technology and Water Reuse, Istanbul, Turkey, 18-22 October 2010, p.684-687; Fendri F., Mitchenko T., Maletskyi Z. Optimization of the reverse osmosis seawater de-mineralization technologies for a power producing industry. Desalination and Water Treatment, 25 (2011), p. 84–90.*
4. *Шоботов С.С, Квитка А.А, Фендрі Ф. Математическое моделирование процесса обратноосмотической деминерализации воды Восточно-европейский журнал передовых технологий, 2010, 2/10 (44), с. 55–58.*

## СЕКЦІЯ 4

### КОМП'ЮТЕРНЕ ПІДТРИМУВАННЯ ВИРОБНИЧИХ ПРОЦЕСІВ

#### МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ВИПАЛЮВАННЯ ВИРОБІВ В ПЕЧАХ РІДГАММЕРА

Пулінець І. В., Лелека С. В., Коржик М. В.

Національний технічний університет України „КПІ”, korzhyk@kpi.ua

Випалювання вуглецевої продукції є однією з найважливіших технологічних операцій, при якій формуються такі корисні властивості виробів, як механічна та термічна стійкість, висока тепло- та електропровідність тощо [1]. У світовій практиці випалювання великогабаритних вуглецевих виробів, зокрема електродів великого діаметра, найчастіше здійснюють у закритих багатокамерних кільцевих печах типу «Рідгаммер» [2].

Основною причиною руйнування виробів під час випалювання є істотна нерівномірність температурного поля вуглецевих заготовок, яка при неправильному обранні швидкості розігріву в інтервалі температур інтенсивного газовиділення часто призводить до утворення структурних дефектів внаслідок виникнення надкритичних термічних та механічних напружень. При цьому не існує промислового способу безпосереднього визначення напружень та рівнів температур у виробах впродовж процесу випалювання, тому розробка методів керування швидкістю розігріву виробів на базі математичної моделі процесу випалювання у кільцевій багатокамерній печі є актуальною науковою та практичною задачею.

Математичне формулювання задачі гідродинаміки та теплообміну в камері печі Рідгаммера базується на рівнянні енергії, системі рівнянь Навье-Стокса для стисливої рідини та рівняннях кінетичної турбулентної енергії та її відносної швидкості дисипації (модель турбулентності), доповнених умовами однозначності [3].

При числовому моделюванні методом скінчених об'ємів [4], для твердих елементів конструкції камери печі розглядалося лише рівняння енергії без урахування конвективних членів та турбулентної в'язкості.

Отримана чисрова модель була застосована для прогнозування рівнів температур у вуглецевих виробах із урахуванням фази інтенсивного газовиділення в залежності від заданої динаміки температури димових газів під склепінням камери кільцевої печі, схеми завантаження камери та типу заготовок, швидкості угару пересипки і заготовок тощо. Порівняння отриманих результатів з даними натурних експериментів дозволяють вважати отриману модель цілком адекватною, проте використання цієї моделі для безпосереднього керування процесом випалювання в промислових умовах є достатньо складним та незручним.

Для практичного використання була розроблена спрощена модель, що використовує дані, отримані з натурного та числового експериментів, виконаних одноразово для конкретної конструкції кільцевої печі та схеми завантаження її камери.

Спрощена модель базується на рівняннях результивного теплового балансу між теплотою гріючих димових газів та акумульованою теплотою пересипки та заготовок для однієї камери багатокамерної кільцевої печі Рідгаммера :

$$\begin{cases} \sum_{k=2}^M \bar{\alpha} \left( \bar{T}_r - \frac{\bar{m}_3 \bar{T}_3 + \bar{m}_b \bar{T}_b}{\bar{m}_3 + \bar{m}_b} \right) S_r \Delta\tau = \sum_{k=2}^M \left[ \bar{m}_3 \bar{c}_3 (T_3^k - T_3^{k-1}) + \bar{m}_b \bar{c}_b (T_b^k - T_b^{k-1}) \right], \\ \sum_{k=2}^M \frac{(\bar{T}_3 - \bar{T}_b) S_b}{r} \Delta\tau = \sum_{k=2}^M \bar{m}_b \bar{c}_b (T_b^k - T_b^{k-1}), \end{cases} \quad (1)$$

де  $k$  – номер кроку за часом;  $M$  – кількість кроків за часом у циклі випалювання;  $\tau$ ,  $\Delta\tau = (\tau^k - \tau^{k-1})$  – час та часовий крок відповідно, с;  $\bar{\alpha} = K(\alpha^k + \alpha^{k-1}) / 2$  – середній на часовому кроці коефіцієнт тепловіддачі між газом та завантаженням камери,  $\text{Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$ ;

$K$  – коефіцієнт форми камери;  $\bar{T} = (T^k + T^{k-1}) / 2$  – середня на часовому кроці середньо об'ємна температура, К;  $S_r$  – площа теплообміну між газом та завантаженням камери,  $\text{m}^2$ ;  $\bar{m} = (m(\tau^k) + m(\tau^{k-1})) / 2$  – середня на часовому кроці маса, кг;  $\bar{c} = (c(T^k) + c(T^{k-1})) / 2$  – середня на часовому кроці масова теплоємність, Дж/(кг·К);  $\bar{r} = (r^k + r^{k-1}) / 2$  – контактний термічний опір засипка – вироби, ( $\text{K}\cdot\text{м}^2$ )/Вт;  $S_b$  – площа поверхні виробів,  $\text{m}^2$ ; г, з, в – індекси параметрів, що стосуються газу під склепінням, засипки та виробів відповідно.

При переході багатокамерної кільцевої печі на випалювання нового типу вуглецевих виробів, в лабораторних умовах визначається температурна залежність інтенсивності газовиділення із сполучника  $f(T)$ , використаного при формуванні цих виробів (наприклад, див. рис. 1). Обирається графік зміни температури під скlepінням  $T_g(\tau)$ , що використовувався для випалювання подібного виду продукції (рис. 2, крива 1).

Шляхом розв'язання системи (1) розмірністю  $2 \times (M-1)^2$  визначається динаміка середньооб'ємної температури виробів  $T_b(\tau)$ , що відповідає обраному графіку зміни температури під скlepінням (рис. 2, крива 2). Значення параметрів  $\bar{\alpha}$  та  $\bar{r}$  визначаються заздалегідь за даними натурного та числового експериментів, проведених на даній випалювальній печі. При цьому  $\bar{\alpha}$  є характеристикою конструктивних особливостей камери печі, а  $\bar{r}$  – характеристикою завантаження камери печі.

За допомогою температурної залежності інтенсивності газовиділення  $f(T_b)$  визначається прогнозована динаміка газовиділення із сполучника, що відповідає обраному графіку зміни температури під скlepінням (рис. 2, крива 3). Здійснюється оцінювання швидкості розігріву виробів та швидкості газовиділення із виробів у температурному інтервалі утворення напівкоксу. Якщо оцінка визнається незадовільною, модифікується графік зміни температури під скlepінням  $T_g(\tau)$  і розрахунок повторюється.

Графік зміни температури під скlepінням слід формувати так, щоб забезпечити мінімальну швидкість розігріву виробів та мінімальну швидкість газовиділення із виробів в інтервалі середньо об'ємних температур виробів, який відповідає утворенню напівкоксу.

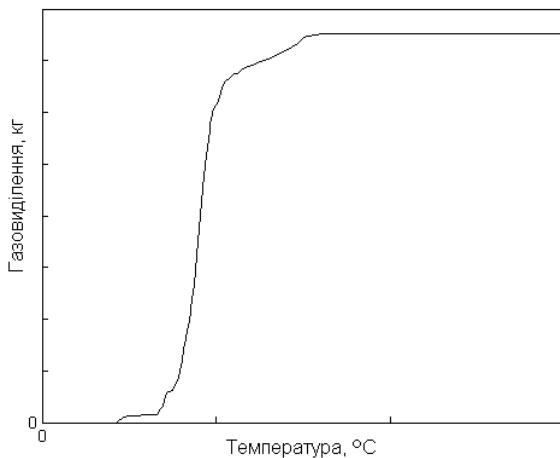


Рис. 1 – Температурна залежність інтенсивності газовиділення із сполучника

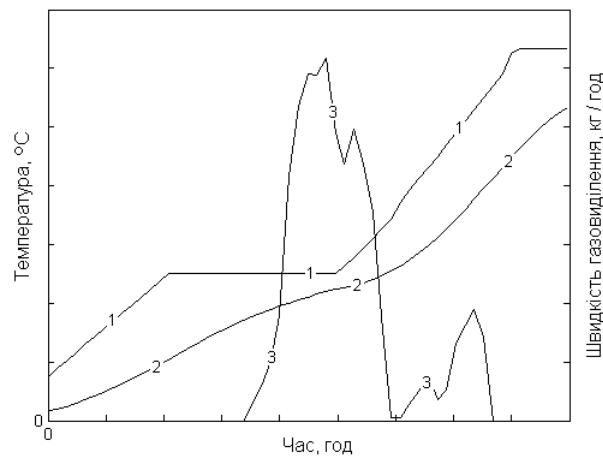


Рис. 2 – Динаміка температури та швидкості газовиділення в завантаженні камери печі

Отримана спрощена модель процесу випалювання у камері кільцевої багатокамерної печі та розроблена на її основі розрахунково-експериментальна методика дозволяють визначати раціональні регламенти експлуатації пічного обладнання та здійснювати керування процесом за опосередкованим параметром – температурою димових газів під скlepінням камери печі, із точністю, що гарантує високу якість кінцевої продукції.

1. Санников А. К. Производство электродной продукции / А. К. Санников, А. Б. Сомов, В. В. Ключников [и др.] – М. : Металлургия, 1985. – 128 с.
2. Чалых Е. Ф. Оборудование электродных заводов / Е. Ф. Чалых. – М. : Металлургия, 1990 – 238 с.
3. Wilcox D. C. Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models / D. C. Wilcox // AIAA Journal. – 1988. – Vol. 26, No. 11. – P. 1299–1310.
4. Панов Є. М. Математичне моделювання складного теплообміну повітряних регенераторів / Є. М. Панов, А. Я. Карвацький, І. Л. Шилович [та інш.] – К.: НТУУ „КПІ”, 2011. – 103 с.

## КОМП'ЮТЕРНА ПІДТРИМКА ПРОЦЕСУ ТЕПЛОПОСТАЧАННЯ У ЦЕХУ ВИРОБНИЦТВА ТВЕРДИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ

Брусник С.М., Сангінова О.В.

Національний технічний університет України «КПІ», olga.sanginova@gmail.com

Фармацевтична промисловість України виробляє близько 1400 із 3000 препаратів, що продаються в країні. До процесу виробництва усіх форм лікарських засобів - твердих, рідких, порошкоподібних – висуваються жорсткі вимоги не тільки до рецептури та технологічних режимів, а й до умов проведення технологічних процесів. Наприклад, виробництво твердих лікарських засобів потребує підтримування у приміщенні цеху певної температури та вологості. Тому комп'ютерне підтримування процесу тепlopостачання є важливою задачею.

Підтримування заданої температури забезпечується системою обігріву цеху, схема якого показана на рис. 1: від подаючої гребінки через фільтр 5 подається вода температурою  $90^0\text{C}$ , яка надходить на пластинчатий теплообмінник 1, де охолоджується до  $70^0\text{C}$  і надходить до зворотної гребінки. Із циркуляційного трубопроводу вода, температурою  $37^0\text{C}$ , проходячи через фільтр 6, насосом 3 подається в теплообмінник 1, де нагрівається до  $55^0\text{C}$ . Далі ця вода надходить на гаряче водопостачання. Аналогічно працює другий теплообмінник.

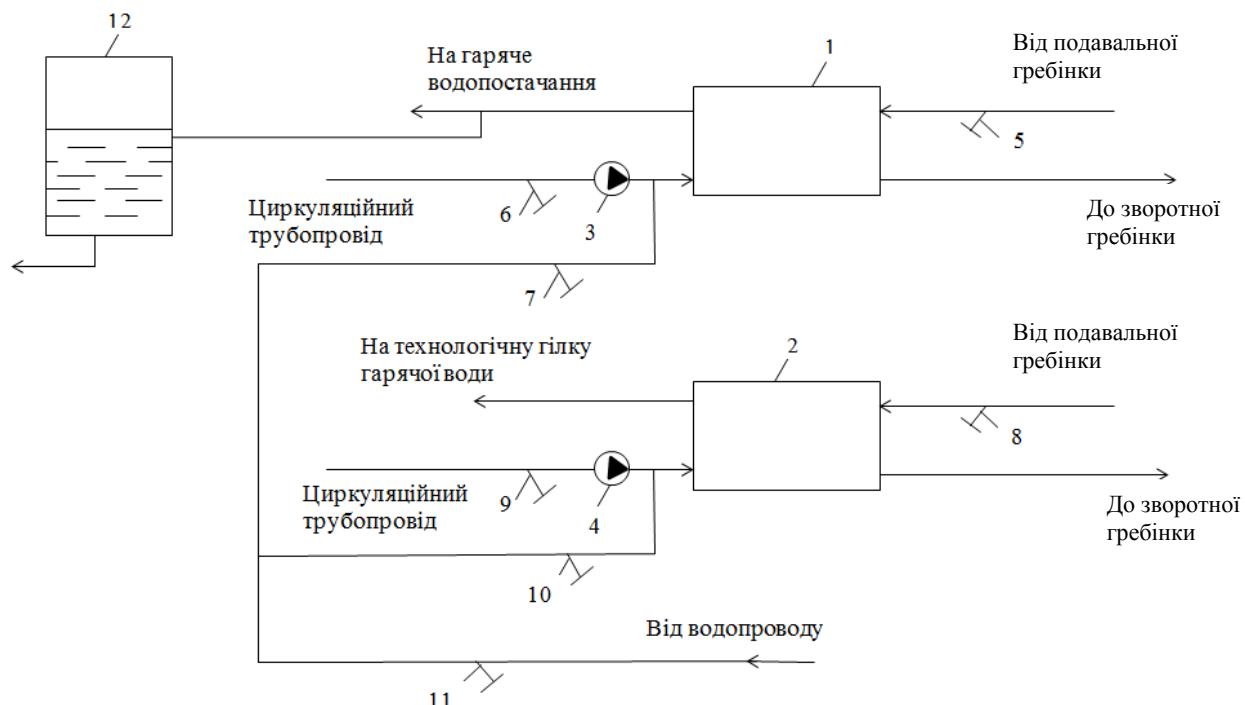


Рис. 1 - Система тепlopостачання цеху виробництва твердих лікарських засобів:  
1, 2 – теплообмінники; 3, 4 – насоси; 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 – фільтри; 12 – бак запасу води

Підпитка контуру водою забезпечується за допомогою водопроводу. Частина гарячої води температурою 55°C подається у бак 12, де відповідно до технологічного регламенту має бути запас гарячої води об'ємом.

Зазвичай підтримування заданої температури здійснюється оператором вручну шляхом зміни витрати одного з теплоносіїв. Такій спосіб керування має типові недоліки, характерні для ручного керування.

В роботі запропоновано автоматизувати систему обігріву цеху виробництва твердих лікарських засобів із застосуванням сучасних комп'ютерних технологій. На першому етапі виділено наступні контури регулювання: підтримування температури на виході з обох теплообмінників та підтримування рівня в ємності; передбачено також контур керування парою теплообмінників в залежності від температури навколошнього середовища: при температурі навколошнього середовища вище 10°C слід вимикнути перший теплообмінник, а вище 19 °C – другий.

Реалізація комп'ютерної підтримки процесу тепlopостачання потребує вирішення таких завдань: вибір математичних моделей теплообмінників і ємності, розрахунок коефіцієнтів запропонованих моделей, вибір типу автоматичних регуляторів, розрахунок оптимальних налаштувань регуляторів, розробка схеми автоматизації, підбір технічних засобів автоматизації відповідно до схеми автоматизації, інтеграція підсистеми керування у існуючу автоматизовану систему керування цехом виробництва твердих лікарських засобів.

Відповідно до сформульованих вище завдань підібрано математичні моделі теплообмінника та ємності: зміну температури на виході з теплообмінника можна описати за допомогою аперіодичної ланки другого порядку, а зміну рівня в ємності – аперіодичною ланкою першого порядку. Розрахунок коефіцієнтів моделей виконано із застосуванням реальних даних одного з фармацевтичних підприємств м. Києва.

З метою визначення параметрів керування для теплообмінника досліджено вплив витрат гарячого та холодного теплоносія на швидкість зміни температури теплоносія на виході. Залежність відносної температури можна виразити наступним чином:

$$\frac{T_{x2} - T_{x1}}{T_{e1} - T_{x1}} = \frac{1}{\frac{c_x G_x}{KF} + \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{c_x G_x}{c_e G_e} \right)} \quad (1)$$

Проведені розрахунки показали (рис. 2), що температура на виході з теплообмінника більш чутлива до холодного теплоносія, ніж до гарячого. Тому в якості параметра керування було обрано витрати холодного теплоносія.

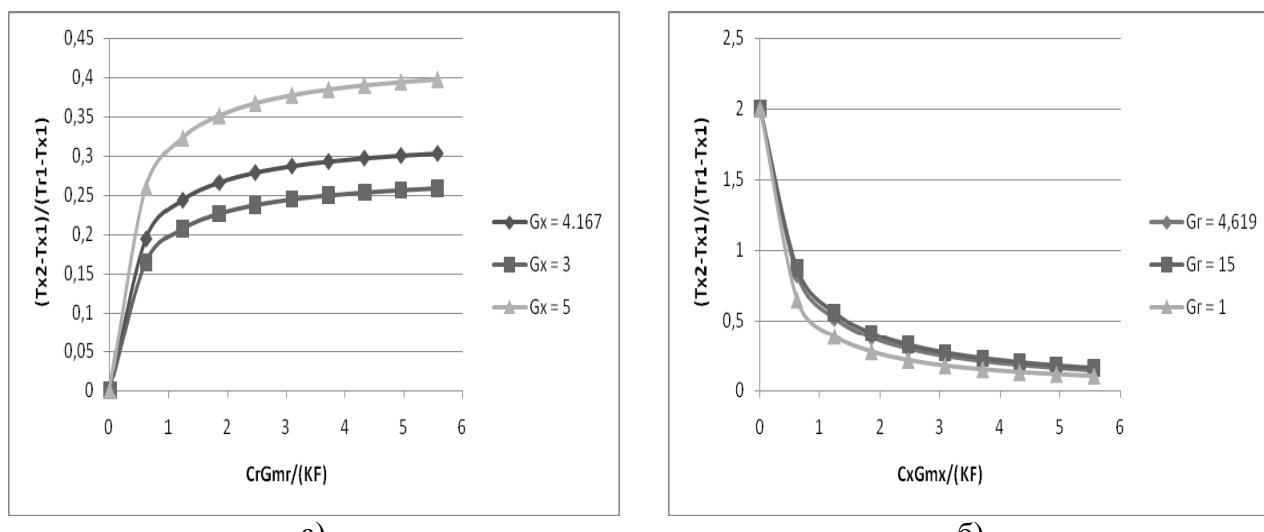


Рис. 2 – Залежність температури від масових витрат холодного (а) та гарячого (б) теплоносія

На наступному етапі обрано тип регулятора для теплообмінника та ємності (обидва об'єкти потребують застосування ПІД-регуляторів) та розраховано оптимальні налаштування регуляторів із заданим запасом стійкості.

Схему автоматизації складено з урахуванням основних вимог до підсистеми керування. У схемі передбачено контури регулювання температури обох теплообмінників, контур регулювання рівню в ємності, контуру вмикання та вимикання теплообмінників в залежності від температури навколошнього середовища. Відповідно до запропонованої схеми підібрано засоби контролю та керування, а також виконавчі пристрої.

Зв'язок підсистеми керування процесом тепlopостачання з автоматизованою системою керування цехом виробництва твердих лікарських засобів здійснюється за допомогою мікропроцесорних засобів фірми Siemens. Основні функції підсистеми: моніторинг та керування основними параметрами процесу, візуалізація даних спостережень, сигналізація при порушеннях, архівування та аналіз зібраних даних.

### АВТОМАТИЗАЦИЯ ПРОИЗВОДСТВА МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СТРОИТЕЛЬНОЙ СМЕСИ

Павлов Ю.С., Медведев Р.Б., Евтушенко А.А.

Национальный технический университет Украины «КПИ», medvedev@xtf.kpi.ua

Авторами разработана программа автоматизации приготовления многокомпонентной строительной смеси на примере производства красок EcoCristal IP-231, IP-233, IP-131 ООО НПФ «Ирком ЭКТ» [1]. В работе использовалась система ExperionPKS с ПЛК C200 фирмы Honeywell [2].

За основу построения алгоритма (стратегии) управления была взята функциональная схема №1, предложенная в [3] (рис. 1, с. 92, [3]).

В процессе производства краски имеются технологические элементы, принцип управления которыми одинаков. Например, канал подачи воды в основную мешалку, канал подачи гидроксиэтилцеллюлозы (*QP*), канал подачи натрия триполифосфата (*ТПФ Na, Na<sub>5</sub>P<sub>3</sub>O<sub>10</sub>*) и т.д. Управление такими каналами может быть сведено к открытию/закрытию задвижки или заслонки, включению/отключению насоса. Поэтому был создан универсальный модуль управления (УМ) - УМ каналом подачи воды в основную мешалку, – структура которого использовалась для однотипных элементов. Структура УМ соответствует структуре УМ схемы управления №1, предложенной в [3] (рис. 3, с. 93, [3]).

УМ каналом подачи воды в основную мешалку состоит из четырех функциональных блоков (ФБ):

1. ФБ AUXCALC (БВВ) служит в качестве блока-задатчика для TOTALIZER (Интегратора).

2. ФБ Интегратор (TOTALIZER) периодически добавляет входное значение к накопленному значению своего выхода, используется для интегрирования расхода; необходим для пересчета расхода потока воды.

3. ФБ DEVCTL (БУУ) реализует функцию управления с несколькими входами и несколькими выходами, которые обеспечивает интерфейс с дискретным устройством, таким как двигатель, электромагнитный клапан и клапан, управляемый двигателем; служит для организации логического управления задвижкой.

4. ФБ DOCHANNEL (Канал выхода) предназначен для передачи дискретного сигнала, сформированного предыдущим БУУ, на выход модуля дискретного выхода ПЛК.

БВВ содержит выражение, которое будет использоваться для пересчета расхода воды: «298.8 / 0.2», где 298.8 – необходимое для приготовления смеси количество воды, 0.2 – время выполнения ФБ (200 мсек).

Масштабный коэффициент Интегратора задан исходя из необходимого времени накопления подачи воды. Он определяет время открытия клапана подачи воды в основную мешалку.

Для управління БУУ используется выход *ACCTVFL* Интегратора, который хранит сигнал достижения Интегратором заданного значения *ACCTV* (298.8).

Параметрам Mode Attribute и Normal Mode Attribute БУУ присвоено значение PROGRAM, что позволит управлять этим ФБ из УПМ. Количество входов установлено равным 2 – они понадобятся для логического управления БУУ.

Созданная структура УМ позволит запускать ФБ управления задвижкой (насосом) БУУ из УПМ и останавливать БУУ с помощью Интегратора автоматически при накоплении необходимого объема воды.

Для выдачи и приема сигналов ПЛК были созданы два модуля дискретного выхода и один модуль дискретного входа, поскольку все сигналы в данной стратегии управления являются дискретными. Для использования в стратегии управления эти модули связываются с программными каналами Выхода и Входа.

Структура УМ каналом подачи воды в основную мешалку (*CM\_WATER*) аналогична структурам УМ, перечисленных в табл. 1.

*Таблица 1 – УМ, полученные в результате копирования CM\_WATER*

<i>№ п/п</i>	<i>Название УМ</i>	<i>Назначение УМ</i>
1	<i>CM_WATER_SOLNa</i>	УМ подачей воды для приготовления ра-ра <i>TПФ Na</i>
2	<i>CM_PRPLGLC</i>	УМ подачей пропиленгликоля, $C_3H_8O_2$
3	<i>CM_DF6002</i>	УМ подачей пеногасителя DF-6002
4	<i>CM_DP1130</i>	УМ подачей дисперганта DP-1130
5	<i>CM_DPNB</i>	УМ подачей DPnB (Дованол, коалесцент)
6	<i>CM_DS_910</i>	УМ подачей дисперсии DS-910
7	<i>CM_LXE</i>	УМ подачей Катона, LXE
8	<i>CM_N2</i>	УМ подачей Нормкал 2 (карбонат кальция $CaCO_3$ мелкодисперсный)
9	<i>CM_N5</i>	УМ подачей Нормкал 5, (карбонат кальция $CaCO_3$ крупнодисперсный)
10	<i>CM_NaOH_SOLNaOH</i>	УМ подачей NaOH для приготовления ра-ра NaOH
11	<i>CM_QP</i>	УМ подачей QP (Целлосайз)
12	<i>CM_TPFNa_SOLNa</i>	УМ подачей <i>TПФ Na</i> для приготовления ра-ра <i>TПФ Na</i>
13	<i>CM_WATER_SOLNaOH</i>	УМ подачей воды для приготовления ра-ра NaOH

Структура УМ основной мешалкої (*CM\_AGITATOR\_1*) отличается от структуры созданных ранее УМ. Она не содержит БВВ и Интегратор, поскольку включение и выключение УМ основной мешалкої будет осуществляться в УПМ. Кроме того, поскольку мешалка будет работать в двух режимах, с разными частотами вращения, структура УМ содержит дополнительный канал выхода, а БУУ имеет два выхода и сконфигурирован для трех состояний: 0 – мешалка выключена, 1 – мешалка вращается с нормальной скоростью, 2 – мешалка вращается с повышенной скоростью.

Кроме основной, производственный процесс предусматривает наличие двух вспомогательных мешалок: для приготовления раствора *TПФ Na* и для приготовления раствора NaOH. Структура УМ этими мешалками идентична и отличается от структуры УМ основной мешалкої отсутствием второго канала выхода и второго выхода БУУ, поскольку эти мешалки работают только с одной скоростью вращения:

- *CM\_AGITATOR\_2* – управляет мешалкой приготовления раствора *TПФ Na*;
- *CM\_AGITATOR\_3* – управляет мешалкой приготовления раствора NaOH.

В стратегию управления добавлены УМ насосами подачи растворов в основную мешалку и готовой смеси (краски) из основной мешалки.

- *CM\_PUMP1* – УМ насосом подачи раствора *TПФ Na* из вспомогательной в основную мешалку;
- *CM\_PUMP2* - УМ насосом подачи раствора NaOH из вспомогательной в основную мешалку;

- CM\_PUMP3 - УМ насосом подачи готової смесі (краски) із основної мешалки на конвеєр.

Структура цих УМ ідентична і походить на структуру УМ вспомогательними мешалками, оскільку насоси знаходяться тільки в двох состояннях: включений або вимкнений.

УМ входами служить для прийняття дискретних сигналів устроїств контролю опустошення всіх трьох мешалок і має резервний ФБ для управління пуском системи із зовнішнього устройства (кнопкою).

Даний модуль містить чотири каналі дискретного входу:

- DCHANNELA – резервний;
- DCHANNELA\_1 – приймає сигнал устроїств контролю опустошення вспомогательної мешалки приготовлення розчину  $T\text{P}\Phi\text{ Na}$ ;
- DCHANNELA\_2 – приймає сигнал устроїств контролю опустошення вспомогательної мешалки приготовлення розчину  $\text{NaOH}$ ;
- DCHANNELA\_1 – приймає сигнал устроїств контролю опустошення основної мешалки.

## Модуль послідовального управління УПМ.

УПМ організовує послідовність роботи УМ, осуществляючи управління всім технологічним процесом, і складається з послідовно чередуючихся ФБ Шагов и Переходов:

1. ФБ шага STEPA містить 15 виходів (т.е. виконує 15 операцій):

- 1) CM\_AGITATOR\_1.DEVCTLA.GOP:=5 – запуск основної мешалки з нормальною швидкістю;
- 2) CM\_AGITATOR\_2.DEVCTLA.GOP:=5 – пуск мешалки приготовлення  $T\text{P}\Phi\text{ Na}$ ;
- 3) CM\_AGITATOR\_3.DEVCTLA.GOP:=5 – пуск мешалки розчину  $\text{NaOH}$ ;
- 4) CM\_WATER.TOTALIZERA.COMMAND:=1 – пуск накопителя для основного каналу подачі води;
- 5) CM\_WATER.DEVCTLA.DI[2]:=1 – пуск подачі основної води;
- 6) CM\_QP.TOTALIZERA.COMMAND:=1 – пуск накопителя QP;
- 7) CM\_QP.DEVCTLA.DI[2]:=1 – пуск подачі QP;
- 8) CM\_WATER\_SOLNa.TOTALIZERA.COMMAND:=1 – пуск накопителя подачі води для  $T\text{P}\Phi\text{ Na}$ ;
- 9) CM\_WATER\_SOLNa.DEVCTLA.DI[2]:=1 – пуск подачі води для  $T\text{P}\Phi\text{ Na}$ ;
- 10) CM\_TPFNa\_SOLNa.TOTALIZERA.COMMAND:=1 – пуск накопителя подачі  $T\text{P}\Phi\text{ Na}$ ;
- 11) CM\_TPFNa\_SOLNa.DEVCTLA.DI[2]:=1 – пуск подачі  $T\text{P}\Phi\text{ Na}$ ;
- 12) CM\_WATER\_SOLNaOH.TOTALIZERA.COMMAND:=1 – пуск накопителя подачі води для  $\text{NaOH}$ ;
- 13) CM\_WATER\_SOLNaOH.DEVCTLA.DI[2]:=1 – пуск подачі води для  $\text{NaOH}$ ;
- 14) CM\_NaOH\_SOLNaOH.TOTALIZERA.COMMAND:=1 – пуск накопителя подачі  $\text{NaOH}$ ;
- 15) CM\_NaOH\_SOLNaOH.DEVCTLA.DI[2]:=1 – пуск подачі  $\text{NaOH}$ .

Параметр  $GOP$  БУУ (DEVCTL) служить для забезпечення можливості змінення свого вихідного сигналу ( $OP$ ) через УПМ. Значення  $GOP=5$  переводить вихід  $OP$  в стан «1».

2. ФБ перехода TRANSITIONA містить 4 умови, об'єднані логічним оператором  $AND$ , т.е. переход відбувається тільки при виконанні всіх чотирьох умов:

- 1) CM\_WATER.TOTALIZERA.ACCTVFL=1 – основної води достаточно;
- 2) CN\_QP.TOTALIZERA.ACCTVFL=1 – QP достаточно;
- 3) CM\_WATER\_SOLNa.TOTALIZERA.ACCTVFL=1 – води для розчину  $T\text{P}\Phi\text{ Na}$  достаточно;
- 4) CM\_TPFNa\_SOLNa.TOTALIZERA.ACCTVFL=1 –  $T\text{P}\Phi\text{ Na}$  достаточно.

3. ФБ шага STEP\_TIME\_DEL\_1 проводить задержку, необхідну для перемішування розчину  $T\text{P}\Phi\text{ Na}$ . Временна задержка відповідає 600 циклам виконання блока, або двум хвилям.

4. ФБ перехода TRANSITIONA\_1 перевіряє, вимкнено ли клапан подачі води в основну мешалку: CM\_WATER.DEVCTLA.GPV=4.

5. ФБ шага STEPA\_1 включает насос подачи раствора  $T\bar{P}\Phi Na$  из вспомогательной в основную мешалку: CM\_PUMP1.DEVCTLA.GOP:=5.

Остальные 12 ФБ УПМ созданы аналогично описанным выше в соответствие с технологическим циклом производства смеси (краски). После загрузки созданной стратегии в ПЛК и активации, управление производственным процессом (пуск цикла приготовления смеси) и контроль параметров процесса осуществляется со Станции Experion [2].

Система ExperionPKS позволяет изменять некоторые параметры загруженной в ПЛК стратегии управления даже во время работы, что делает стратегию подходящей для приготовления различных красок. Программа представляет простой, надежный и доступный способ автоматизации производства многокомпонентной строительной смеси. Затраты на введение предлагаемой системы быстро окупаются (в рассмотренном случае – за два месяца), себестоимость продукции снижается, надежность производства и качество продукта возрастают.

1. <http://farba-ircm.com.ua/>
2. Медведев Р.Б., Бондаренко С.Г., Сангінова О.В. // Навчальна система побудови стратегій керування на базі мікропроцесорної техніки / Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження. Науковий вісник НТУУ «КПІ». Київ. № 2. – С. 31-36.
3. Медведев Р.Б., Евтушенко А.А., Ткач В.В. // Комплекс моделирования алгоритмов управления и имитации объектов автоматизации / Математические методы в технике и технологиях. Сб. трудов XXIV междунар. науч. конф., Т. 6. - Киев: НТУУ «КПИ», 2011. – 156 с.

### ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА ОТЛИВА ПЛЕНОК

Багута В. А., Кулинченко Г. В.

Шосткинский институт Сумского Государственного Университета, heorhy@rambler.ru

Возможности получения полимерных пленок с заданными физико-механическими и техническими характеристиками определяются эффективностью каналов управления процессом отлива пленок. Стремление сократить сроки разработки оборудования и средств автоматизации процесса обуславливает необходимость проведения исследования в двух направлениях:

оптимизация конструкции оборудования, формирующего слой пленки;

оптимизация технологических режимов получения пленки и пленкообразующей полимерной композиции.

Тем не менее, перспектива, как первого, так и второго направления зависят от результатов моделирования процессов формирования пленок на движущейся подложке.

Стремление точно описать процесс образования пленки при течении неньютоновской жидкости, какой является пленкообразующий раствор, приводит к необходимости расчета системы нелинейных уравнений Навье-Стокса, которые решены лишь для частных случаев. [1].

Численное моделирование гидродинамических особенностей истечения полимерной композиции из фильеры позволяет установить качественную картину распределения скоростей, однако для создания системы автоматического управления процесса отлива пленок приходится учитывать динамические характеристики процесса, которые определяют возможности минимизации возмущений, которые сопровождают технологический процесс.

Для анализа влияния возмущений рассмотрим взаимосвязь параметров модели, описывающих процесс получения пленок. Двумерное течение полимерной композиции в процессе нанесения на подложку иллюстрируется рис. 1, на котором скорость течения  $\mathbf{u}$  направлена вдоль оси  $x$ .

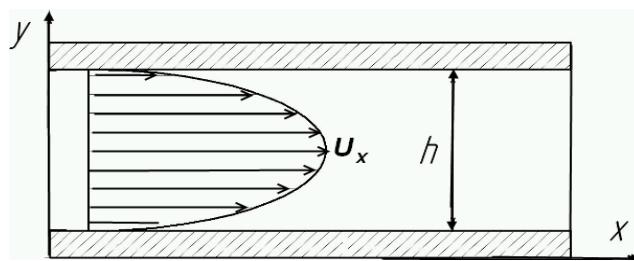


Рис. 1 – Распределение скорости по толщине формирующего капилляра

При малых расстояниях между стенками формирующего капилляра фильтры (доли миллиметра) и высокой вязкости полимерной композиции имеет место ламинарный режим, что дает возможность описывать течение композиции в формирующем капилляре фильтры, образованный двумя параллельными стенками, уравнением Навье-Стокса в виде:

$$\frac{\partial u_x}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (1),$$

где  $\nu$  – вязкость полимерной композиции;  $\rho$  – плотность полимерной композиции;  $p$  – давление в канале (между стенками формирующего капилляра фильтры).

Задача управления процессом отлива пленок формулируется как минимизация флюктуаций толщины пленки, которая, в свою очередь, зависит от стабильности дозирования полимерной композиции.

Различные допущения и упрощения, основанные на ламинарности течения [2], позволяют линеаризовать модель, которая описывается уравнением (1) в окрестностях некоторого ограниченного диапазона значений и получить передаточную функцию по каналу управления расходом композиции. Тогда передаточная функция представляется апериодическим звеном с постоянной времени и запаздывания, которые зависят от параметров композиции (вязкость, плотность и т.п.), параметров конструкции фильтры (высота и длина канала) и технологических параметров процесса (давление, расход).

Однако экспериментальные результаты по оценке переходной характеристики фильтры, представляемой апериодическим звеном первого порядка, несколько расходятся с результатами расчетов. В этой ситуации представляется целесообразным провести дополнительные исследования на основе имитационного моделирования по схеме, представленной на рис. 2.

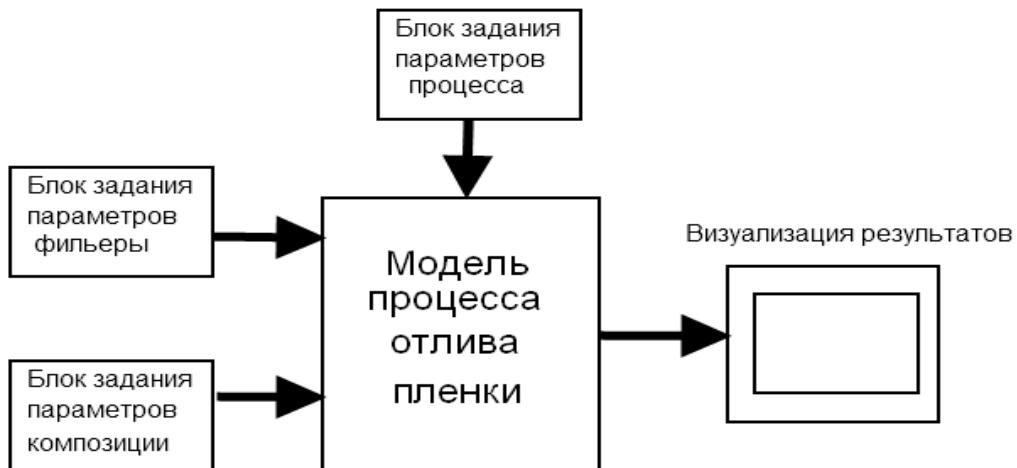


Рис. 2 – Структурная схема моделирования

Такой подход в процессе моделирования позволяет одновременно оптимизировать параметры конструкции формующего оборудования и технологические режимы получения пленки.

1. Багута В. А., Кулинченко Г. В. Моделирование процесса формирования пленки на движущейся подложке. Міжнародна наукова конференція «Теоретичні та прикладні аспекти кібернетики» Київ., 2011. - с. 261-262.
2. Попов Д.Н. Нестационарные гидромеханические процессы. – М.: Машиностроение, 1982. - 240с.

## ИДЕНТИФИКАЦИЯ ФОРМУЮЩЕГО ИНСТРУМЕНТА КАК ОБЪЕКТА УПРАВЛЕНИЯ ПРИ ОТЛИВЕ ПЛЕНКИ

Кулинченко Г.В., Багута В.А.

Шосткинский институт Сумского Государственного Университета, heorhy@rambler.ru

Параметры пленки, отливаемой из раствора полимера, определяются на стадии формования пленки через щель фильтры на движущуюся подложку. Стабильность этого процесса определяется влиянием большого количества характеристик используемого полимера и формующего инструмента: реологическими характеристиками раствора, режимом течения в щели фильтры, геометрией и размерами фильтры, динамическими характеристиками оборудования и т.д. Сложности описания имеющихся связей параметров, влияющих на процесс формирования пленки, приводят к необходимости идентификации данного процесса с целью построения системы управления процессом отлива полимерной пленки.

Рассматривая факторы, влияющие на значение расхода полимера на выходе из щели фильтры [1], приходим к необходимости описания течения полимера через уравнение Навье – Стокса для ненейютоновской жидкости:

$$\rho \left( \frac{\partial U_i}{\partial t} + U_k \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right) = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \mu \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{i,k} \frac{\partial U_l}{\partial x_l} \right) \right\} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \zeta \frac{\partial U_l}{\partial x_l} \delta_{i,k} \right), \quad (1)$$

где  $U$  – скорость течения полимера;  $\rho$  – плотность полимера;  $P$  – давление;  $\mu$  – коэффициент динамической вязкости;  $\zeta$  – «вторая вязкость»;  $\delta$  – дельта Кронекера.

Для описания течения полимерной ненейютоновской жидкости линеаризация уравнений осуществлялась на основе метода конечных элементов(МКЕ) [2] в декартовой системе координат с размером квадратных ячеек 0.05мм, с шагом по времени 10 мс. Расчет проводился с помощью математического пакета Mathcad в переменных «скорость-давление». Варьируемыми переменными модели являются реологические свойства полимера: плотность, и зависимость вязкости от скорости сдвига.

Чтобы оценить эффективность управления процессом течения жидкости через щель формующего инструмента, изменение давления на входе фильтры задавалось по линейному закону (рис.1).



Рис. 1 – Схема моделирования зависимости расхода от давления

Так как расход жидкости, измеряемый в процессе управления процессом отлива, является интегральной величиной, то его вычисление проводилось на основе усреднения векторов распределения скоростей на границе формирующего капилляра. При этом учитывалось, что граничные условия решаемого уравнения определяются геометрией фильтры и трубопровода с полимерной жидкостью. В результате численного моделирования течения жидкости получена зависимость ее расхода на выходе из фильтры от давления, создаваемого на входе системы дозирования (рис.2).

Как видно из графика, малым значениям давления жидкости соответствует линейная зависимость величины расхода от давления (зона 1). По мере увеличения давления рассматриваемая зависимость приобретает нелинейный характер, что связано с вязкоупругими свойствами полимера (зона 2) и аномалией вязкости у неньютоновской жидкости (зона 3).

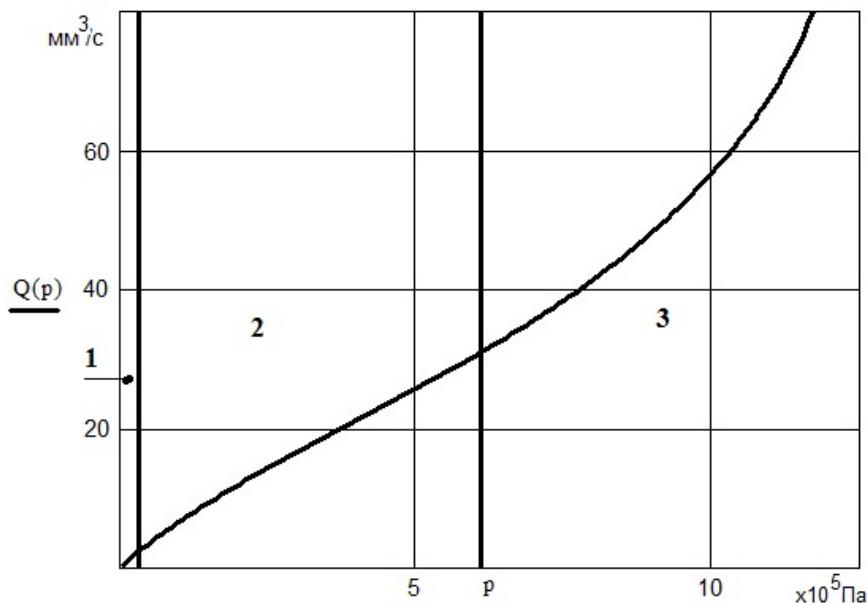


Рис. 2 – Зависимость расхода от давления

На практике нелинейность имеет более выраженный характер, так как на параметры течения жидкости в канале дополнительное влияние оказывает пристенное скольжение, которое на данный момент не учитывается в модели течения[3].

Результаты численного моделирования показали, что формирующую фильтра является нелинейным объектом управления. Следовательно, для синтеза эффективных алгоритмов управления системой дозирования полимерной жидкости необходимо использовать методы, обеспечивающие требуемое качество регулирования на всем диапазоне изменения параметров, например, линеаризацию передаточной функции с использованием обратной связи[4].

Идентификация параметров процесса отлива пленки из формующего инструмента, позволяет оценить эффективность управления толщиной и однородностью отливаемой пленки, а в дальнейшем отрабатывать алгоритмы и параметры регуляторов этого процесса по сформированным критериям.

1. Багута В. А., Кулинченко Г. В. Моделирование процесса формирования пленки на движущейся подложке. Міжнародна наукова конференція «Теоретичні та прикладні аспекти кібернетики» Київ., 2011, с. 261-262.
2. Филатов Е. Ю., Ясинский Ф. Н. Математическое моделирование течений жидкостей и газов: Учеб. пособие / Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И.Ленина». – Иваново, 2007. – 84 с.

3. Янков В.И., Глот И.О., Труфанова Н.М., Шакиров Н.В. Течение полимеров в отверстиях фильтер. Теория, расчет, практика. – М. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2010. – 368 с.
4. Ким Д.П. Теория автоматического управления. Т.2. Многомерные, нелинейные, оптимальные и адаптивные системы: Учеб. пособие. –М.:ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 464 с.

## РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ОХЛАЖДЕНИЯ ФУТЕРОВКИ В ПЕЧІ АЧЕСОНА

Гурчик А.И., Коржик М.В.

Национальный технический университет Украины „КПИ”, korzhyk@kpi.ua

Известно [1], что повысить эффективность процесса графитации можно за счет его интенсификации. Но интенсификация процесса ведёт к значительному и неконтролированному повышению термической нагрузки на футеровку печи в период после окончания кампании, что приводит к её быстрому разрушению, частой замене, а это в свою очередь означает дополнительные расходы, связанные с капитальным ремонтом и простоем секции графитации. Разработка подсистемы охлаждения футеровки печи Ачесона является одним из важных направлений совершенствования существующей системы управления процессом графитации.

Целью данной работы является увеличение срока эксплуатации печи Ачесона и повышение эффективности графитового производства в целом за счет минимизации тепловой нагрузки на футеровку печи путем управления процессом ее охлаждения в период после окончания кампании графитации. Для решения этой задачи была создана автоматическая система управления (АСУ) охлаждением футеровки печи, работа которой базируется на охлаждении футеровки холодным воздухом, который продувается по вытяжным магистралям в кладке печи.

Для оценивания динамики и характера температурной нагрузки на футеровку создана математическая модель температурного поля печи [2], которая представлена описанием сопряжённой нестационарной нелинейной задачи электро- и теплопроводности с соответствующими краевыми условиями.

Результаты численного моделирования показали, что во время кампании графитации с интенсивным регламентом подведения энергии температурная нагрузка на футеровку печи является несущественной (не превышает 300°C в самом „горячем“ месте) и начинает расти лишь через несколько часов после окончания кампании. При отсутствии охлаждения максимум тепловой нагрузки на футеровку приходится на 5-е сутки после завершения кампании графитации. При этом температура внутренней поверхности стен печи может доходить до 980°C, что превышает предел термической стойкости материала футеровки.

По мнению авторов, современная производственная практика, при которой охлаждение стен происходит во время кампании и прекращается после ее завершения, не будет способствовать решению поставленной задачи при интенсификации процесса графитации.

На основании анализа результатов моделирования динамики температурного поля печи графитации было определено оптимальное время включения АСУ системы охлаждения, а также сформирована схема установки термодатчиков, позволяющая получать адекватную информацию про температурное состояние футеровки и гарантирующая длительный срок эксплуатации измерительных средств и надежность системы управления в целом.

Разработан алгоритм функционирования АСУ охлаждения, позволяющий на основе информации от системы термодатчиков формировать оптимальное управление.

1. Соседов В.П. Графитация углеродистых материалов / В.П. Соседов, Е.Ф. Чалых. – М. : Металлургия, 1987. – 176 с.
2. Коржик М.В. Модель температурного поля печи графитации / М.В. Коржик, С.В. Кутузов // Наукові вісті НТУУ „КПІ”. – 2007. – № 1. – С. 17–23.

## СЦЕНАРНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ КОМПЛЕКСАМИ

Кишенко В. Д., Ладанюк А. П.

Национальный университет пищевых технологий, kvd1948@gmail.com

Технологические комплексы пищевых производств имеют все характерные особенности сложных организационно-технологических систем, интенсификация производственных процессов которых требует значительных изменений в практике проектирования и реализации алгоритмов управления. Развитие компьютерных систем и применение сетевых технологий открывает новые перспективы для разработки систем управления нового класса, позволяющих повысить производительность и обеспечить более рациональное использование энергетических и сырьевых ресурсов [1]. В плане таких перспектив проведены исследования по разработке эффективных принципов построения систем управления для объектов биотехнологических производств и обоснованы пути создания автоматизированной технологии решения функциональных задач для этих систем. В результате изучения и анализа биотехнологических процессов, как объектов управления, было установлено, что, во-первых, несмотря на разнообразие технологических процессов, динамические модели объектов управления характеризуются значительной размерностью, наличием запаздываний, параметрической и структурной нестабильностью. Во-вторых, для основных процессов ограничено количество регулируемых параметров и регулирующих воздействий, вместе с тем требования к точности стабилизации параметров увеличиваются при реализации задач оптимального управления. В-третьих, набор функциональных задач, решаемых на иерархических уровнях управления в АСУТП, ограниченный, но при этом требования для повышения эффективности принятых решений постоянно растут. В-четвертых, анализ рассматриваемого класса производства как биотехнологических систем показал, что они характеризуются многостадийностью и относительной автономностью каждой из стадий, что позволяет выделить за технологическими признаками ряд подсистем. Сложность управления такими процессами связана с их многомерностью, нелинейностью, нестационарностью и стохастичностью, а также постоянно изменяющимися свойствами окружающей среды и дефицитом необходимой информации. Проблема усугубляется еще присутствием явлений детерминированного хаоса. Разработать гибкий механизм адаптации к изменяющимся условиям позволяет концепция сценарного планирования. Главный инструмент сценарного планирования — сценарный анализ. Этот метод применяется для управления процессами с высоким уровнем неопределенности, которые протекают в турбулентной среде. Сценарный анализ должен дать набор детальных описаний последовательности событий, которые с прогнозируемой вероятностью могут привести к желаемому или планируемому конечному состоянию или к возможным исходам, при рассматриваемых сценаристом вариантах развития. Сценарии — это способ анализа сложной среды, в которой присутствует множество значимых, к тому же влияющих друг на друга тенденций и событий [2]. При этом необходимо отметить, что сценарий — это многосвязное динамическое пространственно-временное многообразие ситуаций. Технологическая ситуация как образ описывается вектором признаков, что характеризуют соответственный объект, и определяется некоторым отношением на множестве параметров  $\{Y\}$ , которая характеризуется множеством классов ситуаций  $\{K_S\}$ , что отражены в сценарии управления, множеством алгоритмов классификации  $\{K_A\}$ , а также правилами выбору алгоритмов классификации  $\{P_K\}$ :

$$\{Y\} = \{K_S, K_A, P_K\}.$$

Общая постановка задачи управления сложными организационно-технологическими объектами при сценарном подходе состоит в следующем. Определяются описания структур систем управления в виде начального аттрактора, который характеризуется как некоторая стабильная просторово - времененная структура. Далее задается на основе исследований

некоторая последовательность переходов от предыдущих структур – аттракторов до целевых аттракторов (история переходов), а также описание условий этих переходов и их временных параметров. Экспертным опросом за [3] определяются относительно стойкие структуры – аттракторы в фазовом пространстве, а также области их притяжения. При этом определяют:

- как осуществить последовательность действий для перехода от начальной к спланированной структуры – аттрактора;
- какие условия и временные параметры такого перехода;
- каким образом можно оценить эффективность, последовательность та преодоление конфликтности при межаттрактивных переходах с учетом определенных ограничений (часовые, ресурсные, критериальные, информационные);
- какой конечный эффект всех действий при вариантах переходов в целевое состояние системы.

Подобные определения задач управления требуют соответственного функционального обеспечения (мониторинг, диагностика, планирование, реконструкция, прогнозирование, принятия решений) в виде специальных схем – алгоритмов.

1. Трахтенгерц Э.А. Компьютерная поддержка принятия решений: Научно-практическое издание. Сериал “Информатизация России на пороге XXI века”. – М.: СИНТЕГ, 1998 – 376 с.
2. Кононов Д.А., Косяченко С.А., Кульба В.В. Формирование региональных сценариев развития взаимосвязанных объектов в АСУ ЧС // Автоматика и телемеханика . - 2000. - №8. - С. 173-185.
3. Юдицкий С.А. Целевое моделирование организационных систем // Приборы и системы управления. - 1999. - № 12. – С. 62-66.

### УПРАВЛЕНИЕ ПРОЦЕССОМ КОНВЕРСИИ ПО КРИТЕРИЮ МИНИМИЗАЦИИ УНИФИЦИРОВАННОЙ СЕБЕСТОИМОСТИ

Колпаков В.В.

Национальный технический университет Украины “КПИ”, Kolpakov@kpi.ua

С целью внедрения системы управления печью риформинга в производстве окиси углерода был исследован волновой характер распространения температурного поля вдоль реакционной зоны при изменении нагрузки и проанализировано влияние динамики температурного профиля вдоль реакционной зоны на коэффициент конверсии [1].

Система управления, основанная на предложенной в модели, может быть использована для повышения эффективности работы печи в режимах широкого диапазона изменения расхода сырья с целью увеличения износостойкости реакционных труб, снижения периодичности ремонтов и продления срока службы катализатора. Решение задачи достигается формированием управляющего воздействия путем расчета экстремумов температурной волны для каждого из вероятностных расходов реакционной смеси и выдержки рассчитанных приращений расхода на значениях, которые не формируют температурную волну с опасным для реакционного процесса экстремумом. Переход на новую нагрузку в соответствии с этим способом управления предлагается осуществлять последовательно, с выдержкой во времени переходного процесса наибольших возможных безопасных, рассчитанных с использованием предложенной модели приращений расхода сырья.

Для решения задачи в способе автоматического управления, которое содержит расчетное устройство вместо функции расчета управляющей функции по расходу топлива предлагается использовать функцию:

$$(F, \tau, Y_i) = f \left( \sum_{j=1}^{i=j} T_j, P, P_i, F \text{ зав., } F \text{ изм., } T_{\max.}, j=1, N \right)$$

где  $F$  – расчетный сигнал наибольших возможных на время расчета безопасных расхода сырья к моменту прохождения температурной волны и стабилизации температурного поля в слое катализатора;  $\tau$  – время выдержки расчетного сигнала расхода сырья;  $Y_i$  – сигнал расхода топлива в каждую из зон подогрева;  $T_i$  – температура в  $i$ -й точке контроля вдоль реакционной зоны;  $T_j$  – конечная температура готового продукта;  $P$  – давление топлива в точке распределения топлива;  $P_i$  – давление в каждом ярусе зон подогрева ;  $F$  зав. – задача для нового режима расхода сырья;  $F$  изм. – расход сырья на время контроля;  $T$  макс. – экстремум опасный для катализатора;  $N$  – постоянная, которая равняется количества зон обогрева.

Для расчета управляющих действий в соответствии с этой функцией кроме значений давления топлива в точке распределения по зонам обогрева и температур реакционной смеси в контрольных точках зон прогрева, которые используются при реализации способа прототипа, предлагается прибавить связи с объектом управления, которые предоставляют информацию о температуре нагрузки, расхода первичного сырья , значений давления топлива в каждой из зон обогрева и задание нагрузки, которое необходимо достичь. Использования предложенной функции предоставляет возможность управлять температурой за счет изменения расхода топлива с корректированием изменения объема сырья в зависимости от его температуры, достигнутого давления в точке распределения топливного газа и значения температурного экстремума, который может быть достигнут вдоль реакционной зоны при изменении нагрузки.

С целью улучшения экономических показателей процесса (увеличения сроков службы реакционных труб, катализатора и выхода готового продукта) предлагается дополнить систему управления и использовать в алгоритме выбора порядка перехода и продолжительности процесса регенерации катализатора по отношению к основному процессу характеристику статистической усталости реакционных труб и катализатора по предыстории изменения нагрузки [2]. Под статистической усталостью предлагается понимать предельное количество рассчитанных по модели приближающихся к критическому значению выгорания или зауглераживания катализатора температурных пиков обусловленных изменением нагрузки, также пиков температуры приводящих к критическим напряжениям. Статистическая усталость катализатора находится экспериментальным путем с использованием временных характеристик снижения активности катализатора и интенсивности изменения нагрузки избирательно для каждого из применяемых типов комплекса “катализатор-реактор”.

Рассматриваемый метод моделирования процесса конверсии с целью выявления статистической усталости реакционных труб, катализатора и прогноза условий возможного начала процесса регенерации катализатора, позволяет модифицировать алгоритм управления циклом конверсии по унифицированной себестоимость производства. В алгоритме управления процессом по критерию унифицированной себестоимости срок службы реакционных труб, катализатора и производительность установки объединены в критериальный параметр – унифицированная себестоимость производства, который определяется отношением суммарной производительности к общему времени реализации алгоритмов формирования эффективной конверсии на выходе из аппарата с неподвижным слоем дезактивирующегося катализатора за счет управления температурой и за счет изменения нагрузки .

1. Колпаков В.В. Конверсія метану. Математичне моделювання динаміки реакційного процесу. /В. Колпаков. // Хімічна промисловість України.- 2009. - №5. - С.34-38.
2. Колпаков В.В. Діагностування властивостей каталізатора конверсії за критерієм частоти та обсягу зміни навантаження. / В. Колпаков // Доклады 21-ой международной конференции “Современные методы диагностики и неразрушающего контроля”. – 2009.- г. Ялта 4-9 октября, 2009 – С. 67- 70.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ РЕГУЛЯТОРОВ  
ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ**

Ладанюк А.П., Крониковский Д.О.

Национальный университет пищевых технологий, [Ladanyuk@nuft.edu.ua](mailto:Ladanyuk@nuft.edu.ua)

Рассматриваются особенности технологических объектов в пищевой промышленности, в которых протекают сложные технологические процессы различной природы (тепло- и массообмен, химические реакции, биохимические превращения, гидродинамика и т.д.). К таким объектам относятся диффузионные аппараты, выпарные станции, оборудование для фильтрации и очистки жидких сред, кристаллизации и прочие.

В докладе характеризуются существующие системы, реализованные на микропроцессорных контроллерах и SCADA-программах.

Показано, что традиционные одноконтурные системы с ПИ и ПИД регуляторами не всегда обеспечивают необходимые требования как с точки зрения качества регулирования, так и технологических потребностей и экономии ресурсов, что в свою очередь влечет к повышению себестоимости и конкурентной способности продукции.

Для условий пищевой промышленности разработаны и исследованы с помощью компьютерного моделирования и частично в промышленных условиях различные многопараметрические регуляторы. К многопараметрическим регуляторам можем отнести ПИДД2, ПИДД2Д3, а также нейросетевые и нечеткие регуляторы и их комбинации.

Проведено исследование алгоритмов оптимизации настроек регуляторов, качества функционирования и устойчивости систем с различными регуляторами. Соответственно, для оптимизации этой n-мерной задачи необходимы большие технические ресурсы. Тем не менее, с быстрым наращиванием мощностей микропроцессорной техники эта проблема отходит на задний план, разрешая интегрировать алгоритмы многопараметрических регуляторов в интеллектуальные системы. Для сравнительного анализа затрат технических ресурсов на оптимизацию параметров разных регуляторов проведен ряд экспериментов, в которых использованы популярные алгоритмы оптимизации.

Проведен сравнительный анализ устойчивости систем с данными регуляторами при наличии большого времени запаздывания, нелинейности и нестационарности.

Одним из перспективных направлений использования многопараметрических регуляторов является подсистема координации и адаптации функционирования отдельных подсистем технологического комплекса, для чего требуется объединение координатного и структурного регулирования.

1. Ладанюк А.П., Крониковський Д.О. Багатопараметричний регулятор на основі нечіткої логіки // Східно-європейський журнал передових технологій.-2009/-№40, с. 52-54.
2. Сабанин В.Р. Параметрическая оптимизация и диагностика с использованием генетических алгоритмов/ Сабанин В.Р., Смирнов Н.И., Репин А.И. //Промышленные АСУ и контроллеры, №12, 2004. с.21-25.
3. Шубладзе А.М., Гуляев С.В., Шубладзе А.А. Оптимальные автоматически настраивающиеся общепромышленные регуляторы // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. 2002. № 10.-с.21-27.

## СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ УПРАВЛЕНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМ КОМПЛЕКСОМ САХАРНОГО ЗАВОДА

Ладанюк А. П., Шумигай Д.А., Кондрашов Д.О.

Национальный университет пищевых технологий, [Ladanyuk@nuft.edu.ua](mailto:Ladanyuk@nuft.edu.ua)

В промышленности наиболее широко используется в разных отраслях традиционные системы автоматизации, либо отдельные алгоритмы, не позволяющие получить оперативную оценку эффективности работы технологического комплекса в целом.

Выполнен системный анализ технологического комплекса (ТК) сахарного завода, определены общие требования, а также условия координации подсистем и возможности построения подсистем поддержки принятия решений.

В современных системах автоматизации сложных объектов координация получила наиболее важное значение. Только в случае координации работы управляемых подсистем можно обеспечить лучшие технико-экономические показатели функционирования автоматизированных технологических комплексов (ТК). При этом автоматизация отдельных стадий ТК не дает возможности достичь высоких технико-экономических показателей работы ТК в целом, так как они зависят во многом от взаимных связей между подсистемами ТК. Основные принципы координации - это взаимосвязь и одновременность, иерархическая подчиненность, согласование, сбалансированность, единство команд и действий, общая цель. Сегодня происходят три важные тенденции в изменении подхода к координации. Это снижение жесткости вертикальных связей; расширение горизонтальных связей; отклонения от иерархичности как главного принципа координации и, как следствие, замена вертикальных механизмов координации горизонтальными. Координация является специфической задачей иерархической системы управления и на сегодня использует ряд принципов, на которых основаны итеративные и безытеративные процедуры решения поставленной задачи.

