

Присвячується 110-ій річниці НПУУ «КПІ»

Міністерство освіти і науки України

*Національний технічний університет України «КПІ»
Хіміко-технологічний факультет НТУУ «КПІ»*

Черкаський державний технологічний університет

*Черкаське регіональне відділення
Української технологічної академії*

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ ТА ТЕХНОЛОГІЯХ

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

**Першої науково-практичної конференції
з міжнародною участю**

Черкаси, 12-16 травня 2008 року

Черкаси – 2008

УДК 66.011(063)

ББК 35

К63

К63 **Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях:** Тези доп. Першої наук.-практ. конф. з міжнародною участю, Черкаси, 12-16 травня 2008 р. – Черкаси: Видавництво «Черкаський ЦНТЕІ», 2008 – 284 с.

Видання містить тези доповідей Першої науково-практичної конференції «Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях» 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'ютерна підтримка виробничих процесів (інтелектуалізація, проектування, автоматизація), комп'ютерно-інформаційні технології в багаторівневій вищій освіті, сталій розвиток регіонів України – основний напрямок реформ в Україні.

Для науковців, фахівців, аспірантів і студентів.

**УДК 66.011(063)
ББК 35**

© Автори тез доповідей, 2008

© Національний технічний університет України «КПІ»,
укладання, оформлення, 2008

Шановні колеги!



Дозвольте привітати учасників та гостей
Першої науково-практичної конференції
*«Комп'ютерне моделювання в хімії та
технологіях».*



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-2008*», без сумніву сприятиме пошуку нових шляхів реформування та розвитку технологій. Ми сподіваємося, 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.

Бажаємо 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



Ректор ЧДТУ,
Академік Міжнародної академії
комп'ютерних наук і систем,
Заслужений працівник народної освіти України,
доктор технічних наук, професор
ЛЕГА Юрій Григорович

НАУКОВА ШКОЛА
МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІЧНИХ
І ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ ТА СИСТЕМ



СТАТЮХА

Геннадій Олексійович

професор, д.т.н.

Наукова школа – історично створена форма спільної діяльності колективу дослідників різного віку та кваліфікації, керованих визнаним лідером, яка характеризується єдністю основних напрямків робіт, спільністю та послідовністю принципів і методів, що забезпечується ефективністю процесу досліджень та підготовкою наукових кадрів.

Історія створення школи. Період діяльності. У 60-х роках минулого сторіччя бурхливий розвиток хімічної промисловості в колишньому СРСР вимагав нових темпів впровадження досягнень у практику. Єдиною альтернативою прискорення цього процесу в той період вважалося використання обчислювальної техніки. Час підтверджив правильність цього напрямку тому, що зростаючі небаченими темпами можливості комп'ютерів однаково вимагали вивчення їх можливостей.

З іншого боку, виникла гостра потреба перетворення накопичених хіміками-технологами знань у вигляді, який потрібен для розв'язування різних оптимізаційних задач – у вигляді математичних моделей. Причому моделей самих різних, по всьому життєвому циклу створюваного продукту – пошуку речовини, дослідженю, проектуванню й експлуатації технологічних систем.

Розрив, що утворився між знаннями хіміків-технологів з об'єктів хімічної технології, що проектуються, і сучасними комп'ютерними можливостями, призвело до дуже глибокої, і як показав час, дуже плідної ідеї створення нового напрямку наукових досліджень – *моделювання технологічних процесів та вирішення різних задач оптимізації на їх основі*.

Наукові здобутки в цьому напрямку привели до необхідності створення нової навчальної спеціальності. Цю спеціальність у різний час називали по-різному, зокрема і кібернетика. Суть же завжди залишалася одна: підготовлені фахівці грали і грають роль містка між хімією, хімічною технологією і комп'ютерами.

Гарна хімічна підготовка та чудове знання комп'ютерів дозволяли новонародженим фахівцям швидко знаходити спільну мову при вирішенні прикладних задач хімічної технології. Безупинний консультаційний режим поступово накопичував дорогоцінний досвід співробітництва. Перш за все він відображався в розроблених математичних моделях, у методах оптимізації, пристосованих до реалій хімічної технології, у розробленому програмному забезпеченні. До 80-х років можна було вже впевнено говорити про новий науковий напрямок, що має свій предмет (математичні моделі процесів хімічної технології) і свій інструментарій (комп'ютери).

Незважаючи на складності в апробації наукових праць у силу їх новизни, що виникла на стику двох наукових напрямків, рік за роком накопичувалась міць нової науки. Наукові праці і докторські дисертації А.Г. Бондар, Г.О. Статюхи, Є.М. Земляка, кандидатські дисертації Ю.О. Безносика, О.С. Королева, І.О. Потяженко, О.О. Квітки, Л.М. Бугаєвої, Т.В. Бойко, Р.М. Колесникової, та багатьох інших заклали основу унікальної наукової школи **«Математичне і комп'ютерне моделювання хімічних і технологічних процесів та систем»**. Головним досягненням наукової школи є створення на базі системного підходу методології побудови математичних моделей технологічних систем різної природи, різного масштабу і для різних цілей.

Характер Наукової школи. Це єдина на Україні Наукова школа, що поєднує зараз фахівців з різним професійним фундаментом, але пов'язаних однією загальною справою – побудовою математичних моделей і їх використанням у практиці хімічної, харчової, будівельних матеріалів, фармацевтичної, біотехнологічної, нафтохімічної та інших галузях промисловості. Колектив школи поєднує вчених-однодумців Києва, Одеси, Львова, Харкова, Дніпропетровська, Хмельницького та інших міст України. Наукова школа сприяє формуванню вчених з потужною підготовкою в області математичного моделювання. Тісне співробітництво вчених нашої школи і прихильників її методології привело до захисту докторських дисертацій Гогунським В.Д. і Морозюком Т.В. (Одеса), Камбургом В.Г. (Хмельницький), Півнем О.Н. і Мітченко Т.Е. (Київ). Співробітництво з науковою школою проф. Вознесенського В.А. (Одеська Академія архітектури і будівництва) сприяло появі д.т.н. Ляшенко Т.В. Наступна організація кафедр під керівництвом вищезазначених спеціалістів в Одеській Політехніці, Одеській Академії Холоду, Хмельницькому Технологічному Університеті та Університеті «Україна» (Київ) дозволяє впевнено говорити про визнання ідейної міцності школи.

В орбіту нашої наукової школи включені вчені таких країн як Англія, Німеччина, Польща, Словаччина, Угорщина, Чехія, Росія, США та ін.

Свої досягнення ми регулярно представляємо на Міжнародних Конференціях ММТТ (Росія), ESCAPE (Європа), CHISA (Чехія), ECCE (Європа), АСНЕМА (Німеччина) та у багатьох журналах. До 1990 року наша Наукова школа перманентно проводила свою Конференцію в м. Черкаси. С цього року ми поновлюємо цю традицію як свідоцтво нагальної необхідності показу наших досягнень. Ми не тільки вижили, ми опанували нові наукові напрямки, які були схвально оцінені науковою спільнотою на конференціях світового рівня в Чехії, Іспанії, Угорщині, Бельгії, Німеччині, Польщі, Росії, Словакії, Туреччині.

Теоретичний фундамент наукової школи **«Математичне і комп'ютерне моделювання хімічних і технологічних процесів та систем»** дозволив сформувати як мінімум п'ять прикладних напрямків математичного моделювання: **екологічного, рецептурно-продуктового, комбінаторно-хімічного, автоматизованих систем керування та систем сталого розвитку.** Тут розв'язування оптимізаційних задач дає істотний ефект і викликає визначний науковий резонанс.

Останні роки колектив кафедри плідно займається проблемами охорони навколошнього середовища в рамках різних наукових програм, зокрема в програмах розвитку м. Києва. Цей досвід вирішено розвинути, для чого в Науково-Дослідному Інституті соціально-економічних проблем м. Києва (“КП” НДІ СЕП) був створений

відділ екологічної політики та безпеки міста на чолі з д.т.н., професором Статюхою Г.О. Відділ функціонував як інформаційно-аналітичний центр, який надавав населенню та керівництву міста, а також іншим зацікавленим структурам екологічну, еколого-технологічну та медико-біологічну інформацію для обґрунтування та підтримки прийняття рішень, які поліпшують екологічні умови в місті та сприяють підвищенню рівня життя киян. Відділ проводив та координував наукові екологічні програми Київради, які зменшують екологічне навантаження на місто та сприяють економному використанню природних ресурсів.

Сталий розвиток – це новий науковий напрямок школи (керівник групи д.т.н. Статюха Г.А., замісник – к.т.н. Джигирей І.М.). Необхідність у розробці індикаторів сталого розвитку була відзначена в "Порядку денному на 21 століття", прийнятому на Конференції ООН по навколошньому середовищу та розвитку в Ріо-де-Жанейро у 1992 р. Контроль за досягненням цілей сталого розвитку, управління цим процесом, оцінка ефективності використовуваних засобів і рівня досягнення поставлених цілей вимагають розробки відповідних критеріїв і показників – індикаторів сталого розвитку. Кафедрою кібернетики хіміко-технологічних процесів за участі учбово-наукового комплексу "Інститут прикладного системного аналізу" розроблений програмний комплекс оцінювання регіонального індексу сталого розвитку навколошнього середовища. Індекс враховує національні пріоритети в екологічній політиці, зокрема радіаційне та техногенне навантаження. Пропонується використовувати регіональний індекс сталого розвитку навколошнього середовища для оцінювання екологічного статусу у розрізі сталого розвитку окремих регіонів України разом із регіональними індексами оцінювання економічної, соціальної та інституціональної складової сталого розвитку регіону. Використання індексу дає в руки особам, що приймають рішення, інструмент, що прокладає курс до виконання національних природоохоронних показників і полегшує порівняльний політичний аналіз; сприяє впровадженню кількісного підходу в прийнятті рішень на основі досвіду.

До цього напрямку приєднується блок проблем з **техногенної безпеки**, які вирішуються в групі доцента, к.т.н. Бойко Т.В. Розроблено програмну систему, яка реалізує розрахунок показників небезпечності промислових об'єктів для підприємств, розташованих на території України. База даних програмної системи має відомості про всі фактори природної небезпечності України, а також відомості про більш ніж 400 небезпечних речовин. Запропоновано підхід до оцінки небезпечних видів діяльності промислових підприємств. В основу підходу покладені поняття індексів ризику, потенційної шкоди, токсичної небезпечності, пожежо- та вибухонебезпечності на основі яких визначається індекс відносної небезпечності, а також індекс регіональної небезпечності. Індекс ризику функціонування джерела небезпеки це комбінований показник, що враховує гарантійний термін експлуатації устаткування, а також внутрішні (ендогенні) і зовнішні (екзогенні) фактори, що істотно впливають на безпеку роботи. Індекс потенційної шкоди визначає серйозність можливих наслідків аварій і залежить від кількості і властивостей небезпечної речовини, що знаходиться на потенційно небезпечному об'єкті. Для полегшення використання методики розроблюється програмний комплекс призначений для виявлення промислових об'єктів підвищеної небезпеки серед потенційно небезпечних об'єктів і їхнього ранжування по категоріях небезпечності за п'ятиступеневою шкалою.

Розробки з *експериментально-статистичного моделювання* стали в великої нагоді при освоєнні напрямку «Продуктова інженерія» (керівник – к.т.н. Складанний Д.М.). В межах цього напрямку досліджуються методи і підходи по розробці технологій і рецептур виробництва хімічних продуктів з заданими властивостями. Розроблений пакет програм для вирішення задач на базі експериментально-статистичні моделей STAT-SENS широко використовується як в дослідженнях технологічних об'єктів так і в навчальному процесі. Дослідницька робота ведеться в тісному співробітництві як з іншими кафедрами університету так і з науковими установами, в тому числі закордонними. Наукове співробітництво з Вашингтонським Університетом в Сент-Луїсі (США) в цьому напрямку оформлене відповідною угодою на рівні керівників навчальних закладів і вже дало певні наукові результати, що знайшли відображення в сумісних наукових працях.

Нове дихання отримав напрямок *Математичне моделювання технологічних процесів* (керівник групи доцент, к.т.н Безносик Ю.О.) з можливістю використовувати експериментальну базу Інституту технічної хімії Технічного Університету м. Дрездена, Німеччина. На кафедрі розроблена інтелектуальна система підтримки прийняття рішень для вибору й моделювання процесів очищення газових викидів підприємств хімічної та суміжних галузей промисловості проведено детальний аналіз процесів і методів очищення викидних газів. По результатах цього аналізу спроектовані та розроблені база даних та база знань для процесів знешкодження шкідливих викидів. База даних включає всі методи промислового очищення газів від оксидів сірки та оксидів азоту. Бази знань створено в результаті формалізації евристичних правил, якими користуються технологи для вибору методів очищення газів розглянутого класу. Роботу системи показано на прикладах розв'язування задач вибору методів очищення газових викидів від оксидів сірки та оксидів азоту для різних значень параметрів газу, що очищується та при різних вимогах до результатів очищення. Проводяться роботи з мінімізації викидів шкідливих речовин у повітря та у стічні води з використанням Пінч-аналізу.

Застосування методів штучного інтелекту – експертних систем, генетичних алгоритмів, застосування нейронних сіток, баз знань для моделювання та оптимізації процесів та схем хімічної технології. Роботи проводяться із застосуванням відомих програмних продуктів MATLAB, Genocop, Aspen Plus, HYSYS. Ведуться роботи по застосуванню нечіткої логіки до процедур прийняття рішень, роботи по застосуванню генетичних алгоритмів для рішення задач оптимізації (керівник робіт – доцент, к.т.н. Бугаєва Л.М.).

Нові перспективи в вирішенні виробничих проблем відкрились з появою проекту UNIDO «*Більш чисті виробництва*». Наголос на екологічну складову та стійкий розвиток виробництва дає можливість використати накопичений великий досвід АСУТП (керівник групи проф., к.т.н. Медведєв Р.Б.). Провадиться науково-дослідницька робота з метою використання досягнутих на кафедрі результатів в галузях імітаційного моделювання (моделююча система STAR), керування та оптимізації для суттєвого поліпшення основних показників реакторного блоку, а саме безпеки, технологічних та економічних. Розроблені імітаційні моделі, за допомогою яких можна здійснювати перевірку правильності рішень по керуванню, що приймаються з боку різних структур: обслуговуючого персоналу; існуючого

програмного забезпечення; програмних продуктів, що створені і можуть бути застосовані при керуванні. З фірмою Honeywell, м. Київ проводиться робота по застосуванню програмного продукту RMPCT (Robustness Modeling Predictable Control Technology), який призначений для обробки результатів експериментів, моделювання і оптимізації технологічних процесів та впровадженню контролера Experion PKS для оперативного управління. В рамках співпраці з цією фірмою ведуться роботи, пов'язані з моделюванням, оптимізацією і автоматизацією об'єктів хімічної і нафтохімічної промисловості.

В цілому подібні роботи для будь-якої організації будуть виконуватись у сучасній *віртуальній комп'ютерній лабораторії кафедри*. Остання призначена ефективно підтримувати взаємодію наукових, інженерних та освітянських колективів, а також інформаційних, інструментальних, індустріальних та інших матеріальних, а головне – унікальних ресурсів в географічно розподіленому середовищі – м. Києві (а можливо і за його межами). Очевидно, що вчені віртуальної лабораторії кафедри (між іншим, це вихованці нашої Наукової школи) та залучені до роботи магістри та аспіранти кафедри, виконуючи завдання різних організацій Києва та інших регіонів України, одночасно забезпечують наукове супровождення навчального процесу на кафедрі. Як підтвердження високого рівня робіт кафедри, цикл праць в напрямку охорони навколошнього середовища та стійкого розвитку отримав відомий американський грант Fulbright (2005, професор Статюха Г. О.)

При кафедрі активно працює Українська Інженерно-хімічна Асоціація (УІХА), яка входить до Європейської Федерації Хімічної Інженерії (European Federation of Chemical Engineering). Президентом цієї Асоціації вже багато років є проф. Статюха Г.О. Головна мета УІХА – організація співробітництва між науковими та освітянськими установами України та Європейської спільноти. Так, організація співпраці з Жешувською Політехнікою (Польща) в рамках Програми ЕС – COMODEC (2003-2005), Center of Excellence – дала можливість активізувати наукову роботу в напрямку синтезу складних технологічних та хімічних систем. Підготовлені до захисту 2 дисертації (одна на нашій кафедрі, а друга – в Жешувській Політехніці) і ще 4 – готовуються.

Вплив наукової школи на рівень вищої освіти. Важко переоцінити вплив Наукової школи на рівень вищої хіміко-технологічної освіти в Україні. Протягом багатьох років викладачі кафедри проводять загально-професійну підготовку студентів на хіміко-технологічному та інженерно-хімічному факультетах НТУУ «КПІ». Це такі дисципліни як «Обчислювальна математика і програмування» (1 і 2 курс), «Математичне моделювання і застосування комп'ютерів у хімічній технології» (4 курс). Практично кожні два роки згадані курси і лабораторні практикуми оновлюються за рахунок введення нових досягнень інформаційних технологій і нових пакетів прикладних програм.

Недавно кафедрі КХТП було доручене читання курсів «Математичне моделювання систем та процесів», «Математичні методи оптимізації», «Основи наукових досліджень» для магістрів трьох факультетів – хіміко-технологічного, інженерно-хімічного та факультету біотехнологій. Насичені прикладами наукових досліджень, проведених нашою науковою школою, а також зарубіжними науковими школами, в області математичного моделювання, згадані дисципліни знайомлять майбутніх технологів із сучасними методами дослідження і проектування хімічних і технологічних систем.

Остання навчальна розробка Наукової школи разом з Інститутом Прикладного Системного Аналізу (ІПСА) НТУУ «КПІ» – курс лекцій «Аналіз сталого розвитку суспільства» для магістрів ІПСА та всього Університету.

Тісне співробітництво з науковими школами Росії (РХТУ, Москва), Англії (UMIST, Манчестер), Німеччини (Університети Дортмунда і Дрездена), Польщі (Політехніка, Жешув), США (University of Utah, Salt Lake City; University of Minnesota, Duluth; Washington University in St.Louis) та інших країн, а також з Інститутами НАНУ (Інститут фізичної хімії, Інститут сорбції та проблем ендоекології, Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії, Інститут хімії поверхні, Інститут газу, Інститут високомолекулярних сполок, Інститут кібернетики, Інститут прикладного системного аналізу та ін.) дозволяє постійно знайомити студентів профільної спеціальності “Комп’ютерно-інтегровані технологічні процеси та виробництва” з досягненнями передової наукової думки. Так, на бурхливий розвиток комп’ютерної хімії ми відгукнулися відкриттям нової спеціалізації «Комп’ютерно-комбінаторні хімічні системи». У фахівцях подібного профілю є гостра потреба в інститутах НАН України.

Залучення студентів до сучасної методології дослідження і проектування хімічних і технологічних систем, їх особиста участь у розробці тематики Наукової школи, безумовно сприяє підвищенню якості їх освіти, полегшує входження в сучасний ринок з високими вимогами до інженерів та магістрів, підвищує їх кар’єрні можливості. Про це свідчить і постійний стовідсотковий розподіл студентів. Постійно підтримувані зв’язки з випускниками кафедри, які працюють в Україні та багатьох країнах світу, підтверджують високий рівень підготовки профільних фахівців.

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут»

Хіміко-технологічний факультет

Кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів



Адреса: 03056, Київ, пр. Перемоги, 37

E-mail: kxtp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Веб-сайт: <http://www.xtf.ntu-kpi.kiev.ua/~kxtp>

PRODUCT INFORMATION NOTE

Комплекс средств проектирования UniSim™ Design Suite

Инструментарий моделирования процесса для проведения модельных экспериментов, проектирования, контроля рабочих характеристик, оптимизации и бизнес планирования для предприятий по добыче и переработке нефти и газа, а также для химических предприятий.



Целевая задача: Оптимальные разработки технологического процесса

Перед предприятиями по добыче и переработке нефти и газа, а также химическими предприятиями стоит задача оптимизации проектирования технологических процессов при одновременном повышении надежности и стабильности эксплуатационных характеристик. Занятые переработкой отрасли промышленности должны находить оптимальное решение проекта быстро и с минимальными рисками переделок, не утрачивая при этом конкурентоспособности и добиваясь максимальной экономической эффективности. Время от времени технологам в процессе выполнения задач по проектированию и эксплуатации высокопродуктивных и рентабельных перерабатывающих предприятий повышенной безопасности приходится принимать решения и по коммерческим вопросам.

Возможность: Консолидация коммерческих задач и проектирования технологического процесса

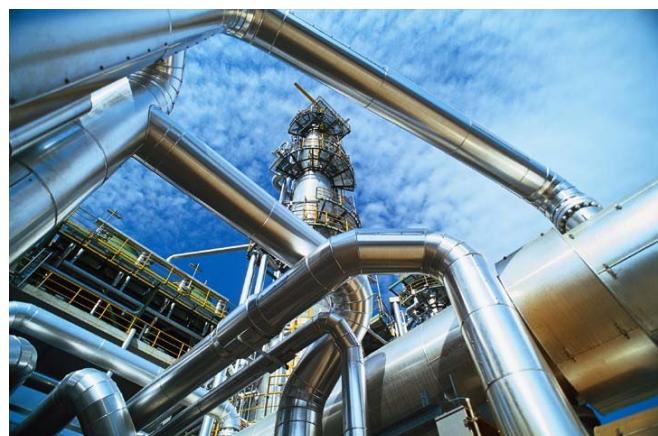
Моделирование процесса – это мощный инструмент, с помощью которого менеджеры и инженеры могут связать важнейшие цели деловой активности с процессом разработки технологического проекта, что позволяет осуществлять моделирование жизненного цикла реального объекта

Основные преимущества моделирования процесса с помощью комплекса средств UniSim Design Suite:

- Применение сценариев возможного развития событий и анализа чувствительности для определения оптимального проекта, исходя из эксплуатационных и коммерческих задач
- Гарантия надлежащего выбора технических параметров оборудования в соответствии с запланированным объемом выпуска продукции и ее характеристиками
- Анализ влияния изменений в подаче сырья, перебоев в работе и простои оборудования на безопасность, надежность и рентабельность технологического процесса
- Мониторинг технического состояния оборудования путем сопоставления с ожидаемыми показателями
- Улучшение параметров управления, работоспособности и безопасности завода с помощью динамических моделей проектируемых и действующих предприятий.

Решение: UniSim Design Suite

Комплекс UniSim Design Suite базируется на последней версии программного обеспечения HYSYS®, которая была недавно приобретена у Aspen Technology. В этом комплексе воплощена технология интуитивного и интерактивного моделирования процесса, с помощью которой инженеры могут создавать стационарные и динамические модели для проектирования предприятий и систем управления, контроля технических параметров, поиска и устранения неисправностей, эксплуатационного совершенствования, составления бизнес-планов и управления активами.



Honeywell

Достоинства комплекса UniSim Design Suite

Комплекс UniSim Design Suite предназначен для перерабатывающих отраслей промышленности, где с его помощью повышают производительность и рентабельность на протяжении всего жизненного цикла предприятий. Наличие в UniSim мощных средств моделирования и анализа, прикладных систем реального времени, а также интегрированный подход к техническим решениям позволяет компаниям улучшать проекты, оптимизировать как производство, так и процесс принятия решений. Комплекс UniSim Design Suite полностью совместим и способен взаимодействовать с моделями, созданными с применением средств из комплексов UniSim Operations и Optimization Suites.

Ниже показаны основные коммерческие преимущества применения средств моделирования UniSim:

Уточненная проработка технологических процессов – Инженеры получают возможность быстро оценить и выбрать наиболее рентабельный, надежный и безопасный проект

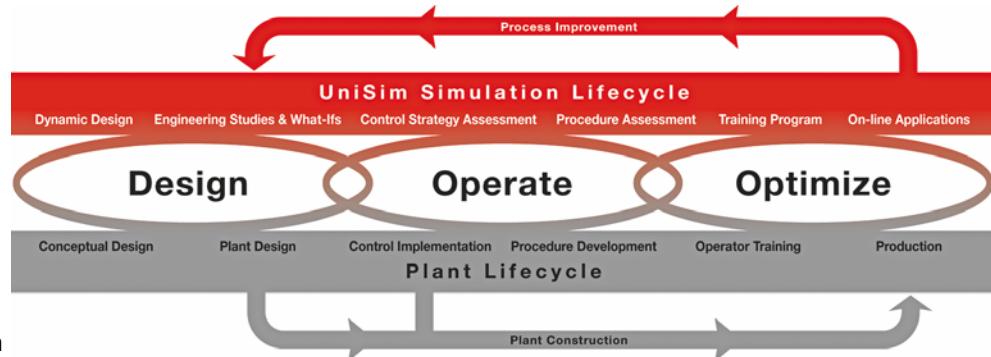
Затраты, связанные с внесением изменений в проект на месте в процессе пуска объекта, оцениваются на уровне 7% капитальных затрат на проект. Используя UniSim, инженеры могут оценить влияние принимаемых ими решений на более ранних стадиях проекта. В случае новых проектов пользователи получают возможность быстро создавать UniSim-модели, позволяющие оценить множество возможных сценариев развития событий. Интерактивная среда упрощает как процесс изучения таких сценариев, так и анализ чувствительности. Наилучшие среди отобранных вариантов могут послужить основой для создания высокоточных моделей, включающих дополнительное оборудование и учитывающих все тонкости процесса.

Контроль технического состояния оборудования – Обеспечивает оптимальный режим эксплуатации оборудования.

UniSim дает пользователям возможность быстро выявить участки, где оборудование работает не в полную силу. Например, в целях локализации неисправности или улучшения эксплуатационных показателей завода инженеры используют средства UniSim, чтобы выявить эксплуатационные недостатки оборудования типа накипи теплообменника или «захлебывания» колонны, а также оценить степень сжатия или очистки. Инженеры, занимающиеся модификацией оборудования, могут быстро оценить эффективность применения оборудования, занятого в различных операциях, или последствия изменения исходных данных проекта.

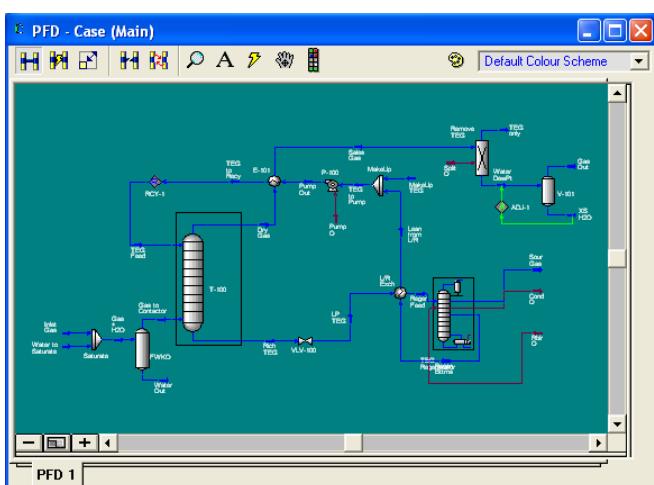
Сокращение затрат на проектирование – Исключение повторного ввода данных вручную или с ошибками.

Моделирование средствами комплексов UniSim снижает затраты на проектирование за счет создания



моделей, которые можно модифицировать для применения на протяжении всего жизненного цикла предприятия – от разработки концепции до рабочего проекта, а также для оценки, обучения и оптимизации. Это позволяет выполнять все работы быстро и эффективно. Отпадает необходимость в требующих больших затрат времени и чреватых ошибками операциях ручного переноса, форматирования и анализа производственных и технологических данных, на что может уходить до 30% всех трудозатрат, выраженных в человеко-часах.

Особенности комплекса UniSim Design Suite



Для достижения максимально эффективной эксплуатации и обеспечения надлежащего понимания и суммы знаний используемое средство моделирования должно сочетать в себе удобство применения с устойчивым техническим потенциалом. Комплекс UniSim создавался на базе испытанных технологий, при наличии более чем 25-летнего опыта оснащения средствами моделирования технологических процессов предприятий по добыче и переработке нефти и газа, а также химических заводов. Комплексу присущи следующие качества:

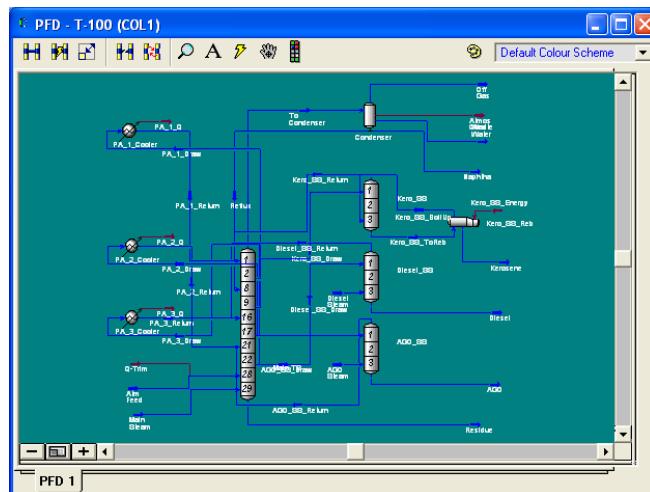
Удобная в работе операционная среда Windows. Графические средства PFD позволяют четко и выразительно отобразить технологическую схему. Включены такие функции, как вырезание, копирование, вставка, авто-соединение, а также разделение крупных объектов на подсхемы.

Исчерпывающая обоснованность термодинамики процесса. Обеспечивается точность расчета физических и связанных с транспортировкой свойств, а также фазового поведения для отраслей по добыче и переработке нефти и газа. Содержится обширная база данных компонентов с возможностью добавления в нее пользовательских компонентов.

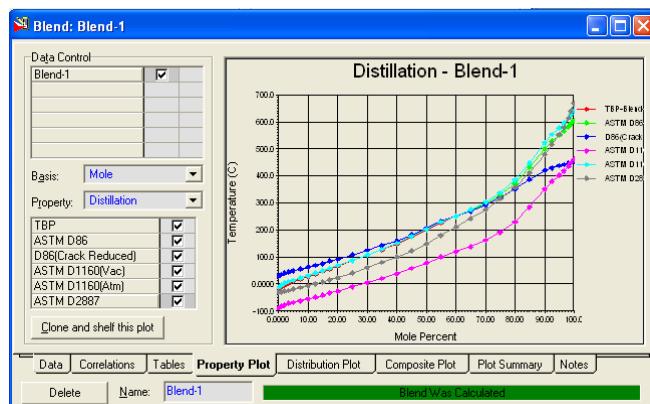
Active X-соответствие (OLE-автоматизация). Возможность интеграции созданных пользователем операций агрегата, запатентованных описаний кинетики реакций, а также комплексов специальных свойств. Согласовано функционирует в связке с такими программами, как Microsoft Excel и Visual Basic.

Комплексные операции агрегатов. Сюда входят перегонка, реакции, операции теплообмена, вращающееся оборудование, а также логические операции в установившихся условиях и в динамике. И для всех этих операций гарантируется получение качественных и реалистичных результатов с возможностью «разрулить» различные ситуации типа опорожнения сосуда, а также перелива или противотока.

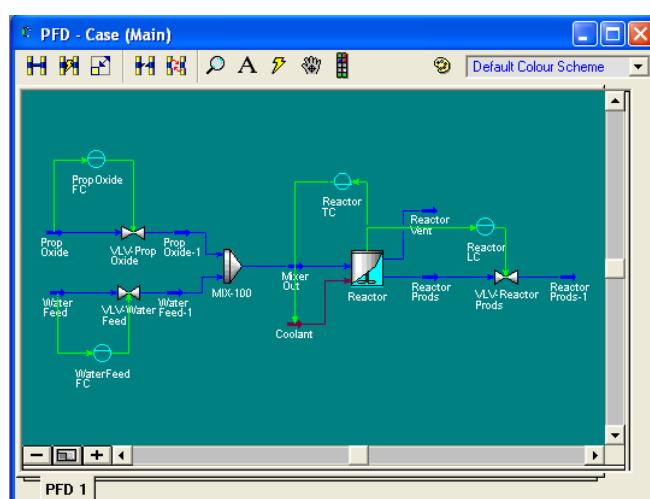
Возможность моделирования систем сырой нефти. Позволяет выполнять моделирование свойств образцов сырой нефти и нефтяных столбов. Путем определения гипотетических компонентов в составе нефти вводятся характеристики углеводородного флюида и предсказываются их теплофизические и транспортные свойства.



Возможность UniSim-моделирования свойств сырой нефти



Моделирование UniSim применительно к сырой нефти – Свойства смесей



Динамическая опция UniSim

Опции UniSim Design Suite

Отберите самые подходящие для Вас опции

Открытая архитектура пакета средств проектирования UniSim Design Suite делает его максимально гибким и мощным инструментом, что позволяет его пользователям наращивать потенциал своих предприятий в соответствии со спецификой отрасли за счет средств, поставляемых как Honeywell, так и сторонними поставщиками. Перечисленные ниже опции UniSim помогают полнее удовлетворить потребности клиентов и распространить применение моделирования на все этапы жизненного цикла предприятия.

Динамическая опция UniSim Design Suite позволяет выполнять динамическое моделирование в режиме полной интеграции с программной средой UniSim. Стационарную модель можно преобразовать в динамическую, а достигнутые результаты будут отличаться строгостью и высокой точностью при очень близком воспроизведении технических параметров и конфигурации оборудования в мельчайших деталях. В число специальных функций для динамического моделирования входят: динамика давления потока, богатый выбор функциональных возможностей регулирования для поддержки управления процессом и его детального мониторинга, матрицы причинно-следственных связей, а также планировщик событий.

Опция UniSim Amines – обеспечивает моделирование и оптимизацию процессов очистки газа и сжиженных фракций от соединений серы, включая простые, смешанные или активированные амины. Благодаря «потарельчатому» подходу достигается выдающаяся точность моделирования поглощения и реакции сероводорода и углекислого газа в различных промышленных растворителях. Расширенная термодинамическая модель электролита дает более достоверные результаты по сравнению с эмпирическими моделями, особенно в отношении смеси аминов.

Опция UniSim OL GAS™ содержит стандартные соотношения многофазных потоков в трубопроводных системах, которые используются в рамках UniSim для расчета градиентов давления, объемного содержания жидкостей и режимов течения.

Опция UniSim Electrolyte Interface базируется на технологии, разработанной экспертом в водной химии - фирмой OLI Systems Inc. Это позволяет выполнять в рамках UniSim анализ сложных вводно-электролитных систем благодаря сочетанию возможностей моделирования UniSim с обширным банком данных OLI и теплофизическими свойствами более чем 3,000 органических и неорганических видов электролитов.

Опция UniSim PIPESYS™ - обеспечивает возможность точного моделирования одно- и многофазных потоков в целях проектирования, устранения «узких мест» и оптимизации трубопроводных систем. Данная опция способна учитывать разности высот трубопровода, имеющиеся на линии оборудования, наличие в трубах замазки и шероховатость их стенок, а также свойства протекающих по этим трубам сред.

Опция UniSim Multiflash™ - включает стандартные методы, чисто компонентный банк данных и средства анализа давления, объема и температуры (PVT) для определения состояний фазового равновесия и термодинамических свойств сложных смесей для устройств подачи нефти и газа.

Опция UniSim Blackoil – включает стандартные методы операций с пластовыми флюидами при моделировании устройств подачи нефти и газа. Эта опция обеспечивает уникальную возможность моделировать технологические схемы процесса без применения композиционных алгоритмов.

Кроме этих опций UniSim для стационарного или статистического моделирования имеется еще целый ряд опций для динамического моделирования.

Опция переходных состояний UniSim OLGA Transient позволяет использовать продукт OLGA2000 из пакета ScandPower в рамках применения опции динамического моделирования UniSim Dynamic Option, включая моделирование неустановившегося многофазного потока нефти, воды и газа в скважинах и трубопроводных системах. Используя эту опцию в рамках UniSim, инженеры получают возможность объединять множество потоков продукции для создания моделей распределения потоков в трубопроводных сетях в сочетании с моделированием всего процесса.

Дополнительная информация

Чтобы получить дополнительную информацию о приложении Profit Controller, посетите сайт www.honeywell.com/ps или обратитесь к представителю компании Honeywell.

Automation & Control Solutions

Process Solutions

Honeywell

Silver Center, 4, I. Lepse av., 03680, Kiev, Ukraine

Tel: +380 (44) 201-44-74; Fax: +380 (44) 201-44-75



**ФІРМА «ІРКОМ-ЕКТ» - ВИРОБНИК
ФАСУВАЛЬНОГО ОБЛАДНАННЯ**

Конищев В.В.

Директор

Науково-виробничої фірми «Ірком-ЕКТ»,
irkom@ekt.kiev.ua

Науково-виробничу фірму «Ірком-ЕКТ», виробника фасувального обладнання для підприємств хімічної промисловості, засновано в 1994 році.

Обладнання фірми одразу ж завоювало ринок фасувального обладнання на всій території країн колишнього Радянського Союзу.

Професійний рівень обслуговування, надійність, абсолютна безпека у вибухонебезпечних приміщеннях, а також висока продуктивність праці сприяли тому, що понад 70% продукції лакофарбових заводів України фасують за допомогою обладнання НВФ «Ірком-ЕКТ» (102 підприємства в 35-ти містах України).

Тільки на заводах російських компаній «Текс» (з 2007 року належить «Тіккурілі») і «Емпілс» працює понад 100 одиниць обладнання НВФ «Ірком-ЕКТ». Ці дві російські компанії випускають понад 200 тис. т продукції, що становить 80% всієї лакофарбової галузі України.

Активна участь у різних виставках дала змогу НВФ «Ірком-ЕКТ» постачати обладнання на найбільші заводи ОАЕ, Туреччини, Польщі, Естонії, Латвії.

Нові розробки НВФ «Ірком-ЕКТ» щодо фасування ЛКМ на водній основі вже зацікавили провідних європейських виробників ЛКМ, таких як “Тіккуріла”, “Акзо Нобель”, “Сігма Колон”, “Капарол”. Ці компанії на своїх підприємствах в Україні, Росії, Казахстані і Туреччині вже використовують нові моделі фасувального обладнання.

З 1998 року фірма здійснює виробництво екологічно чистих, сучасних водно-дисперсійних лакофарбових матеріалів, а завдяки своїй високій якості та реалізації продукції в березні 2003 року побудувала завод з виробництва акрилових оздоблювальних матеріалів.

Завод фірми “Ірком-ЕКТ” – це спроектоване із врахуванням передових новітніх технологій і досягнень науки виробництво, підкріплене сучасною дослідницькою базою, що працює на високоавтоматизованому обладнанні власного виробництва, а продукція, виготовлена із відбірної сировини провідних виробників із Фінляндії, Німеччини та інших країн світу, успішно конкурує із загальновизнаними лідерами.

НВФ “Ірком-ЕКТ” – підприємство нового типу, яке поєднує передовий світовий досвід та досягнення українського бізнесу. Вся діяльність підприємства спрямована на вихід вітчизняного виробництва акрилових оздоблювальних матеріалів на рівень провідних світових виробників.

Завдяки розробці своїх унікальних рецептур і методик НВФ “Ірком-ЕКТ” першою в Україні створила та поповнила вітчизняний ринок будівельних матеріалів такими відомими брендами, як кольорові шпаклівки по дереву “Ірком-колор”, декоративні фарби “Золото”, “Бронза”, “Мідь”, “Срібло”, “Перлина”, “Хамелеон”.

Сьогодні “Ірком-ЕКТ” випускає понад сорок найменувань екологічно чистих високоякісних водно-дисперсійних матеріалів різного призначення: інтер’єрні і фасадні фарби торгової марки EcoCristal, декоративні фарби, які імітують колір дорогоцінних металів, шпаклівки і лаки для паркету, дерева та мінеральних поверхонь, клей, антисептики

“Біодоктор” і ґрунтовки для дерева та мінеральних поверхонь, протигрибковий лак “Доктортекс”, а для елітного оздоблення інтер’єрів – декоративне рельєфне покриття “Бриз” та венеціанську штукатурку “Мармур”. Через дилерську мережу та мережу сучасних будівельних супермаркетів («Нова лінія», «Епіцентр») продукція підприємства широко представлена в усіх регіонах України.

Завдяки творчому підходу, ретельному відстеженню тенденцій товарного ринку асортиментний ряд продукції фірми постійно поповнюється новими видами товарів, які користуються великим попитом у споживачів.

Лабораторія заводу оснащена сучасними приладами, які контролюють якість продукції, що виробляється, і забезпечують вхідний контроль якості сировини.

У 2007 році НВФ “Ірком-ЕКТ” стала переможцем Всеукраїнського конкурсу «Виробник кращих вітчизняних товарів 2007 року» в номінаціях: виробництво обладнання для фасування, закупорювання та етикетування хімічної та лакофарбової продукції; виробництво фасадних та інтер’єрних фарб торгової марки EcoCristal; виробництво декоративних оздоблювальних матеріалів.

В рамках Державної програми «Пропаганда України за кордоном» під патронатом Міністерства закордонних справ України, за високий інтелектуальний потенціал, професіоналізм, створення гідного міжнародного іміджу України за кордоном ТОВ „НВФ „Ірком-ЕКТ” нагороджена срібним знаком «Визнання року 2007».

Колектив надійних професіоналів НВФ “Ірком-ЕКТ” очолює Конишев Валерій Васильович – прагматичний, діловий, ініціативний, досвідчений фахівець, вдумливий і відповідальний керівник, чудовий організатор, який переконаний, що попереду нові досягнення і успіхи.

IPKOM EKT

ФАСУЕМ ВСЕ!

в любую тару

Оборудование ✓

для расфасовки,
укупоривания, этикетирования

- дозаторы
- полуавтоматы весового дозирования
- полуавтоматы дозирования по объему
- линии разлива и укупорки
- укладчики ведер
- укладчики крышек
- машины этикетировочные

Новинки ✓

полуавтоматы на тензодатчиках

технологический комплекс (миксер-дисольвер, дежка, гидропресс, линия фасовки и укупорки)
для особовязких продуктов

линия для фасовки пенящимся пропиток

линия для фасовки колеров

устройство нанесения этикеток.

Для эксплуатации:
в химической и лакокрасочной промышленности во взрывопожароопасных помещениях категорий «А» по НПБ 105-95
с взрывоопасными зонами класса «B-1a» по классификации «ПУЭ»

СЕКЦІЯ 1

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

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГЕОМЕТРІЇ І ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ ГЛЮКОЗАМИНУ ТА ГЛЮКОЗИ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЇ ХІМІЇ

Бараков Р.Ю., Солодовник Т.В., Мінаєв Б.П., Мінаєва В.О.

Черкаський державний технологічний університет, soltav07@rambler.ru

Хітин і хітозан – природні біополімери, які характеризуються унікальними фізико – хімічними, фізіологічними, сорбційними властивостями. Вони широко застосовуються в різних галузях народного господарства (медицина, сільське господарство, харчова промисловість та ін.) та потребують ретельного вивчення [1]. Глюкозамін – мономер хітозану, який зберігає усі його фізико – хімічні властивості та особливості будови.

Стрімкий розвиток комп’ютерів та комп’ютерного програмування дає можливість проводити квантово–хімічні розрахунки досить складних молекул. Які, в свою чергу, дозволяють одержати дані про структуру, енергію молекули, дипольний момент, теплоту утворення, потенціал іонізації, розподіл заряду, порядки зв’язків, спінову густину та т. і. Перевагою квантово–хімічних розрахунків є, насамперед, економія реактивів, матеріальних затрат та часу дослідження. Метою даної роботи було квантово–хімічне дослідження молекул глюкозаміну та глюкози методами PM3, MNDO та функціоналу густини. PM3, MNDO – напівемпіричні методи, в яких рівняння Шредінгера розраховується на основі наближення Хартрі – Фока з використанням молекулярних орбіталей (МО) у вигляді лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО). При цьому у даних методах розглядається взаємодія тільки валентних електронів, а значна частина інтегралів параметризується або задається константами. Метод функціоналу густини ґрунтуються на тому, що енергія основного стану молекули є функціоналом лише електронної густини $E = E[\rho(r)]$. Метод функціоналу густини більш точніший за напівемпіричні методи і тому вимагає для проведення розрахунків потужної комп’ютерної техніки [2].

За допомогою обраних методів були проведені розрахунки і порівняльний аналіз геометрії та електронної структури глюкозаміну та глюкози. Було встановлено, що на зміну довжини зв’язків, валентних кутів у досліджуваних молекулах впливає заміна гідроксильної групи на аміногрупу. Значення деяких двогранних кутів підтверджують те, що молекули глюкозаміну та глюкопіранози мають конформацію крісла. На хімічну активність молекул значно впливає розподіл електронної густини, яку визначають функціональні групи $-\text{NH}_2$ та $-\text{OH}$, а також значення часткових зарядів на атомах. Отримані величини енергій ВЗМО та НВМО дозволяють говорити про те, що молекули глюкозаміну та глюкози повинні мати нуклеофільні властивості та від’ємну електронну спорідненість. Молекула глюкозаміну має більш позитивну енергію НВМО, тому проявляє сильніші нуклеофільні властивості ніж молекула глюкози. Інформацію про напрямки взаємодії з розчинником досліджуваних молекул, а також розподіл негативного та позитивного потенціалів дає карта електростатичного потенціалу. Молекула глюкозаміну більш полярна за молекулу глюкози, тому що має більше значення дипольного моменту та маєвищу реакційну здатність у реакціях за гетерогенним (іонним) механізмом. Для досліджуваних молекул були отримані дані про загальну енергію, теплоту утворення, ширину енергетичної щілини.

Отже, можна стверджувати, що заміна гідроксильної групи на аміногрупу надає глюкозаміну своєрідних фізичних, хімічних та деяких інших властивостей, які широко використовуються в різних галузях господарства. В подальшому планується проводити роботу по дослідженю похідних хітину і хітозану та їх інфрачервоних спектрів.

1) Muzzarelli R. A. A. // Carbohydrate Polymers. 1996. V. 29. P. 309-316.

2) Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. – М.: Мир, 2001. – С.319 – 325.

КВАНТОВОХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ ПРОНИКАЮЧИХ СІТОК У НАНОЧАСТИНКАХ КАРКАСНИХ БІНАРНИХ СПОЛУК

Гребенюк А.Г.

Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, grebenyuk_ag@ukr.net

Діоксид силіцію SiO_2 має багато поліморфних форм, які різняться просторовою будовою та координаційними числами атомів. Серед них особливу увагу привертає кристобаліт, кристалічна гратка якого складається з двох незалежних взаємно проникаючих сіток однакового складу та будови, але зміщених у просторі одна відносно іншої. Завдяки цьому досягається більш щільне заповнення простору атомами силіцію та кисню, а між сітками наявна відштовхувальна взаємодія. Аналогічну будову мають деякі форми BeF_2 та GeO_2 . Структура куприту побудована двома сітками, аналогічними таким у кристобаліті. Єдиними відомими сполуками, що мають таку структуру, є Cu_2O (ця сполука досліджувалась періодичними методами [1] та у кластерному наближенні [2]), Ag_2O , $\text{Zn}(\text{CN})_2$ та $\text{Zn}(\text{CN})_2$. Прозерпіо, Гофман та Пройс [3] запропонували гіпотетичні сполуки складу $\text{BeF}_2^*\text{SiO}_2$ та $\text{BeF}_2^*\text{GeO}_2$ зі структурою куприту, але з двома різними підгратками, як прототипи дуже твердих матеріалів. Невдовзі Валеріо зі співавторами [4], використовуючи періодичний метод Хартрі-Фока, показали, що ці структури мають бути нестійкими. Вони з'ясували, що об'ємні модулі обох взаємно проникаючих сіток є практично рівними сумі модулів незалежних сіток.

Ми дослідили просторову та електронну будову малих частинок кремнезему та діоксиду германію зі структурою кристобаліту. За модель було обрано систему з двох взаємно проникаючих сіток; одна з них мала склад $\text{Si}_{29}\text{O}_{40}(\text{OH})_{36}$ і містила чотири конденсовані силоксанові клітки зі спільним атомом силіцію; на поверхні об'єкта розміщувались термінальні гідроксильні групи. Друга сітка являла собою одну силоксанову клітку і мала склад $\text{Si}_{10}\text{O}_{12}(\text{OH})_{16}$. Розрахунки виконано за допомогою програми GAMESS у напівемпіричному наближенні PM3, а також неемпіричним методом Хартрі-Фока з використанням базисного набору 3-21G*. Analogічним чином досліджено наночастинки діоксиду германію.

Результати напівемпіричних розрахунків свідчать, що у досліджуваній моделі існує відштовхування незалежних сіток, причому енергія цього відштовхування складає лише 28 кДж/моль. У частинці діоксиду германію ця величина істотно більша і складає 243 кДж/моль; таку відмінність можна пояснити більшими розмірами атомів германію порівняно з такими для атомів силіцію, а відтак і більшою стеричною напругою. Визначені за Малікеном величини точкових зарядів на атомах свідчать про відсутність перенесення електронної густини між сітками. Ширина енергетичної щілини у першій описаній сітці SiO_2 дорівнює 10,32 eВ, другій – 10,48 eВ, а їхній суперпозиції – 10,84 eВ, тобто і тут наслідки взаємодії між сітками не є істотними. Перехід до неемпіричних розрахунків дозволяє дещо уточнити параметри просторової та електронної будови досліджуваних систем. Зокрема, енергія відштовхування сіток у моделі кремнезему досить значна і складає близько 1180 кДж/моль (з точністю до суперпозиційної похибки базисного набору).

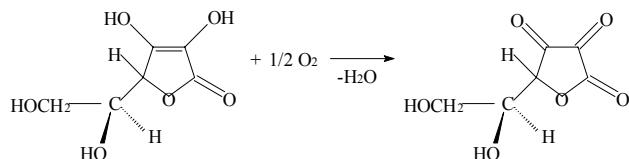
- 1) Ruiz E., Alvarez S., Alemany P., Evarestov R.A. Electronic structure and properties of Cu_2O // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 56, N 12. – P.7189-7196.
- 2) Гребенюк А.Г. Молекулярні моделі оксидів міді // Наукові записки НаУКМА. - Т. 20 (Спеціальний випуск). - В 2-х ч. - Ч. II. - Київ: KM Academia, 2002. - C.506-508.
- 3) Proserpio D., Hoffmann R. and Preuss P. Possible hard materials based on interpenetrating diamond-like networks // J. Amer. Chem. Soc. – 1994. – V. 116, N 21. – P.9634-9637.
- 4) Valerio G., Proserpio D.M., Sandrone G., Catti M. Ab initio calculations on possible hard materials based on interpenetrating networks: $\text{SiO}_2^*\text{BeF}_2$ // J. Phys. Chem. – 1995. – V. 99, N 44. – P.16261-16263.

ТЕОРЕТИЧНИЙ АНАЛІЗ ЕЛЕМЕНТАРНИХ СТАДІЙ ОКИСНЕННЯ АСКОРБІНОВОЇ КИСЛОТИ НА ПОВЕРХНІ КРЕМНЕЗЕМУ

Дем'яненко Є.М., Гребенюк А.Г.

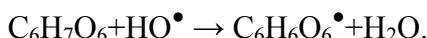
Інститут хімії поверхні імені О.О. Чуйка НАН України, Demianenko_EN@mail.ru

Аскорбінова кислота є ефективним антиоксидантом і легко реагує з киснем повітря:



За літературними даними, при адсорбції аскорбінової кислоти утворюється адсорбційний комплекс з обумовленою взаємодією силанольних груп з гідроксильними і карбонільною групами аскорбінової кислоти [1]. Згідно з експериментом [2], поверхня кремнезему сповільнює окиснення аскорбінової кислоти киснем повітря.

Відома термодинамічна залежність зниження величини окислення вітаміну С від адсорбції [3]. Елементарною (лімітуючою) стадією окиснення аскорбінової кислоти є взаємодія її з гідроксил-радикалом, який утворюється при взаємодії води з киснем повітря:



В даній роботі досліджено теоретичним шляхом елементарні стадії окиснення аскорбінової кислоти на поверхні кремнезему. Розрахунки виконано неемпіричним методом Хартрі-Фока-Рутана, при використанні базисного набору 3-21ГФ** (ROHF), за допомогою програми GAMESS. Для визначення енергії активації взаємодії гідроксил-радикала з аскорбіновою кислотою використовувався алгоритм пошуку геометрії та енергії переходіного стану шляхом мінімізації норми градієнта. Поверхня кремнезему моделювалась кластером, що складається з чотирьох сіліцій-кисневих тетраедрів. Аналізувались адсорбційні комплекси, утворення яких можливе за рахунок виникнення водневих зв'язків між силанольними групами поверхні та гідроксильними і карбонільною групами аскорбінової кислоти, і величини енергії активації взаємодії гідроксил-радикала з аскорбіновою кислотою в газовому стані та при адсорбції на поверхні кремнезему. Була визначена гідроксильна група, якій вигідніше взаємодіяти з гідроксил-радикалом. Для всіх учасників процесу окиснення, включаючи адсорбційні комплекси, розраховано величини вільної енергії Гібса ΔG в інтервалі температур від 263 до 353 К. Із одержаних результатів випливає, що в газовій фазі реакція окиснення аскорбінової буде відбуватися інтенсивніше, ніж в адсорбованому стані.

Відповідно до результатів попередніх розрахунків, енергія активації реакції в газовій фазі складає близько 26,8 кДж/моль, а при адсорбції приблизно до 32,9 кДж/моль.

Таким чином, адсорбція аскорбінової кислоти на поверхні кремнезему зменшує її здатність до окиснення киснем повітря.

- 1) *Wen-Hung Wu, Ting-Fong Chin, John L. Lach. Interaction of Ascorbic Acid with Silicic Acid // J. Pharm. Sciences. A. - 1970. – V. 59, N 8. - P.1122-1125.*
- 2) *P. Kuzema, O. Stavinskaya, O. Kazakova, I. Laguta. Hydrophobized silica nanocomposites with immobilized antioxidants (vitamins C and E) // Surface Chemistry and Nanomaterials in Biomedical and Environmental Science (J.P. Blitz and V.M. Gun'ko, eds.). – Springer, 2005.*
- 3) *Е.М.Дем'яненко, А.Г.Гребенюк. Квантово-химический анализ процессов образований супрамолекулярных продуктов термической деструкции на поверхности кремнезема // Физико-химия наноматериалов и супрамолекулярных структур. – В двух томах. – Т.2. – Киев: Наук. думка, 2007. – С.95-102.*

МАТЕМАТИЧНЕ І КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МОЛЕКУЛЯРНО-МАСОВОГО РОЗПОДІЛУ В ЛІНІЙНОЇ ПОЛІКОНДЕНСАЦІЇ

Кондратов С.О., Немоловський В.В., Смотров Є.І.

Філіал Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля (м. Рубіжне),
kondratov@rune.lg.ua

Незважаючи на прогрес сучасних фізичних методів досліджень, при детальному вивчені складу поліконденсаційних полімерів виникають певні проблеми. Тому розробка методів розрахунків та прогнозування молекулярно-масового розподілу має не тільки теоретичний, але й практичний інтерес.

У нашої роботі за основу розрахунків обрано середню ступень полімеризації (v), оскільки ця величина легко визначається експериментально. Метою роботи є пошук зв'язку між v і молекулярно-масовим розподілом полімерів, що створюються шляхом незворотної поліконденсації.

У основу математичної моделі покладені такі припущення:

- а) процес поліконденсації перебігає статистично;
- б) кінетика поліконденсації задовольняє принципу Флорі про незалежність реакційної здатності функціональних груп від ступеня полімеризації.

На основі цих припущень розроблено теоретико-ймовірністну модель поліконденсації – “модель кошику з пластиліновими кульками”. Згідно з цей моделлю процес поліконденсації розглядається, як перерозподіл пластилінових кульок між кошиками. Кожний кошик з порядковим номером N розглядається, як становище із ступенем полімеризації N . У окремому елементарному акті відбувається випадковий вибір двох непустих кошиків з номерами i та j . З кожного з кошиків вилучають по одній кульці. Вилучені кульки зліплюють у одну велику кульку, яку поміщають у кошик з номером $i+j$.

Згідно з моделлю, у початковий момент часу заповненим є тільки кошик з номером 1, що відповідає мономеру.

У описаному процесі виконується закон збереження: загальна кількість молекул-мономерів (вільних і в складі полімерів) є постійною:

$$\sum_{i=1}^m i \cdot N_i = N_1^0 \quad (1)$$

На основі аналізу подій, що відбуваються під час перерозподілу, отримано систему диференціальних рівнянь, що описують зміни з часом кількості кожного з полімерів:

$$\frac{dN_i}{dm} = \frac{\sum_{j=1}^{i-1} N_j \cdot N_{i-j}}{(N_1^0 - m)^2} - \frac{2 \cdot N_i}{(N_1^0 - m)} \quad (2)$$

На основі послідовних рішень цих рівнянь одержано вираз для частки p_i полімеру зі ступенем полімеризації i у той час, коли середній ступень полімеризації складає v :

$$p_i = \frac{(v-1)^{i-1}}{v^i} \quad (3)$$

Розроблено імітаційну комп'ютерну модель поліконденсації, як Монте-Карловську модель одновимірного клітинного автомата, що реалізує процеси перерозподілу за законом випадку. У процесі моделювання задавали початкову кількість молекул мономерів (100000 – 2000000) і середній ступень полімеризації, який слід було досягнути (2-50) і проводили випадкові випробування до досягнення цієї величини, після цього проводили аналіз молекулярно-масового розподілу. Було встановлено, що результати моделювання є сталими і не залежать статистично значимо від початкової кількості молекул мономеру. При цьому одержаний розподіл добре збігається з результатами, одержаними аналітично по формулі (3). Це свідчить про адекватність клітинно-автоматної моделі і дає потенційну можливість використовувати її у випадках, коли аналітичний вираз отримати неможливо.

ТЕОРЕТИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ВЗАЄМОДІЇ ПОВЕРХНІ КРЕМНЕЗЕМУ З ВОДНИМИ РОЗЧИНАМИ ФТОРОВОДНЮ

Кравченко А.А., Гребенюк А.Г., Лобанов В.В.

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, kravchenko@zeos.net

Молекула безводного фтороводню є зручним зондом для дослідження електроноакцепторних властивостей атомів силіцію, розташованих у поверхневому шарі кремнезему [1]. Взаємодія фториду водню з поверхнею кремнезему є також найважливішою реакцією у промисловій технології пошарового травлення, що використовується для очистки поверхні підкладинок напівпровідників.

Процесу травлення SiO_2 передує утворення адсорбційних комплексів за участю молекул HF та гідроксильних груп поверхні [2]. Крім цього, в травленні велику роль відіграє зовнішній вплив оточення - будь то молекули фториду водню в реакціях у газовій фазі чи молекули води в реакціях з фтороводневою кислотою [3]. Метою цієї роботи є з'ясування механізмів елементарних актів хімічних перетворень за участю поверхневих комплексів HF теоретичним моделюванням квантово-хімічними методами та пошук найбільш ймовірних шляхів адсорбції на поверхні кремнезему з газової фази та в присутності води як розчинника.

Неемпіричним методом Хартрі-Фока-Рутана із застосуванням базисного набору 6-31++G** виконано квантово-хімічні розрахунки комплексів $(\text{HF})_n(\text{H}_2\text{O})_m$ ($n+m \geq 2$) на поверхні кремнезему, яка була представлена кластерами ортосилікатної, дисилікатної та полісилікатної кислот.

З результатів теоретичних квантово-хімічних розрахунків, описаних в літературі [4], відомо, що при взаємодії молекули фториду водню щонайменше з чотирма молекулами води можна одержати гідратовану дисоційовану іонну пару $[\text{H}_3\text{O}^+][\text{F}^-]$. Розглянута можливість розщеплення зв'язку Si–O при взаємодії як з молекулою фториду водню, так і з гідратованим фторид-іоном. Результати свідчать про можливість утворення вищезгаданих асоціатів на поверхні кремнезему. Адсорбція гідратованих комплексів HF поверхнею кремнезему здійснюється за рахунок силанольних груп та силоксанових містків. Силанольні групи можуть утворювати водневі зв'язки з фторид-іоном та молекулами води, що входять до складу таких адсорбційних комплексів.

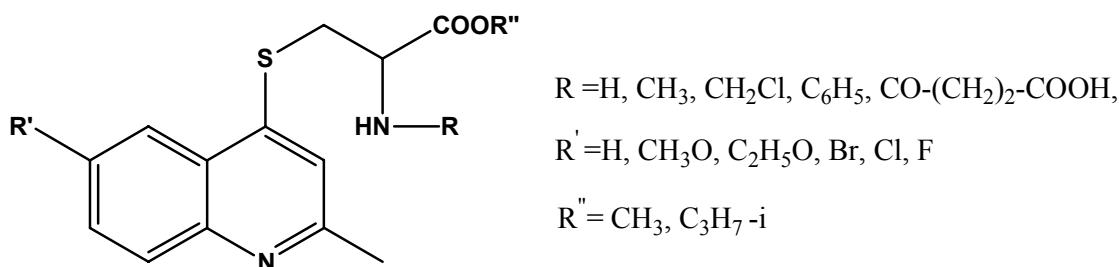
Виконано порівняльний аналіз просторової будови та енергетики утворення іонізованих та неіонізованих молекулярних асоціатів, що містять молекули HF та H_2O , у газовій фазі, у складі адсорбційних комплексів на поверхні кремнезему та у водному середовищі, яке моделювалось супермолекулярним наближенням та континуальною моделлю. Результати свідчать, що процес травлення відбувається щонайменше у чотири етапи з послідовною атакою силоксанових зв'язків молекулами HF та утворенням тетрафториду силіцію як кінцевого продукту.

- 1) Химия поверхности кремнезема / Под ред. А.А. Чуйко. – В 2-х ч. – К.: Наук. думка, 2001. – 1236 с.
- 2) В.А. Тертых, Л.А. Белякова. Химические реакции с участием поверхности кремнезема. – Киев: Наук. думка, 1991. – 264 с.
- 3) Hoshino T., Nishioka Y. Etching process of SiO_2 by HF molecules // J. Chem. Phys. – 1999. – V. 111, N 5. – P. 2109–2114.
- 4) Mechanism of Acid Dissociation in Water Clusters: Electronic Structure Studies of $(\text{H}_2\text{O})_n\text{HX}$ ($n = 4, 7$; X = OH, F, HS, HSO_3 , OOSO_2H , $\text{OOH}\bullet\text{SO}_2$) / A. Smith, A. Mark, V. Hillier, and I.H. Hillier. // J. Phys. Chem. A. – 1999. – V. 103, N 8. – P. 1132-1139.

**МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДИЗАЙН БІОРЕГУЛЯТОРІВ СЕРЕД
S-(2-МЕТИЛХІНОЛІН-4-ІЛ) ЗАМІЩЕНИХ L-ЦИСТЕЇНУ**
 Лабенська І.Б., Корнет М.М., Бражко О.А., Омельянчик Л.О.
 Запорізький національний університет, Labenska@rambler.ru

Пошук нових біологічно активних речовин на основі природних та синтетичних субстанцій базується на емпіричному відборі потрібної сполуки серед багатьох споріднених відносно необхідного фармакологічного ефекту. З метою оптимізації даного процесу використовують сучасні комп'ютерні технології, зокрема комп'ютерну програму PASS (Prediction Activity Spectra for Substances), яка заснована на моделюванні зв'язку хімічна структура – біологічна активність для речовин навчальної вибірки. Математичний алгоритм, що використовується у програмі, забезпечує отримання статистично стійких результатів прогнозу, незважаючи на деяку неповноту як у відношенні обсягу всіх хімічних класів речовин з конкретним видом активності, так і у вивченні кожної окремої речовини на всі види активності [1].

Метою нашої роботи є комп'ютерне прогнозування біологічної активності структурних аналогів “Хінотіну”, антиоксиданта з церебропротекторною дією [2], зокрема естерів S-(2-метилхінолін-4-іл)заміщених L-цистеїну.



Аналіз результатів комп'ютерного прогнозу вказує на перспективність пошуку антиоксидантної, антипротеолітичної, антитромботичної, мембранопротекторної, гепатопротекторної та інших видів активності у ряду даних сполук і відсутності для них токсичності, терато- та канцерогенності, ембріотоксичності. Привертає увагу наявність комбінованої дії сполук, а саме варіанти поєднання нижче наведених ефектів.

Таблиця 1- Діапазон біологічної активності досліджуваних естерів

<i>№</i>	<i>Вид біологічної дії</i>	<i>Межі вірогідної наявності дії (Pa)</i>	<i>Межі вірогідної відсутності дії (Pi)</i>
1	Антиоксидантна	0,412 – 0,613	0,022 – 0,081
2	Гепатопротективна	0,303 – 0,527	0,016 – 0,198
3	Мембранопротективна	0,433 – 0,513	0,015 – 0,060
4	Кардіопротективна	0,594 - 0,671	0,152 – 0,193
5	Протитромботична	0,425 – 0,795	0,068 – 0,094
6	Протизапальна	0,036 – 0,520	0,007 – 0,012

Біологічна активність досліджених сполук залежить від природи замісників у 6-му положенні хінолінового циклу та в карбокси- й аміногрупі.

Використання даного методу надало можливість встановити найбільш перспективні сполуки й визначити оптимальні тести для дослідження їх біологічного потенціалу.

- 1) *Zotchev S., Stepanchikova A., Sergeyko A., Sobolev B., Filimonov D., Poroikov V.* Rational Design of Macrolides by Virtual Screening of Combinatorial Libraries Generated through in Silico Manipulation of Polyketide Synthases.// J Med. Chem.- 2006- V.49.-P. 2077-2087.
- 2) Пат. 28789 Україна, МКІ⁴ С 07 Д 215/04, А61 К 31/435. 2-Метил-6-метоксихіоліл-4-тіоацетат натрію, що проявляє проти ішемічну активність: Пат. 28789 Україна, МКІ⁴ С 07 Д 215/04 Л. О. Омельянчик, О. А. Бражко, І. Ф. Беленічев, М. П. Завгородній (Україна).-№97094717; Заявл. 23.09.1997; Опубл. 29.12.1999. - Бюл. №8.-6с.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗВ'ЯЗУВАННЯ ФЕРУМ(ІІ) ПОРФІРИНУ З МОЛЕКУЛОЮ КИСНЮ МЕТОДОМ ТЕОРІЇ ФУНКЦІОНАЛУ ГУСТИНИ ВЗЛУР ТА МЕТОДОМ РМЗ

Мінаєв Б.П., Мінаєва В.О., Шевченко О.В.¹

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

¹Черкаський державний технологічний університет

Амінокислоти у проксимальному та дистальному положенні гему визначають характерні особливості різних класів гемпротеїнів, наприклад як зв'язок гемоглобіну і міоглобіну з молекулою кисню. Так, у пероксидазі, зв'язуючи O₂ протеїнах – гемоглобін і міоглобін у проксимальному положенні знаходиться гістидин. В електротранспортних протеїнах (цитохромах) білок координується до гему метіоніном, лізином, гістидином. Оксидази (наприклад, цитохром Р450) і каталаза містять, відповідно, цистеїн и тирозин. Теоретичне дослідження зв'язку з O₂ у моделях ферум(ІІ) порфіринів являє собою одну із важливих проблем біохімії гемоглобіну, міоглобіну і цитохромів, оскільки дозволяє виявить вплив спін-орбітальної взаємодії та спинові стани ферум(ІІ) порфіринів на природу дії цих гемпротеїнів. Пряний розрахунок активаційного бар'єру для реакції зв'язування O₂ з Fe(ІІ)Р та коливальних частот цих фрагментів вимагає точного розрахунку функції потенціальної енергії всієї системи при зміщенні ядер із рівноваги в залежності від повного спіну. Сучасний метод ТФГ дозволяє розрахувати цю залежність з досить великою точністю, що передає всі деталі силового поля молекули для різних спинових станів.

В даній роботі проведено вивчення механізму взаємодії молекули O₂ з білковим оточенням у дистальному положенні гема. Роль проксимальної ділянки гема приділяється менше уваги, проте вона являється не менш важливою. В синтетичних моделях гемових комплексів проксимальний ліганд може достатньо просто варіювати, при цьому його властивості, такі як рKa, значно впливають на зв'язування O₂ з залізом. В роботі [1] показано, що деформація проксимального гістидина являється важливим фактором в зниженні подібності до O₂ у триплетному стані гемоглобіна. Гістидин в проксимальному положенні міоглобіну і гемоглобіну координується до атома заліза гему імідазольним кільцем. Відомо, що широкий круг невеликих органічних молекул може заміщувати даний імідазол просто додаванням надлишку відповідних речовин у розчин міоглобіну. Так, наприклад, додавання піридину і метилзаміщених імідазолів приводить до важливих змін ЯМР спектрів і кінетики зв'язування молекул O₂ міоглобіном, при цьому не спостерігається значних змін у спектрах поглинання УФ випромінювання. Однак слід відмітити, що обмін лігандами являється повністю зворотнім, і при додаванні надлишку імідазолу спектри змінюються до початкового стану.

Заміщення проксимального гістидина екзогенними лігандами дозволяє отримувати велику різноманітність стандартних протеїнів. Дані методика простіша, чим хімічне і біосинтетичне введення ненатуральних амінокислот. З її допомогою можна цілеспрямовано змінювати розмір, хімічні і фізичні властивості гемпротеїнів. Можливість одержання штучних білків з різними лігандами також дозволяє цілеспрямовано синтезувати речовини з заданими властивостями, що може бути корисним для створення кровозамінювачів, штучних

коензимів та ін. Для цього потрібно мати чіткі уявлення про механізми процесів міжмолекулярної взаємодії, в яких приймають участь комплекси порфіринів. Нами вивчений вплив спіну і спін-орбітальної взаємодії на моделях цих механізмів. Залежність від спіну для Fe(II)P...O₂ моделювали методом B3LYP, а взаємодію з проксимальними і гістальними залишками моделювали методом PM3.

- 1) Perutz M.F. Stereochemistry of cooperative effects in hemoglobin / M.F. Perutz // Nature. 1970. Vol.228. P.726-734.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ ТА ІЧ-СПЕКТРІВ ФЕРУМ(ІІ) ПОРФІРИНУ ЗА ДОПОМОГОЮ РІЗНИХ МЕТОДІВ ТЕОРІЇ ФУНКЦІОНАЛУ ГУСТИНИ

Мінаєв Б.П., Мінаєва В.О., Шевченко О.В.¹

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, bfmin@rambler.ru

¹Черкаський державний технологічний університет

Теоретичне дослідження нормальних коливань у ферум(ІІ) порфіринах являє собою одну із важливих проблем біохімії гемоглобіну, міоглобіну і цитохромів, оскільки дозволяє не тільки провести пояснення Раманівських і ІЧ-спектрів, але і вивчити динаміку елементарних актів важливих фото- і біопроцесів з участю цих речовин. Прямий розрахунок коливальних частот із рівняння Шредінгера в адіабатичному наближенні це дуже складна задача, що вимагає точного розрахунку функції потенціальної енергії молекули при зміщенні ядер із рівноваги. Сучасний метод ТФГ дозволяє розрахувати матрицю других похідних від потенціальної енергії ядер (Гессіан) з досить великою точністю, що передає всі деталі силового поля молекули.

Стандартний метод самоузгодженого поля (СУП) Хартрі-Фока сильно завищує (на 300-500 см⁻¹) високі частоти валентних коливань, значно знижує низькочастотну область ІЧ-спектра (< 300 см⁻¹) і систематично переоцінює (на 100-200 см⁻¹) частоті в області “відпечатків пальців”, як наслідок не повного врахування електронної кореляції. Істотно краще враховувати кореляцію метода ТФГ. Наприклад, комбінований функціонал B3LYP дає погрішність в розрахунку частот 20-50 см⁻¹ в області “відпечатків пальців” (валентні коливання завишаються в середньому на 100 см⁻¹). Серед всіх методів ТФГ великий інтерес виявляє найпростіший функціонал LDA (Local density approximation), оскільки він дозволяє значно зменшити час розрахунку для складних молекул. У розрахунку за методом LDA можна включити не тільки простатичну групу гема, але й більшу частину білкового полімеру, що практично неможливо розрахувати методом B3LYP.