Также в современных системах автоматизации сложных технологических объектов и комплексов возникает проблема решения ответственных задач управления не только с использованием алгоритмов, построенных на формальной, теоретической основе и на основе эвристик, но и алгоритмов, благодаря которым система управления приобретает способность к планированию, обучению и адаптации, то есть имеет в своем составе подсистему поддержки принятия решений, динамическую экспертную систему реального времени. База знаний интеллектуальной подсистемы принятия решений при управлении ТК сахарного завода формируется в виде каузальных (причинно-следственных) сценариев, задающих последовательность действий в предметной области и описываются в виде темпоральных фреймов, учитывающих время: событие и состояние и их составляющих - слотов. При формировании базы знаний могут быть разные типы каузальных соотношения между действиями: есть необходимые и достаточные причины. При создании данной системы используют названия слотов фреймов базы знаний: каузальный сценарий (название); исполнитель; цель, порядок действий; ситуации; условия; результаты.

Для реальных условий типового сахарного завода с объемом переработки свеклы 3000 т/сутки получена структура системы управления с подсистемами координации и поддержки принятия решений, что соответствует современному классу MES-систем.

## АВТОМАТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ БИПОЛЯРНЫМИ ЭЛЕКТРОЛИЗЕРАМИ ФИЛЬТР-ПРЕССНОГО ТИПА ДЛЯ РАЗЛОЖЕНИЯ ВОДЫ

Лебедев В.Е., Миленький В.В., Щербань Г.И.

Национальный технический университет Украины «КПИ», milenkyvv@ukr.net

Обеспечение гарантированной работы без технологических нарушений электролизеров требует создания высокоэффективной и надежной системы мониторинга необходимого количества технологических параметров. Основой системы мониторинга является постоянно измеряемые технологические параметры электролизера и периодические химические анализы состава электролита. На их основе прямыми и косвенными методами определяются основные физико-химические параметры рабочего режима технологического процесса для поддержания заданных технико-экономических показателей.

Основной задачей контроля технологического состояния водородного электролизера ФВ-500 до нынешнего времени заключалась в постоянном поддержании регламентных значений технологических параметров, которые влияют на безопасность ведения электролиза воды, а также на качество производимых газов. Использование только этих параметров в качестве основных показателей эффективности работы промышленного электролизера является не верным, так как ранее не измерялись основные электрохимические параметры – обратная ЭДС, общее активное сопротивление электролизера, удельное сопротивление электролита. Таким образом, определение технологического состояния водородного электролизера и повышение его эффективности работы осложняется неполнотой оперативной информации о процессе.

**Определение перечня параметров для оценки технологического состояния электролизера.** Поскольку водородный электролизер представляет собой электролитическую ячейку, то его можно рассматривать как аккумулятор в режиме заряда [2]. В процессе заряда обычного аккумулятора изменяется состав активных масс и соответственно ЭДС, напряжение и температура. Электрохимическая активность в батарее возрастает при увеличении температуры и уменьшается с ее понижением.

Необходимый минимум информации, при оценке текущего состояния аккумулятора, включает [3]:

- тип аккумулятора;
- напряжение на аккумуляторе;
- значение тока;
- значение внутреннего сопротивления;
- время, прошедшее с момента начала обслуживания аккумулятора;
- температура и плотность электролита.

Приборы, позволяющие максимально быстро оценить состояние аккумулятора, определяют только три параметра: ЭДС, внутреннее сопротивление аккумулятора (импеданс) и температуру электролита (при отсутствии датчика температуры электролита, используется температура корпуса аккумулятора).

Современные анализаторы аккумуляторов (Cadex, Hioki, Batnalyzer) не определяют электрическую емкость (А/ч), а только сравнивают состояние тестируемого аккумулятора с эталоном, т.е. с параметрами аккумуляторов, такого же типа и с заведомо известными характеристиками [4], а по отклонению измеренных параметров от «образцовых», оценивается его текущее состояние и электрическая емкость. Характеристики «эталонных» аккумуляторов, как правило, предоставляются фирмами-производителями для каждого типа аккумуляторов. При отсутствии «эталонных» характеристик, в качестве образца для сравнения, используются показатели нового аккумулятора такого же типа.

Для описания состояния обычного аккумулятора достаточно трехмерной характеристики, т.к. ряд параметров (рабочий объем, межполюсное расстояние, состав

электролита, материал и геометрия электродов) является постоянным и не учитывается в ней, а попадает в разряд данных - «тип аккумулятора».

Для водородного электролизера необходим более расширенный набор параметров, что позволяет определить все зависимости между различными величинами и оптимизировать величину тока электролизера, состав и температуру электролита в рабочей зоне.

**Синтез алгоритма построения автоматической системы аналитического контроля для электролиза водорода.** Периодичность отбора проб для определения химического состава электролита составляет не более 8 часов. Используя параметры, которые непрерывно измеряются (прямо и косвенно), определяются текущие значения состава и температуры электролита, измеряющиеся периодически.

Для решения поставленной задачи необходимо:

1. Изменить требования, предъявляемые к системе автоматизации электролизера, т.е. значительно расширить количество непрерывно измеряемых параметров водородного электролизера.
2. Изменение системы отбора образцов электролита для анализа его химического состава:
  - Отбор образцов электролита для анализа его химического состава должен осуществляться с фиксацией времени взятия пробы с точностью до минуты.
  - Результаты химического анализа, измерения температуры электролита и удельного сопротивления электролита заносятся в базу данных вместе с датой и временем взятия пробы.

Формируется перечень параметров, которые необходимо непрерывно измерять (прямо и косвенно) и характеристики материалов регистрируемые в базе данных:

- Ток электролизера.
- Напряжение электролизера.
- Обратная ЭДС.
- Общее активное сопротивление электролизера.
- Удельное сопротивление электролита.
- Количество производимого водорода.
- Высота столба электролита в газосборнике и скорость его изменения.
- Температура электролита.

Параметры, измеряемые периодически и вносимые в «базу данных результатов химического анализа»: состав и примеси в электролите, удельная проводимость электролита.

При периодическом отборе образцов электролита для анализа его химического состава, фиксировался: номер электролизера, дата и время измерения температуры и взятия пробы. При поступлении в «базу данных результатов химического анализа», из «базы данных системы автоматического управления» выбираются измеренные данные (прямо и косвенно) на том же электролизере в момент взятия проб химического анализа. Из полученных данных формируется полный «информационный кластер», т.е. весь комплекс параметров, характеризующих технологическое состояние электролизера на момент времени взятия проб.

**Построение физико-химической характеристики водородного электролизера.** Из набора таких полных «информационных кластеров» формируется многомерная номограмма [5] для данного типа электролизера.

Для определения характеристик исследуемых электрических, химических и электрохимических систем, изменяющихся при воздействии на нее различных физических и химических факторов, используется метод номограмм, т.к. он позволяет минимизировать объем математических вычислений в решении типовых многомерных задач и с использованием современных вычислительных средств значительно увеличить точность и скорость определения величин.

Поскольку не определены математические зависимости между всеми параметрами, входящими в «информационный кластер», определение состава и температуры электролита в электролизере производится путем сопоставления значений параметров измеряемых непрерывно, с данными полных «информационных кластеров». Процесс сопоставления текущих значений с «шаблонами» происходит как сравнение двух бинарных изображений, только одно из них с отсутствующими фрагментами [6]. По мере накопления таких «шаблонов» в сформированной номограмме (физико-химической характеристике (ФХХ)), диапазон значений и точность определения параметров характеризующих текущее состояние электролизера повышается.

### **Оценка оптимального технологического состояния электролизера.**

Технологический процесс электролиза характеризуется большим числом разнообразных параметров. Совокупность значений всех параметров процесса называют технологическим режимом, а совокупность значений параметров, обеспечивающую работу электролизера без технологических нарушений - нормальным технологическим режимом.

Степень достижения оптимального технологического состояния электролизера можно характеризовать с помощью критерия. Критерием может быть любой технико-экономический показатель, например выход по току или энергии, срок службы электролизера, чистота продукта и т.д.

При некоторых сочетаниях значений параметров процесса электролиза, не выходящих за регламентированные пределы, наступает такое состояние электролизера, при котором его дальнейшее функционирование может характеризоваться снижением выхода по току при увеличении срока службы электролизера или чистоты продукта [1]. Поскольку нет методик, позволяющих произвести подобные расчеты, а существующие эмпирические формулы не охватывают все перечисленных выше параметры и их возможные диапазоны, использование ФХХ электролизера позволяет определить сочетание основных параметров для ведения технологического процесса с заданными приоритетами и без технологических нарушений. Если при протекании процесса электролиза произошло технологическое нарушение, следовательно, в какой-то точке ФХХ произошло отклонение от заданных условий. Если эта причина может быть обнаружена и устранена, то процесс будет протекать максимально эффективно. Более того, если постоянно поддерживать заданные условия хода процесса, то можно обеспечить протекание процесса с заданным критерием. Важно также, что полученный результат - физические и химические параметры (обратная ЭДС, удельное сопротивление, температура и состав электролита и т.д.) выражаются числовыми величинами. Используя эти данные, с помощью статистических методов осуществляется контроль процесса, т.е. проверяется система причинных факторов, таким образом, процесс контролируется по технологическим параметрам.

Целью создания АСУ ТП является постоянное получение оперативной информации о технологическом состоянии электролизера, а также о динамике возможного изменения основных параметров, характеризующих протекание процесса. Реализованная в программном виде многомерная ФХХ необходима для выработки управляющих воздействий АСУ ТП и позволяет интенсифицировать технологический режим электролизера, снизить энергоемкость производства водорода и влияние человеческого фактора на безопасность протекания технологического процесса

Для определения технологического состояния и интенсификации режима работы электролизера построение подобной ФХХ и АСУ ТП рационально не только для водородных электролизеров, но и для электролизеров с другой конструкцией и электрохимической системой с учетом их особенностей. Это позволит на предприятиях, в технологическом цикле которых, используется электролиз постоянным током, создать ФХХ для используемого типа электролизера и максимально точно оценивать технологическое состояние электролизеров, оптимизировать их рабочие параметры и избежать технологических нарушений, т.к. ФХХ учитывает:

- особенности конструкции электролизеров;
- тип электрохимической системы;
- состав и сортность сырья;
- тип и погрешности приборов измеряющих физические и химические величины.

Изложенные в статье вопросы не исчерпывают перечень задач, определяющих все аспекты создания и надежного функционирования АСУ ТП электролизных установок, прежде всего потому, что данная система не является статичной и в процессе эксплуатации водородной станции предполагается ее постоянное развитие и совершенствование. С целью повышения технико-экономических показателей водородного электролизера также планируется использование методов электрохимической активации.

1. Якименко Л. М. и др., Электролиз воды, изд. "Химия", Москва, 1970.
2. Курс общей химии: Учеб. Для студ. энергет. спец. Вузов / Под ред. Н.В. Коровина. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. Шк., 1990. – 446с.: ил.
3. Васильев Ю.В. Аккумуляторы для мобильных устройств и портативных приборов. Оценка состояния. "Специальная техника" № 1 2001 г.
4. Buchmann, Isodore. Batteries in a Portable World: A Handbook on Rechargeable Batteries for Non-Engineers. 2<sup>nd</sup> 2001. Vancouver: Cadex. ISBN 0-9682118-2-8 Battery University Cadex Electronics Inc. www.batteryuniversity.com
5. Блох Л.С. Практическая номография М., "Высшая школа", 1971, 328 стр. с илл.
6. Фурман Я.А., Юрьев А.Н., Яншин В.В. Цифровые методы обработки и распознавания бинарных изображений. – Красноярск: Изд-во Краснояр. ун-та, 1992.-248 с.

### АНАЛИЗ ЦЕЛЕСООБРАЗНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ РОБАСТНЫХ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ В ПРОЦЕССЕ СТЕКЛОВАРЕНИЯ

Цапар В.С.

Национальный технический университет Украины “КПИ”, cwst@ukr.net

Современные условия рыночных взаимоотношений требуют от стекловарной промышленности высокой производительности с одновременным снижением себестоимости продукции. В Украине и странах СНГ стекловарное производство является одной из отраслей промышленности, которые динамически развиваются. В частности, количество тарного стекла, которое выпускалось в 2008, увеличилось по сравнению с 2003 приблизительно на 50%. Однако следует признать низкую конкурентоспособность отечественной стеклянной продукции на мировом рынке. Недостаточно высокий технологический уровень производства предопределяет значительное отставание отрасли по целому ряду основных технико-экономических показателей. Расходы топлива на варку стекла выше на 20-30% в сравнении с достигнутым мировым уровнем. Еще больше наблюдается отставание в производительности труда - ниже в 1.5-2 раза. Важной проблемой также остается негативное влияние производства стекла на окружающую среду [1]. Поэтому, учитывая значительную энергоемкость производства стекла на предприятиях Украины, высокую цену природного газа и огнеупоров, повышение эффективности работы промышленных агрегатов стеклянного производства является актуальной задачей, которая имеет большое практическое значение.

Как показывают теоретические и практические исследования, определяющую роль в формировании необходимых свойств изделия играют процессы приготовления стекломассы в варочных бассейнах стекловарных печей. В промышленном производстве чаще всего используют газовые печи ванного типа с высокой производительностью. Важнейшим фактором, который непосредственно влияет на эффективность основных технологических операций в газовых зеркальных печах и от которого зависит качество будущего изделия,

является температура стекломассы, а точнее задача поддержки ее на заданном уровне. Однако, как раз эта задача и является собой наибольшую сложность.

Для задач синтеза систем управления технологическими процессами с высокотемпературной и агрессивной средой, характерной является неполнота, нечеткость выходных данных о динамике объекта управления, существования ограничений на энергетические и материальные ресурсы, действие источников возмущений на информационные и технологические структуры, информационная сложность определения взаимосвязей и взаимодействия между элементами производственной системы.

При непрямых методах контроля и диагностики состояния технологического процесса неадекватные алгоритмы отбора и проработки сигнала предопределяют искажение данных в процессе оценивания траекторий состояния, а, следовательно, как следствие, - к потере функциональной и структурной стойкости технологического процесса, который может привести к аварийной ситуации в технологической системе. Недостатки такого подхода можно устранить, используя робастные системы.

Робастность характеризуется чувствительностью системы к факторам, которые не учитывались на этапах анализа и синтеза - например, к возмущениям, шумам датчиков и не учтеным в модели параметрам, которые влияют на динамику системы. Робастная система способна обеспечить стойкость и удовлетворить выставленные к ее качеству требования в достаточно большом диапазоне изменения ее параметров.

1. Дзюзер, В. Я. Современные тенденции развития стеклоторного производства [Текст] / В. Я. Дзюзер // Стекло и керамика. - 2004. - № 4. - С. 3-8.

## АНАЛІЗ ТЕМПЕРАТУРНОГО РОЗПОДІЛУ У СКЛОМАСІ

Жученко А.І., Щапар В.С.

Національний технічний університет України «КПІ», cwst@ukr.net

Сучасні умови ринкових взаємовідносин потребують від скловарної промисловості високої продуктивності з одночасним зниженням собівартості продукції. Тому, враховуючи значну енергоємність виробництва скла на підприємствах України, високу ціну природного газу та вогнетривів, підвищення ефективності роботи промислових агрегатів скляного виробництва є актуальною задачею, яка має велике практичне значення. У зв'язку з цим на основні ролі виходить дослідження температурних полів скловарної печі.

В якості бази для побудови температурних полів була використана математична модель описана у роботі [1]. Для побудови температурних полів скористаємося програмним пакетом Matlab. Даний пакет дозволяє побудувати температурні поля у будь-якому перетині скловарної печі. Проаналізуємо температурні поля скловарної печі у 3-х перетинах, показаних на рис. 1.

При збільшенні температурного максимуму у скловарній печі, спостерігається зростання градієнта температур по товщі скломаси рис 2., який інтенсифікує термодифузійні процеси. Під дією термодифузії більш важкі компоненти скломаси переміщаються в область низьких температур, зменшуючи тим самим щільність скломаси верхнього потоку, що надходить на виробку. Крім того, більш прогріта скломаса верхнього потоку володіє меншою в'язкістю, ніж нижні шари. Важкі компоненти розплаву під дією сил тяжіння будуть більш інтенсивно залишати шар скломаси з низькою в'язкістю. Вверх будуть витісняти легкі компоненти, наприклад збагачені оксидом кремнію. Конвекція скломаси у ванних скловарних печах грає основну роль в процесах гомогенізації. Зі збільшенням температури в квельпункті інтенсифікуються процеси природної конвекції у ванній печі [2].

Відповідно при русі скломаси від загрузочних кишень до зони студки температура її поступово зростає, ліній ізотерм вказують практично на однорідність прогріву скломаси

## Комп'ютерне підтримування виробничих процесів

незалежно від того які пальники в даний момент працюють. Підтвердження вище наведених слів можна отримати, аналізуючи два додаткових перетини печі на рисунках 3 і 4.

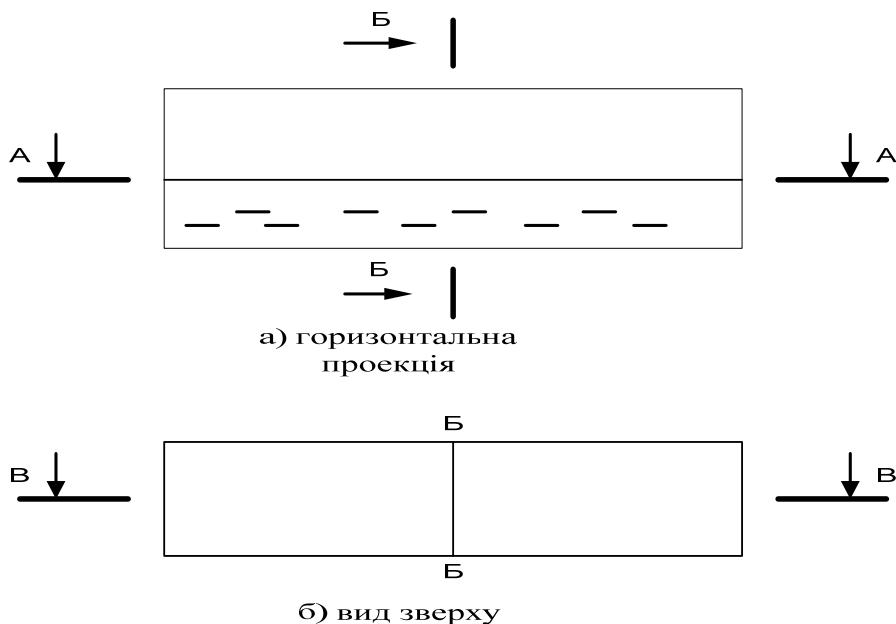


Рис. 1 – Схема перетинів скловарної печі для яких проведено моделювання і дослідження:  
А-А – по поверхні скломаси; Б-Б – поперечний перетин посередині скловарної печі;  
В-В – повздовжній перетин посередині печі

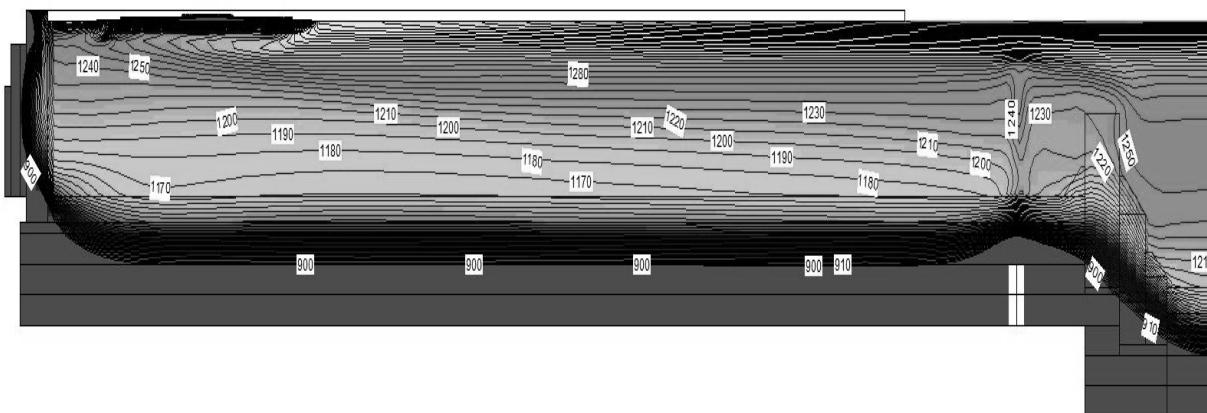


Рис. 2 – Розподіл температур по середині печі (повздовжній перетин)

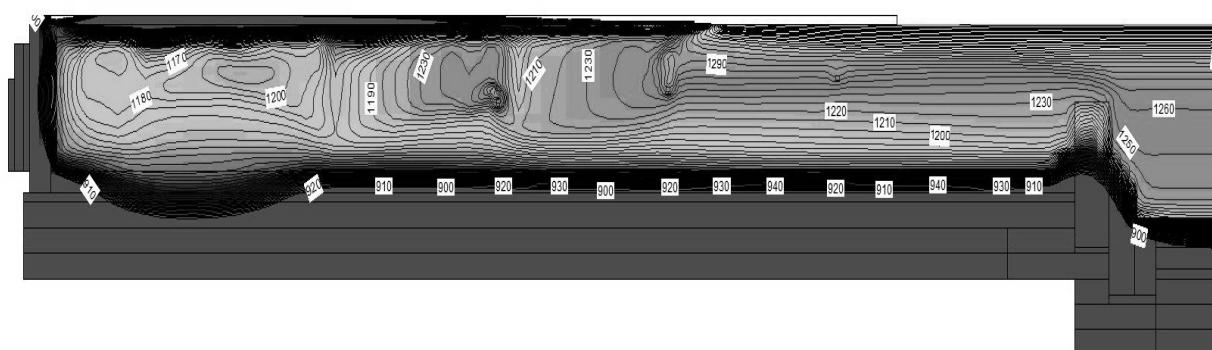


Рис. 3 – Розподіл температур по лівій стороні печі (повздовжній перетин)

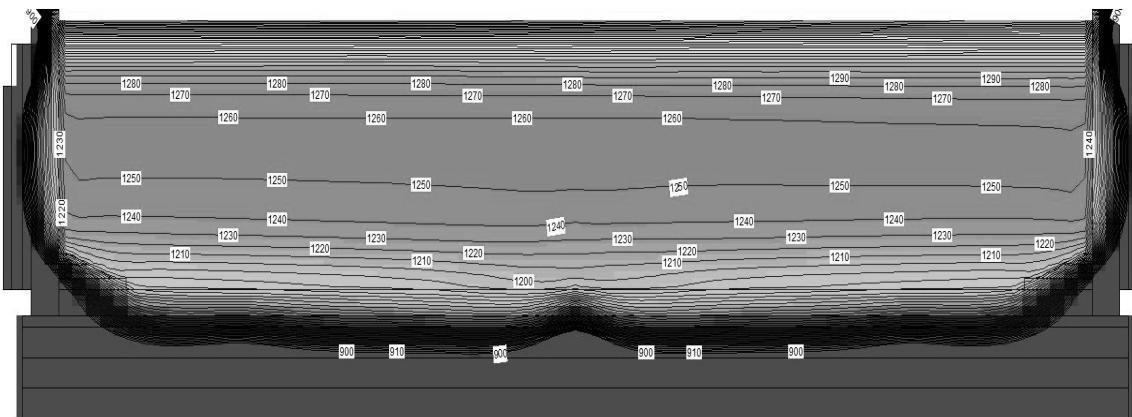


Рис. 4 – Розподіл температур перед проточним каналом печі (поперечний перетин)

Як бачимо, закономірності виявлені на рис. 2 знаходять своє підтвердження і на рис. 3 і 4.

Отже, наведені результати дозволяють стверджувати, що для отримання якісної скломаси достатньо підтримувати на заданому рівні температуру скломаси у точці температурного максимуму, координати якої у печі можна визначити із аналізу представлених вище температурних полів.

1. Жученко, А.І., Романенко, В.О. Моделювання теплового режиму скловарної печі // Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження. – 2011. – №1(11) – с. 126 – 128
2. Гинзбург, Д.Г. Стекловаренные печи. – М.: Изд-во литературы по строительству, 1967. – 214 с.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЖИГА УГЛЕГРАФИТОВЫХ ЗАГОТОВОВОК

Шилович И. Л., Лелека С.В., Пулинец И. В., Лазарев Т.В.

Национальный технический университет Украины "КПИ",  
НИЦ "Ресурсосберегающие технологии", [admin@rst.kiev.ua](mailto:admin@rst.kiev.ua)

Штатный обжиг «зеленых» углеграфитовых заготовок в печах Ридгаммера сопровождается значительным удельным расходом энергии (УРЭ) – 3,9–4,5 ГДж/т [1], а с учетом выхода бракованных изделий УРЭ существенно возрастает.

Основными причинами выхода бракованных изделий являются: низкое качество наполнителя и связующего; выход некачественных заготовок на переделе прессования; нарушение технологических режимов при обжиге по скорости нагрева заготовок в интервале температур интенсивного газовыделения, по уровню максимальных температур и неравномерности температурного поля в объеме заготовок. Поэтому задачи снижения УРЭ и получения заданного качества углеграфитовых заготовок при их обжиге являются актуальными.

Экспериментальные исследования термического режима обжига «зеленых» заготовок включают:

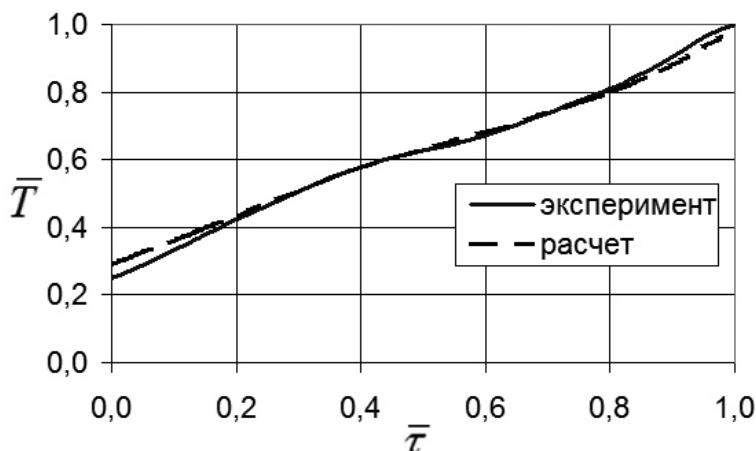
- определение уровня температур в заготовках и газовых каналах на протяжении всего процесса;
- оценку скоростей роста минимальной, максимальной и среднеобъемной температур в заготовках;
- определение перепада температур в заготовках и по камере в целом;
- сопоставление уровней температур под сводом с достижимыми температурами в камере;
- анализ теплового состояния процесса обжига в целом.

Данные натурных экспериментов также используются для проверки численной модели теплового состояния и газодинамики камеры обжиговой печи и задания граничных условий при выполнении соответствующих расчетов.

Разработка численной модели камеры обжиговой печи включает такие этапы: математическую формулировку задачи, создание твердотельной модели камеры печи и задание условий однозначности. Твердотельная модель состоит из камеры обжиговой печи, заготовок, пересыпки и объема газовой среды. Математическая модель нестационарного теплового состояния и газодинамики печи обжига основывается на системе уравнений: энергии и Навье-Стокса с учетом  $k - \omega$  модели турбулентности дымовых газов, движущихся в газовых каналах печи [2]. В качестве граничных условий принимаются: на входе в огневые каналы камеры задаются температура и скорость движения газов; на выходе – условия отсутствия теплообмена и нулевое давление газа; на наружных поверхностях печи – условия конвективного теплообмена с использованием эффективных коэффициентов теплоотдачи; на остальных поверхностях – условия симметрии. Методика численного решения поставленной задачи основывается на методе конечных объемов.

С помощью разработанной численной модели проведен численный анализ теплового состояния и газодинамики действующей конструкции камеры обжиговой печи. Результаты сопоставления численного эксперимента по среднему уровню температур в заготовках с данными натурного эксперимента представлены на рис. 1.

Результаты расчетов полей температур в заготовках (рис. 1) согласуются с экспериментальными данными, что обосновывает применение разработанной численной модели теплообмена и газодинамики камеры обжиговой печи для отработки рациональных технических решений и соответствующих температурных регламентов ведения процесса обжига в многокамерных печах.

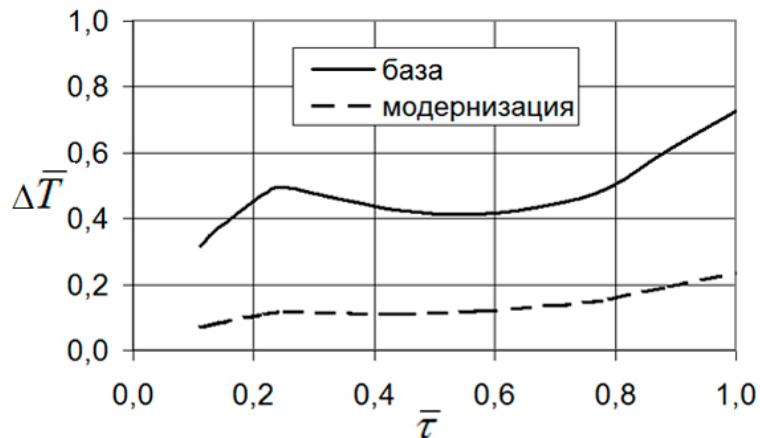


$\bar{\tau} = \tau / \tau_{\max}$  – безразмерное время;  $\bar{T} = T / T_{\max}$  – безразмерная температура;  $\tau$ ,  $T$  – текущее время (с) и температура (К);  $\tau_{\max}$ ,  $T_{\max}$  – продолжительность обжига и максимальная средняя температура заготовок

Рис. 1 – Сравнение результатов расчета с данными эксперимента

На основании проведенного анализа экспериментальных данных и результатов численного моделирования теплового состояния действующей конструкции обжиговой печи разработаны комплексные технические решения по ее модернизации, включающие в себя измененную схему загрузки заготовок, геометрию свода и муфельных каналов.

Сопоставление данных численного анализа теплового состояния действующей и модернизированной конструкций печи приведены на рис. 2.



$\bar{\Delta T} = \Delta T / \Delta T_{\max}$  – безразмірний температурний перепад в заготовках;  $\Delta T$  – текущий перепад температур (К);  $\Delta T_{\max}$  – максимальний температурний перепад по заготовкам (К)

Рис. 2 – Сравнение результата расчета действующей и модернизированной конструкций печи

Аналіз отриманих даних показує, що запропоновані комплексні модернізації дозволяють значно зменшити неравномірноту температурного поля по заготовкам і, відповідно, позитивно впливати на якість фінального продукту – углеграфітової електродної продукції.

- Чалых Е. Ф. Оборудование электродных заводов / Е. Ф. Чалых. – М. : Металлургия, 1990 – 238 с.
- Wilcox D. C. Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models / D. C. Wilcox // AIAA Journal. –1988. – Vol. 26, No. 11. – P. 1299–1310.

## СОЗДАНИЕ СТРУКТУРНОЙ МОДЕЛИ СТЕКЛОВАРНОЙ ПЕЧИ

Ситников А. В., Бобонич И. С.

Национальный технический университет Украины «КПИ», axv\_sitnikov@mail.ru

Структурной моделью называют вид модели, полученный с помощью передаточной функции элементов (звеньев) стекловарной печи, которые получены на основе уравнений тепловых балансов для разных тепловых потоков. Имеет вид схемы связи звеньев и позволяет определить управляемые и не управляемые элементы передаточной функции. В дальнейшем на базе структурной модели объекта создается структурная схема системы управления.

Сначала создана система тепловых потоков, которые излучает стекломасса и кладка [2]:

$$\begin{cases} q_{cm} = 3,5 \cdot 10^{-8} (T_{cm}^4 - T_{\text{ст}}^4) + 1,1 \cdot 10^{-8} (T_e^4 - T_{cm}^4), \\ q_{kl} = 2,11 \cdot 10^{-8} (T_{cm}^4 - T_{kl}^4) + 1,3 \cdot 10^{-8} (T_e^4 - T_{kl}^4), \end{cases} \quad (1)$$

где  $T_{\text{ст}}$ ,  $T_{\text{кл}}$ ,  $T_e$  – температуры стекломассы, кладки газа соответственно.

Рассматривая систему (1) в приращениях, линеаризируя её и используя преобразования по Лапласу [1] переходим к виду (2):

$$\begin{cases} q_{cm}(p) = a_1 T_{cm}(p) + a_2 T_{kl}(p) + a_3 T_e(p) \\ q_{kl}(p) = b_1 T_{cm}(p) + b_2 T_{kl}(p) + b_3 T_e(p) \end{cases} \quad (2)$$

Так же рассмотрено тепловой поток для газа :

$$q_e(p) = G_e c T_e^4, \quad (3)$$

где  $G_e$  расход газа, далее будет не обходимо при создании системы управления.

Передаточная функция, которая была определена из модели для стекломассы представляет собой функцию 2-х параметров  $W_{ct}(x,p)$ . Так же были найдены передаточные функции кладки и газа (4) – (7)

$$W_{cm}(p) = \frac{T_{cm}(p)}{q_{cm}(p)}, \quad (4)$$

$$W_{kl}(p) = \frac{T_{kl}(p)}{q_{kl}(p)}, \quad (5)$$

$$W_{cm}(x, p) = \frac{T_{cm}(x, p)}{q_{cm}(p)}, \quad (6)$$

$$W_e(p) = \frac{T_e(p)}{q_e(p)}. \quad (7)$$

На рис. 1 рассмотрена структурная модель объекта управления. Коэффициенты, находящиеся в (2) учтены как звенья соединенные последовательно, даёт возможность умножать на них передаточные функции (4) – (7), т.к. при последовательном соединении, результирующее звено есть произведение двоих. На выходе будем получать температуру стекломассы, которая изменяется по голубине слоя и с влиянием времени. В общем случае структурная модель объекта реализует систему (2) с учётом (4) – (7). Следующим шагом в решении задачи создания структурной схемы системы управления будет упрощение структурной модели объекта [1]. В результате преобразований получается передаточная функция объекта, который рассматривается как ванна стекловарной печи. Упрощенная схема объекта изображена на рис. 2.

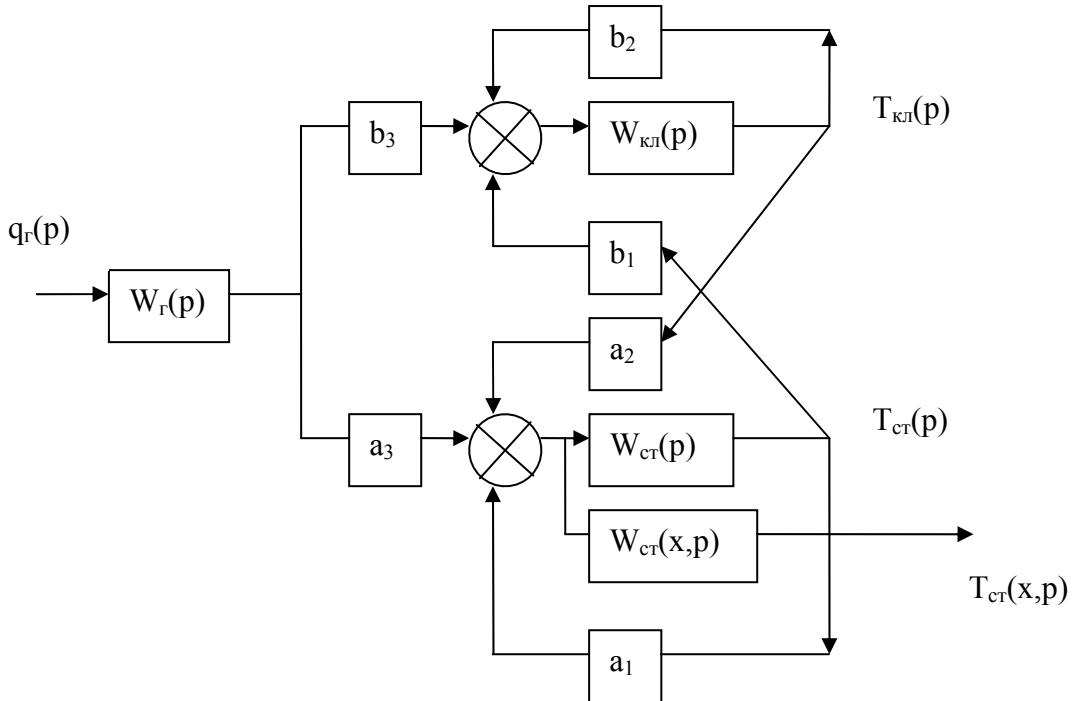


Рис. 1 – Структурная модель объекта управления

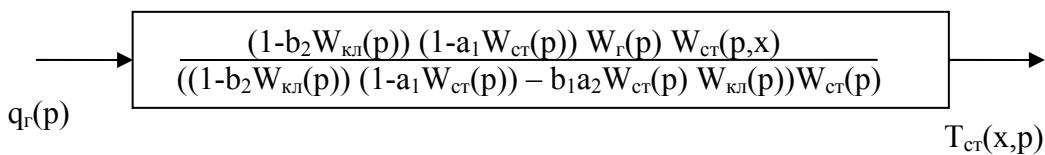


Рис. 2 – Упрощенная схема объекта управления

Передаточная функция объекта управления была использована для создания системы управления процессом, изображена на рис. 3.  $G_e(p)$  – расход газа, как регулятор будет использован тот, который реализует ПИД-закон.

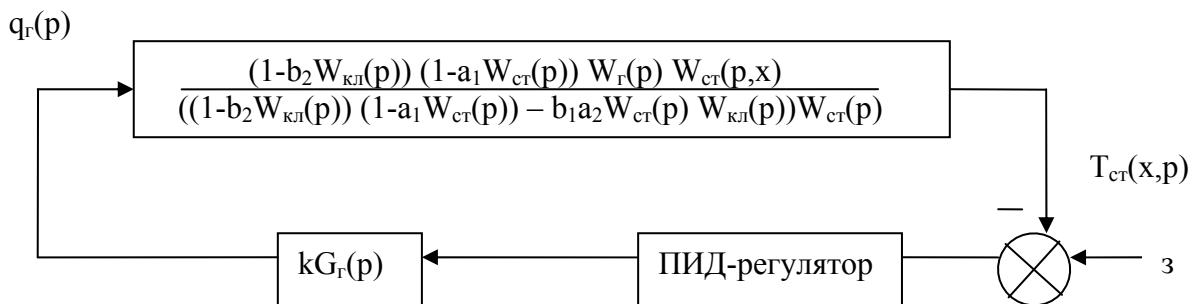


Рис. 3 – Схема системи управління

Приведённая на рис. 3 схема позволяет регулировать расход газа в зависимости от температуры стекломассы.

1. Бутковский А.Г. Характеристики систем с распределёнными параметрами. // «Наука» - Москва, 1979. – 224 с.
2. Лыков А.В. Терия теплопроводности. // «Высшая школа». – Москва, 1967. – 600с

## ВІЗУАЛІЗАЦІЯ КОМП'ЮТЕРНИХ РОЗРАХУНКІВ ПРОЦЕСІВ ДЕФОРМУВАННЯ ПОРОШКОВИХ МАТЕРІАЛІВ

Бондаренко С.Г., Хоменко А.А.

Національний Технічний Університет України «КПІ», vellaria@gmail.com

У останній час порошковим композиційним матеріалам приділяється велика увага. З цих матеріалів отримують деталі з особливими властивостями і високими експлуатаційними характеристиками.

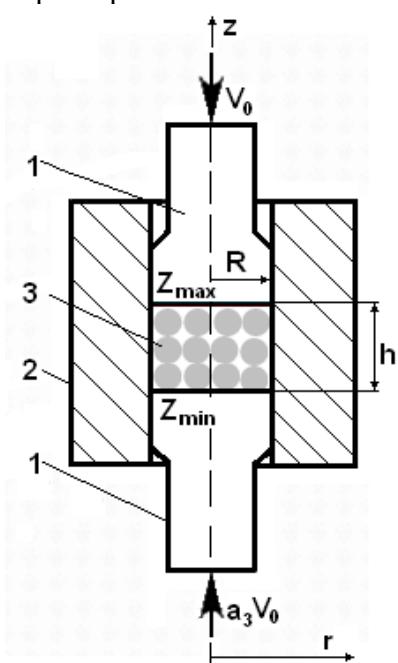


Рис. 1 – Принципова схема двостороннього закритого пресування

1 – пuhanсон; 2 – прес-форма;  
3 – заготовка  
(композиційний матеріал)

При отриманні виробів з порошкових композиційних матеріалів слід враховувати їх майбутні високі властивості по міцності з одного боку, і специфіку обробки матеріалу при отриманні готових виробів. Існує декілька можливих варіантів деформації заготовки, одним з яких є деформація в закритій прес-формі (рис.1). При формуванні порошкових матеріалів прагнуть досягнення однорідного ущільнення заготовки по всьому об'єму, мінімальної або заданої пористості отриманого виробу.

Для визначення властивостей виробу, що піддали обробці в закритій прес-формі, існує декілька складних методик, які мають високу вартість, потребують досить складного обладнання і значних часових затрат. Тому визначення експериментальним шляхом необхідного часу пресування заготовки з подальшим проведенням якісного аналізу деталі є недоцільним з економічної точки зору. Виходячи з цього, виникає необхідність у розробці розрахункових методів попередньої оцінки якості отриманого виробу після обробки заготовки в закритій прес-формі. Для таких цілей розроблений алгоритм та виконана його програмна реалізація, яка дозволяє виконувати розрахунки геометричних параметрів та характеристик міцності деталі циліндричної форми, що підвергається двосторонньому ущільненню в закритій прес-формі, на кожному етапі обробки.

Математична модель, яка описує процес деформування в закритій прес-формі записується наступною системою рівнянь (рівняння для компонент с індексом 1 справедливі для значень  $z < z_{mid}$ , а з індексом 2 - для  $z \geq z_{mid}$ ), за умови що існує деяке значення  $z_{min} < z_{mid} < z_{max}$ , при якому  $v_z$  обвертається в 0):

$$e_r = \frac{\partial v_r}{\partial r} = 0; e_\phi = \frac{v_r}{r} = 0;$$

$$e_{1z} = \frac{\partial v_{1z}}{\partial z} = -\frac{2v_0(1+a_3)}{z_{max}-z_{min}} \left[ 1 + a_1 \left( 1 + a_2 \frac{r^2}{R^2} \right) \cdot \frac{2(1+a_3)z - ((2+a_3)z_{min} + a_3z_{max})}{a_3(z_{max}-z_{min})} \right];$$

$$e_{2z} = \frac{\partial v_{2z}}{\partial z} = -\frac{v_0(1+a_3)}{z_{max}-z_{min}} \left[ 1 - a_1 \left( 1 + a_2 \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{(1+2a_3)z_{max} + z_{min} - 2(1+a_3)z}{z_{max}-z_{min}} \right];$$

$$\gamma_{1rz} = \frac{\partial v_{1z}}{\partial r} = -v_0 \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \frac{(1+a_3)z - a_3z_{max} - z_{min}}{z_{max}-z_{min}} \cdot \left[ 1 - a_1 \left( 1 + a_2 \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{(1+a_3)(z-z_{min})}{a_3(z_{max}-z_{min})} \right] \right\};$$

$$\gamma_{2rz} = \frac{\partial v_{2z}}{\partial r} = \frac{2v_0a_1a_2r}{R^2} \left( \frac{(1+a_3)z - a_3z_{max} - z_{min}}{z_{max}-z_{min}} \right) \left( \frac{(1+a_3)(z_{max}-z)}{z_{max}-z_{min}} \right).$$

При цьому граничні умови записуються наступним чином:  
 $v_r(R, z) = 0; v_r(r, 0) = 0; v_r(0, z) = 0; v_z(r, z_{max}) = -v_0; v_z(r, z_{min}) = a_3v_0$ , де  $0 \leq a_3 \leq 1$ .

Математична модель побудована з урахуванням наступних припущен: деформація матеріалу заготовки прийнята однорідною по її об'єму, верхній і нижній деформуючі пуансони рухаються з постійною швидкістю  $v_0$  і  $a_3v_0$  відповідно ( $a_3 \leq 1$ ). При  $a_3 = 1$  має місце двостороннє симетричне пресування, при якому верхній і нижній пуансони рухаються назустріч один одному з однаковими швидкостями.

Обчислення проводиться за допомогою прямого варіаційного методу, комбінованого з методом сіток. Визначення параметрів  $a_1, a_2$  математичної моделі проводиться за допомогою оптимізації методом Хука-Джівса варіаційного функціонала  $J$ , що обчислюється за методом Монте-Карло. Вихідними даними є геометричні розміри деталі, початкова пористість її матеріалу, швидкість руху пресувального апарату (пуансона) і значення  $a_3$ , крок за часом, а також крок віртуальної сітки по перерізу зразка. А результатами розрахунку є висота та середня пористість заготовки. Вихідні та результатуючі дані наведені у табл. 1 і 2 відповідно.

*Таблиця 1 – Вихідні параметри для розрахунків*

Початкова висота заготовки $h_0$ , мм	Діаметр матриці $d_0$ , мм	Швидкість переміщення верхнього пуансона $v_0$ , мм/с	Крок за часом $\Delta t$ , с	Крок сітки по осі $r$ , мм	Крок сітки по осі $z$ , мм	Початкова пористість, %
50	30	1	1	3	5	70

Кінцевим результатом розрахунку по моделі є середня пористість в заданий момент часу та геометричні характеристики виробу. Такі результати не дозволяють оцінити розподіл пористості по висоті виробу, що обробляється, і не дають можливість визначити зони низької щільності виробу. Ця обставина не дозволяє виконати оцінку майбутніх експлуатаційних характеристик виробу.

Для цього був розроблений модуль візуалізації процесу деформування, яким була доповнена програма розрахунку процесу пресування в закритій прес-формі, що описується модельними залежностями наведеними вище. При візуальному розрахунку на віртуальний переріз заготовки наноситься сітка з заданим кроком і для кожної комірки сітки проводиться розрахунок пористості. Вибрана кольорова градація, яка дозволяє візуально оцінити розподіл пористості (при необхідності градація кольорів може бути змінена).

Таблиця 2 – Результати розрахунків

Час обробки заготовки 5 с					
$a_3$	0	0,25	0,5	0,75	1
Висота заготовки, мм	45	43,75	42,5	41,25	40
Середня пористість	0,22	0,2	0,17	0,15	0,12
Час обробки заготовки 10 с					
$a_3$	0	0,25	0,5	0,75	1
Висота заготовки, мм	43	41,25	39,5	37,75	36
Середня пористість	0,18	0,15	0,11	0,07	0,05

Результати роботи модуля візуалізації представлені на рис. 2 і 3.

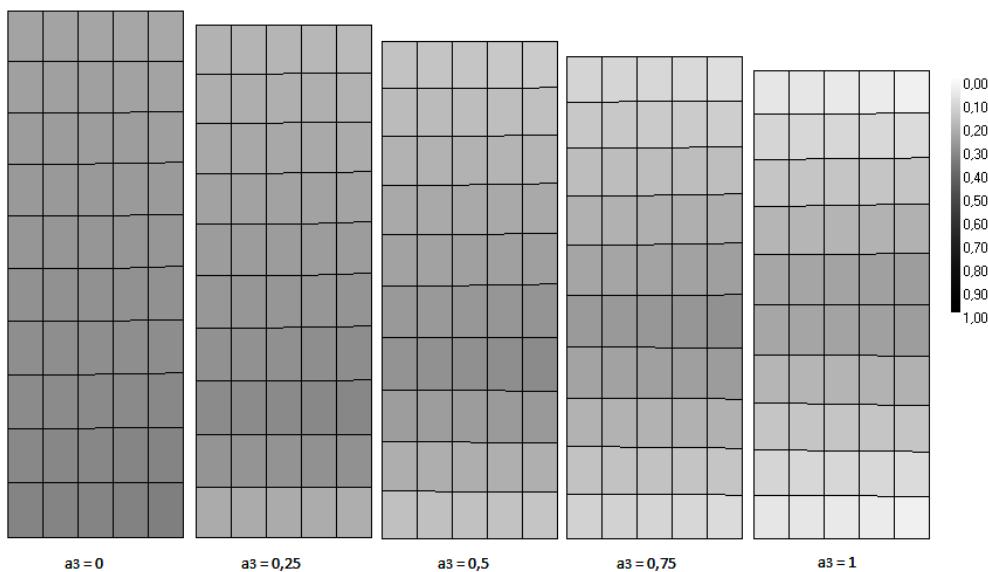


Рис. 2 – Графічна візуалізація результатів розрахунків при різних значеннях  $a_3$   
(час обробки заготовки - 5 с)

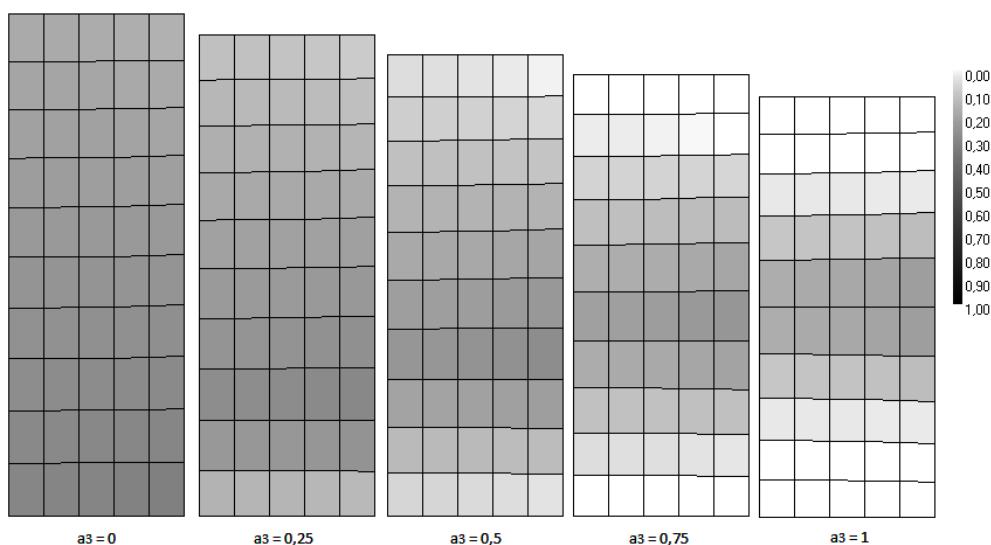


Рис. 3 – Графічна візуалізація результатів розрахунків при різних значеннях  $a_3$   
(час обробки заготовки - 10 с)

Як видно з наведених результатів роботи модуля візуалізації, за його допомогою можна оцінити області низької щільності виробу й винести судження про його майбутні експлуатаційні якості. Наприклад, за отриманими результатами (рис. 3) можна бачити, що в районі центру заготовки існує область низької щільності, отже, незважаючи на високу середню щільність заготовки, її властивості з міцності можуть бути недостатні для експлуатації в реальних умовах, і її необхідно піддавати подальшому ущільненню. Також, виходячи з результатів моделювання видно, як саме відбувається процес деформування виробу при різних швидкостях пресувального апарату. З наведених рисунків видно, що при абсолютно двосторонньому пресуванні ( $a_3 = 1$ ) спостерігається найбільш швидке спресовування заготовки, і через 10 секунд пресування середня пористість матеріалу наближається до нульової.

## ОЦІНЮВАННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ СХЕМ ОТРИМАННЯ МЕТАКРИЛОВОЇ КИСЛОТИ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ АЛГОРИТМУ МІНІМІЗАЦІЇ ВІДХОДІВ WAR

Бугаєва Л.М., Задорожний А.С., Ткач Н.А., Безсінний Д.В.

Національний технічний університет України «КПІ», bugaeva\_l@ukr.net

Традиційний підхід до мінімізації відходів потребує постановки відповідної задачі оптимізації, рішення якої дозволить знайти найкращу комбінацію технологічних умов процесу або оптимальну структуру ХТС. Розроблено цілий ряд методів рішення цієї задачі, але оптимізація ХТС задача зазвичай багатокритеріальна й містить як неперервні, так й дискретні параметри, що значно ускладнюють можливість її рішення.

В пропонованій роботі використовувався підхід, що базується на розрахунку матеріальних балансів в програмах-симулаторах типу Cofe, ChemCad, Hysys та ін. Оскільки моделюючі програми широко застосовуються при розробці хімічних виробництв, можливість рішення задачі скорочення забруднень за допомогою таких програм має велике значення. Одним із засобів рішення задачі мінімізації відходів із використанням програм-симулаторів є розроблений у Національній лабораторії управління ризиками США алгоритм скорочення викидів WAR [1].

Алгоритм WAR заснований на понятті потенційного впливу хімічних процесів на навколошнє середовище. Було введено шість екологічних індексів впливу, які характеризують потенційний вплив процесу. Індекси кількісно відображають можливі впливи, оцінюючи та порівнюючи які, можна вносити зміни у технологічні схеми для зниження рівня забруднення. Потенційний вплив на навколошнє середовище визначається з урахуванням масових витрат потоків, складів та відносної шкали потенційного екологічного впливу дляожної хімічної речовини. Оцінки хімічного впливу враховують всім категорій ефектів від руйнування озонового шару до впливу токсичності на людей та навколошнє середовище.

Запропонований в роботі [1] підхід розглядає крім рівнянь масових балансів, ще й рівняння збереження потенційного впливу на оточуюче середовище, яке має вигляд:

$$\frac{dI_{syst}}{dt} = I_{in} - I_{out} + I_{gen}, \quad (1)$$

де  $I_{syst}$  відображає потенційний екологічний вплив всередині процесу,  $I_{in}$  показує ступень потенційного впливу на вході:

$$I_{in} = \sum_i^{EnvCat} \sum_j^{InletStreams} \sum_k^{Component} \alpha_i M_j^{(in)} x_{k,j} \psi_{k,j}^s. \quad (2)$$

Відповідно  $I_{out}$  - це ступень потенційного впливу на виході:

$$I_{out} = \sum_i^{EnvCat} \sum_j^{OutletStreams} \sum_k^{Component} \alpha_i M_j^{(out)} x_{k,j} \psi_{k,j}^s. \quad (3)$$

У виразах (2, 3) використовуються наступні позначення:  $M_j$  масова витрата  $j$ -го потоку,  $x_{kj}$  - масова доля  $k$ -ої речовини в  $j$ -ому потоці,  $\psi_{kj}$  – потенціал впливу на навколошнє середовище  $k$ -ої хімічної речовини.

Алгоритм WAR для обчислення загального потенціал впливу  $\psi_j$  використовує вираз

$$\psi_j = \sum_l \alpha_l \psi_{j,l}^s .$$

Сума береться по категоріях потенційного хімічного впливу на навколошнє середовище  $l$ , наприклад, потенціал руйнування озону, здоров'я людини та ін. Тут  $\alpha_l$  відносний ваговий коефіцієнт впливу  $l$ -го типу, незалежно від речовини  $j$ , а  $\psi_{j,l}^s$  конкретний потенційний вплив на навколошнє середовище хімічної речовини  $j$  для впливу  $l$ -го типу.

Як продемонстровано в ряді робіт [1,2], алгоритм WAR може бути дуже корисним при оцінюванні варіантів схем і виборі такого варіанта ХТС, який дає мінімальну кількість викидів та характеризується найменшим впливом на навколошнє середовище. Саме від обраного проектного варіанту залежить якість роботи хіміко-технологічної схеми на стадії експлуатації. В представлений роботі алгоритм WAR був застосований до вибору варіанта схеми виробництва метакрилової кислоти.

Метакрилова кислота широко застосовується у виробництві іонообмінних смол, синтетичних каучуків, присадок до змащувальних масел, у лакофарбовій промисловості, косметичній промисловості, побутовій хімії та ін.

Відомо багато шляхів отримання метакрилової кислоти. В наш час здійснюються постійний пошук нових промислових способів її отримання. Отже ще на стадії розробки виробництва метакрилової кислоти необхідно проаналізувати різні варіанти технологічної схеми і оцінити їх ефективність. Всі ці дослідження можуть бути проведені із використанням сучасних програмних продуктів, які розроблені спеціально для рішення задач хімічної технології.

В рамках виконаного дослідження було проведено комп'ютерне моделювання хіміко-технологічної схеми отримання метакрилової кислоти окисненням метакролейну в паровій фазі на гетерогенному каталізаторі в присутності водяної пари. Розрахунок варіантів схеми був виконаний у відомій моделюючій програмі ChemCad.

Проводились розрахунки балансів для різних вхідних даних та керуючих параметрів, а також використовувались вбудовані в програму процедури аналізу можливих варіантів схем. Це допомагає знайти найкраще проектне рішення для технологічного процесу отримання метакрилової кислоти.

Програма ChemCad має вбудовані процедури оптимізації та аналізу чутливості, які також можуть бути використані для знаходження найкращого варіанту процесу. Нашою задачею було знайти варіант схеми із мінімальним впливом на оточуюче середовище. Для цього був застосований алгоритм мінімізації відходів WAR, який досить легко інтегрується із основною програмою розрахунку матеріальних балансів ChemCad. Алгоритм мінімізації відходів WAR дозволив отримати відносні значення впливів (рівня шкідливості) різних варіантів технологічних схем. Враховуючи сучасні виклики сталого розвитку, застосування алгоритму WAR разом із моделюючою програмою ChemCad надало можливість оцінити й порівняти рівень сталості кожного із пропонованих проектних варіантів виробництва метакрилової кислоти на основі індексів, запропонованих в роботі [2]. По результататах такого аналізу були обрані найкращі варіанти ХТС за критерієм мінімізації відходів.

1. Hilaly, A. K., Sikdar, S. K. Pollution Balance: New Methodology for Minimizing Waste Production in Manufacturing Processes., J. Air and Waste Manage.Assoc., 1994, №44, 1303.
2. Cabezas, H., Bare, J. C., Mallick, S.K. Pollution Prevention with Chemical Process Simulators: the Generalized Waste Reduction (WAR) Algorithm, Computers and Chemical Engineering, 1997, Vol. 21, pp S305-310.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРЯДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ХИМИЧЕСКИХ ИСТОЧНИКОВ ТОКА

Наумов И.В., Безносик Ю.А., Ткач В.В.

Национальный технический университет Украины «КПИ», [igor.naumov@gmail.com](mailto:igor.naumov@gmail.com)

Жизнь современного общества невозможна без широкого использования химических источников тока (ХИТ). Разработка новых источников тока неосуществима без определенных экспериментальных исследований, однако некоторые экспериментальные опыты требуют большого времени проведения. Важной характеристикой работы ХИТ является его разрядная кривая, показывающая изменения напряжения во времени. В процессе работы ХИТ, т.е. в процессе его разряда возрастает поляризация элемента, уменьшается электродвижущая сила, растет внутреннее сопротивление. Поэтому, наблюдается неуклонное падение напряжения ХИТ во времени по мере разряда. Разрядную кривую представляют в виде зависимости напряжения от времени разряда, с обязательным указанием тока разряда. Разрядные кривые ХИТ позволяют наглядно судить о поведении тех или иных источников в заданных условиях их эксплуатации, а так же сравнивать эти источники тока между собой. Разрядные кривые ХИТ обычно получают при ограниченном количестве значений разрядного тока и, поэтому, они не охватывают всех возможных условий их эксплуатации. Кроме того, получение разрядных кривых требует большого экспериментального времени.

При выборе ХИТ необходимо решать вопросы, связанные с прогнозированием выходных электрических характеристик источника тока в условиях, не описанных разрядными кривыми. Для этого не необходимо иметь математические зависимости разрядных характеристик ХИТ. Целью данной работы есть разработка математической модели и компьютерной программы, которые описывали поведение ХИТ в широких границах их эксплуатации и позволяли прогнозировать емкость элементов при средних и малых токах и получать результаты прогнозирования в виде графиков разрядных кривых.

Первой математической моделью данного процесса было уравнение Пейкерта, который эмпирически установил, что емкость элемента  $Q = I^* \tau$  при разряде элемента от полностью заряженного к полностью разряженному обратно пропорционально разрядному току  $I$  в степени  $n$ :

$$Q(I, U_0) = K(U_0) / I^n, \quad (1)$$

где  $U_0$  – начальное значение разрядного напряжения,  $\tau$  - время разряда элемента,  $K$  – константа,  $n$  – число Пейкерта.

Константа  $K$  зависит не только от типа ХИТ, но и от других факторов, например температуры. Температурная поправка может быть учтена выражением:

$$K = K_0(1 + \lambda\theta), \quad (2)$$

где  $\theta$  – температура,  $K_0$  и  $K$  - величины при  $0^\circ\text{C}$  и  $\theta^\circ\text{C}$ .

Тогда уравнение (1) можно представить в виде:

$$Q = \frac{K_0(1 + \lambda\theta)}{I^n}. \quad (3)$$

Однако формулы (1) или (3) нельзя использовать при малых токах, так как при  $I \rightarrow 0$   $Q \rightarrow \infty$ , что лишено физического смысла. При снижении тока разрядная емкость практически ограничена величиной  $Q_M$  – максимальной разрядной емкостью элемента. Согласно уравнению Пейкерта, значению  $Q_M$  отвечает ток  $I_H$  – номинальная сила разрядного тока:

$$QI^n = Q_M I_H^n = K. \quad (4)$$

Уравнение (4) можно представить в следующем виде:

$$Q = Q_M / (I / I_H)^n . \quad (5)$$

Анализ экспериментальных кривых «разрядная емкость элемента – средний ток разряда» свидетельствует, что они хорошо описываются гиперболической функцией, которую получают из уравнения (5):

$$Q = Q_M \operatorname{th}(I / I_H)^n / (I / I_H)^n \quad (6)$$

Действительно, уравнение (6) переходит в уравнение Пейкерта (5):

- 1) при  $I >> I_H \quad \operatorname{th}(I/I_H)^n \rightarrow 1$  мы получаем уравнение (5);
- 2) при  $I << I_H \quad \operatorname{th}(I/I_H)^n / (I/I_H)^n \rightarrow 1$  разрядная емкость элемента  $Q$  стремится к значению  $Q_M$ .