В цьому зв'язку з'являється можливість перевірити і порівняти метод LDA для розрахунків структури та ІЧ-спектрів ферум(ІІ) порфірину. На основі квантово-хімічних розрахунків двох методів ТФГ: B3LYP з базисом 6-311G і LDA з базисом DZP дозволило передбачити і зробити співставлення двох методів, а також більш глибше проаналізувати вплив використання більш розширеніх базисів на результати аналізу. Скласти уявлення про методи розрахунків та їх можливі помилки при використанні обмежених базисів для подальших розрахунків та аналізу не лише комплексу Fe(ІІ)P, а також комплексів Fe(ІІІ)P та комплексів Fe(ІІІ)P з киснем. При порівнянні двох методів ми отримали добру відтворюваність результаті стосовно геометричних, електронних та ІЧ параметрів, але в залежності від вибраного базису в двох методах отримали різні основні стани для молекули: при розрахунку в методі B3LYP/6-311G основний стан був квінтетним, а в методі LDA/DZP отримали – триплетний. На рисунку 1 подано електронна конфігурація цього стану та кореляційна діаграма.

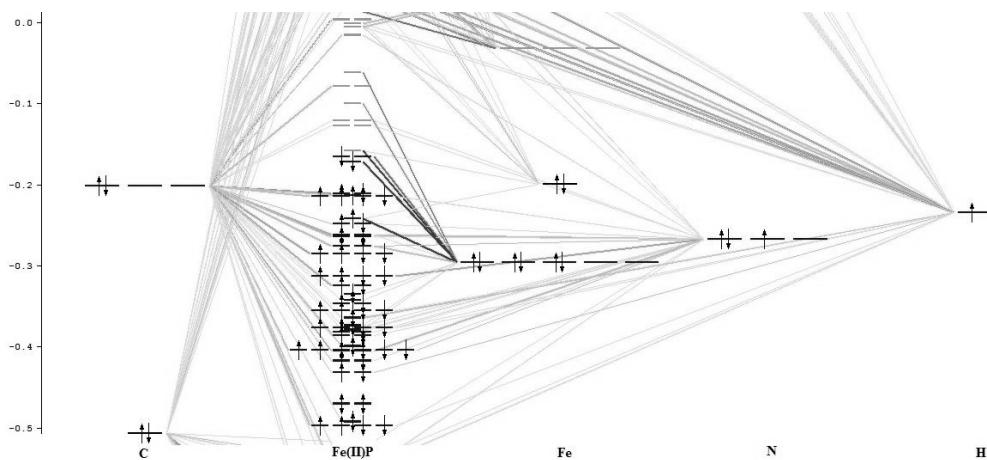


Рис. 1. Електронна конфігурація

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ ДЕФОРМОВАНИХ ІНТЕРМЕТАЛІДІВ CuAl₂ ТА CuAl₂Mg ІЗ КОРОЗИВНИМ СЕРЕДОВИЩЕМ

Похмурський В.І., Корній С.А., Копилець В.І.

Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України, м. Львів, kornii@ipm.lviv.ua

Механічні властивості матеріалів при дії на них різноманітних середовищ визначаються природою міжатомних та міжмолекулярних взаємодій. Тому для дослідження початкової стадії корозії та корозійно-механічного руйнування матеріалів використовують теоретичні підходи квантової хімії та її розрахункові методи [1, 2].

Моделювали вплив деформації на взаємодію із корозивним середовищем інтерметалідних сполук CuAl₂ та CuAl₂Mg, які містяться в сплаві дюралюмінію, що містить 4,5% Cu, 0,65% Mn та 0,65% Mg. Експериментальні дослідження [3] корозії інтерметалідних фаз показують, що включення інтерметалідів не є стійкими електродами мікрогальванічних елементів, а представляють собою складні електрохімічні системи, що мають власні катодні та анодні ділянки. Так, наприклад, інтерметалідні сполуки CuAl₂, CuMg₂, CuAl₂Mg та інші, які знаходяться в сплаві в контакті відповідно з магнієм та алюмінієм, і здавалося б, є катодними електродами, насправді такими рахуватися не можуть, оскільки самі руйнуються в процесі корозії сплаву. Крім цього, деформація інтерметалідів може теж суттєво впливати на їх корозійне розчинення. Така поведінка інтерметалідних сполук вимагає більш детального дослідження їх корозійної стійкості за наявності деформації, в тому числі із використанням сучасних модельних підходів.

Проводили розрахунки параметрів адсорбційної взаємодії молекул води та іонів хлору з поверхнями інтерметалідів в кластерному наближенні. Для квантово-хімічної оцінки взаємодії компонентів водного розчину з поверхнею інтерметаліду використовували напівемпіричний метод PM5 розрахункового пакету MOPAC [4] комп'ютерної програми CAChe 6.1 [5] та метод функціоналу густини програми StoBe2006 [6].

Для моделювання деформації кластерів здійснювали симетричний розтяг кластера вздовж напрямку, перпендикулярного до напрямку адсорбції. Під час розрахунку міжатомні віддалі кластера в напрямку деформації, після зміни їх на задану величину, зберігали постійними. Міжатомні віддалі в інших напрямках, включаючи віддалі адсорбат – поверхня, оптимізували. Деформацію кластерів обмежували двома відсотками, оскільки більші деформації можуть викликати складніші, ніж адсорбція, явища (наприклад, дифузія адсорбційних частинок, перебудова поверхні металу, утворення поверхневих хімічних сполук). Для отриманої структури адсорбційної системи для кожного стану деформації кластера розраховували геометричні та енергетичні параметри адсорбції іонів хлору та молекул води.

Дослідження проводили на поверхнях (100) та (110) вибраного кластера інтерметалідної сполуки. (рис. 1, 2). Кластер, що моделював поверхню (100) інтерметаліду містив 32 атоми алюмінію та 10 атомів міді, а кластер поверхні (110) – 16 атомів алюмінію та 10 атомів міді. Поверхня (110) кластера має ступеневу будову. Атоми алюмінію на поверхні такого кластера знаходяться на віддалі 0,56 Å від шару міді. Відстань між атомами алюмінію та міді на поверхні складала 2,67 Å. Кластер CuAl₂Mg будували, заміщуючи 4 поверхневі атоми алюмінію в кластері (110) CuAl₂ атомами магнію.

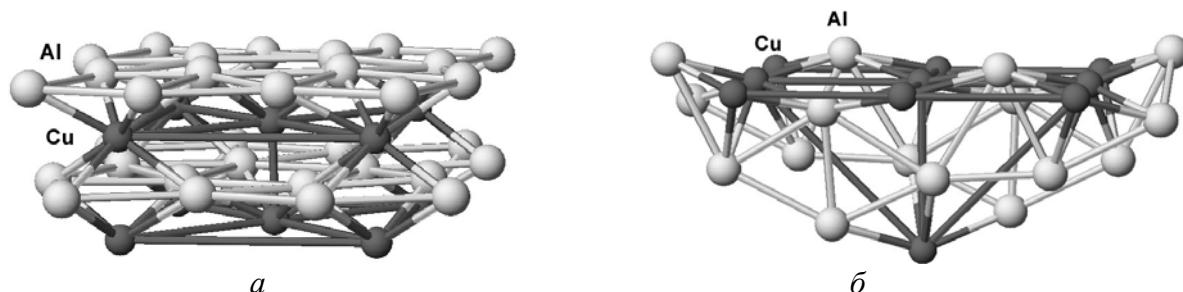


Рис. 1. Кластери, що моделюють поверхні (100) (a) та (110) (b) інтерметаліду CuAl₂.

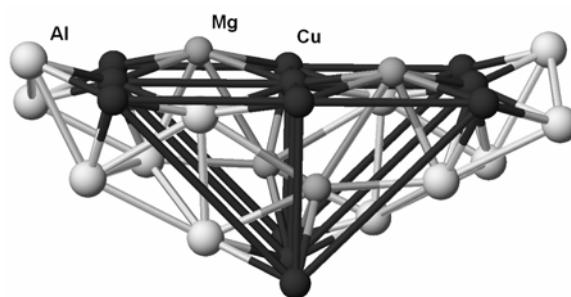


Рис. 2. Кластер, що моделює поверхню (110) інтерметаліду CuAl₂Mg.

Аналіз результатів розрахунків адсорбції води на кластері (100) інтерметаліду CuAl₂, показує, що молекула води адсорбується на алюмінії та міді атомом кисню, а молекулярна площа нахиlena до поверхні металу під кутом в межах 50-65°. Крім цього, на даних металах молекула води адсорбується переважно в вершинному поверхневому положенні, при чому енергетичний вигравш в порівняні з містковим та міжузловим положеннями є досить незначний. Результати адсорбції молекули води на поверхні (110) кластера CuAl₂ вказують на те, що молекула води переважно розміщується над атомами алюмінію.

Під час розрахунків адсорбції хлор-іона на поверхнях (100) та (110) кластера CuAl₂ встановлено, що надатомна адсорбція спостерігається лише на шарі міді поверхні (100) кластера. На шарі алюмінію поверхні (100) хлор-іон адсорбується в містковому положенні над лінією зв'язку Al-Al. На поверхні (110) кластерів CuAl₂ та CuAl₂Mg найбільш енергетичне вигідне положення хлор-іона – міжузлове. Теплота адсорбції на кластері, що містить атоми магнію зростає, що свідчить про більш реакційну здатність хлорид-іонів на поверхні кластера CuAl₂Mg. При адсорбції хлор-іона спостерігається значний перенос електронної густини на поверхню металу. При цьому реакційна здатність хлор-іона є найвищою на поверхні (110) кластера, про що свідчить найбільша теплота адсорбції та значний перенос електронної густини на цю поверхню. В таблицях 1-3 наведено ряд результатів впливу деформації розтягу кластерів інтерметалідів на відносні теплоти адсорбції молекул води та хлорид-іонів (дані в дужках стосуються розрахунку методом DFT).

Отримані результати показують, що на всіх низькоіндексних поверхнях кластерів інтерметаліду для молекул води та хлорид-іонів відбувається ріст теплоти адсорбції при збільшенні міжатомних віддалей. Вплив хлорид-іонів є значно сильнішим, ніж молекул води.

Це може свідчити про переважаючу роль хлорид-іонів в активації поверхневих процесів під час руйнування інтерметалідів в корозивному середовищі. Крім цього, ріст хімічної активності металів у ряді Cu, Al, Mg викликає більшу активацію адсорбції як молекул води так і хлорид-іонів при менших ступенях деформації кластерів. Слід також очікувати, що ріст теплоти адсорбції компонентів корозивного середовища викликає прямо пропорційне пониження енергії активації виходу іонів металів з поверхні.

Таблиця 1 – Вплив деформації кластера CuAl₂ на відносну теплоту ($\Delta H/H, \%$) адсорбції молекул води та хлорид-іонів на поверхні (100)

Деформація, %	H ₂ O		Cl ⁻	
	на Al	на Cu	на Al	на Cu
0,5	0,8 (0,9)	0,6 (0,4)	4,0 (1,3)	2,5 (1,9)
1,0	1,5 (1,7)	1,2 (0,8)	7,8 (6,0)	4,3 (3,8)
1,5	2,4 (2,6)	1,8 (1,2)	11,6 (9,1)	6,7 (6,3)
2,0	3,1 (4,0)	2,0 (1,5)	15,1 (12,2)	8,4 (8,1)

Таблиця 2 – Вплив деформації кластера CuAl₂ на відносну теплоту адсорбції ($\Delta H/H, \%$) молекул води та хлорид-іонів на поверхні (110)

Деформація, %	H ₂ O		Cl ⁻
	на Al	на Cu	
0,5	1,2 (1,4)	- (0,3)	5,4 (4,8)
1,0	2,5 (2,8)	0,8 (1,2)	10,5 (9,2)
1,5	3,8 (3,9)	1,4 (1,5)	14,3 (11,0)
2,0	5,2 (6,2)	1,6 (1,8)	19,8 (14,5)

Таблиця 3 – Вплив деформації кластера CuAl₂Mg на відносну теплоту адсорбції ($\Delta H/H, \%$) молекул води та хлорид-іонів на поверхні (110)

Деформація, %	H ₂ O			Cl ⁻
	на Al	на Mg	на Cu	
0,5	1,1 (1,2)	1,2 (1,4)	0,3	5,2 (4,8)
1,0	2,4 (2,7)	2,5 (2,8)	0,6 (1,3)	10,1 (9,4)
1,5	3,6 (3,6)	4,4 (4,0)	1,3 (1,7)	18,6 (13,3)
2,0	5,0 (6,4)	6,3 (5,4)	1,5	24,5 (18,0)

Виходячи із отриманих результатів видно, що під час деформації кластера (110) інтерметаліда спостерігається дещо сильніша активація поверхневих процесів порівняно із кластером (100). Тобто, якщо при поверхневій обробці алюмінієвого сплаву на його поверхні будуть реконструюватися інтерметалідні фази з високоіндексними орієнтаціями граней, наприклад, (110) – такий сплав може бути більш стійкий до корозійно-механічного руйнування.

Отже, деформація розтягу кластерів інтерметалідів в межах 0-2% зумовлює підвищення теплот адсорбції молекул води та хлорид-іонів, тобто сприяє активації корозійних процесів. Поверхня (110) кластерів інтерметалідів є більш склонною до руйнування за одночасної наявності деформації та середовища.

- 1) Корній С., Копилець В. Використання методів квантової хімії до моделювання анодного розчинення легованих корозійно-тривких сталей // Фіз.-хім. механіка матеріалів, Спец. випуск “Проблеми корозії та протикорозійного захисту матеріалів”. – 2002.– № 1. – С. 380–384.
- 2) Назмутдинов Р.Р., Зинкевича Т.Т., Шапник М.С. Квантово-химическое исследование взаимодействия молекул воды с поверхностью металлических электродов // Электрохимия.– 1999.– №10.– С. 1249-1259.

- 3) Buchheit R.G. et al. Local Dissolution Phenomena Associated with S Phase (Al_2CuMg) Particles in Aluminum Alloy 2024-T3 // Journal of Electrochemical Society – 1997. – Vol.144. – P. 2621-2628.
- 4) Stewart J.J.P. Mopac: a semiempirical molecular orbital program // J. Comput.-Aided Mol. Des. – 1990.– Vol.4, №1.– P. 1-105.
- 5) <http://www.fqspl.com.pl>.
- 6) Hermann, K.; Pettersson, L. G. M.; Casida, M. E. et al. StoBe2006, Version 2.2; 2.2 ed., 2006.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ УТВОРЕННЯ МЕТАЛОХЕЛАТНИХ НАНОСТРУКТУР ПРИ ПОВЕРХНЕВІЙ МОДИФІКАЦІЇ МАТЕРІАЛІВ

Старчак В. Г., Осовик А.П., Селивоненко Б.О., Буяльська Н.П.

Чернігівський державний педагогічний університет ім. Т.Г. Шевченка, chgpu@chgpu.cn.ua

Вступ. Перспективи розвитку нанотехнологій в найближчому десятиріччі вказують на пріоритети використання її досягнень в матеріалознавстві, машинобудуванні, енергетиці, охороні навколошнього середовища [1, 2]. Однак, чимало її аспектів (нанотрибологія, нанокорозія, нанохелатування тощо) ще недостатньо знаходяться в полі зору дослідників. Дуже обмежені літературні дані про поверхневу модифікацію конструкційних, композитних, електротехнічних, будівельних матеріалів шляхом наномасштабного металохелатування [1 - 3].

Постановка задачі дослідження. Мета даної роботи – показати можливості наукового прогнозу активності наномасштабного металохелатування на основі комп'ютерного моделювання утворення металохелатних наноструктур при поверхневій модифікації матеріалів для підвищення їх тривкості, техногенно-екологічної безпеки в агресивних середовищах екологічно небезпечних виробництв.

Результати експериментів та їх обговорення. Металохелатування – процес утворення металохелатних комплексів, які здатні формувати, при певних умовах, захисну наномасштабну плівку на поверхні металу. Історія розвитку координаційної хімії металохелатів, почалася з одержання в 1885 р. відомим хіміком-органіком Ільїнським першого металохелату за реакцією залізного купоросу з α -нітрозо- β -нафтолом. І продовжилася Вернером в 1893 р., який вперше описав будову металохелату $[\text{Pt}(\text{en})_2]\text{Cl}_2$. Термін «хелат» введено в 1920 р. Морганом і Дрю. Хелатоутворення помітно змінює властивості вихідних реагентів та грає велику роль в хімії, біології, матеріалознавстві, техногенно-екологічній безпеці конструкційних, композитних матеріалів.

Модель утворення хімічних зв'язків в металохелатах ґрунтується на концепції донорно-акцепторної взаємодії донорних (акцепторних) атомів полідентатних лігандів з іонами (атомами) металу і описується з позицій теорій молекулярних орбіталей (ТМО), кристалічного поля (ТКП) і поля лігандів (ТПЛ), з утворенням σ -, π -донорно-акцепторних і π -дативних зв'язків. В результаті можуть утворюватися молекулярні, макроциклічні, поліядерні металохелати, внутрішньокомплексні сполуки, металохелати з π -зв'язками. Ймовірність хелатуючої дії збільшується при переході до полімерних структур з хелатуючими макролігандами, що утворюють з металами макромолекулярні металохелати (ММХ). Це забезпечує значну «післядію» захисту від агресивного середовища. Тому конденсовані багатоядерні гетероциклічні сполуки сприяють зміцненню зв'язків з металом не тільки за рахунок гетероатомів, але й π -електронної взаємодії ядра з поверхнею металу. Ефективність металохелатування залежить від аніонного складу розчину, його концентрації, pH, природи центрального атому (адсорбційної властивості, що обумовлено атомними радіусами, потенціалом іонізації, теплотою сублімації, електронегативністю, роботою виходу електрону, енергією зв'язку M – M, рівнем Фермі, числом вільних \bar{e} , середньою енергією d-зони і т.і.), але визначаються електронними та термодинамічними параметрами хелатоутворювачів (ХО) – полідентатних лігандів.

Комп'ютерне моделювання утворення металохелатних наноструктур здійснено за напівемпіричним методом MNDO-PM 3, що враховує інтеграли міжелектронного відштовхування, включаючи одноцентрові перекривання. Загальне число параметрів скорочується з 102 (проти MNDO/3) до 41. Метод MNDO-PM 3 дає можливість моделювати (за рахунок полярних замісників у Ph-, Im-, Руг-, Tz-кільцях) довжину, порядок зв'язків, їх міцність, валентні, двогранні кути, величини повних зарядів та електронну густину на атомах, електронну заселеність орбіталей, термодинамічні характеристики – повну (E_p) енергію та електронну (E_{el} , eV), іонізаційний потенціал I, eV, дипольний момент, поляризуемість молекули ГТЦ – ПАР з повною оптимізацією її геометрії.

Кількісні характеристики термодинамічних властивостей, електронних зарядів на атомах в молекулах ГТЦ – ХО дають можливість зробити науковий прогноз по виявленню найбільш активних РЦ (реакційних центрів), їх спроможності до взаємодії в рамках концепції ЖМКО Пірсона (особливо з позицій додаткової стабілізації металохелатів за рахунок взаємодії м'якої кислоти – поверхневих атомів Ме з м'якою основою (Ім та інші ГТЦ); активності електронного переносу за резонансним та мезомерним механізмами, хемосорбційних процесів з O-, N-, C-протонуванням, за участю молекулярних, Kat- та An-форм ГТЦ. Це обумовлює внутрішньомолекулярний та міжмолекулярний синергізм дії розроблених синергічних металохелатуючих композицій (СМХК) із залученням відходів виробництва (капролактама (К) – ЧВО «Хімволокно», МП РХЗ «Азот» та ін.) та споживання (некондиційних, за строком вживання, фармпрепаратів і малотоксичних пестицидів) із синергічними добавками – ГТЦ – ХО [3 - 5].

Олігомери в складі К, МП підсилюють утворення стійких ($K_{st} = 10^6 \dots 10^{20}$) макромолекулярних металохелатних комплексів на поверхні Ме за рахунок реакцій нуклеофільного заміщення лігандів, блокування анодних, катодних ланок металу, за участю процесів хімічної та електрохімічної полімеризації. Певну роль відіграє каталітична активність Ме-поверхні, що промотує реакції за участю ГТЦ – ХО, з утворенням ММХ [3 - 5].

Підтверджено підвищення довговічності, тривкості вуглецевих, низьколегованих, неіржавіючих сталей, боралюмінієвих та полімерних (на основі модифікованих ЕПС) композитів в агресивних середовищах за рахунок наномасштабного поверхневого металохелатування в умовах формування металовиробів, при хімічній очистці ТЕО, в електрохімічних процесах (травлення, нанесення гальванічних покриттів і т. і.), дії СМХК як біоцидів, інгібуючих добавок для захисту металовиробів від корозійно-механічного руйнування, запобігання техногенних аварій технічних споруд екологічно небезпечних виробництв [3 - 5].

Висновки:

1. Комп'ютерне моделювання утворення металохелатних наноструктур при поверхневій модифікації матеріалів дає можливість ціленаправленому науково обґрунтованому вибору СМХК для підвищення техногенно екологічної безпеки експлуатації технічних споруд.

2. Наявність захисних металохелатних плівок (40...60 нм) на поверхні Ме підтверджено спектральними методами: ІЧ-, Оже-спектроскопією, рентгеноспектральним аналізом.

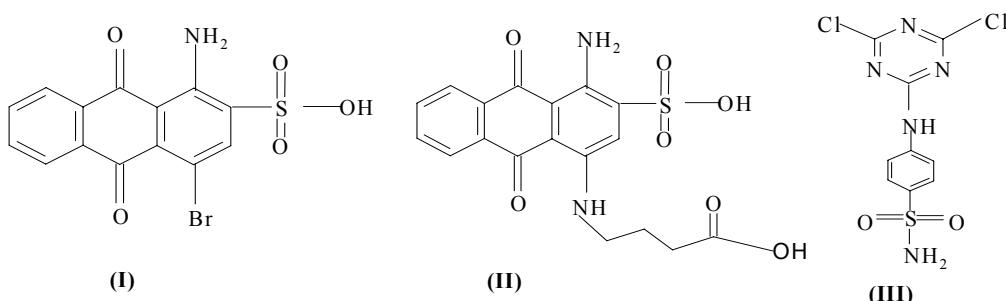
- 1) Нанотехнологии в ближайшем десятилетии. Прогноз направления исследований / Под ред. M. Роко, R. Уильямса, P. Аливисатоса. – М.: Мир, 2002. – 292 с.
- 2) Скорогод В.В., Уварова И.В., Рагуля А.В. Фізико-хімічна кінетика в нанодисперсних системах. – Київ: Наук. думка, 2001. – 180 с.
- 3) Наукові основи підвищення екологічної безпеки металоконструкцій модифікацією їх поверхні в протикорозійному захисті / В.Г. Старчак, Н.П. Буяльська, С.Д. Цибуля та ін. // Фіз.-хім. механіка матер. – Спецвип. № 4. – 2004. – Т.2. – С. 738 – 741.
- 4) Повышение долговечности материалов наномасштабным металлохелатированием / В.Г. Старчак, С.Д. Цибуля, С.А. Алексеенко и др. // Современное материаловедение: достижения и проблемы. – Киев: ИПМ им. И.Н. Францевича НАНУ, 2005. – С. 540 – 541.
- 5) Повышение надежности, долговечности, экологической безопасности конструкционных материалов наномасштабным поверхностным металлохелатированием / В.Г. Старчак, С.А. Алексеенко, Н.П. Буяльская и др. // Техника машиностроения. – 2006. – №6. – С. 45 – 51

ПОРІВНЯЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РЕАКЦІЙНОЇ ЗДАТНОСТІ ПОХІДНИХ 9,10-АНТРАХІНОНУ ЗА ДОПОМОГОЮ КВАНТОВО-ХІМІЧНИХ РОЗРАХУНКІВ

Федорів М.З., Тарас Т.М., Федорів А.С.

Прикарпатський національний університет ім. Василя Стефаника, pavush@rambler.ru

Заміщений 9,10-антрахіон є важливим структурним компонентом різноманітних антрациклических антибіотиків, що володіють протипухлинними властивостями. Існують протипухлинні препарати, що містять S-триазиновий фрагмент, які проявляють широкий спектр фармакологічної активності. Саме тому нам було цікаво поєднати антрахіоновий та S-триазиновий фрагменти з метою одержання нових біологічно активних речовин. В якості антрахіонового фрагменту було заплановано застосувати 1-аміно-4-бромантрахіон-9,10-2-сульфокислоту (технічна назва - бромамінова кислота) (І) та бромамінову кислоту, в якій атом брому заміщений нуклеофільним реагентом (ІІ). В якості S-триазинового фрагменту використовується 4-(4,6-дихлоро(1,3,5)-триазин-іламіно)бензолсульфонамід (ІІІ).



З метою дослідження взаємодії методом комп’ютерного моделювання між сполуками (I) і (III) та (II) і (III) проведено обґрунтування можливості протікання реакції нуклеофільного заміщення за допомогою квантово-хімічних розрахунків.

Розрахункові дані ефективних зарядів на реакційних центрах сполуки (I) та (II), показують, що позитивний заряд на атомі нітрогену в положенні 1 речовини (I) більший (0,085), ніж в положенні 1 речовини (II) (0,04). Цим самим можна припустити, що сполука (I) більш реакційно здатна. Щодо речовини (II), квантово-хімічними розрахунками показано наявність більш позитивного заряду атома нітрогену в положенні 4 – 0,049, що зумовлює виникнення реакційного центру даної сполуки саме в цьому положенні. Проте теоретично можна припустити, що стеричні затруднення будуть визначальними.

Практично отримано продукт взаємодії сполук (I) і (III). Реакція проходить в середовищі фенолу при 150°C протягом чотирьох годин.

При проведенні реакції між сполуками (II) і (III) в аналогічних умовах заміщення не проходить.

ВИКОРИСТАННЯ КВАНТОВО-ХІМІЧНИХ РОЗРАХУНКІВ У МОДЕЛЮВАННІ МЕХАНІЗМІВ ФОРМУВАННЯ ЗАБОРОНЕНИХ ПЕРЕХОДІВ У МОЛЕКУЛІ ОЗОНУ

Хоменко О М

Черкаський державний технологічний університет, homenko@uch.net

В даній роботі показано роль нижніх збуджених триплетних станів молекули озону, а саме 3A_2 стану, в спектрі його поглинання. Значна увага до таких досліджень пояснюється тим, що триплетні стани озону пов'язані з кінетикою процесів утворення та дисоціації $O_2 + O \rightleftharpoons O_3$ і тому є важливими для фотохімії атмосфери [1,2]. Знання інтенсивності синглет-триплетних (S-T) переходів у спектрі поглинання озону дозволяють передбачати вплив спінових ефектів на реакції рекомбінації та розкладу молекули O_3 .

В роботі досліджено механізм формування інтенсивності забороненого за спіном $^3A_2 \leftarrow X^1A_1$ переходу в молекулі O₃ на основі результатів квантово-хімічних розрахунків, оскільки 3A_2 стан є найбільш важливим триплетним збудженим термом, що визначає більшу частину інтенсивності смуги Вульфа. Тому інтенсивність вертикального $^3A_2 \leftarrow X^1A_1$ переходу в молекулі O₃ повинна відповідати максимуму деформаційної прогресії (2_0^2 смуга). Ця довга прогресія, що починається зі смуги 2_0^0 при 9500 см⁻¹ і до 15000 см⁻¹, була проаналізована Андерсоном [1] та її віднесення підтверджено за допомогою спектроскопії високого розрішення [3, 4]. З аналізу поперечних перерізів найменш розширеніх обертальних ліній одержано радіаційний час життя, що дорівнює 0,2 рм [4]. Це означає, що всі верхні вібронні рівні є переддисоціативними та ефективний час життя 3A_2 терму повинен бути набагато меншим.

Розрахунок інтенсивності $^3A_2 \leftarrow X^1A_1$ переходу проведено методом багатоконфігураційного самоузгодженого поля (БК СУП) з використанням теорії квадратичного відгуку та різних базисних наборів. В роботі порівняно результати розрахунків інтенсивності S-T переходу в спектрі поглинання озону при використанні різних базисних наборів та повних активних просторів (ПАП). Для a₁, b₁, b₂ і a₂ орбіталей озону в групі симетрії c_{2v} обрано неактивним простором (4020) (табл. 1), що включає 12 електронів у всіх ПАП.

Таблиця 1 – Заповнення електронами орбіталей озону в різних повних активних просторах

a ₁	b ₁	b ₂	a ₂	ПАП
4	0	2	0	неактивний простір
4	3	3	1	ПАП-1; 53484
4	3	3	2	ПАП-2; 157016
4	3	4	1	ПАП-3; 213640
4	3	4	2	ПАП-4; 736464

Результати розрахунку наведено в таблиці 2.

Таблиця 2 – Значення інтенсивностей вертикального $^3A_2 \leftarrow X^1A_1$ переходу в молекулі озону, розраховані різними методами

Метод, базис	ΔE	M _y (T ^y)	M _x (T ^x)	M _z (T ^z)	K _y	K _x	K _z	τ	f·10 ⁻⁷
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
ПАП-1 6-311G*	1,43	0,00192	-0,00024	0,00135	11,50	0,19	5,69	0,06	1,96
ПАП-1 cc-pVTZ	1,17	0,00138	-0,00029	0,00361	3,22	0,14	21,85	0,04	4,28
ПАП-1 6-311++G (3df, 3pd)	1,05	0,00230	-0,00025	0,00135	10,88	0,19	5,45	0,06	1,91
ПАП-3 6-311G*	1,91	0,00684	-0,00005	0,000158	344,8	0,02	0,18	0,00	21,9
ПАП-3 cc-pVTZ	1,92	0,01269	-0,00015	0,000088	1205	0,17	0,05	0,001	75,7
ПАП-4 cc-pVTZ	1,89	0,00432	-0,00023	0,00011	133,7	0,37	0,09	0,007	8,67

Примітка. ΔE , eВ – енергія переходу; M_b(T^a), а.о. – момент переходу вздовж осі b до T^a спінових підрівнів; K_b, с⁻¹ – коефіцієнт Ейнштейна для спонтанного випромінювання, поляризованого вздовж осі b; τ , с – випромінювальний час життя для відповідного збудженого стану; f – сила осцилятору S-T переходу, що характеризує його інтенсивність.

Аналіз таблиці показує значну залежність результатів розрахунків методом БК СУП від обраного ПАП та базису. Наприклад, зміна енергії ${}^3A_2 \leftarrow X^1A_1$ переходу відбувається від 1,1 до 1,9 eВ, проте відносні інтенсивності для S-T переходів до різних спінових підрівнів узгоджуються. Найбільш важливий момент ${}^3A_2 \leftarrow X^1A_1$ переходу M_y до T^y спінового підрівня, що складає близько 0,0043 а.е. в ПАП-4 (табл.), а в ПАП-1 та ПАП-3 ця величина суттєво відрізняється. Розрахунки в ПАП-1 дещо зменшують, а в ПАП-3 значно збільшують значення моменту переходу.

На основі результатів квантово-хімічних розрахунків можна зробити висновок, що ${}^3A_2 \leftarrow X^1A_1$ смуга поглинання є досить інтенсивною і система поглинання Вульфа може бути віднесена виключно до цього переходу. ${}^3A_2 \leftarrow X^1A_1$ переход дає вклад головним чином в довгохвильову область смуги поглинання Вульфа.

- 1) Anderson S.M., Mauersber K. // J. Geophys. Research. 1995. V.100. №2. P.3033.
- 2) Minaev B.F., Bilan E. // Bulletin of the Polish academy of sciences chemistry. 2001. V.49. №2. P.135.
- 3) Bouvier A.J., Wannous G., Churassy S., Bacis R., Brion J., Malicet J., Judge R.H. // Spectrochimica Acta Part A. 2001. V.57. P.561.
- 4) Bouvier A.J., Inard D., Veyret V., Bussery B., Bacis R., Churassy S., Brion J., Malicet J., Judge R.H. // J.Molecular Spectrosc.Acta. 1998. V.190. P.189.

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ АНОДНОГО ОКИСЛЕННЯ АЛЮМІНІЮ

Янко Т.Б., *Фільченков А.С., Скачков В.О., Грицай В.П.

*ВАТ „Запорізький механічний завод”

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

Використання процесу анодного окислення в сучасній промисловості вимагає значної автоматизації та комп'ютеризації. Сьогодні виникає потреба у створенні багатофункціональному обладнанні для створення анодних плівок різного гатунку, товщини, електро- та теплопровідних властивостей на одному й тому ж устаткуванні. Для якнайкращого завдання програми на обладнання необхідно створити математичну модель процесу, яка всебічно описує процес утворення анодної плівки в загальному вигляді.

Процес анодування й пов'язані з ним електродні процеси супроводжуються інтенсивним масоперенесенням [1,2].

Масоперенос хімічно активних часток може бути описаний наступним рівнянням:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \nabla^2 C_i + \left(\frac{z_i F D_i}{RT} \right) \nabla(C_i \Delta\varphi) - \vec{v} \nabla C_i, \quad (1)$$

де C_i – концентрація часток i -го сорту; D_i - коефіцієнт дифузії часток i -го сорту, $\Delta\varphi$ - градієнт потенціалу, \vec{v} – швидкість руху гідродинамічного потоку, F - число Фарадея, Z_i - заряд часток i -го сорту, ∇ - знак дивергенції, t , T - час і температура процесу.

Перший член у рівнянні (1) являє собою перенесення часток i -го сорту, шляхом дифузії. Другий член характеризує перенесення часток i -го сорту, під впливом градієнта потенціалу $\Delta\varphi$. Третій член відповідає перенесенню часток гідродинамічним потоком зі швидкістю v .

Загальне рівняння (1) можна спростити для кожної конкретної технологічної схеми. У випадку із пласкими анодом і катодом з відповідними площами поверхонь S_a і S_k і відстанню між електродами a рівняння (1) запишеться у вигляді для випадку коли процес здійснюється по нормальні до електродів:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \left(\frac{z_i F D_i}{RT} \right) \frac{\partial(C_i \Delta \varphi)}{\partial x} - \vec{v} \nabla C_i. \quad (2)$$

У випадку постійного значення градієнта потенціалу рівняння (2) запишеться у вигляді:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \left(\frac{z_i F D_i \Delta \varphi}{RT} - \vec{v} \right) \frac{\partial C_i}{\partial x}. \quad (3)$$

У правій частині (3) значення швидкості v повинне бути задане. У випадку відсутності зовнішнього перемішування електроліту й рівномірному розподілу температури по всьому обсязі швидкість v можна задати пропорційно швидкостям сплиття пухирців газів, що утворяться на електродах.

Величина швидкості сплиття пухирців визначається

$$V_n = \left(\frac{\delta}{K} \right)^3, \quad (4)$$

де δ - товщина дифузійного шару, K - константа.

З огляду на (4) швидкість перемішування електроліту може бути визначена

$$V = C \cdot V_n = K_n \cdot \delta^3. \quad (5)$$

У сталому режимі, коли концентрація не залежить, (3) запишеться у вигляді

$$\frac{\partial^2 C_i}{\partial t^2} + \left(\frac{z_i F D_i \Delta \varphi}{RT} - \frac{\vec{v}}{D_i} \right) \frac{\partial C_i}{\partial x} = 0. \quad (6)$$

Значення концентрації в центрі електролізного осередку задовольняти

$$C_i|_{x=0} = C_i^0. \quad (7)$$

Рішення рівняння (6) з урахуванням (7) можна подати у вигляді:

$$C_i = C_i^0 \cdot e^{\left(\frac{\vec{v}}{D_i} - \frac{z_i F \Delta \varphi}{RT} \right) x}. \quad (8)$$

Розв'язання (8) розглядає процес переносу заряджених часток i -го сорту в обсязі електролізного осередку в стаціонарних умовах при постійному градієнтові потенціалу.

Забезпечення стаціонарних умов припускає створення спеціальних технологічних методів, які відновлювали б склад електроліту.

В умовах зміни складу електроліту рівняння (3) запишеться у вигляді

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + B_i \frac{\partial C_i}{\partial x}, \quad (9)$$

де $B_i = z_i \cdot F \cdot D_i \cdot \frac{\Delta \varphi}{RT} - \vec{v}$.

Для рівняння (9) умова (7) має бути доповнена:

$$C_i \Big|_{\substack{x=0 \\ t=t_k}} = C_i^k, \quad (10)$$

де t_k – кінцевий час електролізу; C_i^k – кінцева концентрація іонів i -го сорту.

Рішення (9) з урахуванням (8) та (10) запишеться у вигляді:

$$C_i(x, t) = C_i \exp \left[\left(Q_i - \sqrt{Q_i^2 + H/D_i} \right) x + H \cdot t \right], \quad (11)$$

$$\text{де } Q_i = \frac{B_i}{2D_i}; \quad H = \frac{1}{t_k} \ln \frac{C_i^k}{C_i^0}$$

Розв'язання (11) визначає перенесення маси в електролітові в умовах зміни складу електроліту по вмісту іонів i -го сорту.

- 1) В. И. Черненко, Л.А. Снежко, К.И. Литовченко. Теория и технология анодных процессов при высоких напряжениях. Киев: "Наукова думка", 1995.-198с.
- 2) Анондные оксидные покрытия на металлах и анодная защита / И.Н. Францевич, В.А. Лавренко. 2-е издание, перераб. и доп., Киев: «Наукова думка», 1985, - 240 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Болотин А.В.

ГВУЗ “Украинский государственный химико-технологический университет”,
alexandr_bolotin@mail.ru

Современные электрохимические технологии в значительной степени базируются на процессах, протекающих вдали от состояния термодинамического равновесия, когда в широко распространенных в электрохимии нелинейных системах может происходить потеря устойчивости. Потеря устойчивости в нелинейных системах на протяжении последних десятилетий интенсивно изучается специалистами в областях астрофизики, биологии, экономики, социологии и т.д. В электрохимии такие исследования малочисленны. Понимание условий возникновения и закономерностей неустойчивости различных типов может в одних случаях послужить основой для создания методов разработки режимов поведения электрохимических процессов без возникновения неустойчивости, а в других случаях использовать такие неустойчивости для разработки новых методов контроля, новых технологий.

Нами проведен комплекс экспериментальных исследований и компьютерное моделирование сложных, многостадийных электрохимических реакций, протекающих на электродах, покрытых анодными оксидными пленками при высоких анодных потенциалах [1–4]. Развита теория неустойчивости электрохимического поведения металла, покрытого анодной оксидной пленкой [2, 3]. Теоретически предсказаны и экспериментально обнаружены колебания тока нового типа [4]. Результаты математического моделирования и вычислительных экспериментов позволили найти методы стабилизации неустойчивого динамического поведения исследованных электрохимических систем и экспериментально их реализовать [2]. Математические модели колебательных процессов, предложенные для описания динамических свойств металлов - оксидных систем типа $\text{Me}, \text{MeO}_x / \text{HA}$, могут быть использованы при теоретическом анализе неустойчивости процессов в других областях, например, при компьютерном моделировании процессов биологического окисления пищевых добавок в организме человека. Выводы теории могут быть применены для управления электрохимическими процессами, проводимыми в области высоких анодных потенциалов.

- 1) Болотин А.В. К теории автоколебаний в электрохимических системах // Вісник Дніпропетровського університету – Хімія. – 2001. – Вип.6. – С. 123 – 130.
- 2) Ковтун В.Н., Болотин А.В. О динамическом поведении системы $\text{Ni} - \text{H}_2\text{SO}_4$ в области высоких анодных потенциалов в зависимости от режимов электролиза // Электрохимия. – 2005. - №3. - С. 111-115.
- 3) Варгалюк В.Ф., Болотин А.В. Теоретический анализ сложных электрохимических систем, характеризующихся динамической неустойчивостью // Украинский химический журнал. – 2005. - №3. - С. 47 – 49.
- 4) Варгалюк В.Ф., Болотин А.В., Могиленко В.Ф. Некоторые особенности кинетики электроокисления катионов Cr^{3+} на платиновом аноде // Вісник Дніпропетровського університету – Хімія. – 2006. – Вип.8. – С. 3 – 5.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КЛАСТЕРИЗАЦИИ МОЛЕКУЛ В РАСПРЕДЕЛЕННОЙ СИСТЕМЕ DISTRIBUTEME

Бондаренко В.В., Никитенко Е.В., Ткач Ю. Э.

Черниговский государственный технологический университет, vv.bondarenko@gmail.com

В промышленной сфере, кластеризация часто применяется к неоднородным наборам элементов, которые представлены как точки в многомерном пространстве. Учитывая соответствующую меру подобия, представляющую расстояние между точками, процесс кластеризации идентифицирует группы объектов. В основу такой классификации и кластеризации положен принцип схожести свойств, который указывает, что структурно подобные объекты имеют подобные свойства [1].

В области химии кластеризация веществ широко используется в фармацевтической промышленности для получения различных типичных наборов молекул [2]. Применение типичных наборов молекул связано с представлением их в виде обучающих наборов при создании различных структур деятельности, а также для просеивания веществ через биологические экраны и тестирования медицинских препаратов. Во всех случаях предполагается, что центральная точка кластера, имеющая определенные свойства, является представителем соответствующего набора, все элементы которого имеют схожие свойства. Существенным для успешной кластеризации набора молекул является соответствующее описание структуры молекулы, а также наличие адекватного алгоритма кластеризации. Одним из автоматических и наиболее быстрых подходов получения типичных наборов является неконтролируемая кластеризация молекул, основанная на Daylight отпечатках и индексе подобия Tanimoto [3].

Процесс получения кластеров молекул состоит из нескольких последовательных шагов (рис. 1). Входными данными задачи кластеризации являются количество молекул и пороговый индекс подобия Tanimoto, а выходными информация о принадлежности молекул к найденным кластерам вместе с отдельно выделенными молекулами, являющимися центральными точками, которые наиболее похожи на все остальные молекулы кластера.

Генерация отпечатка для каждой молекулы производится программным обеспечением фирмы Daylight.

Молекула, которая содержит наибольшее число соседей и тем самым «наиболее похожа» на остальные молекулы, при определение потенциальных центральных точек кластеров, является «хорошим кандидатом» для центральной точки кластера. Используя индекс подобия Tanimoto для идентификации таких молекул формируются списки ближайших соседей каждой молекулы исходного набора и сортируются согласно их длине в убывающем порядке.

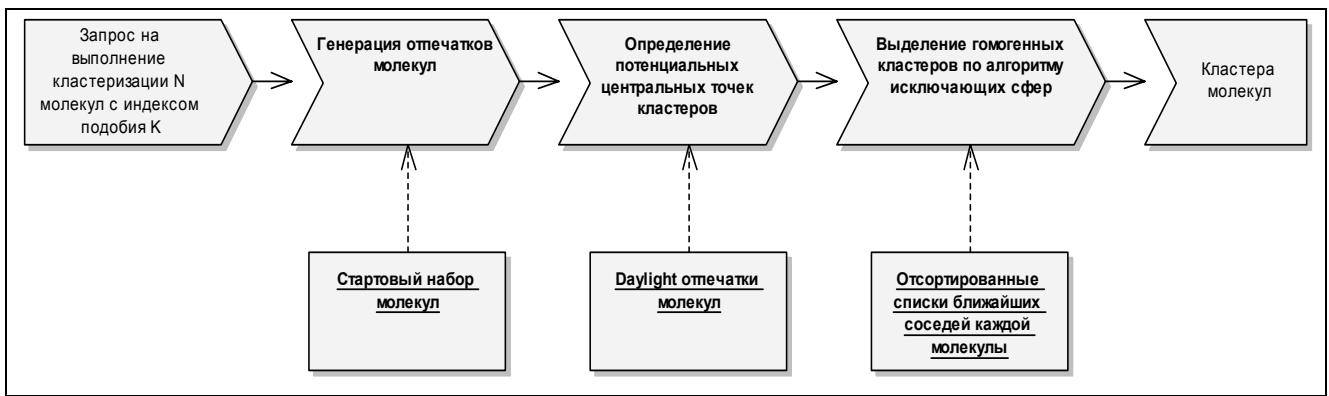


Рис. 1. Процесс получения кластеров молекул

Этот шаг алгоритма кластеризации является ключевым и наиболее ресурсоемким, так как в нем выполняются сравнения отпечатков каждой молекулы с каждой молекулой в исходном наборе.

Основой данного алгоритма, является принцип последовательного просматривания отсортированного списка, полученного на предыдущем шаге, и исключении из рассмотрения молекул, которые уже принадлежат большему по количеству молекул кластеру. Молекула, которая была отнесена к определенному кластеру, не может быть центральной точкой другого кластера или принадлежать ему. Данный процесс можно рассматривать, как формирование сферы исключения вокруг последнего созданного кластера. Поскольку при каждой итерации все больше молекул назначается различным кластерам, поэтому меньше сравнений необходимо выполнять, и, следовательно, алгоритм быстрее движется к завершению.

Молекулы, которые не были отнесены к какому-либо кластеру после завершения процесса кластеризации, становятся одиночками. Важно подчеркнуть, что одним из следствий данного алгоритма является то, что некоторые молекулы-одиночки могут иметь соседей с определенным индексом подобия Tanimoto, но их соседи были исключены «более сильной» центральной точкой кластера, то есть, той, которая содержит большее число соседей в своем списке.

Преимущество данного алгоритма состоит в невозможности формирования высоко гетерогенных кластеров [3]. Примером такого кластера может быть кластер с молекулой в качестве центральной точки, который включает все молекулы из исходного набора.

Каждый шаг алгоритма кластеризации представляется в виде отдельной задачи, которые решаются последовательно одна за другой в системе распределенного решения задач DistributeMe[4]. Визуально задачи представляются с помощью графа топологии, изображенного на рисунке 3.



Рис. 3. Топология решения задачи кластеризации

Задача генерации отпечатков выполняется на отдельном компьютере с применением программного обеспечения фирмы Daylight. Исходные наборы молекул программа получает из специализированных баз данных. Данный шаг может быть пропущен при наличии готового файла с отпечатками молекул.

Задача определения потенциальных центральных точек кластеров наиболее ресурсоемкая, и поэтому ее решение происходит параллельно на нескольких рабочих узлах системы. На вход задачи передаются три параметра: список отпечатков молекул A , интервал B с начальным и конечным индексом молекул в списке и пороговое значение индекса подобия Tanimoto C . Сравнивая отпечатки молекул, входящие в интервал B , со всеми отпечатками исходного списка, задача формирует списки ближайших соседей каждой молекулы.

Наиболее простым способом разбиения задачи определения центральных точек кластеров на несколько подзадач является разложение интервала с начальным и конечным индексом молекул в списке на несколько мелких интервалов. Вычисление каждой отдельной подзадачи занимает незначительно времени, и общее параллельное решение всей задачи проходит быстро. На рисунке 4 схематически изображен процесс разбиения задачи.

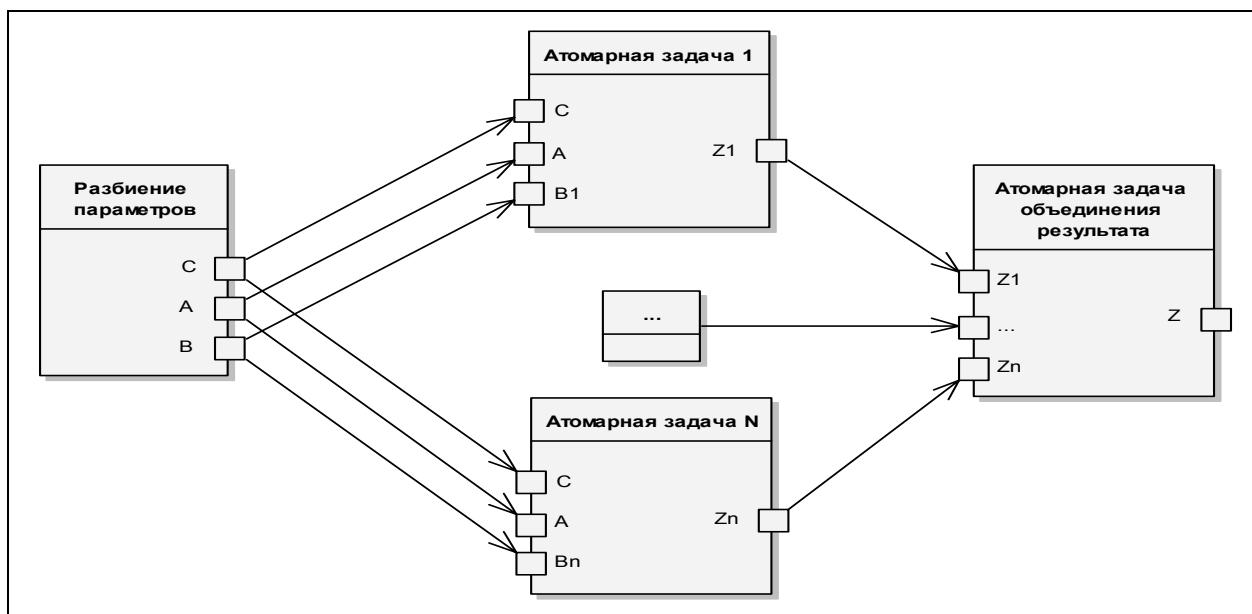


Рис. 4. Разбиение задачи определения центральных точек на несколько подзадач

Входные данные исходной задачи разбиваются на несколько частей и вместе с алгоритмом вычисления формируют несколько атомарных задач, которые передаются на рабочие узлы системы. После решения всех атомарных задач результаты их вычислений передаются на вход атомарной задаче объединения параметров, которая формирует общий результат решения исходной задачи.

Задача выделения гомогенных кластеров по алгоритму исключающих сфер не является настолько ресурсоемкой, как предыдущая задача, поэтому допускается ее решение на одном рабочем узле системы. Параллельное решение данной задачи возможно, однако при этом усложняется схема разбиения исходных данных и сборки результата, поэтому такое решение целесообразно только при очень больших наборах данных.

Результатом решения последней задачи является список выделенных кластеров с включенными в них молекулами. Молекула с индексом ноль в кластере представляет собой центральную точку.

Для проверки работоспособности системы были проведены несколько экспериментов по решению задачи кластеризации молекул. Решение задач происходило с использованием шести рабочих узлов и одного сервера, объединенных в сеть со скоростью передачи данных 100 Мбит/сек.

Известно, что с увеличением размера входных данных, время решения задачи должно увеличиваться нелинейно. Для подтверждения этого факта был проведен эксперимент, в котором исследовалось влияние количества молекул в исходном наборе на общее время

решения задачи кластеризации. В эксперименте использовалось 4 рабочих узла, на которых производилась кластеризация от 500 до 10000 отпечатков молекул, и для сравнения применялся индекс подобия Tanimoto равный 0.8

На основе результатов эксперимента была найдена формула функции регрессии (1), отражающая зависимость времени решения задачи кластеризации от размерности входных данных.

$$y = 38.36 + 1.28 \cdot 10^{-6} \cdot (x - 107.42)^2 \quad (1)$$

Анализ функции подтверждает, что зависимость времени решения задачи от размера входных данных нелинейная, и в данном случае квадратичная. При небольших наборах молекул время решения практически одинаковое, так как основное время затрачивается на передачу данных между рабочими узлами и обработку результатов системой. При увеличении количества молекул возрастает время, затрачиваемое на решение задачи отдельным рабочим узлом, и оно во много раз превышает время передачи данных.

Уменьшение времени решения задачи при увеличении размера входных данных можно обеспечить за счет: увеличения мощности рабочих узлов; увеличения количества рабочих узлов.

Увеличение мощности рабочих узлов в системе распределенного решения задач с использованием неотчуждаемых ресурсов невозможно, так как ресурсы не находятся под контролем администраторов системы, а принадлежат их владельцам.

Подключение дополнительных рабочих узлов к системе не является сложной и дорогой задачей, так как свободных ресурсов достаточно много. К тому же нет необходимости подключать большое количество узлов, так как при увеличении количества параллельных процессов, осуществляющих вычисления, время решения задачи будет уменьшаться до определенной граничной точки. Для подтверждения этого факта был проведен эксперимент, в котором исследовалось влияние количества используемых для вычислений рабочих узлов на общее время решения задачи кластеризации. В эксперименте использовалось от 1 до 6 рабочих узлов, на которых производилась кластеризация 10000 отпечатков молекул, и для сравнения применялся индекс подобия Tanimoto равный 0.8.

На основе результатов эксперимента была найдена формула функции регрессии (2), отражающая зависимость времени решения задачи кластеризации от количества рабочих узлов, используемых для вычислений.

$$y = 749.07 - 391.54 \cdot x + 95.69 \cdot x^2 - 10.56 \cdot x^3 + 0.45 \cdot x^4 \quad (2)$$

Анализ функции подтверждает, что увеличение количества рабочих узлов, используемых для решения задачи, а значит и увеличение параллельных процессов, осуществляющих вычисления, приводит к уменьшению времени решения всей задачи до определенного момента, после которого дальнейшее распараллеливание не является эффективным. Это связано с тем, что при использовании большого количества рабочих узлов, много времени затрачивается на пересылку данных и обработку результатов вычислений каждого узла.

Задача кластеризации молекул является одним из примеров задач большой размерности, которые оперируют данными и вычислениями больших размеров. Решение таких задач невозможно с использованием одного компьютера, что требует применение параллельных вычислений, тем более что такие задачи могут быть разбиты на несколько слабосвязных подзадач, что идеально подходит для распределения вычислений между неотчуждаемыми от владельца рабочими узлами системы.

Разработанная система распределенного решения задач с использованием неотчуждаемых ресурсов, содержащая все необходимые модули, для выполнения вычислений и управления ними, позволяет эффективно решать подобные задачи с минимальными затратами для пользователя, применяя приставающие мощности компьютеров.

- 1) Ott T., Kern A., Schuffenhauer A., Popov M., Acklin P., Jacoby E., and Stoop R. Sequential Superparamagnetic Clustering for Unbiased Classification of High-Dimensional Chemical Data. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 2004, 44, 1358-1364.
- 2) Willett P. Similarity and Clustering in Chemical Information Systems // Letchworth, Research Studies Press. - 1987.
- 3) Butina D. Unsupervised Data Base Clustering Based on Daylight's Fingerprint and Tanimoto Similarity: A Fast and Automated Way To Cluster Small and Large Data Sets. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1999, 39, 747-750.
- 4) Павловский В. И., Ткач Ю. Э. Распределенная система параллельных вычислений для решения задач большой размерности // Труды второй международной конференции "Распределенные вычисления и Grid-технологии в науке и образовании". - Дубна: ОИЯИ. – 2006. - Д11-2006-167. - С. 379-386.

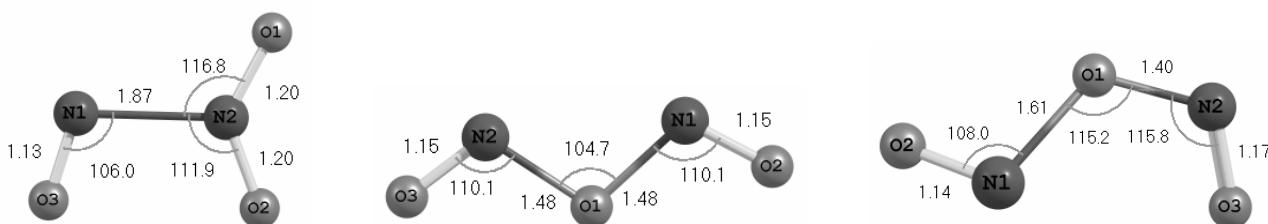
DFT-РАСЧЕТЫ ИЗОМЕРОВ АЗОТИСТОГО АНГИДРИДА N_2O_3 . КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ СВИДЕТЕЛЬСТВО НОВОГО ИЗОМЕРА

Захаров И.И.

Восточноукраинский национальный университет имени Владимира Даля,
Технологический институт, г. Северодонецк, E-mail: zvonu@rambler.ru

Азотистый ангидрид N_2O_3 — в обычных условиях неустойчивое $N_2O_3 \leftrightarrow NO + NO_2$ соединение и практического применения пока не находит. Тем не менее, оно является промежуточным продуктом в многочисленных превращениях окислов азота. С учетом этого, любые схемы и механизмы реакций окисления соединений азота требуют знаний об особенностях электронного и молекулярного строения N_2O_3 . Например, вопреки хорошо известной стадии $2NO + O_2 \rightarrow 2NO_2$ (1) в производстве азотной кислоты, физиологическое окисление NO кислородом в воде образует *нитриты* (производные азотистой кислоты), а не *нитраты* (производные азотной кислоты) [1]. Это значит, что после реакции (1) образуется азотистый ангидрид. Причем, согласно американским исследователям [2], это должен быть до сих пор неизвестный, реакционно-способный интермедиат N_2O_3 .

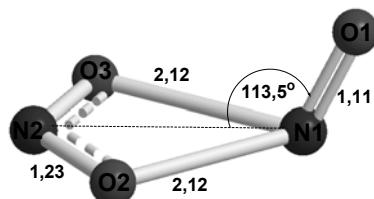
В данной работе проведены квантово-химические расчеты методом функционала плотности (DFT/B3LYP) в расширенном базисе 6-311++G(3df) для известных молекулярных изомеров N_2O_3 (длины связей приведены в ангстремах, углы — в градусах):



Квантово-химические расчеты оптимизированной молекулярной геометрии с последующим анализом колебательных частот позволяет охарактеризовать возможную стабильность рассчитанной молекулярной структуры [3].

Проведенный расчет колебательных частот для оптимизированной структуры нового изомера $NONO_2$, так же как и для трех известных ранее изомеров, показывает отсутствие мнимых частот в ИК-спектре. Это означает, что молекулярная структура $NONO_2$

характеризуется локальным минимумом на гиперповерхности потенциальной энергии и соответствует устойчивому состоянию изомера молекулы N_2O_3 .



Для молекулярной структуры $NONO_2$ (*нитрит нитрозония*) характерны наибольший дипольный момент (2,9 Д) и наибольшее значение энтропии $S^o_{298}=305,3$ Дж/(моль·К) из всех изомеров N_2O_3 . По нашему мнению, именно это должно способствовать его преимущественному формированию в жидкой фазе биологических систем.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований (ДФФД) Министерства образования и науки Украины (проект № Ф25.3/072).

- 1) Недоспасов А.А., Беда Н.В. Биогенные оксиды азота // Природа. – 2005. - № 7. – С. 35-42.
- 2) Wink D.A., Darbeshire J.F., Nims R.W., Saavedra J.E., Ford P.C. // Chem. Res. Toxicol.- 1993.-V.6. - Р. 23-27.
- 3) Захаров И.И., Колбасин А.И., Захарова О.И., Кравченко И.В., Дышловой В.И. Квантово-химическое свидетельство существования нового изомера тетраоксида диазота // Теорет. и эксперим. химия. – 2008. – 44, № 1.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВЫХ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Кац М.Д.

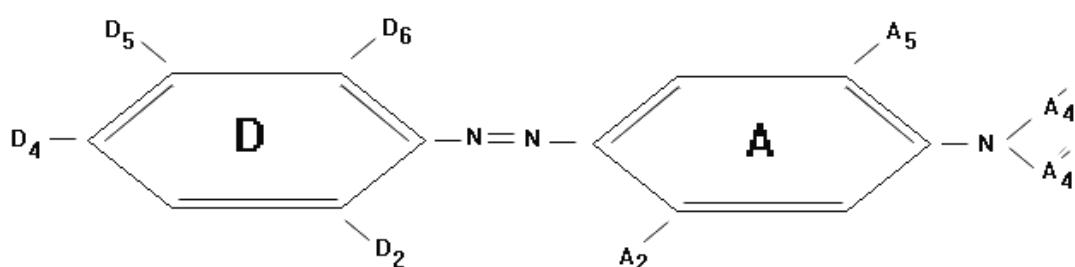
Рубежанский технологический институт Восточно-украинского национального университета им. В. Даля, kats@is.ua.

В данной работе приведено решение актуальной проблемы - построения моделей зависимости потребительских свойств химических соединений определенного класса от их химического строения. С помощью этих моделей появляется возможность решать задачи:

- прогноза свойств новых, еще не синтезированных химических соединений по их химическим формулам;
- формального синтеза химических формул новых соединений изучаемого класса, потенциально обладающих заданным комплексом потребительских свойств.

На примере дисперсных моноазокрасителей показана возможность решения приведенных выше задач для любых классов химических соединений.

В качестве методологической основы для построения модели «строение-свойства» был использован метод мозаичного портрета. [1]. Объект исследования – класс дисперсных моноазокрасителей, имеющих следующую структуру:

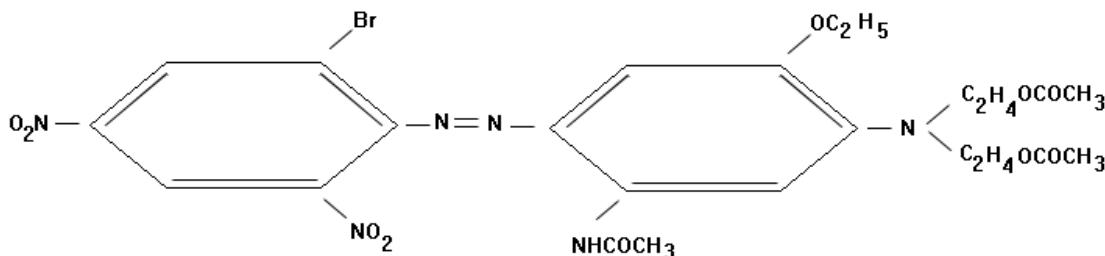


В качестве исходного материала были использованы 273 красителя, входящих в отечественный ассортимент, ассортименты фирм БАСФ, Ай Си Ай, Байер, Гейги, Сандоз, Дюпон, Истмен, Кодак, Циба, Хекст, а также синтезированных в НИИ Органических полуупродуктов и красителей в ходе поисковых работ. Для этих красителей экспериментально были определены устойчивость к свету и сублимации (по ГОСТу 97-33-71) и выбираемость при 1% выкраске (по шкале органолептических оценок).

Исходное множество красителей было разделено на 2 подмножества – «хорошее», в которое вошли красители, имеющие следующие показатели: устойчивость к свету ≥ 6 баллов, устойчивость к сублимации ≥ 3 баллов, выбираемость при 1%-ой выкраске – 3 балла, и «плохое», в которое вошли красители, хотя бы по одному из показателей не удовлетворяющие приведенным выше ограничениям.

Для построения модели строение каждого из красителей было закодировано при помощи таблицы 1.

Например, самарон морской синий Г (фирма Hochst)



имеет код 2.15.40.47.59.71.75.

*Таблица 1 – Условия кодирования строения дисперсных моноазокрасителей
Диазосоставляющая*

Положение 2		Положение 4		Положение 5		Положение 6	
Заместитель	код	Заместитель	код	Заместитель	код	Заместитель	код
- H	1	- NO ₂	15	- NO ₂	27	- NO ₂	35
- NO ₂	2	- CN	16	- Br	28	- CN	36
- CN	3	- SO ₂ CH ₃	17	- Cl	29	- SO ₂ CH ₃	37
- SO ₂ CH ₃	4	- SO ₂ C ₂ H ₅	18	- OCH ₃	30	- SO ₂ C ₂ H ₅	38
- SO ₂ C ₂ H ₅	5	- SO ₂ CF ₃	19	- OC ₂ H ₅	31	- SO ₂ CF ₃	39
- SO ₂ CHF ₂	6	- SO ₂ CHF ₂	20	- COC ₂ H ₅	32	- Br	40
- SO ₂ CF ₃	7	- CH ₃	21	- CF ₃	33	- Cl	41
- Br	8	- CF ₃	22			- OCH ₃	42
- Cl	9	- NHCOCH ₃	23			- OCHF ₂	43
- OCH ₃	10	- NHCOC ₂ H ₅	24			- CF ₃	44
- OC ₂ H ₅	11	- NHCOC ₆ H ₅	25			- SO ₂ CHF ₂	45
- CH ₃	12						
- CF ₃	13						

Модель зависимости между химическим строением и комплексом потребительских свойств дисперсных моноазокрасителей строилась путем сопоставления кодов структур красителей «хорошего» и «плохого» подмножеств. При этом выделялись сочетания кодов заместителей, которые встречались в некоторых красителях «хорошего» класса и не встречались ни в одном красителе из «плохого» класса. Аналогично искались сочетания кодов заместителей, которые встречались в некоторых красителях «плохого» класса и не встречались ни в одном красителе из «хорошего» класса.

Азосоставляющая

Положение 2		Положение 4			Положение 5	
Заместитель	код	Код 4'	Заместитель	Код 4''	Заместитель	код
- CH ₃	46	50	- H	62	- OCH ₃	74
- NHCOC ₃	47	51	- CH ₃	63	- OC ₂ H ₅	75
- NHCO ₂ H ₅	48	52	- C ₂ H ₅	64	- CH ₃	78
- Cl	49	53	- C ₄ H ₉	65	- Cl	79
- OH	77	54	- C ₂ H ₄ Cl	66		
		55	- C ₂ H ₄ CN	67		
		56	- C ₂ H ₄ OH	68		
		57	- C ₂ H ₄ OCH ₃	69		
		58	- C ₂ H ₄ OC ₂ H ₅	70		
		59	- C ₂ H ₄ OCOCH ₃	71		
		60	- C ₂ H ₄ N(CO) ₂ C ₆ H ₄	72		
		61	- C ₂ H ₄ HN(CH ₂) ₃ OCH ₃	73		

Ниже приведена полученная таким образом мозаичная модель зависимости комплекса заданных потребительских свойств от химического строения класса дисперсных моноазокрасителей.

В мозаичной модели жирным шрифтом обозначены коды заместителей, наличие которых в соответствующих высказываниях необходимо, а нежирным шрифтом – коды заместителей, которые должны отсутствовать в соответствующих высказываниях.

1. Модель «хорошего» класса:

2 3 4 5 6 7

Y=1, если: 3.15.74 V3.35.36.59 V4.41.59.78 V40.74 V9.46.67 V9.52.67 V8.43.44.46.67

8 9 10 11 12 13 14 15 16

V2.15.47.59 V15.47.71 V9.41.59.78 V15.41.47.49 V9.53 V41.71 V9.47.71 V7.40.71 V10.35.55

17 18 19 20 21 22 23 24

V15.35.55 V3.35.55.67 V3.46.59 V3.35.55.71 V3.36.40.72 V9.47.59 V9.55.67 V36.46

25 26 27 28 29 30 31 32 67

V3.41.51 V3.40.59 V4.41.74. V15.41.74 V17.41.74 V3.35.47.74 V3.46.71 V7.40.59... V3.49.71

2. Модель «плохого» класса:

2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14

Y=0, если: 13 V20 V21 V22 V29 V32 V33 V43 V56 V70 V73 V52.66 V41.53.67 V2.66

15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25

V17.66 V2.17 V19.52 V8.69 V2.72 V16.52 V3.57 V15.57 V44.52 V2.52.71 V2.41.52

26 27 28 29 130

V2.40.47 V2.59.71 V40.55.71 V4.52.69.....V10.15.47.

Прогнозирование свойств новых, еще не синтезированных азокрасителей осуществляется следующим образом:

1. Химическую формулу красителя кодируют в соответствии с табл.1.

2. Сопоставляют коды красителя с высказываниями мозаичной модели «хорошего» класса и выписывают номера тех высказываний, все коды которых полностью совпадают с кодами красителя.

3. Сопоставляют коды красителя с высказываниями мозаичной модели «плохого» класса и выписывают номера тех высказываний, все коды которых полностью совпадают с кодами красителя.
4. Если структура формулы рассматриваемого красителя содержит сочетания заместителей, соответствующих высказываниям только «хорошего» класса, то соответствующий краситель можно синтезировать, т.к. с очень высокой вероятностью он будет обладать заданными свойствами по всем изучаемым выходным показателям. Следовательно, его имеет смысл синтезировать.

Если формуле красителя помимо высказываний «хорошего» класса содержит хотя бы одно высказывание «плохого» класса, вероятность того, что хотя бы по одному из выходных показателей не будет соответствовать заданным ограничениям. Если высказываний «плохого» класса, больше одного – в подавляющем большинстве случаев синтез такого красителя – напрасная потеря времени и средств.

Экспериментальная проверка эффективности предсказания потребительских свойств красителя по его химической формуле была проведена следующим образом. По химическим формулам 73 моноазокрасителей, которые планировалось синтезировать, с помощью приведенной выше мозаичной модели был осуществлен прогноз их потенциальных потребительских свойств. Все эти красители были синтезированы и испытаны. В таблице 2 приведено сопоставление предсказанных и экспериментально определенных свойств.

Таблица 2 – Экспериментальная проверка эффективности прогнозирования потребительских свойств новых дисперсных моноазокрасителей по их химическим формулам

№ красителя	Код формулы красителя	№ № высказываний мозаичной модели		Прогноз	Экспериментальные оценки	Точность прогноза
		«Хорошие», (Y=1)	«Плохие», Y=0			
1	8.15.44.52.69	-	18, 23, 29	П	6-7, 1, 3	+
2	13.15.52.69.	-	1, 29	П	5, 1, 3	+
3	2.15.40.52.71	-	24, 26	П	6, 1, 3	+
4	13.16.17.18.20	13,16,17,18,20	-	Х	7, 3-4, 3	+
5	6.15.55.71.	16,17	-	Х	7, 4, 3	+
6	8.15.44.55.71	16,17	-	Х	7, 3, 3	+
7	7.15.55.71	15, 16, 17,	-	Х	6, 4, 3	+
8	3.15.41.52.71	13	-	Х	6, 4-5, 3	+
9	7.15.47.59.71	9, 15, 32	-	Х	7, 4, 3	+
10	12.15.55.68	16, 17	-	Х	5-6, 2-3, 3	-
11	9.15.41.59.71	3, 10, 13	-	Х	6, 3, 3	+
12	9.15.55.67	5, 17, 23	-	Х	6-7, 3-4, 3	+
13	9.15.41.55.67	5, 17, 23	13	П	6, 3, 3	-
14	3.15.36.46.54.66	24		Х	6, 3-4, 3	+
15	3.15.36.46.57.69	24	21, 22	П	6-7, 3, 3	-
16	15.59.71	-	-	?	5-6, 2, 3	?
...
73	2.19.52.71	-	17, 24, 27	П	6, 1, 3	+

В графе «прогноз» таблицы 2 буквами П (плохой) и Х (хороший) обозначены предсказанные значения комплекса потребительских свойств.

В графе «экспериментальные оценки» 1-ая цифра характеризует устойчивость к свету (в баллах), 2-ая – устойчивость к сублимации (в баллах), 3-я – выбираемость при 1% выкраске (1- плохая, 2- посредственная, 3- хорошая).

В графе «правильность прогноза» - совпадение прогноза с экспериментально полученными оценками обозначается знаком «+», несовпадение – знаком «-», отсутствие прогноза – знаком вопроса (?).

Анализ эффективности предсказания свойств новых, еще не синтезированных азокрасителей по их химической формуле:

1. В 12 случаях (16.5%) в мозаичной модели не хватило информации для соответствующего прогноза (см. №16 в таблице 2);
2. Для 58 красителей (79.5%) прогноз и результаты экспериментальной проверки полностью совпали;
3. Для 3-ех красителей (4%) прогноз оказался ошибочным. Для формулы 10 оценки по устойчивости к свету и сублимации оказались на 0.5 балла ниже заданных (что не превышает погрешности визуальной оценки этих показателей по принятой методике); для формул 13 и 15, несмотря на наличие в них соотношений компонентов, присущих высказываниям «плохого» класса, оценки по всем выходным показателям соответствовали заданным ограничениям.

Одной из самых важных задач органической химии является направленный синтез новых соединений, обладающих заданными свойствами. Предложен новый высокоэффективный метод решения этой задачи, и на примере дисперсных моноазокрасителей доказана его эффективность.

Метод направленного синтеза химических формул новых соединений, потенциально обладающих заданным комплексом потребительских свойств, основан на следующих логических предпосылках. Составное высказывание, полученное путем объединения простых высказываний, истинно только в том случае, если каждое из входящих в него простых высказываний истинно, и ложно в случае, если хотя бы одно из входящих в него высказываний ложно.

Молекулу красителя можно представить в виде составного высказывания, состоящего из отдельных простых высказываний. Соответственно, химическое соединение будет обладать заданным комплексом потребительских свойств в том случае, если его формула будет состоять из фрагментов структуры «хорошего» класса (простых истинных высказываний) и не будет содержать ни одного фрагмента структуры «плохого» класса (простых ложных высказываний).