По экспериментальным данным разряда элементов ОВЛ-2325, ВСЛ-2325 и ДСЛ-2325 по уравнению (6), с учетом методов приближения функций, получены соответствующие аналитические зависимости:

- для элемента ОВЛ-2325:  $Q = 328 \operatorname{th}(I / 0,99)^{0,73} / (I / 0,99)^{0,73}$ ;
- для элемента ВСЛ-2325:  $Q = 330 \operatorname{th}(I / 1,42)^{0,81} / (I / 1,42)^{0,81}$ ;
- для элемента ДСЛ-2325:  $Q = 158 \operatorname{th}(I / 0,80)^{0,61} / (I / 0,80)^{0,61}$ .

По полученным аналитическим зависимостям легко может быть проведено сравнение электрических характеристик ХИТ. Так, для элементов ОВЛ-2325 и ВСЛ-2325 при приблизительно одинаковых величинах максимальной и номинальной емкости, значения номинального тока значительно отличаются в пользу элемента ВСЛ-2325, у которого  $I_H=1,42$  мА, против  $I_H=0,99$  мА для элемента ОВЛ-2325. Поэтому, элемент ВСЛ-2325 отдает 76% максимальной емкости при токовой нагрузке почти в 1,5 раза большей, чем для элемента ОВЛ-2325.

По полученным зависимостям можно прогнозировать емкости ХИТ на средние и низкие нагрузки по току. При этом используют следующие соотношения, получаемые путем преобразования формулы Пейкерта для двух значений  $Q$  и  $I$ :

$$n = \frac{\lg Q_2 - \lg Q_1}{\lg I_1 - \lg I_2}, \quad K = Q_1 I_1^n = Q_2 I_2^n, \quad I_H = (K / Q_M)^{1/n}.$$

На основе предложенной методике было разработано программное обеспечение для автоматизированного расчета разрядных характеристик ХИТ в программной среде JAVA.

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ПРОЦЕССА РАЗДЕЛЕНИЯ СУСПЕНЗИЙ ПРИ ВВЕДЕНИИ РАЗБАВИТЕЛЯ

Брановицкая С.В., Бондаренко С. Г.

Национальный технический университет Украины «КПИ», sgb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Разделение высоковязких суспензий вызывает определенные трудности в различных отраслях промышленного производства. Понижение вязкости таких суспензий осуществляется введением разбавителя в исходную суспензию. При введении разбавителя вязкость жидкой фазы суспензии уменьшается, что приводит к повышению скорости процесса разделения. С другой стороны введение разбавителя приводит к увеличению объема разделяемой суспензии, а, следовательно, и времени процесса разделения. Таким образом, указанные факторы действуют на продолжительность операции разделения в противоположном направлении. В каждом конкретном случае существует определенная степень разбавления исходной суспензии, при которой продолжительность операции разделения достигает минимума, а производительность установки, на которой проводят

разделение, становится наибольшей. Следовательно, при определении оптимальных условий ведения операции разделения необходим учет всех параметров процесса, вызывающих изменение его продолжительности.

Условия получения максимальной производительности установки разделения обычно отличаются от экономически целесообразного режима работы установки. Эффективность функционирования установки может быть оценена с помощью экономического критерия – затрат на проведение операции разделения. Также затраты на операцию разделения будут зависеть и от конкретного аппарата, в котором данный процесс проводят, и условий его работы (например, при разделении в центрифуге на время процесса будет влиять скорость ее вращения, при разделении на фильтре – перепад давлений на фильтровальной перегородке).

Правильный выбор количества разбавителя должен быть произведен на основе минимальных затрат на проведение операции разделения при обеспечении заданного технологического результата в процессе разделения (имеется в виду, что качественные показатели конечного продукта – осадка (твердой фазы суспензии) или фильтрата (жидкой фазы суспензии) не должны быть ухудшены после введения разбавителя). Для ряда суспензий введение разбавителя может ухудшить качество конечного продукта. Поэтому на количество разбавителя должны быть наложены соответствующие ограничения. На параметры работы аппаратов, в которых проводят операцию разделения, также накладываются ограничения, соответствующие условиям эксплуатации данных аппаратов.

Математическая постановка задачи оптимизации процесса разделения имеет вид:

$$R^* \rightarrow \min Z_p(\bar{U}), \quad (1)$$

$$\bar{U} \in \Omega,$$

где  $R^*$  – оптимальное значение критерия;  $\bar{U}$  – вектор управляющих параметров;  $\Omega$  – область допустимого изменения параметров;  $Z_p$  – затраты на проведение операции разделения.

Рассмотрим задачу оптимизации в такой постановке для фильтрования суспензии бисульфата графита  $C_{24}^+HSO_4^- \cdot 2H_2SO_4$ , полученной в результате обработки дисперсного графита смесью серной кислоты и окислителя. На фильтрование направляется вязкая сильнокислая суспензия (послереакционная смесь). В ней содержится до 16 – 20 % (объемных) дисперской фазы интеркалированного графита. Для снижения вязкости суспензии и повышения скорости процесса фильтрования исходная суспензия разбавляется водой. Однако это приводит к вымыванию части интеркаланта из структуры интеркалированного графита, в результате чего изменяется морфологическая структура осадка и его сопротивление фильтрованию. Разбавленная суспензия разделяется на фильтр, а полученный осадок промывается водой для удаления остатков серной кислоты из его структуры, и далее в качестве конечного продукта направляется на последующую обработку.

Исследования фильтрования бисульфата графита [1] показали, что для описания этого процесса можно использовать уравнение Рута–Кармана, связывающее мгновенную скорость фильтрования с перепадом давления и общим сопротивлением:

$$\frac{dV}{Sd\tau} = \frac{\Delta P}{\mu(r_0 x_0 \frac{V}{S} + R_{\phi n})}, \quad (2)$$

где  $V$  – объём фильтрата,  $m^3$ ;  $\tau$  – продолжительность фильтрования, с;  $S$  – поверхность фильтрования,  $m^2$ ;  $\Delta P$  – перепад давлений при фильтровании, Па;  $\mu$  – динамическая вязкость жидкой фазы суспензии, Па·с,  $R_{\phi n}$  – сопротивление фильтровальной перегородки,  $m^{-1}$ ;  $r_0$  – среднее удельное сопротивление осадка,  $m^{-2}$ ;  $x_0$  – отношение объема осадка к объему фильтрата.

Интегрирование уравнения (2) при  $\Delta P = \text{const}$  позволяет получить время фильтрования:

$$\tau = \frac{\mu r_0 x_0}{2\Delta P} q^2 + \frac{\mu R_{\phi n}}{\Delta P} q, \quad (3)$$

где  $q = V/S$  – объем фильтрата, получаемого с единицы фильтрующей поверхности,  $\text{m}^3/\text{m}^2$ .

Как видно из уравнения (3), время процесса  $\tau$  и объем получаемого фильтрата  $V$  связаны квадратичной зависимостью. Величины  $r_0$ ,  $R_{\phi n}$  и  $x_0$  рассматриваются как постоянные процесса фильтрования. Для каждой конкретной суспензии они определяются экспериментально. Проведенные экспериментальные исследования кинетики фильтрования бисульфата графита [1] при различных значениях перепада давлений при фильтровании  $\Delta P$  и степени разбавления исходной суспензии  $g_p$ , которая определяется по формуле:

$$g_p = V_p/V_c,$$

где  $V_p$  – объём разбавителя, что вводится в исходную суспензию,  $V_c$  – объём полученной суспензии (суммарный объём исходной суспензии и разбавителя) с последующей аппроксимацией экспериментальных зависимостей методом наименьших квадратов, позволили получить зависимости постоянных процесса фильтрования от указанных параметров вида:

$$r_0 = \varphi_1(g_p, \Delta P), \quad R_{\phi n} = \varphi_2(g_p, \Delta P), \quad x_0 = \varphi_3(g_p, \Delta P). \quad (4)$$

Полученные зависимости позволяют проводить расчет процесса фильтрования бисульфата графита в широком диапазоне изменения параметров.

Изменение гидродинамических характеристик процесса фильтрования при разбавлении связано, прежде всего, с изменением вязкости фильтрата и концентрации дисперсной фазы. Динамическая вязкость  $\mu$  жидкой фазы суспензии (фильтрата) при различных значениях степени разбавления исходной суспензии  $g_p$  определялась экспериментально и была аппроксимирована с помощью метода наименьших квадратов зависимостью вида:

$$\mu = \varphi_4(g_p). \quad (5)$$

Временные затраты на операцию разделения, которая проводится на фильтре, включают в себя следующие составляющие: временные затраты непосредственно на фильтрование  $\tau_\phi$ , временные затраты на промывку осадка  $\tau_{np}$  и временные затраты на вспомогательные операции  $\tau_{ec}$  (съем осадка и т.д.).

Рассмотрим величины, влияющие на затраты при проведении процесса фильтрования разбавленной суспензии:

$$Z_\phi = [(k_\phi \cdot \tau_\phi + k_{np} \cdot \tau_{np} + k_{ec} \cdot \tau_{ec}) + k_p \cdot V_p] \cdot n_u, \quad (6)$$

где  $\tau_\phi$ ,  $\tau_{np}$ ,  $\tau_{ec}$  – продолжительность фильтрования суспензии, промывки осадка и вспомогательных операций соответственно за один цикл работы фильтровальной установки;  $k_\phi$ ,  $k_{np}$ ,  $k_{ec}$  – удельные затраты на фильтрование, промывку и вспомогательные операции соответственно;  $V_p$  – объём разбавителя, который используется в одном цикле;  $k_p$  – затраты на  $1 \text{ m}^3$  разбавителя;  $n_u$  – число циклов работы фильтровальной установки за 1 год работы.

Однако для одного и того же количества исходной суспензии (независимо от того введен в суспензию разбавитель или нет) слой осадка, образовавшийся на фильтре, можно принять постоянным, а следовательно и объем промывных вод будет постоянен. Таким образом, временные затраты на промывку осадка  $\tau_{np}$  и временные затраты на вспомогательные операции  $\tau_{ec}$  также будут постоянны, что следует учесть при решении задачи оптимизации.

Рассмотрим величины, влияющие на время процесса фильтрования. Как следует из уравнения (3), время процесса фильтрования определяется: удельным объемом фильтрата –  $q$ ; перепадом давлений при фильтре –  $\Delta P$ ; постоянными процесса фильтрования –  $r_0, R_{\phi\pi}, x_0$ ; вязкостью фильтрата –  $\mu$ . При этом, постоянные процесса фильтрования и вязкость фильтрата, согласно зависимостям (4) и (5), можно выразить через значения  $\Delta P$  и  $g_p$ . Количество фильтрата, прошедшее через фильтр будет зависеть от объема исходной суспензии и степени ее разбавления  $g_p$ . Параметр  $g_p$  также позволяет учесть и объем разбавителя  $V_p$ . Отсюда видно, что параметры  $q$ ,  $\Delta P$  и  $g_p$  в значительной степени влияют на время проведения процесса фильтрования.

Таким образом, в качестве варьируемых переменных в общем случае следует принять:

$$\bar{U} = \{q, \Delta P, g_p\}.$$

С учетом того, что задачу оптимизации будем решать для конкретного фильтра (задана площадь фильтровальной перегородки  $S$ ) и заданного объема суспензии  $V_S$  (объем фильтрата  $V$  вычисляется как разность между объемом суспензии  $V_S$  и объемом осадка  $V_{oc}$  из уравнения материального баланса, а удельный объем фильтрата – как  $q = V/S$ ), то в качестве варьируемых переменных примем:  $\bar{U} = \{\Delta P, g_p\}$ . Диапазоны варьирования управляющих параметров выбирают на основании эксплуатационных и технологических требований к оборудованию и режимам проведения процесса фильтрования. Они формируют область  $\Omega$ . На данные параметры ограничения накладываются в виде следующих неравенств:

$$\Delta P_{\min} \leq \Delta P \leq \Delta P_{\max} \text{ и } g_{p\min} \leq g_p \leq g_{p\max}. \quad (7)$$

Указанный критерий оптимальности использован при выборе параметров процесса фильтрования на нутч-фильтре бисульфата графита в технологии получения терморасширенного графита.

Задача оптимизации (1)–(7) была решена комплексным методом Бокса, предназначенным для решения задач нелинейного программирования с ограничениями – неравенствами, которую в общем виде можно сформулировать так:

минимизировать  $f(\bar{x})$ , где  $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  при наличии явных ограничений:

$$l_j \leq x_j \leq u_j. \quad (8)$$

Для минимизации функции  $n$  переменных  $f(\bar{x})$  в  $n$ -мерном пространстве строят выпуклые многогранники, содержащие больше, чем  $n+1$  вершину. По Боксу число вершин должно составлять  $k=2n$  (применительно к нашей задаче:  $n=2$ , а  $k=4$ ).

Алгоритм комплексного поиска минимума состоит в следующем. В качестве первой вершины начального комплекса выбирается некоторая допустимая точка  $\bar{x}_1 = (x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1n})$ , то есть точка, удовлетворяющая ограничениями (8). Координаты остальных ( $k-1$ ) вершин комплекса определяются соотношением:

$$x_{ij} = l_j + r_j(u_j - l_j),$$

где  $x_{ij}$  –  $j$ -ая координата  $i$ -ой точки;  $i = 2, 3, \dots, k$ ;  $j = 1, 2, \dots, n$ ;  $r_j$  – псевдослучайные числа, равномерно распределенные в интервале (0; 1).

Полученные таким образом точки удовлетворяют ограничениям (8). Процедура повторяется до тех пор, пока не выполняются все ограничения задачи. Затем на каждой итерации заменяется вершина  $\bar{x}_h$ , в которой значения целевой функции  $f(\bar{x})$  имеет наибольшую величину. Для этого  $\bar{x}_h$  отражается относительно центра тяжести  $\bar{x}_c$  остальных вершин комплекса. Точка  $\bar{x}_r$ , заменяющая вершину  $\bar{x}_h$ , определяется по формуле:  $\bar{x}_r = \bar{x}_c + \alpha(\bar{x}_c - \bar{x}_h)$ , где  $\alpha$  – коэффициент отражения ( $\alpha > 1$ , по мнению Бокса  $\alpha=1,3$ ), а

$$\bar{x}_c = \frac{1}{k-1} \left( \sum_1^k \bar{x}_r - \bar{x}_h \right).$$

Если  $\bar{x}_r$  допустимая точка и  $f(\bar{x}_r) < f(\bar{x}_h)$  то точка  $\bar{x}_h$  заменяется на  $\bar{x}_r$ ; если же  $f(\bar{x}_r) > f(\bar{x}_h)$ , то есть «хуже», чем наибольшее значение, полученное ранее, то точка  $\bar{x}_r$  смещается к центру тяжести  $\bar{x}_c$  на половину расстояния между ними, а затем выполняется проверка на допустимость. Вычисления заканчиваются если значения целевой функции практически не изменяются, т. е:

$$|f(\bar{x}_i^{k+1}) - f(\bar{x}_i^k)| \leq \varepsilon,$$

где  $\varepsilon$  – заданная точность;  $i=1, 2, \dots, k$ .

Выбор комплексного метода Бокса для решения задачи оптимизации обусловлен его простотой, надежностью работы и удобством для программирования. Он хорошо зарекомендовал себя для решения различных задач нелинейного программирования. Метод на каждом шаге использует информацию только о значениях целевой функции и функции ограничений задачи.

Описанный алгоритм был положен в основу программного модуля, который реализован с помощью объектно-ориентированного языка программирования Visual Basic for Application. Разработанный программный модуль использован для поиска оптимальных значений степени разбавления исходной суспензии и перепада давлений при проведении процесса фильтрования. В результате поиска оптимальных значений параметров процесса фильтрования для условия минимума приведенных затрат на проведение процесса при заданных технологических ограничениях на параметры получены следующие оптимальные значения параметров: степени разбавления исходной суспензии, которая составляет  $g_{\text{опт}} = 0,7$  и оптимального перепада давлений на фильтре, равного  $\Delta P_{\text{опт}} = 60$  кПа. При этом перепад давлений (кПа) варьировался в следующих пределах –  $20 \leq \Delta P \leq 60$ , а степень разбавления исходной суспензии  $g_p$  –  $0,5 \leq g_p \leq 0,9$ .

1. Бондаренко, С. Г. Исследование процесса фильтрования интеркалированного графита [Текст] / С. Г. Бондаренко, Г. А. Статюха, И. Г. Черныш // Химическая технология.- 1990. - № 6.-С. 43-48.

### ОПЕРАТИВНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ОКТАНОВОГО ЧИСЛА БЕНЗИНІВ

Бондаренко С.Г., Степанов М.Б., Василькевич О.І., Степанов Д.М.

Національний технічний університет України «КПІ», sgb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Бензин є найбільш поширеним видом моторного палива і є вуглеводневим середовищем, яке добувається з нафти. Основними показниками якості бензинів є фракційний склад, тиск насиченої пари, густина і детонаційна стійкість. Фракційний склад характеризується температурами початку кипіння і відгонки при стандартній перегонці. Ці точки визначають умови запуску двигуна, форсування після прогрівання і повноту згорання палива. Головним показником якості бензину є детонаційна стійкість, яка визначає здібність палива до нормального горіння, що не супроводжується процесами вибухового характеру. Кількісним показником детонаційної стійкості є октанове число. Від детонаційної стійкості залежать ступінь стиснення паливно-повітряної суміші в циліндрах, потужність двигуна, що розвивається, і питома витрата палива. Вимоги, що пред'являються до бензинів, дуже різноманітні і викладені у відповідних ДСТУ і у довідковій літературі. В Україні крім шести великих НПЗ існує багато міні-заводів, які випускають продукцію значно гіршої якості, ніж

це передбачено загальнонаціональними стандартами. У сучасних автомобілях, оснащених електричною системою подачі і розпилювання бензину з комп'ютерним блоком управління подачі бензину, октанове число бензину є одним із основних параметрів для штатної роботи блоку управління. При невідповідності октанового числа стандартному двигун не може працювати в оптимальному режимі, порушується управління упорскуванням палива аж до аварійної втрати потужності. Крім того, згідно науковим дослідженням, автомобільний транспорт є одним з основних чинників погіршення екологічної ситуації в великих містах. Концентрація токсичних речовин в атмосфері безпосередньо залежить і від якості палива, на якому працює автотранспорт. Об'єм викиду забруднюючих речовин в атмосферу від автотранспорту в деяких містах досягає більше 50%. Ситуація різко загострюється ще і тим, що в значній кількості використовуються моторні палива, що не відповідають сучасним вимогам до їх якості. По різних оцінках фахівців об'єми продажів неякісного автомобільного палива на території України і СНД складають від 30 до 70% всього об'єму. Тому, в цілях охорони навколошнього середовища і для забезпечення роботи автомобільних двигунів в оптимальному режимі, необхідно здійснювати контроль якості моторного палива.

Таким чином, дуже актуальною є розробка нових методик оперативного визначення октанового числа бензину, що дозволять за малий проміжок часу отримати необхідну інформацію. Вони не претендують на заміну стандартних і занадто високу точність. Але, в той же час, вони дозволяють здійснити оперативний контроль октанового числа бензину за порівняно невеликий час і при мінімальних витратах.

Зазвичай визначають октанове число моторним і дослідницьким методами, і, відповідно, отримують моторне і дослідницьке октанові числа. Традиційний підхід визначення октанового числа бензину полягає у використанні моторних установок. Okрім механічних складнощів вони громіздкі, вимагають окреме спеціально обладнане приміщення. Для прогрівання моторної установки необхідні великі витрати енергії і часу, для вимірювання – значна кількість бензину і дорогих реактивів, для експлуатації потрібно мінімум два фахівця – механік і хімік. Спроби замінити моторні установки простішими, надійнішими і більше оперативними в роботі, почалися ще в 70-х роках минулого сторіччя і не припиняються до сих пір. До теперішнього часу накопичений матеріал по покращенню методів визначення окремих показників якості моторних палив .

Одним з таких методів є метод холодного окислення бензину, що базується на періодичному пропусканні через реактор бензино–повітряної суміші, нагрітої до температури 290-300 градусів. У нагрітому реакторі протікає реакція холоднополум'яногого окислення з виділенням тепла. Октанове число визначається по стрибку температури в реакторі в порівнянні з температурою палива на вході. Значення температури холоднополум'яногого окислення вуглеводневої сировини знаходиться в інтервалі від 320 до 450 °C, а швидкість протікання реакції складає від декількох секунд до декількох десятків секунд і обидва ці параметра залежать як від складу паливо–повітряної суміші так і від конструкції реактора.

Методи, і октанометри, що базуються на цьому, мають ряд недоліків. Тут октанове число визначається по максимальній температурі в реакторі (у місці знаходження холодного полум'я). Такий спосіб визначення параметрів і характеру реакції окислення не є достатньо інформативним. Повну інформацію про процес окислення в реакторі несе кількість тепла, що виділяється в ході реакції. Високі температури , при яких проводять процес окислення ускладнюють конструкцію пристрою. Також, при таких високих температурах можуть відбуватися процеси розкладання вуглеводнів бензину (термічний крекінг), що дає додаткову похибку при визначенні октанового числа. На точність результату впливає також і стабільність подачі повітря і бензину в часі.

З урахуванням вище сказаного, була розроблена модифікована методика визначення октанового числа бензину, що базується на стандартному методі холодного окислення. При розробці октанометра на базі запропонованої методики були сформульовані наступні

вимоги: октанометр повинен визначати октанове число складних вуглеводневих сумішей за короткий проміжок часу (15-40 с) при використанні для аналізу малої проби (1-2мл).

Робота націлена на створення апаратно-програмного комплексу для визначення октанового числа бензину. В основі методу, який взято за основу при створенні апаратно-програмного комплексу лежить вимірювання теплофізичних параметрів реакцій початкових стадій окислення вуглеводнів бензинів у певних термодинамічних умовах. До цих умов належать сталій реакційний об'єм, в якому при певному низькому температурному режимі відбувається окиснення проби бензину киснем повітря в присутності спеціального катализатора. В цих умовах відбувається низькотемпературне окиснення вуглеводнів бензину, яке тодіожне процесам, що протікають на початкових стадіях при спалюванні бензинів у двигунах внутрішнього згоряння. Як показали попередні дослідження, тепловий ефект цих реакцій та інші термодинамічні параметри мають тісний зв'язок з октановим числом.

Установка (рис. 1) складається з персонального комп'ютера (ПЕОМ) в який вводяться результати вимірювання теплофізичних параметрів реакцій початкових стадій окислення вуглеводнів бензинів у певних термодинамічних умовах. Результати вимірювань обробляються за розробленим алгоритмом, в основу якого покладені математичні моделі процесів окислення. Таким чином обчислюється інтегральна характеристика, яка добре корелює з октановим числом.

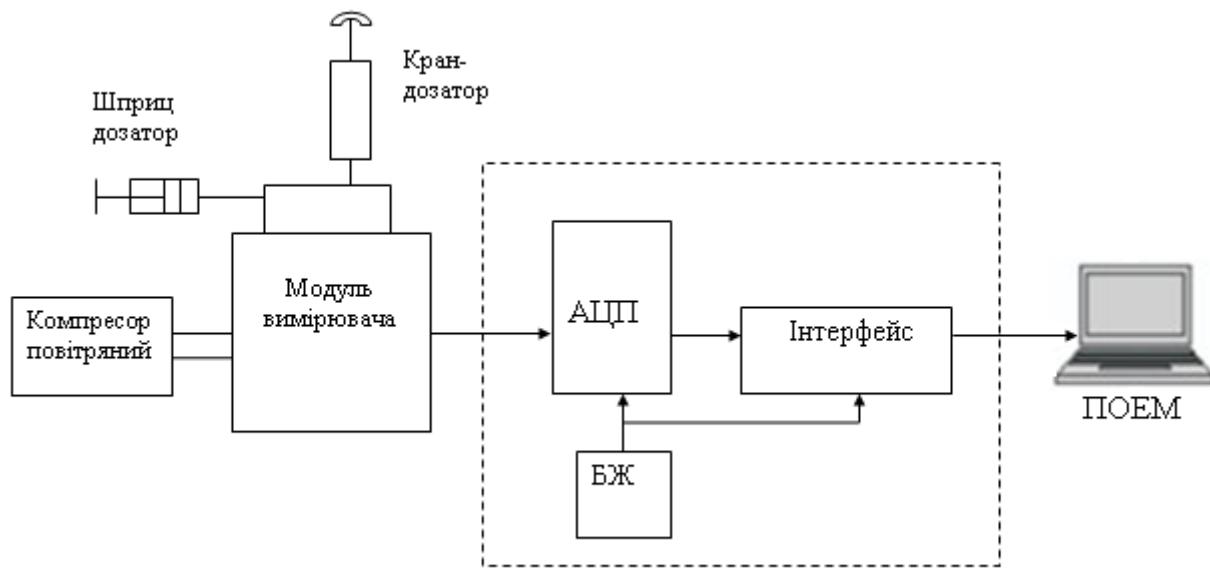


Рис. 1 – Структурна схема октанометра

Проба досліджуваного нафтопродукту може потрапляти на вимірювальний модуль двома шляхами: через кран-дозатор або через шприц-дозатор. Введення проби через шприц-дозатор дозволяє використовувати для проведення аналізу проби дуже незначного об'єму (до 5 мл). В модулі вимірювача, в якості якого пристосований блок аналізатору хроматографа здійснюється аналіз введеної проби. Дані аналізу подаються на аналогово-цифровий перетворювач (АЦП), а потім передаються через інтерфейс RS-232 на ПЕОМ (можливе застосування мікропроцесора), де і обчислюється інтегральна характеристика бензину на основі запропонованого алгоритму. Інформація про визначене октанове число відображається на екрані монітору. Вихідний сигнал при аналізі різних видів бензину виглядає, як показано на рис.2.

Попередні лабораторні дослідження, які проведені на розробленому устаткуванні, показали високий кореляційний зв'язок кінцевої інтегральної характеристики з октановим числом індивідуальних вуглеводнів, їх суміші та реальних товарних бензинів.

Апаратно-програмний комплекс дозволяти проводити визначення октанового числа складних вуглеводневих сумішей за короткий проміжок часу (до 60 с) при використанні

проби у кількості до 5  $\text{мм}^3$ . Також він простий у застосуванні. Похибка вимірювань не перевищує 1–2 %. В апаратно-програмному комплексі усунені недоліки традиційного методу холодно-полум'яного окислення. При проведенні вимірювань не потрібна спеціальна підготовка оператора.

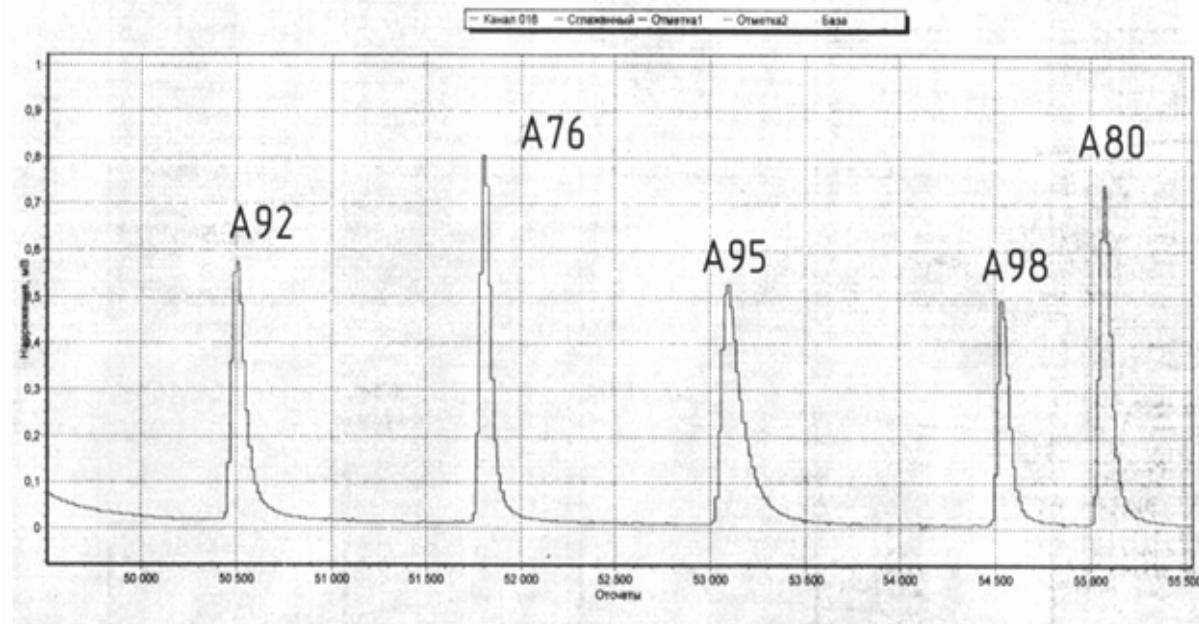


Рис. 2 – Вихідний сигнал приладу при аналізі різних видів бензину

Результати нашої роботи дають можливість успішного використання такого апаратно-програмного комплексу при експрес-аналізі якості бензинів . Простота апаратурного оформлення методу дослідження, мала трудомісткість і тривалість аналізу відкриває широкі перспективи його використання його на виробництві і при реалізації нафтопродуктів.

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ТЕПЛОПЕРЕНОСА ЧЕРЕЗ ПЛОСКУЮ СТЕНУ ЗДАНИЯ

Герасименко Ю.Я., Герасименко Е.Ю., Скакунова Т.П., Голованов А.А.

Донской государственный технический университет, dec\_neftgas@iem.donstu.ru

Рассматривается одномерный процесс теплопереноса через однородную плоскую стену здания (Рис. 1).

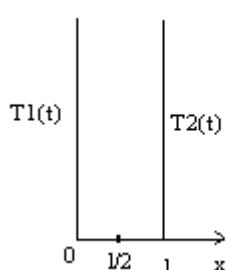


Рис. 1 – Геометрия задачи

Теплофизические параметры стены считаются заданными и постоянными. Начальная температура стены задана и равна  $T_0$ . Законы изменения граничных температур  $T_1(t)$  и  $T_2(t)$  известны. Требуется рассчитать пространственно-временное распределение температуры  $T(x; t)$  в стене при  $t \geq 0$ .

Математической моделью теплопереноса является дифференциальное уравнение теплопроводности

$$\rho c \frac{\partial T(x; t)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T(x; t)}{\partial x^2}, \quad (1)$$

где  $\rho$  – плотность материала стены,  $c$  – удельная теплоемкость,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности.

Начальное условие задается в виде

$$T(x;0) = T_0. \quad (2)$$

Краевые условия задачи определяются граничными температурами:

$$T(0;t) = T_1(t), \quad (3)$$

$$T(l;t) = T_2(t) \quad (4)$$

Уравнение (1) преобразуют к виду

$$\frac{\partial T(x;t)}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T(x;t)}{\partial x^2}, \quad (5)$$

где  $a^2 = \frac{\lambda}{\rho c}$  - коэффициент температуропроводности.

Начально-краевую задачу (2)-(5) удобно решать операторным методом Лапласа.

Вводят соответствие  $T(x;t) \xrightarrow{o} \overset{0}{T}(x;p)$ . Уравнению (5) соответствует операторное уравнение

$$\frac{\partial^2 \overset{0}{T}(x;p)}{\partial x^2} - \frac{p}{a^2} \overset{0}{T}(x;p) = -\frac{T_0}{a^2}, \quad (6)$$

где  $p$  - параметр преобразования Лапласа.

Уравнение (6) дополняется операторными краевыми условиями

$$\overset{0}{T}(0;p) = \overset{0}{T}_1(p), \quad (7)$$

$$\overset{0}{T}(l;p) = \overset{0}{T}_2(p), \quad (8)$$

где  $\overset{0}{T}_1(p) = T_1(p)$ ,  $\overset{0}{T}_2(p) = T_2(p)$ .

Общим решением уравнения (6) является функция

$$\overset{0}{T}(x;p) = A(p)sh\gamma x + B(p)ch\gamma x + \frac{T_0}{p} \quad (9)$$

где  $\gamma = \frac{\sqrt{p}}{a}$ ,  $A(p), B(p)$  - операторные постоянные, подлежащие определению из краевых условий (7) и (8).

Из (9) при  $x = 0$  имеем

$$\overset{0}{T}(0;p) = B(p) + \frac{T_0}{p}. \quad (10)$$

Сопоставляя (7) и (10) получаем

$$B(p) = \overset{0}{T}_1 - \frac{T_0}{p}. \quad (11)$$

Із (9) при  $x = l$  с учетом (11) следует

$$T(l; p) = A(p)sh\gamma l + \left( \overset{0}{T_1}(p) - \frac{\overset{0}{T_0}}{p} \right) ch\gamma l + \frac{\overset{0}{T_0}}{p},$$

откуда с учетом (8) находим

$$A(p) = \frac{\overset{0}{T_2}(p) - \frac{\overset{0}{T_0}}{p} - \left( \overset{0}{T_1}(p) - \frac{\overset{0}{T_0}}{p} \right) ch\gamma l}{sh\gamma l}.$$

Подстановка значений  $\gamma, A(p)$  и  $B(p)$  в (9) после преобразований приводит к такому результату

$$\overset{0}{T}(x; p) = \frac{\left( \overset{0}{T_2}(p) - \frac{\overset{0}{T_0}}{p} \right) sh \frac{\sqrt{p}}{a} x + \left( \overset{0}{T_1}(p) - \frac{\overset{0}{T_0}}{p} \right) sh \frac{\sqrt{p}}{a} (l - x)}{sh \frac{\sqrt{p}}{a} l} + \frac{\overset{0}{T_0}}{p}. \quad (12)$$

Полученный результат (12) позволяет получить изображение температуры в любой точке слоя  $[0; l]$ , например, в точке  $x = \frac{l}{2}$ :

$$\overset{0}{T}\left(\frac{l}{2}; p\right) = \frac{\overset{0}{T_2}(p) - \frac{2\overset{0}{T_0}}{p} + \overset{0}{T_1}(p)}{2ch \frac{\sqrt{p}}{a} \frac{l}{2}} + \frac{\overset{0}{T_0}}{p}. \quad (13)$$

Для поиска оригинала температуры  $T\left(\frac{l}{2}; t\right)$  найдем вначале оригинал, соответствующий изображению

$$\overset{0}{G}(p) = \frac{1}{ch \frac{\sqrt{p}}{a} \frac{l}{2}}. \quad (14)$$

С этой целью, прежде всего, определяем корни знаменателя (14):

$$ch \frac{\sqrt{p}}{a} \frac{l}{2} = 0 \text{ или } \cos(i \frac{\sqrt{p}}{a} \frac{l}{2}) = 0,$$

откуда

$$i \frac{\sqrt{p}}{a} \frac{l}{2} = (2k+1) \frac{\pi}{2}, \quad k \in Z,$$

что равносильно условию

$$p_k = -\frac{(2k+1)\pi^2 a^2}{l^2}, \quad k \in Z.$$

Оригинал  $g(t)$  соответствующий (14) имеет вид [1]:

$$g(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \operatorname{Res}_{p_k}^0 G(p) \cdot e^{p_k t}, \quad (15)$$

где

$$\operatorname{Res}_{p_k}^0 G(p) = \frac{1}{\frac{d}{dp} \left( ch \frac{\sqrt{p}}{a} \frac{l}{2} \right) \Big|_{p=p_k}} \quad (16)$$

вычет функции  $g(p)$  относительно полюса  $p_k$ .

Реализация (15) и (16) приводит к такому результату

$$g(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k 4\pi a^2 (2k+1)}{l^2} e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 a^2}{l^2} t}. \quad (17)$$

Для расчета  $T(\frac{l}{2}; t)$  будем считать, что краевые условия имеют вид:

$$T_1(t) = T_0 e^{-\alpha t}, \quad (18)$$

$$T_2(t) = T_0 e^{-\beta t}, \quad (19)$$

где  $\alpha > 0$ ,  $\beta > 0$ , причем  $\alpha < \beta$ .

Изображения, соответствующие (18) и (19), записываются таким образом:

$$T_1(p) = \frac{T_0}{p + \alpha}, \quad (20)$$

$$T_2(p) = \frac{T_0}{p + \beta}. \quad (21)$$

Подстановка (20) и (21) в (13) приводит к такому результату:

$$T\left(\frac{l}{2}; p\right) = \frac{T_0}{2(p + \alpha)ch \frac{\sqrt{p}}{a} \frac{l}{2}} - \frac{T_0}{pch \frac{\sqrt{p}}{a} \frac{l}{2}} + \frac{T_0}{2(p + \beta)ch \frac{\sqrt{p}}{a} \frac{l}{2}} + \frac{T_0}{p}. \quad (22)$$

Отдельным слагаемым в правой части (22) соответствуют следующие оригиналы [1]:

$$\begin{aligned} \frac{T_0}{2(p + \alpha)ch \frac{\sqrt{p}}{a} \frac{l}{2}} &\stackrel{o}{=} T_0 \frac{2\pi a^2}{l^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (2k+1)(e^{-\alpha t} - e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 a^2}{l^2} t})}{(2k+1)^2 \pi^2 a^2 - \alpha}, \\ -\frac{T_0}{pch \frac{\sqrt{p}}{a} \frac{l}{2}} &\stackrel{o}{=} -T_0 \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} (1 - e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 a^2}{l^2} t}), \end{aligned}$$

$$\frac{T_0}{2(p+\beta)ch\frac{\sqrt{p}}{a}\frac{l}{2}} \stackrel{o}{=} T_0 \frac{\frac{2\pi a^2}{l^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (2k+1)(e^{-\beta t} - e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 a^2}{l^2} t})}{(2k+1)^2 \pi^2 a^2 - \beta}}{l^2},$$

$$\frac{T_0}{p} \stackrel{o}{=} T_0.$$

Суммируя в соответствии с (22) полученные оригиналы, получаем

$$T\left(\frac{l}{2}; t\right) = T_0 \left(1 - \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)} \left(1 - e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 a^2}{l^2} t}\right)\right) + \\ + T_0 \frac{2\pi a^2}{l^2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (2k+1) \left(\frac{e^{-\alpha t} - e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 a^2}{l^2} t}}{\frac{(2k+1)^2 \pi^2 a^2}{l^2} - \alpha} + \frac{e^{-\beta t} - e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 a^2}{l^2} t}}{\frac{(2k+1)^2 \pi^2 a^2}{l^2} - \beta}\right). \quad (23)$$

Ряды в правой части (23) являются сходящимися, поэтому, задавшись погрешностью  $\Delta_T$ , можно всегда рассчитать температуру с необходимой точностью.

1. Привалов И.Н. Введение в теорию функций комплексного переменного. – М.: Наука, 1977. – 444 с.

## ЗАСТОСУВАННЯ АЛГОСТРУКТУРНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ ДЛЯ СТВОРЕННЯ ІМІТАЦІЙНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ АВТОМАТИЧНОГО КЕРУВАННЯ

Смирнов Г.М., \*Смирнова О.С.

Інститут хімічних технологій СНУ ім. В.Даля (м. Рубіжне), [asm777@ukr.net](mailto:asm777@ukr.net)

\*Технологічний інститут СНУ ім. В.Даля (м. Сєверодонецьк), [contact@iht.lg.ua](mailto:contact@iht.lg.ua)

Автоматичні системи керування в хімічній промисловості здатні оптимізувати технологічні процеси. А це, в свою чергу, дозволяє збільшити виробництво продукції, підвищити її якість, економити сировину та енергоносії, зробити виробництво безпечнішим для людей.

Важливим етапом створення автоматичних систем є побудова та вивчення їх імітаційних моделей з метою виявлення важливих закономірностей їхнього функціонування. Відомо, що під час реалізації проектів систем, виявляти помилки в логіці їх роботи бажано ще на початкових стадіях проектування, коли ціна помилки ще не є критичною. Сучасна комп'ютерна техніка надає широкі можливості по створенню імітаційних моделей систем.

Розглянемо як можна ефективно побудувати якісну комп'ютерну модель автоматичної системи? Відомо [1], що в теорії автоматичного регулювання для опису поведінки автоматичних систем використовують диференціальні рівняння, що встановлюють зв'язок між їх вхідними величинами (керувальний вплив, збурення), величинами на виході (регульована величина) та часом. Під час розв'язування задач аналізу та синтезу, автоматична система, для зручності, поділяється на окремі частини, такі, що математична залежність між їх вхідними та вихідними величинами та часом описується диференціальними рівняннями не вище ніж другого порядку. Такі, штучно виокремлені частини автоматичної системи звуться елементарними динамічними ланками. На відміну від елемента системи, динамічна ланка не обов'язково є конструктивно або схемно завершеною частиною системи. Одному елементові системи (наприклад, електричному двигунові) можуть відповідати декілька динамічних ланок.

Під час проектування та аналізу систем автоматики часто послуговуються їх структурними схемами (рис. 1). На таких схемах динамічні ланки подаються як прямокутники з вписаними в них позначками, щодо функціонального призначення кожної з них. Кожна динамічна ланка на структурній схемі має певні входи, виходи та параметри (коєфіцієнти рівняння ланки). Зв'язки між динамічними ланками (шляхи передавання інформації) позначаються на структурних схемах за допомогою ліній зі стрілками.

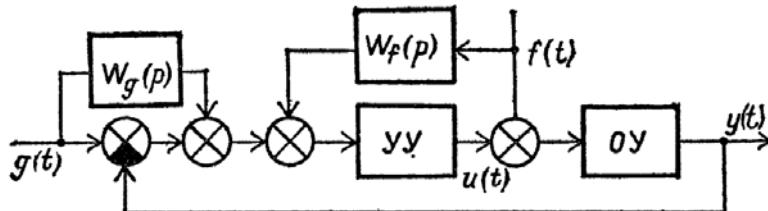


Рис. 1 – Приклад структурної схеми автоматичної системи

На практиці найчастіше використовуються такі типи динамічних ланок: пропорційна, інтегральна, диференціальна, аперіодична, коливальна та запізнювання (затримка). Всі вони добре відомі і вивчені.

Запропонована авторами алгоструктурна технологія проектування [2] полягає у створенні моделей автоматичних систем керування шляхом поєднання в одну систему низки гіпотетичних об'єктів, званих алгоелементами. Кожен алгоелемент має вхідні величини, вихідні величини, параметри налаштування та певний закон функціонування – алгоритм опрацювання вхідної інформації та отримання значень виходів.

Під час розробки алгоструктурної моделі проектувальник додає до проекту потрібні алгоелементи і встановлює структурні та інформаційні зв'язки між ними, а також, здійснює налаштування параметрів окремих елементів. Таким чином, відбувається структурний та параметричний синтез моделі проектованої технічної системи. При чому, створена алгоструктура своїм виглядом подібна до звичної структурної схеми, що полегшує проектування.

Для проектування засобів автоматики за допомогою алгоструктур потрібно мати алгокомпоненти, що представляють поведінку і властивості елементарних динамічних ланок. На практиці, особливо, за використання цифрової комп'ютерної техніки, диференціальні та інтегральні рівняння слід перетворити таким чином, що би диференціали можна було замінити на т. з. скінченні різниці. Тоді отримане рівняння називатиметься різницевим рівнянням, або рівнянням у скінчених різницях.

Для деяких, найбільш поширених, динамічних ланок диференціальні рівняння та різницеві рівняння матимуть вигляд (табл. 1):

*Таблиця 1 – Рівняння деяких динамічних ланок*

<i>Назва дин. ланки</i>	<i>Диференціальне рівняння</i>	<i>Різницеве рівняння</i>
Пропорційна	$y(t) = K * x(t)$	$Y_n = K * X_n$
Диференціальна	$y(t) = Td * \frac{dx}{dt}$	$y_n = \frac{Td}{T} * (x_n - x_{n-1})$
Інтегральна	$y(t) = \frac{1}{Ti} * \int_0^t x(t) dt$	$y_n = y_{n-1} + \frac{T}{Ti} * x_n$
Аперіодична	$Tf * \frac{dy(t)}{dt} + y(t) = K * x(t)$	$y_n = \frac{Tf}{Tf + T} * y_{n-1} + \frac{T}{Tf + T} * x_n$

Оскільки алгоструктура – поняття гіпотетичне, для практичної реалізації проектних процедур, що базуються на використанні алгоструктур, авторами була створена комп'ютерна програма AlgoCAD, що дозволяє:

- створювати та зберігати проект алгоструктури;
- здійснювати навігацію компонентами алгоструктури;
- визначати структуру проекту шляхом додавання алгокомпонентів;
- налаштовувати компоненти алгоструктури;
- будувати ієрархічні функціональні схеми;
- виконувати моделювання в часі поведінки алгоструктури, як імітація поведінки проектованої системи;
- виводити модельну інформацію під час моделювання у зручній для аналізу формі (у вигляді графіків, діаграм, тощо).
- здійснювати документування проектів та результатів моделювання;
- зберігати розроблені алгоструктури, або їх частини, що реалізують вдалі рішення, як бібліотечні компоненти, для використання в інших проектах;
- транслювати логіку побудованої і перевіреної алгоструктурної моделі в форму, придатну для практичного використання. (Наприклад, у текст програми на алгоритмічній мові).

На рис. 2 показано процес створення алгоструктурної моделі ПІД-регулятора. На рис. 3 показано процес вивчення динаміки моделі шляхом побудови перехідного процесу, як реакцію на стрибок вхідної величини, в алгоструктурній моделі автоматичної системи керування з ПІД-регулятором.

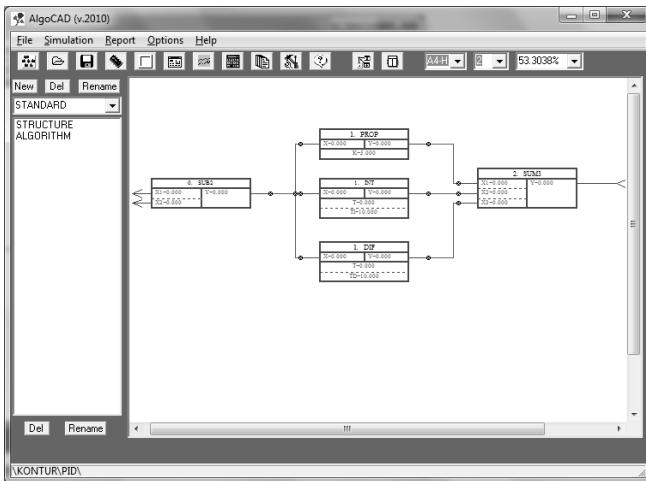


Рис. 2 – Процес розробки алгоструктурної моделі ПІД-регулятора в програмі AlgoCAD

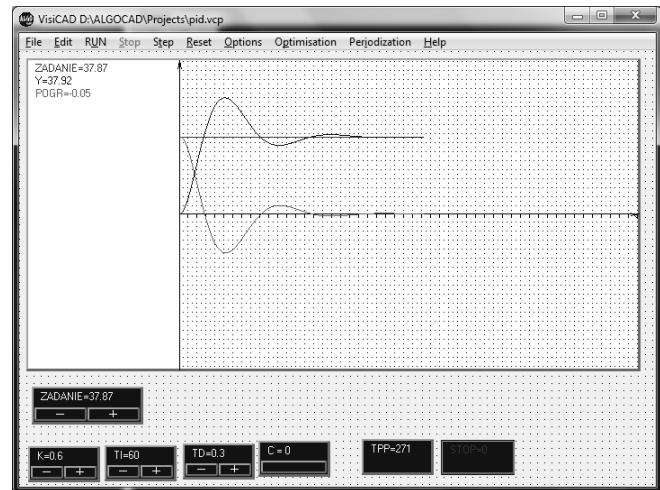


Рис. 3 – Моделювання перехідного процесу в алгоструктурній моделі автоматичної системи керування

Таким чином, алгоструктурна технологія проектування дозволяє за допомогою комп'ютерної техніки ефективно будувати цифрові імітаційні моделі засобів автоматики.

1. Зимодро А.Ф., Скибинский Г.Л. Основы автоматики. Учебное пособие для учащихся электрорадиотехнических и электроприборостроительных специальностей техникумов Л. Энергоатомиздат 1984г. 160 с. + илл.
2. Горбатюк А. Ф. Применение алгоструктурной технологии в компьютерных системах управления: Учеб. пособие / А. Ф. Горбатюк, А. В. Бешкарев. Восточноукр. гос. ун-т. – Луганск : Изд-во ВУГУ, 2000. - 200 с.
3. Смирнов Г. М. Адаптация алгоструктурного метода для проектирования цифровых устройств компьютерных систем управления. Вісник Сумського державного університету. Серія Технічні науки. № 10(94)' 2006. с. 81-90.

## LIFE CYCLE ASSESSMENT OF POLYETHYLENE COLOR VEST BAGS

Statyukha G.O., Ruban A.V., Dzhygyrey I.M.

National Technical University of Ukraine "Kyiv Polytechnic Institute", dzhgyrey@gmail.com

Life cycle assessment (LCA) allows measuring an environmental impact of product manufacture and disposal wastes, comparing several different product systems, choosing the best option during decisions making for improving the industrial cycle and decreasing the influence on nature and human health. Numerous methods and models of LCA have been developed and tested worldwide in order to measure the environmental impact of a product production, consumption and disposal. However, most of these methods have the drawbacks, difficulties in using, unreasonable simplifications and so on. But still LCA has become an important part of International organization of standardization (ISO) and EU Eco-Management and Audit Scheme certification. Companies want to get such certificate, because it helps to increase competitiveness on national and global markets. That is financially important, especially in the current economic slowdown.

ISO certification has wide range of families covered all aspects of production and management processes. None of the Ukrainian companies had ISO certification on subfamily 1404X «Environmental Management. Life Cycle Assessment» or the Occupational Health and Safety Assessment Series (OHSAS 18001) in 2010. It is a fact that existing software for LCA evaluation is quite expensive and only special big auditing and certification companies can afford to use them.

LCA is a technique for assessing the environmental aspects and potential impacts associated with a product, by compiling an inventory of relevant inputs and outputs of a product system; evaluating the potential environmental impacts associated with those inputs and outputs; interpreting the results of the inventory analysis and impact assessment phases in relation to the objectives of the study [2]. LCA consists of four phases: definition of goal and scope, inventory analysis, impact assessment and interpretation of results. Life cycle impact assessment (LCIA) is the third phase of life cycle assessment. The purpose of LCIA is to assess a product system's life cycle inventory analysis (LCI) results to better understand their environmental significance. The LCIA phase models selected environmental issues, called impact categories, and uses category indicators to condense and explain the LCI results. Category indicators are intended to reflect the aggregate emissions or resource use for each impact category. The general framework of the LCIA phase is composed of several mandatory elements that convert LCI results to indicator results:

- a) Selection of impact categories, category indicators and characterization models.
- b) Assignment of LCI results (classification) to the impact categories.
- c) Calculation of category indicator results (characterization).

In addition, there are optional elements for normalization, grouping or weighting of the indicator results and data quality analysis techniques:

- a) Calculating the magnitude of category indicator results relative to reference information (normalization).
- b) Grouping: sorting and possibly ranking of the impact categories.
- c) Weighting: converting and possibly aggregating indicator results across impact categories using numerical factors based on value-choices.

The total number of life cycle assessment stages may vary from only three mandatory to seven including four optional. The selection number of stages depends on the conditions, requirements and calculation purposes intended by the investigator or auditor.

The aim of this research is to test the LCA model [1], taking into account the peculiarities of the research's object. Included optional stages for life cycle impact assessment (LCIA) are aggregation, normalization and weighing. The scientific relevance of the results lies in the LCA model adaptation which takes into account the characteristics of the research object in order to obtain a single indicator based on used model. The problem-oriented model includes seventeen impact subcategories, which group into ten categories and then into four categories of protection. That allows to obtain a single score indicator of product effects on the environment and human health – Damage Index of a Product (DIP) [1]. The model estimates the life cycle of product system

includes the following subcategories: acidification of natural ecosystems, agricultural land occupation, urban land occupation, depletion of non-renewable energy resources, depletion of mineral resources, formation of photochemical oxidants, ozone depletion, climate change, human toxicity, respiratory effects, ionizing radiation, terrestrial eutrophication, freshwater eutrophication, marine eutrophication, freshwater ecotoxicity, marine ecotoxicity and terrestrial ecotoxicity. Subcategory indicator is calculated as follows

$$S_i = \sum (E_j \text{ or } R_j) \times C_{i,j} \quad (1)$$

where  $S_i$  is indicator's value for subcategory  $i$ ,  $E_j$  is emission of the substance  $j$ ;  $R_j$  is usage of resource  $j$ ;  $C_{i,j}$  is characterization factor of substance  $j$  or resource  $j$  for impact subcategory  $i$ . If it is necessary the number of subcategories could be expanded or decreased within an impact category. Impact categories are formed on the basis of one to three subcategories: ecosystems' acidification, climate change, land occupation (agricultural and urban), ozone depletion, photochemical smog, resource depletion (energy and mineral), impact of emissions on human health (toxicity, respiratory effects and ionizing radiation), eutrophication of terrestrial ecosystems, aquatic eutrophication (freshwater and marine) and ecotoxicity (freshwater, marine and terrestrial). Category indicator is obtained by using the normalization of values of subcategory indicators

$$I_h = \sum S_i / N_i \quad (2)$$

where  $I_h$  is indicator's value for impact category  $h$ ,  $N_i$  is normalization factor for subcategory  $i$ . Impact categories fuse protection categories of "Human health" (impact of emissions and smog and ozone depletion), "Ecosystems" (eutrophication, ecotoxicity, acidification and land occupation), "Climate" (climate change) and "Resources" (resource depletion)

$$P_k = \sum I_h / W_h \quad (3)$$

where  $P_k$  is indicator's value for protection category  $k$ ,  $W_h$  is weighing factor for impact category  $h$ . Product damage index is calculated as a sum of protection categories indicators

$$DIP = \sum P_k \quad (4)$$

and represents single score indicator of environmental aspects and potential impacts associated with estimated product.

*Case study.* Plastic bags produced by an enterprise «Polymer» was chosen as a case study for testing the model. This factory is constantly working on improvements of service quality and establishment of effective quality control system at all stages of production. The products are made from high quality raw materials that meet Ukrainian requirements of standards. The qualitative and performance characteristics of «Polymer» have awarded diplomas and certificates at various exhibitions and competitions in Ukraine and abroad.

Table 1 – LCI data collection on functional unit (1000 bags)

Resources Emissions	Units	Color bags with pattern	Color bags without pattern
<b>Inputs</b>			
HPPE <sup>1</sup> 15303–003	kg	8,572	9,488
LPPE <sup>2</sup> F 00952	kg	11,573	12,809
<b>Master batch</b>			
EP11006 (white)	kg	1,286	0,238
EP11723 (yellow)	kg	—	1,186
Diesel fuel	l	0,874	0,967

The functional unit for this study is 1000 vest bags of two different types with the same size: color (white) bags with pattern and color (yellow) bags without pattern. Vest bags are ones of the most popular among buyers and sellers because of low cost, large capacity, high endurance, high capacity due to lateral folds, and probability of drawing logo.

<sup>1</sup> High Pressure Polyethylene

<sup>2</sup> Low Pressure Polyethylene

*End of table 1*

Resources Emissions	Units	Color bags with pattern	Color bags without pattern
<i>Flexographic ink</i>			
Black RC	kg	5,358	—
Red 032 C	kg	8,144	—
Solvent	kg	0,643	—
<i>Emissions to air</i>			
Carbon monoxide	kg	0,0348	0,0386
NMVOC <sup>3</sup>	kg	0,0071	0,0079
Methane	kg	0,00022	0,00024
Nitrogen dioxide	kg	0,0274	0,0304

total transportation distance is 1,927 km. Inventory data are presented in Table 1. Water is not used in the production of polyethylene and printing patterns on bags. Similarly, it is assumed that there are no emissions to water or land. The scraps of plastic, which are a byproduct, are collected and melted again. Table 2 represents inventory data of categories of influence. Impact category indicators are obtained by using formulas (1) and (2), characterization and normalization factors are the same as in [1].

Table 2 – Results of normalization, grouping and weighting stages

Category name / Single score	Indicator value ( $\times 10^{-11}$ )	
	Color bags with pattern	Color bags without pattern
<i>Impact categories</i>		
Acidification	0,545	0,604
Climate change	0,063	0,069
Emissions (human health)	75,884	2,061
Photochemical oxidation	19,99	0,031
Aquatic eutropication	0,056	0,061
Ecotoxicity	2,929	2,622
<i>Protection categories</i>		
Health	826	18,1
Ecosystems	23,5	21,8
Climate	0,20	0,22
<i>Single score</i>		
DIP	850	40

bigger impact of bags with pattern comparing with ones without pattern.

This study has analyzed environmental impacts one of the most popular plastic bags – vest bags with and without printing. The results indicated that plastics bags without pattern have the least environmental impact especially on human health on account of emissions to air as compared to same plastic bags with pattern. The key note for green responsible end-consumer is using plastic bags with minimum or without printing when it's feasible and the key note for plastic packaging producer is implementation of improvements associated with air pollution throughout the printing process based on pollution prevention strategy that may reduce risk concerns to human health especially workers.

1. *Statyukha, G.O. An Aggregated Technique for Hazard Impact Assessment of Products on Environment [Text] / G.O. Statyukha, I.M. Dzhygyrey, B.M. Komarysta // Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. – 2009. – 1/6 (37) – P. 8–19. (in Ukrainian)*
2. ISO 14040: 2006. Environmental management – Life cycle assessment – Principles and framework [Text]. – Switzerland, 2006. – 12 p.

System boundaries include transportation of raw materials (polyethylene pellets) from the place of purchase to the company directly and production process with the last stage of the placement of finished goods in the warehouses. Raw materials are purchased at JSC «Kazanorgsyntez» (Kazan, Russia) and transported by trucks to enterprise «Polymer» (Vinnitsa, Ukraine);

LCIA (at protection categories' level) of color vest bags with and without pattern shows that the first type has a much bigger impact on human health especially for the reason of printing process. But for climate change protection category the second type of estimated vest bags has slightly less impact than first one, mainly because during production of yellow bags are used more granules of polyethylene. Single score indicator value – DIP – shows relatively twentyfold

<sup>3</sup> Non-Methane Volatile Organic Compounds

## МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ПСЕВДОЗРІДЖЕННЯ СУМІШЕЙ У ТОПЦІ З НТКШ

Сігал О.І., Кучин Г.П., Скрипко В.Я., Бикоріз Є.Й.,

Канигін О.В., \*Безносик Ю.О., \*Логвин В.О.

Інститут технічної теплофізики НАН України, engeco@kw.ua

\*Національний технічний університет України «КПІ», logvyn\_valerii@mail.ru

Одним із оптимальних шляхів заміщення природного газу є впровадження технології спалювання твердого низькоякісного та дрібнодисперсного палива в низькотемпературному киплячому шарі (НТКШ). Данна технологія дозволить виробляти теплову енергію за допомогою дрібнодисперсних відходів довгопламеневого вугілля, відсіву антрацитового штибу, що використовується на вугільних електростанціях, дрібних відходів пелет, та деревини, тощо.

Для фізичного моделювання процесів псевдозрідженого шару створено лабораторну установку, схема якої наводиться на рис. 1.

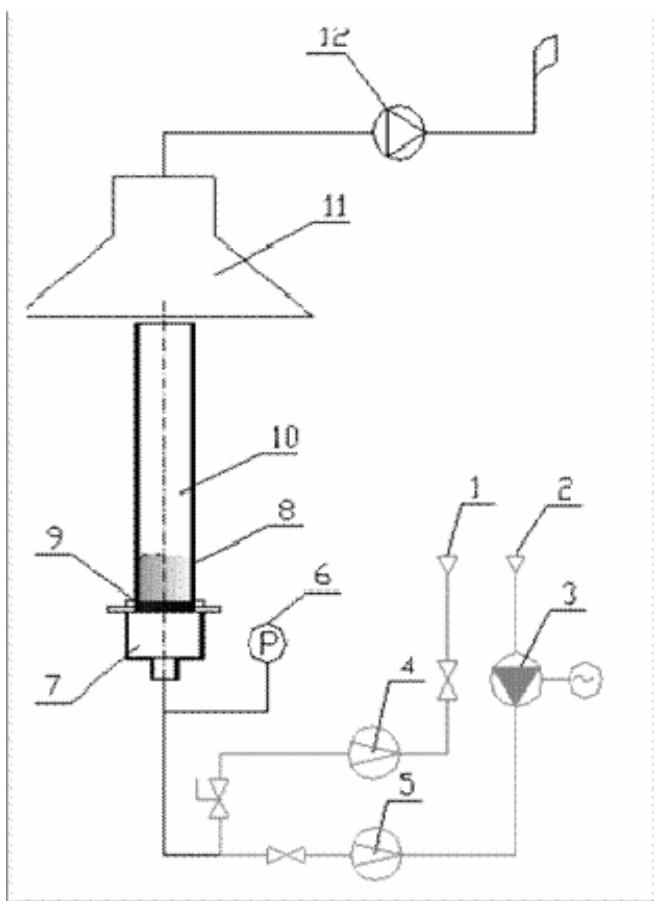


Рис. 1 – Схема лабораторної установки для дослідження характеристик зрідженого шару:

- 1 – підведення газу (пропан-бутан);
- 2 – дуттєве повітря на зрідження;
- 3 – дуттєвий вентилятор з регулюванням подачі;
- 4 – прилад для вимірювання витрати газу;
- 5 – прилад для вимірювання витрати дуттєвого повітря;
- 6 – прилад для вимірювання тиску повітря (газової суміші) на вході у повітророзподільну решітку;
- 7 – камера змішування;
- 8 – зріджений шар;
- 9 – повітророзподільна решітка;
- 10 – кварцована камера;
- 11 – вентиляційний зонт;
- 12 – витяжний вентилятор

Технологія роботи лабораторного стенду полягає в наступному: підведення дуттєвого повітря для зрідження (1) здійснюється за допомогою пилососа, регулювання витрати повітря (3) здійснюється з допомогою автотрансформатора. Для вимірювання витрати повітря (5) використовується ротаметр РМ-25Г. За допомогою дифманометра вимірюється тиск перед решіткою. Повітря після ротаметра потрапляє у камеру змішування (7) і проходить через повітророзподільну решітку (9), діаметр отворів якої складає 1 мм. На решітку через кварцову камеру (10), яка є камерою згорання, засипається матеріал фракцією більше 1 мм, що підлягає зрідженню. Для розігріву інертного матеріалу використовується газ (1). Витяжний вентилятор (12) та зонт (11) призначенні для виведення продуктів спалювання. Діаметр камери згорання складає  $59 \cdot 10^{-3}$  м. Характеристики лабораторної установки представлені у табл. 1.

Таблиця 1 – Характеристики лабораторної установки

<b>Витрати повітря</b>	<b>Швидкість повітря</b>	<b>Тиск перед решіткою</b>	<b>Комплекс</b>
$G, m^3/год$	$w_n, м/с$	$\Delta P_2 \text{мм в.ст.}$	$w_n^2 * \rho / 2$
9,2	0,94	3	0,5
10,4	1,06	3,5	0,7
11,8	1,2	4	0,9
13,6	1,38	5	1,2
15,4	1,57	7,5	1,5
17,2	1,75	8,5	1,9
18,8	1,91	10,5	2,2

На основі аналізу та експериментальних досліджень, було визначено, що оптимальним інертним матеріалом, для даної лабораторної установки є дрібнодисперсний шамот фракцією від 1 до 2 мм, так як він не має здатності до агломерації при температурах 800 – 1200 С та є найбільш енергоекспективним серед аналогів.

Дослідження швидкості псевдозрідження при горінні паливо-інертних сумішей у співвідношенні 1:10 показали, що зазначена кількість палива практично не впливає на швидкість псевдозрідження суміші при середньому однаковому діаметрі фракцій шамоту і довгополум'яного вугілля ( $d_{cp} = 1 \div 2$  мм) рис.2. При  $d_{cp}$  шамоту =  $(1,5 \div 2,5) \cdot d_{cp}$  вугілля відбувається сегрегація шару і процес псевдозрідження не відбувається.

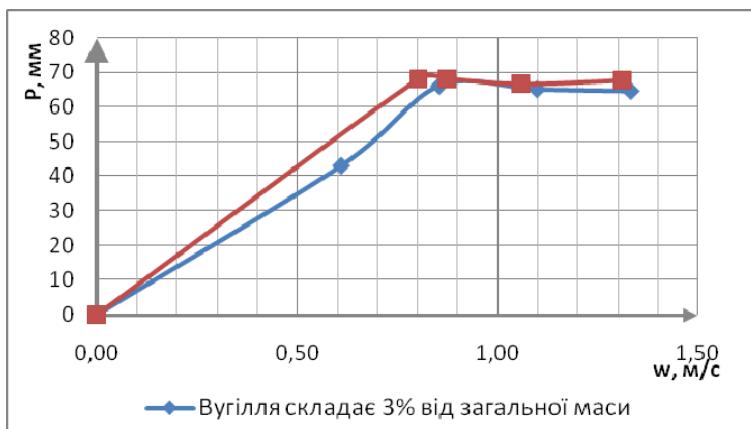


Рис. 2 – Залежність опору решітки і КШ від швидкості повітря для суміші катового шлаку та довгополум'яного вугілля фракції діаметром від 1 до 2 мм

Порівняння залежностей опору решітки і КШ від швидкості повітря суміші шамоту та вугілля марки Д (довгопламеневе) при температурах 288 та 1123 К показують, що при одинакових швидкостях псевдозрідження опір решітки та КШ при температурі 1123 К у середньому у 0,8 разів менший від опору решітки та КШ при температурах 288 К (рис. 3). Висота шару (Н) при температурах 1123 К більша в середньому в два рази ніж висота шару при температурах 288 К.

Для визначення температурних режимів горіння вугілля марки Д та АШ на лабораторній установці проводились експерименти за схемою: періодично засипався інертний матеріал у камеру горіння, який розігрівався до температури 1237 К за допомогою горіння пропан-бутанової суміші. Після цього припиняється подача газу та періодично подається порційно вугілля. Відбувається різке зниження температури (рис.1), після чого виділяються летючі речовини та вугілля починає горіти. Температура підвищується до 1173 К після чого знову знижується до 1073 К, при якій необхідно провести повторну засипку вугілля для недопущення загасання.

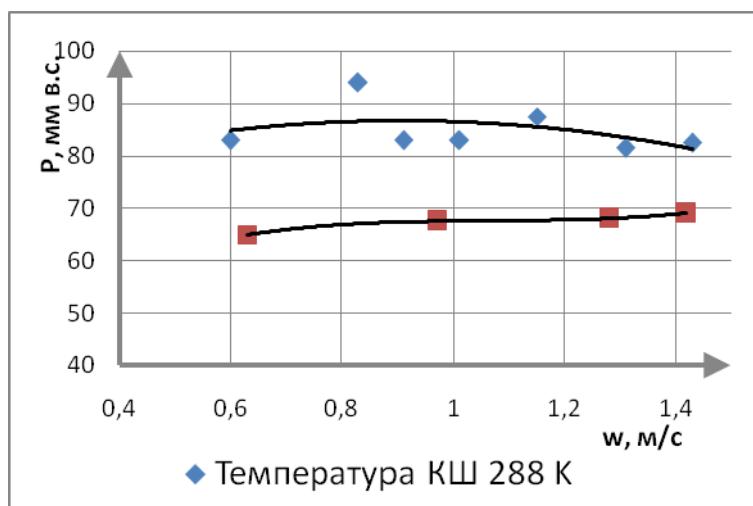


Рис. 3 – Залежність опору решітки та КШ від швидкості повітря при різних температурах для суміші шамоту (90%) та вугілля марки Д (10%)

На рис. 4 і 5 наведені температурні режими спалювання вугілля марки Д і АШ, які свідчать, що стабільне горіння вугілля марки Д має нижчу температуру горіння ніж марки АШ на рахунок більш в'язкої структури антрацітового штибу і набагато меншої кількості летючих горючих.

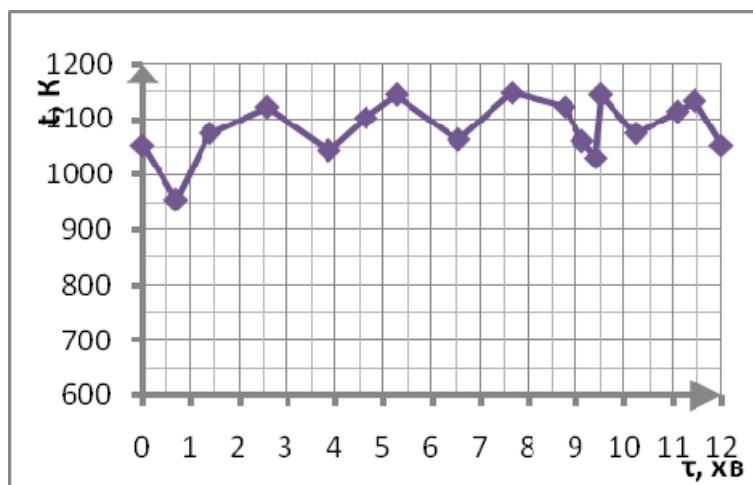


Рис. 4 – Температурний режим горіння вугілля марки Д

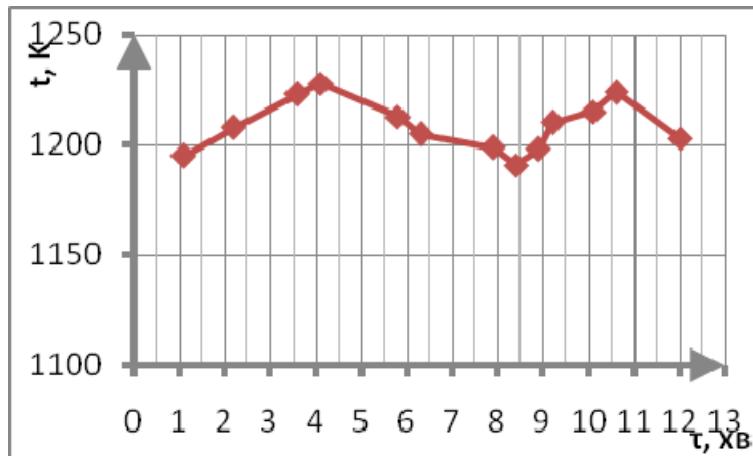


Рис. 5 – Температурний режим горіння вугілля марки АШ

У псевдозрідженному шарі процес горіння частинок вугілля істотно інтенсифікується в порівнянні з шаровим спалюванням, оскільки доступ кисню повітря до поверхні частинки тут значно більше, чим до шматків вугілля, що спалюється шаровим способом. Можливість спалити подрібнене паливо робить цей процес спалювання схожим на спалювання в пиловугільній топці з тією перевагою, що час перебування частинки вугілля в псевдозрідженному шарі можна регулювати. Це не вдається зробити в пиловугільних топках. Тривале перебування дрібних частинок вугілля в топці дає можливість понизити механічне недопалювання вуглецю в часточці палива. Особливо цінною є можливість глибокого вигорання вуглецю у високозольних частинках при порівняно невисоких температурах, рівних 1123—1223 К.

## ДЕКОМПОЗИЦІЯ ЗАДАЧ АВТОМАТИЗАЦІЇ КЕРУВАННЯ ПРОЦЕСІВ КОНВЕРСІЇ МЕТАНУ

Козаневич З. Я., Колпаков В. В., Ківа І. І.

Національний технічний університет України «КПІ», e-mail: kivaigor@gmail.com

Парова конверсія є найбільш енергоємнішою стадією у виробництві аміаку та водню. Процес реалізується в трубчастих печах. Динаміка змін цін на сировину та нестабільність попиту на головну продукцію обумовлює неритмічність роботи технічного обладнання та необхідність його функціонування у режимах зміни навантаження.

Узагальнений критерій оптимізації повинен вирішувати задачу знаходження оптимальної траєкторії переходу обладнання з режиму на режим при умові мінімізації собівартості готового продукту:

$$C = \int_{T_0}^{T_f} \Pi_{\text{узаг.}}(T) \sum_{i=1}^N G_i [\phi_i(t), \phi'_i(t)] dt, \quad (1)$$

з обмеженнями :  $\forall t \leq T_0 \quad \phi_i(t) = 0$ ,  $\forall t \leq T_f \quad \phi_i(t) = \phi_i$ , де  $C$  – інтегрована собівартість одиниці продукції за цикл виробництва від пуску до зупинки,  $T_0$  – початковий час,  $T_f$  – кінцевий час,  $N$  – кількість переходів,  $\Pi_{\text{узаг.}}(T)$  – узагальнені витрати,  $G_i$  – функція щільності розподілу споживаної енергії на проміжку фазових станів технологічного циклу,  $\phi_i$  – фазові траєкторії,  $\phi'_i$  – швидкість реалізації.

Наведений критерій призводить до складних обчислень та множини можливих оптимальних траєкторій при вирішенні задач автоматизації. Рациональніше провести декомпозицію критерію оптимізації на більш простіші задачі.

Зміна навантаження технологічного обладнання процесу конверсії призводить до змін властивостей каталізатора та частоти величин термонаруженнях станів реакційних труб. Це головні обставини, які можуть значною мірою впливати на кінцеву собівартість продукції.

Згідно [1, 2] існує алгоритм відновлення властивостей каталізатора зміною навантаження, як один з елементів подовження безупинного циклу виробництва. На рисунку 1 зображено блок-схему алгоритму регенерації каталізатора.

Таким чином зміна навантаження роботи печі може бути використано не тільки як виробнича необхідність, але й як окремий технологічний процес, що обумовлює відновлення каталізатору та подовження виробничого циклу. Ця обставина дає можливість сформувати перший елемент декомпозиційної задачі оптимізації виробничого циклу процесу конверсії. А саме мінімізацію витрат сировини на відновлення властивостей каталізатора.

У зв'язку з цим в системі управління циклом виробництва пропонується використовувати алгоритм корекції тимчасового ресурсу використання реакційних труб [2]. Накопичення термічний напружені в процесі змін навантаження пропонується розраховувати з використанням моделі динаміки температурного поля реакційної зони [3].

# Комп'ютерне підтримування виробничих процесів

Радіальні і окружні температурні навантаження  $\sigma_r^T$ ,  $\sigma_\theta^T$  визначаються по формулам:

$$\sigma_r^T = \frac{\alpha E(T_1 - T_2)}{2(1-v) \ln \frac{b}{a}} \left[ \frac{a^2}{b^2 - a^2} \left( \frac{b^2}{r^2} - 1 \right) \ln \frac{b}{a} - \ln \frac{b}{r} \right], \quad (2)$$

$$\sigma_\theta^T = \frac{\alpha E(T_1 - T_2)}{2(1-v) \ln \frac{b}{a}} \left[ 1 - \ln \frac{b}{r} - \frac{a^2}{b^2 - a^2} \left( \frac{b^2}{r^2} - 1 \right) \ln \frac{b}{a} \right], \quad (3)$$

де  $\alpha$ ,  $E$ ,  $v$  – коефіцієнт лінійного розширення, модуль пружності і коефіцієнт Пуассона матеріалу труби,  $a$ ,  $b$  – внутрішній і зовнішній радіус труби,  $r$  – поточний радіус,  $T_1$ ,  $T_2$  – температура на внутрішній і зовнішній стінках труби.

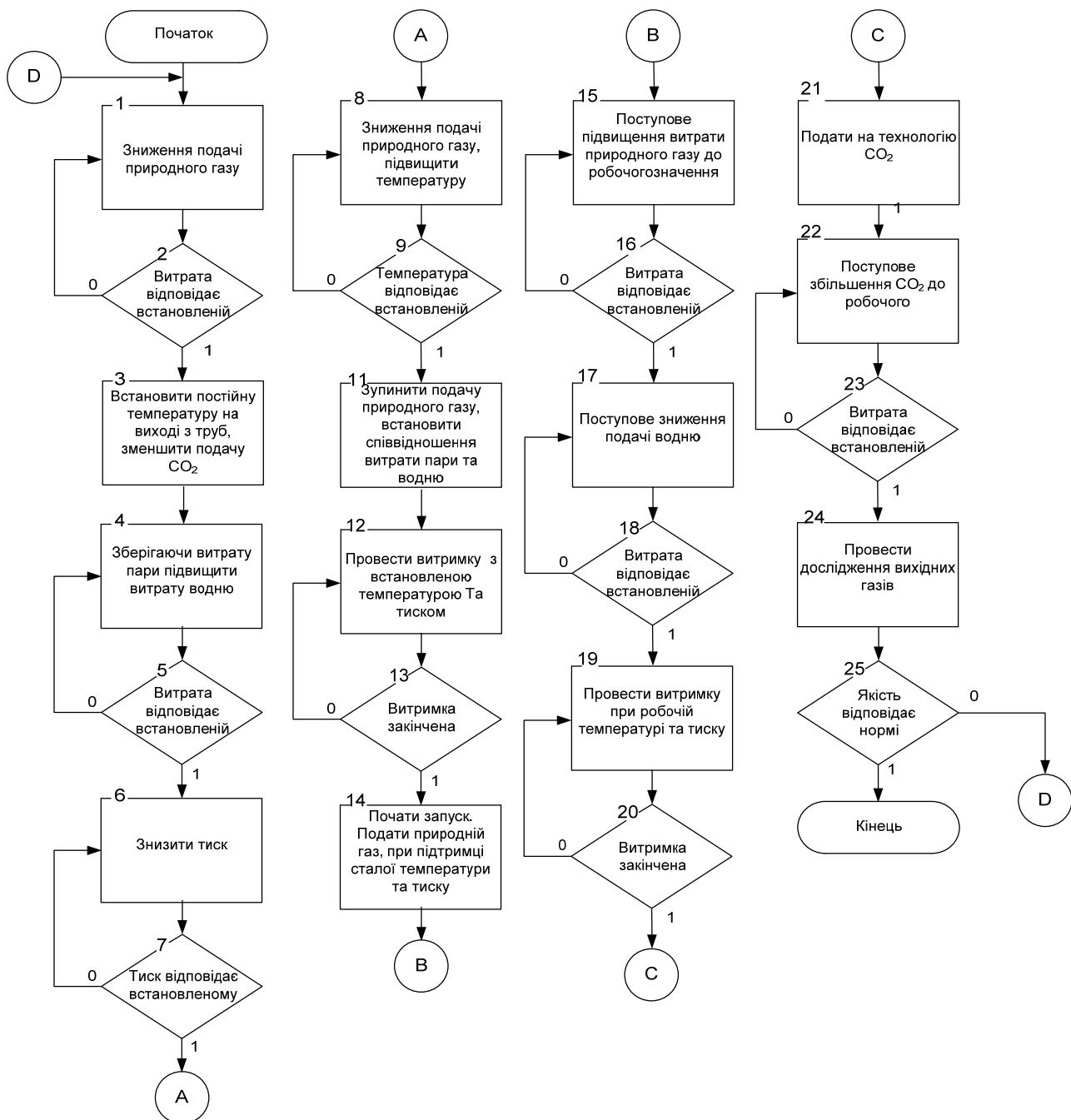


Рис. 1 – Блок-схема алгоритму регенерації каталізатора

Радіальні і окружні температурні навантаження  $\sigma_r^p$ ,  $\sigma_\theta^p$  від дії перепаду тиску визначаються як:

$$\sigma_r^p = \frac{p_1 a_T^2}{b^2 - a_T^2} \left( 1 - \frac{b^2}{r^2} \right), \quad (4)$$

$$\sigma_\theta^p = \frac{p_1 a_T^2}{b^2 - a_T^2} \left( 1 + \frac{b^2}{r^2} \right), \quad (5)$$

де  $p_1$  – тиск на внутрішній поверхні труби, тиск на зовнішній поверхні труби дорівнює нулю,  $a_t$  – границя розповсюдження радіальних тріщин:  $a \leq r \leq a_t$  – область тріщин,  $a_t \leq r \leq b$  – тріщини відсутні.

Сумарна окружна напруга  $\sigma_\theta$  визначається:

$$\sigma_\theta = \sigma_\theta^p + \sigma_\theta^T, \quad (6)$$

Отримання повних характеристик тривалої міцності матеріалу у всьому діапазоні робочих температур і тисків пов'язано з великим обсягом експериментальних досліджень, тому в умовах зміни навантаження пропонується використовувати апроксимацію температурно-часових залежностей тривалої міцності:

$$\lg \sigma_t^T = \lg \sigma_{100}^T - A^T (\lg t - \lg t_{100}), \quad (7)$$

де  $\sigma_\theta^T$  – межа тривалої міцності при температурі  $T$  за  $t$  годин,  $\sigma_{100}^T$  – межа тривалої міцності при температурі  $T$  за 100 годин,  $A^T$  – коефіцієнт, залежний від температури,  $t$  – час в годинах, при якому відбувається руйнування випробованого зразка,  $t_{100} = 100$  годин. Тут використовуються не результати короткочасних випробувань на пружність за температури  $T$ , а межа тривалої міцності при температурі  $T$  за 100 годин. Коефіцієнт  $A^T$  визначається за результатами експериментів в умовах експлуатації.

Ресурс роботи данного елемента реакційної труби при експлуатації установки за регламентом:

$$\lg t = \frac{\lg t_{100} - 1}{A^T (\lg \sigma_t^T - \lg \sigma_{100}^T)}, \quad (8)$$

Мінімальне значення  $\lg t(r)$  дає час експлуатації до появи першої тріщини. Пропонується наступний порядок розрахунку ресурсу роботи реакційних труб. Визначаються напруги на внутрішній поверхні труби при сталому режимі експлуатації. За формулою (2) знаходиться час до руйнування (появи тріщин на внутрішній поверхні). Так як температура по радіусу труби міняється, то знаходиться час до руйнування елементів труби по радіусу. Таким чином отримаємо залежність  $\ln t(r)$ , по якому можлива зробити висновок про ресурс реакційних труб. Аналогічно може бути визначений ресурс при заданому перегріві зовнішньої поверхні труби. При визначені навантаження від перепаду тисків тут враховується межа поширення тріщин, що дозволяє точніше визначати навантаження при перегріві металу.

За другою декомпозицією зменшення часу напрацювання реакційних труб повинно бути зведена до мінімуму. Отже ця складова неповинна впливати на собівартість розрахованого циклу виробництва.

Задачу оптимізації цієї складової можна звести до мінімізації двох вище згадуваних факторів. Критерій оптимізації який може бути сформований з наведених складових у собівартості:

$$C = \int_0^t (A(t, \text{grad}(T(t)), N) F_{\text{пргаз}} + F_{\text{труб}}(t)) dt \rightarrow \min, \quad (9)$$

де  $C$  – складова собівартості,  $A$  – активність каталізатора,  $t$  – час,  $T(t)$  – зміна температури у часі,  $N$  – кількість змін навантаження,  $F_{\text{пргаз}}$  – затрати на природній газ,  $F_{\text{труб}}(t)$  – сума витрати на експлуатацію труб.

На рис. 2 наведено приклади складових собівартості та можливий окіл екстремуму.

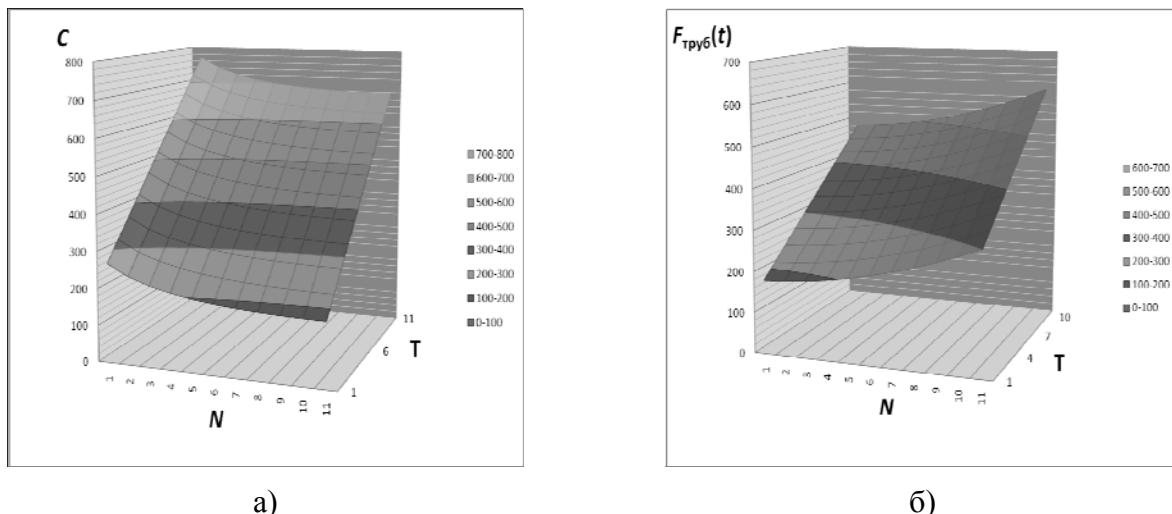


Рис. 2 – Витрати при різній кількості переходів на нові режими у часі (а)  
і затрати на експлуатацію труб у часі (б)

1. Колпаков В. В. Конвертори метану. Дослідження можливостей зміни навантаження. . – // Хімічна промисловість України. – К., 2009. – №4. – С. 22–26
2. Способ восстановления каталитической активности катализаторов риформинга в рабочем цикле : пат. 02095137 Рос. Федерация : МПК<sup>7</sup> 6 B 01 J 23/96 / Мясищев Ю. Г., Гаранин Д. И., Федоров А. П., Демин В. М., Бауман А. Э. ; заявитель и патентообладатель Филиал Научно-производственного обледенения «Леннефтфим» по разработке и внедрению нефтехимических процессов. – № 5018851/04 ; заявл. 18.12.91 ; опубл. 10.11.1997, Бюл. № 23. – 5 с.
3. Горчаков Л. Н. К определению остаточного ресурса реакционных труб нефтехимической аппаратуры / Горчаков Л. Н., Хакимов А. Г. // «Разрушение и мониторинг свойств металлов» и «Контроль технологий, изделий и окружающей среды физическими методами» : науч.-практ. конф., Екатеринбург, Институты машиноведения и физики металлов УрО РАН 24 – 26 апр. 2007 г.: тезисы док. – Екатеринбург, 2007. – С. 120.

**СЕКЦІЯ 5**  
**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ АВАРИЙНИХ СИТУАЦІЙ**  
**І СТВОРЕННЯ КОМП'ЮТЕРНИХ ТРЕНАЖЕРІВ**  
**ДЛЯ ХІМІЧНОЇ ПРОМИСЛОВОСТІ**

**АЛГОРИТМ ПРИМЕНЕНИЯ МИКРОПРОЦЕССОРНОГО ПРИБОРА ДЛЯ  
СИСТЕМЫ АВАРИЙНОЙ ЗАЩИТЫ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ БЛОКИРОВОК**

Ковалевский В. М.

Национальный технический университет Украины «КПИ», kvmdom-46@ukr.net

В технологических процессах на химических производствах применяются шнековые транспортеры, ковшевые цепные элеваторы, центробежные насосы и все эти виды технологического оборудования работают при помощи электродвигателя. Электродвигатель при эксплуатации обязательно имеет механическую аварийную защиту в виде вставки на вал металлического вкладыша “шпонка” и защитные автоматические выключатели в цепи питания, если потребляемый рабочий ток станет больше допустимой величины. Остановка крыльчатки насоса, шнека или цепного ковша создает аварийную ситуацию и срабатывание механической защиты и автоматическое выключение питания электродвигателя не являются достаточными для предотвращения производственной аварии потому, что еще необходима система защиты, обеспечивающая для процесса определенные технологические блокировки.

На стенде компьютерно-микропроцессорной обучающей системы (КМОС) студенты моделируют работу системы аварийной защиты и технологических блокировок на основе микропроцессорного прибора ИТМ-11. Микропроцессорный прибор-индикатор ИТМ-11 марки “Микрол” имеет встроенный блок технологической сигнализации, который при соответствующем конфигурировании и настраивании формирует дискретный сигнал при отклонении контролируемого параметра за установленные пределы [1]. На рис. 1 показана схема моделируемой в КМОС системы аварийной защиты и технологических блокировок для экзотермического процесса смешивания двух потоков веществ в химическом реакторе с охлаждением реакционной массы поверхностным теплообменником. Схема рис. 1 в КМОС используется в виде программного демонстрационного ролика, работа которого зависит по интерфейсу обмена данных RS-485 от настроек, выполняемых студентами на реальном микропроцессорном приборе ИТМ-11, установленном на стенде. Демонстрационный ролик системы аварийной защиты и технологических блокировок для химического реактора реализован в виде программы C++, которая обеспечивает студенту возможность мышкой интерактивно имитировать нарушение в работе центробежного насоса потока Б на входе в реактор. В демонстрационном ролике нормальная работа центробежного насоса потока Б программой C++ показывается в виде прохождения сигнала серого цвета от прибора (позиция 6-1) до прибора ИТМ-11 (позиция 6-2). При имитации студентом в программе C++ аварии (уменьшение рабочего давления на выходе центробежного насоса потока Б) сигнал от прибора 6-1 до прибора 6-2 начинает показываться красным цветом и одновременно далее появляется передача цветного сигнала от прибора 6-2 до электромагнитных реле KM5 и KM6, а также красным цветом обозначаются элементы сигнализации HL9, HL10 и сформированные сигналы аварийной защиты ЗАЗ и технологической блокировки ЗТБ. По линии сигналов “аварийная защита” до магнитного пускателя (позиция МПЗ) цветом показывается действие аварийного защитного сигнала ЗАЗ на цепь прохождения тока к обмотке электромагнита пускателя. Одновременно по линии сигналов “технологические блокировки” показывается цветом в схеме демонстрационного ролика прохождение и действие сигналов ЗТБ по выполнению технологических блокировок. При прохождении цветных сигналов блокировок ЗТБ до регулятора соотношения расходов (позиция 4-3),

## Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

регулятора расхода (позиция 3-4) и регулятора температуры (позиция 2-2) миганием стрелки демонстрационный ролик показывает технологическую блокировку выходных сигналов от этих регуляторов на “нормально закрытые” регулирующие клапаны на трубопроводе потока Б , потока А и трубопроводе воды на входе в поверхностный теплообменник. Действие сигнала блокировки 3Тб на магнитные пускатели МП1 и МП2 в демонстрационном ролике показывается путем снятия зеленого цвета у сигнальных элементов HL2, HL6 и выделением красным цветом сигнальных элементов HL1, HL5. Работа электродвигателя M4 не зависит от блокировок 1Тб, 2Тб и 3Тб, что показывается зеленым цветом сигнального элемента HL14.

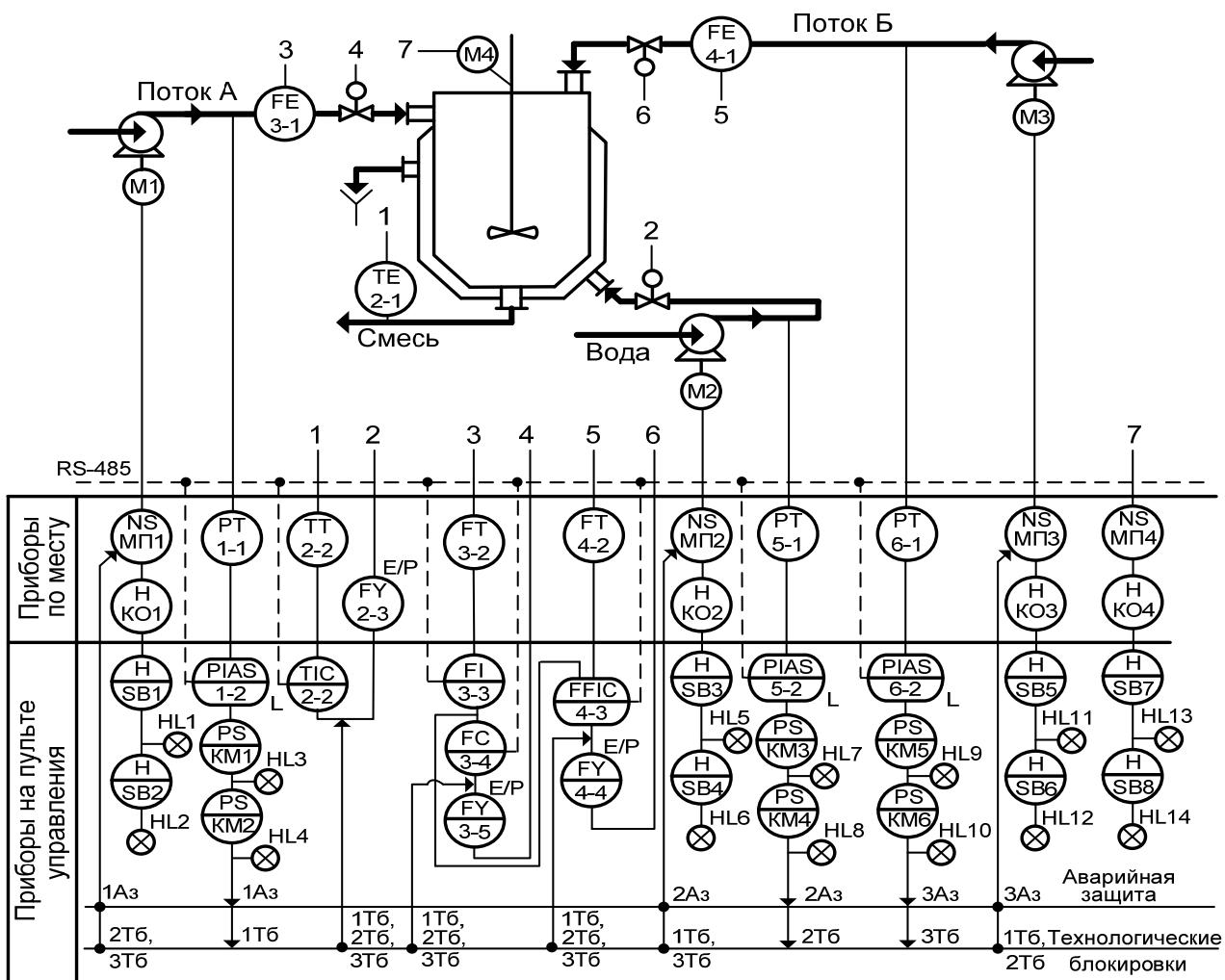


Рис. 1 – Схема аварийной защиты и технологических блокировок процесса в реакторе

В демонстрационном ролике системы аварийной защиты и технологических блокировок процесса в реакторе программа C++ интерактивно показывает и срабатывание элементов схемы при запуске в работу электродвигателей M1, M2 и M3 после устранения аварийной ситуации. Для демонстрации запуска в работу электродвигателей указатель мышки устанавливается одним щелчком в схеме на обозначения кнопок SB2, SB4 и SB6, затем удерживается 10 секунд мышка на кнопке SB6 до снятия программой C++ красного цвета с сигнальных элементов HL9, HL10, HL3, HL4, HL7 и HL8. При выполнении на схеме рис. 1 правильных действий по запуску в работу M1, M2 и M3 в демонстрационном ролике происходит снятие красного цвета с сигналов и сигнальных элементов, а зеленым цветом обозначаются HL2, HL6 и HL12, что показывает включение питания на электродвигатели и рабочее состояние насосов, также при этом одновременно восстанавливается серым цветом прохождение сигналов от прибора 1-1 до прибора 1-2, от 5-1 до 5-2 и от 6-1 до 6-2.

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

Применение в учебном процессе демонстрационного ролика, связанного по RS-485 с настройками реального микропроцессорного прибора, позволяет студентам лучше понять работу системы аварийной защиты и технологических блокировок, а также правильно выполнять проектирование принципиальных и монтажно-коммутационных схем.

1. Ковалевский, В. М. Алгоритмическое обеспечение учебных задач компьютерно-микропроцессорной обучающей системы [Текст] / А. И. Жученко, Міжнародна науково-технічна конференція «Сучасні методи, інформаційне, програмне та технічне забезпечення систем управління організаційно-технологічними комплексами». 26 – 27 листопада 2009. – Київ НУХТ, 2009. – с. 19 – 20.

## МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ВИЗНАЧЕННЯ ЕКОЛОГІЧНОГО РИЗИКУ ПРОЕКТОВАНОГО ПРОМИСЛОВОГО ОБ'ЄКТУ

Статюха Г.О., Бойко Т.В., Абрамова А.О.

Національний технічний університет України «КПІ», tvbojko@gmail.com

В даній роботі досліджені питання оцінювання ризиків проектованих промислових об'єктів. Можна запропонувати таку структуру ризиків проектованого промислового об'єкту, що включає екологічний ризик, ризик щодо здоров'я людини та соціальний ризик (рис.1), такі ризики є взаємозалежними та розподіленими в часі.

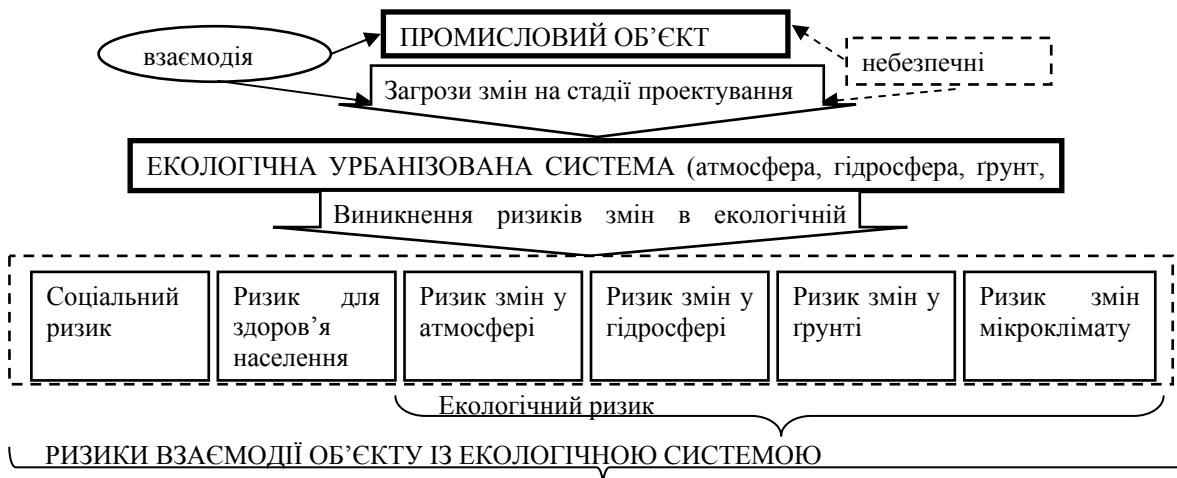


Рис. 1 – Схема взаємодії проектованого промислового об'єкту  
з урбанізованою екологічною системою

Згідно із концепцією оцінки впливів на навколошнє середовище (ОВНС), що є основоположною при проектуванні промислових об'єктів та специфікою прояву небезпек на стадії проектування промислового об'єкту, розроблено математичну модель оцінювання ризиків проектованого промислового об'єкту (1):

$$\begin{cases} R_S = CRa \cdot V_u \cdot \frac{N}{T} (1 - N_p) \\ R_A = CRa = \sum_{k=1}^n ICR_k = \sum_{i=1}^k C_i \cdot UR_i \quad \text{або} \quad R_A = \sum_{k=1}^n HQ_k = \sum_{i=1}^k C_i / RfC_i \\ R_E = \sum_{i=1}^m p_i \cdot Z_i \end{cases} \quad (1)$$

## Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

де  $R_s$  – соціальний ризик планованої діяльності, визначається як ризик групи людей, на яку може вплинути впровадження об'єкта з урахуванням природно-техногенної системи, тис.чол./рік.;  $CR_a$  – канцерогенний ризик комбінованої дії декількох канцерогенних речовин, забруднюючих атмосферу (у випадку відсутності канцерогенних впливів (при розрахунку соціального ризику) приймається  $CR_a=1 \cdot 10^{-6}$  безрозмірний);  $V_u$  – уразливість території від прояву забруднення атмосферного повітря, відношення площі віднесеної під об'єкт господарської діяльності до площини об'єкта з санітарно-захисною зоною, частки одиниці;  $N$  – чисельність населення населеного пункту, тис.чол.;  $T$  – середня тривалість життя, рік;  $N_p$  – коефіцієнт, що визначається як відношення кількості додаткових робочих місць до загальної кількості робочих місць;  $R_A$  – ризик для здоров'я населення від забруднення атмосферного повітря;  $ICR_i$  – ризик розвитку індивідуальних канцерогенних ефектів;  $C_i$  – розрахункова середньорічна концентрація  $i$ -ої речовини,  $\text{мг}/\text{м}^3$ ;  $UR_i$  – одиничний канцерогенний ризик  $i$ -ої речовини,  $\text{м}^3/\text{мг}$ ;  $HQ_i$  – коефіцієнти небезпеки для окремих речовин;  $RfC_i$  – референтна (безпечна) концентрація  $i$ -ої речовини,  $\text{мг}/\text{м}^3$ ;  $R_E$  – екологічний ризик промислового об'єкту, тобто ризик змін у навколошньому природному середовищі (НПС);  $p_i$  – ймовірність виникнення негативних наслідків (незворотних змін в урбанізованій екологічній системі) від впровадження промислового об'єкту;  $Z_i$  – збитки від забруднення  $i$ -ої складової НПС (атмосфера ( $i=1$ ), гідросфера ( $i=2$ ), ґрунт ( $i=3$ )), що заподіяні внаслідок впровадження промислового об'єкту, грн.

Для знаходження ймовірнісної складової екологічного ризику проведено модифікацію існуючого методу «індекс-ризик» [1] в напрямку знаходження функціональної залежності значень ймовірностей екологічного ризику (ризику змін в складовій НПС від впровадження промислового об'єкта) і значень індексу кожної складової НПС. Ймовірнісну складову екологічного ризику можна розрахувати згідно із розробленими залежностями (2)–(4) на трьох рівнях ієрархічної схеми:

$$p^{(1)} = \sum_{i=1}^m p_i^{(2)}, \quad (2)$$

$$p_i^{(2)} = a_i \cdot e^{b_i \cdot I_i^{(2)}}, \quad (3)$$

$$p_{i,k}^{(3)} = c \cdot e^{d \cdot I_{i,k}^{(3)}}, \quad (4)$$

де  $p^{(1)}$  – ймовірнісна складова екологічного ризику НПС першого рівня;  $p_i^{(2)}$  – ймовірнісна складова екологічного ризику  $i$ -ої складової НПС другого рівня;  $a$ ,  $b$  – розрахункові константи, що пов'язані із специфікою складової НПС:  $a_1=5,17 \cdot 10^{-9}$ ,  $b_1=11,29$  (для атмосфери);  $a_2=6,29 \cdot 10^{-10}$ ,  $b_2=17,28$  (для гідросфери);  $a_3=6,083 \cdot 10^{-8}$ ,  $b_3=5,48$  (для ґрунту);  $a_4=1 \cdot 10^{-6}$ ,  $b_4=-37,05$  (для шумів);  $a_5=8 \cdot 10^{-10}$ ,  $b_5=7,67$  (для інфразвуку);  $a_6=1 \cdot 10^{-8}$ ,  $b_6=6,89$  (для ультразвуку);  $a_{7-14}=1 \cdot 10^{-8}$ ,  $b_{7-14}=4,95$  (для електромагнетизму, вібрацій);  $a_{15}=2,47 \cdot 10^{-9}$ ,  $b_{15}=8,93$  (для радіоактивності);  $e$  – експоненціальна функція;  $I_i^{(2)}$  – індекс впливу на  $i$ -ту складову НПС;  $p_{i,k}^{(3)}$  – ймовірнісна складова екологічного ризику  $k$ -ої речовини  $i$ -ої складової НПС третього рівня;  $c$ ,  $d$  – розрахункові константи, що пов'язані із специфікою речовини складової НПС:  $c=1 \cdot 10^{-8}$ ,  $d=4,931$ ;  $I_{i,k}^{(3)}$  – індекс впливу  $k$ -ої речовини  $i$ -тої складової НПС [2–4].

Проведення оцінювання рівня ймовірнісної складової екологічного ризику здійснюється відповідно до запропонованої шкали (табл.1).

На основі отриманого значення приймається рішення про прийнятність промислового об'єкту по кожній специфічній забруднюючої речовині відповідної складової НПС на

## Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

третьому рівні, для складової навколошнього середовища на другому рівні та для промислового об'єкту в цілому на першому рівні.

*Таблиця 1 – Класифікація рівнів ймовірності складової екологічного ризику*

<i>Рівень</i>	<i>Значення ймовірності складової</i>
Неприйнятний	$>10^{-6}$
Умовно прийнятний	$10^{-6} - 10^{-7}$
Прийнятний	$10^{-7} - 10^{-8}$
Безумовно прийнятний	$< 10^{-8}$

Розрахунок збитків від забруднення складових НПС, що заподіяні внаслідок впровадження проектованого промислового об'єкту здійснюється згідно нормативної документації України.

Розрахунок збитків від забруднення складових НПС, що заподіяні внаслідок впровадження проектованого промислового об'єкту здійснюється згідно залежностей (5)–(7):

$$Z_1 = k_1 \cdot k_2 \cdot \sum_{i=1}^k 3n_i \cdot \sum_{i=1}^k Ma_i, \text{ або } Z_1 = m_i \cdot 1,1\pi \cdot A_i \cdot K_T \cdot K_{zi} \cdot K_{ind}, \quad (5)$$

$$Z_2 = 1,5 \cdot k_{inf} \cdot K_{cam} \cdot K_P \cdot \sum_{i=1}^m M_i \cdot \gamma_i \cdot K_{hi}, \quad (6)$$

$$Z_3 = A \cdot \Gamma_{O3} \cdot \Pi_D \cdot K_3 \cdot K_H \cdot K_{EG}, \quad (7)$$

де  $Z_1$  – збитки від забруднення атмосфери промисловим об'єктом, грн.;  $k_1$  – коефіцієнт, що враховує розташування джерела викиду;  $k_2$  – коефіцієнт, що враховує висоту викиду;  $3n$  – питомий збиток від викиду 1 тони  $i$ -го забруднювача в атмосферу, грн/т;  $Ma$  – маса викиду  $i$ -ого забруднювача в атмосферу, т/рік;  $Z_1$  – збитки від забруднення атмосфери промисловим об'єктом, грн.;  $m_i$  – маса  $i$ -тої забруднюючої речовини, що викинута в атмосферне повітря понаднормово, т;  $1,1\pi$  – базова ставка компенсації збитків в частках мінімальної заробітної плати ( $\Pi$ ), на момент виявлення порушення, за одну тонну умовної забруднюючої речовини грн./т;  $A_i$  – безрозмірний показник відносної небезпечності  $i$ -тої забруднюючої речовини;  $K_m$  – коефіцієнт, що враховує територіальні соціально-екологічні особливості;  $K_{zi}$  – коефіцієнт, що залежить від рівня забруднення атмосферного повітря населеного пункту  $i$ -тою забруднюючою речовиною;  $K_{ind}$  – коефіцієнт індексації, що враховує інфляційні процеси;  $Z_2$  – збитки у разі та несанкціонованих скидів забруднюючих речовин у поверхневі води;  $k_{inf}$  – коефіцієнт інфляції на дату (рік) розрахунку збитків;  $K_{cam}$  – коефіцієнт, що враховує категорію водного об'єкту;  $K_P$  – регіональний коефіцієнт дефіцитності водних ресурсів;  $M_i$  – маса скинутої  $i$ -ої забруднюючої речовини, т;  $\gamma_i$  – питомий, економічний збиток забруднення  $i$ -ою забруднюючою речовиною, грн./т;  $K_{hi}$  – коефіцієнт, що враховує зменшення питомих витрат на ліквідацію забруднення із зростанням масштабу забруднення;  $Z_3$  – розмір збитків від забруднення ґрунту, грн.;  $A$  – питомі витрати на ліквідацію наслідків забруднення земельної ділянки, значення якого дорівнює 0,5;  $\Gamma_{O3}$  – нормативна грошова оцінка земельної ділянки, що зазнала забруднення (засмічення), грн/  $m^2$ ;  $\Pi_D$  – площа забрудненої земельної ділянки,  $m^2$ ;  $K_3$  – коефіцієнт, що характеризує вміст забруднюючих речовин ( $m^3$ ) в об'ємі забрудненої землі ( $m^3$ ) залежно від глибини просочування;  $K_H$  – коефіцієнт небезпечності забруднюючих речовин;  $K_{EG}$  – коефіцієнт екологіко-господарського значення земель.

Розроблений спосіб визначення такого ризику як екологічний вже на етапі проектування промислових об'єктів, що базується на системі індексів урбанізованих екосистем, дозволяє отримати оцінки та здійснювати контроль за якістю та екологічною безпекою НПС та орієнтуватися не тільки на шкоду здоров'ю людини, але й на інші «відповідні реакції» НПС.

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

1. Бойко, Т.В. К вопросу определения рисков при оценке воздействий техногенных объектов на окружающую среду [Текст] / Т.В. Бойко // Восточно-европейский журнал передовых технологий. – 2008. – №4/6 (34): Технология неорганических и органических веществ и экология. – С.37–41.
2. До питання розробки методики з оцінки ризику планової діяльності на навколошнє природне середовище [Текст] / Г.О. Статюха, В.А. Соколов, І.Б. Абрамов, Т.В. Бойко, А.О. Іщишина (Абрамова) // Захист навколошнього середовища. Енергоощадність. Збалансоване природокористування: Зб. матеріалів I Міжнародного конгресу.– Львів: Видавництво Національного університету «Львівська політехніка» . – 2010. – №667.– С.231–234.
3. До питання кількісної оцінки екологічної безпеки при ОВНС [Текст] / Г.О. Статюха, В.А.Соколов, І.Б. Абрамов, Т.В. Бойко, А.О. Абрамова // Східно – Європейский журнал передових технологий. – 2010. – №6/6 (48). – С.44–46.
4. Статюха, Г.А. Системне оцінювання екологічної безпеки проектованих промислових об'єктів [Текст] / Г.О. Статюха, Т.В. Бойко, А.О. Абрамова // Вісник Національного технічного університету «ХПІ». Збірник наукових праць. Тематичний випуск: Нові рішення в сучасних технологіях. – Харків: НТУ «ХПІ». – 2011. – №58. – С.70-76.

## РОЗРОБКА ТА АНАЛІЗ СКЛАДОВИХ КОМП'ЮТЕРНОГО ТРЕНАЖЕРА В СЕРЕДОВИЩІ UNISIM OPERATION

Баршацький О. І., Шахновський А. М., \*Янишпольський В. В.  
Національний технічний університет України «КПІ», Lesha.memphis@gmail.com  
\*ІП "Хоневелл-Україна", Київ, Vasiliy.Yanishpolskii@honeywell.com

Визначну роль у контролі та керуванні технологічним процесом на сучасному промисловому виробництві відіграє оператор. Ця особа має бути спеціально підготовленою, враховуючи специфіку виробництва та обладнання, з яким необхідно працювати. Помилка оператора може привести до зменшення продуктивності виробництва, до погіршення якості цільового продукту та навіть до зупинки виробництва із серйозними наслідками для підприємства та для навколошнього середовища.

Найбільш ефективною визнають підготовку операторів, що здійснюється в тих же умовах, у тому ж фізичному та психологічному стані, що й під час роботи [1, 2]. При цьому цілком очевидно, що готувати операторів на реальному виробництві є небезпечно і економічно недоцільно.

Для підготовки та тестування операторів прийнято створювати багатофункціональні комп'ютерні тренажери, які мають на меті перевірку навичок та досвіду операторів, а також навчання операторів правильно реагувати у випадку надзвичайної ситуації, враховуючи специфіку конкретного виробництва.

Комп'ютерне навчання операторів передбачає наявність високоточних математичних моделей, реалізацію моделей в динаміці, облаштування місця навчання аналогічно робочому місцю оператора на виробництві, відтворення роботи системи керування технологічним процесом з базовим управлінням, системою блокувань та захисту і алгоритмами модернізованого керування, створення робочого місця інструктора навчання, наявність методичної бази комп'ютерного навчання, розробку методів аналізу та оцінки результатів навчання [1].

Тренажери, створені фірмою Honeywell (реалізовані в Україні, зокрема, на виробництвах аміаку в м. Одеса та м. Черкаси), відповідають описаним вимогам. Роль об'єкта керування у тренажері відіграє комп'ютерна модель. При цьому базовим програмним забезпеченням для роботи тренажера є пакет UniSim Operation (USO), розроблений фірмою Honeywell. За допомогою USO в тренажері забезпечується робота моделі, зв'язок з

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

розділеною системою керування, реалізуються функції інструктора. В USO можна створювати різні сценарії розвитку подій на об'єкті керування (наприклад, створювати ситуації відмови обладнання), слідувати за роботою операторів під час навчання, збирати дані щодо поведінки системи, представляючи їх у вигляді графіків та множин даних.

Задачею дослідження було розширення функціональності створеного на платформі USO тренажера оператора XTC виробництва зв'язаного азоту та проведення комп'ютерних експериментів на базі вказаного тренажера.

Розширення функціональності тренажера передбачало насамперед підбір компонентів та параметричну ідентифікацію комп'ютерної моделі XTC за експериментальними даними з метою забезпечення адекватності вказаної комп'ютерної моделі наявному виробництву як об'єкту керування.

Інтерфейс тренажера розроблено відповідно до стандартів екранів оператора: оператору доступні значення з датчиків, положення клапанів як регуляторів, так і систем блокування та захисту, представлена інформація режими роботи клапанів та інша необхідна інформація.

У процесі навчання інструктор обирає необхідний набір даних. Відображення типового набору даних у вікні тренажера представлено на рис. 1. Надана інформація дає змогу зробити висновки щодо екологічної безпеки, недоліків роботи системи керування, правильності та чіткості роботи операторів, роботи зміни тощо.

В рамках дослідження було проведено засобами тренажера аналіз хіміко-технологічної системи на стійкість до збурень. На рис. 1 відображено реакцію модельованої системи на збурення, в результаті чого деякі важливі параметри перетнули нижню границю на 20-25 хв., але в результаті дій оператора вдалося повернути технологічні параметри в робочий діапазон без зупинки виробництва в цілому.

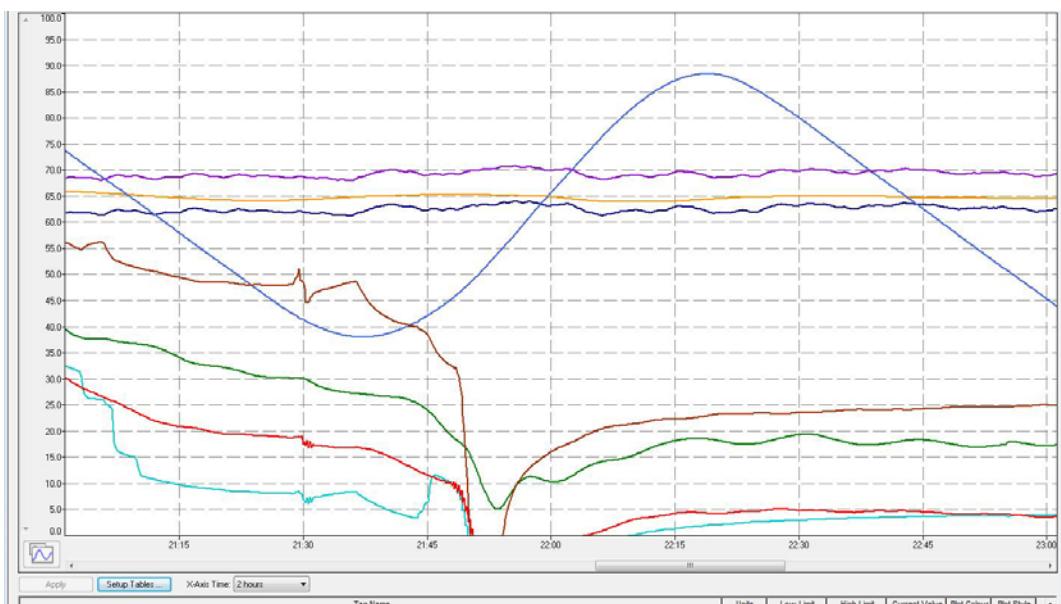


Рис. 1 – Набір результатів моделювання роботи XTC в середовищі UniSim Operation

Також було проведено аналіз реактора синтезу аміаку на чутливість до зміни об'ємного відношення водню до азоту. За результатами аналізу в якості оцінки виходу аміаку на виході з реактору синтезу прийнято вибіркове середнє  $\bar{m}=6\%$ , що свідчить про стійкість реактору до збурень у вигляді зміни співвідношень об'єму.

Із використанням результатів симуляційних експериментів, проведено аналіз чутливості системи та аналіз необхідного часу на відтворення нормальної роботи, визначено «слабкі» місця системи регулювання та розроблено план модернізації системи автоматизації, вироблено рекомендації щодо модернізації алгоритмів регулювання та системи протиаварійного захисту

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

перевірено швидкодію та надійність роботи нових алгоритмів регулювання та обладнання автоматизації досліджуваного виробництва. Розрахунки показали, що у разі впровадження вказаних рекомендацій можливе збільшення виходу продукту на 6-7%.

1. Дозорцев, В.М. Компьютерные тренажеры для обучения операторов технологических процессов [Текст] / В.М. Дозорцев. – М.: Синтег, 2009. – 372 с.
2. Чачко, А.Г. Подготовка операторов энергоблоков: алгоритмический подход [Текст] / А.Г. Чачко. М.: Энергоатомиздат, 1986. – 230 с.

## МАТЕРИАЛЬНА СОСТАВЛЯЮЩАЯ ОЦЕНКИ БЕЗОПАСНОСТИ ПРОЕКТИРУЕМЫХ ПРОМЫШЛЕННЫХ ОБЪЕКТОВ

Салко М.Т., Бойко Т.В., Бендюг В.И.

Национальный технический университет Украины «КПИ», Podarochekster@gmail.com

Нами проанализировано состояние проблемы определения техногенного риска промышленных объектов Украины и обнаружено, что на объектах химической опасности, в основном, используют морально устаревшие технологии, оснащённые изношенным оборудованием. Каждый год во время проверок состояния техногенной безопасности на промышленных объектах фиксируют многочисленные нарушения норм охраны труда, пожарной, экологической и санитарно-эпидемиологической безопасности. Выявлены случаи проектирования и построения потенциально опасных промышленных объектов без соблюдения норм по техногенной безопасности. В связи с этим актуальной задачей является определение степени опасности промышленных объектов на этапе проектирования с учётом расположения будущего объекта на выбранной территории. При этом необходимо провести количественную оценку опасности с расчётом уровня техногенного риска и его влияния на составляющие природной окружающей среды, оценить уровень возможного ущерба вследствие возникновения аварии на проектируемом промышленном объекте. Современная концепция оценки воздействия на окружающую среду предполагает оценку влияния на составляющие: атмосферу, гидросферу, почву, человека (с учётом социальных аспектов) [1].

Оценка риска негативного влияния на природную среду проектируемого объекта проводится в два этапа. На первом этапе на основе полученного значения уровня опасности проектируемого промышленного объекта принимается решение про приемлемость размещения данного объекта на выбранной территории, доработке проекта (например, усовершенствованию системы безопасности, регулирующего оборудования и т.д.), или отклонению данного проекта. На втором этапе на основе полученных значений принимается решение про приемлемость уровня риска по каждому специальному веществу (показателю) для компонентов окружающей среды. Данная модель была создана с целью расчёта экологического риска на стадии проектирования. При расчёте учитывается множество факторов и особенностей, как производственного процесса, так и внешних природных и техногенных факторов, которые могут повысить уровень риска данного объекта [2].

Величина индекса относительной опасности отдельного источника опасности промышленного предприятия  $D_{RL_i}$ , исчисляется по формуле:

$$D_{RL_i} = \sqrt[n]{\prod_{j=1}^n I_j}, \quad (1)$$

где  $I_j$  - индекс опасности  $j$ -го вида, приведённый к единой безразмерной шкале от 0 до 1.

Приведённые значения индексов опасности рассчитываются по формуле:

$$I_j = 1 - \exp(-\exp(-\alpha_j + \beta_j \cdot I'_j)), \quad (2)$$

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

где  $I_j$  - индекс опасности  $j$ -го вида, приведённый к единой безразмерной шкале;  $\alpha_j$ ,  $\beta_j$  - эмпирические коэффициенты для  $j$ -го индекса опасности;  $I'_j$  - индекс опасности  $j$ -го вида

В качестве примера использования методики нами произведен расчёт техногенной опасности тепловой электростанции ТЕЦ-5, расположенной в населённом пункте Дергачи Харьковской обл., на основе документации по её модернизации [3-4]. На основе рассчитанных индексов опасности был найден обобщённый показатель – индекс относительной опасности для наиболее опасных объектов и сделаны выводы о категории опасности по каждому объекту (табл. 1)

*Таблица 1 – Категория опасности объекта*

<i>Наименование объекта</i>	<i>Индекс относительной опасности</i> $D_{RL_i}$	<i>Категория опасности</i>
Котёл ТГМП-344А	0,435	Объект средней опасности
Котёл ПТВ 180	0,359	Мало опасный объект
Насос для перекачивания мазута	0,406	Объект средней опасности
Насос мазутный первого подъёма	0,362	Мало опасный объект
Насос мазутный рециркуляционный	0,405	Объект средней опасности
Насос конденсаторный	0,278	Мало опасный объект
Насос дренажный	0,186	Безопасный объект

Полученные значения индексов опасности на основе разработанной нами методики являются безразмерными индексными показателями и могут применяться для определения уровня опасности проектируемого объекта, а также сравнительной оценки полученной опасности с аналогичными объектами. Данные индексные показатели могут служить руководством к формированию выводов о целесообразности размещения оцениваемого промышленного объекта на указанной территории. На основе анализа рассчитанных составляющих индексов опасности можно определить факторы, вносящие наибольший негативный эффект в уровень конечной опасности объекта. Данная оценка является относительной оценкой опасности промышленного объекта.

Для формирования абсолютной оценки в широко распространённой системе координат – денежном эквиваленте, в качестве развития нашей методики предлагается включить материальную составляющую возможных убытков от возникновения аварии на рассматриваемом промышленном объекте. При этом мы отталкиваемся от теории максимального ущерба, т.е. рассматриваем наихудший вариант с выбросом всего имеющегося количества опасных веществ на промышленном объекте, в окружающую среду.