В таблице 3 приведены коды химических формул новых азокрасителей, потенциально обладающих заданными потребительскими свойствами, которые были синтезированы в соответствии с приведенными выше принципами. Химический синтез этих красителей и экспериментальная оценка их потребительских свойств были проведены в Научно-исследовательском институте органических полупродуктов и красителей [1-3]. Результаты экспериментальной проверки эффективности нового метода направленного синтеза новых химических соединений приведены в таблице 3.

Анализ полученных результатов. У 14 из 16 (87.5%) красителей экспериментально определенные оценки показателей качества полностью соответствуют заданным. У 2-х красителей (1 и 15) оценка по выбираемости на 0.5 балла ниже заданной, что не превышает погрешности оценки этого показателя по принятой методике.

Таблиця 3 – Экспериментальная проверка эффективности направленного синтеза химических формул новых соединений, потенциально обладающих заданным комплексом свойств

№	№№ высказываний «хорошего» класса, по которым синтезирована формула красителя	Синтез формулы красителя, обладающей заданными свойствами	Оценки, полученные после испытания красителя
1	10, 27, 28	9.15.41.59.71.74	6, 3-4, 2-3
2	9, 10	9.15.41.47.59.71	7, 3-4, 3
3	9, 14, 22.	9.15.41.59.71	7, 3-4, 3
4	2, 9, 11, 28	3.15.41.47.59.71.74	6-7, 4, 3
5	2, 9, 39	3.15.36. 47.59.71.	6-7, 4, 3
6	2, 9	3.15.47.59.71.	7, 4, 3
7	2, 9, 11,	3.15.41.47.59.71.	7, 3-4, 3
8	5, 12, 33	9.17.53.67	6-7, 3, 3
9	1, 9, 15, 32	7.15.47. 59.71.74	6, 4, 3
10	19, 31, 34, 35	3.15.35.46.59.71	6-7, 4, 3
11	2, 9, 26	3.15.40.47.59.71	7, 4, 3
12	2, 38	3.49.59.71	7, 3, 3
13	10, 36	9.41.49.59.71.	6, 3, 3
14	9, 30, 37	3.15.35. 47.59.71	6-7, 4, 3
15	1, 8, 9, 39	2.15.36.47.59.71.74	6-7, 4-5, 2-3
16	1, 5, 16	9.15.55.67.74	6, 3, 3

Выводы.

- На примере дисперсных моноазокрасителей показана принципиальная возможность решения актуальных задач:
 - построения простой и легко интерпретируемой математической модели зависимости потребительских свойств изучаемого класса химических соединений от его строения;
 - прогнозирования свойств новых еще не синтезированных соединений изучаемого класса по их химическим формулам;
 - направленного синтеза химических формул новых соединений изучаемого класса, потенциально обладающих заданным комплексом потребительских свойств.
- Большим достоинством мозаичной модели является ее изоморфность изучаемому классу химических соединений: коды каждого синтезированного соединения однозначно интерпретируются в виде соответствующей химической формулы этого соединения.
- 1) Кац М.Д., Мостославская Э.И. Зависимость между строением дисперсных моноазокрасителей и их потребительскими свойствами на лавсане // Журнал прикладной химии. - 1983. - №9. - с. 2135-2141.
 2) Лысун Н.В., Кац М.Д., Кричевский Г.Е. Направленный синтез красителей с заданными светозащитными свойствами по отношению к полиамидным волокнам //Химия и химическая технология. – 1984. – Том 6. – с.700 – 703.
 3) Кац М.Д., Лысун Н.В., Мостославская Э.И., Кричевский Г.Е. Изучение зависимостей между строением дисперсных моноазокрасителей и их светозащитными свойствами на полиамидном волокне // Журнал прикладной химии. - 1988. - №5. - с. 1196-1199.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПАССИВАЦИИ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ ПРИ ИХ АНОДНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

Коробов В.И., Петренко Л.В.

Днепропетровский национальный университет, korvik58@mail.ru

Явления пассивации играют важную роль в формировании коррозионного поведения различных металлов и сплавов.

При математическом моделировании процессов пассивации металлической поверхности исходили из следующих допущений:

- ионизация металла при его анодной поляризации реализуется стадийно, по механизму последовательного переноса электронов;
- при стадийной ионизации образуются различные адсорбированные частицы; количественное описание адсорбционных явлений может быть проведено в рамках ленгмюровской теории;
- суммарный процесс анодного растворения и пассивации включает ряд равновесных стадий, к которым применим принцип квазивновесного приближения;
- в области вторичной пассивации возможно образование оксидов (гидроксидов) нестехиометрического состава.

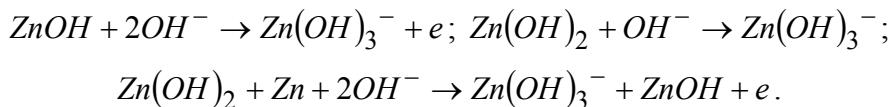
На основании высказанных допущений получены аналитические уравнения, описывающие для ряда металлов теоретический ход анодной стационарной поляризационной кривой электрода:

$$i = f(k_i, K_j, \theta_Z, \varphi),$$

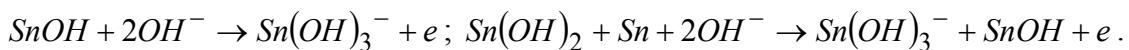
где i - плотность тока на электроде; k_i - константы скоростей замедленных стадий; K_j - термодинамические константы равновесных стадий; θ_Z - степени заполнения поверхности адсорбированными частицами; φ - потенциал электрода.

Экспериментальная проверка полученных уравнений проведена на следующих объектах: цинк и олово в растворах NaOH, никель в растворе H₂SO₄, электроды из гальванических сплавов Zn-Sn, Zn-Ni в щелочных растворах. Об адекватности моделей свидетельствует не только совпадение расчетных и экспериментальных поляризационных характеристик электродов, но и соответствие вычисленных средствами нелинейной аппроксимации (Mathcad 11.2) термодинамических параметров литературным данным. Найдены корреляционные соотношения между величинами потенциалов первого максимума и активностями компонентов раствора. Полученные результаты дают основание считать, что кинетическими значимыми стадиями при анодной пассивации являются следующие.

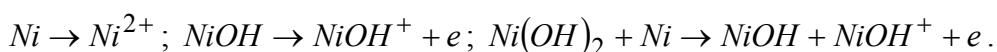
1. Цинк в растворах щелочи:



2. Олово в растворах щелочи:



3. Никель в кислых сульфатных растворах



Показано, что в определенной области потенциалов полученные уравнения могут быть применимы для описания процессов анодного растворения цинковых электролитических сплавов различного химического состава. При этом анодное поведение образцов сплава в области первичной пассивации полностью определяется кинетикой растворения более электроотрицательного компонента. В то же время существенное значение имеет фазовый состав исследуемого сплава. Полученные результаты могут быть использованы для прогнозирования функциональных свойств легированных цинковых покрытий.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ СОРБЦИИ СЕРОВОДОРОДА НА АКТИВИРОВАННЫХ УГЛЯХ

Тарасенко Ю.А., *Безносик Ю.А., Хаврюченко В.Д., *Яценко С.А.

Институт сорбции проблем эндоэкологии НАН Украины, tarasenko@ispe.kiev.ua

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

Сероводород, как и низшие меркаптаны, достаточно распространенные соединения в окружающей среде. С одной стороны они создают массу проблем в связи с загрязнением атмосферы, а с другой - могут служить источниками дешевого сырья для химической промышленности. Сероводород может служить энергетическим ресурсом при его электрохимическом окислении кислородом воздуха, образуя в качестве побочного продукта элементарную серу. В связи с этим изучение закономерностей окисления сероводорода является актуальной теоретической и важной практической проблемой. Распространенным способом удаления сероводорода из газовых смесей является его каталитическое окисление кислородом воздуха на активных углях при комнатной или повышенной температуре.

В литературе по изучению механизма окисления H_2S отсутствует рассмотрение этого процесса на атомном уровне с привлечением методов квантовой химии. Поэтому в данной работе представлены результаты моделирования процессов взаимодействия сероводорода с активированным углем и его функциональными группами и участие молекулярного кислорода в процессе каталитического окисления. С учетом того, что в состав активированного угля входят различные кислородсодержащие функциональные группы, в том числе и хиноидные, мы предположили, что система H_2S – Хинон является хорошей моделью окислительной сорбции сероводорода на активных углях. Поэтому в данной работе было решено промоделировать с привлечением методов квантовой химии взаимодействие в системе H_2S – Хинон в газовой фазе и в присутствии молекул воды и активных углей с аналогичными группировками на поверхности. Для моделирования использовали кластерное приближение. Исходные H_2S и хинон, рассчитывали, исходя из стандартных длин связей и значений валентных углов. В качестве простейшей модели строения угля был использован графитоподобный кластер, аналогичный описанному в [1], но терминированный с одного края хиноидными группами. Для учета влияния растворителя на протекание этих процессов использовали супермолекулярное приближение, т.е. когда реагирующие молекулы или активные центры модельной системы окружаются набором молекул воды, положение которых оптимизируется. Таким образом, молекулы растворителя «отслеживают» протекание химической реакции, т.е. изменение пространственного и электронного строения реакционных центров, и отражают роль среды в процессе. Для моделирования химических превращений использовали стандартное приближение координаты химической реакции, которое базируется на понятии гиперповерхности потенциальной энергии (ГПЭ), где каждой точке на многомерной поверхности соответствует определенное взаимное расположение атомов. Удобной формой представления координаты химической реакции является график зависимости теплоты образования системы от координаты реакции, которая выражается в проекции на линию движения точки, определяющей взаимное расположение атомов в системе, на ГПЭ от исходных веществ к продуктам реакции. В связи с необходимостью

расчета большого числа различных модельных систем с последующим переходом к кластерам активного угля, для подходящих моделей использовали полуэмпирический квантовохимический метод РМ6, реализованный в программе 'QuChem' [2, 3]. Для более точного учета электронных эффектов, использовался неограниченный метод Хартри-Фока.

Основным энергетическим параметром, который используется в данной работе для описания состояния изучаемой системы, а также ее текущего положения на ГПЭ, является теплота образования, вычисляемая квантовохимически. Она соответствует термодинамически (экспериментально) определяемым значениям теплоты образования для отдельных молекул и вычисляется по формуле:

$$\Delta H_f = E_{Elect} + E_{Nuc} - \sum E_{el}^A + \sum \Delta H_f^A$$

где ΔH_f - теплота образования системы, E_{Elect} – общая электронная энергия, E_{Nuc} – энергия отталкивания, $\sum E_{el}^A$ – вычисляемая энергия образования газообразного атома из его иона и $\sum \Delta H_f^A$ – экспериментальные теплоты образования атомов.

Используя предложенную методологию, был проведен вычислительный эксперимент по изучению взаимодействия в системе H_2S – Хинон. Начальное приближение пространственного расположения взаимодействующих молекул было выполнено таким образом, чтобы атомы соседних молекул находились на расстояниях, превышающих сумму их Ван-дер-Ваальсовых радиусов для корректного представления исходных веществ без искажения их химического строения.

Проведенное моделирование взаимодействия хинона с молекулами сероводорода показало возможность прохождения данного процесса предпочтительно в триплетном состоянии и в водной среде. Исходные хиноидные структуры и молекулы сероводорода превращаются в гидрохиноны и гидрохинонные (фенольные) структуры и продукты окисления сероводорода. Образование аморфной смеси состава H_2S_x и продуктов ее дальнейших превращений (молекулярная сера S_8 и свободные молекулы сероводорода) характерно для процессов окислительной сорбции сероводорода на окисленном угле. Наличие сольватной (гидратной) оболочки вокруг хиноидных структур играет важную роль в реакциях молекулярных хинонов. Без сольватирующих молекул воды происходит присоединение серы к молекулярным хинонам, что останавливает реакцию. Однако в водной среде реакция проходит до конца, что можно объяснить сольватацией как молекул хинонов и гидрохинонов, так и сольватацией молекул сероводорода и продуктов его окисления, включая его радикалы. Использованный квантовохимический метод показывает, что атомы серы и другие ее кластеры водой не сольватируются, что соответствует наблюдаемой экспериментально несмачиваемости поверхности кристаллической серы жидкой водой. Критически важным для химизма процесса окисления молекул сероводорода на молекулярных хинонах и хиноидных структурах окисленного угля является мультиплетность системы или ее спиновое состояние. В синглетном состоянии молекула сероводорода не реагирует с молекулярными хинонами как в «чистом» виде, так и в растворе. Затрата незначительной энергии для перевода системы в триплетное состояние приводит к резкому повышению реакционной способности, что в результате дает значительный энергетический выигрыш, получающийся при прохождении химической реакции.

- 1) *Zhonghua Zhu, G.Q.(Max) Lu, Justin Finnerty, Ralph T. Yang.* Electronic structure methods applied to gas–carbon reactions. – Carbon, 2003, v. 41, No. 4, p. 635–658.
- 2) *Khavryutchenko V.* Computation vibration spectroscopy as a tool for investigation of complicated systems. - Eurasian ChemTech Journal, 2004, v. 6, No 3, p. 157-170.
- 3) *Khavryutchenko V.D., Khavryutchenko Al.V., Tarasenko Yu.A., Strelko V.V.* - Quantum chemical simulation of the carbonization process. Space and electronic structure of the active amorphous carbon nanoparticles. – Carbon'03, An International Conference on Carbon, Oviedo, July 6-10, 2003.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ИЗНОСА ПОДШИПНИКОВ СКОЛЬЖЕНИЯ НА ОСНОВЕ БАББИТА

*Фильченков А.С., Грицай В.П., Скачков В.А., Иванов В.И.

*ОАО «Запорожский механический завод»

Запорожская государственная инженерная академия, Colourmet@zgia.zp.ua,

Коренные и шатунные подшипники двигателей внутреннего сгорания в момент запуска работают в условиях недостаточного количества смазки. В этом случае происходит интенсивный износ в режиме полусухого трения. Процесс износа в указанных условиях характеризуется усталостным разрушением поверхностных и приповерхностных слоев [1,2].

В рамках моделирования баббита средой класса B_2 , в которой выделены элементы первого и второго порядков малости, ставится и решается статистическая задача микромеханики сплошных сред, связанная по процессам деформирования и разрушения микроструктуры [3].

В поставленной задаче физические уравнения учитывают изменение модулей упругости в результате образования и накопления структурных микроразрушений в условиях многоциклового нагружения.

Накопление структурных повреждений описывается случайными функциями, которые задаются моментными функциями первого и второго рангов.

Появление микроповреждений оценивается вероятностью выхода микроструктурных напряжений за допустимую поверхность прочности элементов микроструктуры баббита.

Накопление повреждений задается случайной функцией, зависящей от времени (числа циклов) нагружения, параметры которой определяются по результатам экспериментальных исследований процесса износа в зоне трения.

Для определения прочностных характеристик и идентификации случайных функций накоплений микроповреждений проведен комплекс исследований баббитов, имеющих разную структуру и химический состав.

В качестве основных легирующих компонентов баббита применяли кальций, натрий, магний, медь, никель, цинк и олово. Изменение структурного состава обуславливается температурно-временными режимами термообработки.

Проведен комплекс исследований износа баббита различного структурного и химического состава в условиях сухого и полусухого трения.

Исследования проводили с использованием системы «диск – колодка» на машине трения СМТ-1. Массовый износ определяли по изменению массы образцов взвешиванием с точностью 0,0001 г. Линейный износ определяли прямым измерением остаточной толщины образца с точностью 0,001 мм.

Экспериментальные данные по линейному износу баббитов в условиях сухого и полусухого трения с достаточной точностью совпадают с результатами моделирования процесса износа.

Установлены параметры структуры и химический состав баббитов, обеспечивающие износ в допустимых пределах.

- 1) И.В.Кригельский. Трение и износ. – М.: Машиностроение, 1968. – 480 с.
- 2) А.Г.Ковшов. Физическая модель разрушения поверхностей трения / Актуальные проблемы трибологии. – М.: Машиностроение, 2007. – Т.2. С.206-213.
- 3) В.А.Скачков, Ю.В.Соколкин. Связанные задачи деформирования и разрушения композитных материалов и конструкций / Пятый всесоюзный съезд по теоретической и практической механике. - Алма-Ата: Наука, 1981, - С.322

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТАВА РАВНОВЕСНОЙ СИСТЕМЫ “ВОДА – ГЕКСАФТОРОКРЕМНИЕВАЯ КИСЛОТА – ПИПЕРИДИН”

Чеботарев А.Н., Хома Р.Е., Рахлицкая Е.М., Титула В.Н.

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

В работе [1] показано, что различия в механизме взаимодействия гексафторокремниевой кислоты (ГФКК) с азотсодержащими органическими основаниями – аминами (Am) определяется их строением и электронодонорной способностью. Согласно данным потенциометрического титрования в зависимости от основности моноамина на кривой титрования наблюдается один или два скачка. При титровании разбавленных растворов H_2SiF_6 водными растворами относительно слабых оснований с $pK_a < 7$ наблюдается только один скачок при соотношении $Q_{H_2SiF_6} : Q_{Am} = 1 : 2$. В случае сильных Am с $pK_a > 7$ (например, пиперидин) – два ярко выраженных скачка титрования при соотношении $Q_{H_2SiF_6} : Q_{Am} = 1 : 2$ и $1 : 6$. Установлено, что первый скачок связан с нейтрализацией свободных протонов, согласно основности H_2SiF_6 , а второй – при соотношении $1 : 6$ отвечает полному гидролизу комплексного аниона SiF_6^{2-} , вплоть до образования слабой кремневой кислоты.

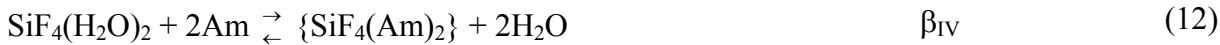
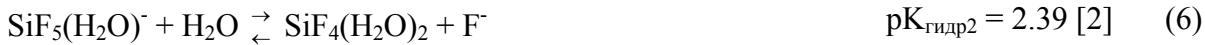
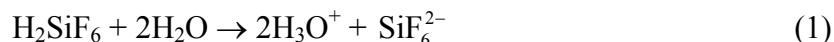
Согласно данным [2-4] в водных растворах ГФКК одновременно может существовать не менее девяти частиц, находящихся в динамическом равновесии при определенных условиях. При введении в указанные растворы таких относительно простых соединений как Am различной электронодонорной способности равновесия усложняются вследствие усиления процессов гидролиза комплексного аниона и, как отмечено в [1], возможного протекания комплексообразования с участием всех компонентов такой сложной химической системы.

В целом многообразие ион-молекулярных форм и существование динамического равновесия между ними не дает возможности обычными классическими физико-химическими методами зафиксировать полный компонентный состав химической системы “ $H_2O - H_2SiF_6 - Am$ ” и относительное содержание всех возможных форм в ней.

Поэтому при рассмотрении и анализе результатов потенциометрического титрования системы “ $H_2O - H_2SiF_6$ – пиперидин” [1] в настоящей работе проведено математическое моделирование, учитывающее наиболее вероятные равновесия с участием продуктов, данной кислотно-основной реакции и возможных процессов гидролиза и комплексообразования.

Экспериментальная часть

На основании проведенного обзора литературных данных [2] по кислотно-основным равновесиям в растворах ГФКК и их ионно-молекулярному составу, а также согласно данным, представленным авторами [3-4], следует, что взаимодействие ГФКК с аминами сопровождается рядом дополнительных процессов. Во-первых, бренстедовским взаимодействием по типу “классическая кислота – классическое основание”, сопровождающимся диссоциацией H_2SiF_6 (1) и HF (2), как продукта гидролиза аниона SiF_6^{2-} , autoprotолизом воды (3), протонизацией амина (4). Во-вторых, гидролизом гексафторосиликат-иона, с образованием фторид-ионов и аквакомплексов фторзамещенного кремния различного состава: пентафторосиликата и тетрафторида кремния и на конечной стадии возможно образование ортокремневой кислоты в виде геля (5 – 7) [1]. В тоже время амин в свободной и протонированной формах чувствует в образовании ионных ассоциатов с фторокомплексными анионами, а также может замещать координированную воду у пентафторида и тетрафторида кремния с образованием ионных пар либо комплексов анионного и молекулярного характера (8 - 12). Количественно характеристики первых семи равновесий достаточно широко описаны в литературе.



Количественные характеристики последних четырех равновесий, а также вероятность существования ион-молекулярных форм, участвующих в них в литературе практически не описано. Необходимость учета уравнений материального баланса по кремнию (13), фтору (14) и амину (15), условия электронейтральности (16) дает дополнительно еще четыре математических выражения (13 – 16). Таким образом, в целом получена математическая модель вышеописанных процессов, состоящая из тринадцати уравнений и пятнадцати переменных. Известно, что необходимым условием решения любой системы линейных уравнений является, по крайней мере, одинаковое количество переменных и уравнений. В нашем случае число переменных больше, чем уравнений, на два.

$$Q_{\text{Si}} = [\text{SiF}_6^{2-}] + [\text{SiF}_5(\text{H}_2\text{O})^-] + [\text{SiF}_4(\text{H}_2\text{O})_2] + C_2 + C_{3\text{H}} + C_{3\text{A}} + C_4 + [\text{SiO}_2 \cdot \text{nH}_2\text{O}] \quad (13)$$

$$Q_F = 6[\text{SiF}_6^{2-}] + 5[\text{SiF}_5(\text{H}_2\text{O})^-] + 4[\text{SiF}_4(\text{H}_2\text{O})_2] + C_1 + 6C_2 + 5C_{3\text{H}} + 5C_{3\text{A}} + 4C_4 \quad (14)$$

$$Q_{\text{Am}} = [\text{Am}] + [\text{AmH}^+] + C_1 + 2C_2 + C_{3\text{H}} + C_{3\text{A}} + 2C_4 \quad (15)$$

$$[\text{AmH}^+] + [\text{H}^+] = 2[\text{SiF}_6^{2-}] + [\text{SiF}_5(\text{H}_2\text{O})^-] + C_{3\text{A}} + [\text{F}^-] + [\text{OH}^-], \quad (16)$$

где Q_{Si} , Q_F , Q_{Am} – общее содержание кремния, фтора и амина, соответственно, в системе; C_1 , C_2 , $C_{3\text{H}}$, $C_{3\text{A}}$, C_4 соответственно равны $[\{\text{AmHF}\}]$, $[(\text{AmH}^+)_2\text{SiF}_6^{2-}]$, $[\{\text{AmH}^+\text{SiF}_5(\text{H}_2\text{O})^-\}]$, $[\{\text{SiF}_5(\text{Am})^-\}]$, $[\{\text{SiF}_4(\text{Am})_2\}]$

В данной работе сделано допущение, что пентафторосиликат может образовывать с амином либо анионный продукт $\{\text{SiF}_5(\text{Am})^-\}$ – Модель 1, либо продукт нейтрального характера $\{\text{AmH}^+\text{SiF}_5(\text{H}_2\text{O})^-\}$ – Модель 2. Существование в смеси одновременно двух продуктов пренебрегалось. В итоге, получено две системы линейных уравнений с числом неизвестных на один больше, чем самих уравнений. В первом приближении сделана количественная характеристика состава исследуемых химических систем путем решения вышеуказанной математической системы уравнений. Установлено, что основная часть H_2SiF_6 в водном растворе амина существует в виде гексафторосиликат-иона и молекулярного комплекса состава $\{\text{SiF}_4(\text{Am})_2\}$. Путем перебора указанных двух компонентов были и рассчитаны равновесия в рассматриваемых модельных химических системах.

При решении вышеуказанной математической системы уравнений, отражающих закон действующих масс, условия материального баланса и электронейтральности, находили такие значения концентраций итерационных компонентов, позволяющие с наименьшей погрешностью описать экспериментальную кривую $Q_{\text{Am}} = f(\text{pH})$. При этом рассматривался

функционал $F = \sum_{i=1}^N ((Q_{Am}^{\vartheta})_i - (Q_{Am}^p)_i) \rightarrow \min$, где Q_{Am}^{ϑ} и Q_{Am}^p – экспериментальные и расчетные количества добавленного титранта. Массив данных по потенциометрическому титрованию водных растворов ГФКК (0.01 – 0.50 M) водными растворами пиперидина (0.01 – 0.50 M) взят из ранее проведенных исследований [1].

Следует отметить, что с помощью разработанных моделей удалось математически обработать лишь те участки потенциометрических кривых, которые отвечают первому скачку титрования (рис. 1). Это указывает на то, что в разработанных моделях учтены не все возможные протекающие процессы связанные со вторым скачком титрования.

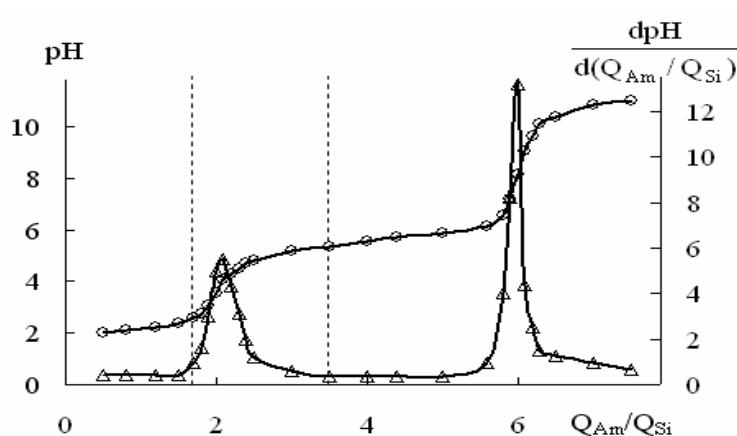


Рис. 1. Кривые pH-метрического титрования 0.10 M водного раствора H_2SiF_6 0.10 M водным раствором пиперидина.

(кривые 4, 4'). Описанный процесс (уравнение 17) при использовании пиперидина в качестве титранта не сопровождается дальнейшей перекоординацией у атома кремния с образованием комплекса $\{SiF_4(Am)_2\}$ (уравнение 18).



Из данных, представленных на рис. 2а, видно, что накопление пиперидина в титруемой системе сопровождается разрушением соединения $\{(AmH^+)_2SiF_6^{2-}\}$ (кривые 1, и 1') вплоть до соотношения компонентов ($Q_{Am}/Q_{Si} \approx 2.0$), за счет чего происходит резкое накопление свободных ионов гексафторосиликат-иона и катиона пиперидина (кривые 2 и 2'). Дальнейшее прибавление титранта приводит к тому, что сразу после точки эквивалентности на кривых, описывающих относительное содержание SiF_6^{2-} , AmH^+ и $\{(AmH^+)_2SiF_6^{2-}\}$, возникают разрывы второго рода (предел слева не равен пределу справа). Кроме того, гексафторосиликат-ион в свободном виде отсутствует, и существует только в составе соединения $\{(AmH^+)_2SiF_6^{2-}\}$. Содержание остальных форм в титруемой системе <1.0 %.

Согласно расчетам частичного распределения различных форм в системе “ $H_2O - H_2SiF_6 -$ пиперидин” с помощью Модели 2 (рис. 2б) резкое изменение компонентного состава вышеупомянутой системы наблюдается лишь после точки эквивалентности ($Q_{Am}/Q_{Si} > 2.0$). Необходимо отметить, что для ионов пиперидина не характерно образования ионной пары $\{AmH^+SiF_5(H_2O)^-\}$ с пентафторосиликат-ионами ($N_{\{AmH^+SiF_5(H_2O)^-\}} < 1.0 \%$) (кривые 4, 4'). Тетрафторосиликат, как продукт гидролиза SiF_6^{2-} , практически полностью входит в

На основании полученных данных были построены диаграммы компонентного состава изученных систем, например, при титровании 0.10 M водного раствора ГФКК 0.10 M водными растворами пиперидина (рис. 2).

При расчете компонентного состава по кривой потенциометрического титрования водного раствора ГФКК водным раствором пиперидина наблюдается ряд эффектов (рис. 2). При образовании анионного комплекса $\{SiF_5(Am)\}^-$ его накопление происходит только после точки эквивалентности

состав соединения $\{\text{SiF}_4(\text{Am})_2\}$. Описанные эффекты, очевидно, связаны с тем, что вблизи точки эквивалентности происходит существенное изменение в механизме взаимодействия в системе “ $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{SiF}_6$ – пиперидин”.

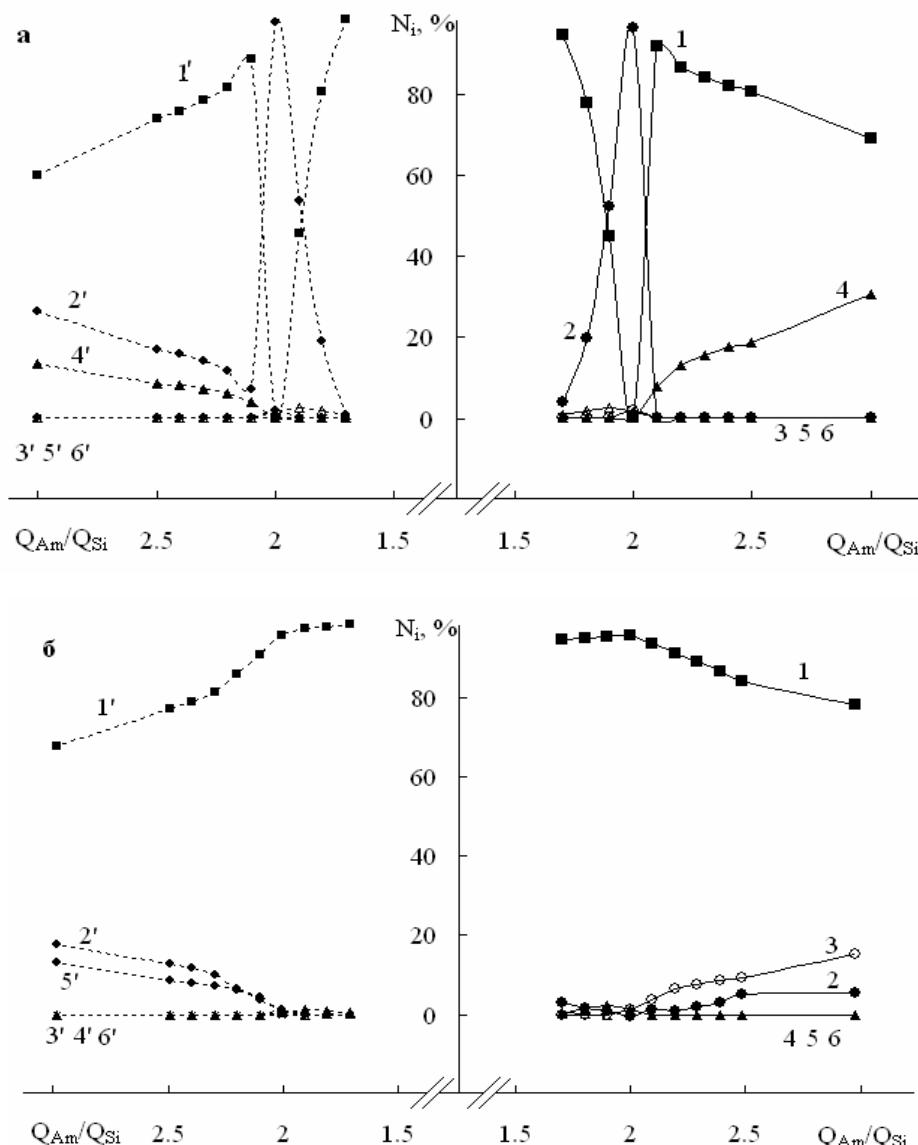


Рис. 2. Диаграммы частичного распределения различных форм в системе “ $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{SiF}_6$ – пиперидин” от соотношения $Q_{\text{Am}}/Q_{\text{Si}}$ по результатам расчета с помощью Моделей 1 (а) и 2 (б). N_i – мольная доля SiF_6^{2-} (2); $\text{SiF}_5(\text{H}_2\text{O})^-$ (5); $\text{SiF}_4(\text{H}_2\text{O})_2$ (6); AmH^+ (2'); Am (3'); комплексов $\{\text{AmHF}\}$ (6'); $\{(\text{AmH}^+)_2\text{SiF}_6^{2-}\}$ (1, 1'); $\{\text{SiF}_5(\text{Am})^-\}$ (4, 4' на а); $\{\text{AmH}^+\text{SiF}_5(\text{H}_2\text{O})^-\}$ (4, 4' на б); $\{\text{SiF}_4(\text{Am})_2\}$ (3, 5') относительно общего содержания Si (1-6) и Am (1'-6') в растворе.

Следует отметить, что во всех изученных в этой работе случаях содержание продуктов гидролиза гексафторосиликат-иона: пентафторосиликат-ион и тетрафторосиликат в свободном виде ($\text{SiF}_5(\text{H}_2\text{O})^-$ и $\text{SiF}_4(\text{H}_2\text{O})_2$, соответственно) незначительно. Эти формы, как правило, закомплексованы амином или его протонированной формой в виде соединений $\{\text{SiF}_5(\text{Am})^-\}$, $\{\text{AmH}^+\text{SiF}_5(\text{H}_2\text{O})^-\}$ и $\{\text{SiF}_4(\text{Am})_2\}$.

Таким образом, методом математического моделирования рассчитан равновесный состав системы “ $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{SiF}_6$ – пиперидин” с участием различных ионно-молекулярных форм гексафторосиликат-иона и азотсодержащего органического основания – пиперидина.

- 1) Чеботарев А.Н., Рахлицкая Е.М., Хома Р.Е. Качан С.В. // Вестник ОНУ, серия “Химия”. – 2005. – Т.10, №8, – С.121-130.
- 2) Чеботарев А.Н. // Вестник ОНУ, серия “Химия”. – 2003. – Т. 8, № 7. – С.46-71.
- 3) Гельмбольдт В.О. и др. // Координ.химия. – 2004. – Т.30, № 3, С. 211-218.
- 4) Эннан А.А., Гельмбольдт В.О. Тетрафторид кремния в реакциях с органическими основаниями. – Одесса: Экология, 2005. – 160 с.
- 5) Чеботарев А.Н., Хома Р.Е. // Вестник ОНУ, серия “Химия”. – 2004. – Т. 9, №3. - С. 30 - 47.
- 6) Гороновский И.Т., Назаренко Ю.П., Некряч Е.Ф. Краткий справочник по химии. – К.: “Наукова думка”, 1987. – 829 с.

QUANTUM CHEMICAL MODELING OF MEERWEIN REACTIONS. THE ROLE OF THE TRIPLET STATE OF ARENDIAZONIUM SALTS AND SPIN CATALYSIS

Bondarchuck S.¹, Minaev A.², Minaev B.^{1,2}

¹Department of Chemistry, B. Hmelnitsky National University, Cherkassy, Ukraine

²Department of Chemistry, State University of Technology, Cherkassy, Ukraine

Diazonium salts, $\text{YArN}_2^+ \text{X}^-$, where Ar is aryl residue with substituent Y and X is a complex anion of low nucleophilicity, are starting reagents in Meerwein condensation reactions (chlororoarylation of unsaturated compounds). have been investigated for a number of Y and X species by density functional method (DFT) with account of solvent effect by polarized continuum model (PCM). Dielectric permeability of solvent was chosen in the interval from water to acetone. Calculation of these salts in vacuum (with anions $\text{X}=\text{Cl}^-$, Br^-) provide pure covalent bound compounds with low polarity of the N-X bond. In water the phenyl diazonium salt is characterized by a large N-X distance (3.1 Å) and strong polarization. These salts have received remarkable attention as the first efficient photoinitiators for cationic polymerization [1]. In general diazonium salts are very unstable and it is difficult to extract them from water solvents. A poor thermal stability of diazonium salts often limits their use as photoinitiators for polymerization. The 4-alkyloxysubstituted diazonium salts ($\text{Y} = \text{OC}_6\text{H}_{13}$) with complex anion of low nucleophilicity ($\text{X} = \text{BF}_4^-$, PF_6^- , SbF_6^-) are pretty stable in several solvents and have a good photosensitivity to UV light (315 nm).