Размер материальных убытков в первую очередь будет зависеть от степени опасности присутствующих на объекте опасных веществ, а также количества данных веществ. Для определения размера материальных убытков от попадания сверхнормативного количества вредных веществ в атмосферу, предлагается воспользоваться следующей зависимостью:

$$Z_{oc} = m_i \cdot 1,1\pi \cdot A_s \cdot K_t \cdot K_{zi} \cdot K_{uند}, \quad (3)$$

где  $Z_{oc}$  – размер компенсации убытков от попадания вредных веществ в окружающую среду, грн;  $m_i$  - масса  $i$ -того загрязняющего вещества, которое выкинуто в атмосферный воздух сверх нормы, т (общее количества опасного вещества, которое содержится или используется на объекте за вычетом предельно допустимого количества);  $1,1\pi$  – базовая ставка компенсации убытков волях минимальной заработной платы ( $\pi$ ), на момент расчёта размера потенциальных материальных убытков, за одну тонну условного загрязняющего вещества, грн/т;  $A_i$  – безразмерный показатель относительной опасности  $i$ -того

## Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

загрязняющего вещества;  $K_i$  – коэффициент, который учитывает территориальные социально-экологические особенности;  $K_{si}$  – коэффициент, который зависит от уровня загрязнения атмосферного воздуха населённого пункта  $i$ -тым загрязняющим веществом;  $K_{ind}$  – коэффициент индексации, который учитывает инфляционные процессы.

При наличии вблизи рассматриваемого объекта водоёма и присутствии на объекте нелетучих, слабо испаряющихся опасных веществ, необходимо рассчитывать материальные убытки от попадания вредных веществ в поверхностные воды, в том числе затраты на ликвидацию последствий и очистку водоёма. Для расчёта такого вида убытков предлагается воспользоваться зависимостью:

$$Z_{вод} = K_{инн} \cdot K_{кат} \cdot K_p \cdot \sum_{i=1}^m (M_i \cdot \gamma_i \cdot K_{н_i} \cdot K_{o_i}) \quad (4)$$

где  $K_{инн}$  – коэффициент инфляции на дату (год) расчётов убытков;  $K_{кат}$  – коэффициент, который учитывает категорию водного объекта;  $K_p$  – региональный коэффициент дефицитности водных ресурсов;  $m$  – количество загрязняющих веществ;  $M_i$  – сверхнормативная масса сброшенного  $i$ -го загрязняющего вещества, т (общее количества опасного вещества, которое содержится или используется на объекте за вычетом предельно допустимого количества);  $K_{н_i}$  – коэффициент, который учитывает уменьшение удельных расходов на ликвидацию загрязнения с ростом масштаба загрязнения;  $K_{o_i}$  – коэффициент, который учитывает фактическую степень загрязнённости водного объекта  $i$ -ым веществом, или степень поражённости водного объекта, которая зависит как от интенсивности загрязнения, так и от свойства водоёма.

Дополнение разработанной нами методики материальной составляющей оценки возможных убытков вследствие возникновения аварии на рассматриваемом проектируемом объекте, позволит более полно представить себе возможные масштабы последствий размещения проектируемого объекта на выбранной промышленной площадке с учётом особенностей и ценности региона, а также численности населения в населённых пунктах вблизи проектируемого объекта. Это даст возможность принимать адекватные выводы о целесообразности размещения проектируемого промышленного объекта на выбранной территории, а наличие индексных составляющих оценки опасности объекта позволит определить возможные слабые стороны проекта с целью его усовершенствования и уменьшения уровня опасности.

1. Альмов В.Т. Техногенный риск [Текст] / В.Т. Альмов, Н.П. Тарасова. – М.: ИКЦ «Акадмкнига», 2006. – 118 с.
2. Статюха Г.А. Оценка экологической опасности промышленных систем [Текст] / Г.А.Статюха, Т.В. Бойко, В.И. Бендюг // Математические методы в технике и технологиях ММТТ-22: Сб. трудов ХХII Международ. науч. конф.: В10 т. Т. 4. Секция 4, Псков. – 2009. – С. 36–38.
3. Бойко Т.В. Особенности определения техногенного риска на объектах химической технологии при проектировании [Текст] / Т.В. Бойко, В.И. Бендюг, М.В. Назаренко // Сб. трудов ХХIV Междунар. науч. конф. Математические методы в технике и технологиях – ММТТ-24 в 10 т. Т. 4 Секция 4 / под. общ. ред. В.С. Балакирева.- Киев: Национальний техн. ун-т України «КПІ», 2011. – С. 23–26.
4. Назаренко М.В. Особливості визначення техногенного ризику хіміко – технологічних об’єктів на стадії проектування [Текст] / М.В. Назаренко, Т.В. Бойко, В.І. Бендюг // Східно-європейський журнал передових технологій, Харків, 2011, №3/11 (51) – С.13–17.

**АНАЛИЗ РИСКА СЛОЖНЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ  
КОМПЛЕКСА «РизЭкс-2»**

Грановский Э.А. Ворона А.П.

Научный центр изучения рисков «РИЗИКОН», office@rizikon.lg.ua

Международные стандарты регламентируют принятие решений по безопасности технологических систем на основе анализа риска. Анализ риска структурно-сложных технологических систем невозможен без применения информационных технологий

Программный комплекс моделирования промышленных аварий «РизЭкс-2» позволяет выполнять все процедуры анализа опасности и оценки риска, регламентированные действующим международным законодательством, нормативными документами и национальными стандартами многих стран. Структура комплекса приведена на рис. 1.

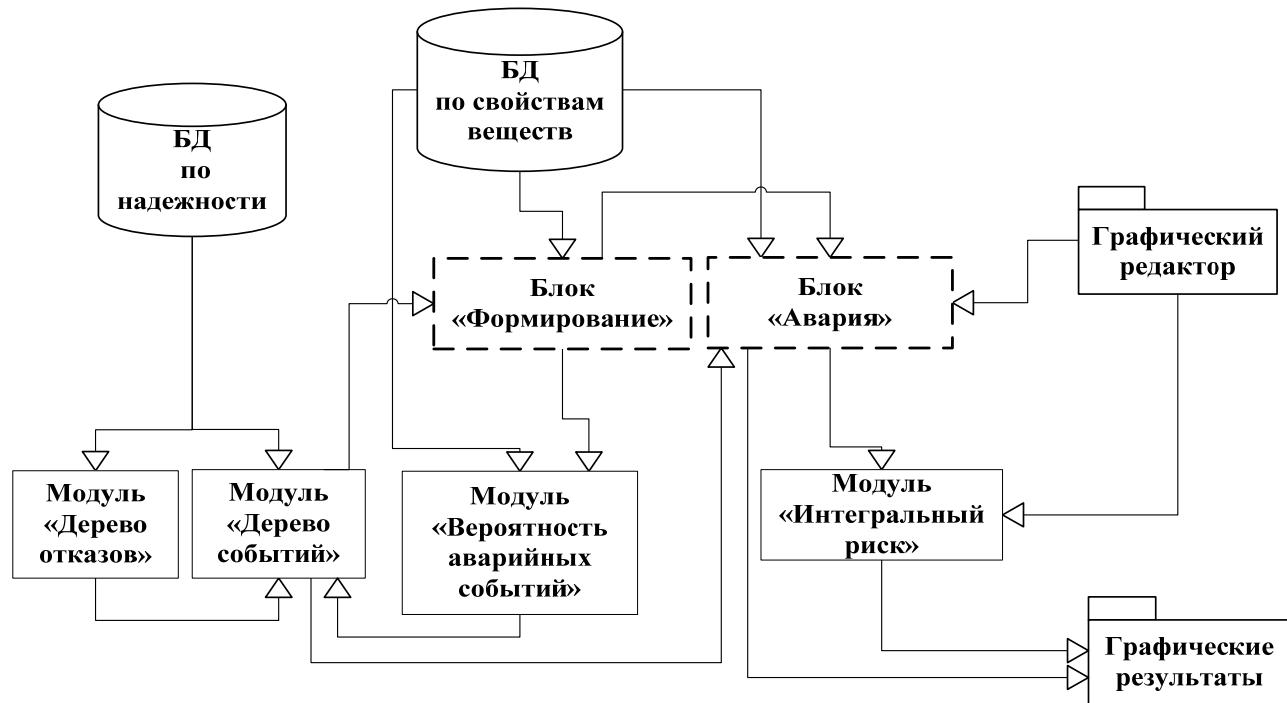


Рис.1 – Структурная схема организации процесса анализа опасности и оценки риска программного комплекса «РизЭкс-2»

Структура программного комплекса «РизЭкс-2» учитывает, что любой аварийный процесс (взрыв, пожар, токсичное облако и др.) происходят в результате случайных процессов возникновения и развития аварии, реализуемых вследствие отказов в системе «МашинаН – Человек»

Моделирование случайного процесса возникновения аварии, в программе выполняется с использованием модуля «Дерево отказов».

Построение «дерева отказов» автоматизировано и производится на основе выявления причинно-следственных связей между отказами сверху вниз (от вершины к корням).

Модуль «БД по надежности» содержит информацию для около 4000 элементов технологических систем (оборудование, арматура и трубопроводы; контрольно-измерительные приборы и автоматика, системы противоаварийной защиты) и данные о вероятности ошибочных действий персонала .

Программа в автоматизированном режиме выполняет анализ «минимальных аварийных сочетаний», «проходных сочетаний» и значимости «базовых событий».

## Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

Эти данные используются как исходные при анализе случайных процессов развития аварии в модуле «Дерево событий» и модулей блока «Формирование»

Развитие аварии, завершающееся аварийным процессом, имеет множество направлений, каждое из которых определяется набором отказов и срабатываний систем сдерживания, включая действия человека. Моделирование случайного процесса развития аварии выполняется в автоматизированном режиме модулем «дерево событий» с вероятностью начального события определенного методом «дерево отказов».

Вероятность промежуточных событий, каждое из которых представляет собой срабатывание или отказ системы защиты, предназначеннной для сдерживания развития аварии или ликвидации ее на каком-то этапе развития, определяется либо как вероятность элементарного события с использованием базы данных по надежности, либо построением дерева отказов этой системы защиты с использованием модуля «Дерево отказов». При этом для каждого промежуточного события учитывается не только вероятность его наступления, но и эффективность сдерживания аварии и ее ликвидации.

Программа позволяет установить логическую связь между зависимыми и независимыми промежуточными событиями, что обеспечивает корректное построение «дерева событий» при сложной взаимозависимости промежуточных событий, включая человека, как элемента системы защиты.

Оптимизация «дерева событий» по условию и минимизация по уровню вероятности позволяет найти минимально необходимый набор конечных состояний в «дереве событий», позволяющий с необходимой точностью определить суммарные риски возможных аварийных процессов.

Данные о начальных условиях в «дереве отказов» и информации каждого конечного состояния в «дереве событий» о времени формирования аварийной ситуации, об эффективности сработавших средств защиты и т.п. используются в расчетных модулях блока «Формирование».

Моделируется истечение жидкости и газа в окружающее пространство как при образовании аварийного отверстия на теле аппарата, так и через систему трубопроводов при их порыве. Учитывается поступление в аварийный аппарат или участок опасных веществ от смежных аппаратов или участков за время прекращения потоков.

Полученные данные используются, как исходные для моделирования испарения жидкости при ее проливе.

Рассматривается мгновенное переход в паровую фазу при выбросе многокомпонентной смеси сжиженных газов и перегретых жидкостей и испарение жидкости из пролива.

Для пролива с температурой жидкости ниже температуры кипения при атмосферном давлении рассчитывается изменение во времени интенсивности испарения и массы поступивших паров в атмосферу с учетом теплообмена с подстилающей поверхностью и атмосферой, радиационного потока и прогрева пролива внешним тепловым источником (например, пожаром).

По массе мгновенного выброса и интенсивности поступления газов и паров в окружающее пространство определяется изменение во времени массы между нижним и верхним пределами распространения пламени. Расчет выполняется с использованием модуля «Формирование взрывоопасного облака» по гауссовой модели рассеяния.

На плане и/или карте местности отображается граница распространения взрывоопасного облака и определяется возможная взрывоопасная зона.

Модуль «Вероятность аварийных событий» с использованием модуля «Формирование взрывоопасного облака» рассматривает миграцию облака по территории опасного объекта с учетом вероятности направления и скорости ветра в возможном диапазоне их изменения и вероятность встречи со случайными источниками зажигания взрывоопасной смеси. По изменению во времени концентрации топлива во взрывоопасной смеси определяется вероятность реализации различных режимов горения: «огненный шар»,

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

взрыв, вспышка (хлопок). С учетом наличия или отсутствия пролива горючей жидкости и токсичных свойств выброшенных веществ и продуктов сгорания определяется вероятность пожара пролива при условии реализации одного из режимов сгорания и вероятность токсичной волны выброса и продуктов сгорания.

Блок «**Аварийные события**» включает в себя модули «**Взрыв**», «**Пожар**» и «**Рассеяние ОХВ**».

Модуль «**Взрыв**» позволяет выполнять расчеты с определением параметров ударных и взрывных волн в окружающем пространстве при детонации конденсированных веществ, при детонации и дефлаграции парогазовых облаков, при физических взрывах вследствие разрушения оборудования под давлением, при разрушении сосудов с перегретыми жидкостями (BLEVE). Моделируется разлет осколков.

Модуль «**Пожар**» позволяет определять интенсивность тепловых потоков в окружающем пространстве для пожара пролива, сгорания облака в виде «огненного шара» и факельного горения.

Модуль «**Рассеяние ОХВ**» позволяет определить изменение во времени и в пространстве концентрации вредных примесей в воздухе.

При моделировании аварийных процессов для каждого из них определяется условная вероятность поражения человека с использованием Пробит-функции и материальные потери.

Для множества источников аварийных процессов на производственном объекте или в регионе с использованием модуля «**Риск**» рассчитываются поля территориального риска, производится построение F-N диаграмм. Определяются интегральные показатели риска: индивидуальный риск, ожидаемое число погибших, социальный риск. В процессе анализа риска могут приниматься решения для достижения приемлемого риска.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЖАРОВ И ОЦЕНКА ПОЖАРНОГО РИСКА В ЗДАНИЯХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА «ПожарИз»

Барбуца И.М., Грановский Э.А., Ворона А.П., Маслов Р.А.  
Научный центр изучения рисков «РИЗИКОН», office@rizikon.lg.ua

Пожары в зданиях сопровождается быстрым распространением его поражающих факторов в пространстве зданий, и создают угрозу массовой гибели людей. Принятие решений по пожарной защите зданий невозможно без моделирования его развития во времени и анализа риска.

Программный комплекс «ПожарИз» состоит из четырех модулей (рис. 1.)

Данные программные средства позволяют путём моделирования пожаров в здании и процессов эвакуации людей определить риски для людей, эффективность и достаточность предусмотренных систем противопожарной защиты.



Рис. 1 – Структурная схема программного комплекса «ПожарИз»

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

Они реализуют следующие функции:

- задание графическими программными средствами метрических и объектных свойств пространства;
- моделирование пожаров и получение динамических характеристик опасных факторов пожара;
- моделирование эвакуации людей при заданном начальном произвольном размещении в отдельных помещениях здания по заданным целевым путям эвакуации;
- расчет пожарного риска здания.

Модуль «Редактор» позволяет конструировать здание, создавать комнаты, лестницы, пролёты, задавать двери и проёмы. Он предназначен для введения метрических и графических данных и используется модулями «CFAST» и «Эвакуация».

Для определения временных характеристик пространственного распределения поражающих факторов пожаров используется модуль «CFAST», основанный на зонной модели расчёта тепломассопереноса при пожаре.

Модуль «CFAST» разработан в Национальном институте стандартов и технологий США в международной коопeração с научно-исследовательскими организациями США, Канады и Финляндии, позволяет моделировать процессы возникновения и развития пожаров в зданиях с учётом распространения негативных факторов пожара, возможностей средств пожаротушения и дымоудаления, отображать и анализировать пожар (рис. 2)

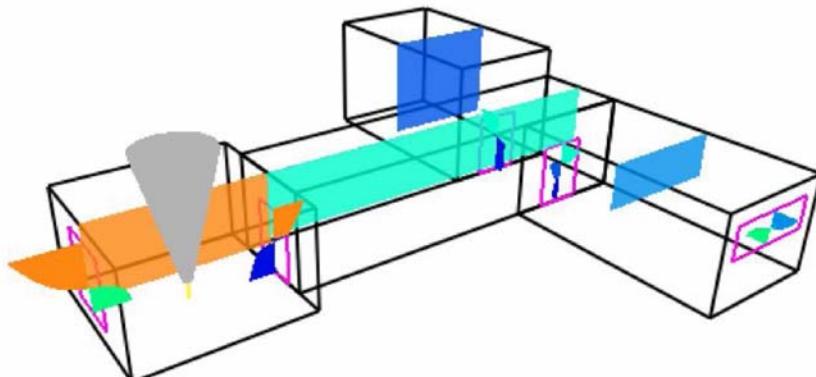


Рис. 2 – Моделирование пожара с использованием программы «CFAST»

Модуль «Эвакуация» позволяет моделировать и отображать процесс эвакуации людей из здания к доступным выходам по открытым путям эвакуации с учётом реальных метрических характеристик здания, изменения плотностей потоков людей и движения в горизонтальном или вертикальном пространстве. Модуль позволяет учитывать все характерные этапы процесса эвакуации (рис. 3)

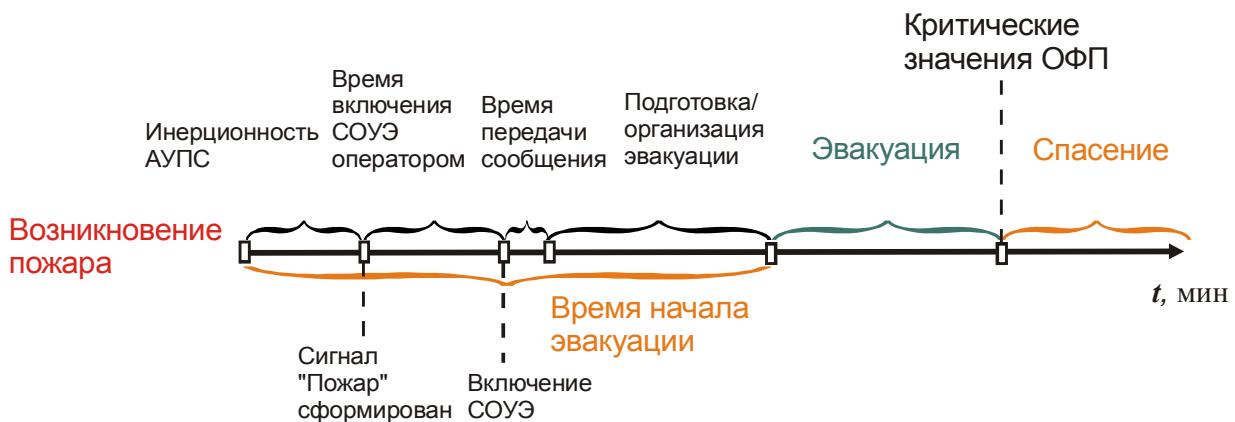


Рис. 3 – Временные этапы процесса эвакуации

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

Модуль «Риск» на основе моделирования множества пожаров в местах их возможного возникновения и процесса эвакуации людей с учетом стохастических характеристик их поражения людей определяет индивидуальный риск гибели, возможное и ожидаемое число поражённых и производит построение Р/Н диаграмм (Р – вероятность гибели, N – число пораженных с летальным исходом) с определением социального риска (рис. 4).

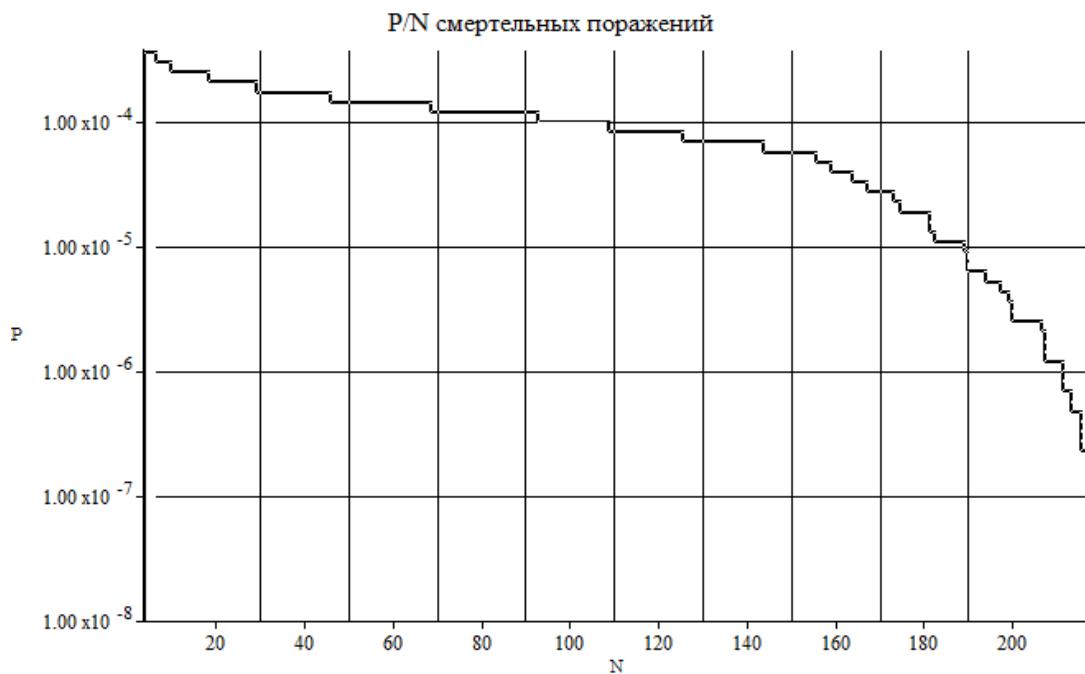


Рис. 4 – Р/Н диаграмма смертельного поражения людей

Вероятность возникновения пожара определяется с учетом его функционального назначения. Статистические данные о вероятности возникновения пожара для некоторых общественных зданий различного назначения приводятся в методической литературе.

Для каждого конкретного здания, вероятность возникновения пожара и вероятность присутствия в них людей можно принять за константу, тогда основные переменные показатели, влияющие на риск гибели людей при пожарах в зданиях – время эвакуации людей и время наступления критических значений опасных факторов пожара.

Комплекс «ПожАРиз» возможно проводить исследования пожаров в зданиях с определением влияния:

- количества людей в здании на время эвакуации и показатели риска;
- загромождённости помещений здания и путей эвакуации;
- типа системы оповещения и управления эвакуацией при пожаре (СОУЭ);
- изменений пожарной нагрузки и применение разных горючих материалов отделки;
- применения спринклеров системы и системы дымоудаления и т.п.

Результаты анализа риска гибели людей при помощи моделирования пожаров в зданиях имеют практическое применение:

- при разработке рекомендаций по обеспечению безопасной эвакуации людей при пожаре;
- при создании и совершенствовании систем сигнализации и автоматических систем пожаротушения;
- при определении соответствия объекта защиты требованиям пожарной безопасности;
- при разработке рекомендаций по изменению функционального назначения и объёмно-планировочных решений зданий, помещений и т. п.

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

## ПРОГНОЗИРУЮЧИЙ КОМПЛЕКС ПОДДЕРЖКИ ДЕЙСТВИЙ ДИСПЕТЧЕРСКОЙ СЛУЖБЫ ХИМИЧЕСКИ ОПАСНЫХ ОБЪЕКТОВ

Эсмонт А.В., Грановский Э.А., Ворона А.П., Маслов Р.А.

Научный центр изучения рисков «РИЗИКОН», office@rizikon.lg.ua

Одной из функций диспетчерских служб опасных производственных объектов – организация работ по предупреждению и локализации промышленных аварий. Сюда входит оперативное оповещение персонала предприятия, населения, всех участников противоаварийных действий, координация работ по безаварийной остановке производств, по эвакуации и по локализации аварии и ликвидации ее последствий.

Оперативное выполнение этих задач невозможно без прогноза возможных последствий возникающих угроз и поддержки действий диспетчера с применением современных информационных технологий.

Такая система автоматизированная система оповещения и поддержки принятия решений АРМ «Диспетчер» разработана и успешно эксплуатируется более 5 лет.

Система включает в себя (рис. 1):

- программные средства прогнозирования последствий и развития аварий;
- программные средства поддержки принятия решений и выполнения действий диспетчером;
- базу данных прогноза аварийных ситуаций;
- автоматическую метеостанцию;
- систему обработки и отображения информации, в т.ч. результатов прогноза;
- систему автоматического оповещения по телефону и по громкоговорящей связи.

Программные средства прогнозирования последствий аварий используют расчетные модули программного комплекса «РизЭкс -2».

База данных прогноза аварийных ситуаций и действий диспетчера в этих ситуациях создается с учетом особенностей конкретного предприятия и характерных для него опасностей.

Система обработки и отображения информации включает два компьютера, один из которых является сервером для управления системой, второй предназначен для поддержки принятия решений и контроля действий диспетчера, отображает список действий диспетчера и визуализацию процесса автоматического оповещения. Сервер на основе данных о метеоусловиях и результатов идентификации аварийной ситуации выполняет расчеты для прогноза возможных последствий.

Диспетчер имеет возможность ознакомиться с информацией о метеоусловиях, полученных от метеостанции, или ввести данные о метеоусловиях для выполнения прогноза в случае неисправности метеостанции в момент аварии.

Система функционирует в нескольких режимах:

- Режим создания и редактирования базы данных по потенциально опасным объектам и грозам;
- Режим аварии – включает составление прогноза развития и последствий аварии;
- Режим учебной тревоги – составление прогноза без выполнения оповещения.

Имеется возможности создание дублированного пункта для органов ГО и ЧС предприятия и распределенной системы в рамках локальной сети предприятия.

В режиме создания и редактирования базы данных производиться создание и редактирование карты местности и планов предприятий, ее наполнение параметрами аварийных ситуаций с учетом мест и условий возникновения угрозы аварии для отображения возможных зон поражения. Формируются списки оповещения и база знаний по действиям диспетчера в условиях возникновения угрозы аварий, занесенных в базу данных.

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості



Рис. 1 – Структурна схема системи

Для определения мета аварии используется иерархическая структура с выделением отдельных элементов в древовидную форму. События, в конкретном месте формируют список, а масштаб последствий имеет структуру с выделением усугубляющих факторов. Таким образом, для определения аварийной ситуации необходимо задать место, событие и масштаб последствий. Каждому масштабу соответствуют параметры угроз для расчета последствий. Результат расчета с учетом метеоусловий и определит характер и зоны поражения.

Использование топографических карт предполагает использование карт с различной степенью детализации для получения корректного отображения зон поражения.

Компьютер, отвечающий за поддержку действий диспетчера, во время аварийной ситуации отображает следующую информацию:

- список оповещения и ход процесса автоматического оповещения;
- список последовательных действий диспетчера во время идентифицированной аварии с регистрацией времени выполнения предусмотренных в базе знаний решений и действий.

Результаты прогноза в текстовом и графическом представлении отображаются (рис. 2) на различных средствах отображения (мониторы, проекционные экраны и т.п.). Для контроля действий диспетчера регистрируется:

## Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

- факт и время оповещения конкретного должностного лица,
- последовательность и полнота выполнения диспетчером предусмотренных его обязанностями действий,
- время начала дежурства,
- время запуска и окончания расчета прогноза аварийной ситуации,
- корректировка диспетчером ранее заданных параметров угроз перед расчетом.

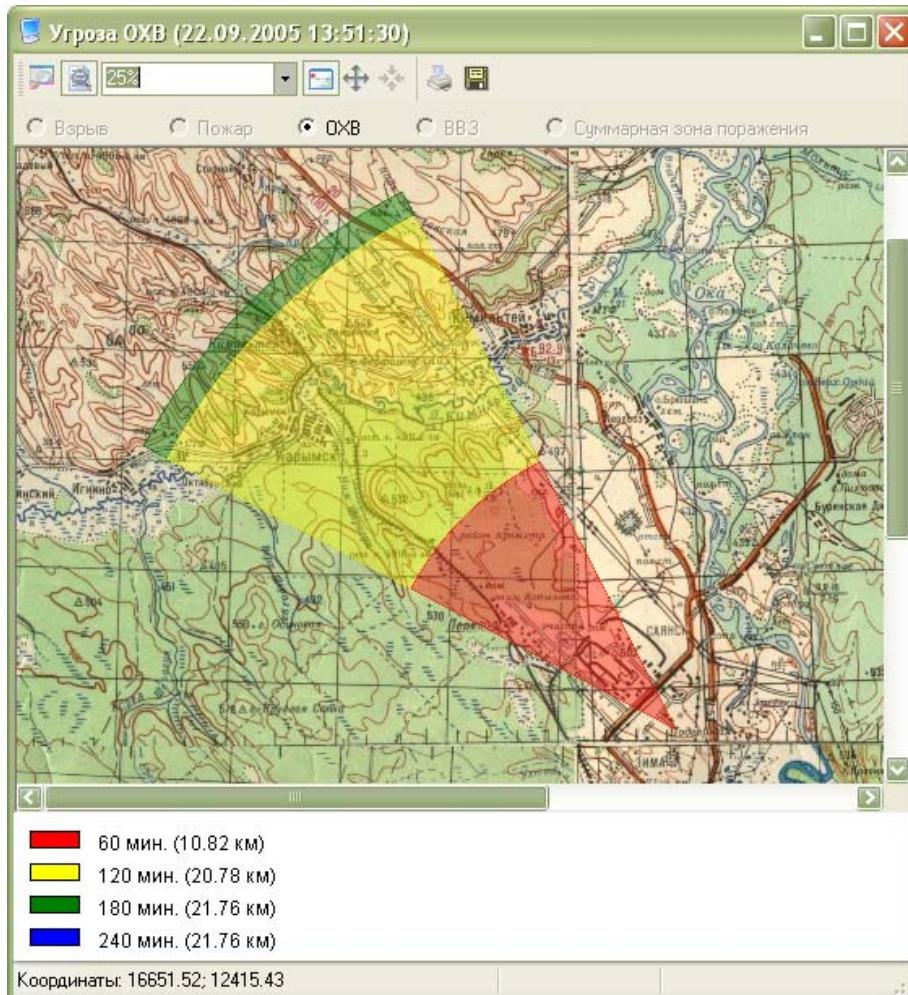


Рис. 2 – Отображение графических результатов прогноза

Ведется специальный журнал с фиксации времени регистрации этих событий. Эта информация используется при анализе действий диспетчера на предмет соответствия инструкции во время локализации и корректировки процесса ликвидации аварийной ситуации. Результаты (текстовый и графический) прогнозов сохраняются для последующего анализа в отдельных файлах.

Для проведения обучения диспетчеров используется режим учебной тревоги, при этом в журнале событий фиксируется, что тревога учебная, а к текстам оповещения добавляются предупреждение об учебной тревоге. Возможно отключение автоматического оповещения.

Для дублирования системы поддержки действий диспетчера введен режим, при котором диспетчер передает на дублирующий пост код аварии и система автоматически выполняет формирование прогноза без уточнения места, события и масштаба аварийной ситуации.

Применение комплекса значительно снижает вероятность ошибки, как диспетчерской службы, так и всех участников противоаварийных действий при локализации и ликвидации нежелательных последствий техногенных аварий.

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

## ТРЕНАЖЕРНИЙ КОМПЛЕКС «ТренаРиз» ДЛЯ ПОДГОТОВКИ ПЕРСОНАЛА ТЕХНОЛОГІЧЕСКИХ УСТАНОВОК К ПРОТИВОАВАРИЙНИМ ДЕЙСТВІЯМ

Ворона А.П.Грановский Э.А.

Научный центр изучения рисков «РИЗИКОН», office@rizikon.lg.ua

В системе «Машина – человек» в случаях отказов и поломок «Машины» вероятность возникновения и развития аварии и масштабы возможных последствий определяются эффективностью действий человека, как элемента системы. Очевидно, что «планирование» аварий и подготовка персонала к реагированию на возникшую аварийную ситуацию позволяют значительно сократить потери от аварий. Тем не менее, на всех стадиях жизненного цикла технологических систем основное внимание уделяется повышению надежности оборудования и систем управления. В последнее десятилетие на рынке появились компьютерные тренажеры для операторов химических и нефтехимических производств в основном использующие математические модели для АСУТП. Такие тренажеры эффективны для обучения персонала управлению процессом в нормальных режимах и не могут применяться в переходных аварийных процессах, для которых математические модели не разработаны. Кроме того, учитывая очень большое количество случайных состояний структурно-сложных технологических систем, обусловленных отказами огромного числа элементов, такое моделирование практически невозможно. Более того, для подготовки персонала к действиям в аварийных ситуациях более важно его «натаскивание» для выработки навыков быстрого принятия решений в условиях неопределенности и непрерывно изменяющейся обстановки. Для этих целей более применимы тренажеры, основанные на множестве сценариев возникновения и развития аварий.

Программный комплекс «ТренаРиз» позволяет инженеру-исследователю с использованием модуля «Дизайнер» создавать на основе сценариев виртуальный тренажер для коллективной подготовки оперативного персонала технологических установок к противоаварийным действиям.

Для создания базы данных и знаний тренажера на основе анализа опасности технологической системы разрабатываются сценарии возникновения и развития аварии и сценарии действий персонала при каждом изменении состояния системы.

Логика действия отрабатывается в тренировках по технологическим схемам, а моторные навыки, взаимодействие и ориентация отрабатываются в виртуальном пространстве (рис. 1).

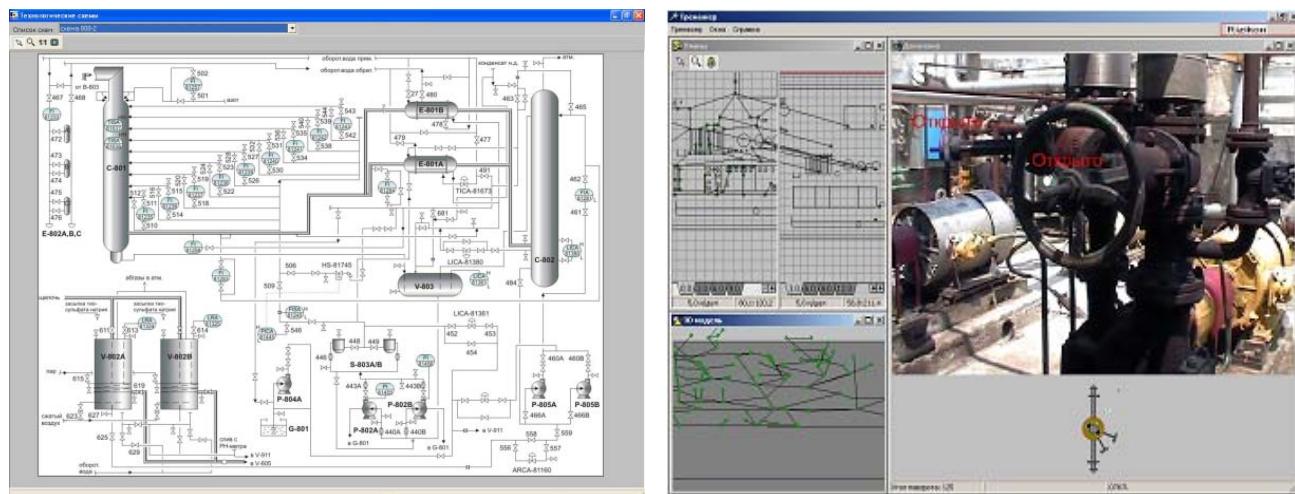


Рис. 1 – Екранна форма при открытии тренажера по технологическим схемам (а) и видео  
пространству (б) в режиме обучения

# Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

Подготовка персонала, как по технологическим схемам, так и в видео пространстве, производится в четыре этапа: вначале изучения действий для заданной аварийной ситуации в режиме учебного фильма (демонстрация), затем обучение в режимах с подсказкой и без подсказки и тренировка.

Авария развивается во времени, поэтому одним из критериев правильности действий является их своевременное выполнение. В начальной фазе обучения инструктор может выключить учет времени до приобретения необходимых навыков. Во время локализации и ликвидации аварий очень важно взаимодействие между участниками противоаварийных действий и их взаимозаменяемость. Поэтому важно, чтобы каждый участник понимал весь процесс борьбы с аварией. Программа позволяет каждому участнику, выбрав режим анонимной тренировки, изучить весь сценарий противоаварийных действий для каждой аварийной ситуации.

Выбор правильных решений по локализации и ликвидации аварии зависит не только от знания сценария, но от правильной идентификации возникшей ситуации. В режиме учебного фильма для выбранной аварийной ситуации диктор перечисляет все ее опознавательные признаки. Во время обучения в видео пространстве персонал имеет возможность выявлять аварию по показаниям приборов, по сигнализации по характерным производственным шумам (работа насоса, стукив компрессоре и т.п.). Кроме того, по характерным звукам и визуально могут идентифицироваться аварийные процессы: истекающая струя, облако вредных веществ, пожар, взрыв и т.п. (рис. 2.).

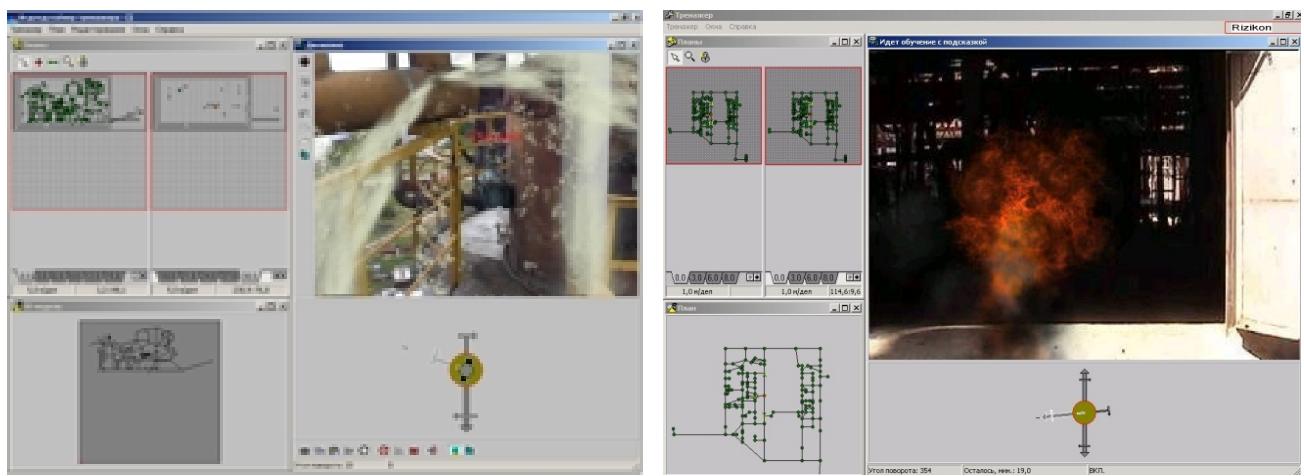


Рис. 2 – Обнаружение при перемещении в пространстве установки порыва и истечения горючей жидкости (а) и пожара в насосной (б)

При обучении в видео пространстве оператор может перемещаться в нем, принимать информацию от элементов отображения и воздействовать на элементы управления.

Для выработки навыков принятия решений в условиях неопределенности при обучении без подсказки и при тренировках может быть выбран режим случайной генерации аварийной ситуации. В этом случае оператор должен по опознавательным признакам идентифицировать сложившуюся ситуацию и принять правильные решения по ее ликвидации.

Поскольку в момент возникновения аварии место нахождения участников противоаварийных действий неизвестно может быть выбрано случайное расположение персонала на установке. В этом случае необходимо, идентифицировав свое место нахождения, выбрать кратчайший путь к месту расположения элементов управления для выполнения необходимых действий, что позволяет приобрести навыки ориентации в пространстве.

Тренажерный комплекс имеет в своем составе блок «компьютер», что позволяет имитировать работу персонала с АСУТП.

## Комп'ютерне моделювання аварійних ситуацій і створення комп'ютерних тренажерів для хімічної промисловості

В режиме «тренировка» оператор может работать индивидуально. В этом случае он выполняет только свои действия, а действия других участников противоаварийных действий выполняет компьютер.

Инструктор может задать режим коллективной тренировки. В этом случае участники противоаварийных действий могут тренироваться одновременно, перемещаясь в пространстве на своих компьютерах. Если на тренировке присутствуют не все участники противоаварийных действий, за отсутствующих «играет» компьютер.

Коллективная тренировка в видео пространстве позволяет отрабатывать взаимодействие персонала при локализации и ликвидации аварии, ориентацию персонала в пространстве производственного объекта, отработку моторных навыков и оперативного принятия решений при изменении ситуации.

Инструктор может выбрать режим «свободный коллектив». В этом случае при неукомплектованном составе участников противоаварийных действий лицо ответственное за организацию работ, руководя процессом ликвидации аварии, должно обеспечить правильность и своевременность выполнения действий. Такой режим позволяет отрабатывать взаимозаменяемость персонала.

Инструктор может выбрать режим наблюдения и контролировать процесс обучения, перемещаясь по пространству, может включить режим «запись игры» и по ее окончанию произвести «разбор полета».

Компьютер ведет журнал, который позволяет контролировать процесс обучения и тренировок. Для каждого тренируемого уровень его готовности определяется по всем аварийным ситуациям, в ликвидации которых он принимал участие.

Повышение готовности персонала технологических установок к локализации и ликвидации аварий позволяет существенно снизить ожидаемые потери от них.

**СЕКЦІЯ 6**  
**СТАЛИЙ РОЗВИТОК РЕГІОНІВ**

**ПОДХОДЫ К ОЦЕНКЕ УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ**

Статюха Г.А., Бондаренко Е.С.

Национальный технический университет Украины «КПИ», gen.statyukha@mail.ru

Планы действий «Повестка дня на 21 столетие» (1992 г.) и Йоханнесбургский план выполнения решений (2002 г.) выделяют необходимость разработки систем показателей для оценки достигнутого прогресса и содействия устойчивому развитию. На сегодняшний день межправительственными, национальными, региональными, научными и негосударственными организациями разработаны и используются разнообразные индикаторы и индексы устойчивого развития. Эти метрики оценивания устойчивого развития отличаются аспектами, масштабом анализируемых объектов, сложностью, уровнем агрегирования, обобщенностью, базовой концепцией и т.д., и предназначены для усовершенствования принятия решений на всех уровнях общественной жизни ради устойчивого развития.

**Оценка экологической устойчивости территорий.** Экологическая устойчивость территории – оценка *экологичности* обращения с природными ресурсами и отходами жизнедеятельности Человека, состояния окружающей среды и антропогенной нагрузки на нее, эффективности механизмов защиты окружающей природной среды. Украинский региональный индекс экологической устойчивости (URESI 2008) разработан с целью оценки экологической устойчивости регионов Украины. Структура и наполненность индекса базируются на предыдущих разработках и концептуальных наработках под руководством академика М.З. Згуровского в рамках научно-технической программы НТУУ «КПИ» «Устойчивое развитие» [1]. Индекс сформирован на основе причинной модели «движущие силы – давление – состояние – воздействие – реакция» с привнесением некоторых элементов модели экологической уязвимости «опасности – сопротивляемость – повреждение» с учетом особенностей оценки экологической устойчивости и национальных приоритетов в экологической политике. URESI охватывает такие компоненты как (1) «Экологические системы», (2) «Экологическая нагрузка», (3) «Опасности» и (4) «Региональное экологическое управление», которые, в свою очередь, содержат 13 индикаторов.

Была проведена оценка экологической устойчивости 23 регионов Украины и двух условных агломератов (г. Киев и Киевская область – агломерат «Киевская область» и г. Севастополь и АР Крым – агломерат «Крым»), а именно получены значения 78 показателей на основе около 150 наборов данных, рассчитаны значения индикаторов экологической устойчивости, проведена их нормализация и определены значения компонентов и индекса URESI 2008. Как показывает кластерный анализ, оцениваемые объекты формируют четыре кластера: кластер «Высокая экологическая устойчивость» охватывает Волынскую и Черниговскую области, кластер «Средняя экологическая устойчивость» – Житомирскую, Закарпатскую, Ивано-Франковскую, Кировоградскую, Львовскую, Николаевскую, Полтавскую, Ровенскую, Сумскую, Тернопольскую, Харьковскую, Херсонскую, Хмельницкую, Черновицкую и Черкасскую области, кластер «Низкая экологическая устойчивость» – Винницкую, Днепропетровскую, Запорожскую, Луганскую и Одесскую области, а также агломераты «Киевская область» и «Крым», и кластер «Сверхнизкая экологическая устойчивость» – Донецкую область. Такая агрегированная оценка как URESI 2008 не позволяет определить конкретные проблемы региона. Здесь важную роль в интерпретации результатов и поддержке принятия решений играют профили экологической устойчивости регионов, содержащие визуализированные результаты оценки от показателей до индекса.

**Оценка экологической уязвимости территорий.** Экологическое управление тесно связано с процессами устойчивого развития и является неотъемлемой частью экономической и социальной систем любой территории. Уязвимость может быть той метрикой, которая определяет насколько отвечают принципам устойчивого развития экономические, экологические и социальные процессы для оцениваемой территории. Оценка экологической уязвимости территории, наряду с экономической и социальной уязвимостью, дает возможность охарактеризовать сопротивляемость этой территории к внешним и внутренним воздействиям, спрогнозировать возможную реакцию на будущие события.

Индекс экологической уязвимости Причерноморья и Приазовья (BREVI 2008) разработан для оценивания экологической уязвимости приморских регионов Украины с учетом национальных природоохранных приоритетов и особенностей оцениваемых объектов. Региональная модель оценки сформирована на основе трех аспектов экологической уязвимости (опасности – сопротивляемость – повреждение) с использованием 40 индикаторов. Обработка наборов данных для 2006–2008 гг., их преобразование и масштабирование дала возможность получить значения индикаторов экологической уязвимости для АР Крым, Донецкой, Запорожской, Николаевской, Одесской и Херсонской областей. На основе значений индикаторов определены значения аспектов и категорий принятия решений, рейтинг приморских регионов Украины от наиболее до наименее экологически уязвимых (табл. 1) и профили экологической уязвимости этих регионов [3].

*Таблица 1 – Рейтинг экологической уязвимости приморских регионов Украины по данным 2006–2008 гг.*

<i>Регион</i>	<i>Значение BREVI 2008</i>	<i>Уровень эко-уязвимости</i>
Николаевская и Херсонская области	3,43	Высокий
Донецкая область	4,00	Высокий
Запорожская и Одесская области	4,10	Критический
АР Крым	4,55	Критический

**Оценка устойчивости прибрежных зон.** Одним из направлений в сфере реализации парадигмы устойчивого развития является комплексное управление прибрежными зонами (КУПЗ). Этот подход характеризуется конвергенцией различных знаний и достижений в области экологии моря и прибрежных зон, развитием законодательных инициатив, применением системной методологии на всех уровнях и постановкой конкретных целей. Восемь принципов «хорошего» КУПЗ, позволяют сформулировать специфические задачи управления, в т.ч. в рамках международного сотрудничества – подхода «региональные моря». Успешный опыт использования методологии КУПЗ в Европе показывает ее эффективность и возможность применения в оценке экологической устойчивости приморских регионов Украины. Европейская методология была адаптирована с целью обеспечения актуальности в условиях приморских зон Украины и согласования с действующей сетью сбора статистических и экологических данных. Разработана система индикаторов экологической устойчивости, составляющие которой агрегируются в единый показатель – индекс ICZMU-45. В качестве процедуры агрегирования используется методика, построенная ранее для получения индекса экологической устойчивости. Особое внимание уделено разработке моделей обработки наборов данных по состоянию прибрежных зон для расчета индекса и перспективе применения циклической модели «морская экосистема – смык отходов» и ее интеграции в разработанную индикаторную систему оценки. Исследование продолжает работы НТУУ «КПИ» по оценке устойчивого развития и поддерживается Мировым центром данных по геоинформатике и устойчивому развитию (WDC-Ukraine), а также Сетью университетов Черноморского региона (BSUN).

**Оценка экологического риска при проектировании техногенных объектов.** В настоящее время отсутствует эффективная методика, позволяющая количественно оценить

состояние урбанизированной экологической системы и соответственно говорить об надежных показателях устойчивого развития. При внедрении нового объекта необходимо провести оценку его влияния на экосистему, исследовать его взаимодействие с основными компонентами экосистемы в условиях неопределенности и оценить качество экосистемы после его внедрения. Урбанизированные экосистемы состоят из огромного числа разнородных элементов, объединенных множеством связей и отношений, полностью изучить которые практически невозможно. Сегодняшняя практика определения экологического риска ориентируется в первую очередь на человека как реципиента. При этом допустимые границы влияний, включаемые в оценку экологических опасностей, определяются только по отношению к человеку, а другие компоненты окружающей природной среды (возможно, больше чувствительные) не рассматриваются. Это связано, прежде всего, с отсутствием способа количественной оценки. Поскольку экологический риск – это количественная или / и качественная оценка экологической опасности неблагоприятных воздействий на окружающую среду, то задача разработки универсального алгоритма, включающего возможность количественной оценки экологического риска при проектировании техногенного объекта является актуальной, иными словами, есть необходимость формирования такого показателя качества (индекса), который будет обеспечивать количественную характеристику явления в единстве с его качественным определением.

Такой системой показателей является разработанная совокупность индексов загрязнения компонентов экологической системы [4]. Разработанная система интегральных показателей, по сути, формируется на основе индекса качества соответствующего компонента внутри составляющей (химическая) и класса (состав). Принцип формирования индексов на основе функции желательности позволяет исключить неопределенность по двум вопросам. Во-первых, он максимально использует сложившуюся практику при проведении оценки воздействий на окружающую среду, а безразмерность индексов облегчает их интерпретацию при применении в системах принятия решений, а также упрощает их сопоставление. Во-вторых, шкала для измерения индексов и оценивания качества компонентов окружающей среды является универсальной (имеет диапазон от 0 до 1), линейной и пропорциональной. При этом система остается открытой и может дополняться новыми индексами для физической или биотической составляющих. Так как количественной мерой, которая определяет экологическую безопасность экосистем, является риск, поэтому необходимо найти метод сравнения и сопоставления такой экологической информации, которая с одной стороны характеризует качество экосистемы (система индексов), а с другой – экологическую безопасность этой экосистемы (экологический риск). Экологический риск в экологии не может рассматриваться как однодirectionalный показатель (риск здоровья человека) исходя из сложности экосистемы в целом. Если измерять степень влияния значениями индексов качества экосистемы как мерой количественной оценки отклонения от нормируемого состояния, то соответствующее значение экологического риска будет измерением данного типа влияния. Поэтому показатель экологического риска необходимо связать с другими оценками качества состояния экосистем, например системой индексов. Предложена зависимость определения риска методом «индекс-риска», представляющая собой функциональную зависимость и устанавливающая связь значения риска изменений в компоненте окружающей природной среды от внедрения техногенного объекта и значения функции желательности. Обобщая индексные оценки, экологический риск можно рассчитать согласно (1):

$$r = 4,99 \cdot 10^{-6} \cdot e^{-7,557 \cdot (1-ind)} \quad (1)$$

где  $r$  – экологический риск;  $ind$  – индекс опасности, при оценке отдельных влияний принять  $ind = I_i$ ,  $r = R_i$  ( $i$  – учитываемые составляющие экосистемы), рассчитывается по зависимости (2);  $R_i$  – экологический риск  $i$ -го влияния,

$$ind = 1 - D = \sqrt[k]{\prod_{i=1}^k I_i} = \sqrt[k]{\prod_{i=1}^k (1 - d_i)} = \sqrt[k]{\prod_{i=1}^k 1 - e^{-(e^{-y'_i})}} \quad (2)$$

где  $D$  – обобщенный показатель качества;  $I_i$  – индекс  $i$ -го влияния на экосистему;  $d_i$  – функция желательности по  $i$  – ому компоненту экосистемы;  $y'_i$  – некоторая безразмерная величина, которая связана с  $y_i$  (количественный показатель оценки) и определяется для каждого влияния на экосистему. Проведение оценки уровня риска осуществляется соответственно шкале оценки экологических рисков и используя рекомендации по классификации уровней риска. Предложенный алгоритм оценки экологического риска внедрения техногенного объекта на основе системы индексов качества экосистемы, в частности, индекса опасности как количественной оценки влияния на компоненты окружающей среды, дает возможность системно оценить уровень экологической безопасности. При таком подходе закладываются рычаги управления экологической безопасностью уже на этапе проектирования техногенного объекта.

**Оценка ресурсосбережения производственных систем с целью эффективного управления.** В сфере оценки устойчивого развития разномасштабных объектов, в том числе экологической устойчивости, многообещающие возможности имеет применение концепции сильной устойчивости и теории природного капитала. С точки зрения сильной устойчивости созданный человеком капитал не является заменителем природного, они лишь дополняют друг друга, а на природный капитал накладывается условие неуменьшения его запасов. Одно из наиболее глубоких исследований в области анализа связей компонентов природного капитала принадлежит Д.И. Люри, развившему идею ресурсных циклов. Рассмотрение процессов в виде циклов «потребление – восстановление» природных ресурсов позволяет построить приближенную модель круговорота компонентов природных ресурсов в некоторой системе и возможность разработки индикатора устойчивого развития этой системы, с помощью которого можно осуществлять управление, в частности на уровне отдельных производственных систем.

Ранее предложена оценка, характеризующая способность оцениваемой системы восстанавливать и компенсировать использованные ресурсы – коэффициент устойчивого ресурсопотребления  $\eta$  [5]. Этот показатель представляет собой отношение затрат на использование сырья (добыча, транспортировка и т.п.), изготовление и потребление продукции (производство, доставка потребителю и т.п.) к затратам на переработку отходов, утилизацию продуктов, технологию природной очистки, исправление ранее нанесенного природе ущерба. Несложно отметить, что при рассчитанной оценке  $\eta > 1$  система, с точки зрения сохранения её потенциала, будет неустойчивой: потребление природных ресурсов происходит интенсивнее, чем их восстановление. При  $\eta = 1$  – система находится на границе устойчивости; при  $\eta < 1$  – система устойчива: восстановление ресурсов природы идет опережающим темпом. Очевидно, что все решения должны быть таковы, чтобы добиваться значения  $\eta \leq 1$ , как за счет снижения затрат ресурсов и совершенствования технологий производства, так и за счет увеличения затрат на восстановление и пополнение ресурсов.

Подобный показатель может быть построен на основе монетаризованных влияний на человека и природу в рамках оценки производственных систем. Модифицированный коэффициент устойчивого ресурсопотребления  $\eta^*$  отличается от вышерассмотренного тем, что представляет собой отношение затрат на сырье, изготовление и потребление продукции к совокупным затратам на сырье, изготовление и потребление продукции, переработку отходов, утилизацию продукции и т.д. Критическое значение этого показателя представляется возможным рассчитывать как

$$\eta_{kp}^* = (C_R + C_P) / (C_R + C_P + C_{RD} + C_{HH} + C_{ES}), \quad (3)$$

где  $C_R$  – затраты на использование сырья;  $C_P$  – затраты на изготовление и потребление продукции;  $C_{RD}$  – необходимые вложения в восстановление ресурсов в единицах истощения вовлеченных ресурсов (например, для минеральных ресурсов это дополнительная энергия необходимая в будущем на их добычу);  $C_{HN}$  – необходимые вложения в восстановление здоровья человека в единицах ущерба здоровью, нанесенного производственной системой (отрицательное значение годов качественной жизни, QALYs);  $C_{ES}$  – необходимые вложения в восстановление природных систем в единицах ущерба экосистемам, нанесенного оцениваемой производственной системой (гектар-годы, скорректированные относительно потери биоразнообразия, BAHYs). Денежный эквивалент затрат на восстановление здоровья человека и экосистем, т.е. монетаризованное выражение единиц QALYs и BAHYs приняты здесь согласно работам Бо Вейдема. Если индикатор  $\eta^*$  принадлежит интервалу  $(\eta_{kp}^*, 1]$ , то оцениваемая система является неустойчивой: ущерб природным ресурсам, здоровью человека и природы не восполняется, и, если индикатор  $\eta^*$  принадлежит интервалу  $(0, \eta_{kp}^*]$ , то оцениваемая система устойчива. Кроме того, оценка нескольких производственных систем, при условии выбора одной и той же функциональной единицы, показывает, какая из систем является наиболее устойчивой, а именно система со значением модифицированного коэффициента  $\eta^*$  наиболее близким к нулю. Расчет критического значения представленного коэффициента удобно проводить на основе оценки жизненного цикла, поскольку этот инструмент позволяет охватить влияния оцениваемой производственной системы на человека и природу от добычи сырья до утилизации продукта. С точки зрения корпоративной социальной ответственности определение критического значения модифицированного коэффициента устойчивого ресурсопотребления может оказаться эффективным для оценки минимально необходимых вложений в восстановление окружающей среды на функциональную единицу производственной системы.

Светом в конце тоннеля в проблеме оценивания системного взаимодействия устойчивого развития и нижних уровней иерархии общества можно считать ресурсосберегающий подход. Здесь же, по-видимому, скрывается и решение задачи управления технологическими системами по показателям устойчивости на нижнем уровне иерархии, когда учет значений индексов устойчивости высших уровней общественного развития осуществляется хотя бы в виде ограничений.

1. *Analysis of Sustainable Development – Global and Region Contexts: in 2 p. [Electron. resource] / ICSU and others; sci. adv. M.Z. Zgurovsky. – K.: NTUU "KPI", 2009. – p. 1. Global analysis of quality of life and security of world population. – Access link: <http://wdc.org.ua/sites/default/files/sd2009-P1-Full-en.pdf>*
2. *Analysis of Sustainable Development – Global and Region Contexts: in 2 p. [Electron. resource] / ICSU and others; sci. adv. M.Z. Zgurovsky. – K.: NTUU "KPI", 2009. – p. 2. Ukraine in the sustainable development indicator analysis. – Access link: [http://wdc.org.ua/sites/default/files/sd2009-P2-Full-en\\_0.pdf](http://wdc.org.ua/sites/default/files/sd2009-P2-Full-en_0.pdf)*
3. *Оценка екологічної уязвимості приморських регіонів України на основі даних 2006–2008 років [Текст] / Г.А. Статюха, І.Н. Джигирей, Д.В. Чашник, Р.П. Мельничук // Вост.-євр. ж. передових технологій. – 2010. – № 4/8 (46) – С. 8–14. (на укр. языке)*
4. *Бойко Т.В. К вопросу определения рисков при оценке воздействий техногенных объектов на окружающую среду [Текст] / Т.В. Бойко // Вост.-евр. ж. передовых технологий. – 2008. – №4/6 (34): Техн.-я неорг. орг. веществ и экология. – С.37–41.*
5. *Statyukha, G. Sustainable resource consumption assessment on LCA's basis [Text] / G. Statyukha, B. Komarysta and I. Dzhygyrey // Comp. Aided Chem. Eng. – 2009. – 26. – PP. 1111-1116.*

## ПОРІВНЯННЯ ПІДПРИЄМСТВ З ТОЧКИ ЗОРУ СТАЛОГО РОЗВИТКУ З ВИКОРИСТАННЯМ ЗВЕДЕНОГО ІНДЕКСУ

Климюк О.О., Безносик Ю.О.

Національний технічний університет України «КПІ», olgaklmk@gmail.ru

На сьогоднішній день існують різноманітні критерії оцінки сталого розвитку окремих підприємств. Вони пропонують використовувати численні індекси сталості, які, як правило, вимірюються в різних одиницях. В той час коли важливо оцінювати сталість за допомогою певних показників, інколи буває важко зробити порівняння серед підприємств на основі великої кількості виконавчих вимірюваннях.

Дана робота представляє модель проектування зведеніх індексів сталого розвитку, які описували б діяльність підприємств відповідно до трьох складових сталого розвитку – економічної, екологічної та соціальної. У роботі наведена процедура розрахунку індексів, яка дозволила б порівняння підприємств у визначеному секторі стосовно сталості виконуваної роботи і наведений приклад ефективності запропонованої моделі, в якому три компанії, певного сектору, порівняні відносно сталості їхньої діяльності. Мета цієї роботи полягає у тому, що запропонована модель, може виконуватися та застосовуватися не тільки для оцінки лише однієї окремої компанії, а також для оцінки та порівняння двох та більше підприємств.

Запропонована модель зменшує кількість показників за рахунок їхнього об'єднання у зведений індекс сталого розвитку (*a composite sustainable development index*) –  $I_{CSD}$ . Основну ієархію показників  $I_{CSD}$  зображену на рис. 1. Процедура розрахунку  $I_{CSD}$  поділяється на кілька частин: відбір показників, групування, оцінка показників, визначення вагомості, нормалізація показників та їхнє об'єднання у  $I_{CSD}$ .