Photolysis of the diazonium salts produces paramagnetic species which EPR spectra and hyperfine structure which are typical for both diazenyl and aryl radicals [1]. The photolysis of the diazonium salts in the presence of vinyl ethers and epoxides is accompanied by the oxidation of the monomer. Moreover, the photo-induced electron transfer starts the Meerwein-reduction of the diazonium salts, which is usually catalyzed by CuCl_2 in thermal reactions. Aryl radicals can be formed also from aryl cations in the triplet state [2]. EPR measurements prove that a second radical source exists in an oxygen saturated vinyl ether solution under irradiation; this is charge-transfer complex formation [1]. In order to check these mechanisms we have calculated by time-dependent DFT the excited states of a number of aryl-diazonium cations. Their geometries were optimized in the ground and excited states, including the reduced radical forms. Comparison of the Meerwein reaction of the diazonium salts catalyzed by CuCl_2 in thermal reactions with the mechanism of photo-induced cationic polymerization lead us to idea of the diazonium triplet state involvement into the mechanism of the former thermal process. This is in agreement with general ideas of spin-catalysis concept [3].

- 1) U.Muller, A. Utterodt, W. Morke, B. Deubzer, C. Herzig, J. Photochem. Photobiol. A 140, 53 (2001).
- 2) S.M. Gasper, C. Devadoss, G.B. Schuster, J. Am. Chem. Soc., 117, 5206 (1995).
- 3) B. Minaev, J. Mol. Catalysis. A 171, 53 (2001).

СЕКЦІЯ 2

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

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ РЕКТИФІКАЦІЇ ЕТИЛОВОГО СПИРТУ

Буряков В.Г., Сергієнко І.В., *Головченко В.М.

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, vbur@yandex.ru

*Черкаський державний технологічний університет

Процес ректифікації широко застосовується в багатьох галузях промисловості як в нашій країні, так і за кордоном: харчовій, хімічній, нафтохімічній, парфюмерно-косметичній та багатьох інших. Ректифікація є заключним і найважливішим процесом у виробництві харчового, синтетичного та гідролізного етилового спирту.

Математичні моделі, які досить повно й адекватно описують процес ректифікації багатокомпонентних сумішей, є важливим знаряддям для оптимізації режимів роботи ректифікаційних колон, вдосконалення існуючих апаратурно-технологічних схем, а також розробки нових схем ректифікації. В результаті можливо досягти значної економії сировинних та енергетичних ресурсів.

Розроблена математична модель ректифікації багатокомпонентних сумішей дозволяє розраховувати процес для органічних компонентів різних класів, практично при будь-якій кількості компонентів і тарілок, при будь-яких концентраціях компонентів. Колона може мати будь-яке число живлень та відборів з тарілок як з рідкої, так і парової фаз. Передбачено як закритий обігрів, так і відкритий обігрів колони, а також комбінований обігрів колони з використанням кип'ятильника й гострої пари. Дефлегматор може бути парціальним або повним.

Математичний опис колони складається з рівнянь матеріального балансу, теплового (ентальпійного) балансу та умов парорідинної рівноваги на кожній тарілці n для кожного компонента i . Позначення для внутрішньої тарілки показано на рис. 1. Кип'ятильник та дефлегматор розглядаються як тарілки, до яких відповідно підводиться або відводиться тепловий потік.

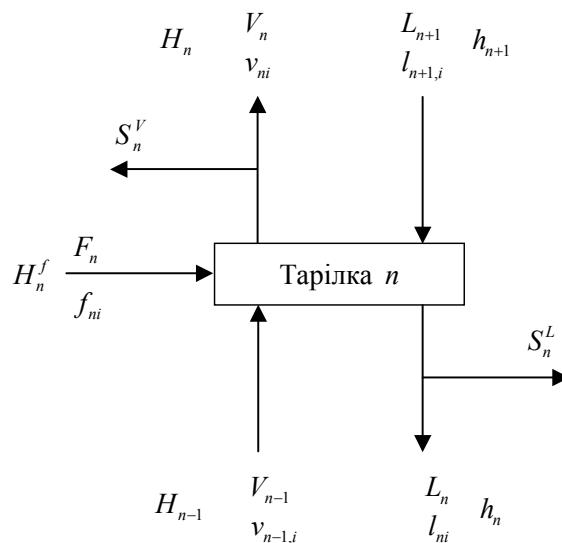


Рис. 1. Позначення вхідних і вихідних потоків на довільній тарілці

Рівняння матеріального балансу мають вигляд:

$$F_{ni}^1 = v_{n-1,i} + l_{n+1,i} + f_{ni} - \left(1 + \frac{S_n^L}{L_n}\right)l_{ni} - \left(1 + \frac{S_n^V}{V_n}\right)v_{ni}, \quad (1)$$

де F_{ni}^1 – функція нев'язки матеріального балансу на n -й тарілці; l_{ni} і v_{ni} – відповідно потоки рідини й пари компонента i на тарілці n , які залишаються після бічних відборів; S_n^L – загальний відбір з рідкої фази з тарілки n ; S_n^V – загальний відбір з парової фази з тарілки n ; f_{ni} – потік живлення i -го компонента на n -у тарілку;

Рівняння теплового (ентальпійного) балансу мають вигляд:

$$F_n^2 = H_{n-1} + h_{n+1} + h_n^f - \left(1 + \frac{S_n^L}{L_n}\right)h_n - \left(1 + \frac{S_n^V}{V_n}\right)H_n, \quad (2)$$

де h_n – загальна енталпія потоку в рідкій фазі на n -й тарілці; H_n – загальна енталпія потоку в паровій фазі на n -й тарілці.

Рівняння, що описують умови фазової рівноваги рідина – пар, виведені з рівняння для визначення коефіцієнта корисної дії тарілок по Мерфрі η_{ni} , і мають вигляд:

$$F_{ni}^3 = \frac{\eta_{ni} K_{ni} V_n l_{ni}}{L_n} - v_{ni} + \frac{(1 - \eta_{ni}) v_{n-1,i} V_n}{V_{n-1}}, \quad (3)$$

де K_{ni} – коефіцієнт випаровування i -го компонента на n -й тарілці.

Коефіцієнт випаровування визначається на основі умови фазової рівноваги для кожного компонента суміші. Для розрахунку коефіцієнтів активності було використано рівняння УНІКВАК. Параметри молекулярної взаємодії УНІКВАК розраховувалися шляхом обробки експериментальних даних парорідинної рівноваги на основі принципу максимальної правдоподібності. При відсутності експериментальних даних параметри УНІКВАК визначалися за допомогою методу групових внесків УНІФАК. У моделі передбачено розрахунок як з корекцією парової фази, так і за умови ідеальної парової фази. У системі рівнянь (1) – (3) незалежними змінними є мольні компонентні потоки в рідкій і паровій фазах та температура на тарілках. Температура входить в рівняння для розрахунку енталпії потоків та в рівняння для розрахунку коефіцієнта випаровування. Рішення даної системи виконується за методом Ньютона – Рафсона. Мірою збіжності служить сума квадратів нев'язок на всіх тарілках.

Вхідними даними є: для розрахунку фазової рівноваги на кожній тарілці – властивості чистих компонентів та параметри молекулярної взаємодії; конфігурація колони (кількість тарілок; кількість живлень, номери тарілок живлень, агрегатний стан та склад живлень); номери тарілок відбору, агрегатний стан та величина відбору; тиск на тарілках; витрата пари, відбір дистиляту та ін. У результаті розрахунку одержуємо на кожній тарілці значення температури, компонентних потоків у рідині й парі, концентрації компонентів на кожній тарілці, у кубі, дистиляті, бічних відборах, енталпії вхідних і вихідних потоків у колоні, а також дані, що характеризують роботу колони: витрата й питома витрата гріючої пари, флегмове число, коефіцієнт витягу домішок тощо.

Розроблені математичні моделі були використані для оптимізації процесу ректифікації багатокомпонентних сумішей у виробництві етилового спирту з різних видів сировини. Так, для виробництва синтетичного етилового спирту було розроблено технологію ректифікації, за якої досягається повна очистка спирту від усіх супутніх домішок, у тому числі від такої специфічної як кротоновий альдегід, а також скоротити втрати спирту більш ніж на 5 % у порівнянні з відомими схемами ректифікації. Було розроблено нову схему ректифікації харчового спирту, що дозволяє поліпшити якість харчового спирту як за органолептичними, так і аналітичними показниками і при цьому зменшити втрати спирту до 0,5-1 % від абсолютноого спирту. Технологія дозволяє отримувати спирт високої якості з дефектної сировини (зерна та меляси), забезпечуючи видалення домішок, які повністю не видаляються за традиційною технологією (кротоновий альдегід, етилбутират, ізопропиловий спирт та ін.). Розроблено ефективну схему розгонки естеро-альдегідної фракції, а також схему ректифікації гідролізного спирту. Ряд розробок впроваджено у виробництво.

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ РЕКТИФІКАЦІЇ СПИРТО-ЕФІРНОГО РОЗЧИННИКА

Головченко В.М., *Буряков В.Г.

Черкаський державний технологічний університет,

*Інститут кібернетики ім. В. М. Глушкова НАН України, Vbur@yandex.ru

В основу математичної моделі процесу виділення діетилового ефіру із потрійної суміші покладено метод групових вкладів УНІФАК. За допомогою цього методу можливо із задовільною точністю розрахувати склади рівноважної з рідиною пари потрійної системи діетиловий ефір – етанол – вода.

Математична модель процесу являє собою систему алгебричних рівнянь, що дають можливість проведення потарілкового розрахунку. Системи рівнянь забезпечують визначення матеріальних потоків і концентрацій компонентів по висоті ректифікаційної колони і в кінцевих продуктах, а також склади рівноважної пари в залежності від складу рідкої фази на тарілках і тиску в колоні. Збіжність ітераційного процесу розрахунку колони забезпечували на основі методу Ньютона - Рафсона.

Розроблена математична модель ефірної колони (ЕК) дозволила дослідити вплив регулюючих (флегмове число) і конструктивних параметрів (кількість тарілок у виварній і концентраційній частинах колони) на ефективність виділення ефіру.

З метою вибору оптимальних технологічних і конструктивних параметрів проведено розрахунок ЕК, яка має 17 теоретичних тарілок (т. т.) з двома вводами живлення. 93 % основного потоку живлення з концентраціями ефіру 10 % об. і етанолу 8 % об. подавали в середню частину колони; а 7 % потоку живлення з концентраціями ефіру 96 об. % і етанолу 2,4 об. % подавали на верхню тарілку колони.

Ефірну колону розраховували при різному флегмовому числі (v) і при різних місцях вводу основного живлення, тобто при зміненні кількості тарілок у відгінній і концентраційній частинах колони.

Змінення флегмового числа від 0 до 4 привело до підвищення концентрації ефіру в дистиляті з 0,967 мол. частки до 0,993 мол. частки, концентрація ефіру збільшилась на 0,026 мол. частки по відношенню до відповідної концентрації при $v = 0$.

Це дозволило зробити висновок, що для досягнення концентрації ефіру в дистиляті 0,987 мол. частки (99,5 об. %), відповідно стандарту на ефір етиловий технічний, ЕК може працювати при $v = 2,0...2,5$.

Змінення флегмового числа викликало значний перерозподіл ефіру на тарілках колони. Але при будь-якому значенні v в концентраційній частині ЕК спостерігалась відносно постійна концентрація ефіру на верхніх тарілках. Вміст ефіру на них змінювався від 0,981 мол. частки при $v = 4$ до 0,878 мол. частки при $v = 0$. Значне змінення концентрацій ефіру спостерігалось лише на трьох нижніх тарілках концентраційної частини ЕК.

Змінення кількості тарілок у відгінній (від 2 до 11 т. т.) і концентраційній (від 6 до 15 т. т.) частинах колони також, як і змінення v , впливало на розподілення ефіру по висоті ЕК. При збільшенні кількості т. т. у виварній частині колони до 5 і більше спостерігалась зона постійної концентрації ефіру. Отже, для виснаження кубового залишку від ефіру достатньо мати 5 т. т. Аналогічно, в концентраційній частині ЕК також достатньо – 5 т. т.

Зниження флегмового числа значно зменшило витрату гострої пари на обігрівання ЕК. Так економія пари при зниженні v з 3,5 до 2,5 склала 15 %.

Додатковий ефект дав й переход до закритого обігрівання ЕК. При цьому знизилась кількість кубового залишку і підвисився в ньому вміст етанолу. Наприклад, при $v = 2,5$ з переходом на закрите обігрівання ЕК вміст етанолу в кубовому залишку підвисився на 0,9об.%. Це дасть зменшення витрати пари при виділенні етанолу в спиртовій колоні.

Результати дослідження з математичного моделювання й оптимізації процесу виділення діетилового ефіру із потрійної суміші в ефірній колоні використані при удосконаленні технологічного процесу ректифікації спирто-ефірного розчинника.

МОДЕЛЮВАННЯ ЗМІНИ ПАРАМЕТРІВ рН ТА Еh ВОДИ

Клепач М.І., Филипчук Л.В.

Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне,
kaf_electech@nuwm.rv.ua

Активна реакція (рН) та окисно-відновний потенціал (Eh) є узагальненими характеристиками водних середовищ, які використовуються для контролю за протіканням різноманітних хімічних реакцій при обробці води та створенні систем автоматизованого управління технологічними процесами очистки природних і стічних вод. Ці величини змінюються внаслідок дозування хімічних реагентів або змішування різних категорій стічних вод. Характер зміни величини рН і Eh залежить від природи забруднюючих та інших компонентів, що знаходяться у водному середовищі, та виду доданих реагентів [1].

Кількісно активна реакція середовища оцінюється показником рН, який залежить від концентрації водневих іонів:

$$pH = -\lg[H^+] \quad (1)$$

Величина Eh характеризує процеси окислення-відновлення, які обумовлюються переходом електронів від однієї частинки до іншої. Якщо у водному середовищі є декілька видів окисників і відновників, то в ньому проходить процес перерозподілу електронів по валентним станам. В результаті встановлюється динамічна рівновага, яка відповідає деякому "компромісному" окисно-відновному потенціалу (Eh), що визначається співвідношенням концентрацій окисленої (Ox_i) та відновленої (Red_i) форми будь-якої речовини:

$$Eh = E_0 + \frac{RT}{nF} \lg \frac{[Ox_i]^a}{[Red_i]^b}, \text{ мВ} \quad (2)$$

Тобто, узагальнений аналітичний та графічний характер можливої зміни величин рН та Eh води має логарифмічну залежність (рис.1).

Наведені графіки показують, що на кривій зміни рН (рис. 1 а) можна виділити три основних ділянки. На першій і третій ділянках (у граничних областях) зміна рН від кількості доданого реагенту протікає досить повільно. На середній ділянці (у переходній області) спостерігається різка зміна рН. Оскільки більшість хімічних процесів при очищенні природних та стічних вод протікає в переходній області рН від 2,5-3,0 до 11,0-11,5, то при змішуванні різних категорій вод або дозуванні хімічних реагентів контроль за величиною рН у цій області буде утруднений.

Зміна Eh (рис. 1 б) до точки еквівалентності обумовлюється редокс-системою відновника $Ox1 / Red1$. У точці еквівалентності протікає різка зміна (стрибок) потенціалу Eh, що вказує на повне окислення (а в зворотному випадку відновлення) речовини, що є у воді. Після точки еквівалентності Eh води визначається редокс-системою окисника $Ox2 / Red2$, яка має конфігурацію, подібну до першої системи. Фіксуючи стрибок потенціалу можна контролювати закінчення реакції окислення (відновлення) деякої речовини при додаванні його до іншого відновника (окисника).

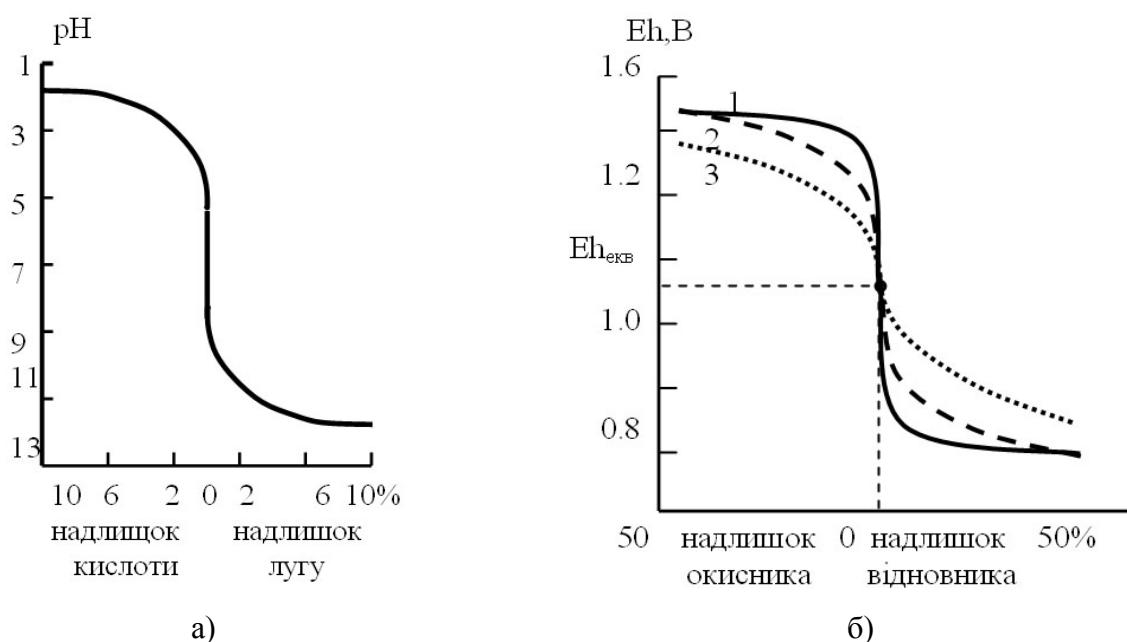


Рис. 1 Характер зміни pH (а) при змішуванні сильної кислоти та сильного лугу та окисно-відновного потенціалу (б) при потенціометричному титруванні окисника відновником і різниці нормальних електродних потенціалів (E_0) 0.7 В (1.2) і 0.3 В (3)

При регулюванні pH та Eh реальних водних систем (природних та стічних вод) зміна цих параметрів має значно складніший характер (рис. 2). Це пояснюється тим, що реальні водні системи мають буферну дію (буферність), яка пов'язана із наявністю у водній системі різних хімічних речовин, що можуть додатково реагувати з доданими реагентами (кислотами, лугами, окисниками, відновниками). Внаслідок цього pH та Eh водного середовища змінюються досить мало, що значно викривлює логарифмічний характер зміни цих величин.

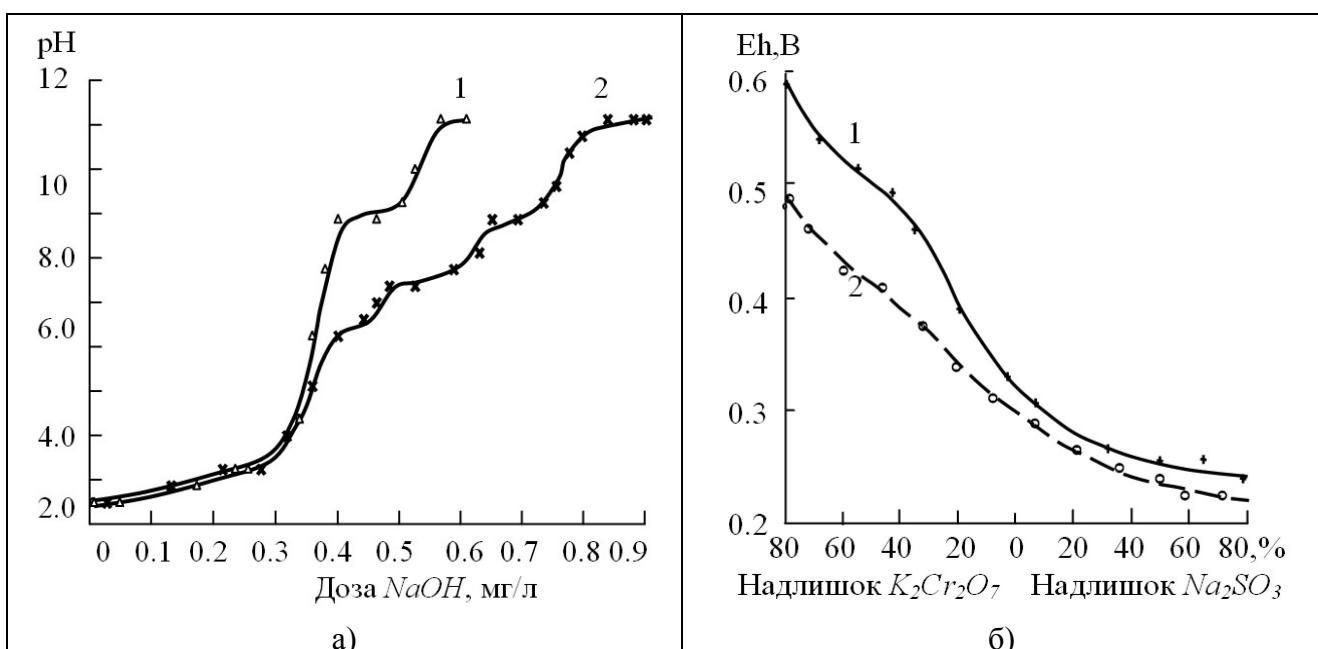


Рис. 2. Експериментальна залежність зміни pH (а) водних розчинів, що вміщують іони заліза(ІІІ) та нікелю (1) концентрацією 100 мг/л та суміші металів (2) від дози лугу, та Eh (б) розчину хрому(VI) при його відновленні за допомогою Na₂SO₃ при вихідній концентрації хрому(VI) 300 (1) і 50 (2) мг/л без стабілізації pH розчину.

Зокрема, величина буферної дії стічної води по pH визначається її буферною ємкістю (β), яка вимірюється кількістю сильного лугу або сильної кислоти (δ_0), яку треба додати до водної фази, щоб змінити pH середовища на одиницю:

$$\beta = \frac{d\delta_0}{dpH} \quad (3)$$

Буферна ємкість буде різною при різних діапазонах значень pH і буде залежати в першу чергу не від концентрації у воді водневих іонів, а від кислотності або лужності стічної або природної води.

Важливим фактором, що впливає на ефективність протікання хімічних реакцій, є повнота та швидкість змішування реагентів з водою. Змішувачі-реактори, що використовуються на вітчизняних та зарубіжних водоочисних станціях, можна розділити на чотири групи. Гіdraulічні, в яких змішування реагентів з водою досягається за рахунок енергії потоку води, що витрачається на підвищення його турбулентності (утворення вихрів). До цього виду відносяться перегородчасті, дірчасті, вихрові змішувачі, а також змішування у всмоктуючі або напірній трубі насосу та спеціальному патрубку з різними діафрагмами. Механічні, в яких турбулентність потоку підсилюється мішалками різноманітних типів (зокрема, пропелерними та лопатними), що приводяться в дію зовнішніми джерелами живлення. Пневматичні, в яких змішування реагентів з водою відбувається за рахунок створення турбулентності стислим повітрям. Комбіновані, які являють собою поєднання попередніх груп змішувачів-реакторів.

Для регулювання pH води можна застосовувати проточні і непроточні реактори. Проточні реактори використовуються при незначних флуктуаціях вихідних показників якості води, можливості регулювання pH і Eh в досить широкому діапазоні і використання реагентів малими надлишковими дозами. Непроточні реактори застосовуються при нестабільних вихідних показниках якості води, значній тривалості (більше 5-10 хвилин) протікання хімічних реакцій, при ступенево-дискретному регулюванні pH і Eh середовища, а також при необхідності періодичного лабораторного контролю за протіканням хімічного процесу.

При цьому можливе використання одно- та багатоступеневого регулювання. Одноступеневе застосовують тоді, коли можна обмежитись однією дозою реагенту для досягнення потрібного значення pH і Eh, багатоступеневе - при необхідності ступінчастого регулювання або порційного уведення хімічних реагентів

Математичні моделі змішувачів-реакторів механічного та барботажного типу розглядаються як апарати ідеального змішування, які враховують кінетику хімічної реакції

$$T_o \frac{dC_t}{dt} + C_t = K_y C_1 \quad (1)$$

або не враховують її

$$T_c \frac{dC_t}{dt} + C_t = C_1 \quad (2)$$

де T_c , T_o – сталі часу змішувача-реактора з врахуванням та без врахування кінетики хімічної реакції відповідно, C_t – поточна концентрація речовини в реакторі, C_1 – початкова концентрація речовини на вході в реактор, K_y – константа швидкості реакції.

Ці реактори у більшості випадків застосовуються у непроточному стані для обробки води, що вміщує високі концентрації забруднень, наприклад концентрати або елюати.

Для проточних режимів найчастіше використовують йоршові, перегородчасті та трубчасті змішувачі. Математичні моделі первих двох реакторів розглядаються як проміжний тип між апаратами ідеального змішування та ідеального витіснення, що мають властивості як тих, так і інших. Вони враховують зміну концентрації речовини з часом, турбулентність, зміну концентрації в результаті переносу та кінетику хімічної реакції.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - KC, \quad (3)$$

де $\frac{\partial C}{\partial t}$, $D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$, $v \frac{\partial C}{\partial x}$, KC - відповідно члени, що враховують зміну концентрації з часом, зміну концентрації внаслідок турбулентного перемішування, переносу (дифузії) та власне протікання самої хімічної реакції [2].

Математичну модель трубчастого змішувача із внутрішніми вставками також можна описати подібним рівнянням, оскільки їх гіdraulічний режим подібний до йоршового та перегородчастого змішувача.

Як видно з вищепередованої формули (3), основні фактори впливу на зміну концентрації реагенту, тобто власне іонів H^+ , можна поділити на гіdraulічні (перемішування та дифузія) та хімічні (хімічна взаємодія реагенту та розчину). Так як врахування гіdraulічних факторів на даний час досить глибоко досліджено і описане [1, 2], то пропонується більш глибоко дослідити вплив на зміну концентрації при дозуванні реагенту власне самої хімічної взаємодії речовин в реакторі саме з врахуванням буферності розчину.

Дане дослідження дозволить більш ефективно проводити регулювання pH та Eh води за рахунок комплексного врахування гіdraulічних та хімічних складових процесів, що відбуваються в змішувачах-реакторах.

На основі даної моделі (3) за допомогою програми FEMLAB з модулем Chemical було проведено комп'ютерне моделювання процесу змішування реагенту з водою в трубчастому змішувачі-реакторі. Розподіл pH у потоці води при змішуванні з реагентом має наступний вигляд (рис. 3).

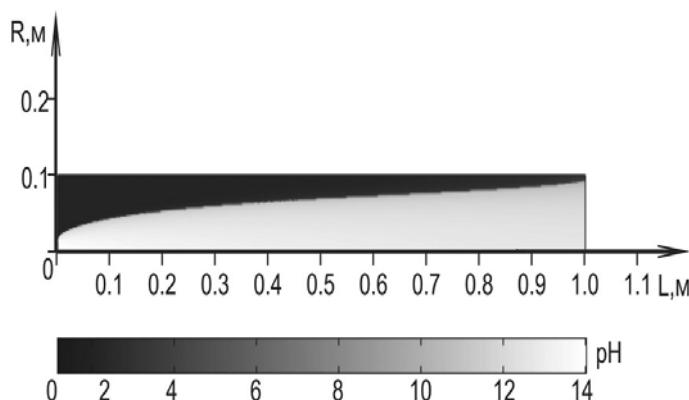


Рис. 3. Розподіл величини pH в об'ємі трубчатого змішувача-реактора

Здійснюючи імітаційне моделювання можна оптимізувати геометричні розміри реактора та значення технологічних параметрів до заданого ступеня завершеності процесу змішування. Конкретизувати значення D_L можна шляхом вирішення оберненої задачі.

- 1) Филипчук В.Л. Очищення багатокомпонентних металовміщуючих стічних вод промислових підприємств // Монографія. – Рівне: УДУВГП, 2004. – С. 24-34.
- 2) Гордин И.В., Манусова Н.Б., Смирнов Д.Н. Оптимизация химико-технологических систем очистки промышленных сточных вод // Ленинград. – „Хімія”. – 1977, - С. 57-65.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПОДІБНОСТІ ЛІКАРСЬКИХ ПРЕПАРАТИВ

Кондратов С.О., Савяк Р.П., *Сухіна Г.М.

Інститут хімічних технологій СНУ ім. В.Даля, kondratov@rune.lg.ua

*НВФ «Мікрохім»

При атестації та постановці на виробництво ліків необхідна процедура – встановлення подібності за тестом „розчинність” референтному зразку (стандартному препарату). Тест проводиться в умовах, що імітують діяльність шлунку і полягає в одержанні та порівнянні кривих розчинення таблеток генеричного та референтного препаратів. Але статистика подібності вивчена недостатньо, тому для порівняння використовують емпіричні методи, які не завжди обґрунтовані. Мета цієї роботи – вивчення статистики подібності шляхом комп’ютерного моделювання.

У контексті задачі подібність кривих розчинення полягає у встановленні їх однорідності, або наявності зсуву однорідних кривих у межах, що дозволені нормативними документами. Вважаючи, що реальний розподіл розчинності відрізняється від нормальног, за меру однорідності використана непараметрична рангова статистика Лемана-Розенблатта [1] для перевірки однорідності двох вибірок: x_1, x_2, \dots, x_{m_1} обсягом m_1 и y_1, y_2, \dots, y_{m_2} обсягом m_2 ($x'_1 < x'_2 < \dots < x'_{m_1}$ и $y'_1 < y'_2 < \dots < y'_{m_2}$ - відповідні варіаційні ряди):

$$A = \frac{1}{m_1 m_2 (m_1 + m_2)} [m_1 \sum_{i=1}^{m_1} (r_i - i)^2 + m_2 \sum_{j=1}^{m_2} (s_j - j)^2] - \frac{4m_1 m_2 - 1}{6(m_1 + m_2)}, \quad (1)$$

де r_i - ранг x'_i і s_j - ранг y'_j в загальному варіаційному ряді, що побудований по об'єднаної вибірці. При $m_1 = m_2 = m$ вираз приймає вид:

$$A = \frac{1}{2m^2} [\sum_{i=1}^m (r_i - i)^2 + \sum_{j=1}^m (s_j - j)^2] - \frac{4m^2 - 1}{12m} \quad (2)$$

Оскільки у нашої задачі необхідно порівнювати декілька вибірок, запропоновано модифікований критерій Лемана-Розенблатта:

$$AS = \frac{1}{n} \cdot \sum_{k=1}^n A(t_k) \quad (3)$$

де $A(t_k)$ – величина критерію (2) за даними з розчинності m зразків за період часу t_k ($k = 1, 2, \dots, n$).

Розроблено процедуру генерації таблиці значень критерію AS методом Монте-Карло. Встановлено, що для $m > 6$ величина AS не залежить від m , а визначається тільки кількістю серій випробувань в часі (n) і рівнем значимості. Розроблено процедуру встановлення наявності зсуву однорідних вибірок та оцінки його величини.

Розроблений підхід використано для встановлення подібності профілів розчинення референтного препарату Аспірин (фірма Bayer, Німеччина) і препарату-генерику Аспірин-Кардіо виробництва НПФ „Мікрохім” (м. Рубіжне). Обидва покриті полімерною оболонкою, що запобігає розчинності у кислому середовищі шлунку, але яка легко розчиняється у кишковому тракті при $pH > 6$. Встановлено, що криві розчинності обох препаратів при $pH = 1.2, 4.5$ та 6.8 є подібними: усі вибірки у часі є однорідними з поправками на зсув. Останній знаходитьсь у межах нормативних показників. Це дозволяє зробити висновок про доцільність використання статистичної процедури встановлення подібності профілів розчинення у практичної фармакології.

- 1) Прикладная статистика. Учебник. / А.И.Орлов.- М.: Издательство «Экзамен», 2004. – 656 с.

ВИЯВЛЕННЯ НАЙБІЛЬШ ВПЛИВОВИХ ФАКТОРІВ ПРОЦЕСУ ІЗОМЕРИЗАЦІЇ В УМОВАХ ВИРОБНИЦТВА

Кондратов С.О., *Сидоренко О.В.

Інститут хімічних технологій СНУім. В.Даля , kondratov@rune.lg.ua

*ЗАТ „Северодонецький ОРГХІМ”,

Кatalітична ізомеризація легких бензинових фракцій – один з головних процесів нафтохімічного синтезу, що використовується для виробництва пального. Це є сучасним багатотоннажним виробництвом, що працює під керівництвом ЕОМ. У процесі роботи ЕОМ контролює більше, ніж 100 показників, підтримуючи їх у регламентних межах. Але в умовах пусконалагоджувальних робіт виникають проблеми, що пов’язані з великою кількістю параметрів, які треба виводити на режим. Тому виявлення обмеженої кількості факторів, що є найвпливовішими у технологічному процесі, є актуальною задачею.

Розроблено підхід для виявлення найвпливовіших факторів, що заснований на методі головних компонентів [1]. Сутність методу полягає в тому, що на основі великого масиву даних стосовно значень вхідних параметрів, що збираються комп’ютером у процесі пусконалагоджувальних робіт, будеться кореляційна матриця. Далі розраховують власні значення кореляційної матриці з яких знаходяться кількість головних компонентів (N), що дають головний внесок у загальну дисперсію (обраний рівень: 90 %). Потім шляхом розрахунків усіх можливих комбінацій кореляційних матриць, побудованих на базі N параметрів, розрахунків їх власних значень обираємо ті комбінації, що дають найбільші значення визначників кореляційної матриці. За допомогою побудови бутстреп розподілу можливо виявляти сталу комбінацію факторів, що є найбільш впливовими та лінійно незалежними. Їх можна використовувати, як базові для управління у процесі виводу установок на сталий режим.

Використання даного підходу продемонстровано на прикладі стадії підготовки сировини у процесі ізомеризації за результатами пусконалагоджувальних операцій на одному з нафтохімічних підприємств. На цій стадії комп’ютер контролює значення 21 параметрів, величини яких фіксуються кожні 10 секунд. Загальний обсяг спостережень, що зафіксовано комп’ютером кожні 10 секунд, становив 10000.

За допомогою згаданого підходу було встановлено, що з 21 вхідного параметру реальна кількість лінійно-незалежних факторів, які вносять не менше 90 %- у загальну дисперсію, складає всього 6. Ці фактори були встановлені шляхом, що був згаданий вище.

Розроблено метод графічної візуалізації багатовимірних поверхонь відгуку у задачах оптимізації [2]. Він заснований на:

- генерації великої кількості випадкових значень цільової функції у межах області визначення,

- одержання зображень у виді точкової множини у координатах „фактор-відгук”,

- побудові опуклої оболонки точкової множини, що є апроксимацією проекції граничної лінії у координатах „фактор-відгук”,

- аналізі типових ситуацій граничних ліній, що оримані.

На прикладі результатів дослідження процесу ізомеризації в умовах пусконалагоджувальних робіт показано, що цей метод можна використовувати для оцінки оптимальних значень найвпливовіших факторів, якщо використовувати великі масиви даних, що містять не тільки фактори, але й змінні-відгуки тощо.

- 1) Ким Д.-О., Мьюллер Ч.У., Клекка М.С и др. Факторный, дискриминантный и кластерный анализ. – М.: Финансы и статистика, 1989. – 215 с.
- 2) Кондратов С.А. Растворная визуализация области оптимума многомерных зависимостей //Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля, 2007, № 11 (117), ч.2 – С. 79-84

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ СИНТЕЗУ АМІАКУ

Концевой А.Л., Концевой С.А.

Національний технічний університет України «КПІ», kontsev@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Технологічна схема синтезу аміаку є циркуляційною, що передбачає введення свіжого газу, синтез і конденсацію аміаку, продувку системи з метою виводу інертних газів . При цьому частина всіх присутніх газів розчиняється в рідкому аміаку.

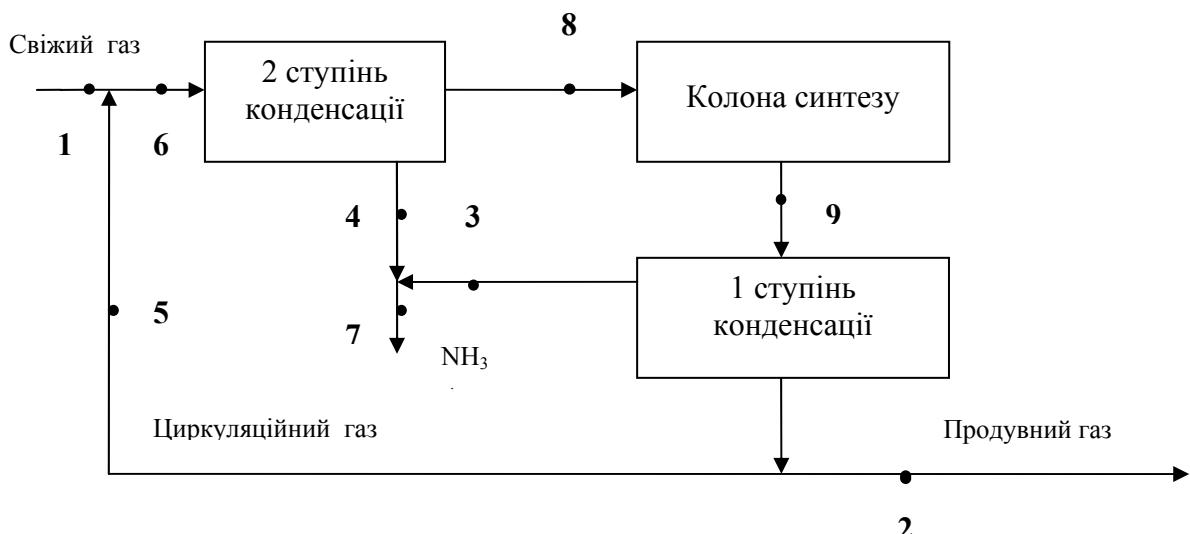


Рис. 1. Схема матеріальних потоків в установці синтезу аміаку

Велика кількість невідомих і змінних величин при розрахунку матеріального балансу згідно моделі [1] вимагає організації ітераційних циклів відносно кількох параметрів. Нами адаптовано алгоритм [2], який передбачає складання системи 13 рівнянь, що в свою чергу дозволяє отримувати шукані значення 13 параметрів матеріального балансу. Цей алгоритм реалізовано програмно на QBasic [3], а також в середовищі Visual Basic for Applications. З точки зору користувача отримано програмні продукти, що є зручними для багатоваріантних розрахунків. Не кожний студент-хімік здатен запрограмувати такий складний розрахунок, але кожний п'ятикурсник здатен зробити це в середовищі MathCad. З метою отримання *власного* програмного продукту для рішення системи рівнянь студентами використається саме математичний пакет MathCad, який не вимагає спеціальних навичок програмування на відміну від пакетів, що потребують знань алгоритмічної мови.

Алгоритм реалізується наступним чином: завдання вихідних даних, виконання попередніх розрахунків, завдання 13 початкових наближень, рішення системи 13 рівнянь з 13 невідомими за допомогою операторів Given та Find, складання таблиць матеріального балансу для дев'яти точок схеми матеріальних потоків. Важливо те, що реалізація цього розрахунку вимагає від студента поєднання знань і вмінь в технологічному і програмному аспектах. Отриманий програмний продукт може використовуватися в проектних розрахунках і для аналізу роботи реальної схеми синтезу.

За браком місця тексти алгоритму і програми в середовищі MathCad не наведено, їх можна безкоштовно замовити за вказаною вище електронною адресою.

- 1) Методи розрахунків у технології неорганічних виробництв (ч.1. Зв'язаний азот) / Лобойко О.Я., Товажнянський Л.Л., Слабун І.О. та ін. – Харків: НТУ «ХПІ», 2001.-512 с.
- 2) Жидков Б.А., Бондарь А.Г. Алгоритмизация расчетов в химической технологии. Киев: Вища школа, 1970. - 272 с.
- 3) Алгоритмизация расчётов в производстве аммиака: Учеб.пособие / А.Л. Концевой, Н.П. Гамалей. – Киев: УМК ВО, 1991. – 104 с.

ФОРМУВАННЯ РЕГУЛЮЮЧОГО ВПЛИВУ НА КОМБІНОВАНІ СИСТЕМИ ОЧИЩЕННЯ СТІЧНИХ ВОД

Корчик Н.М., Яцков М.В., Бєлікова С.В.

Національний університет водного господарства та природокористування

В зв'язку з актуальністю проблеми вторинного використання ресурсів, особливого значення набуває системний підхід до вивчення головного виробництва в комплексі з очисними спорудами, у тому числі і рідких відходів (стічних вод).

Системне дослідження машинобудівної та металооброблювальної промисловості показали, що ступінь його негативної дії на навколишнє середовище займає одне з перших місць[1].

В зв'язку з цим являється актуальним вивчення регулюючих впливів як на головні системи виробництва, для зменшення витрат реагентів на вході та виході, так і на систему очисних споруд для повного знешкодження компонентів стічних вод від різноманітних операцій, а також їх утилізації та регенерації.

Результати дослідження формування стоку і наступних змін концентрації забруднюючих речовин на очисні системи за окремими операціями показані на рис 1 і рис 2.

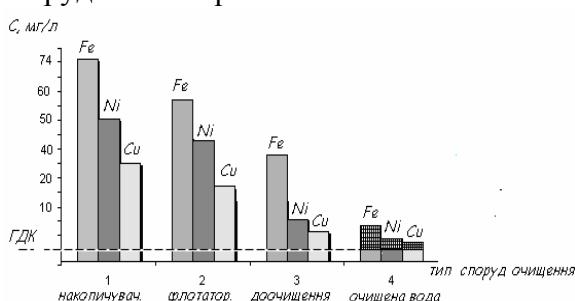


Рис. 1. Ефект очищення стічних вод гальванічного виробництва при залповому скиді ВТР

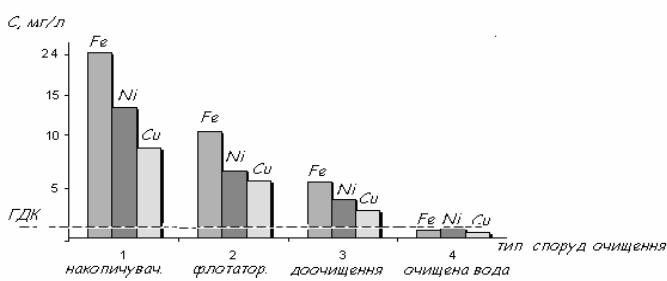


Рис. 2. Ефект очищення стічних вод гальванічного виробництва в залежності від операцій промивок

З наведених даних виходить, що система очищення проточного типу для промивних вод (які поступають безперервно), у випадку скиду технологічних розчинів (які поступають періодично), не забезпечує необхідний ефект очищення навіть у випадку витрати необхідної дози реагентів, що обумовлене відмінністю фізико-хімічних властивостей розведених та концентрованих розчинів.

Промивні води за концентраціями основних компонентів відносяться до категорії розведених розчинів (зона Дебая-Хюкеля), а технологічні розчини і суміш промивних вод та технологічних розчинів (у випадку їх залового скиду) відносяться до категорії концентрованих розчинів (зона до межі, а також на межі повної гідратації) [2].

Тому виявляється необхідним розглядати комбіновану систему очищення стічних вод, яка включає знезараження, регенерацію, утилізацію відпрацьованих технологічних розчинів (ВТР) в періодично діючих локальних циклах, та очищення промивних вод в безперервно діючих (або на півбезперервно діючих) централізованих системах з попередньо спільно обробленими ВТР.

Відомо, що комбіновані системи повинні включати уніфіковані елементи обробки та відповідне обладнання [2]. Як свідчать результати аналізу існуючих способів переробки стічних вод, найбільш широке розповсюдження отримали хімічні методи з метою нейтралізації, осадження та спів-осадження, відновлення-окиснення, регулювання складу стічних вод. При цьому слід відмітити, що найбільш практично і теоретично обґрунтовані методи контролю процесів хімічного перетворення за значеннями параметрів pH та Eh, та регулювання систем очищення зміною витрати реагентів та часу, які гарантують забезпечення завершення реакції. Тому метою наступних експериментальних і теоретичних досліджень було

встановлення оптимальних параметрів очищення шляхом регулювання витрат реагентів (часу) для стічних вод різної концентрації та різноманітного хімічного складу.

Для вирішення поставленого завдання, на основі сучасних положень теорії розчинів електролітів та експериментальних даних визначені коефіцієнти активності основних йонів стічних вод в залежності від операцій покриття та підготовки поверхонь, що дозволяє розрахувати ізотерми осадження для гідроксидів міді, нікелю, заліза та скласти математичні моделі, які дозволяють визначити ефект очищення відповідних компонентів в залежності від значення pH при різних концентраціях (роздедені і концентровані розчини).

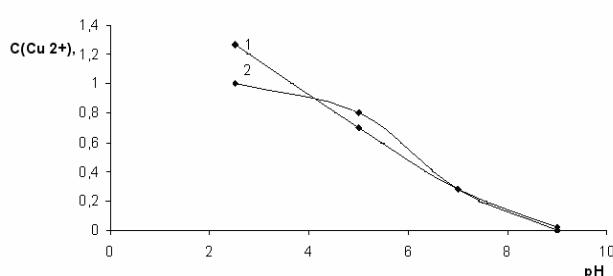


Рис. 3. Концентрація міді в розчині при різних значеннях pH (вихідний розчин C (Cu²⁺) – 1 г/л):

- 1 –за розрахунковими даними,
2 – за експериментальними даними

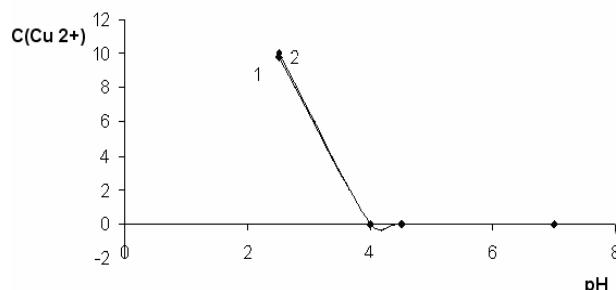


Рис. 4. Концентрація міді в розчині при різних значеннях pH (вихідний розчин C (Cu²⁺) – 10 г/л):

- 1 –за розрахунковими даними,
2 – за експериментальними даними.

Таблиця 1 – Класифікація кислих та лужних стічних вод від різних операцій гальванічного виробництва по типу функціональної схеми їх обробки.

Група	Назва операцій	pH	Витратний коефіцієнт
I	1). анодування сірчанокисле	> 5	B= 1
	2). анодне оксидування		
	3).активування		
	4). декапування		
	5). травлення алюмінію		
II	1). розчин освітлення цинку	7	B<1
	2). розчин нейтралізації		
	3).оксидування міді		
	4). електрохімічне знежирення		
III	1). зняття нікельного покриття	не < 10	B>1
	2). розчин освітлення алюмінію		

На основі сучасних уявлень про структуру водних розчинів та експериментальних досліджень витрат реагентів встановлені коефіцієнти витрати (визначені теоретичною витратою як частка від ділення на практичні витрати) для стічних вод в залежності від різних операцій підготовки та покриття в гальванічному виробництві, що дозволяє виділити певні групи стічних вод, для яких апаратурне оформлення з точки зору оптимальних умов, буде ідентичним.

За допомогою отриманих залежностей можна здійснювати оперативне визначення основних статичних та динамічних характеристик, для забезпечення управління технологічною системою очищення стічних вод гальванічного виробництва, визначити необхідну кількість реагентів в залежності від матеріальних потоків, передбачити хід та характер хімічної взаємодії в вищестоячій системі „стічні води - ВТР”.

- 1) Петрович Й.М., Захарчин Г. М. Організація виробництва. – Львів: „Магнолія +”, 2006. - 400с.
- 2) Гордин И.В., Манусова Н.Б., Смирнов Д.Н. Оптимизация химико-технологических систем очистки сточных вод.- Л.: Химия, 1977, - 176с.

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ ВИПАРОВУВАННЯ В РОТОРНОМУ ПЛІВКОВОМУ АПАРАТІ

Ладієва Л. Р., Анохіна Є. О.

Національний технічний університет України «КПІ», Ladieva_lr@users.ntu-kpi.kiev.ua

Розглядається пошаровий метод розрахунку математичної моделі процесу випаровування у роторному плівковому апараті з жорстко закріпленими лопастями. Обігрів апарату може складатися з декількох (до чотирьох) секцій. У сорочку обігріву корпусу апарату подається гріюча пара.

Розроблена математична модель динаміки процесу випаровування у роторному плівковому апараті [1], яка враховує розподіл температури розчину і концентрації упареної речовини по висоті апарату. При моделюванні процесу виділені такі акумулюючі ємкості:

- парова сорочка;
- плівка розчину;
- корпус апарату;
- ємкість вторинної пари.

Гріюча пара стикаючись зі стінкою корпусу апарату, температура якої нижче температури насичення, конденсується у вигляді плівкового конденсату. Процес тепловіддачі залежить від товщини шару конденсату і характеру його руху, що змінюється по висоті парової сорочки [2]. Коефіцієнт масовіддачі від поверхні плівки до вторинної пари є також змінним по висоті апарату і залежить від гідродинаміки і режимних параметрів.

При розрахунку математичної моделі процесу випаровування враховано зміну цих коефіцієнтів по висоті секції обігріву.

Система рівнянь розв'язувалась числовим пошаровим методом. Алгоритм розрахунку має наступний вигляд:

1. Задано температури пари, стінки корпусу, розчину і концентрації розчину у вхідному перерізі.

2. На наступному кроці визначається коефіцієнт тепловіддачі від пари до стінки корпуса α_1 , коефіцієнт масовіддачі β_p в залежності від висоти. За рівнянням статики знаходився коефіцієнт тепловіддачі від стінки корпуса до плівки розчину α_2 . Розраховуються нові значення температури і концентрації з рівнянь динаміки процесу.

3. Далі розрахунки повторюються для кожного наступного кроку.

Розрахунок проведено послідовно для чотирьох секцій обігріву. Впровадження пошарового методу розрахунку математичної моделі процесу випаровування у роторному плівковому апараті з жорстко закріпленими лопастями на основі вказаного алгоритму, дає можливість враховувати залежність коефіцієнту тепlop передачі α_2 плівки від висоти апарату, що істотно уточнює результати.

- 1) Ладієва Л.Р., Горський Ю.В. Оптимальне керування плівковим апаратом роторного типу // Автоматизація виробничих процесів. – 2000, №1 (10), с. 41 – 43.
- 2) М.А. Михеев. Основы теплопередачи. – М.-Л.: ГЭИ, 1956. – 390 с.

ПОБУДОВА рК - СПЕКТРІВ СИНТЕТИЧНИХ ГУМІНОВИХ РЕЧОВИН ЗА ДАНИМИ ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНОГО ТИТРУВАННЯ

Литвин В.А., Галаган Р. Л.

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, garol@ukr.net

Для характеристики складних протолітичних систем авторами [1] було запропоновано метод рК-спектроскопії, суть якого полягає в одержанні неперервної функції розподілу молярної частки іоногенних груп за величиною рК. У першому наближенні протолітичні властивості поліелектроліту можна подати як властивості суміші N одноосновних кислот. Тоді крива титрування такої суміші буде описуватися рівнянням

$$\frac{[H^+]-K_w/[H^+]}{V_0}(V_0+V)+\frac{c_t V}{V_0}=c_0 \sum_{j=1}^N q_j \frac{K_j}{K_j+[H^+]} \quad (1)$$

Для протолітичної системи з довільною функцією розподілу рівняння (1) переходить у інтегральне рівняння Фредгольма першого роду

$$\frac{[H^+]-K_w/[H^+]}{V_0}(V_0+V)+\frac{c_t V}{V_0}=c_0 \int_{-\infty}^{+\infty} q(pK) \cdot \frac{K}{K+[H^+]} \cdot d(pK) \quad (2)$$

де q – молярна частка кислотних груп, рК яких належать інтервалу $d\text{pK}$.

Розв'язування як рівняння (2), так і системи (1), що апроксимує його для випадку дискретного розподілу значень рК, належить до некоректних задач, у зв'язку з чим авторами (1,2) вводилося обмеження на невід'ємність розв'язку $q \geq 0$.

За фізичним змістом величина q пропорційна буферній ємності системи у будь-якій точці кривої титрування, і, отже може виражатися загальним рівнянням буферної ємності (3)

$$\beta_i = 2,303 \cdot \left(\left[10^{-\text{pH}} + 10^{(\text{pH}-14)} \right] + \sum_{i=1}^n \frac{(c_0)_i \cdot K_i}{(K_i + 10^{-\text{pH}})^2} \right) = (\beta_1 + \beta_3 + \beta_2) \quad (3)$$

яке одержують комбінуванням виразів для $K_{\text{дис}}$ протоліту, іонного добутку води, електронейтральності системи та збереження кількості речовини протоліту. Це рівняння містить суму трьох β -функцій від концентрації H^+ . Розподіл за рК іоногенних груп досліджуваного протоліту можна знайти застосувавши варіаційний принцип при заданому рівномірному кроці зміни K (крок базису), оптимальне значення якого, пропоноване авторами (2) рівне $0,25 \cdot K$, що дає 20 опорних розрахункових точок на інтервалі pH[2;14]. Ця модель є надзвичайно зручною для теоретичного дослідження поведінки складних протолітичних систем.

Нами запропоновано алгоритм прямого обчислення буферної ємності системи за даними потенціометричного титрування, коли функція $\beta(\text{pH})$ розраховується як відношення скінчених різниць $\Delta V / \Delta \text{pH}$, після попереднього згладжування експериментальних даних за методом зваженого середнього. Дані знімаються програмою зчитування даних безпосередньо з pH - метра автоматичного титратора і зберігаються у текстовому файлі, що може опрацю-вуватись спеціально розробленим MathCAD-документом. Для побудови рК - спектру використовується функція $\beta_2(\text{pH})$, де $\beta_2 = A \cdot |\beta - (\beta_1 + \beta_3)|$. Нормуючий множник A визначається з умови

$$A \int_{\text{pH}_1}^{\text{pH}_2} \beta_2(\text{pH}) \cdot d\text{pH} = 1 \quad (4)$$

де pH_1 і pH_2 – точки мінімуму функції β_2 відповідно з лівого та правого краю області зміни pH.

У роботі представлені рК - спектри деяких, синтезованих нами аналогів природних гумінових речовин (гумінових і фульвокислот), одержані з використанням описаного підходу.

- 1) Leuenberger B. Schindler P.W. Application of integral pK-spectrometry to the titration curve of fulvic acid //Anal. Chem., 1986, 58, №7, pp 1471 – 1474.
- 2) Гармаш А.В., Устинова И.В., Кудрявцев А.В., Воробьев О.Н. и др. Потенциометрический анализ сложных протолитических систем методом рК-спектроскопии с использованием линейной регрессии. // ЖАХ, 1998, 53, № 3, С.241-248.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ПЕРЕРОБКИ ПІСЛЯСПИРТОВОЇ БАРДИ

Швець Д.І.*, Сангінова О.В., Максимчук С.Л.

*Інститут сорбції та проблем ендоекології НАНУ,

Національний технічний університет України «КПІ», kxtp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Проблема переробки відходів спиртової промисловості є надзвичайно актуальну в Україні, оскільки існуючі способи утилізації відходів із використанням бардосховищ мають негативні екологічні і соціальні наслідки.

В роботі запропоновано технологію, яка передбачає переробку післяспиртової барди в готовий сухий дріжджовий кормоконцентрат (ДКК). Цей продукт є основою комбікорму для годівлі сільськогосподарських тварин і птаха; по біологічній цінності він значно перевищує суху барду.

Одним з ефективних шляхів пошуку оптимальних режимів технологічних процесів є застосування програм-симулаторів, серед яких найбільш поширеними є Hysys, Unisim, ChemCad та деякі інші. Математичні моделі в таких програмах складаються з бібліотечних блоків, кожен з яких моделює якусь частину процесу – апарат, потік або регулятор, тобто користувачу не потрібно розробляти моделі окремих елементів технологічної схеми.

Розглянемо моделювання процесу виробництва ДКК із післяспиртової барди у середовищі ChemCad. На першому етапі потрібно задати всі хімічні компоненти, які присутні в процесі, і вибрати термодинамічний пакет, у відповідності до якого будуть розраховуватися фізико-хімічні властивості компонентів.

На другому етапі з бібліотеки обираються стандартні компоненти і визначаються параметри кожного з блоків. В бібліотеці ChemCad присутні багато блоків, однак, користувач може за необхідності створити самостійно так званий псевдокомпонент з заданими хіміко-фізичними властивостями.

Принципова технологічна схема виробництва ДКК із післяспиртової барди у середовищі ChemCad представлена на рис. 1.

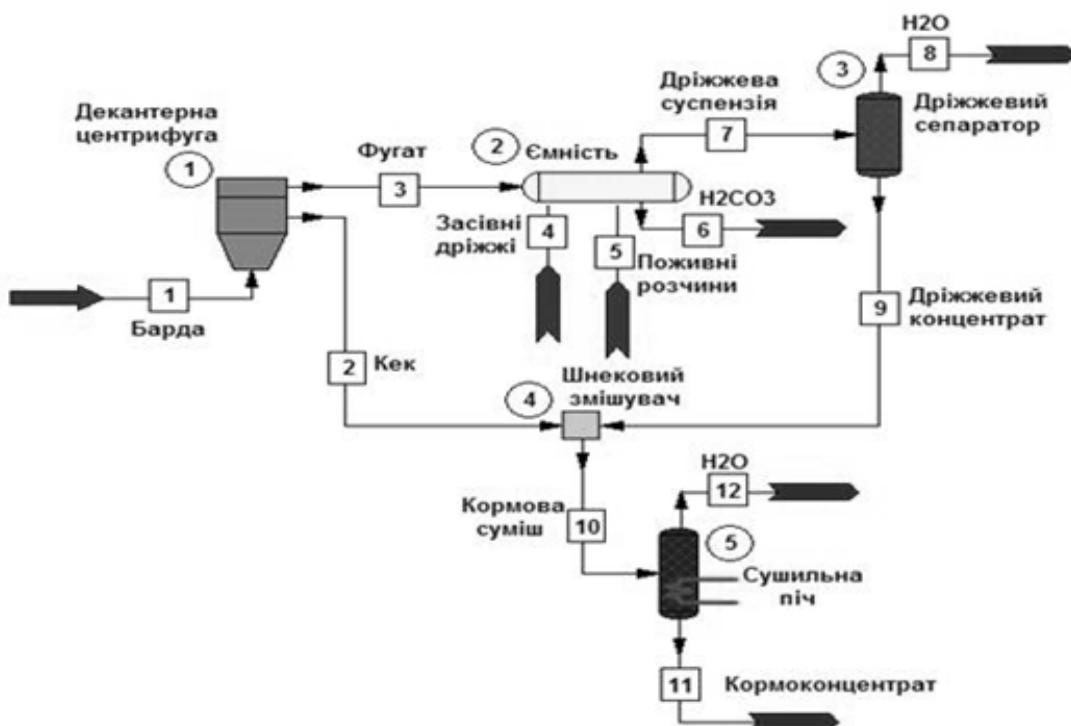


Рис. 1. Апаратна схема процесу у середовищі ChemCad

На схемі гаряча барда надходить у центрифугу (*декантер*), де розділяється на тверду (*кек*) і рідку фазу (*фугат*). Кек надходить на транспортер і далі в змішувач. Фугат насосом перекачується у ферментатор. Туди ж уводяться засівні мікроорганізми. Із ферментатора дріжджева суспензія подається на сепаратор, де відбувається відділення рідини від дріжджів. Відсепаровані дріжджі подаються у змішувач, куди також подається кек із центрифуги. Кек із центрифуги шнековим транспортером подається в змішувач. Туди ж надходять і відсепаровані дріжджі. Кек і дріжджі змішуються в шнековому змішувачі. Потім суміш надходить транспортером у сушильну піч. У сушильній печі відбувається остаточне сушіння продукції. Після чого кормоконцентрат подається або на відвантаження споживачам, або на ділянку затарювання й далі на склад.

Після вибору компонентів можна перейти безпосередньо до моделювання процесу, розрахунку матеріального балансу, пошуку оптимального складу встакування і його характеристик, а також оптимальних режимів технологічного процесу.

Пошук оптимального складу встакування і режимів технологічного процесу виконується для конкретного виробництва окремо.

Результати моделювання подані у табл. 1.

Таблиця 1 – Матеріальний баланс схеми

Речовини (кг/год) / Потоки		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	Зважені сухі речовини	510	510	0	0	0	0	0	0	0	510	510	0
2	Розчинені сухі речовини	690	25	666	0	0	0	666	0	666	690	690	0
3	H ₂ O	13800	486	13314	90	60	0	13464	13464	0	486	0	486
4	Дріжджі	0	0	0	30	0	0	30	0	30	30	30	0
5	Сухі розчини	0	0	0	0	40	0	40	0	40	40	40	0

Повний матеріальний баланс (кг/год)

	Вхід	Вихід
H ₂ O	13950.000	13950.000
H ₂ CO ₃	0.000	0.000
Yeast	30.000	30.000
Weighed	510.000	510.000
Dissolved	690.000	690.000
dry	0.000	0.000
Сума	15180.000	15180.000

Застосування програм-симуляторів дозволяє знаходити оптимальні параметри обладнання й технологічних режимів без значних затрат часу, і зробити технологічний процес переробки барди досить дохідною ділянкою виробництва спирту.

ВИКОРИСТАННЯ КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ДЛЯ РОЗРАХУНКІВ В КІЛЬКІСНОМУ АНАЛІЗІ

Яровий Р.В., Солодовнік Т.В.

Черкаський державний технологічний університет, soltav07@rambler.ru

Стрімкий розвиток комп'ютерних технологій дає можливість застосувати їх у будь-яких галузях, навіть там де раніше вони не застосовувались. За допомогою спеціально розроблених комп'ютерних програм можливо спростити рутинні багаточасові операції по обробці результатів будь-якого хімічного експерименту, а також дає можливість продемонструвати процес розрахунку більш наглядно і зрозуміло, ніж використання підручників, методичних розробок, посібників.

Основним завданням даної роботи є використання комп'ютерних технологій для спрощення вибору методики в кількісному аналізі, обрахунку результатів, побудування допоміжних засобів (наприклад графіків) та використання навчаючих елементів, таких як розгорнута система допомоги та візуалізація результатів. До складу розробленого нами програмного комплексу входять два модулі, які відповідають за систему обчислень в гравіметричному та титриметричному аналізі. Кожен з цих модулів має перелік конкретних типів аналізу, які можуть бути обчислені. Планується інтеграція універсального алгоритму, який би забезпечив розрахунок незалежно від вхідних параметрів. Дляожної функції модуля присутня довідникова інформація про технологію аналізу та принцип його обрахунку, також є можливість для крокового виконання обчислень з метою більшої наочності, що є дуже корисним для використання студентами. Також планується інтеграція періодичної системи елементів у вигляді бази даних для універсалізації процесу введення вхідних даних.

Програма розповсюджується у вигляді дистрибутиву, має простий та зрозумілий інтерфейс, як звичайні доданки Windows, сумісна з версією XP та Vista. Вимоги до апаратної частини комп'ютерів повторюють вимоги до вище названих операційних систем.

Впровадження даного програмного комплексу в програму курсу „Аналітична хімія та інструментальні методи аналізу” дозволить студентам будь-яких хімічних спеціальностей при вивчені кількісного аналізу на конкретному прикладі наглядно представити весь процес розрахунку і скористатися даним комплексом для обробки одержаних результатів.

ВИКОРИСТАННЯ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ ДЛЯ ІДЕНТИФІКАЦІЇ ІНЕРЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ОБ'ЄКТІВ

Ярощук Л.Д., Ярощук І.В.*, Борозенець Н.В.

Національний технічний університет України “КПІ”, Київ, Vicleon@i.ua

*Московський державний гірничий університет, Irvic1@mail.ru

Нейронні мережі (НМ) є новим напрямком ідентифікації технологічних об'єктів керування. Його реалізацію та дослідження досить ефективно виконують за допомогою математичного процесора MatLab. Створення нейронної моделі вимагає певного досвіду на етапах визначення структури мережі та формування даних для її навчання.

У роботі розглянуто використання НМ для ідентифікації технологічного об'єкта з суттєвим транспортним та ємнісним запізнюваннями, показники якості продукції якого визначають лабораторно.

При розробці НМ визначають її початкову структуру і виконують навчання цієї структури на масиві даних, отриманому при випробуваннях реального об'єкта. Після

навчання модель перевіряють на додатковому, тестовому масиві даних. Таким чином, загальний масив для входів X і виходів Y моделі складається з навчальної ($X_{\text{навч}}$, $Y_{\text{навч}}$) та тестової ($X_{\text{тест}}$, $Y_{\text{тест}}$) частин [1]. Обидві частини повинні бути репрезентативними.

У розглянутому об'єкті було виділено 7 вхідних і 2 вихідні змінні. Згідно з теорією навчання НМ для відповідної кількості зв'язків потрібно більше сотні даних. Для надто інерційного об'єкта в умовах реального виробництва таку кількість інформації одержати неможливо.

Автори застосували наступний спосіб формування масивів для навчання й тестування нейронної мережі. Отриманий на об'єкті експериментальний матеріал був підданий традиційному статистичному аналізу: визначені типи законів розподілу ймовірностей вхідних і вихідних змінних; оцінені їхні математичні сподівання й дисперсії; розраховані коефіцієнти парної кореляції; створені регресійні моделі $Y_1=f_1(X)$ та $Y_2=f_2(X)$, перевірені їхні адекватності і виконаний аналіз залишків[2].

За допомогою стандартних функцій MatLab були отримані числові послідовності заданої довжини з параметрами, що відповідають реальним вхідним змінним. Таким чином був сформований масив вхідних змінних навчальної вибірки $X_{\text{навч}}$.

Ця чисрова послідовність була подана на кожну з моделей, що дозволило отримати розрахункові значення $Y_i=f_i(X_{\text{навч}})$, $i=1,2$. На виходи моделей додатково накладали “шум”, який відповідав дисперсіям згаданих раніше залишків.

До результатів цієї комп'ютерної імітації додали експериментальні дані, сформувавши масиви вихідних змінних $Y_{\text{навч}}$ відповідної довжини. Масиви ($X_{\text{тест}}$, $Y_{\text{тест}}$) складалися також із сукупності експериментальних та імітованих даних.

Запропонований алгоритм підготовки даних дозволив одержати й дослідити нейросітєві моделі міцності та водопоглинання керамічної цегли на виході тунельної печі. Запропонований авторами підхід може бути використаний для створення стартових нейросітєвих моделей інерційних технологічних об'єктів керування.

- 1) Уоссермен Ф. Нейрокомп'ютерная техника: Теория и практика. – М.: Мир, 1992 – 237с.
- 2) Жученко А.І., Ярощук І.В. Математичне моделювання деяких якісних показників керамічної цегли // Наукові вісті НТУУ “КПІ”.- 2002.-№4.-с.121-127.

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ МАГНІТНОГО ОЧИЩЕННЯ РЕЧОВИН ВІД ДОМІШОК

Яцков М.В., Мисіна О.І.

Національний університет водного господарства та природокористування,
oksana_mysina@inbox.ru

В даній роботі представлена математична модель процесу магнітного очищення речовин від залізовмісних домішок. Магнітне осадження домішок здійснюється в намагнічених пористих (гранульованих) середовищах, між гранулами яких створюються ефективні зони захоплення за рахунок високих значень напруженості поля h та високого ступеня його неоднорідності $grad h$. Добуток цих двох параметрів $h grad h$, так званий силовий фактор, суттєво проявляється саме поблизу точок контакту гранул.

Основою математичної моделі процесу магнітного очищення в таких пристроях в загальному випадку є векторне рівняння руху часточки

$$\vec{F}_I + \vec{F}_M + \vec{F}_C + \vec{F}_T + \vec{F}_B = 0 \quad (1)$$

Отже, при проходженні рідини чи газу крізь намагнічену насадку можливість захоплення часточок насадкою залежить від конкуренції ряду сил, які діють на часточку: магнітної F_M , стоксової F_C , інерційної F_I , тяжіння F_T та виштовхувальної (архімедової) F_B .

Якщо скласти та розв'язати диференціальне рівняння, яке включає ці сили, то можна отримати, зокрема, траекторію руху часточки, що дає уявлення про ймовірність захоплення часточки. Але такий формальний підхід без оцінки внеску кожної з сил приводить до отримання громіздких рівнянь. Таким чином, необхідно конкретизувати вплив кожної сили з врахуванням тонкого очищення в намагнічених насадках. Для цього необхідно виявити домінуючі сили та сили, якими можна знехтувати. Проведена оцінка впливу кожної з сил, що входять в (1) привела до висновку, що процес тонкого магнітного осадження здійснюється в результаті конкуренції в основному двох сил - магнітної F_M та стоксової F_C , оскільки для часточек розмірами 0,01-10 мкм „немагнітними“ силами – інерційними та масовими – можна знехтувати, тому що вони на 2÷9 порядків менші за стоксові сили.

Тому для магнітного захоплення залізовмісних домішкових часточек в намагніченому пористому середовищі рівняння (1) в скалярному вигляді можна записати як умову захоплення часточек

$$F_M \geq F_C \quad (2)$$

$$F_M = \mu_0 \cdot \chi \cdot w \cdot h \text{grad}h; F_C = 3 \cdot \pi \cdot \delta \cdot \eta \cdot (V - V_q) \cdot k_\phi, \quad (3)$$

де μ_0 – абсолютна магнітна проникливість вакууму, χ - магнітна сприйнятливість часточки, що осаджується, h – напруженість магнітного поля в порах насадки, w - об'єм часточки, δ - еквівалентний ефективний діаметр (крупність) часточки, V і V_q - швидкості рідини і часточки, η - динамічна в'язкість середовища, яке фільтрується [1], k_ϕ – динамічний коефіцієнт форми часточки.

На основі теоретичних уявлень про намагнічену насадку як квазісуцільний поглинаючий екран обґрунтowany і експериментально підтверджений висновок про експоненціальний механізм осадження залізовмісних часточек з рідин та газів.

Отже, в основі загального вигляду рівняння магнітно-фільтраційного очищення лежить використання закону експоненціального поглинаючого екрану:

$$\psi = \lambda(1 - \exp(-\alpha L)), \quad (4)$$

де ψ - ефективність очищення; λ - частка активної (магнітносприйнятливої) фракції домішок; L - довжина насадки.

Розглядаючи умови магнітного осадження з використанням залежностей розподілу поля в порах насадки та руху рідини в межах точки контакту гранул, приймаючи до уваги ймовірні характеристики захоплення часточек, а також враховуючи роль щільноти упаковки насадки γ , з точністю до узагальненого коефіцієнта пропорційності α рівняння (4) в розгорнутому вигляді запишеться

$$\frac{\psi}{\lambda} = 1 - \exp\left(-\frac{\alpha \chi \delta^2 H^{0.75} \gamma L}{\eta V d^2}\right), \quad \xi = -\frac{\alpha \chi \delta^2 H^{0.75} L}{\eta V d^2}, \quad (4)$$

де ξ - логарифмічний показник очищення; δ - розмір (усереднений) домішкових часточек; χ - магнітна сприйнятливість часточек; γ - щільність упаковки гранул насадки; d - розмір (діаметр) часточек; η - динамічна в'язкість середовища [1]; H - напруженість зовнішнього магнітного поля; V - швидкість фільтрування; α - коефіцієнт пропорційності .

Частковим випадком процесу магнітного очищення є використання магнітних пристройів дискового типу. Зокрема, в математичній моделі процесу магнітної сепарації в сепараторі дискового типу та розрахунку траєкторії руху часточки в зоні магнітного осадження серед сил, що діють на часточку в робочій зоні дискового сепаратора, в даній роботі враховуються магнітна пондеромоторна сила, сила в'язкого тертя та сила тяжіння.

Питома величина сили магнітного захоплення пропорційна величині силового фактору і для радіальної складової сили отримуємо вираз

$$F_M = \mu_0 \chi \alpha H_0^2 \exp(-2\alpha l), \quad (6)$$

де H_0 - напруженість магнітного поля на поверхні дисків; α - коефіцієнт неоднорідності поля; l - відстань до часточки.

Сила в'язкого тертя визначається швидкістю руху часточки

$$F_C = -\frac{9\eta}{2r\rho} V, \quad (7)$$

де η - динамічна в'язкість повітря; r - радіус часточки; ρ - густина речовини часточки; V - швидкість руху часточки.