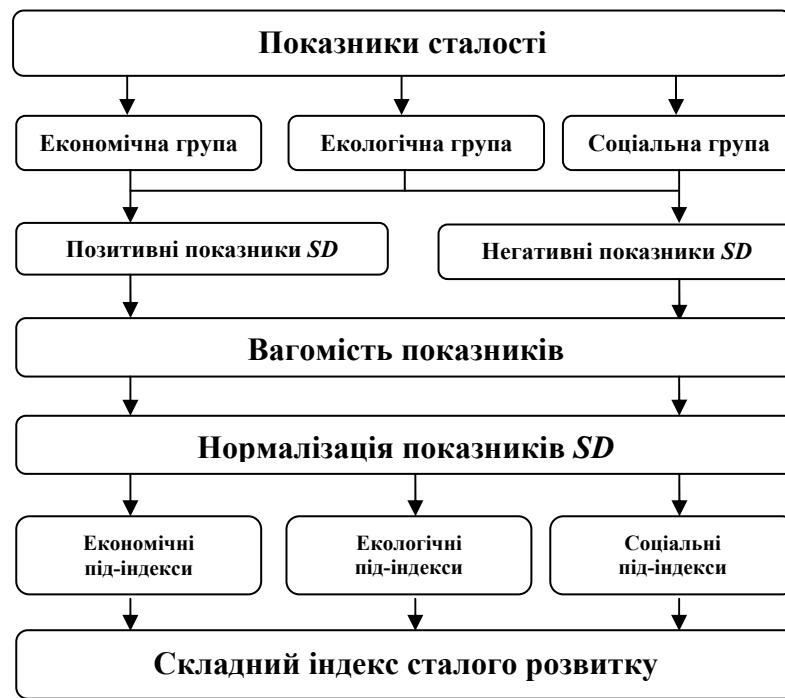


Рис. 1 – Схема розрахунку зведеного індексу сталого розвитку

Вибір та групування показників проводиться відповідно до найважливіших аспектів сталості (економічний  $j=1$ , екологічний  $j=2$ , соціальний  $j=3$ ). Економічна група показників стосується впливу підприємства на економічне благополуччя зацікавлених у цьому сторін та на економічні системи місцевих, національних та глобальних рівнів. Вони охоплюють всі аспекти економічних взаємодій, включаючи традиційні міри, що застосовуються у фінансових бухгалтерських звітах. Екологічна група показників стосується існуючих

природних систем, включаючи екосистему, землю, повітря та воду. Соціальна група показників відображає відношення підприємства до управління її власних працівників, постачальників, підрядних та клієнтів, а також її вплив на суспільство в цілому. Для кожної групи  $j$ , розглядаються індикатори  $i$  позитивної роботи  $\Gamma_{A,ji}^+$  в перспективі розвитку (тобто індикатори, збільшення яких позитивно впливає на сталий розвиток). Індикатори негативної роботи  $\Gamma_{A,ji}$  також визначаються на даному етапі. Наприклад, зрозуміло, що збільшення викидів у атмосферу на одиницю виробництва має негативний вплив (показник типу «чим менше, тим краще»), в той час як збільшення поточного доходу – позитивний вплив на показники підприємства (показник типу «чим більше, тим краще»).

Для розрахунку сталості, існує певна кількість показників, які використовуються, щоб оцінити просування підприємства до сталого розвитку. Індивідуальну важливість цих показників дуже важко визначити з достатньою точністю. Щоб оцінити значення показників, спеціалісти часто стикаються із нестачею даних. Тому, попарна техніка порівнювання використовується в наступній процедурній частині обчислення  $I_{CSB}$ , щоб отримати практично відносні значення кожного показника.

Попарна техніка порівняння, заснована на Методі Аналіза Ієрархій (MAI). Будемо вважати, що показники  $N$  сталого розвитку, розглядають з метою визначення кількості відносних значень кожного показника відносно усіх інших показників групи  $j$ . Це виконується за рахунок порівняння кожної пари показників. Внаслідок випливає питання, який з двох показників  $i$  та  $k$  є важливішим відносно сталого розвитку компанії. Інтенсивність переваги виражена в масштабі фактора від 1 до 9. Оцінка 1 вказує на рівність між двома показниками, в той час як 9 вказує на те, що один з показників у 9 разів важливіший того, з яким порівнюється. Таке попарне порівняння дає додатню матрицю  $A (N \times N)$  де діагональ  $a_{ik}=1$  та протилежна властивість  $a_{ki}=(1/a_{ik}), i, k=1, \dots, n$ . Припускають, якщо показник  $i$  у  $p$ -разів важливіший показника  $k$ , тоді, відповідно, показник  $k$  у  $1/p$ -разів важливіший показника  $i$ . Швидкий шлях знайти нормалізоване значення кожного показника це нормалізація кожної колонки матриці  $A$  (розділяючи відносні значення показників на суми відносних значень у колонках), а потім виводимо середнє значення по рядках; ця середня колонка є нормалізованим значенням вектору  $W$ , що містить значення  $(W_{ij})$  обраного показника сталості.

Головна складність поєднання індикаторів у  $I_{CSB}$  полягає у тому, що індикатори можуть бути виражені в різних одиницях. Відповідна процедура нормалізації може використовувати систему рівнянь (1-2):

$$I_{N,ijt}^+ = \frac{I_{A,ijt}^+ - I_{\min, jt}^+}{I_{\max, jt}^+ - I_{\min, jt}^+} \quad I_{N,ijt}^- = 1 - \frac{I_{A,ijt}^- - I_{\min, jt}^-}{I_{\max, jt}^- - I_{\min, jt}^-} \quad (1-2)$$

де  $\Gamma_{N,ijt}^+$  є нормалізованим індикатором  $i$  типу «чим більше, тим краще» для групи індикаторів  $j$  для часу  $t$  та  $\Gamma_{N,ijt}^-$  є нормалізованим індикатором  $i$  типу «чим менше, тим краще» для групи індикаторів  $j$  для того ж часу  $t$ .

Таким чином можна об'єднувати величини різних запропонованих типів, з різними одиницями вимірювання (тобто фізичні, економічні і т.д.). Однією перевагою запропонованої нормалізації показників – сумісність різних показників, так як всі показники нормалізовані.

Розрахунок  $I_{CSB}$  – це поступова процедура групування різних основних індексів в під-індекс стійкості ( $I_{S,j}$ ) для кожної групи індикаторів стійкості  $j$ . Під-індекси можуть бути отримані як показано в рівнянні (3)

$$I_{S,jt} = \sum_{jlt}^n W_{jt} I_{N,ijt}^+ + \sum_{jlt}^n W_{jt} I_{N,ijt}^- \quad (3)$$

$$\sum_{ji}^n W_{ji} = 1, \quad W_{ji} \geq 0$$

де  $I_s$  є під-індексом сталості для групи показників  $j$  для часу  $t$ ;  $W_{ji}$  вагомість показників  $i$  для групи показників сталості  $j$  та відображає важливість цього показника в оцінці компанії.

Зрештою, усі під-індекси об'єднуються у складний індекс сталого розвитку  $I_{CSD}$ :

$$I_{CSD,t} = \sum_{jt}^n W_j \times I_{s,jt} \quad (4)$$

де  $W_j$  позначає фактор, що представляє априорне значення показників сталого розвитку групи  $j$ .

Ці значення повинні відображати пріоритети на думку осіб, приймаючих рішення. В заключному обчисленні  $I_{CSD}$  можна розглянути підхід, який використовує запропоновані значення. Ці значення відображають важливість економічних, екологічних та соціальних результатів діяльності компанії.

Розглядаючи доступність надійних даних, ми обрали три підприємства, які займаються переробкою твердих побутових відходів (м. Київ «Енергія», м. Тулуса «Гранд», м. Ле Ман «Метрополь») щоб оцінити і порівняти їхню діяльність. Щоб дослідити успішність сталості, запропонована модель була застосована до даних підприємств та  $I_{CSD}$  з його під-індексами був представлений за період 2007-2010 років. Вихідні дані, використані в роботі, були отримані із, щорічних звітів. Вони включають перехресні таблиці, які дозволяють користувачам ясно зрозуміти рівень звітності. Обрані підприємства були оцінені і порівняні відповідно до сталості, використовуючи економічні, екологічні та соціальні під-індекси, які були складені з багатьох окремих показників. Мета полягала в тому, щоб визначити в якої компанії, була краща робота у відбраних роках 2007-2010 з точки зору сталого розвитку.

Для трьох підприємств, які досліджувалися з точки зору сталого розвитку, було відібрано ряд показників сталості. Для кожного показника було присвоєно свій символ та одиницю вимірювання. Економічні показники підприємств: Грошовий потік; Частка витрат на розвиток та дослідження; Вартість досліджень; Вартість екологічних штрафів та штрафів безпеки. Екологічні показники підприємств: Оксид вуглеводню; Оксид азоту; Діоксид сірки; Тверді частинки; Бензол; Толуол. Соціальні показники підприємств: Частка соціальних інвестицій у валовому прибутку; Частка нещасних випадків на одного працівника; Частота травм працівників та підрядників.

Щоб визначити вагомість відбраних показників було виконане попарне порівняння показників згідно їхнього впливу на сталість підприємств. Базуючись на попарному порівнянні, були розраховані середні значення факторів. Розраховуючи під-індекси сталості у часі  $t$  (року) для економічної, екологічної та соціальної групи показників, нормалізоване значення кожного з показників було помножене на його розраховану вагомість використовуючи рівняння (3). Останній крок моделювання представляє об'єднання отриманих під-індексів сталості в складний індекс сталого розвитку  $I_{CSD}$  для кожного проміжку часу (року)  $t$  використовуючи рівняння 4. В заключному обчисленні  $I_{CSD}$ , кожний під-індекс сталості був перемножений з його вагомістю, яка відображає його важливість у економічній, екологічній та соціальній групі показників сталого розвитку підприємства. Вагомість, характерна кожному під-індексу, має також розраховану експертну оцінку, використовуючи попарне порівняння під-індексів у MAI. Результати в табл. 1 вказують на найважливіший екологічний під-індекс, якому слідують економічні та соціальні під-індекси.

Чотири економічних, дев'ять екологічних та три соціальних показників були об'єднані в під-індекси сталості обраних підприємств і нарешті в складний індекс сталого розвитку, як представлено в табл. 2. Зміна під-індексів сталості в інтервалі часу 2007-2010 років представлено графічно на рис. 2.

## Сталий розвиток регіонів

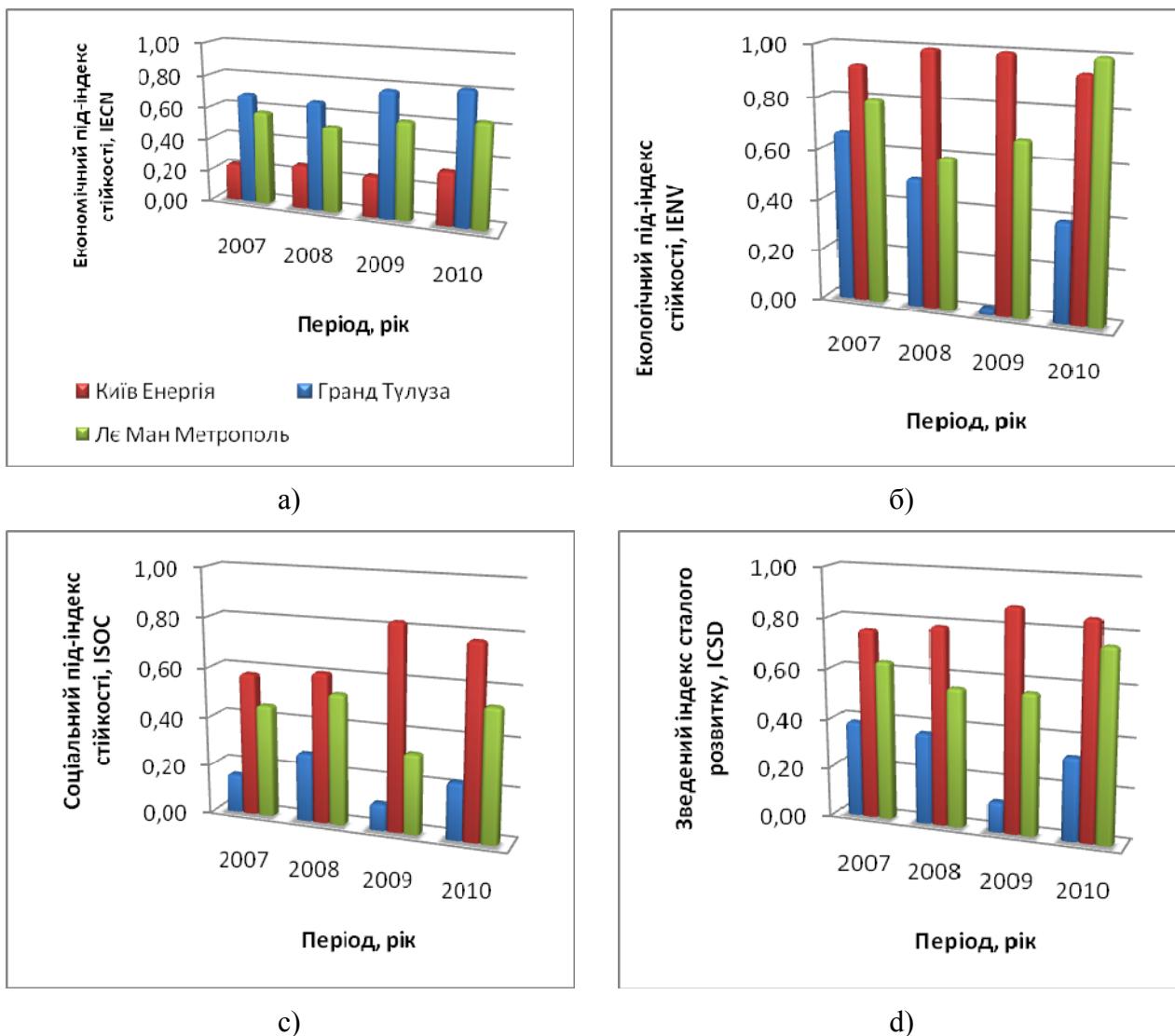


Рис. 2 – Зміна під-індексів сталості та складного індексу сталого розвитку в період часу 2007-2010 років

$I_{CSD}$  та усі під-індекси показують діяльність підприємства в одному році у порівнянні з іншими роками та іншими підприємствами відповідно. Відносно високий  $I_{CSD}$  може бути як міра відносної ймовірності того, що підприємство буде здатним досягти та витримати сприятливих життезадатних умов протягом кількох років у майбутньому. За результатами досліджень, очевидно, що  $I_{CSD}$  різний для підприємств, оцінених у вибраний період часу. Порівнюючи виbrane підприємства, бачимо, що  $I_{CSD}$  показує кращі результати для підприємства м. Тулуси.

*Таблиця 1 – Матриця попарного порівняння оцінки та розрахунку вагомості під-індексів сталості*

Під-індекси	$I_{ECN}$	$I_{ENV}$	$I_{SOC}$	
Економічний під індекс, $I_{ECN}$	1	$\frac{1}{2}$	2	
Екологічний під індекс, $I_{ENV}$	2	1	1	
Соціальний під індекс, $I_{SOC}$	$\frac{1}{2}$	1	1	
$\Sigma$	3,5	2,5	4,0	Вагомість
Економічний під індекс, $I_{ECN}$	0,286	0,20	0,50	0,329
Екологічний під індекс, $I_{ENV}$	0,571	0,40	0,25	0,407
Соціальний під індекс, $I_{SOC}$	0,143	0,40	0,25	0,264

**Таблиця 2 –  $I_{CSD}$  та під-індекси сталості для економічної ( $I_{ECN}$ ), екологічної ( $I_{ENV}$ ) та соціальної ( $I_{SOC}$ ) групи показників**

П-ін	м. Київ «Енергія»				м. Тулуса «Гранд»				м. Ле Ман «Метрополь»			
	2007	2008	2009	2010	2007	2008	2009	2010	2007	2008	2009	2010
$I_{ECN}$	0,23	0,27	0,25	0,33	0,69	0,67	0,78	0,82	0,58	0,53	0,60	0,64
$I_{ENV}$	0,67	0,51	0,02	0,39	0,93	1,00	1,00	0,94	0,80	0,59	0,68	1,00
$I_{SOC}$	0,15	0,28	0,11	0,23	0,58	0,61	0,83	0,78	0,46	0,53	0,33	0,54
$I_{CSD}$	<b>0,39</b>	<b>0,37</b>	<b>0,12</b>	<b>0,33</b>	<b>0,76</b>	<b>0,79</b>	<b>0,88</b>	<b>0,85</b>	<b>0,64</b>	<b>0,56</b>	<b>0,56</b>	<b>0,76</b>

Важлива особливість  $I_{CSD}$  – можливість порівняння підприємств у визначеному секторі з точки зору сталого розвитку. Тому,  $I_{CSD}$  можливо використовувати в якості критеріїв, за якими підприємства можуть бути оцінені згідно їх сталої діяльності. Цей індекс, може підтримувати інвесторів, щоб вкладати капітал в розвиток підприємства.

## **ОЦІНКА ЕКОЛОГІЧНОГО АСПЕКТУ СТАЛОГО РОЗВИТКУ ПРОМИСЛОВИХ ОБ'ЄКТІВ**

Бойко Т.В., Комариста Б.М., Бендюг В.І.

Національний технічний університет України «КПІ», Vladys77@gmail.com

Теорія і практика підходів щодо управління стратегією сталого розвитку на основі визначення фінансової стратегії відповідає практиці господарської діяльності більшості підприємств і поєднує у собі наступні риси:

- визначення економічного стану підприємства шляхом проведення фінансового аналізу;
- формування сценаріїв оперативних та стратегічних управлінських рішень з метою поліпшення економічної ситуації;
- визначення змін в економічному стані впродовж звітного періоду;
- виявлення й аналіз факторів, які впливають на формування незадовільного економічного стану підприємства;
- прогноз й оцінка загальних тенденцій зміни економічного стану;
- аналіз соціальної діяльності підприємства;
- аналіз екологічної діяльності підприємства.

Результатом такої діяльності є надання оцінки підприємству, як уособленню концепції сталого розвитку.

Таким чином, стратегічною метою сталого розвитку України є досягнення збалансованості співіснування природного середовища, держави, суспільства і підприємництва у соціальному, економічному та екологічному вимірах.

До оцінки екологічного аспекту діяльності промислового підприємства відноситься в першу чергу рівень забруднення ним навколошнього середовища через шкідливі викиди. Проте велика кількість промислових об'єктів також містить в собі потенційну загрозу позанормових разових викидів великої кількості шкідливих речовин, вибухів та пожеж внаслідок виникнення аварійних ситуацій, які можуть перетворитись на техногенні катастрофи в залежності від спричинених ними шкідливих наслідків [1]. Саме оцінці потенційної загрози таких негативних наслідків для навколошнього середовища та людини від промислових об'єктів і присвячена наша робота.

Нами розроблена методологія оцінки ризику діяльності промислових об'єктів [2]. За допомогою даної методології можна проводити кількісну оцінку рівня небезпеки промислового об'єкту на основі розробленого показника - індексу відносної небезпечності  $D_{RL}$ . В залежності від отримано значення даного індексу виконується віднесення об'єкту до однієї з п'яти категорій небезпеки – від безпечноного, до особливо небезпечного об'єкту.

Рівень небезпеки промислового підприємства в цілому може бути оцінений по максимальному небезпечному його об'єкту.

За допомогою розробленої нами методології були проведені розрахунки потенційної небезпеки промислового об'єкту Газотурбінної Електростанції Комбінованого Циклу (ГТС КЦ) на стадії проєктування. ГТС КЦ входить до складу ВАТ «Алчевський металургійний комбінат».

Аварійні ситуації на об'єкті можуть виникнути в разі стихійного лиха, вибуху, пожежі.

Згідно з даними фірми Mitsubishi при експлуатації технологічного обладнання ГТС КЦ можуть виникнути такі аварійні ситуації:

- аварійне відключення газової турбіни;
- відключення подачі паливного газу;
- відключення подачі охолоджуючої води, в тому числі в газоохолоджувачі;
- відключення котла-утилізатора;
- відключення парової турбіни;
- припинення подачі азоту.

При аварійних ситуаціях проводиться автоматичне відключення газової турбіни, при цьому весь потік газу, що проходить через газовий компресор, скидається в газоохолоджувач і потім прямує на всмоктувач електрофільтру.

Для визначення потенційної небезпеки проектованого об'єкту, згідно з нашою методологією, розглядається максимально можливий негативний сценарій розвитку аварії [3]. В даному випадку це розрив трубопроводу з імовірною пожежею чи вибухом усього об'єму газової суміші в трубопроводі. Результати розрахунку потенційної небезпеки об'єкту зведені в табл. 1.

Таблиця 1 – Показники небезпеки промислового об'єкту

Індекси небезпеки зовнішніх факторів	
Індекс урахування небезпеки виникнення землетрусів:	0,5
Індекс урахування небезпеки розчинення карсту:	0,8
Індекс урахування небезпеки знаходження на лесових ґрунтах:	0,5
Індекс урахування небезпеки вітрового навантаження:	0,531
Індекс урахування пожежовибухонебезпеки приміщення:	0,9
Характеристика небезпеки об'єкту	
Індекс ризику виникнення аварії:	0,19
Індекс потенційного збитку:	0,132
Індекс відносної небезпеки:	0,0845
Індекс регіональної небезпеки:	0,165
Категорія небезпеки:	Малонебезпечний об'єкт
Масштаб небезпеки:	Об'єктний

Згідно з отриманими результатами газотурбінна електростанція комбінованого циклу може бути віднесена до другої категорії небезпеки - мало небезпечний об'єкт з об'єктним масштабом потенційної небезпеки. У відповідності з цим спорудження ГТС КЦ можна проводити згідно з розробленим проєктом на обраному промисловому майданчику і дотриманням меж санітарно-захисної зони.

Проектована ГТС КЦ потужністю 454,5 МВт в якості палива при виробленні електроенергії буде використовувати доменний, коксовий та конвертерний гази, спалювання яких буде проводитися на більш ефективних пальниках, ніж спалювання на факелі, що дає значне зниження викидів діоксиду азоту і відповідно зниження фонових концентрацій.

Згідно з зазначеним вище та отриманими результатами проєктований промисловий об'єкт за екологічною складовою відповідає основним принципам сталого розвитку, тому що

проектований об'єкт має припустимий рівень потенційної аварійної небезпеки, а також його впровадження призведе до значного зниження рівня викидів NO<sub>2</sub>.

Проектований об'єкт відповідає принципам економічної складової сталого розвитку, бо побудова даного промислового об'єкту була викликана економічною необхідністю, внаслідок отриманих проектних розрахунків і призведе до збільшення виробництва власної електроенергії ВАТ «Алчевський металургійний комбінат» на 454,5 МВт, що дозволить зменшити закупівлю електроенергії для виробничих цілей.

1. *Бендюг В.І.* Оцінка техногенної безпеки як важлива ланка сталого розвитку [Текст] / В.І. Бендюг, Б.М. Комариста, В.І. Годзевич // Зб. тез XIII Міжнар. науково-практич. конф. студентів, аспірантів та молодих вчених «Екологія. Людина. Суспільство». 19-23 травня 2010 р.– Київ, 2009. – С. 296-297.
2. *Sustainable Development In Quantity Indicators Of The Assessment Of Technogenic Safety* (англ. мовою) [Текст] / Gennady Statyukha, Tatyana Bojko, Vladyslav Bendyug, Arcady Shakhnovsky // Chemistry & Chemical Technology, Львів, 2010, Vol. 4, №1– Р. 69-72.
3. *Назаренко, М.В.* Особливості визначення техногенного ризику хіміко – технологічних об'єктів на стадії проєктування [Текст] / М.В. Назаренко, Т.В. Бойко, В.І. Бендюг // Східно-європейський журнал передових технологій, 2011, №3/11 (51) – С. 13-17.

### ПРОЦЕС ПЛАЗМОХІМІЧНОГО ОЧИЩЕННЯ ВОДИ

Петров С.В., \*Бондаренко С.Г., \*Саванчук О.В., \*Янюк В.А.

Інститут газа НАН України, vizana@voliacable.com

\*Національний технічний університет України «КПІ», sgb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

З екологічного погляду сталий розвиток повинен забезпечувати цілісність біологічних і фізичних природних систем. Деградація природних ресурсів, забруднення навколошнього середовища скорочують здатність екологічних систем до самовідновлення. Вода як частина природи і одночасно як природний ресурс є одним з найважливіших об'єктів стосовно економічних і соціальних аспектів сталого розвитку. На свої потреби людство використовує головним чином прісні води. Їх об'єм складає трохи більше 2% гідросфери, причому розподіл водних ресурсів по земній кулі надто нерівномірний. Недолік води посилюється погіршенням її якості. Щорічно у всьому світі, а також і в Україні мільярди тонн твердих, пастоподібних, рідких, газоподібних відходів надходить в біосферу, наносячи тим самим невіправну втрату як живій, так і неживій природі. До 50% річкової води щороку піддається техногенній дії, у тому числі і в результаті скидання великої кількості стічних вод. У глобальних масштабах змінюються кругообіг води і газовий баланс в атмосфері. Небезпечні речовини впливають на живі організми, зокрема на генетичному рівні, що призводить до ураження цілого ряду поколінь організмів. За даними Всесвітньої організації охорони здоров'я від використання неякісної питної води щороку в світі страждає кожна десята людина. За прогнозами вчених, через 15 - 20 років найважливішим ресурсом на планеті стане питна вода. І ефективність економіки майбутнього визначиться не тільки запасами її джерел, але і технологічним рівнем їх використання.

Вибір кращих і доступніших технологій очищення води для проектувальників є досить складною задачею, що обумовлена різноманітністю забруднюючих речовин в стічній воді і високими вимогами, що пред'являються до якості її очистки. На сьогоднішній день існує декілька основних методів очищення. Їх застосування залежить від степені забруднення води, наявності шкідливих домішок, а також від кожної конкретної ситуації, в якій вони використовуються. Кожному типу стічних вод відповідає метод або група методів, що придатні для їх очистки. В той же час, багато методів очистки стічних вод дозволяють видаляти один або декілька типів забруднень, що і застосовується при проектуванні і будівництві установок очистки води. У багатьох випадках стічні води промислових

підприємств містять забруднення, які не піддаються видаленню за допомогою традиційних методів. Для ряду забруднень, існуючі методи очистки мають дуже високу вартість і складність. Наявність у воді високих концентрацій важких металів, токсичних органічних сполук, радіоактивних сполучень, нафти, вірусів, патогенних бактерій і спор вимагає використання нових технологій обробки води. Незважаючи на велику кількість досліджень в цій області, ефективних методів комплексного очищення води, яка містить шкідливі домішки різного складу, практично не існує.

Робота націлена на створення процесу комплексного очищення води з використанням плазмових технологій. Плазма є унікальним джерелом хіміко-термічної обробки матеріалів завдяки інтенсифікації плазмохімічних перетворень: високою концентрацією енергії в одиниці об'єму, радіаційними, акустичними і електромагнітними діями.

Очищення і знезараження стічних вод різного походження (чи підготовка питної води) плазмохімічним методом полягає в дії на воду або водний розчин одночасно всієї сукупності факторів плазми: високої температури, електричного і магнітного полів, світлового випромінювання в інфрачервоному і ультрафіолетовому областях спектру, радіочастотного випромінювання, ударних акустичних хвиль, потоку заряджених частинок. Розвинена поверхня в бульбашковому середовищі, де на межі розділу вода-повітря йде розряд, дозволяє проводити глибоке очищення води з мінімальними енергетичними витратами навіть за наявності високостійких мікроорганізмів і хімічних реагентів, дезактивація яких іншими методами проблематична. В результаті дії на водні потоки, як окремих факторів, так і синергетичних ефектів на виході комплексу виходить знезаражена чиста вода, заданого рівня знесолювання, і тверді нерозчинні осади.

Установка плазмохімічного очищення води різного походження наведена на рис. 1.



Рис. 1 – Установка плазмохімічного очищення води

Установка включає в себе плазмохімічний реактор (розрядна камера) через який прокачується вода, що підлягає очищенню. Рідина прокачується через електричний розряд за допомогою циркуляційного насосу. Електроди, між якими горить дуговий розряд в бульбашковому середовищі, знаходяться всередині реактора (занурені в рідину). Електророживлення дуги здійснюється від спеціального випрямляча. Установка забезпечена системами подачі рідини і газу, а також засобами контролю і регулювання.



Рис. 2 – Плазмохімічний модуль в роботі

До складу установки можна включити різні по потужності модулі обробки води (плазмохімічні реактори). Монтуючи ці модулі паралельно або послідовно, можна збільшувати або зменшувати об'єми обробки води, а також і степінь її обробки в залежності від вихідних даних рідини, що очищається, і за бажання конкретного замовника. Комбінувати набір модулів можна і так, щоб отримувати на виході необхідну кількість води, параметри якої відповідають стандартам. Вигляд такого модуля в роботі показано на рис. 2.

Технологія плазмохімічної обробки води і промислових стоків застосовує при обробці так званий «деструктивний метод», при якому відбувається внесення хімічних змін до структури і складу молекул шкідливих речовин в обробляємій рідині на відміну від регенеративних методів що видаляють домішки з води в тверду (адсорбція), газову (десорбція) або неводну рідку (екстракція), фази. При використанні плазмової технології очищення одночасна дія всіх факторів розряду на забруднену воду або водні розчини створює в області взаємодії води і плазми умови для протікання

хімічних реакцій і фізичних процесів, що приводять до очищення і знезараження води або водних розчинів. В їх числі такі реакції, як окислення, відновлення і гідратація, хімічна взаємодія домішок, що містяться у воді, з продуктами розрядної взаємодії. Це призводить до зміни структури води і одночасно відбувається генерація реакційно-здатних частинок і компонентів таких як: іони водню, кисню, гідроксили, іони перокисних і надперокисних сполучень, атомарний кисень, водень і інші (причому, як правило, вони перебувають в збуджених станах). Це приводить до того, що вода або водний розчин стає каталітичним середовищем для протікання вищезазначених реакцій. Знезараження води електророзрядом супроводжується необоротністю ушкоджувальної дії на бактерії навіть при порівняно невисокій щільності енергії. Установка стерилізує воду утворюваними в ній вільними радикал-іонами, надвисокою температурою і тиском, сильною дією електричного і магнітного полів, а також своєрідною ударною хвилею, що утворюється у воді під час розряду. Ударна хвиля просто розриває мембрани мікробів. Завдяки цьому рівень залишкової мікрофлори практично не виявляється, чого не можна досягти якнайкращими традиційними методами. Додатково впливають на знезараження води ультрафіолетове випромінювання і озон, що утворюється в реакційному середовищі. При цьому, бактерицидність води зберігається тривалий час. Також можна відмітити, що ніякі проміжні сполучення, як, наприклад, при хлоруванні, не утворюються.

Температура плазми значно вища за температуру дисоціації і іонізації будь-яких молекул, що забезпечує розпад будь-якого стійкого забруднюючого сполучення. Наявність реакційно-здатних частинок призводить до того, що забруднюючі речовини в результаті взаємодії забрудненої води або водних розчинів з плазмою або переходять в нерозчинну (слабо розчинну форму), або повністю або частково руйнуються, або утворюють нові нетоксичні сполучення. Таким чином чистити можна великий спектр рідин: нафтопродукти, барвники, жири, залізо, шестивалентний хром, фтор, радіонукліди, солі важких металів і інші сполучення органічного і неорганічного походження.

В якості приклада, в табл. 1 наведені результати очищення води від солей важких металів на установці плазмохімічної обробки води. Аналізи вихідної і обробленої води проводились в сертифікованих лабораторіях: лабораторії іонного обміну та адсорбції НТУУ «КПІ», лабораторії ТОВ «Науково-технічний центр» ВНДІХІМПРОЕКТ та лабораторії компанії «Субос».

## Сталий розвиток регіонів

*Таблиця 1 – Результати плазмохімічної обробки розчинів важких металів*

<b>Характеристика розчину (аналізований компонент)</b>	<b>Концентрація компонента у вихідному розчині, мг/л</b>	<b>Концентрація компонента в обробленому розчині, мг/л</b>	<b>Кількість циклів оброблення розчину</b>	<b>Лабораторія виконавець аналізу</b>
Розчин мідного купоросу в технічній воді (мідь)	33,6	3,3	2	НТУУ «КПІ»
Розчин ZnCl <sub>2</sub> в технічній воді (цинк)	3300	365	2	НТУУ «КПІ»
Розчин перманганату калія в дисцилірованій воді (марганець)	109,2	81	2	НТУУ «КПІ»
Розчин Cu(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O в технічній воді (мідь)	21	12	1	
Розчин азотнокислого свинцю в технічній воді (свинець)	1,4	0,16	2	ВНДІХІМПРОЕКТ
Розчин CaJ <sub>2</sub> в технічній воді (кадмій)	2,4	0,6	1	ВНДІХІМПРОЕКТ
Розчин мідного купоросу в технічній воді (мідь)	18,82	1,86	2	
Розчин ZnCl <sub>2</sub> в технічній воді (цинк)	42	0,56	3	ВНДІХІМПРОЕКТ
Розчин мідного купоросу в технічній воді (мідь)	8,9	3,2	1	Субос
Розчин CuSO <sub>4</sub> 5H <sub>2</sub> O в технічній воді (мідь)	219	140	1	Субос
Розчин CuSO <sub>4</sub> 5H <sub>2</sub> O в технічній воді (мідь)	310	210	1	Субос

Як видно з наведених даних, концентрація аналізуємого компонента може бути зменшена як мінімум у два рази, а то і на порядок. Таке зменшення залежить від кратності обробки розчину і від параметрів процесу плазмохімічної обробки розчину (частота, витрата розчину і таке інше). Також, були приведені дослідження по плазмохімічній обробці радіоактивно забрудненої води. Після обробки радіоактивне випромінювання радіоактивно забрудненої води зменшувалось як найменше у 5 разів. Це доводить ефективність застосування цього методу не тільки для знезараження води і очищення від органічних сполук і сполук важких металів, а і до очищення радіоактивних стоків.

Таким чином, застосування плазми в технології знезараження стічних вод є перспективним щодо промислового застосування і має ряд переваг: відсутність утворення побічних продуктів в процесі дезінфекції; ефективна очистка стоків від технічних домішок. Установки плазмохімічної обробки води не потребують будови спеціальних приміщень і можуть бути застосовані в стаціонарному або мобільному варіанті для очищення і знезараження стічних вод різного походження чи підготовки питної води в різній кількості. Витрати на обробку води за такою технологією не перевищують витрат на застосування радіційних методів.

**КІНЕТИЧНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ СИНТЕТИЧНОГО  
ПАЛИВА З СИРОВИНИ РОСЛИННОГО ПОХОДЖЕННЯ**

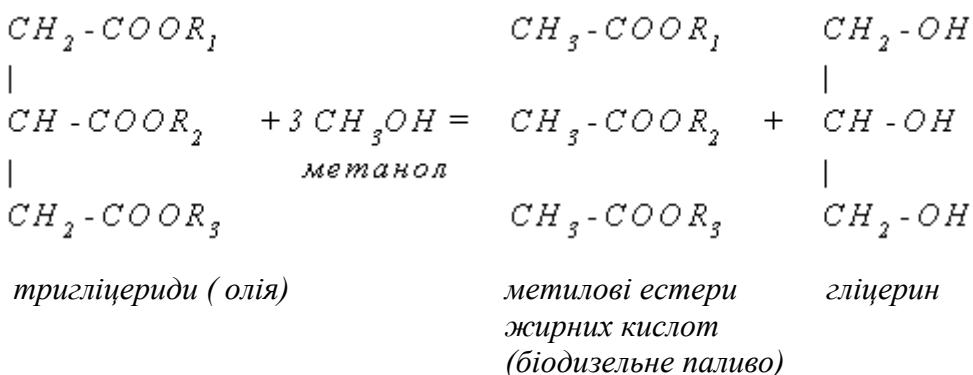
Василькевич О.І., Бондаренко С.Г., Старостін А.Р., Буд'ко М.О.

Національний технічний університет України «КПІ», sgb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Розвиток в Україні енергетики, заснованої на використанні поновлюваних джерел енергії, стимулюється дефіцитом традиційних паливно-енергетичних ресурсів і рухом в захист екології. Високі темпи видобутку нафти та скорочення її запасів примушують економічно розвинені країни приділяти велику увагу пошуку нових джерел палива, які зменшили б їх залежність від імпорту нафтопродуктів. Необхідність заміни невідновлюваних джерел енергії відновлюваними привело до відродження інтересу до сировинних ресурсів рослинного і тваринного походження. Наявність промислової бази, придатної для виробництва практично всіх видів обладнання для нетрадиційної енергетики, робить рішення цієї задачі реальною. Останнім часом в світі зростає інтерес до створення нових технологій отримання синтетичного палива з сировини рослинного походження, яке задовольняє зростаючим вимогам якості. Про це свідчить збільшення кількості наукових і патентних публікацій в даній області. Важливою перевагою палив на основі рослинних олій є більш висока екологічність як під час виробництва, так і при застосуванні. Саме цей факт вказує на велику перспективність їх використання в недалекому майбутньому.

В роботі досліджено кінетичні закономірності процесу отримання синтетичного палива, що передбачає переробку рослинних олій у біодизель шляхом переестерифікації за присутності лужного катализатору з отриманням гліцерину як побічного продукту. Отримане таким чином біодизельне паливо складається із метилових естерів жирних кислот. Великою перевагою біодизельного палива є те, що воно біологічно розкладається за 21-28 днів на 99% [1].

Реакція переестерифікації рослинних жирів (олій) метанолом в присутності катализатора проходить за наступною схемою:



де R1, R2, R3 – вуглеводневі радикали.

Побічним продуктом цієї реакції є технічний гліцерин, який є висококалорійним паливом, що може бути застосовано для опалювальних котлів.

В літературних джерелах можна зустріти суперечливі дані щодо механізму цієї реакції. Так в роботі [2] зроблено висновок, що реакція переестерифікації є гомогенною та має другий порядок (механізм  $S_N2$ ). Цей висновок не можна вважати достатньо обґрунтованим. Враховуючи те, що вихідні речовини (олія та спирт) є рідинами, які практично не є взаєморозчинними, слід вважати, що реакційну систему олія-спирт слід розглядати як гетерогенну. Ця гетерогенна суміш є неводною емульсією, яка складається з двох рідких фаз: одна з цих фаз неполярна (олія), а інша полярна (спирт). Це вказує на те, що навіть при достатньому перемішуванні цієї двофазної системи, кількість зіткнень молекул взаємодіючих речовин буде значно меншою, ніж в гомогенних системах. Тому в даному випадку крім хімічної взаємодії можуть також відбуватися інші фізичні та фізико-хімічні перетворення.

Зовсім по іншому розглядають процес переестерифікації автори роботи [3]. Вони стверджують, що реакція переестерифікації протікає на поверхні розділу фаз. Але при цьому не виключають можливість того, що процес відбувається в середині ліофільної фази (олія). В такому разі, лімітуючою стадією процесу може бути як перенесення маси крізь поверхню розділу фаз, так і дифузійні явища. Дослідження впливу перемішування на реакцію переестерифікації проведено в роботі [4] показало, що збільшення інтенсивності перемішування реакційної суміші олія-спирт не дає збільшення швидкості реакції при суттєвому збільшенні витрат енергії на перемішування. Цей аналіз дозволяє зробити висновки про те, що процеси, які відбуваються в реакційній суміші лімітуються не тільки швидкістю хімічної реакції, а й іншими фізико-хімічними явищами. Тому питання лімітуючої стадії процесу переестерифікації лишається дискусійним.

Метою даної роботи було дослідження кінетики процесу переестерифікації соняшникової олії метанолом в присутності лужного катализатора, для визначення кінетичних закономірностей процесу, що дозволить визначити лімітуючи стадію процесу та отримати експериментальний матеріал, необхідний для створення математичної моделі.

Методика проведення експерименту полягає у перемішуванні олії зі спиртом в термостатованій ємності в присутності гідрооксиду калію та періодичному відборі проб для аналізу з подальшим хроматографічним визначенням вмісту метилових естерів у пробі.

В якості катализатора було використано технічний 90% KOH, що є більш сильною основою, ніж NaOH, він легко утворює алкоголят, який і відіграє каталітичну роль, та краще ніж NaOH розчиняється у метиловому спирті. Крім того при промисловому виробництві біодизельного палива для нейтралізації KOH у кінцевих продуктах можна використовувати фосфорну кислоту з отриманням фосфату калію, який можливо застосовувати як добриво. Результати досліджень наведені в табл. 1.

*Таблиця 1 – Вихід метилових естерів при різних значеннях концентрації катализатора та температури*

Час реакції $\tau, \text{хв}$	Концентрація КОН, % при температурі 23°C			Концентрація КОН, % при температурі 60°C		
	4,3	6,5	8,6	4,3	6,5	8,6
	Вихід метилових ефірів, %					
1	6,2	20,1	29,1	11,9	54,4	48,5
2	9,5	34,7	44,5	38,3	55,4	61,4
3	21,9	45,9	51,6	47,2	60,5	62,6
4	32,1	51,6	58,4	52,3	61,3	63,2
5	44,5	54,7	61,7	56,7	64,0	64,7
10	49,9	57,9	72,2	59,4	68,7	69,9
15	53,1	61,2	78,5	60,2	70,5	71,7
25	54,8	64,7	81,6	60,4	72,4	72,5
35	57,6	68,8	85,2	61,6	74,8	75,6
45	60,3	75,3	87,5	62,8	76,2	76,9

Аналіз отриманих експериментальних даних показує що:

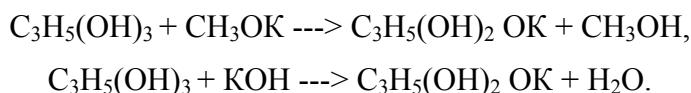
1) температурний коефіцієнт реакції переестерифікації  $\gamma \approx 1,3$  не відповідає правилу Вант-Гоффа для хімічних реакцій. Згідно цього правила, для процесів які проходять в кінетичній області, сумарна швидкість процесу при підвищенні температури на 10°C повинна збільшуватись в 2-4 рази для процесів, і тоді визначальною стадією є хімічна реакція;

2) розраховані значення енергії активації  $E_a = 22 \div 23 \text{ кДж / моль}$  не характерні для процесів, які відбуваються в кінетичній області ( $E_a = 50 \div 150 \text{ кДж / моль}$ ).

Як видно з отриманих залежностей, при досягненні 40÷50 % виходу естерів швидкість процесу різко зменшується. Це може бути пов'язане з утворенням значної кількості

гліцерину, який реагує з каталізатором і сольватує метанол. В результаті зменшується фактична концентрація реагенту (метанол), та каталізатора (алкоголят калію).

При цьому відбуваються наступні хімічні реакції:



Гліцерин реагує з алкоголятом калію тому, що він має більший коефіцієнт кислотності  $pK_a = 13,99$  ніж у метилового спирту (15,49). Ефективність сольватації метанолу гліцерином визначається близькістю хімічної будови та здатністю до утворення водневих зв'язків між молекулами гліцерину та метанолу.

Отримані результати дозволяють зробити висновок, що кінетика реакції переестерифікації олії метанолом в присутності KOH є результатом накладання декількох фізико-хімічних процесів:

- хімічної реакції переестерифікації;
- дифузії реагентів та каталізатора через поверхню розділу фаз;
- взаємодії каталізатора з метанолом та продуктом реакції (гліцерином).

При цьому швидкість процесу утворення метилових естерів суттєво залежить від концентрації гліцерину у системі та вихідної концентрації каталізатора.

1. Фортунин, В. „Зеленое“ дизельное топливо [Текст] / В. Фортунин // ТЭК. – 2006. – № 11. – С. 32–35.
2. Лебедев, Н. Н. Теория технологических процессов основного органического и нефтехимического синтеза [Текст] / Н. Н. Лебедев, М. Н. Манаков, В. Ф. Швец // – М.: Химия, 1975. – 478 с.
3. Нагорнов, С. А. Исследование кинетики процесса метанолиза при переработке растительного сырья в биотопливо [Текст] / С. А. Нагорнов, С. В. Романцова, С. И. Дворецкий, В. П. Таров, И. А. Рязанцева, К. С. Малахов // Вестник ТГТУ. – 2009. – Т. 15, № 3. – С. 572-579.
4. Зернини, И. А. Физико-химические закономерности процессов при производстве биодизеля второго поколения [Текст] / И. А. Зернини, Д. А. Казаков, В. В. Вольхин // Вестник Пермского государственного технического университета. Химическая технология и биотехнология. – 2011. – № 12. – С. 138-151.

### СТОХАСТИЧНЕ МОДЕлювання Як Інструмент дослідження розвитку процесів під дією природокористування в регіоні

Котовенко О.А., Мірошниченко О.Ю.

Київський національний університет будівництва і архітектури, diekknuba@ukr.net

В даній роботі обґрунтована можливість опису зміни станів екосистеми марковським процесом. На цій основі синтезована стохастична ієрархічна ситуаційна модель розвитку процесів в компонентах екосистеми регіону під впливом природокористування. Модель верхнього рівня реалізована за допомогою імовірнісних рівнянь Колмогорова – Чепмена, а модель нижнього рівня – імовірнісно-автоматними моделями.

Забезпечення сталого розвитку регіонів, як основи екологічно-безпечної життєдіяльності людини, є одним з напрямків стратегії сталого розвитку, метою якої є збереження рівноваги взаємовідносин суспільства і природи. Базовою проблемою в цьому напрямку є вирішення задачі раціонального природокористування. Оскільки всі глобальні проблеми при природокористуванні зароджуються на регіональному рівні, то дослідження регіональних промислових екосистем є базовим підходом.

Промислова екосистема, як будь-яка інша складна система, — багатокомпонентна багатозв'язкова система із складними міжкомпонентними взаємодіями. У якості підсистем

екосистеми розглядаються атмосфера, літосфера (грунт), гідросфера. Ці підсистеми динамічні і змінюють в певний момент часу свій стан під впливом природокористування.

Перехід із стану в стан підсистеми може бути представлений інформаційним графом, вершини якого задають імовірність знаходження підсистеми у даний момент у певному стані, а дуги відповідають значенням інтенсивностей переходу підсистеми із стану в стан. Стан екосистеми можна охарактеризувати значенням таких її показників, як екологічна ємність та екологічний потенціал у певний момент часу. Стан региональної екосистеми (системи верхнього рівня) задається вектором значень інтегрального показника підсистеми (значеннями потенціалів).

Вирішення задачі вимагало проведення дослідження регіону як складної багатокомпонентної системи. Для цього застосовано системний структурно-функціональний аналіз при дослідженні региональних промислових екосистем як одиниць природокористування для дослідження та визначення умов і механізмів процесів природокористування.

Однією з проблем в цьому напрямку є вирішення задачі раціонального природокористування, базовим підходом до якої є дослідження региональних промислових екосистем.

Пропонується визначення екологічної ємності екосистеми, як екологічного критерію оцінки її станів в процесі природокористування. Під екологічною ємністю будемо розуміти здатність екосистеми (природного, природно-антропогенного середовища) певним чином виконувати задачу чи притаманну їй функцію в умовах екзо- та ендогенних природних та техногенних навантажень.

Розроблена і представлена методика визначення екологічної ємності екосистеми регіону як базового еталону стану та можливих еволюційних процесів в навколошньому природному середовищі регіону.

Процес формування і розвитку природокористування в екосистемі супроводжується споживанням природних ресурсів і антропогенною зміною в зв'язку з цим властивостей екосистеми. При цьому характер цих змін обумовлений регіональними особливостями природних ландшафтів, що перетворюються, які, в свою чергу, залежать від природних (географічних) та кліматичних особливостей регіону, а також характеру природокористування.

В реальних умовах кількість локальних змін, що накопичуються, а також послідовність їх появи і характер зміни – випадкові фактори (з точки зору реакції природи, а не господарської потреби суспільства), їх статистичні характеристики пов'язані з функцією екологічної надійності екосистеми. Аналіз таких факторів і функцій методологічно виправданий з позиції теорії марковських випадкових процесів, а також теорії надійності складних систем з накопиченням порушень.

Окрім техногенних дій, на екосистему впливають і природні збурення, тобто перехід екосистеми із стану в стан обумовлюється імовірністями факторами, а також станом в попередній момент часу, тому динаміку переходу із стану в стан екосистеми можна розглядати як дискретний марківський процес, зміна станів якого задається рівняннями Колмогорова-Чепмена [1,2].

Синтезована стохастична ситуаційна модель розвитку процесів в складових екологічних систем під дією природокористування. Ця модель має ієрархічну структуру. Модель верхнього рівня ієрархії будується на основі теорії марковських процесів і представляє собою систему диференціальних рівнянь Колмогорова-Чепмена, що описує перехід екосистеми із стану в стан під дією природокористування. Візуально модель представляється як направлений інформаційний граф, вершини якого задають імовірність того, що система знаходиться у даний момент в одному з екологічних станів, які характеризуються ємністю екосистеми в даний момент часу. В результаті структурно-функціонального аналізу екосистеми, що досліджується, визначені моделі нижнього ієрархічного рівня, які описують результати дії природокористування на окремі підсистеми (складові) екосистеми. Для синтезу таких моделей застосовано метод ймовірносно-автоматного моделювання.

На нижньому рівні ієрархії для дослідження процесів, що проходять у компонентах промислової екосистеми під дією техногенного навантаження, що спричинене природокористуванням, може бути використаний метод імовірнісно-автоматного моделювання [3]. Вхідною інформацією для цього рівня є статистичні дані та гіпотези відносно закону розподілу стосовно техногенних навантажень та антропогенних змін у конкретних підсистемах промислової екосистеми. Вихідною інформацією – значення інтенсивностей переходу із стану в стан відповідної підсистеми промислової екосистеми, що є вхідною інформацією для моделі верхнього рівня.

В залежності від інтенсивності накопичення антропогенних змін та умовної інтенсивності рівноважних переходів екосистеми вирази для ймовірності функціонування екосистеми в стійкому стані набувають різний вигляд. Але вони суттєво спрощуються, якщо період дослідження досить довгий. Виконуючи переход часу до нескінченності, маємо граничну умовну ймовірність накопичення антропогенних змін у рівноважній екосистемі.

Синтезована модель призначена для дослідження впливів природокористування на процеси в екосистемі та визначення ймовірності переходу екосистеми у різні стани, в тому числі можливість дослідження ймовірності переходу системи у критичні стани (стани деградації), що сприяє виявленню та уникненню таких станів. Модель надає можливість визначення ймовірності переходу екосистеми до стану деградації, що сприяє виявленню та уникненню таких станів, тобто визначення умов екологічно безпечного природокористування.

1. Вентцель Е.С., Овчаров Л.А. Теория вероятностей и математическая статистика. - М.: Наука, 1973. - 364 с.
2. Камени Дж., Снелл Дж. Конечные цепи Маркова. - М.: Наука, 1970. - 270 с.
3. Бакаев А.А., Костина Н.И., Яровицкий Н.В. Имитационные модели в экономике. - К.: Наукова думка, 1978. - 304 с.

### ОЦІНКА ПРОБЛЕМНОСТІ РЕГІОНУ В РАМКАХ РЕГІОНАЛЬНОЇ ПОЛІТИКИ СТАЛОГО РОЗВИТКУ УКРАЇНИ

Шатковський О.В.

Національний технічний університет України «КПІ», shatkovskyi@gmail.com

Регіональну політику сталого розвитку необхідно розглядати як механізм, що забезпечує комплексний взаємозв'язок між соціальною, екологічною та економічною сферою регіону. Нерациональне ресурсоспоживання, низький рівень життя, економічна криза, екологічне навантаження, малоефективна система управління регіональним розвитком та ряд інших факторів поглиблюють регіональні проблеми екологічного, економічного та соціального розвитку. Згідно Закону України «Про стимулювання розвитку регіонів», депресивна територія - це регіон чи його частина (район, місто), рівень розвитку якого за показниками є найнижчим серед територій відповідного типу.

Визначення рівня проблемності регіонів можливе на основі системи показників соціально-інституціонального, економічного та екологічного типу. Для оцінки рівня проблемності регіону пропонується методика оцінки проблемності регіонів (МОПР). На основі запропонованих показників у подальшій роботі буде розраховано *Індекс проблемності* ( $I_n$ ) окремо для кожного регіону України. У вересні 2000 року Україна підписала Декларацію тисячоліття на Саміті ООН, тобто взяла на себе зобов'язання досягти Цілей Тисячоліття в галузі розвитку в період до 2015 року. У цьому документі є 7 орієнтирів та 15 конкретних цілей, адаптованих з урахуванням всіх особливостей розвитку України. Також, згідно з постановою Кабінету Міністрів України від 21 липня 2006 р. N 1001 „Про затвердження Державної стратегії регіонального розвитку на період до 2015 року” було сформовано конкретні стратегічні цілі, що будуть здійснюватися за певними пріоритетними

## Сталий розвиток регіонів

напрямами. Отже, маючи конкретні показники, яких потрібно досягнути та існуючі, згідно МОПР отримаємо рівень проблемності кожного регіону. В табл. 1 наведено ряд показників, що поділено за вимірами.

*Таблиця 1 – Параметри для розрахунку за МОПР*

<i>Вимір</i>	<i>Показники</i>
Екологічний	Вміст окису карбону в атмосферному повітрі міст
	Забруднення підземних вод
	Використання води
	Споживання кам'яного вугілля
	Використання відходів
	Накопичення відходів
	Площі під твердими побутовими відходами
	Використання пестицидів
	Екологічно небезпечні підприємства
	Токсичні відходи
	Фінансування природоохоронних заходів
	Викиди парникових газів на душу населення
	Інтенсивність вуглецевого сліду
	Хімічно небезпечні об'єкти
	Лісистість
	Валовий регіональний продукт на одну особу
	Введення в експлуатацію житла
Економічний	Виробництво електроенергії
	Обсяг експорту товарів і послуг
	Обсяг імпорту товарів і послуг
	Продукція сільського господарства
	Наявний доход населення у розрахунку на одну особу
	Обсяг інноваційної продукції
	Прямі інвестиції в область
	Обсяг промислової політики
	Капіталльні інвестиції
	Кредиторська заборгованість
	Дебіторська заборгованість
	Кількість організацій, які виконують наукові та науково-технічні роботи
	Середньомісячна заробітна плата
	Чисельність ВІЛ-інфікованих
Соціально-інституційний	Захворюваність населення на активний туберкульоз
	Обсяг фінансування фізичної культури і спорту
	Частка осіб із вищою освітою серед населення від 25 років
	Чисельність студентів ВНЗ І-ІІ рівня акредитації
	Чисельність студентів ВНЗ ІІІ-ІV рівнів акредитації
	Коефіцієнт смертності немовлят
	Коефіцієнт материнської смертності
	Рівень безробіття за методологією МОП (міське населення)
	Рівень зайнятості (міське населення)
	Валовий регіональний продукт на одну особу (у фактичних цінах, грн.)
	Рівень дотримання законів
	Кількість масовий та універсальних бібліотек
	Рівень забезпеченості житлом
	Загальна кількість осіб, які потерпіли від злочинів
	Рівень задоволеності життям
	Частка населення із середніми грошовими доходами на душу населення на місці нижче прожиткового мінімуму

Розподіл за індексом проблемності дає можливість виявити ті регіони України, що найбільше потребують залучення державних коштів, які і до того є обмеженими. Також ці результати необхідно враховувати при плануванні заходів державної регіональної політики сталого розвитку.

### **ПРОБЛЕМЫ ЛИКВИДАЦИИ ПРОМЫШЛЕННЫХ ОТХОДОВ И УСТОЙЧИВОЕ РАЗВИТИЕ СЕВЕРО-ЗАПАДНОГО РЕГИОНА ДОНБАССА**

Кондратов С.А., Попов Е.В., Назаренко Е.С., Островка В.И.

Інститут хіміческих технологій Восточноукраїнського національного університета імені Владимира Даля, г.Рубежнє, kondratovsa@gmail.com

Концепция устойчивого развития появилась в результате объединения трех основных точек зрения: экономической, социальной и экологической. С экологической точки зрения, устойчивое развитие должно обеспечивать целостность биологических и физических природных систем. Особое значение имеет жизнеспособность экосистем, от которых зависит глобальная стабильность всей биосферы. Более того, понятие «природных» систем и ареалов обитания можно понимать широко, включая в них созданную человеком среду, такую как, например, города. Основное внимание уделяется сохранению способностей к самовосстановлению и динамической адаптации таких систем к изменениям, а не сохранение их в некотором «идеальном» статическом состоянии. Деградация природных ресурсов, загрязнение окружающей среды и утрата биологического разнообразия сокращают способность экологических систем к самовосстановлению [1-3].

Важная проблема экологической составляющей устойчивого развития Украины - обезвреживание и утилизация промышленных отходов, оставшихся от прошлого. Типичная ситуация, характерная для городов северо-западного Донбасса, в прошлом бывших крупными промышленными центрами, а ныне пришедшиими в упадок, наблюдается в г. Рубежное. Ликвидация крупнейшего в бывшем СССР предприятия тонкого органического синтеза – АО «Краситель» породила новые экологические проблемы. Бесконтрольное хранение на территории предприятия токсичных отходов, проникновение органических загрязнений из почвы в подземные воды, наличие бесхозных накопителей промстоков создает потенциальную угрозу трансрегиональной экологической катастрофы, а практическое отсутствие экологического аудита, мониторинга динамики загрязнений, замалчивание проблемы диоксинового загрязнения (Рубежное относится к числу «диоксиновых городов» [4]) создает у населения и властей обстановку ничем не оправданного благодушия. Поэтому разработка и реализация долгосрочных региональных и трансрегиональных программ экологического аудита и мониторинга, разработка и внедрение долголетней комплексной программы обезвреживания промышленных отходов, регенерации загрязненных территорий является актуальной проблемой, которую необходимо решать совместными усилиями государства, бизнеса и науки.

Учеными Института химических технологий (г.Рубежное) Восточноукраинского национального университета имени Владимира Даля сделан первый шаг в этом направлении – разработана технология обезвреживания и рекультивации накопителя сточных вод бывшего АО «Краситель». Работы, выполняемые на техническом этапе условно можно разделить на следующие группы:

- Очистка секций накопителя от шлама;
- Создание противофильтрационных устройств (защитный экран, дренаж противофильтрационного экрана, перехватывающий дренаж);
- Обезвреживание отходов с последующим депонированием в накопитель;
- Изолирование отходов (при совместном складировании промышленных и бытовых отходов), с созданием комбинированной дренажной системы.
- Рекультивация шламонакопителя;
- Комплекс природоохранных мероприятий.

Наиболее перспективным методом обезвреживания отходов является термическая обработка, и целесообразно депонировать шлам после прокаливания в накопителе. Если по результатам экологической экспертизы шлам будет отнесен к 3 или 4 классу опасности, тогда можно будет применить совместное захоронение промышленных и бытовых отходов, с целью максимального использования полезной площади накопителя. В результате микробиологических процессов, проходящих в отходах, возникает так называемый биогаз. Он обладает значительным энергетическим потенциалом (содержание метана 44-66%) и может быть использован в теплосиловых установках. При совместном захоронении с бытовыми отходами необходимо соорудить специальную систему для отвода и очистки биогаза. Сверху отходов укладывается защитный экран из полимерной пленки.

После того как накопитель будет заполнен до проектной отметки, он должен быть спланирован и закреплен. Закрепление поверхности производится биологическим, физическим и химическими методами. Биологические метод заключается в культивировании многолетних трав и является одним из лучших. Его дешевизна и долговечность не вызывают сомнений.

В процессе захоронения и рекультивации накопителя необходимо проводить натурные наблюдения за состоянием объекта. В задачи натурных наблюдений входят :

- оценка эффективности работы противофильтрационных устройств накопителя
- контроль качества воды в наблюдательных скважинах.

На основании получаемых результатов мониторинга необходимо создавать математическую и компьютерную модель функционирования объекта, на основании которой можно было бы прогнозировать его поведение.

На основании проведенных исследований предложены мероприятия по ликвидации существующего очага загрязнения подземных :

- откачка загрязненных вод и их очистка после использования для технического водоснабжения;
- изоляция накопителя с помощью противофильтрационных стенок, заглубленных до водоупора;
- откачка из специальных дренажных скважин
- разработка компьютерной модели распространения загрязнений в почве и в подземных водоносных горизонтах

Экологический аудит территории невозможен без создания и постоянного уточнения геоинформационной модели бассейна реки Северский Донец. Ее разработка и использование в рамках масштабного экологического проекта межгосударственной ассоциации «Еврорегион Донбасс» способствовало бы постепенному развитию страны по инновационно-инвестиционному пути, оптимальному с позиции современных требований экономики, энергетики и экологии. Обеспечение чистоты главной водной артерии востока Украины, источника пресной воды для тысяч украинцев и россиян должно стать приоритетным направлением, затрагивающим вопросы здоровья и безопасности жизни пятнадцатимиллионного населения пяти приграничных областей Украины и России.

1. Устойчивое развитие. Материал из Википедии — свободной энциклопедии [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL [http://ru.wikipedia.org/wiki/Устойчивое\\_развитие](http://ru.wikipedia.org/wiki/Устойчивое_развитие)
2. Бобылев С. Н. Экономика устойчивого развития. Учебное пособие // Бобылев С. Н., Гиусов Э. В., Перелет Р.А.[Текст]. – М.: Ступени, 2004. – 303 с.
3. Гвишиани Д.М. Мосты в будущее. Римский клуб, ИФИАС, Венский совет/ Гвишиани Д.М. [Текст]. – М.: Эдиториал, 2010. – 368 с
4. Киселев А. В. Отравленные города / А. В. Киселев В. В. Худолей [Текст]. – М.: Greenpeace, 1997. – 83 с.

**СЕКЦІЯ 7**  
**КОМП'ЮТЕРНО-ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ**  
**В БАГАТОРІВНЕВІЙ ВИЩІЙ ОСВІТІ**

**ПРАКТИЧЕСКОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ  
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОПТИМИЗАЦИИ  
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ  
В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО  
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА**

Холоднов В.А., Хайдаров А.Г., Хайдаров В.Г., Кулишенко Р.Ю., Краснобородъко Д.А.  
ГОУВПО Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический  
университет) (СПбГТИ (ТУ)), holodnow@yandex.ru

В докладе будут представлены практические материалы, изложенные в учебных пособиях, изданных кафедрой в последнее время по математическому моделированию, оптимизации химико-технологических объектов и систем [1-10]. Учебные пособия имеют гриф УМО по университетскому политехническому образованию. Два пособия [3, 5] награждены дипломами лауреата Всероссийской выставки «ЗОЛОТОЙ ФОНД ОТЕЧЕСТВЕННОЙ НАУКИ» за лучшее учебное пособие в отрасли.

Практические примеры моделирования химико-технологических объектов и систем с помощью Mathcad изложены в [1, 4, 5, 7, 8]. Здесь рассмотрены вопросы моделирования химико-технологических и биохимических объектов управления, некоторых химико-технологических процессов и химических реакторов, изложено моделирование химико-технологических процессов для решения экологических проблем.

В учебном пособии [9] предложен метод интервального оценивания параметров математического описания для сложных моделей химико-технологических процессов и систем, что особенно важно для оптимизации химико-технологических систем в условиях неопределенности информации.

Вопросы оптимизации химико-технологических процессов и систем с использованием Mathcad и Excel изложены в [2,3,11-13]. Особое внимание здесь уделено вопросам оптимизации в условиях неопределенности исходной информации, целочисленной оптимизации, дискретной оптимизации. Приведены многочисленные практические примеры оптимизации.

Компьютерные технологии реализации методов многокритериальной оптимизации обсуждаются в [3]. Рассматриваются традиционные методы решения задач многоцелевой оптимизации: метод главной компоненты, принцип последовательной «уступки», метод комплексного критерия, метод Гермейера метод справедливого компромисса, метод условного центра масс. Приводятся практические примеры оптимизации процесса кристаллизации полугидрата сульфат кальция, технико-экономическая многоцелевая оптимизация систем на основе маргинальных решений, разработка нового полимерного материала, исследование процесса конверсии нитрата кальция и фосфорной кислоты. Рассматриваются вопросы решение задач многоцелевой оптимизации в маркетинговых исследованиях.

Как известно при моделировании ХТС наряду с моделями отдельных аппаратов используют модель всей системы. Поэтому в [6] приводятся известные методы и программы для моделирования ХТС с материальными и тепловыми рециклами, что характерно для химических производств. Здесь показано использование лицензионных программных продуктов для моделирования статических режимов ХТС.

В докладе будут приведены и обсуждены результаты моделирования и оптимизации с помощью ASPEN PLUS следующих задач: каталитическая гидратация этилена, оптимизация выпарной установки, получение хлористого этила, синтез оптимальных систем теплообмена, расчет различных типов химических реакторов, моделирование различных процессов ректификации многокомпонентных смесей, процесс синтез-газа, фрагмент ХТС окисления SO<sub>2</sub> в SO<sub>3</sub>.

1. Холоднов В.А., Дьяконов В.П., Иванова Е.Н., Кирьянова Л.С. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов: Практическое руководство Печ. СПб. АНО НПО «Профессионал», 2003. – 480 с.
2. Холоднов В.А., Лебедева М.Ю. Системный анализ и принятие решений. Решение задач оптимизации химико-технологических систем в среде Mathcad и Excel. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2005. – 220 с.
3. Холоднов В.А., Лебедева М.Ю., Пунин А.Е., Хартманн К. Системный анализ и принятие решений. Компьютерные технологии решения задач многоцелевой оптимизации систем. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2006. – 152 с.
4. Холоднов В.А., Гумеров Ас. М., Емельянов В.М. и др. Системный анализ и принятие решений. Математическое моделирование и оптимизация объектов химической технологии. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2006. – 340с.
5. Холоднов В.А., Решетиловский В. и др. Системный анализ и принятие решений. Компьютерное моделирование и оптимизация объектов химической технологии в Mathcad и Excel. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2007. – 434с.
6. Холоднов В.А., Хартманн К. и др. Системный анализ и принятие решений. Компьютерные технологии моделирования химико - технологических систем. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2007. – 160с.
7. Крылов В.М., Холоднов В.А. Теория и практика математического моделирования. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2007. – 178с.
8. Холоднов В.А., Кирьянова Л.С., Сидоров В.А. Системный анализ и принятие решений. Компьютерное моделирование объектов химической технологии в Mathcad. ПРАКТИКУМ к лабораторным работам по учебным дисциплинам «Информатика» и «Системный анализ химических технологий»: учебное пособие. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2008. – 91 с.
9. Холоднов В.А. Компьютерные технологии точечного и интервального оценивания параметров парной линейной регрессии по методу наименьших квадратов. Учебное пособие / В.А.Холоднов, СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2008. – 78 с.
10. Холоднов В.А. Системный анализ и принятие решений. Математическое моделирование гидродинамической структуры однофазных потоков в химических реакторах. Учебное пособие / В.А. Холоднов, В.П. Решетиловский, Е.С. Боровинская, В.П. Андреева. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2009. – 35 с.
11. Холоднов В.А. Решение задач безусловной оптимизации с использованием системы компьютерной математики MathCAD: методические указания / В.А.Холоднов, В.А.Сиренек, Е.С., В.Н. Чепикова, Е.С. Боровинская, Крылов В.М. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2010. – 47 с.
12. Холоднов В.А. Решение задач нелинейного программирования на основе условий Куна-Таккера с использованием системы компьютерной математики MathCAD: методические указания / В.А.Холоднов, Е.С. Боровинская, М.Б. Суханов, А.В. Гайков СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2010. – 50 с.
13. Холоднов В.А. Решение задач нелинейного программирования на основе градиентных методов с использованием системы компьютерной математики MathCAD: методические указания / В.А.Холоднов, Е.С. Боровинская, В.П.Андреева, В.И. Черемисин. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2010. – 69 с.

## СТАТИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОЦЕНИВАНИЮ ЗНАНИЙ УЧАЩИХСЯ

Цейтлин Н. А.

Фирма «CuBe Matrix GbR», ФРГ, tseitlin@gmx.net

Повышения эффективности обучения учащихся возможно с использованием системного подхода на стыке таких дисциплин, как педагогика, психология, метрология, квалиметрия, прикладная математическая статистика и информатика.

**Уровень знаний** (УЗ) – мера относительного количества усвоенных знаний учащимся как доля всего объема знаний, определенного учебной программой.

**Статистический подход** предполагает расчёт функции распределения средневзвешенного значения обобщённой медианы тестовых и экзаменационных оценок УЗ. Это позволяет корректно проверять гипотезы при анализе успеваемости: (1) сравнивать УЗ учащихся в течение ряда учебных периодов, в разных группах и в разных ВУЗах; (2) выбирать отличников, середняков и отстающих; (3) сравнивать квалификацию педагогов по успеваемости их учеников; (4) принимать решения о приеме учащихся в ВУЗ и переводе на следующий курс; (5) определять места в конкурсах и др.

**Статистическая оценка** (СО) - приближённое выборочное значение оцениваемого параметра распределения **случайной величины** (СВ), как функция от выборки (наблюдаемых значений) из генеральной совокупности значений СВ. УЗ является СВ.

Термин «оценка» в педагогике характеризует УЗ учащегося, а в прикладной статистике это - СО. Здесь эти термины используем – или раздельно (УЗ или СО), или совместно: **статистическая оценка уровня знаний** (СОУЗ) учащегося.

**Рутинное компьютерное тестирование** (РКТ) – краткая проверка УЗ, полученных учащимися на предыдущем занятии, производимая в начале следующего занятия или (и) полученных учащимися на занятии, производимая в конце этого же занятия.

В качестве устойчивой меры положения СВ УЗ используются: **медиана**, её точечная (однозначная) СО, и её **доверительные интервалы** (ДИ).

**ДИ медианы** УЗ – интервалы, которые покрывают неизвестную медиану генерального распределения УЗ с заданными доверительными вероятностями.

Оценки УЗ учащихся можно условно разделить на **объективные**, получаемые с помощью РКТ и **субъективные численные экспертные оценки** (ЧЭО), даваемые экзаменаторами учащимся на экзаменах.

Традиционным ЧЭО УЗ (2, 3, 4, 5), присущи недостатки: (1) числа и действия над ними не интерпретируются (например, знания «на 4» не превышают в два раза знания «на 2»); (2) для точного статистического оценивания и сравнения ряда оценок УЗ приходится использовать специальный метод расчёта среднемедианных показателей [1].

**Оценки УЗ «в процентах»** обладают **достоинствами**: 1) они относятся к метрической шкале отношений: УЗ учащихся относятся как их оценки; 0% - отсутствие знаний; (2) широкий диапазон – от 0% до 100% - облегчает сравнение УЗ с помощью медиан; (3) объективность оценок УЗ обеспечивается формальными методами РКТ.

Уместно пересчитывать оценки УЗ из одной шкалы – в другую. Если отсутствие знаний Y = 2 балла принять за X = 0% УЗ, а Y = 5 - за X = 100% УЗ, то формулы соответствия:  $X\% \approx 33,33Y - 66,67$  и  $Y = E[2 + 0,03X\%]$ , где E[•] - округление до целого числа, или - так:  $X \in (0; 17; 33; 50; 67; 83; 100)\%$ ;  $Y \in (2; 2,5; 3; 3,5; 4; 4,5; 5)$ .

**Совершенствование педагогической технологии** предполагает стимулирование с помощью РКТ учащихся к равномерной работе над изучаемой дисциплиной. Экзаменаторы получают более полное представление об успехах учащегося в течение учебного цикла, и могут тестировать его по тем темам, которые учащийся освоил хуже других. Это позволяет учащемуся «улучшить» плохие оценки, полученные при РКТ, и получить повышенную **итоговую СОУЗ** за весь курс.

Количеством УЗ учащегося и единицей измерения являются субъективные представления экзаменатора об УЗ и тем количеством знаний, которое учащийся должен

усвоить. Отношение этих величин является **субъективной ЧЭО УЗ учащегося**, которая учитывается в **обобщённой СОУЗ** наряду с **объективными СОУЗ**, полученными в процессе РКТ. **Важность** этих СОУЗ учитывается при расчёте **обобщённой СОУЗ** учащихся с помощью **весовых коэффициентов важности**.

**Традиционно** при педагогических измерениях рассматривают лишь **точечные (однозначные) СОУЗ** (обычно – средние арифметические значения, редко – медианы [2]); вопросы о построении **эмпирических функций распределения (ЭФР)** оценок УЗ и представления **СОУЗ** в виде ДИ медиан не поднимаются. В настоящее время такие задачи решают численными методами: строят кусочно-линейную аппроксимацию ЭФР УЗ учащегося, **точечные СО и ДИ медиан УЗ бутстреп-методом** [2]. Расчёты выполняются по мере поступления данных в **базу данных** после каждого РКТ, так что СОУЗ учащихся периодически уточняются в течение учебного цикла.

**Объективные СОУЗ учащихся.** Тест РКТ состоит из  $N$  заданий; каждому заданию ставится в соответствие  $n$  ответов ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ). Если  $n = 0$  (ответа нет), то учащийся должен получить его самостоятельно. Это - **тестовые задания открытой формы**.

Если  $n > 0$  (ответы есть), то учащийся должен выделить среди них правильные. Это - **тестовые задания закрытой формы**. Они предполагают наличие вариантов ответа (соответствие, последовательность, сравнение количественное, логическое, иерархическое) с одним или несколькими правильными ответами. Если количество ответов  $n$  во всех  $N$  заданиях одинаково, то из  $n$  ответов могут быть  $m$  – правильных ( $m \leq n$ ) и ( $n - m$ ) – неправильных. Учащийся должен указать все  $m$  правильных ответов.

**Погрешность СОУЗ учащихся** тем меньше, чем больше количество  $N$  заданий в каждом РКТ. Однако  $N$  не должно быть слишком велико, чтобы учащийся мог выполнить все задания за небольшое время. Поэтому в РКТ отбирают минимум валидных заданий.

Каждой  $i$  – й задаче ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) тестового задания открытой формы можно придать “вес”  $b_i$  (экспертную оценку степени трудности),  $b_i \in Z$  ( $b_i = 1$  – для самых лёгких задач;  $b_i \in (2, 3, \dots)$  – для более трудных). Оценка А УЗ учащегося вычисляется по формуле

$$A = 100\% \sum_{i=1}^N b_i k_i / \sum_{i=1}^N b_i, \quad (1)$$

где  $k_i = 1$ , если ответ правильный и  $k_i = 0$ , если – неправильный.

К каждому вопросу **тестовых заданий** равной степени трудности **закрытой формы** придаётся  $n$  ответов, среди которых один – правильный и  $n - 1$  неправильных [3]. Каждый ответ на каждое из  $N$  заданий составляется так, чтобы вероятность угадать правильный ответ была равной  $1/n$ . Вероятное число  $u$  ответов, которое можно угадать, ничего не зная, вычитается из набираемой суммы баллов. Тогда ценка А УЗ учащегося вычисляется:

$$A = [100(X - u)/(N - u)]\%, \quad (2)$$

где  $X$  – общее количество правильных ответов из  $N$  возможных.

При малой степени строгости тестов допустимо случайно угадывать максимальное количество правильных ответов, и ограничение  $u$  минимально:  $u = u^-$ ; при средней степени строгости даётся возможность угадать около половины правильных ответов,  $u = u^0$ ; при высокой степени строгости возможности угадывать правильные ответы практически нет и  $u$  максимально:  $u = u^+$ ; значения  $u^-$ ,  $u^0$  и  $u^+$  в зависимости от  $n \in (2, \dots, 8)$  и  $N \in (30, 50, 100)$  приведены в [3]. **Тестовые задания закрытой формы** более эффективны как средство обучения и менее, - как средство оценивания УЗ.

**Расчет ДИ медианы бутстреп-методом.** **Исходные данные:**  $N$  – объём выборки;  $X = F_s^{-1}(P)$  – аппроксимация обратной ЭФР СВ  $X$ ;  $\varphi = \varphi\{x_i\}$  – вид заданной статистики (по умолчанию  $\varphi_{(0)}$  – медиана);  $B$  – доверительные вероятности,  $B \in (68; 83; 95; 99; 99,7)\%$ ; число имитаций порядка  $10^4$ . Результатами расчёта являются графики ЭФР оценки УЗ учащихся, обратной ЭФР статистики  $\varphi$  (медианы) и таблицы её ДИ.

**Пример. Дано:** В качестве **частных показателей качества (ЧПК)** УЗ учащихся на экзамене приняты «степень освоения теории» - ЧПК-1 и «умение решать практические задачи» - ЧПК-2. Четверо экспертов присвоили этим ЧПК оценки важности (%): (80; 60; 100; 100) – для ЧПК-1 и (99; 70; 100; 100) – для ЧПК-2. Три экзаменатора поставили оценки УЗ двум учащимся (%): 1-му: по ЧПК-1 – (100; 83; 93); по ЧПК-2 - (0; 92; 75) и 2-му: по ЧПК-1: (100; 77; 97); по ЧПК-2: (0; 67; 85).

**Необходимо:** 1) рассчитать 83-х-процентные ДИ обобщённых медиан ЧЭО УЗ учащихся; 2) проверить гипотезу о равенстве обобщённых медиан ЧЭО УЗ против альтернативной гипотезы об их неравенстве **методом доверительных интервалов** [2].

**Справка.** В работе [2] доказано, что для сравнения двух параметров методом ДИ на уровне значимости 5% необходимо сравнивать перекрываемость их 83-х-процентных ДИ.

**Решение.** Оценки важности ЧПК-1 (%):  $V_{0i} = \{80, 60, 100, 100\}\%$ . Первый вариационный ряд ЧЭО:  $V_{1i} = \{60, 80, 100, 100\}\%$ . Второй вариационный ряд:  $V_{2i} = \{60, 80, 100\}\%$  с весами  $D_{2i} = \{1, 1, 2\}$ . С помощью кусочно-линейной аппроксимации ЭФР (рис.) находим медиану  $V_m = 87\%$  важности ЧПК-1 (см. [2] и стрелки на рис.).

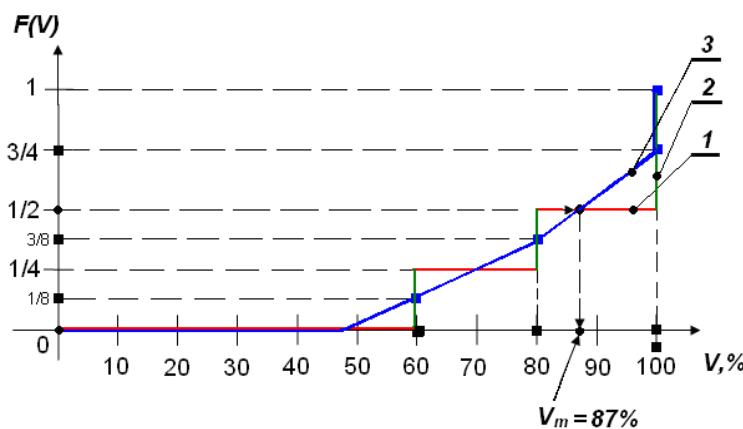


Рис. 1 – Определение медианы ЧЭО для ЧПК-1 с помощью кусочно-линейной аппроксимации ЭФР:  $V$  – ЧЭО;  $F(V)$  – вероятность; 1 – ступенчатый график ЭФР; 2 – обратная ЭФР; 3 – кусочно-линейная сплайн-аппроксимация ЭФР [2].

Аналогично находим медиану  $V_m = 99.5\%$  важности ЧПК-2.

ЧЭО, данные 3-мя экзаменаторами учащемуся 1 по ЧПК-1:  $X_{0i} = \{100, 83, 93\}\%$  с весами  $D_{0i} = \{1, 1, 1\}$ . Медиана  $X_m = 93\%$ . Аналогично находим медианы ЧЭО ЧПК-2  $X_m = 75\%$ ; ЧЭО ЧПК-1 учащегося 2:  $X_m = 97\%$ ; ЧЭО ЧПК-2:  $X_m = 67\%$ . ЧПК ответов учащегося 1 с весами  $C_{0i}$ :  $\{(W_{0i}, C_{0i})\} = \{(93, 87), (75, 99.5)\}$ ; вариационный ряд:  $\{(W_{1i}, C_{1i})\} = \{(75, 99.5), (93, 87)\}$ . Нормируем веса  $W_{Hi} = W_i/(W_1 + W_2)$ ,  $i = (1, 2)$ . Получаем:  $\{(W_{2i}, C_{2i})\} = \{(75, (99.5 \times 100)/(99.5 + 87)), (93, (87 \times 100)/(99.5 + 87))\} = \{(75, 53), (93, 47)\}$ . Медиана  $W_{m1} = 83\%$ . Аналогично – оценки  $W_{0i}$  качества ответа учащегося 2 с весами  $C_{0i}$   $\{(W_{0i}, C_{0i})\} = \{(97, 87), (67, 99.5)\}$ , вариационный ряд  $\{(W_{1i}, C_{1i})\} = \{(67, 99.5), (97, 87)\}$ ; второй вариационный ряд с нормированием весов:  $\{(W_{2i}, C_{2i})\} = \{(67, 53), (97, 47)\}$ ; медиана  $W_{m2} = 81\%$ .

83-х-процентные ДИ медианы полученные бутстреп-методом [3] за  $10^4$  имитаций для 1-го учащегося (81; 85)% и для 2-го – (79; 83)% перекрываются. Поэтому гипотеза о равенстве обобщённых медиан ЧЭО УЗ этих учащихся не отклоняется на уровне значимости, превышающем 5%.

1. Горбач А. Н., Цейтлин Н. А. Покупательское поведение: анализ спонтанных последовательностей и регрессионных моделей в маркетинговых исследованиях. – Киев: Освіта України, 2011. – 192 с.
2. Цейтлин Н. А. Из опыта аналитического статистика. – М.: Солар, 2007. – 906 с.
3. Цейтлин Н. А. Рациональная экспертная оценка знаний учащихся. – Зав. лаб. – 2010. Т. 76, № 11. – С. 70–72.

**БАЗОВІ АСПЕКТИ КОМП'ЮТЕРНОЇ ПІДГОТОВКИ ЗІ СПЕЦІАЛЬНОСТІ  
«КОМП'ЮТЕРНО-ІНТЕГРОВАНІ ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ І ВИРОБНИЦТВА»**

**Статюха Г. О., Квітка О.О., Бугаєва Л.М., Шахновський А.М.**

Національний технічний університет України «КПІ», kxtp@list.ru

Спеціальність «Комп'ютерно-інтегровані технологічні процеси та виробництва» у відповідності до стандартів освіти передбачає набуття таких знань і вмінь:

- здійснювати комп'ютерне моделювання технологічних процесів і систем, застосовувати математичні методи для пошуку оптимальних рішень, дослідження та прийняття рішень при розробці нових або вдосконалені діючих виробництв;
- створювати системи управління технологічними процесами;
- використовувати сучасні програмні продукти для розрахунків, комп'ютерного моделювання та оптимізації інтегрованих процесів і технологій;
- розробляти ефективні алгоритми для розв'язання окремих задач та реалізовувати їх в вигляді програмних продуктів за допомогою сучасних середовищ програмування;
- створювати і застосовувати інформаційні та експертні системи на базі найновіших інформаційних технологій.

На кафедрі кібернетики хіміко-технологічних процесів НТУУ «КПІ» базова комп'ютерна підготовка, що забезпечує формування у майбутніх фахівців зазначених знань і вмінь, здійснюється на першому (бакалаврському) рівні вищої освіти за допомогою дисциплін, які можна розділити на три групи (табл. 1). До першої належать ті дисципліни, які безпосередньо пов'язані з вивченням тих чи інших комп'ютерних технологій і програмних пакетів, тобто – виконують навчальну функцію (Н). Другу групу складають дисципліни, які виконують підтримуючу (з точки зору комп'ютерної підготовки) функцію (П), – застосовують програмні пакети для вирішення практичних задач. Частина дисциплін при вирішенні відповідних завдань знайомлять студентів із спеціалізованими програмними пакетами, тобто виконують змішану функцію (З).

*Таблиця 1 – Дисципліни, що забезпечують комп'ютерну підготовку бакалаврів*

<b>Дисципліна</b>	<b>Семестр</b>	<b>Комп'ютерні технології (програмні продукти)</b>	<b>Функція</b>
Комп'ютерна техніка і організація обчислювальних робіт	1, 2	ОС, системне ПЗ, VirtualBox, «офісні» програми, MathCAD	Н
Алгоритмізація та програмування	1, 2, 3, 4	VBA, VB	Н
Комп'ютерна графіка	3	AutoCAD	Н
Основи комп'ютерно-інтегрованого управління та комп'ютерні мережі	3	NetCracker, мережеві технології та протоколи	Н
Інформаційні системи та комплекси	4	Visual FoxPro, MS Access	Н
Теорія ймовірності та випадкові процеси	4	MS Excel, VBA	П
Технічні засоби автоматизації та мікропроцесорна техніка	5	Experion PKS	З
Числові методи і математичне моделювання на ЕОМ	4, 6	MS Excel, VBA, VB MathCAD	П
Прикладні комп'ютерні системи в хімічній технології	6	MathCAD, MATLAB, програми-симулатори (HYSYS / UniSim Design та інші)	Н
Основи САПР та автоматизація хімічних процесів	6	Aspen Plus, програми-симулатори (HYSYS / UniSim Design та ін.), MATLAB Optimization Toolbox, VBA, VB	П

*Закінчення табл. 1*

<i>Дисципліна</i>	<i>Семестр</i>	<i>Комп'ютерні технології (програмні продукти)</i>	<i>Функція</i>
Теорія автоматичного управління	6, 7	MathCAD, MatLab, VBA, VB	П
Системний аналіз складних хіміко-технологічних комплексів	6, 7	MathCAD, MATLAB Simulink, програми-симулятори (HYSYS / UniSim Design та ін.)	П
Методи оптимізації хіміко-технологічних процесів	7	MS Excel, VBA, VB, Delphi	П
Основи роботи з сучасними інтегрованими комплексами	7, 8	Delphi, MathCAD	3 П
Макрокінетика і хімічна гідрогазодинаміка	7, 8	MathCAD, MATLAB, VBA, VB	П
Ідентифікація та моделювання процесів автоматизації	8	STAR, MathCAD, MATLAB	3
Осн. проект. систем автоматизації і систем управління експериментом	8	MS Excel, VBA	П
Методи штучного інтелекту та їх застосування в хімічній технології	8	Prolog, Neural Net Toolbox, MATLAB, VBA	П
Автоматизація бізнес-процесів	8	MS Excel, MathCAD, MATLAB Simulink, MS Project, GanttProject, OpenProj	П

Фундамент комп'ютерної підготовки складають дисципліни:

- «Комп'ютерна техніка та організація обчислювальних робіт», де вивчається побудова комп'ютера, операційні системи, інше системне програмне забезпечення (ПЗ) і компоненти пакетів класу MS Office (з поглибленим вивченням можливостей MS Excel для виконання інженерних розрахунків), а також основи застосування пакета MathCAD для організації обчислювальних робіт [1];
- «Алгоритмізація та програмування», що забезпечує насамперед алгоритмічну підготовку для розв'язання типових задач та відпрацювання методів алгоритмізації в середовищі програмування Qbasic (1 курс) та вивчення мов програмування Visual Basic for Application (VBA) і Visual Basic (VB) та застосування їх до розробки програмних модулів (1, 2 курси);
- «Комп'ютерна графіка», що навчає можливостям побудови технічних креслень за допомогою пакету AutoCAD і забезпечує можливості комп'ютерної побудови креслень у всіх технічних дисциплінах («Теоретична та прикладна механіка», «Типові виробничі процеси та обладнання об'єктів автоматизації» тощо) і при підготовці дипломного проекту;
- «Інформаційні системи та комплекси», яка вивчає види та методи побудови інформаційних систем, технології пошуку даних;
- «Прикладні комп'ютерні системи в хімічній технології», яка призначена для вивчення майбутніми фахівцями програмних пакетів, таких як MathCAD, MATLAB, Aspen Plus, HYSYS (UniSim Design), ChemCAD, PRO II, які є інструментами для розв'язання задач моделювання аналізу, синтезу та оптимізації складних ХТС;
- «Основи роботи з сучасними інтегрованими комплексами», де вивчається сучасне середовище програмування Delphi та здобуваються навички розробки програмних модулів для розв'язання практичних задач.

На наступному рівні освіти - підготовка магістрів (фахівців) закономірно зростає роль спеціальних дисциплін (табл. 2), в рамках яких студенти вчаться застосовувати для розв'язання професійних завдань набуті в рамках бакалаврата базові комп'ютерні знання та

навички, спеціалізовані програмні продукти (зокрема, розроблені на кафедрі пакети STAT-SENS, STAR, STAU). Вивчення програмних пакетів на цьому етапі планується переважно в рамках часу, виділеного на самостійну підготовку студентів.

*Таблиця 2 – Дисципліни, що забезпечують комп'ютерну підготовку магістрів*

<i>Дисципліна</i>	<i>Семестр</i>	<i>Комп'ютерні технології (програмні продукти)</i>	<i>Функція</i>
Математичні моделі хімічних реакторів	9	MathCAD, MS Excel, VBA, VB	П
Моделювання енергозберігаючих та екологічних систем	9	MathCAD, MS Excel, VBA, VB	П
Планування оптимального експерименту	9	STAT-SENS, MS Excel	З
Основи наукових досліджень	9	MathCAD, MS Excel,	З
Управління технологічними процесами	9	STAU	З
Автоматизація моделювання	9, 10	MathCAD, MATLAB, Delphi, VBA	П
Основи роботи з сучасними програмними комплексами	9, 10	VBA, MS Access, Statistica, MS Visio, CorelDRAW, MS PowerPoint	З
Математичні моделі основних ХТП	10	MathCAD	П
Комп'ютерні технології проектування СУ	10	STAR, MATLAB, Control Builder Honeywell	П
Інтелектуальні системи прийняття рішень	10	MathCAD, MATLAB	П
Основи комп'ютерного матеріалознавства	10	STAT-SENS, MS Excel	П
Оптимізація ХТС	10,11	MathCAD, Delphi, VBA, VB	П
Математичне моделювання систем і процесів	11	MATLAB, MathCAD, Femlab	З
Математичні методи оптимізації ХТП	11	MS Excel, VBA, VB, Delphi	П
Сучасні комп'ютерні технології	11	Dreamweaver (html, css, js), CorelDRAW, MS PowerPoint	З
Методи оцінювання процесів сталого розвитку	11	Online веб-додатки, SimaPro	З

При наповненні «комп'ютерних» дисциплін на перше місце ставиться принцип системності. Описані вище дисципліни можуть бути розглянуті як елементи відповідного блоку дисциплін базової комп'ютерної підготовки. Одночасно вказаний блок являє собою важливу частину системи підготовки студентів за спеціальністю «Комп'ютерно-інтегровані технологічні процеси і виробництва», що входить, у свою чергу, в систему освітніх програм для сталого розвитку, що ухвалена та реалізується в НТУУ «КПІ».

Сукупність знань, умінь і навичок в області інформаційних технологій є одним з ключових складових конкурентоспроможності наших фахівців на ринку праці, тому система комп'ютерної підготовки, що склалася на кафедрі, постійно удосконалюється відповідно до прогресу інформаційних технологій і змін вимог роботодавців.

1. Шахновский А.М., Квітка А.А. и др. Сб. тр. МНК «Комп. модел. в техн. и технол. и уст. разв.». Київ, 2010, с. 197–199.
2. Статюха Г.А. и др. Сб. тр. МНК «Комп. модел. в техн. и технол. и уст. разв.». Київ, 2010, с. 195–197.

## ПРОБЛЕМИ ВПРОВАДЖЕННЯ КОМП'ЮТЕРНИХ ТА ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ В БАГАТОРІВНЕВІЙ ПІДГОТОВЦІ ФАХІВЦІВ ТЕХНІЧНИХ СПЕЦІАЛЬНОСТЕЙ

Давиденко В.М., Сітак І.В., Тімошин А.С.

Інститут хімічних технологій (м. Рубіжне) СНУ ім. В. Даля, timoshin\_a@inbox.ru

Комп'ютерні технології становлять один із основних пріоритетів у розвитку сучасної вищої освіти, особливо технічної. Можна виділити чотири принципові складові впровадження комп'ютерних технологій в освіті – це соціальна, професійна, педагогічна і каталітична. Соціальна складова полягає у визнанні ролі, яку комп'ютерні технології відіграють сьогодні в цілому у суспільстві, в необхідності для освіти відображати інтереси суспільства і застосування комп'ютерних технологій для студентів. Професійна складова полягає в необхідності підготовки студентів до таких типів професійної діяльності, які потребують навиків використання комп'ютерних технологій. Педагогічна складова полягає у тому, що комп'ютерні технології супроводжують процес навчання, надаючи більш широкі можливості комунікації і більш якісні матеріали, що робить цей процес більш ефективним. Комп'ютерні технології можуть створювати каталітичний ефект не тільки на освіту, але й на суспільство в цілому, вдосконалюючи виконання, викладання, адміністрування, управління, поліпшуючи засвоєння матеріалу, спричиняючи позитивний вплив на освіту і змінюючи відношення між викладачами і студентами.

За допомогою комп'ютерних технологій формуються нові стандартні зразки організації знань, взаємозв'язок між різними галузями науки, практичного застосування отриманих навичок.

Провідна роль комп'ютерних та інформаційних технологій у підготовці фахівців технічних спеціальностей полягає у можливості використовувати їх як інформаційне джерело, інструмент для розв'язання різноманітних прикладних задач, засіб для контролю якості засвоєння знань і тестування та можливість моделювання економічних, хімічних, екологічних процесів.

Підготовка фахівців технічних спеціальностей у Інституті хімічних технологій (м. Рубіжне) Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля має багаторівневий характер. Інститут хімічних технологій готове бакалаврів, спеціалістів і магістрів з 6 технічних спеціальностей. Можна підкреслити, що навчальні плани підготовки спеціалістів та магістрів мають незначні розходження. Але, зрозуміло, що задачі в процесі підготовки спеціалістів і магістрів ставляться по різному.

Якщо проаналізувати рівень педагогічної складової впровадження комп'ютерних та інформаційних технологій в навчанні, то можна вказати наступне. Набуло принципово нового рівня інформаційне забезпечення навчального процесу. Наявність науково-методичних матеріалів в електронному виді, підготовлених на високому професійному рівні, наявність локальної мережі в інституті, яка надає можливість доступу до методичних матеріалів, наявність доступу до Інтернету, – все це сприяє ефективній роботі в підготовці висококваліфікованих майбутніх фахівців в хімічні технології. Але, в цьому секторі можна визначити низку проблем. По-перше, має місце низький відсоток інтерактивних та мультимедійних методичних матеріалів, наприклад, віртуальні лабораторні роботи, навчальні комп'ютерні програми з елементами тестування та запрограмованої навігації, таке інше. Такі матеріали набувають все більшого значення на фоні недостатньої наявності сучасного лабораторного обладнання та обмеження баз практик. Зрозуміло, що розробка віртуальних лабораторних робіт не може бути в компетенції звичайного викладача. Такі програмні продукти мають бути сертифікованими і повинні створюватися висококваліфікованими програмістами разом з спеціалістами предметної області. Також можна вказати на недостатність або низький рівень навчально-інформаційних Інтернет - порталів.

Рівень володіння комп'ютерними та інформаційними технологіями майбутніми фахівцями з хімічної технології та інженерії безпосередньо залежить від освітньо-професійної програми підготовки. У навчальному плані підготовки бакалаврів передбачена лише одна нормативна дисципліна «Обчислювальна математика та основи програмування». Викладання розділів обчислювальної математики в класичному розумінні цієї науки не є ефективним для набуття професійної майстерності інженера. Вивчення методів обчислювальної математики повинно базуватися на прикладах фізико-хімічних і хімічних явищ. Для цього потрібні відповідні підручники, які знову ж таки повинні складатися фахівцями з хімії і знанням програмування одночасно. На даний час можна скористатися лише невеличкими розробками, наприклад [3].

Необхідно більш чітко визначитися з програмним середовищем для виконання розрахунків. Найбільш розповсюдженим програмним продуктом для хімічних розрахунків і, на наш погляд найбільш придатним для звичайного студента, є Mathcad – система комп'ютерної алгебри із класу систем автоматизованого проектування, орієнтована на підготовку інтерактивних документів з обчисленнями й візуальним супроводом, що відрізняється легкістю використання й застосування для колективної роботи. Незважаючи на те, що ця програма в основному орієнтована на користувачів-непрограмістів, Mathcad також використовується в складних проектах, щоб візуалізувати результати математичного моделювання, шляхом використання розподілених обчислень і традиційних мов програмування. Також Mathcad часто використовується у великих інженерних проектах, де велике значення має трасируємість і відповідність стандартам. Mathcad дає можливість виконування хіміко-технологічних розрахунків, розрахунків матеріального балансу реактору синтезу, технологічних показників, теплового балансу, залежності швидкості реакції від температури та тиску, концентрації як функції ступеню перетворення, моделювання впливу температури, тиску, ступеню перетворення, мольної долі речовини на швидкість реакції, об'ємного відображення швидкості оборотної реакції.

Що стосується підготовки магістрів зі спеціальностей хімічної технології, зокрема використання інформаційних технологій, то потрібно залучати до навчального процесу вже відомі комп'ютерні прикладні програми для моделювання хімічних процесів. Ці програми дають змогу вирішувати багато складних хімічних задач без застосування серйозного програмування. Наведемо лише деякі з них: Ascalaph - Molecular modeling - програми, що допомагають вирішувати завдання побудови, редактування формул і моделювання молекулярної динаміки. Програми призначенні для фахівців в області моделювання молекул, особливо молекулярної динаміки, ДНК/РНК, білків і їх комплексів; ChemAxon chemistry software - розробка й реалізація хімічних програмних інструментів, заснованих на Java-Мові. Академічно безкоштовними є програми малювання й редактування структур Marvinbeans, пакет Jchem, що включає віртуальний реактор і функцію пророкування метаболізму, а також інструмент роботи з базами даних InstantJchem; Gordon Group/GAMESS Homepage - американська галузь розвитку програми квантово-хімічних розрахунків GAMESS, що представляє винятково обчислювальну оболонку; The PC Games/Firefly Home Page - вітчизняна версія GAMESS, розроблена в МГУ, також має тільки обчислювальну оболонку. Відрізняється від американської значним прискоренням розрахунків.

1. Репьев Ю.Г. Интерактивное самообучение: Монография. - М: Логос, 2004. - 248 с.
2. Смышляева Л.Г., Сивицкая Л.А., Качалов Н.А. Активные образовательные технологии как условие реализации компетентностного подхода в высшей школе \ Известия Томского политехнического университета. 2006. Т. 309. № 5 с.235-240.
3. Луцко Ф.Н., Сороко В.Е., Прокопенко А.Н. Химико-технологические расчеты с применением MathCAD: учебное пособие. – СПб.: СПБГТИ(ТУ). 2006. – 12 с.

## ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ БЕСПЛАТНОГО ПРИКЛАДНОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ В ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЯХ

Волков С.В.

Институт химических технологий (г.Рубежное) ВНУ им.В.Даля, sv.kenos@gmail.com

Программное обеспечение (ПО) является наиболее важной частью информационной системы любой организации, но следует помнить, что ПО является продуктом интеллектуальной собственности, защищенным законом об авторских правах. Сегодня мировой практикой является борьба с нелицензионным, пиратским программным обеспечением.

За последние годы в странах СНГ наметилась тенденция к переходу государственных учреждений и организаций на бесплатное программное обеспечение. Процесс перехода является достаточно условным, т.к. до недавнего времени во многих организациях нелегально использовалось коммерческое ПО на свой страх и риск. Поэтому данный процесс, скорее всего, можно назвать легализацией рабочих мест сотрудников, чем переходом.

Коммерческие организации часто соприкасаются с государственными учреждениями. Они вынуждены использовать те же программные средства, которые предоставляют государственные органы. Это является предпосылкой к тому, что как минимум часть бизнеса также будет переходить на бесплатное программное обеспечение.

Свободное программное обеспечение приобретает огромное значение для отрасли информационных технологий, оно стало важным элементом в механизмах извлечения прибыли крупнейших мировых компаний и государственных организаций. [1]

В связи с вышеперечисленным, появляется необходимость в специалистах, имеющих навыки работы и знания, связанные с бесплатным ПО. Таким образом, использование некоммерческого ПО при подготовке студентов в высших учебных заведениях является достаточно актуальной задачей. Помимо этого, большая часть ВУЗов сами по себе являются бюджетными организациями, и большинство из них не в состоянии выделять огромные средства на покупку лицензий для коммерческого ПО. Как результат – использование рассматриваемого ПО в высшем учебном заведении позволит уменьшить затраты на информационные технологии и решит задачу подготовки специалистов, соответствующих современным тенденциям развития государственных организаций и бизнеса.

Бесплатное ПО (Freeware) – это программное обеспечение, лицензионное соглашение которого не требует каких-либо выплат правообладателю. Freeware обычно распространяется в бинарном виде, без исходных кодов и является проприетарным ПО.[1]

Важно отличать Freeware от свободного программного обеспечения, которое предоставляет каждому помимо права на использование программного обеспечения, право модификации и ряд других прав. Freeware может распространяться без исходных текстов и может содержать ограничения на коммерческое использование, модификацию и.т.д. [2]

В мире существует свыше десятка принятых бесплатных лицензий со своими особенностями, это такие лицензии как Adware, Freeware, Open Source Software, Registerware, Free Software и др. Следует отметить, что все эти лицензии позволяют использовать программные средства без финансовых затрат.

Пятилетний опыт внедрения и использования бесплатного ПО в учебном процессе Института химических технологий (г.Рубежное) ВНУ им.В.Даля выявил некоторые трудности. Первым существенным недостатком является практически отсутствие учебной и методической литературы по бесплатным прикладным пакетам, рекомендованной министерством образования и науки. Этот недостаток влечет за собою индивидуальную разработку совершенно новых методических указаний и пособий. Следующая трудность заключается в неготовности профессорско-преподавательского состава к безболезненному переходу от коммерческого ПО к бесплатному, но это скорее дело времени, нежели «глухой угол».

Программное обеспечение принято подразделять на системное, прикладное и инструментальное. Как было сказано выше, выпускник ВУЗа должен уметь работать с бесплатным прикладным ПО, которое используется практически в любой сфере деятельности человека. В отличии от прикладного, навыки работы с системным и инструментальным ПО необходимы более узкому кругу специалистов, таких, например, как ИТ-специалисты.

Прикладным называется ПО, предназначенное для решения определенной целевой задачи из проблемной области. Часто такие программы называют приложениями. Спектр проблемных областей в настоящее время весьма широк.

Из всего разнообразия прикладного ПО выделяют группу наиболее распространенных программ (типовыe пакеты и программы).

К типовому прикладному ПО относят следующие программы:

- текстовые процессоры;
- табличные процессоры;
- системы иллюстративной и деловой графики;
- системы управления базами данных;
- программы математических расчетов, моделирования и анализа экспериментальных данных.

Первые четыре программы указанные в списке входят в так называемый пакет офисных приложений. Конкретными представителями подобного набора программ являются коммерческий продукт Microsoft Office и его бесплатный аналог OpeOffice.org. Рассмотрим их подробнее, сравнивая некоторые особенности (в сравнении используются версии Microsoft Office 2000 и OpeOffice.org 3.0.0).

Текстовый процессор OOO Writer, как аналог MS Word. При использовании OOO Writer в учебном процессе были выявлены такие его недостатки, как существующие проблемы с проверкой орфографии и грамматики, а также неудобный редактор формул, в сравнении с MS Equation. В остальном же возможности двух этих редакторов идентичны. В поддержку OOO Writer выступает несущественный плюс – конвертация документа в формат PDF.

Табличный процессор OOO Calc, практически не отличается от своего коммерческого аналога MS Excel. Набор функций для работы с данными достаточен для проведения вычислений, функции Calc, в отличии от Excel имеют английские названия, а не русские. Единственный недостаток Calc, который был выявлен – слабо реализованная программа «Поиск решения», которая важна для решения оптимизационных задач.

Общего у средств для создания презентаций OOO Impress и MS PowerPoint много, возможности одинаковы, существуют лишь некоторые различия в их реализации.

Система управления базами данных OOO Base как аналог MS Access. При создании баз данных в Base студенты некомпьютерных специальностей сталкиваются с проблемами понимания некоторых моментов, таких как создание вычисляемых полей, обеспечение целостности, создание сложных форм и отчетов, нет возможности работать с полями с подстановками. На основании этого можно сказать о том, что изучение Access для пользователя начального уровня предпочтительнее. Однако Access не может работать со многими бесплатными серверными и настольными СУБД, в отличии от Base. В данной ситуации есть надежда на усовершенствование пакета Base в сторону упрощения.

Коммерческих математических пакетов существует достаточно большое количество, однако в учебном процессе использовались только некоторые из них, это такие пакеты как Mathcad, MathLab и Maple. Идентичных аналогов, подобных офисным для этих пакетов нет, однако существует ряд бесплатных приложений, которые используются для решения задач оптимизации, линейной алгебры, дифференцирования и интегрирования, обработки экспериментальных данных. Лучшими для использования в учебном процессе выявились пакеты SciLab и Maxima.

Как видно из вышеперечисленного, уровень задач, решаемых бесплатными программными средствами не уступает коммерческим. Учитывая это, а также накопленный опыт, можно сделать вывод о том, что использование бесплатного прикладного программного обеспечения в ВУЗе является эффективным решением на данном этапе развития экономики стран СНГ.

1. Use of Free and Open-Source Software (FOSS) in the U.S. Department of Defense [Электронный ресурс] / The MITRE Corporation. 2003. – 168 с. Режим доступа: <http://www.microcross.com/dodfoss.pdf>.
2. Кондращенко А., Бесплатные компьютерные программы [Текст] / М.: Патенты и лицензии. 2009, № 5. – с. 15–18.

## АВТОРСЬКИЙ ВКАЗІВНИК

**MARTINSEN Kristian**

Секція 6

Professor Gjovik University College, Norway; professor in Manufacturing Technology  
and is responsible for the new Master in Sustainable Manufacturing

[kristian.martinsen@sintef.no](mailto:kristian.martinsen@sintef.no)

**АЛЬ РАММАХІ Мустафа Маккі Мохаммед Алі**

Секція 2

Сумський державний університет; аспірант кафедри процесів та обладнання хімічних і  
нафтопереробних виробництв

[engmustafa@ukr.net](mailto:engmustafa@ukr.net)

**АЛЬ ХАМАДАНІ Мохаммед Джаліл**

Секція 2

Інститут хімічних технологій Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля,  
м. Рубіжне; аспірант кафедри вищої математики та комп'ютерних технологій

[kondratov@rune.lg.ua](mailto:kondratov@rune.lg.ua)

**АБРАМОВА Алла Олександрівна**

Секція 5

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;  
асистент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів

[alla\\_abramova@ukr.net](mailto:alla_abramova@ukr.net)

**АРТЮХОВ Артем Євгенійович**

Секція 2

к.т.н., Сумський державний університет; старший викладач кафедри процесів та обладнання  
хімічних і нафтопереробних виробництв

[rohnp@yandex.ru](mailto:rohnp@yandex.ru)

**АТАМАНЮК Володимир Михайлович**

Секція 2

професор, д.т.н., Національний університет "Львівська політехніка";  
завідувач кафедри хімічної інженерії

[atamanyuk@ukr.net](mailto:atamanyuk@ukr.net)

**БАГУТА Віктор Анатолійович**

Секція 4

Шосткинський інститут Сумського державного університету;  
асpirант кафедри системотехніки та інформаційних технологій

**БАРБУЦА Ігор Мирчевич**

Секція 5

Науковий центр вивчення ризиків «Ризикон», м. Сєвєродонецьк;  
замісник директора з виробництва

[office@rizikon.lg.ua](mailto:office@rizikon.lg.ua)

**БАРНА Ірина Романівна**

Секція 2

Національний університет «Львівська політехніка»; аспірант кафедри хімічної інженерії

[barnairuna@ukr.net](mailto:barnairuna@ukr.net)

**БАРШАЦЬКИЙ Олексій Ігорович**

Секція 5

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;  
магістр кафедри кібернетики ХТП

[Lesha.memphis@gmail.com](mailto:Lesha.memphis@gmail.com)

**БЕЗНОСИК Юрій Олександрович**

Секції 1–4, 6

доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;  
доцент кафедри кібернетики ХТП

[yu\\_beznosyk@ukr.net](mailto:yu_beznosyk@ukr.net)

**БЕЗСІННИЙ Дмитро Вадимович**

Секція 4

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;  
студент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів

[rastabess@rambler.ru](mailto:rastabess@rambler.ru)

**БЕЛОДЕД Артем Вячеславович**

Секція 2

Сумський державний університет; магістрант кафедри процесів та обладнання хімічних  
і нафтопереробних виробництв

**БЕНДЮГ Владислав Іванович**

Секції 5, 6

доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;  
доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів

[Vladys77@gmail.com](mailto:Vladys77@gmail.com)

**БИКОРІЗ Євгеній Йосипович**

Секція 4

Інститут технічної теплофізики НАН України, н.с. відділу теплофізичних процесів у котлах

[engeco@kw.ua](mailto:engeco@kw.ua)

**БОБОНИЧ Іван Сергійович**

Секція 4

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;  
студент кафедри автоматизації хімічних виробництв

[bobonich\\_ivan@mail.ru](mailto:bobonich_ivan@mail.ru)

# Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку

<b>БОЙКО Тетяна Владиславівна</b>	Секції 3, 5, 6	
доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;		
доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів		<a href="mailto:tvbojko@gmail.com">tvbojko@gmail.com</a>
<b>БОЧКОР Ігор Ігоревич</b>	Секція 2	
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;		
магістр кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів		<a href="mailto:gor-matpockih@rambler.ru">gor-matpockih@rambler.ru</a>
<b>БОНДАРЕНКО Олена Сергіївна</b>	Секція 6	
доцент, к.х.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;		
доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів		
<b>БОНДАРЕНКО Сергій Григорович</b>	Секції 4, 6	
доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;		
доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів		<a href="mailto:sqb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua">sqb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua</a>
<b>БРАНОВИЦЬКА Слава Викторовна</b>	Секція 4	
доцент, к.е.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;		
доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів		<a href="mailto:kxtp@list.ru">kxtp@list.ru</a>
<b>БРУСНИК Світлана</b>	Секція 4	
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;		
магістр кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів		<a href="mailto:Brusnik_sveta@mail.ru">Brusnik_sveta@mail.ru</a>
<b>БУГАЕВА Людмила Николаївна</b>	Секції 2, 4, 7	
доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;		
доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів		<a href="mailto:bugaeva_l@ukr.net">bugaeva_l@ukr.net</a>
<b>БУДЬКО Марина Олександрівна</b>	Секція 6	
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;		
аспірант кафедри органічної хімії та технології органічних речовин		<a href="mailto:fialka93@gmail.com">fialka93@gmail.com</a>
<b>ВАСИЛЬКЕВИЧ Олександр Іванович</b>	Секції 4, 6	
доцент, к.х.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»;		
доцент кафедри органічної хімії та технології органічних речовин		<a href="mailto:vasylkevych@ukr.net">vasylkevych@ukr.net</a>
<b>ВОЛКОВ Сергей Владимирович</b>	Секція 7	
Інститут хіміческих технологій (г. Рубежнє) ВНУ им.В.Даля;		
ассистент кафедри высшей математики и компьютерных технологий		<a href="mailto:sv.kenos@gmail.com">sv.kenos@gmail.com</a>
<b>ВОРОБЬЕВА Виктория Ивановна</b>	Секція 1	
Національний техніческий университет України «КПІ»;		
аспирант кафедри фізичної хімії		
<b>ВОРОНА Александр Петрович</b>	Секція 5	
Научный центр изучения рисков «Ризикон», г. Северодонецк; заведующий отделом		<a href="mailto:office@rizikon.lg.ua">office@rizikon.lg.ua</a>
<b>ГАВРИЛІВ Роман Іванович</b>	Секція 3	
доцент, к.т.н. Національний університет «Львівська політехніка»;		
доцент кафедри хімічної інженерії		
<b>ГЕРАСИМЕНКО Елена Юр'євна</b>	Секція 2	
доцент, к.т.н., Донской государственный технический университет;		
доцент кафедры автоматизация процессов и производств НГК		<a href="mailto:dec_neftgas@iem.donstu.ru">dec_neftgas@iem.donstu.ru</a>
<b>ГЕРАСИМЕНКО Юрій Яковлевич</b>	Секція 2	
професор, д.т.н., Донской государственный технический университет;		
зав. кафедрой автоматизация процессов и производств НГК		<a href="mailto:dec_neftgas@iem.donstu.ru">dec_neftgas@iem.donstu.ru</a>
<b>ГОЛОВАНОВ Андрей Анатольевич</b>	Секція 2	
доцент, к.т.н., Донской государственный технический університет;		
доцент кафедры автоматизация процессов и производств НГК		<a href="mailto:dec_neftgas@iem.donstu.ru">dec_neftgas@iem.donstu.ru</a>
<b>ГРАНОВСКИЙ Эдуард Алексеевич</b>	Секція 5	
к.т.н., Научный центр изучения рисков «Ризикон», г. Северодонецк; генеральный директор		<a href="mailto:office@rizikon.lg.ua">office@rizikon.lg.ua</a>

# Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку

<b>ГРЕБЕНЮК Анатолій Георгійович</b> Старший науковий співробітник, к.х.н. Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України; с.н.с.	Секція 1 <a href="mailto:grebenyuk_ag@ukr.net">grebenyuk_ag@ukr.net</a>
<b>ГУМНИЦЬКИЙ Ярослав Михайлович</b> професор, д.т.н., Національний університет "Львівська політехніка"; професор кафедри екології та охорони навколишнього середовища	Секція 2 <a href="mailto:jgumnitsky@ukr.net">jgumnitsky@ukr.net</a>
<b>ГУРЧИК Анна Ігоревна</b> Національний техніческий університет України «КПІ»; студентка кафедри автоматизації хіміческих производств	Секція 4
<b>ДАВИДЕНКО Викторія Михайловна</b> Інститут хіміческих технологій СНУ им. В. Даля; старший преподаватель кафедры высшей математики и компьютерных технологий	Секція 7
<b>ДЕМЧЕНКО Андрей Николаєвич</b> Сумський юридичний університет	Секція 2
<b>ДЖИГИРЕЙ Ірина Миколаївна</b> к.т.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; старший викладач кафедри кібернетики ХТП	Секція 4 <a href="mailto:dzhygyrey@gmail.com">dzhygyrey@gmail.com</a>
<b>ДОНЕЦ Юlia Владимирова</b> Державний вищий навчальний заклад «Дніпропетровський хіміко-технологічний університет»; студент кафедри технології неорганічних речовин та екології	Секція 1
<b>ДУБІНІН Анатолій Іванович</b> професор, д.т.н., Національний університет «Львівська політехніка»; професор кафедри хімічної інженерії	Секція 3
<b>ЄВТУШЕНКО Артем Олександрович</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; асpirант кафедри кібернетики ХТП	Секція 4 <a href="mailto:evtushenko.artem@gmail.com">evtushenko.artem@gmail.com</a>
<b>ЄГОРОВ Юрій Павлович</b> професор, к.т.н., Запорізька державна інженерна академія; професор кафедри металургії кольорових металів	Секція 2 <a href="mailto:colourmet@zgia.zp.ua">colourmet@zgia.zp.ua</a>
<b>ЖИГІР Ольга Миколаївна</b> доцент, к.ф.-м.н., Національний технічний університет України «КПІ»; доцент кафедри кібернетики ХТП	Секція 3 <a href="mailto:zhygir@rambler.ru">zhygir@rambler.ru</a>
<b>ЖУРАКОВСЬКА Оксана Сергіївна</b> доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; доцент кафедри автоматизованих систем обробки інформації та управління	Секція 2 <a href="mailto:oxana@asu.ntu-kpi.kiev.ua">oxana@asu.ntu-kpi.kiev.ua</a>
<b>ЖУРАКОВСЬКИЙ Ярослав Юрійович</b> Національний технічний університет України «КПІ»; ст. викладач кафедри автоматизації хімічних виробництв	Секція 2 <a href="mailto:zhurakovsky@bigmir.net">zhurakovsky@bigmir.net</a>
<b>ЖУЧЕНКО Анатолій Іванович</b> професор, д.т.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; завідувач кафедри автоматизації хімічних виробництв	Секція 4 <a href="mailto:zhaniv@ukr.net">zhaniv@ukr.net</a>
<b>ЗАДОРОЖНИЙ Андрій Сергійович</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; магістр кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів	Секція 4 <a href="mailto:a.zadorozhnyi@gmail.com">a.zadorozhnyi@gmail.com</a>
<b>ЗАПОРОЖЕЦЬ Юлія Анатоліївна</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; асpirант кафедри кібернетики ХТП	Секція 3 <a href="mailto:z.juli@bigmir.net">z.juli@bigmir.net</a>
<b>ЗАХАРОВ Іван Іванович</b> професор, д.х.н., Технологический институт Восточноукраинского национального университета им. В. Даля (г. Северодонецк); профессор кафедры технологии неорганических веществ и экологии	Секція 1, 2 <a href="mailto:zvonu@rambler.ru">zvonu@rambler.ru</a>

# Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку

<b>ЗИЯТДИНОВ Надир Низамович</b> професор, д.т.н., Казанский национальный исследовательский технологический университет; заведующий кафедрой системотехники	Секція 2 <a href="mailto:nziat@yandex.ru">nziat@yandex.ru</a>
<b>ЗУБ Юрій Леонідович</b> доцент, д.х.н., Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України; зав. відділу «Хімія поверхні гібридних матеріалів»	Секція 1 <a href="mailto:zub_yuriy@isc.gov.ua">zub_yuriy@isc.gov.ua</a>
<b>ІВАНОВ Віктор Ілліч</b> Запорізька державна інженерна академія; ст. викладач кафедри металургії кольорових металів	Секція 2 <a href="mailto:colourmet@zgia.zp.ua">colourmet@zgia.zp.ua</a>
<b>ІВАНЮК Роман Романович</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; студент інституту телекомунікаційних систем	Секція 2 <a href="mailto:link.irr@gmail.com">link.irr@gmail.com</a>
<b>КАНИГІН Олександр Вікторович</b> Інститут технічної теплофізики НАН України, аспірант відділу теплофізичних процесів у котлах	Секція 4 <a href="mailto:engeco@kw.ua">engeco@kw.ua</a>
<b>КАРАВАНОВ Антон Анатольович</b> Казанский национальный исследовательский технологический университет; аспирант кафедры системотехники	Секція 2 <a href="mailto:k.ant@mail.ru">k.ant@mail.ru</a>
<b>КАЦ Марк Давидович</b> профессор, д.т.н., Рубежанский химико – технологический институт Восточноукраинского университете им. В. Даля; профессор кафедры высшей математики и компьютерных технологий	Секція 2 <a href="mailto:mdkats@is.ua">mdkats@is.ua</a>
<b>КАЧОРОВСЬКА Ольга Петрівна</b> Національний технічний університет України «КПІ»; старший викладач кафедри загальної та неорганічної хімі	Секція 1 <a href="mailto:o_mur@ukr.net">o_mur@ukr.net</a>
<b>КВАСКО Михайло Зіновійович</b> професор, к.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; професор кафедри автоматизації хімічних виробництв	Секція 2 <a href="mailto:alkvi@ukr.net">alkvi@ukr.net</a>
<b>КВІТКА Олександр Олександрович</b> доцент, к.х.н., Національний технічний університет України «КПІ»; доцент кафедри кібернетики ХТП	Секції 3, 7 <a href="mailto:alkvi@ukr.net">alkvi@ukr.net</a>
<b>КИШЕНЬКО Василий Дмитриевич</b> профессор, к.т.н., Национальный университет пищевых технологий; профессор кафедры автоматизации и компьютерно-интегрированных технологий	Секція 4 <a href="mailto:kvd1948@gmail.com">kvd1948@gmail.com</a>
<b>КІВА Ігор Ігоревич</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; студент кафедри автоматизації хімічних виробництв	Секція 4 <a href="mailto:kivaigor@gmail.com">kivaigor@gmail.com</a>
<b>КЛИМЮК Ольга Олексіївна</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; магістр кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів	Секція 6 <a href="mailto:olgaklmk@gmail.com">olgaklmk@gmail.com</a>
<b>КОВАЛЕВСКИЙ Валерий Михайлович</b> доцент, к.т.н., Национальный технический университет Украины «КПИ»; доцент кафедры автоматизации химических производств	Секція 5 <a href="mailto:kvmdom-46@ukr.net">kvmdom-46@ukr.net</a>
<b>КОЗАНЕВИЧ Звенислава Ярославівна</b> доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; доцент кафедри автоматизації хімічних виробництв	Секція 4 <a href="mailto:kvmdom-46@ukr.net">kvmdom-46@ukr.net</a>
<b>КОЗЛОВ Ярослав Николаевич</b> ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»; асистент кафедры енергетики	Секція 3 <a href="mailto:and8705@yandex.ru">and8705@yandex.ru</a>

# Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку

<b>КОЛПАКОВ Владимир Владимирович</b> Национальный технический университет Украины «КПИ»; старший преподаватель кафедры автоматизации химических производств	Секція 4 <a href="mailto:Kolpakov@kpi.ua">Kolpakov@kpi.ua</a>
<b>КОЛЯБІНА Дар'я Олександрівна</b> Національний технічний університет України «КПІ»; магістр кафедри кібернетики ХТП	Секція 3 <a href="mailto:amito@i.ua">amito@i.ua</a>
<b>КОМАРИСТА Богдана Миколаївна</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; асистент кафедри кібернетики ХТП	Секція 6 <a href="mailto:angel2nika@gmail.com">angel2nika@gmail.com</a>
<b>КОНДРАТОВ Сергій Олексійович</b> професор, д.х.н., Інститут хімічних технологій Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля, м. Рубіжне; завідувач кафедрою Вищої математики та комп'ютерних технологій	Секція 2 <a href="mailto:kondratovsa@gmail.com">kondratovsa@gmail.com</a>
<b>КОНДРАЧУК Александр Владимирович</b> с.н.с., к.ф.-м.н., Институт теоретической физики НАН Украины, старший научный сотрудник	Секція 2 <a href="mailto:kondr@kondr.kiev.ua">kondr@kondr.kiev.ua</a>
<b>КОНДРАШОВ Дмитрий Олегович</b> Національний університет пищевих технологий; магістрант кафедри автоматизації та комп'ютерно-інтегрованих технологій	Секція 4
<b>КОНЦЕВОЙ Андрій Леонідович</b> доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; доцент кафедри технології неорганічних речовин та загальної хімічної технології	Секція 2 <a href="mailto:kontsev@xtf.kpi.ua">kontsev@xtf.kpi.ua</a>
<b>КОНЦЕВОЙ Сергій Андрійович</b> к.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; асистент кафедри технології неорганічних речовин та загальної хімічної технології	Секція 2 <a href="mailto:kontsev@xtf.kpi.ua">kontsev@xtf.kpi.ua</a>
<b>КОРЖИК Михайло Володимирович</b> доцент, к.т.н. Національний технічний університет України «КПІ»; доцент кафедри автоматизації хімічних виробництв	Секція 4 <a href="mailto:korzhyk@kpi.ua">korzhyk@kpi.ua</a>
<b>КОТОВЕНКО Елена Андреевна</b> доцент, к.т.н., Киевский государственный университет строительства и архитектуры; заведующая лабораторией проблем моделирования в экологии	Секція 6 <a href="mailto:diekknuba@ukr.net">diekknuba@ukr.net</a>
<b>КРАСИЛЬНИКОВА Анна Олександрівна</b> Інститут хімічних технологій Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля, м. Рубіжне; аспірант кафедри Вищої математики та комп'ютерних технологій	Секція 2 <a href="mailto:krasina@list.ru">krasina@list.ru</a>
<b>КРАСНОБОРОДЬКО Денис Александрович</b> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет); ассистент кафедры математического моделирования и оптимизации химико-технологических процессов	Секція 7 <a href="mailto:kraden@list.ru">kraden@list.ru</a>
<b>КРОНИКОВСКИЙ Дмитрий Олегович</b> Національний університет пищевих технологий; студент кафедри автоматизації та комп'ютерно-інтегрованих технологій	Секція 4 <a href="mailto:extrmdim@ukr.net">extrmdim@ukr.net</a>
<b>КУЛИНЧЕНКО Георгий Васильевич</b> доцент, к.т.н., Шосткинський інститут Сумського національного університету; доцент кафедри СІТ	Секція 4 <a href="mailto:heorhy@rambler.ru">heorhy@rambler.ru</a>
<b>КУЛИШЕНКО Роман Юрьевич</b> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет); аспирант кафедры математического моделирования и оптимизации химико-технологических процессов	Секція 7 <a href="mailto:admin@mm.lti-gti.ru">admin@mm.lti-gti.ru</a>

# Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку

<b>КУЧИН Генадій Петрович</b> к.т.н., Інститут технічної теплофізики НАН України; с.н.с. відділу теплофізичних процесів у котлах	Секція 4	
<b>КУЛИШЕНКО Роман Юрьевич</b> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет); аспирант кафедры математического моделирования и оптимизации химико-технологических процессов	Секція 7	<a href="mailto:engeco@kw.ua">engeco@kw.ua</a>
<b>КУПРИЕНКО Наталья Петровна</b> Национальный технический университет Украины «КПИ»; младший научный сотрудник кафедры физической химии	Секція 1	
<b>ЛАДАНЮК Анатолий Петрович</b> профессор, д.т.н., Национальный университет пищевых технологий; заведующий кафедрой автоматизации и компьютерно-интегрированных технологий	Секція 4	<a href="mailto:Ladanyuk@nupt.edu.ua">Ladanyuk@nupt.edu.ua</a>
<b>ЛАЗАРЕВ Тарас Валериевич</b> Национальный технический университет Украины «КПИ»; техник, научно-исследовательский центр “Ресурсосберегающие технологии”	Секція 4	<a href="mailto:waiter120@ukr.net">waiter120@ukr.net</a>
<b>ЛАПТЕВА Татьяна Владимировна</b> к.т.н., Казанский национальный исследовательский технологический университет; докторант кафедры системотехники	Секція 2	<a href="mailto:tanlapteva@gmail.com">tanlapteva@gmail.com</a>
<b>ЛАСКОРУНСКАЯ Леся Александровна</b> Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова; студентка кафедры физической и коллоидной химии	Секція 3	
<b>ЛЕБЕДЕВ Владимир Евгеньевич</b> Национальный технический университет Украины «КПИ»; аспирант кафедры автоматизации химических производств	Секція 4	
<b>ЛЕЛЕКА Сергій Володимирович</b> Національний технічний університет України «КПІ»; науковий співробітник НДЦ «РТ»	Секція 4	<a href="mailto:sleleka@rst.kiev.ua">sleleka@rst.kiev.ua</a>
<b>ЛІСИЦЫН Николай Васильович</b> профессор, д.т.н., Санкт-Петербургский государственный технологический институт; ректор технического университета	Секція 2	
<b>ЛОГВИН Андрей Владимирович</b> Сумський державний університет; асистент кафедри ПОХНП	Секція 2	<a href="mailto:gti@restech.ru">gti@restech.ru</a>
<b>ЛОГВІН Валерій Олександрович</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; асpirант кафедри кібернетики ХТП	Секція 4	<a href="mailto:fench@ukr.net">fench@ukr.net</a>
<b>ЛОРІЯ Марина Геннадіївна</b> доцент, к.т.н., Технологический институт Восточноукраинского национального университета им. В. Даля (г. Северодонецк); доцент кафедры электронных аппаратов	Секції 1, 2	<a href="mailto:logvyn_valerii@mail.ru">logvyn_valerii@mail.ru</a>
<b>ЛУГОВАЯ Светлана Олеговна</b> к.т.н., Сумський юридичний університет; ассистент кафедри прикладной гидроаэромеханики	Секція 2	<a href="mailto:atp00@ukr.net">atp00@ukr.net</a>
<b>МАЙСТРУК Володимир Володимирович</b> доцент, к.т.н., Національний університет «Львівська політехніка»; доцент кафедри хімічної інженерії	Секція 3	
<b>МАКАРЕВИЧ Эдвін Ніколаєвич</b> профессор, д.т.н., University of Technology and Life Sciences (Poland); Faculty of Chemical Engineering and Technology	Секція 1	<a href="mailto:makar@utp.edu.pl">makar@utp.edu.pl</a>

# Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку

<b>МАЛЕЦЬКИЙ Захар Васильович</b>	Секція 3	
Національний технічний університет України «КПІ»; аспірант лабораторії іонного обміну та адсорбції		<a href="mailto:mail@zahar.info">mail@zahar.info</a>
<b>МАНУЙЛОВА Елена Викторовна</b>	Секція 2	
Санкт-Петербургский государственный технологический институт; младший научный сотрудник кафедры ресурсосберегающих технологий		<a href="mailto:manuylova.lena@gmail.com">manuylova.lena@gmail.com</a>
<b>МАРЧЕНКО С.В.</b>	Секція 1	
Одесский национальный медицинский университет		
<b>МАСЛОВ Роман Александрович</b>	Секція 5	
Научный центр изучения рисков «Ризикон», г. Северодонецк; ведущий инженер-программист		<a href="mailto:office@rizikon.lg.ua">office@rizikon.lg.ua</a>
<b>МЕДВЕДЕВ Ромуальд Брониславович</b>	Секція 2	
професор, к.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; професор кафедри кібернетики ХТП		<a href="mailto:medvedev@xtf.kpi.ua">medvedev@xtf.kpi.ua</a>
<b>МЕРДУХ Світлана Леонідівна</b>	Секція 2	
Національний технічний університет України «КПІ»; аспірант кафедри кібернетики ХТП		<a href="mailto:merdukh.svetlana@yandex.ru">merdukh.svetlana@yandex.ru</a>
<b>МИЛЕНЬКИЙ Владислав Васильович</b>	Секція 4	
доцент, к.т.н., Национальный технический университет Украины «КПИ»; доцент кафедры автоматизации химических производств		<a href="mailto:milenkyvv@ukr.net">milenkyvv@ukr.net</a>
<b>МИНАЕВ Борис Филиппович</b>	Секція 1	
профессор, д.х.н., Черкасский национальный университет им. Б. Хмельницкого; зав. кафедрой качества, стандартизации и органической химии		<a href="mailto:bmin@rambler.ru">bmin@rambler.ru</a>
<b>МИТИНА Лілія Ігоревна</b>	Секція 1	
Национальная металлургическая академия Украины; студент кафедры покрытий, композиционных материалов и защиты металлов		
<b>МИРОШНИЧЕНКО Елена Юрьевна</b>	Секція 6	
Киевский государственный университет строительства и архитектуры; научный сотрудник лаборатории проблем моделирования в экологии		<a href="mailto:elenamiroshka@ukr.net">elenamiroshka@ukr.net</a>
<b>МИРОШНИЧЕНКО Юлія Анатоліївна</b>	Секція 1	
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; магістр кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів		<a href="mailto:Ju1ianna@ukr.net">Ju1ianna@ukr.net</a>
<b>МІТЧЕНКО Тетяна Євгенівна</b>	Секція 3	
д.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; завідувач лабораторії іонного обміну і адсорбції хіміко-технологічного факультету		<a href="mailto:tmitchenko@voda.com.ua">tmitchenko@voda.com.ua</a>
<b>МОСЕЙКО Юрій Вікторович</b>	Секція 2	
доцент, к.т.н., Запорізька державна інженерна академія; доцент кафедри металургії кольорових металів		<a href="mailto:colourmet@zgia.zp.ua">colourmet@zgia.zp.ua</a>
<b>НАЗАРЕНКО Е.С.</b>	Секція 2	
Інститут хіміческих технологій ВНУ им. В. Даля		
<b>НАУМОВ Ігорь Владимирович</b>	Секція 4	
Національний технический университет Украины «КПИ»; специалист кафедры кібернетики ХТП		<a href="mailto:ihor.naumov@gmail.com">ihor.naumov@gmail.com</a>
<b>ОЛІЙНИК Валерія Вікторівна</b>	Секція 2	
Інститут хімічних технологій Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля, м. Рубіжне; аспірант кафедри Вищої математики та комп'ютерних технологій		<a href="mailto:valerija-olejinik@rambler.ru">valerija-olejinik@rambler.ru</a>
<b>ОНИЩЕНКО Анастасія Александровна</b>	Секція 1	
Державний вищий навчальний заклад «Дніпропетровський хіміко-технологічний університет»; студент кафедри технології неорганічних речовин та екології		

# Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку

<b>ОСИПЕНКО Ульяна Юрьевна</b>	Секція 2	
Санкт-Петербургский государственный технологический институт; старший преподаватель кафедры ресурсосберегающих технологий		<a href="mailto:niefreld@rambler.ru">niefreld@rambler.ru</a>
<b>ОСТРОВКА В.И.</b>	Секція 2	
Інститут хіміческих технологій ВНУ им. В. Даля		
<b>ПАВЛОВ Юрій Сергійович</b>	Секція 4	
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; інженер кафедри кібернетики ХТП		<a href="mailto:PavlovYuriy@bigmir.net">PavlovYuriy@bigmir.net</a>
<b>ПЕТРОВ Станіслав Володимирович</b>	Секція 6	
д.т.н., Інститут газу НАН України, провідний науковий співробітник відділу плазмових технологій		<a href="mailto:vizana@voliacable.com">vizana@voliacable.com</a>
<b>ПОПОВ Е.В.</b>	Секція 2	
Інститут хіміческих технологій ВНУ им. В. Даля		
<b>ПОТАПЕНКО Эдуард Владимирович</b>	Секція 1	
доцент, к.х.н., Інститут хіміческих технологій ВНУ им. В. Даля; директор інститута		<a href="mailto:potapenko@iht.lg.ua">potapenko@iht.lg.ua</a>
<b>ПРИМІСЬКА Світлана Олексіївна</b>	Секція 3	
к.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; асистент кафедри кібернетики ХТП		<a href="mailto:primiska@rambler.ru">primiska@rambler.ru</a>
<b>ПУЛІНЕЦЬ Ігор Валерійович</b>	Секція 4	
Національний технічний університет України «КПІ»; аспірант кафедри автоматизації хімічних виробництв		<a href="mailto:bull3t@ukr.net">bull3t@ukr.net</a>
<b>ПУТІЄНКО Тарас Володимирович</b>	Секція 1	
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; магістр кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів		<a href="mailto:taras.v@meta.ua">taras.v@meta.ua</a>
<b>РАЙКО Валентина Федоровна</b>	Секція 2	
профессор, к.т.н., Национальный технический университет «ХПИ»;		
профессор кафедры химической техники и промышленной экологии		
<b>РАДЧЕНКО Андрей Андреевич</b>	Секція 1	
Национального технического университета Украины «Киевский политехнический институт»; магистрант кафедры кібернетики ХТП		<a href="mailto:TNTBull@yandex.ru">TNTBull@yandex.ru</a>
<b>РАУХВЕРГЕР Ірина Анатоліївна</b>	Секція 2	
Національний технічний університет України «КПІ»; магістрант кафедри автоматизації хімічних виробництв		<a href="mailto:I_M_T_R@mail.ru">I_M_T_R@mail.ru</a>
<b>РЕШЕТИЛОВСЬКИЙ Володимир Петрович</b>	Секція 3	
професор, д.т.н., Technische Universität Dresden, Institut für Technische Chemie		<a href="mailto:Wladimir.Reschetilowski@chemie.tu-dresden.de">Wladimir.Reshetilowski@chemie.tu-dresden.de</a>
<b>РУБАН Анна Валеріївна</b>	Секція 4	
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; магістр кафедри екології та технології рослинних полімерів		<a href="mailto:ruban.ann@gmail.com">ruban.ann@gmail.com</a>
<b>РЫЖОВ Денис Александрович</b>	Секція 2	
доцент, к.т.н., Казанский национальный исследовательский технологический университет; доцент кафедры системотехники		<a href="mailto:rygov_da@mail.ru">rygov_da@mail.ru</a>
<b>САВАНЧУК Олександр Валерійович</b>	Секція 6	
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; магістрант кафедри кібернетики ХТП		<a href="mailto:savan4yk999@rambler.ru">savan4yk999@rambler.ru</a>
<b>САВЯК Р.П.</b>	Секція 2	
Інститут хімічних технологій Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля, м. Рубіжне		
<b>САЛКО Марія Тиберіївна</b>	Секція 5	
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; магістр кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів		<a href="mailto:Podarochekster@gmail.com">Podarochekster@gmail.com</a>

# Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку

<b>САНГИНОВА Ольга Викторовна</b> доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; доцент кафедри кібернетики ХТП	Секція 2, 4 <a href="mailto:olga.sanginova@gmail.com">olga.sanginova@gmail.com</a>
<b>СЕРГЕЕВА Ольга Вячеславовна</b> доцент, к.т.н., Державний вищий навчальний заклад «Дніпропетровський хіміко-технологічний університет»; доцент кафедри інформаційних комп'ютерних систем	Секція 1 <a href="mailto:ov.sergeeva@mail.ru">ov.sergeeva@mail.ru</a>
<b>СЕМЕНЮТА Олександр Миколайович</b> Національний технічний університет України «КПІ»; магістр кафедри кібернетики ХТП	Секція 3 <a href="mailto:semenyuta@gmail.com">semenyuta@gmail.com</a>
<b>СЕМИКИН Кирилл Вадимович</b> Санкт-Петербургский государственный технологический институт; аспирант кафедры ресурсосберегающих технологий	Секція 2 <a href="mailto:kirill@restech.ru">kirill@restech.ru</a>
<b>СИТАК Ірина Викторовна</b> Інститут хіміческих технологій СНУ им. В. Даля; старший преподаватель кафедри высшей математики и компьютерных технологий	Секція 7
<b>СИТНИКОВ Алексей Владимирович</b> Національний техніческий університет України «КПІ»; ассистент кафедри автоматизації хіміческих производств	Секція 4 <a href="mailto:axv_sitnikov@mail.ru">axv_sitnikov@mail.ru</a>
<b>СІГАЛ Олександр Ісакович</b> к.т.н., Інститут технічної теплофізики НАН України, зав. відділом теплофізичних процесів у котлах; директор інституту промислової екології	Секція 4 <a href="mailto:engeco@kw.ua">engeco@kw.ua</a>
<b>СКАКУНОВА Татьяна Павловна</b> доцент, к.т.н., Донской государственный технический университет; доцент кафедры автоматизация процессов и производств НГК	Секція 2 <a href="mailto:dec_neftgas@iem.donstu.ru">dec_neftgas@iem.donstu.ru</a>
<b>СКАЧКОВ Віктор Олексійович</b> доцент, к.т.н., Запорізька державна інженерна академія; доцент кафедри металургії кольорових металів	Секція 2 <a href="mailto:colourmet@zgia.zp.ua">colourmet@zgia.zp.ua</a>
<b>СКИДАНЕНКО Максим Сергійович</b> Сумський юридичний університет; аспирант кафедри процесов и оборудования химических и нефтеперерабатывающих производств	Секція 2 <a href="mailto:skidanenko@pohnp.sumdu.edu.ua">skidanenko@pohnp.sumdu.edu.ua</a>
<b>СКЛАБИНСКИЙ Всеволод Іванович</b> профессор, д.т.н., Сумський юридичний університет; заведуючий кафедри процесов и оборудования химических и нефтеперерабатывающих производств	Секція 2 <a href="mailto:sklabin@ukr.net">sklabin@ukr.net</a>
<b>СКРИПКО Валерій Яковлевич</b> к.т.н., Інститут технічної теплофізики НАН України; с.н.с. відділу теплофізичних процесів у котлах	Секція 4 <a href="mailto:engeco@kw.ua">engeco@kw.ua</a>
<b>СМЕЛЯНСКАЯ Елена Юрьевна</b> Сумський юридичний університет	Секція 2
<b>СМИРНОВ Василий Анатольевич</b> Сумський юридичний університет; ассистент кафедри процесов и оборудования химических и нефтеперерабатывающих производств	Секція 2 <a href="mailto:smirnov@pohnp.sumdu.edu.ua">smirnov@pohnp.sumdu.edu.ua</a>
<b>СМИРНОВ Геннадій Миколайович</b> Інститут хімічних технологій СНУ ім. В. Даля (м. Рубіжне); асистент кафедри вищої математики та комп'ютерних технологій	Секція 4 <a href="mailto:asm777@ukr.net">asm777@ukr.net</a>
<b>СМИРНОВА Дарья Александрова</b> Санкт-Петербургский государственный технологический институт; старший преподаватель кафедры ресурсосберегающих технологий	Секція 2 <a href="mailto:dasha.smir@gmail.com">dasha.smir@gmail.com</a>

# Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку

<b>СМИРНОВА Олеся Валентинівна</b> к.х.н., Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України; м.н.с. відділу «Хімія поверхні гібридних матеріалів»	Секція 1  <a href="mailto:olsmirnova2001@yahoo.com">olsmirnova2001@yahoo.com</a>
<b>СМИРНОВА О.С.</b> Технологічний інститут СНУ ім. В. Даля (м. Сєвєродонецьк)	Секція 4  <a href="mailto:contact@iht.lg.ua">contact@iht.lg.ua</a>
<b>СНИГУР Денис Васильевич</b> Одесский национальный университет им. И.И.Мечникова; студент химического факультета	Секція 1  <a href="mailto:alexch@ukr.net">alexch@ukr.net</a>
<b>СОЛНЦЕВ Виктор Петрович</b> старший научный сотрудник, к.т.н., Институт проблем материаловедения им.И.М. Францевича НАН Украины; с.н.с.	Секція 1  <a href="mailto:solntcevv@yandex.ru">solntcevv@gmail.com</a>
<b>СТАРОСТИН Антон Ростиславович</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; магістр кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів	Секція 6  <a href="mailto:star_tos@ukr.net">star_tos@ukr.net</a>
<b>СТАТЮХА Геннадій Олексійович</b> професор, д.т.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; зав. кафедри кібернетики ХТП	Секції 1, 3–7  <a href="mailto:gen.statyukha@gmail.com">gen.statyukha@gmail.com</a>
<b>СТЕПАНОВ Дмитро Миколайович</b> Національний технічний університет України «КПІ»; студент каф. інженерної екології Інституту енергозбереження та енергоменеджменту	Секція 4  <a href="mailto:stepa2006@bigmir.net">stepa2006@bigmir.net</a>
<b>СТЕПАНОВ Микола Борисович</b> Національний технічний університет України «КПІ»; зав. лабораторією ОКБ "Штурм"	Секція 4  <a href="mailto:nikola.step54@yandex.ua">nikola.step54@yandex.ua</a>
<b>СТОРОЖЕНКО Виталий Яковлевич</b> профессор, к.т.н., Сумський юридичний університет; професор кафедри процесов и оборудования химических и нефтеперерабатывающих производств	Секція 2  <a href="mailto:vasmirsum@gmail.com">vasmirsum@gmail.com</a>
<b>СУВОРИН А.В.</b> Научный центр изучения рисков «Ризикон», г. Северодонецк	Секція 1  <a href="mailto:office@rizikon.lg.ua">office@rizikon.lg.ua</a>
<b>СУПРУНЧУК Володимир Ілліч</b> доцент, к.х.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; доцент кафедри технології неорганічних речовин та загальної хімічної технології	Секція 2  <a href="mailto:link.irr@gmail.com">link.irr@gmail.com</a>
<b>СУХОЙ Константин Михайлович</b> доцент, к.т.н., ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»; доцент кафедры переработки пластмасс и фото- нано- и полиграфических материалов	Секція 3  <a href="mailto:ksukhyy@rambler.ru">ksukhyy@rambler.ru</a>
<b>СУХОЙ Михаил Порфирьевич</b> профессор, к.т.н., ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»; заведующий кафедры энергетики	Секція 3  <a href="mailto:ksukhyy@rambler.ru">ksukhyy@rambler.ru</a>
<b>ТАРАСЮК Віталія Анатоліївна</b> Національний технічний університет України «КПІ»; магістр кафедри кібернетики ХТП	Секція 3  <a href="mailto:Vitaminka_c@meta.ua">Vitaminka_c@meta.ua</a>
<b>ТАРГОНСЬКА Олеся Олексіївна</b> Національний технічний університет України «КПІ»;	Секція 2  <a href="mailto:timoshin_a@inbox.ru">timoshin_a@inbox.ru</a>
магістр кафедри технології неорганічних речовин та загальної хімічної технології	
<b>ТИМОШИН Анатолий Сергеевич</b> доцент, к.ф.-м.н., Інститут хіміческих технологій СНУ ім. В. Даля;	Секція 7  <a href="mailto:timoshin_a@inbox.ru">timoshin_a@inbox.ru</a>
доцент кафедри высшей математики и комп'ютерних технологий	
<b>ТИМОШИНА Любовь Васильевна</b> Інститут хімічних технологій ВНУ ім. В. Даля;	Секція 1  <a href="mailto:timoshin_a@inbox.ru">timoshin_a@inbox.ru</a>
старший викладач кафедри філософських та гуманітарних дисциплін	
<b>ТКАЧ Василій Васильович</b> доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»;	Секція 3  <a href="mailto:timoshin_a@inbox.ru">timoshin_a@inbox.ru</a>
доцент кафедри хімічної технології кераміки та скла	

# Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку

<b>ТКАЧ Наталія Олексіївна</b> доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; доцент кафедри хімічної технології композиційних матеріалів	Секція 2 <a href="mailto:xtkm@kpi.ua">xtkm@kpi.ua</a>
<b>ТКАЧЕНКО Анастасія Андріївна</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; магістр кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів	Секція 2 <a href="mailto:mojiji@yandex.ru">mojiji@yandex.ru</a>
<b>ТРАЧЕВСЬКИЙ Володимир Васильович</b> Технічний Центр НАН України	Секція 1 <a href="mailto:trachev@imp.kiev.ua">trachev@imp.kiev.ua</a>
<b>ТРУЩ Елена Витальєвна</b> Одесский национальный университет им. И.И.Мечникова; аспирант кафедры аналитической химии	Секція 1 <a href="mailto:alexch@ukr.net">alexch@ukr.net</a>
<b>ТЫМЧУК Алла Федоровна</b> доцент, к.х.н., Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова; доцент кафедры Физической и коллоидной химии	Секція 3 <a href="mailto:Tymchuk@onu.edu.ua">Tymchuk@onu.edu.ua</a>
<b>ФЕДОРОВ Владимир Іванович</b> доцент, к.т.н., Санкт-Петербургский государственный технологический институт; доцент кафедры ресурсосберегающих технологий	Секція 2 <a href="mailto:gti@restech.ru">gti@restech.ru</a>
<b>ФЕДОТОВ Р.Н.</b> Технологический институт Восточноукраинского национального университета им. В. Даля (г. Северодонецк), студент	Секція 2
<b>ФРОЛОВА Лілія Анатольєвна</b> доцент, к.т.н., Державний вищий навчальний заклад «Дніпропетровський хіміко-технологічний університет»; доцент кафедри технології неорганічних речовин та екології	Секція 1 <a href="mailto:domosedi@i.ua">domosedi@i.ua</a>
<b>ХАЙДАРОВ Андрей Геннадиевич</b> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет); аспирант кафедры математического моделирования и оптимизации химико- технологических процессов	Секція 7
<b>ХАЙДАРОВ Валентин Геннадиевич</b> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет); аспирант кафедры математического моделирования и оптимизации химико- технологических процессов	Секція 7
<b>ХОЛОДНОВ Владислав Алексеевич</b> профессор, д.т.н., Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет); заведующий кафедрой математического моделирования и оптимизации химико-технологических процессов	Секція 7 <a href="mailto:holodnow@yandex.ru">holodnow@yandex.ru</a>
<b>ХОМА Руслан Євгеньевич</b> доцент, к.х.н., Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова; доцент кафедры аналитической химии	Секція 1 <a href="mailto:rek@onu.edu.ua">rek@onu.edu.ua</a>
<b>ХОМЕНКО Анастасія Олексіївна</b> Національний технічний університет України «КПІ»; магістр кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів	Секція 4 <a href="mailto:vellaria@gmail.com">vellaria@gmail.com</a>
<b>ХОМЕНКО Елена Михайловна</b> доцент, к.х.н., Черкаський государственный технологический университет; зав. кафедрой экологии	Секція 1 <a href="mailto:homenko@uch.net">homenko@uch.net</a>
<b>ЦАПАР Виталий Степанович</b> Національний технічний університет України «КПІ»; ассистент кафедри автоматизации химических производств	Секція 4 <a href="mailto:cwst@ukr.net">cwst@ukr.net</a>
<b>ЧЕБОТАРЕВ Александр Николаевич</b> доцент, к.х.н., Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова; зав. кафедрой аналитической химии	Секція 1 <a href="mailto:alexch@ukr.net">alexch@ukr.net</a>

# Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку

<b>ЦЕЙТЛІН Михаїл Абрамович</b> професор, д.т.н., Національний технічний університет «ХПІ»; професор кафедри Хімичної техніки і промисленної екології	Секція 2 <a href="mailto:mzeit@mail.ru">mzeit@mail.ru</a>
<b>ЦЕЙТЛІН Натан Абрамович</b> професор, д.т.н., Фірма «CuBe Matrix GbR», Німеччина	Секція 7 <a href="mailto:tseitlin@gmx.net">tseitlin@gmx.net</a>
<b>ЦЕЛИЩЕВ Алексей Борисович</b> доцент, к.т.н., Технологічний інститут Восточноукраїнського національного університета ім. В. Даля (г. Северодонецьк); доцент кафедри комп'ютерно-інтегрованих систем управління	Секції 1, 2 <a href="mailto:atp00@ukr.net">atp00@ukr.net</a>
<b>ЧИГИРИНЕЦ Елена Эдуардовна</b> професор, д.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; засновник кафедри фізичної хімії	Секція 1 <a href="mailto:corrosionlife@yandex.ru">corrosionlife@yandex.ru</a>
<b>ШАТКОВСЬКИЙ Олександр Віталійович</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; асpirант кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів	Секція 6
<b>ШАХНОВСКИЙ Аркадий Маркусович</b> доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; доцент кафедри кібернетики ХТП	Секції 1, 3, 5, 7 <a href="mailto:arcadyshakhn@rambler.ru">arcadyshakhn@rambler.ru</a>
<b>ШЕПЕЛЕВ М.Е.</b> ООО «Химтехнология», г. Северодонецьк	Секція 2
<b>ШИЛОВИЧ Ігорь Леонідович</b> доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; С.Н.С., науково-дослідницький центр “Ресурсосберегаючі технології”	Секція 4 <a href="mailto:shil@rst.kiev.ua">shil@rst.kiev.ua</a>
<b>ШКВАРУН Костянтин Борисович</b> Національний технічний університет України «КПІ»; магістр кафедри кібернетики ХТП	Секція 2
<b>ШМЕЛЕВ Александр Сергійович</b> проф., к.т.н., Северодонецький технологічний інститут	Секція 1 <a href="mailto:asshmel@mail.ru">asshmel@mail.ru</a>
<b>ШМЕЛЬКОВ Владислав Валер'євич</b> Національний технічний університет «ХПІ»; аспирант кафедри хімичної техніки і промисленної екології	Секція 2
<b>ШУМИГАЙ Дмитрій Анатольєвич</b> Національний університет харчових технологій; магістрант кафедри автоматизації і комп'ютерно-інтегрованих технологій	Секція 4 <a href="mailto:shumiguy@mail.ru">shumiguy@mail.ru</a>
<b>ЩЕРБАНЬ Г.І.</b> Національний технічний університет України «КПІ»	Секція 4
<b>ЭСМОНТ Александр Валер'євич</b> Науковий центр дослідження ризиків «Ризікон», г. Северодонецьк; ведучий інженер-программист	Секція 5 <a href="mailto:office@rizikon.lg.ua">office@rizikon.lg.ua</a>
<b>ЯНИШПОЛЬСЬКИЙ Василь Вікторович</b> Підприємство "Хоневелл-Україна"; науковий співробітник	Секція 5 <a href="mailto:Vasiliy.Yanishpolskii@honeywell.com">Vasiliy.Yanishpolskii@honeywell.com</a>
<b>ЯНЮК Вероніка Андріївна</b> Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»; магістрант кафедри кібернетики ХТП	Секція 6 <a href="mailto:veronanikaverona@mail.ru">veronanikaverona@mail.ru</a>
<b>ЯРОЩУК Людмила Дем'янівна</b> доцент, к.т.н., Національний технічний університет України «КПІ»; доцент кафедри автоматизації хімічних виробництв	Секція 2 <a href="mailto:vicleon@i.ua">vicleon@i.ua</a>

## ЗМІСТ

Згуровский М.З., Ректор Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут». ПРИВІТАЛЬНЕ СЛОВО.....	3
Голубенко А.Л., Ректор Восточноукраинского национального университета имени В. Даля. ПРИВЕТСТВЕННОЕ СЛОВО.....	4
Потапенко Э.В., Директор Института химических Технологий (г. Рубежное) Восточноукраинского национального университета имени В. Даля. ПРИВЕТСТВЕННОЕ СЛОВО.....	6
Статюха Г.А., Martinsen Kristian. УСТОЙЧИВОЕ РАЗВИТИЕ: МОДЕЛИ И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЛЯ АНАЛИЗА СОСТОЯНИЯ ОБЩЕСТВА И ЕГО ПЕРСПЕКТИВ.....	7

### СЕКЦІЯ 1

#### **КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ, КОМП'ЮТЕРНІ МЕТОДИ СИНТЕЗУ НОВИХ РЕЧОВИН**

1. Хоменко Е.М., Минаев Б.Ф. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ НОІ.....	9
2. Гребенюк А.Г. ТЕОРЕТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ В ТВЕРДИХ ТІЛАХ З ЛАНЦЮГОВОЮ СТРУКТУРОЮ.....	11
3. Чеботарёв А.Н., Хома Р.Е., Снигур Д.В., Труш Е.В. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА В БУФЕРНОЙ СИСТЕМЕ ХЛОРОВОДОРОДНАЯ КИСЛОТА – ГЕКСАМЕТИЛЕНТЕТРАМИН – ВОДА.....	13
4. Чеботарёв А.Н., Марченко С.В., Снигур Д.В. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ЦИАНИДИНА ПРИ ИЗМЕНЕНИИ КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ МЕТОДОМ ПОТЕНЦИАЛОВ НУЛЕВОГО РАДИУСА.....	16
5. Радченко А.А., Солнцев В.П., Шахновский А.М. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОПОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦІЙ РАЗЛОЖЕНИЯ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ В ОБЛАСТИ ТЕРМОДИНАМІЧЕСКОЇ НЕУСТОЙЧИВОСТІ.....	19
6. Захаров И.И., Лория М.Г., Целищев А.Б., Минаев Б.Ф. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АКТИВАЦИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО АЗОТА В ПРИСУТСТВІИ ПЕРЕКІСІ ВОДОРОДА.....	21
7. Путієнко Т.В., Статюха Г.О. МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ФОРМУВАННЯ ЛИЦЬОВОГО ШАРУ ТРОТУАРНОЇ ПЛИТКИ.....	24
8. Хома Р.Е. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМАХ «SO <sub>2</sub> – R <sub>2</sub> NCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> NR <sub>2</sub> – H <sub>2</sub> O».....	27
9. Фролова Л.А., Сергєєва О.В., Донець Ю.В., Оніщенко А.О. СИМПЛЕКСНИЙ МЕТОД ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ В ТЕХНОЛОГІЇ ОДЕРЖАННЯ ПІГМЕНТІВ.....	30
10. Makarewicz E., Cysewski P., Michalik A., Ziolkowska D. PROPERTIES OF ACID-AND ALKALI-TREATED CADMIUM PIGMENTS.....	32
11. Мирошниченко Ю.А., Безносик Ю.А., Смирнова О.В., Зуб Ю.Л. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ АЗОТ-, ФОСФОР- И СЕРО-СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТОВ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНЕЗЕМА.....	35
12. Чигиринец Е.Э., Воробьева В.И., Митина Л.И., Куприенко Н.П. ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА КОМПОЗИЦИИ ЛЕТУЧЕГО ИНГИБИТОРА КОРРОЗИИ ДЛЯ ЗАЩИТЫ МЕТАЛЛОВ ОТ АТМОСФЕРНОЙ КОРРОЗИИ.....	37

13.	Суворин А.В., Шмелев А.С. КОМПЬЮТЕР ФОРМИРУЕТ И УРАВНИВАЕТ ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ .....	39
14.	Potapenko E.V., Timoshina L.V. MODERN SCIENTIFIC TENDENCIES OF USING COMPUTER EXPERIMENTS IN CHEMISTRY .....	42
15.	Качоровська О.П., Гребенюк А.Г., Трачевський В.В. ТЕОРЕТИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОСТОРОВОЇ БУДОВИ ТА ОСНОВНОСТІ ТРИС-( $\beta$ -АМИНОЕИЛАТА) КОБАЛЬТУ(ІІІ) .....	44

## СЕКЦІЯ 2

### **КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ**

1.	Кац М.Д. ПРОБЛЕМЫ ВЫБОРА КРИТЕРИЯ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕССОВ .....	46
2.	Шмельков В.В., Цейтлин М.А., Райко В.Ф. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТАВА РАСТВОРОВ СОДОВОГО ПРОИЗВОДСТВА .....	48
3.	Шепелев М.Е. ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ВЫДЕЛЕНИЯ УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ .....	51
4.	Красильникова А.О., Кондратов С.О. КОМП'ЮТЕРНА МОДЕЛЬ АДІАБАТИЧНОГО МОНОНІТРУВАННЯ АРОМАТИЧНИХ СПОЛУК .....	54
5.	Скачков В.О., Іванов В.І., Єгоров Ю.П., Мосейко Ю.В. ПРО МОДЕЛЮВАННЯ ОСАДЖЕННЯ БОРУ НА ПОВЕРХНІ ВУГЛЕЦЕВИХ ВОЛОКОН .....	55
6.	Олійник В.В., Кондратов С.О. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СИНТЕЗУ ОЛІГОМЕРІВ МЕТОДОМ РІВНОВАЖНОЇ ПОЛКОНДЕНСАЦІЇ З ВІДГОНКОЮ НИЗЬКОМОЛЕКУЛЯРНИХ КОМПОНЕНТІВ .....	58
7.	Кондратов С.А. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТОДА ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОДНОМЕРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ .....	60
8.	Кондратов С.О., аль Хамадані М.Д., Савяк Р.П. МОДЕЛЮВАННЯ НІТРУВАННЯ БЕНЗОЛУ У ПРОМИСЛОВОМУ РЕАКТОРІ .....	62
9.	Захаров И.И., Федотов Р.Н., Лория М.Г., Целищев А.Б. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИСЛОТООБРАЗОВАНИЯ $\text{HNO}_3$ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ .....	63
10.	Медведев Р.Б., Сангінова О.В., Мердух С.Л. МОДЕЛЮВАННЯ ПАРОГЕНЕРАТОРА У СКЛАДІ АЕС ІЗ РЕАКТОРОМ ТИПУ ВВЕР-1000 ЗАСОБАМИ МОДЕлюючої СИСТЕМИ UNISIM .....	66
11.	Стороженко В.Я., Смирнов В.А., Білодід А.В. ОПТИМІЗАЦІЯ ПРОТОЧНОЇ ЧАСТИНИ ПНЕВМОКЛАСIFIКАТОРА МЕТОДОМ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ .....	69
12.	Ярошук Л.Д., Раухвергер І.А. ВИЗНАЧЕННЯ ТРИВАЛОСТІ ПРОЦЕСУ ФЕРМЕНТАЦІЇ У ВИРОБНИЦТВІ БІОЕТАНОЛУ .....	71
13.	Гумницький Я.М., Атаманюк В.М. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОЛЯ ВЛАГОСОДЕРЖАНИЯ В СТАЦІОНАРНОМ СЛОЕ ПРИ ФІЛЬТРАЦІОННОЙ СУШКЕ .....	73
14.	Колпаков В.В. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КОНВЕРСИИ МЕТАНА .....	75
15.	Ткаченко А.А., Безносик Ю.О., Ткач В.В. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ АВТОТЕРМІЧНОГО ПРОЦЕСУ ТРИ-РІФОРМІНГУ .....	76
16.	Бугаєва Л.М., Бочкор І.І., Кондрачук О.В. ЗАСТОСУВАННЯ ПРОГРАМНИХ ЗАСОБІВ КОМП'ЮТЕРНОЇ ГІДРОДИНАМІКИ ДЛЯ РІШЕННЯ ЗАДАЧІ МОДЕЛЮВАННЯ ОТОЛITOVOЇ СТРУКТУРИ .....	82

17.	<b>Супрунчук В.І., Іванюк Р.Р.</b> ТЕОРЕТИЧНА ТЕМПЕРАТУРА АДІАБАТИЧНОГО РЕАКТОРА .....	84
18.	<b>Скиданенко М.С., Склабінський В.І., Артюхов А.Є., Лугова С.О.</b> ДОСЛІДЖЕННЯ ГІДРОДИНАМІКИ ПРИСТРОЇВ ДЛЯ СТВОРЕННЯ МОНОДИСПЕРСНИХ МІКРО-КРАПЕЛЬ .....	85
19.	<b>Кваско М.З., Жураковська О.С., Жураковський Я.Ю.</b> АНАЛІЗ ПАРАМЕТРІВ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ АДСОРБЦІЇ ТЕТРАФТОРЕТАНУ НА ЦЕОЛІТІ NAY .....	87
20.	<b>Логвин А.В., Аль Раммахі Мустафа М.М.</b> КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕЧІЇ ГАЗУ В ІНЕРЦІЙНО-ФІЛЬТРУЮЧОМУ (ІФ) ГАЗОСЕПАРАЦІЙНОМУ ЕЛЕМЕНТІ .....	90
21.	<b>Шкварун К.Б., Безносик Ю.А., Ткач Н.А.</b> ДВІЖЕННЯ И СЕПАРАЦІЯ ТВЕРДОЙ ЧАСТИЦЫ В ЦИКЛОННОМ АППАРАТЕ .....	92
22.	<b>Концевой А.Л., Концевой С.А., Таргонська О.О.</b> МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІКИ РІВНОВАЖНОГО ОБМІNU РІЗНОЗАРЯДНИХ ІОНІВ .....	97
23.	<b>Барна І.Р., Атаманюк В.М.</b> МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ЗОВНІШНІШНОГО ТЕПЛООБМІNU ПІДЧАС ФІЛЬТРАЦІЙНОГО СУШІННЯ .....	100
24.	<b>Караванов А.А., Рыжов Д.А., Лаптева Т.В., Зиятдинов Н.Н.</b> МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ КОНВЕРСИИ УГЛЕВОДОРОДОВ ВОДЯНЫМ ПАРОМ .....	103
25.	<b>Смирнова Д.А., Федоров В.И., Лисицын Н.В.</b> ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ БЕНЗОЛА .....	107
26.	<b>Осипенко У.Ю.</b> АНАЛИЗ И ОПТИМИЗАЦИИ ХТС ПРОЦЕССА СИНТЕЗА МЕТАНОЛА С ПОМОЩЬЮ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ .....	110
27.	<b>Семикин К.В.</b> ОПТИМИЗАЦИЯ РЕЖИМНЫХ ПАРАМЕТРОВ КОЛОННЫ К-2 УСТАНОВКИ ПЕРВИЧНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ НЕФТИ .....	115
28.	<b>Артюхов А.Е, Демченко А.Н.</b> МОДЕЛИРОВАНИЕ ГІДРОДИНАМІЧСКИХ УСЛОВІЙ РАВНОВЕСІЯ ДІСПЕРСНОЇ ФАЗИ В МАЛОГАБАРИТНИХ ВІХРЕВÝХ АППАРАТАХ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ГРАНУЛ С ОСОБЫМИ СВОЙСТВАМИ .....	117
29.	<b>Артюхов А.Е, Смелянская О.Ю.</b> КОМП'ЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГІДРОДИНАМІКИ ДВІЖЕННЯ ПОТОКОВ В МАССООБМЕННО-СЕПАРАЦІОННИХ ЭЛЕМЕНТАХ ВІХРЕВÝХ ТАРЕЛОК .....	120
30.	<b>Мануйлова Е.В.</b> ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ КСИЛОЛОВ .....	123

### СЕКЦІЯ 3

#### **КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРИРОДООХОРОННИХ ПРОЦЕСІВ**

1.	<b>Козлов Я.Н., Сухой М.П., Сухой К.М.</b> ИССЛЕДОВАНИЕ РАБОТЫ ПОЛИМЕРНЫХ СОЛНЕЧНЫХ КОЛЛЕКТОРОВ НА ОСНОВЕ СОТОВЫХ ПОЛИКАРБОНАТНЫХ ПЛАСТИКОВ .....	128
2.	<b>Тымчук А.Ф., Ласкорунская Л.А.</b> ОПТИМИЗАЦІЯ ПРОЦЕССА СОРБЦІИ ПАВ ПОЛИМЕРНИМИ СОРБЕНТАМИ .....	130
3.	<b>Примиська С.О., Безносик Ю.О., Решетіловський В.П., Ткач В.В.</b> КОМП'ЮТЕРНИЙ РОЗРАХУНОК ПРОЦЕСУ ЗНЕШКОДЖЕННЯ ГАЗОВИХ ВИКІДІВ ВИРОБНИЦТВА КАВИ .....	132
4.	<b>Колябіна Д.О., Жигір О.М.</b> ВСТАНОВЛЕННЯ ОСОБЛИВОСТЕЙ СОРБЦІЇ ЦЕЗІЮ-137 ГЛІНИСТИМИ МІНЕРАЛАМИ З ВИКОРИСТАННЯМ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ .....	134
5.	<b>Статюха Г.А., Бойко Т.В., Запорожець Ю.А.</b> ДО ПИТАННЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ВПЛИВУ ХІМІЧНИХ ЧИННИКІВ НА ЗАБРУДНЕННЯ ГРУНТІВ .....	139

6.	<b>Квітка О.О., Шахновський А.М., Семенюта О.М.</b> РОЗРОБКА ЗАСОБІВ ОПТИМІЗАЦІЇ СХЕМ ВОДОСПОЖИВАННЯ НА ОСНОВІ МОДЕЛЕЙ У НЕЯВНОМУ ВИГЛЯДІ.....	141
7.	<b>Дубинін А.І., Майструк В.В., Гаврилів Р.І.</b> КОМП'ЮТЕРНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ЦИКЛОНІВ ІЗ СПІРАЛЬНИМ НАПРАВЛЯЮЧИМ АПАРАТОМ.....	143
8.	<b>Квітка О.О., Малецький З.В., Тарасюк В.А.</b> ОПТИМІЗАЦІЯ ДВОСТАДЙНОЇ ЗВОРОТНООСМАТИЧНОЇ УСТАНОВКИ ДЕМІНЕРАЛІЗАЦІЇ МОРСЬКОЇ ВОДИ ДЛЯ ПРОМИСЛОВОГО ПІДПРИЄМСТВА.....	145
9.	<b>Малецький З.В., Мітченко Т.Є., Квітка О.О.</b> ОПТИМІЗАЦІЯ ОПРІСНЕННЯ МОРСЬКОЇ ВОДИ МЕТОДОМ ЗВОРОТНОГО ОСМОСУ З ПОВТОРНИМ ВИКОРИСТАННЯМ МІСЬКИХ СТІЧНИХ ВОД.....	148

#### СЕКЦІЯ 4

#### **КОМП'ЮТЕРНЕ ПІДТРИМУВАННЯ ВИРОБНИЧИХ ПРОЦЕСІВ**

1.	<b>Пулінець І.В., Лелека С.В., Коржик М.В.</b> МОДЕлювання процесу випалювання виробів в печах рідгаммера.....	151
2.	<b>Брусник С.М., Сангінова О.В.</b> КОМП'ЮТЕРНА ПІДТРИМКА ПРОЦЕСУ ТЕПЛОПОСТАЧАННЯ У ЦЕХ ВИРОБНИЦТВА ТВЕРДИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ .....	153
3.	<b>Павлов Ю.С., Медведев Р.Б., Евтушенко А.А.</b> АВТОМАТИЗАЦІЯ ПРОІЗВОДСТВА МНОГОКОМПОНЕНТНОЇ СТРОІТЕЛЬНОЇ СМЕСІ.....	155
4.	<b>Багута В.А., Кулинченко Г.В.</b> ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА ОТЛИВА ПЛЕНOK.....	158
5.	<b>Кулинченко Г.В., Багута В.А.</b> ИДЕНТИФИКАЦИЯ ФОРМУЮЩЕГО ИНСТРУМЕНТА КАК ОБЪЕКТА УПРАВЛЕНИЯ ПРИ ОТЛИВЕ ПЛЕНКИ.....	160
6.	<b>Гурчик А.И., Коржик М.В.</b> РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ОХЛАЖДЕНИЯ ФУТЕРОВКИ В ПЕЧИ АЧЕСОНА.....	162
7.	<b>Кишенсько В.Д., Ладанюк А.П.</b> СЦЕНАРНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ КОМПЛЕКСАМИ.....	163
8.	<b>Колпаков В.В.</b> УПРАВЛЕНИЕ ПРОЦЕССОМ КОНВЕРСИИ ПО КРИТЕРИЮ МИНИМИЗАЦИИ УНИФИЦИРОВАННОЙ СЕБЕСТОИМОСТИ.....	164
9.	<b>Ладанюк А.П., Крониковский Д.О.</b> ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ РЕГУЛЯТОРОВ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ.....	166
10.	<b>Ладанюк А.П., Шумигай Д.А., Кондрашов Д.О.</b> СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ УПРАВЛЕНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМ КОМПЛЕКСОМ САХАРНОГО ЗАВОДА.....	167
11.	<b>Лебедев В.Е., Миленький В.В., Щербань Г.И.</b> АВТОМАТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ БИПОЛЯРНЫМИ ЭЛЕКТРОЛИЗЕРАМИ ФИЛЬТР-ПРЕССНОГО ТИПА ДЛЯ РАЗЛОЖЕНИЯ ВОДЫ.....	168
12.	<b>Цапар В.С.</b> АНАЛІЗ ЦЕЛЕСООБРАЗНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ РОБАСТНИХ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ В ПРОЦЕССЕ СТЕКЛОВАРЕНИЯ.....	171
13.	<b>Жученко А.І., Цапар В.С.</b> АНАЛІЗ ТЕМПЕРАТУРНОГО РОЗПОДЛУ У СКЛОМАСІ .....	172
14.	<b>Шилович И.Л., Лелека С.В., Пулинец И.В., Лазарев Т.В.</b> КОМП'ЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЖИГА УГЛЕГРАФИТОВЫХ ЗАГОТОВОВОК.....	174
15.	<b>Ситников А.В., Бобонич И.С.</b> СОЗДАНИЕ СТРУКТУРНОЙ МОДЕЛИ СТЕКЛОВАРНОЙ ПЕЧІ.....	176
16.	<b>Бондаренко С.Г., Хоменко А.А.</b> ВІЗУАЛІЗАЦІЯ КОМП'ЮТЕРНИХ РОЗРАХУНКІВ ПРОЦЕСІВ ДЕФОРМУВАННЯ ПОРОШКОВИХ МАТЕРІАЛІВ.....	178
17.	<b>Бугаєва Л.М., Задорожний А.С., Ткач Н.А., Безсінний Д.В.</b> ОЦІНЮВАННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ СХЕМ ОТРИМАННЯ МЕТАКРИЛОВОЇ КИСЛОТИ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ АЛГОРИТМУ МІНІМІЗАЦІЇ ВІДХОДІВ WAR.....	181

18.	<b>Наумов И.В., Безносик Ю.А., Ткач В.В.</b> КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРЯДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ХИМИЧЕСКИХ ИСТОЧНИКОВ ТОКА.....	183
19.	<b>Брановицкая С.В., Бондаренко С.Г.</b> ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ПРОЦЕССА РАЗДЕЛЕНИЯ СУСПЕНЗИЙ ПРИ ВВЕДЕНИИ РАЗБАВИТЕЛЯ.....	184
20.	<b>Бондаренко С.Г., Степанов М.Б., Василькевич О.І., Степанов Д.М.</b> ОПЕРАТИВНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ОКТАНОВОГО ЧИСЛА БЕНЗИНІВ.....	188
21.	<b>Герасименко Ю.Я., Герасименко Е.Ю., Скақунова Т.П., Голованов А.А.</b> МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ТЕПЛОПЕРЕНОСА ЧЕРЕЗ ПЛОСКУЮ СТЕНУ ЗДАНИЯ.....	191
22.	<b>Смирнов Г.М., Смирнова О.С.</b> ЗАСТОСУВАННЯ АЛГОСТРУКТУРНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ ДЛЯ СТВОРЕННЯ ІМІТАЦІЙНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ АВТОМАТИЧНОГО КЕРУВАННЯ.....	195
23.	<b>Statyukha G.O., Ruban A.V., Dzhygyrey I.M.</b> LIFE CYCLE ASSESSMENT OF POLYETHYLENE COLOR VEST BAGS.....	198
24.	<b>Сігал О.І., Кучин Г.П., Скрипко В.Я., Бикоріз Є.Й., Канигін О.В., Безносик Ю.О., Логвин В.О.</b> МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ПСЕВДОЗРІДЖЕННЯ СУМІШЕЙ У ТОПІЦІ З НТКШ.....	201
25.	<b>Козаневич З.Я., Колпаков В.В., Ківа І.І.</b> ДЕКОМПОЗИЦІЯ ЗАДАЧ АВТОМАТИЗАЦІЇ КЕРУВАННЯ ПРОЦЕСІВ КОНВЕРСІЇ МЕТАНУ.....	204

## СЕКЦІЯ 5

### **КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ АВАРИЙНИХ СИТУАЦІЙ І СТВОРЕННЯ КОМП'ЮТЕРНИХ ТРЕНАЖЕРІВ ДЛЯ ХІМІЧНОЇ ПРОМИСЛОВОСТІ**

1.	<b>Ковалевский В.М.</b> АЛГОРИТМ ПРИМЕНЕНИЯ МИКРОПРОЦЕССОРНОГО ПРИБОРА ДЛЯ СИСТЕМЫ АВАРИЙНОЙ ЗАЩИТЫ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ БЛОКИРОВОК.....	208
2.	<b>Статюха Г.О., Бойко Т.В., Абрамова А.О.</b> МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ВИЗНАЧЕННЯ ЕКОЛОГІЧНОГО РИЗИКУ ПРОЕКТОВАНОГО ПРОМИСЛОВОГО ОБ'ЄКТУ.....	210
3.	<b>Баршацький О.І., Шахновський А.М., Янишпольський В.В.</b> РОЗРОБКА ТА АНАЛІЗ СКЛАДОВИХ КОМП'ЮТЕРНОГО ТРЕНАЖЕРА В СЕРЕДОВИЩІ UNISIM OPERATION.....	213
4.	<b>Салко М.Т., Бойко Т.В., Бендюг В.И.</b> МАТЕРИАЛЬНА СОСТАВЛЯЮЩАЯ ОЦЕНКИ БЕЗОПАСНОСТИ ПРОЕКТИРУЕМЫХ ПРОМЫШЛЕННЫХ ОБЪЕКТОВ.....	215
5.	<b>Грановский Э.А., Ворона А.П.</b> АНАЛИЗ РИСКА СЛОЖНЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ КОМПЛЕКСА «РИЗЭКС-2».....	218
6.	<b>Барбуца И.М., Грановский Э.А., Ворона А.П., Маслов Р.А.</b> МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЖАРОВ И ОЦЕНКА ПОЖАРНОГО РИСКА В ЗДАНИЯХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА «ПОЖАРИЗ».....	220
7.	<b>Эсмонт А.В., Грановский Э.А., Ворона А.П., Маслов Р.А.</b> ПРОГНОЗИРУЮЩИЙ КОМПЛЕКС ПОДДЕРЖКИ ДЕЙСТВИЙ ДИСПЕТЧЕРСКОЙ СЛУЖБЫ ХІМІЧЕСКИ ОПАСНИХ ОБЪЕКТОВ.....	223
8.	<b>Ворона А.П., Грановский Э.А.</b> ТРЕНАЖЕРНЫЙ КОМПЛЕКС «ТРЕНАРИЗ» ДЛЯ ПОЛГОТОВКИ ПЕРСОНАЛА ТЕХНОЛОГІЧЕСКИХ УСТАНОВОК К ПРОТИВО-АВАРИЙНИМ ДЕЙСТВІЯМ.....	226

**СЕКЦІЯ 6**  
**СТАЛИЙ РОЗВИТОК РЕГІОНІВ**

1.	<b>Статюха Г.А., Бондаренко Е.С.</b> ПОДХОДЫ К ОЦЕНКЕ УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ .....	229
2.	<b>Климюк О.О., Безносик Ю.О.</b> ПОРІВНЯННЯ ПІДПРИЄМСТВ З ТОЧКИ ЗОРУ СТАЛОГО РОЗВИТКУ З ВИКОРИСТАННЯМ ЗВЕДЕНОГО ІНДЕКСУ .....	234
3.	<b>Бойко Т.В., Комариста Б.М., Бендюг В.І.</b> ОЦІНКА ЕКОЛОГІЧНОГО АСПЕКТУ СТАЛОГО РОЗВИТКУ ПРОМИСЛОВИХ ОБ'ЄКТІВ .....	238
4.	<b>Петров С.В., Бондаренко С.Г., Саванчук О.В., Янюк В.А.</b> ПРОЦЕС ПЛАЗМОХІМІЧНОГО ОЧИЩЕННЯ ВОДИ .....	240
5.	<b>Василькевич О.І., Бондаренко С.Г., Старостін А.Р., Буд'ко М.О.</b> КІНЕТИЧНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ СИНТЕТИЧНОГО ПАЛИВА З СИРОВИНИ РОСЛИННОГО ПОХОДЖЕННЯ .....	244
6.	<b>Котовенко О.А., Мірошниченко О.Ю.</b> СТОХАСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЯК ІНСТРУМЕНТ ДОСЛІДЖЕННЯ РОЗВИТКУ ПРОЦЕСІВ ПД ДІЄЮ ПРИРОДОКОРИСТУВАННЯ В РЕГІОНІ .....	246
7.	<b>Шатковський О.В.</b> ОЦІНКА ПРОБЛЕМНОСТІ РЕГІОНУ В РАМКАХ РЕГІОНАЛЬНОЇ ПОЛІТИКИ СТАЛОГО РОЗВИТКУ УКРАЇНИ .....	248
8.	<b>Кондратов С.А., Попов Е.В., Назаренко Е.С., Островка В.І.</b> ПРОБЛЕМЫ ЛИКВИДАЦИИ ПРОМЫШЛЕННЫХ ОТХОДОВ И УСТОЙЧИВОЕ РАЗВИТИЕ СЕВЕРО-ЗАПАДНОГО РЕГИОНА ДОНБАССА .....	250

**СЕКЦІЯ 7**  
**КОМП'ЮТЕРНО-ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ  
В БАГАТОРІВНЕВІЙ ВИЩІЙ ОСВІТІ**

1.	<b>Холоднов В.А., Хайдаров А.Г., Хайдаров В.Г., Кулишенко Р.Ю., Краснобородъко Д.А.</b> ПРАКТИЧЕСКОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА .....	252
2.	<b>Цейтлин Н.А.</b> СТАТИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОЦЕНИВАНИЮ ЗНАНИЙ УЧАЩИХСЯ .....	254
3.	<b>Статюха Г.О., Квітка О.О., Бугаєва Л.М., Шахновський А.М.</b> БАЗОВІ АСПЕКТИ КОМП'ЮТЕРНОЇ ПІДГОТОВКИ ЗІ СПЕЦІАЛЬНОСТІ «КОМП'ЮТЕРНО-ІНТЕГРОВАНІ ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ І ВИРОБНИЦТВА» .....	257
4.	<b>Давиденко В.М., Сітак І.В., Тімошин А.С.</b> ПРОБЛЕМИ ВПРОВАДЖЕННЯ КОМП'ЮТЕРНИХ ТА ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ В БАГАТОРІВНЕВІЙ ПІДГОТОВЦІ ФАХІВЦІВ ТЕХНІЧНИХ СПЕЦІАЛЬНОСТЕЙ .....	260
5.	<b>Волков С.В.</b> ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ БЕСПЛАТНОГО ПРИКЛАДНОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ В ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЯХ .....	262
	<b>Авторський вказівник .....</b>	264

*Оргкомітет конференції КМХП-2012*

**СПІВГОЛОВИ:**

- Згуровський М.З.* – академік НАН України, ректор НТУУ «КПІ»  
*Голубенко О.Л.* – член-кор. АПН України, ректор СНУ ім. В. Даля

**ЗАСТУПНИКИ ГОЛОВИ:**

- Статюха Г.О.* – професор, д.т.н., зав. кафедри НТУУ «КПІ»  
*Кондратов С.А.* – професор, д.х.н., зав. кафедри ІХТ СНУ ім. В. Даля

**ЧЛЕНИ ОРГКОМИТЕТУ:**

- Астрелін І.М.* – професор, д.т.н., Київ  
*Картель М.Т.* – академік НАН України, Київ  
*Атаманюк В.М.* – професор, д.т.н., Львів  
*Гумницький Я.М.* – професор, д.т.н., Львів  
*Мальований М.С.* – професор, д.т.н., Львів  
*Шмельов О.С.* – професор, д.т.н., Сєверодонецьк  
*Кац М.Д.* – професор, д.т.н., Рубіжне  
*Стороженко В.Я.* – професор, Суми  
*Склабінський В.І.* – професор, д.т.н., Суми  
*Захаров І.І.* – професор, д.х.н., Сєверодонецьк  
*Шмельов О.С.* – професор, к.т.н., Сєверодонецьк  
*Мінаєв Б.Ф.* – професор, д.х.н., Черкаси  
*Петров С.В.* – д.т.н., Київ  
*Гребенюк А.Г.* – к.х.н., Київ  
*Безносик Ю.О.* – доцент, к.т.н., Київ  
*Бойко Т.В.* – доцент, к.т.н., Київ  
*Бугаєва Л.М.* – доцент, к.т.н., Київ  
*Бендюг В.І.* – доцент, к.т.н., Київ  
*Джигирей І.М.* – доцент, к.т.н., Київ  
*Павлинська Ю.М.* – генеральний директор, Київ  
*Стешенко М.М.* – к.т.н., Київ  
*Коваленко Л.В.* – керівник громадської організації  
«Регіональний центр сприяння розвитку  
бізнесу, інвестиціям, інноваціям» (м. Рубіжне)  
*Рябінін В.І.* – голова Кремінської РДА Луганської області

**ЧЛЕНИ МІЖНАРОДНОГО ОРГКОМИТЕТУ**

- Лісіцин Н.В.* – ректор, професор, д.т.н, С.-Петербург  
*Холоднов В.О.* – професор, д.т.н., С.-Петербург  
*Зіятдинов М.М.* – професор, д.т.н., Казань  
*Герасименко Ю.Я.* – професор, д.т.н., Ростов  
*Мартінсен К.* – професор, Йовік  
*Решетіловський В.П.* – професор, д.т.н., Дрезден  
*Шийчук О.В.* – професор, д.е.н., Івано-Франківськ – Бидгощі  
*Макаревіч Е.* – професор, д.т.н., Бидгощі

**УЧАСНИКИ КМХП-2012**

Університети, інститути НАН України,  
галузеві інститути, науково-інженерні асоціації

Національний технічний університет України «КПІ»  
Хіміко-технологічний факультет НТУУ «КПІ»  
Центрально-східно-європейський інститут сталого розвитку  
Українська інженерно-хімічна асоціація (УІХА)  
Союз хіміків України  
Східноукраїнський національний університет ім. В. Даля  
Інститут хімічних технологій СНУ ім. В. Даля (м. Рубіжне)  
Національний університет «Львівська політехніка»  
Національний університет харчових технологій  
Київський національний університет будівництва і архітектури  
Черкаський державний технологічний університет  
Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького  
Одеський національний університет ім. І.І. Мечникова  
Одеський національний медичний університет  
Сумський державний університет  
Шосткінський інститут Сумського державного університету  
Запорізька державна інженерна академія  
Державний вищий навчальний заклад  
«Дніпропетровський хіміко-технологічний університет»  
Технологічний інститут СНУ ім. В. Даля (г. Сєвєродонецьк)  
Інститут теоретичної фізики НАН України  
Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України  
Інститут газу НАН України  
Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України  
Інститут технічної теплофізики НАН України  
Технічний центр НАН України  
Інститут промислової екології

**Росія**

Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(Технический Университет)  
Донской государственный университет, Ростов  
Казанский национальный исследовательский технологический университет

**Німеччина**

Technische Universitat Dresden, Institut fur Technische Chemie

**Польща**

Rzeszow University of Technology im. Ignacego Lukaszewicza  
University of Technology and Life Sciences, Bydgoszcz, Poland

**Норвегія**

Gjovik University College

## *Наукове видання*

# Третя міжнародна науково-практична конференція «Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку»

## **ЗБІРНИК НАУКОВИХ СТАТЕЙ**

Під загальною редакцією  
проф. Статюхи Г.О.

*Матеріали видано в авторській редакції*

Укладач: Безносик Ю.О.

Комп'ютерна верстка: Джигирей І.М.

Обкладинка: Алексенко Н.М.

Підп. до друку \_\_\_.2012 р. Формат 42×28.7%. Папір офсетний. Гарнітура Times New Roman.  
Друк різографічний. Умов.-друк. арк. 39,06. .облік.-вид. арк. 41,26. Наклад 100 прим.  
Надруковано \_\_\_\_\_