Диференціальне рівняння руху часточки в проекції за осями X та Y з врахуванням вищезазначених сил, можна записати у вигляді

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{9\eta}{2r^2\rho} \frac{dx}{dt} + \mu_0 \chi \alpha H_0^2 \exp(-2\alpha l) \cos \beta; \quad \frac{d^2y}{dt^2} = -\frac{9\eta}{2r^2\rho} \frac{dy}{dt} + \mu_0 \chi \alpha H_0^2 \exp(-2\alpha l) \sin \beta + g, \quad (8)$$

де g - прискорення вільного падіння.

Ці рівняння є математичною моделлю процесу магнітної сепарації в сепараторі дискового типу [2]. Розв'язок системи рівнянь при різних початкових умовах дає можливість дослідити вплив параметрів системи на якість сепарації, що здійснювалося шляхом моделювання процесів на персональній ЕОМ. Для цього була розроблена комп'ютерна програма інтегрування диференціальних рівнянь з візуальним відображенням результатів обрахунку у вигляді побудови траєкторії руху часточки. Використовувався метод чисельного інтегрування Рунге-Кутта 4-го порядку з автоматичним вибором кроку інтегрування.

В результаті комп'ютерного моделювання був отриманий графік залежності часу захоплення часточки від величини коефіцієнта неоднорідності поля, який характеризує динаміку процесу сепарації при зміні коефіцієнта неоднорідності поля. Данна програма може бути модифікована для випадку задання розподілу поля у вигляді двомірного масиву, який отриманий в результаті автоматизованого вимірювання напруженості магнітного поля.

Результати досліджень були покладені в основу конструкції магнітного сепаратора, призначеного для вилучення феромагнітних домішок із сипучих продуктів сільськогосподарського виробництва.

- 1) Сандуляк О.В., Корхов О.Ю., Яцков М.В. Влияние некоторых параметров на осаждение из малоконцентрированных суспензий в полилокализованном магнитном поле // Теоретические основы химической технологии.- 1985.- т.19.- № 4.- С. 559-560.
- 2) Яцков М.В., Клепач М.І., Мисіна О.І. Розрахунок траєкторії руху часточек в зоні магнітного осадження // Вісник РДТУ. – 2000. – Вип.3(5), частина 1. – С. 297-300.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ АЗОТНОКИСЛОТНОГО ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ ИЗ НИЗКОСОРТНЫХ ФОСФОРИТОВ УКРАИНЫ

Белогур И.С., Савенков А.С., Баркатаева С.С., Ратушная Л.Н.

Национальный технический университет "ХПИ", savenkov@kpi.kharkov.ua

Получение информации о кинетике химико-технологического процесса, является, необходимым условием для последующего моделирования его в промышленном масштабе. Для определения показателей непрерывного процесса следует детально изучить закономерности различных стадий, чтобы получить математическое описание в виде системы уравнений, решение которой позволит предсказать характер его протекания. Особое значение это имеет при изучении гетерогенных процессов, скорость которых зависит не только от концентрации реагентов и температуры, но и от состояния агломератов вещества, в конденсированном состоянии. Наиболее важной характеристикой таких процессов является площадь реакционной поверхности, которая в общем случае в ходе процесса изменяется. Имеющиеся литературные сведения о кинетике гетерогенных процессов, сопровождающихся изменением площади поверхности раздела фаз (в первую очередь процессов выщелачивания и кристаллизации), приведены для изометрических частиц (пластиинка, цилиндр, шар, куб) и в большинстве представляют собой частные случаи для монодисперсных систем и равнодоступной поверхности [1].

Для гетерогенного процесса в случае постоянства площади поверхности раздела фаз [1,3]:

$$W = \frac{d\alpha}{dt} = KSC^n \text{ либо } 1 - (1 - \alpha/N)^{1-n} = A\tau, \quad (1)$$

где S – площадь раздела фаз; K – константа скорости при определенной температуре; c – концентрация реагента, мол/л; N – стехиометрическая норма реагента; α – степень извлечения; n - порядок по реагенту.

На практике весьма часто приходиться изучать влияние на скорость процесса одного из продукта, так в случае $C=CK\alpha$, CK – конечная концентрация продукта (при $\alpha=1$) скорость реакции можно выразить [1,2]:

$$W = \frac{d\alpha}{d\tau} = KS\alpha^n C_K^n. \quad (2)$$

После интегрирования этого уравнения и определения постоянной интегрирования получим:

$$\alpha^{1-n} = A\tau. \quad (3)$$

Однако интегрирования уравнения скорости процесса (1) и (3) не учитывают изменения поверхности раздела фаз. Для случая растворения одиночной изометрической частицы или монодисперсной системы изометрических частиц известно выражение:

$$S = S_0 (1 - \alpha)^m, \quad (4)$$

где m - порядок реакции «по твердому» реагенту.

При выявлении закономерности измерения поверхности в ходе гетерогенного процесса кинетическое уравнение приобретает вид:

$$W = \frac{d\alpha}{d\tau} = B(N - \alpha)^n (1 - \alpha)^m, \quad (5)$$

где для условий опыта:

$$B = KS_0(C_0 / N)^n = \text{const}. \quad (6)$$

Правомерность уравнения (6) подтверждается данными исследований азотнокислотного разложения фосфат-глауконитового концентрата Ново-Амвросиевского месторождения. Нами исследована скорость разложения фосфорита 56%-вою азотной кислотой, при температурных пределах от 45 к 60°C при норме 1,12, скорости вращения мешалки (N) от 80 до 250 об/мин. Разложения проводили во времени: 5, 10, 15, 30, 45 мин. Через определенные промежутки времени отбирались пробы, которые анализировались на содержание P_2O_5 химическими методами [4].

Данные экспериментов по степени извлечения P_2O_5 из Ново-Амвросиевского концентрата приведенные в таблице 1.

Погрешность вычислений варьируется до 10%, что говорит о применяемости данного уравнения. Установлено, что удельная поверхность Ново-Амвросиевского концентрата (с использованием фракции 0,25 мм) и составила $14,45 \text{ м}^2/\text{г}$. Согласно кинетическому уравнению 6, с помощью ЭВМ рассчитаны параметры, показанные в таблице 2.

Таблица 1 – Результаты расчета скорости процесса азотнокислотного разложения Ново-Амвросиевского концентрата

$T, ^\circ\text{C}$	Время, мин.	Степень извлечения, д.е.		Скорость реакции, $10^{-5}, \text{с}^{-1}$		Погрешность, $dW = \frac{W_t - W_{np}}{W_t} 100\%$
		практ.	теорет.	практ.	теорет.	
45	5	0,961	0,963	4,7193	4,7572	0,7973
	10	0,972	0,9731	3,2425	3,3789	4,2058
	15	0,98	0,9812	2,2469	2,3934	6,5204
	30	0,9929	0,9935	0,7661	0,8374	9,3083
	45	0,998	0,9978	0,2579	0,2345	9,1132
50	5	0,9748	0,9747	3,1752	3,1623	0,4049
	10	0,9819	0,9826	2,1667	2,2555	4,097
	15	0,987	0,9880	1,6114	1,4859	8,4479
	30	0,9958	0,9960	0,4909	0,5156	5,0236
	45	0,9986	0,9987	0,1591	0,1713	7,7047
60	5	0,977	0,9772	3,030	3,0573	0,8969
	10	0,981	0,9813	2,4751	2,5156	1,635
	15	0,9889	0,9897	1,3514	1,4576	7,8593
	30	0,9965	0,9968	0,4166	0,4558	9,4122
	45	0,9987	0,9988	0,1559	0,1688	8,3458

Найдя все данные, получили полное кинетическое уравнение процесса азотнокислотного разложения Ново-Амвросиевского фосфоритного концентрата:

$$W = 1.913 \times 10^{-5} \exp\left(-\frac{6226.35}{RT}\right) S_0 \left(\frac{C_0}{N}\right)^{0.143} (N - \alpha)^{0.143} (1 - \alpha). \quad (8)$$

Полученное уравнение для скорости процесса разложения Ново-Амвросиевского концентрата позволит рассчитать параметры для реактора разложения.

Таблица 2 – Характеристика полученных данных

Ново-Амвросиевский концентрат				
Порядок реакции, n	Константа скорости, 10^{-5}			E, КДж/моль
45°C-60°C	45°C	50°C	60°C	6,23
0,143	7,7819	8,1512	8,6528	

- 1) Богачев Б.Г. Определение кинетических параметров химико-технологического процесса. Химическая промышленность, 1992, №11 – с.40-42.
- 2) Аксельруд Г.А., Молчанов А.Д. Растворение твердых веществ. – М.: Химия, 1977. – 245 с.
- 3) Семенишин Е.М., Малеванный М.С., Хеян Г.Х. Исследования кинетики выщелачивания фосфоритов азотной кислоты. Химическая технология, 1984. - №3 – с. 21-22.
- 4) Белогур И.С., Савенков А.С., Ратушная Л.Н., Рыщенко И.М. Исследование кинетики разложения Ново-Амвросиевского концентрата азотной кислотой. Вопросы химии и химической технологии. – Днепропетровск: УГХТУ, 2006. – №5. – с. 61-62.

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОКСИДОВ АЗОТА АММИАКОМ

Близнюк О.Н., Савенков А.С., Яковишин В.А.

Национальный технический университет «ХПИ», Bliznjuk@kpi.kharkov.ua

Исследование кинетики и механизма каталитического восстановления оксидов азота аммиаком проводилось многими авторами. Так для процесса, протекающего на нанесенном алюмованадиевом катализаторе, было выведено кинетическое уравнение $w=13,68 \cdot \exp(-9300/RT) \cdot P_{\text{NO}}^{0.2} \cdot P_{\text{NH}_3}^{0.12}$ [2]. Однако в этом уравнении не учитывается наличие O_2 , NO_2 , N_2O в отходящих газах, подаваемых на восстановление аммиаком, и поэтому расчет по этой зависимости дает значительное расхождение с промышленными данными. Нами было проведено исследование кинетики процесса восстановления оксидов азота на алюмованадиевом катализаторе для газовых смесей промышленного состава. Данные по влиянию соотношения $\text{NH}_3 : \text{NO}_x$ и объемной скорости на степень восстановления оксидов азота приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Зависимость степени восстановления NO_x от соотношения $\text{NH}_3 : \text{NO}_x$ и объемной скорости w

w, час ⁻¹	NH ₃ : NO _x						
	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2
5000	60,12	65,09	68,16	77,01	94,01	99,04	99,14
10000	57,45	62,55	66,45	75,91	92,43	98,89	98,91
15000	56,62	61,21	65,19	73,82	90,34	98,55	98,62
20000	53,96	58,35	62,64	70,98	87,45	94,49	94,63
30000	52,01	58,97	60,14	68,76	83,32	87,27	87,31

Результаты исследований, приведенные в таблице 1, показывают, что максимальная степень восстановления NO_x составляет 98,5–99,3% при объемной скорости 15000 час⁻¹, линейной скорости до 1 м/с, и соотношении $\text{NH}_3 : \text{NO}_x = 1,1$ при концентрации оксидов азота в газе, направляемом на восстановление, 0,11% (об).

Однако в данном исследовании не учитывалась реакция восстановления оксида азота (I) – N_2O , который является сильным парниковообразующим газом. Оксид азота (I) – третий по распространенности компонент атмосферы после диоксида углерода и метана. Полагают, что эти газы вместе с озоном и фреоном играют важную роль в процессах, обеспечивающих тепловой баланс на Земле. Их молекулы адсорбируют тепло, отдаваемое Землей в виде инфракрасного излучения, что приводит в конечном итоге к заметному повышению температуры в тропосфере и парниковому эффекту. И хотя вклад N_2O в суммарный парниковый эффект оценивается на уровне 6%, оксид азота (I) приблизительно в 260 раз более мощный парниковообразующий газ, чем диоксид углерода [4].

Поэтому нами были проведены исследования влияния различных кинетических параметров на процесс восстановления N_2O аммиаком на $\text{Fe} - \text{Cr} - \text{Mg} - \text{O}$ катализаторе.

На рис.1 представлена зависимость степени восстановления N_2O аммиаком от температуры при различной объемной скорости w и содержании O_2 – 2,75% об., NO – 0,12% об., NH_3 – 0,12%, N_2O – 0,05% об., остальное – азот.

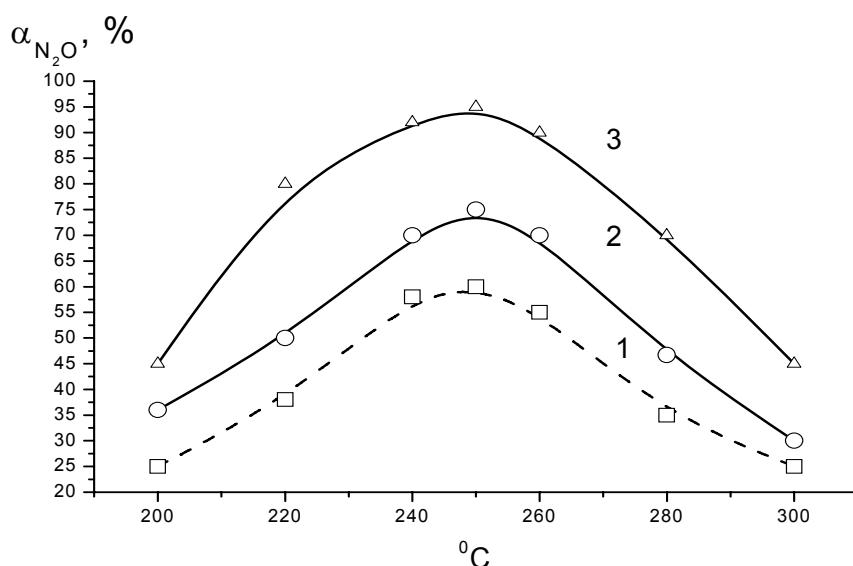


Рис. 1. Зависимости степени восстановления N_2O аммиаком от температуры при объемной скорости, час⁻¹: 1 – 20 000, 2 – 15 000 час⁻¹, 3 – 10 000 час⁻¹,

Как видно из рис.1, при объемной скорости 10 000 час⁻¹ и температуре контактирования 250°C можно на данном катализаторе получить высокую степень очистки от N_2O ~95%.

При изучении влияния кинетических параметров на процесс восстановления оксидов азота установлено, что процесс протекает по следующим маршрутам:





Для описания кинетики процесса селективной каталитической очистки хвостовых нитрозных газов от оксидов азота использовалась следующая система уравнений:

$$\frac{dC_i}{d\tau} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^k w_j, \text{ где } i = 1, 2 \dots n \quad (5)$$

где n – число реагентов, участвующих в реакции ($\text{NH}_3, \text{NO}, \text{NO}_2, \text{N}_2\text{O}, \text{O}_2, \text{N}_2, \text{H}_2\text{O}$); k – число реакций в процессе; C_i – концентрация i -го компонента; w_j – скорость j -ой реакции.

Скорости реакций w_1, w_2, w_3, w_4 выражали в виде зависимостей:

$$w_1 = k_{01} \exp(-E / RT) C_{\text{NH}_3}^{m_1} C_{\text{NO}}^{m_2} \quad (6)$$

$$w_2 = k_{02} \exp(-E / RT) C_{\text{NH}_3}^{m_3} C_{\text{NO}_2}^{m_4} \quad (7)$$

$$w_3 = k_{03} \exp(-E / RT) C_{\text{NH}_3}^{m_5} C_{\text{N}_2\text{O}}^{m_6} \quad (8)$$

$$w_4 = k_{04} \exp(-E / RT) C_{\text{NH}_3}^{m_7} C_{\text{O}_2}^{m_8} \quad (9)$$

где m_i – порядок реакции по данному компоненту.

В результате решения системы уравнений методом Рунге-Кута были найдены константы скорости и порядки реакций по каждому компоненту. Сопоставление экспериментальных и расчетных данных показывает хорошую сходимость.

Зависимость степени конверсии аммиака и оксидов азота от времени контактирования представлена на рисунке 2.

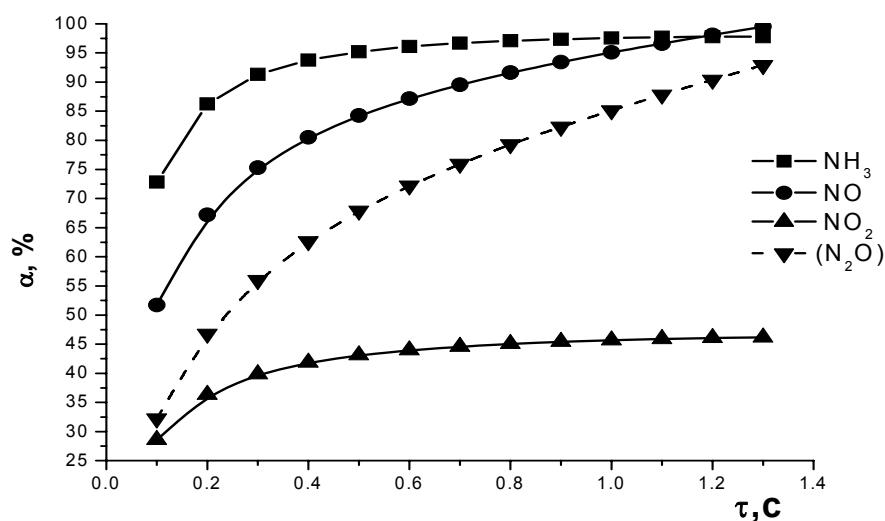


Рис. 2. Зависимость степени конверсии от времени контактирования

Приведенная кинетическая модель позволяет определить оптимальное время контактирования, содержания компонентов газовой смеси, а так же реакционный объем катализатора для реакций восстановления оксидов азота аммиаком.

- 1) Производство азотной кислоты в агрегатах большой единичной мощности / Под ред. В.М.Олевского. – М.: Химия., 1985. – 400 с.
- 2) *Матрос Ю.Ш., Носков А.С.* Катализическое обезвреживание отходящих газов промышленного производства.- Новосибирск: Наука, 1999. – 243 с.
- 3) *Савенков А.С., Яковшин В.А., Сибирцева М.А., Жигайло Б.Д.* Исследование кинетики селективной очистки от оксидов азота// Интегрированные технологии в промышленности.– 2005. – №2. – С. 56–60.
- 4) *Petryk J., Kolakowska E.* Cobalt oxide catalysts for ammonia oxidation activated with cerium and lanthanum // Applied Catalysis B:Env. – 2000. – №24. – С. 121–128.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГРАНУЛЯЦИИ НАНОДИСПЕРСНОГО ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ

Болотин А.В., Верещак В.Г., Николенко Н.В.

ГВУЗ “Украинский государственный химико-технологический университет”,

alexandr_bolotin@mail.ru

Диоксид циркония обладает уникальными физико-химическими свойствами и поэтому на протяжении последних десятилетий является одним из наиболее исследуемых материалов, на основе которого разработано новое поколение керамических конструкционных материалов. В Украине находится единственное в Европе месторождение высококачественного цирконийсодержащего сырья, однако его переработка направлена на изготовление традиционных грубодисперсных порошков диоксида циркония и его стабилизованных модификаций (размер частиц 5-10 мкм и выше). Анализ современной патентной и научной литературы свидетельствует о том, что большинство производителей циркониевых порошков перешли на изготовление ультра- и нанодисперсных материалов (размер частиц 50-100 нм). Стоимость одного килограмма такого порошка составляет 60–80\$.

В УГТУ разработана технология производства нанодисперсных порошков стабилизированного диоксида циркония. Тестирование изготовленных в лабораторных условиях порошков ZrO_2 показало их хорошие физико-химические показатели: размер частиц – 50-100 нм, температура спекания контрольных образцов конструкционной керамики – 1400°C , прочность на изгиб – 110 кг/мм². Для внедрения технологии необходимо разработать способы гранулирования нанодисперсных порошков с целью доведения их производства для полного замкнутого цикла, который позволил бы изготавливать конкурентноспособный конечный продукт со стабильными физико-химическими свойствами.

Решение проблемы оптимизации технологических процессов требует разработки и исследования математической модели. Нами предложена математическая модель процессов грануляции нанодисперсного диоксида циркония, в основе которой лежит замкнутая система интегро-дифференциальных уравнений в безразмерной форме, описывающих движение отдельной капли полидисперсного факела, процессы тепло- и массообмена капли с теплоносителем, внутренние процессы переноса тепла и влаги в материале и тепловой баланс газового теплоносителя. В результате численного расчета на ЭВМ были найдены оптимальные параметры процесса грануляции (см. табл.). Полученные результаты позволили детально проанализировать процессы, протекающие в полидисперсном потоке и определить оптимальные размеры аппарата.

Таблица 1 – Оптимальные параметры грануляции монодисперсного ZrO₂

Параметр	Диапазон изменения
Начальная температура теплоносителя	200 - 220 0C
Конечная температура теплоносителя	100 – 120 0C
Начальная скорость капель раствора ZrO ₂ .	30 – 40 м/с
Начальная скорость теплоносителя	0,4 – 0,6 м/с
Максимальный диаметр капли	200 – 300 мкм.
Конечный размер частицы ZrO ₂ .	60 мкм
Начальное влагосодержание материала	50 – 60 %
Требуемое влагосодержание	0,1 %
Производительность сушильной установки по влаге	20 – 30 кг/час
Высота сушильной камеры	160 – 170 см
Диаметр сушильной камеры	0,78 см.

АНАЛИЗ КАЧЕСТВА НЕФТЕПРОДУКТОВ ПО КОМПЛЕКСНОМУ ПАРАМЕТРУ

Бондаренко С.Г., Степанов Н.Б., Васильевич А.И.

Национальный технический университет Украины «КПИ», sgb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Жизненный цикл любого нефтепродукта завершается в точках розничной реализации. И даже если нет сомнений в том, что продукт был произведен на самом современном нефтеперерабатывающем заводе и соответствует ДСТУ, не всегда продукция такого же качества доходит до конечного потребителя. Подтвержденное качество в точках розничной торговли - сегодня задача №1 не только для любой нефтяной компании, работающей на рынке нефтепродуктов, но и для компаний, занимающихся реализацией топлив. В Украине кроме шести крупных НПЗ существует масса мини- заводов, которые выпускают продукцию значительно худшего качества, нежели это предусмотрено общенациональными стандартами. Такое топливо реализуется в сетях недобросовестных участников рынка под марками продукции крупных НПЗ, с использованием паспортов качества и сертификатов соответствия последних. Зачастую производитель не заинтересован в выпуске более качественного бензина, ведь таким образом он фактически повышает «рентабельность» реализаторов фальсификата. Кроме того, согласно научным исследованиям, автомобильный транспорт является одним из основных факторов ухудшения экологической обстановки в крупных городах. Концентрация токсичных веществ в атмосфере напрямую зависит и от качества топлива, на котором работает автотранспорт. Объем выброса загрязняющих веществ в атмосферу от автотранспорта в крупных городах достигает более 50%. В целях охраны окружающей среды необходимо осуществлять контроль качества моторного топлива.

Таким образом, весьма актуальна разработка новых упрощенных методик оперативного определения качественных показателей нефтепродуктов, позволяющих за малый промежуток времени получать необходимую информацию. Такие методики не претендуют на замену стандартных и на высокую точность. Но в тоже время они позволяют осуществить оперативный контроль качества за сравнительно небольшое время и при минимальных затратах на исследование.

В настоящее время существует множество физико-химических показателей нефтепродуктов, по которым судят о пригодности к применению их по тому или иному назначению. К таким показателям относятся традиционные, наиболее часто используемые: плотность, вязкость, коэффициент преломления, температура вспышки, фракционный состав и другие. Данные показатели характеризуют отдельные физические или химические свойства нефтепродуктов, но не несут в себе более обобщенной информации о химической природе вещества, о преобладании тех или иных соединений, информации, по которой можно судить о потенциальной возможности, как сырой нефти, так и получаемых из нее продуктов.

Групповой и структурно-групповой состав смесей углеводородов, соотношение количества углерода к водороду являются наиболее информативными показателями, но метод их определения достаточно трудоемок и не позволяет оперативно получать информацию о составе сложных смесей углеводородов, что крайне необходимо в реальных условиях производства нефтепродуктов. Существуют корреляционные зависимости между теплофизическими показателями углеводородных смесей (теплота образования, энтропия, теплота испарения при нормальном кипении, теплоемкость и др.) и их структурно-групповым составом. Теплофизические константы смесей углеводородов зависят от соответствующих свойств входящих компонентов и тесно увязаны с плотностью, молекулярной массой, средне-молекулярной температурой кипения, соотношением количества отдельных классов углеводородов в сложной смеси. Влияние химического состава на физические и тепловые свойства нефтепродуктов учитывается величиной характеризующего фактора, а так же теплоемкостью [1].

В результате предварительной экспериментальной и аналитической работы была выведена математическая зависимость, на основе которой разработана методика экспресс-анализа определения комплексного теплофизического параметра T . Данный параметр коррелируется с соотношением количества углерода к водороду (С/Н) в усредненной углеводородной молекуле, а также и с рядом других физико-химических параметров и показателей нефтепродуктов.

Сущность метода оценки состава нефтепродуктов заключается в измерении параметра, характеризующего динамические (инерционные) свойства углеводородной жидкости при скачкообразном изменении внешнего теплового воздействия. Для пробы нефтепродукта объемом V_{np} с теплоемкостью C_t , плотностью ρ и температурой t_c , нагреваемой внешней средой с температурой t_o объемом значительно большим, чем объем пробы, до контрольной температуры t_{ck} справедливо уравнение теплового баланса:

$$C_{cp} \cdot (V_{np} \cdot \rho) \cdot \frac{dt_c}{d\tau} = \alpha \cdot A(t_o - t_c),$$

где C_{cp} – средняя весовая теплоемкость; α – коэффициент теплоотдачи от внешнего теплоносителя к нефтепродукту; A – поверхность теплообмена; $dt_c/d\tau$ – скорость изменения температуры пробы нефтепродукта.

Приведенное уравнение динамики является апериодическим звеном первого порядка и может быть представлено в виде:

$$T \frac{dt_c}{d\tau} + t_c = Kt_o,$$

где $T = C_{no} \cdot (V_{no} \cdot \rho) / \alpha \cdot A$ – постоянная времени пробы нефтепродукта; $K = 1 / \alpha \cdot A$ – коэффициент передачи по каналу “температура внешней среды-температура нефтепродукта”. Изменение температуры пробы нефтепродукта во времени будет описываться экспонентой вида:

$$t_c = K \cdot (1 - e^{-\tau/T})$$

Таким образом, определив постоянную времени T можно судить о величине комплексного параметра – $(C_{cp} \rho \cdot V_{np})$, который, в свою очередь, коррелирует с показателями качества нефтепродуктов.

Для определения постоянной времени T проб нефтепродуктов различного состава разработана методика, суть которой состояла в исследовании поведения объекта (пробы нефтепродукта постоянной массы $m = \rho V_{np}$) во времени при скачкообразном изменении теплового воздействия. С использованием данной методики были проведены экспериментальные исследования по определению корреляционной зависимости постоянной времени T с параметрами, характеризующими показатели качества выбранных реальных нефтепродуктов. Параллельно по стандартным методикам определялись те же параметры.

Результаты исследований были сведены в таблицы и представлены в виде графических зависимостей. Рассчитанные значения выборочного коэффициента корреляции находились в пределах 0,9-0,99, что характеризует достаточно тесную связь между исследуемыми параметрами, а именно, с октановым числом бензинов и с I_k – индексом корреляции (показатель качества сырья для получения технического углерода).

Таким образом, апробация методики на реальных нефтепродуктах показала достаточно высокую однозначность связи комплексного параметра Т с показателями их качества. Это дает возможность ее успешного использования при экспресс-анализе качества нефтепродуктов. Простота аппаратурного оформления метода исследования, малая трудоемкость и длительность анализа (порядка 2-3 минут) открывает широкие перспективы ее использования на производстве, а также при реализации нефтепродуктов.

1) Химия нефти / Под ред. З.И. Сюняева. – Л.: Химия, 1984. – 360 с.

РАЗРАБОТКА ГИБРИДНЫХ ПРОЦЕССОВ ДЛЯ ОЧИСТКИ ГАЗОВЫХ ВЫБРОСОВ

Бугаева Л.М., Безносик Ю.А.

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

В последние годы во всем мире растет интерес к совмещенным (гибридным) химико-технологическим процессам. Основной методологический принцип интеграции нескольких процессов должен совмещать достоинства различных процессов за взаимную компенсацию их недостатков. В настоящее время наибольшая активность при разработке таких процессов наблюдается в моделировании, проектировании и изучении реактивных дистилляционных и абсорбционных процессов в сочетании их с последующим разделением образующихся веществ.

При разработке новых технологий и производств новых материалов процессы разделения и очистки являются важными операциями, играющими решающую роль. Недостатки традиционных процессов ограничивают их возможности в решении новых технологических проблем. Поэтому приоритеты исследований в области очистки и разделении веществ все более сдвигаются от отдельных процессов к гибридным процессам.

Комбинация различных процессов массообмена во времени и пространстве (в одном аппарате) позволяет расширять эффективность очистки отходящих газов, снижая энергопотребление и капитальные затраты. Интеграция процессов реактивной абсорбции и процессов разделения делает возможным преодолеть ограничений, которые являются характерными для каждого процесса в отдельности. Интеграция процессов позволяет изолировать отдельные компоненты из смесей, трудных для традиционного разделения.

Для газо-жидкостных систем очистки важным гибридным процессом является реактивная абсорбция протекающая совместно с физическими процессами предварительной очистки или физическими процессами разделения образующихся продуктов очистки. Это является особенно важным при получении товарных продуктов в результате процессов очистки.

Нами исследован способ очистки отходящих газов, в котором в качестве абсорбента используют карбамид. Данный метод позволяет очищать дымовые газы от оксидов азота более чем на 95% и практически полностью удалять оксиды серы. Процесс не требует предварительной подготовки газов. В результате очистки образуются нетоксичные N_2 , CO_2 , H_2O и $(NH_4)_2SO_4$. Величина pH абсорбционного раствора колеблется в пределах 5-9, что не вызывает коррозии аппаратуры. Эффективность метода практически не зависит от колебаний входных концентраций оксидов азота и серы. В качестве аппарата очистки используется двухсекционный абсорбер. На первой стадии происходит очистка отходящего газа от пыли и взвешенных частиц в режиме распылительной сушки и промывки водной эмульсией. В качестве реагента второй ступени используется карбамид концентрацией 5-25 г/л. Переработку и разделение продуктов очистки проводят после смешения потоков первой и второй ступени.

Разработана математическая модель совмещенного процесса очистки отходящих газов и рассчитаны коэффициенты ускорения хемосорбции и массопередачи для двухсекционной колонны.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ И СУБОПТИМИЗАЦИЯ ДЕЙСТВУЮЩИХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Кац М.Д., Давиденко А.М.

Рубежанский химико-технологический институт Восточно-украинского национального университета им. В. Даля, kats@is.ua.

Известно, что большинство действующих производств в химии, металлургии, нефтепереработке, биотехнологии и других отраслях промышленности работают не в оптимальных режимах и имеют существенные резервы повышения эффективности работы по экономическим, потребительским, экологическим критериям и другим критериям. [1].

Низкая эффективность работы большинства действующих производств объясняется в первую очередь ограничениями известных методов идентификации. По литературным данным их использование может быть эффективным, если выходной показатель 1 а число идентифицируемых параметров не более 3.

Для эффективного решения задач совершенствования действующих технологических процессов с практически любым количеством входных параметров и выходных показателей разработан новый метод идентификации изучаемого процесса – метод восстановления одномерных зависимостей (МВОЗ). [2, 3].

С помощью МВОЗ осуществляется редукция изучаемого процесса к его элементным свойствам – строится математическая модель зависимости выходного показателя Y от каждого из n входных параметров X_i процесса.

Исходная информация для построения модели представляет собой таблицу экспериментального материала, полученную в режиме наблюдения за работой изучаемого процесса. Каждая строка этой таблицы содержит информацию о значениях всех входных параметров и выходных показателей в одной реализации изучаемого процесса. Под реализацией понимается: для периодических процессов одна операция (плавка в мартеновском и конвертерных производствах), для непрерывных процессов – период времени, превышающий время превращения сырья в продукт. Например, в доменной плавке фиксируются среднесуточные значения входных и выходных переменных.

1. Алгоритм построения математической модели с помощью МВОЗ:

1. Таблицу исходных данных сортируют по возрастанию входного параметра X_1 .
2. Диапазон вариаций параметра X_1 делится на три поддиапазона из условия попадания в каждый поддиапазон одинакового (примерно одинакового) количества опытов - если число опытов в таблице экспериментального материала не кратно трем или по разные стороны границы находятся одинаковые значения. Границы поддиапазонов определяются как среднее между значениями в последнем опыте предыдущего и первом опыте последующего поддиапазонов.
3. Для каждого поддиапазона значения параметра X_1 определяются средние значения (X_{1cpD_1} , X_{1cpD_2} , X_{1cpD_3}).
4. Определяются средние значения выходного показателя Y в строках, попавших в каждый из поддиапазонов по X_1 после выполнения пп1,2 (Y_{cpD_1} , Y_{cpD_2} , Y_{cpD_3}).
5. По полученным по пп. 3, 4 координатам трех точек (X_{1cpD_1} , Y_{cpD_1} ; X_{1cpD_2} , Y_{cpD_2} ; X_{1cpD_3} , Y_{cpD_3}) строят график зависимости выходного показателя от 1-ого входного параметра $Y=F_1(X_1)$.
6. Повторяют пп. 1-5 последовательно для каждого из n входных параметров и получают модель $Y=F_i(X_i)$, $i=1,n$ (1), описывающую зависимости выходного показателя от каждого из n входных параметров.

В построении модели $Y=F_i(X_i)$ участвуют два вектор-столбца таблицы экспериментального материала - $\{X_i\}$ и $\{Y\}$. Однако значение выходного показателя Y определяется всеми входными параметрами. Если бы зависимость выходного показателя от входного параметра X_i была слабой, то в каждом поддиапазоне средние значения Y были бы очень близкими, т.е. зависимость $Y=F_i(X_i)$ практически не проявилась бы на фоне влияния остальных параметров. При построении модели значения параметра X_i проранжированы по

возрастанию и усредняются в каждом поддиапазоне, значения же остальных параметров случайным образом «размазаны» по всему диапазону их возможных значений. Это позволяет выделять влияние i-ого параметра на фоне остальных.

2. Метод сверки множества выходных показателей в обобщённый критерий

В случае, когда выходных показателей более одного, свёртка множества выходных показателей в обобщённый критерий оценки эффективности работы производства 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 (регламенте производства).

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.

3. Анализ математической модели

3.1. Качественный анализ зависимостей (1).

При изучении реальных технологических процессов возможны 4 вида зависимостей $Y=F_i(X_i)$: монотонно убывающая (с увеличением значения параметра X_i значение выходного показателя уменьшаются), монотонно возрастающая (с увеличением значения параметра X_i значение выходного показателя растёт, экстремальная – с максимумом, соответствующим «лучшему» значению выходного показателя, экстремальная – с минимумом, соответствующим «худшему» значению выходного показателя.

Интерпретация зависимостей 1-4:

Зависимость 1. Имеется определенный резерв по улучшению выходного показателя, который может быть реализован за счет увеличения входного параметра до максимальных значений, приведенных в таблице экспериментальных данных. При дальнейшем изучении процесса имеет смысл исследовать область со значениями параметров X_i , большими, чем имеются в исходном экспериментальном материале.

Зависимость 2. Имеется определенный резерв по улучшению выходного показателя, который может быть реализован за счет уменьшения значений входного параметра до минимальных значений, приведенных в таблице экспериментальных данных. При дальнейшем изучении процесса имеет смысл исследовать область со значениями параметра X_i , меньшими, чем имеются в исходном экспериментальном материале.

Зависимость 3. Имеется определенный резерв по улучшению выходного показателя, который может быть реализован за счет поддержания значений параметра во втором поддиапазоне. При дальнейшем изучении процесса имеет смысл более подробно исследовать область значений параметра, соответствующую второму поддиапазону. Это позволит выявить возможности дальнейшего повышения эффективности процесса.

Зависимость 4. Технологический процесс по данному параметру работает в области впадины между двумя экстремумами. Поиск оптимальных значений необходимо вести в областях значений соответствующего параметра ниже минимального и выше максимального.

3.2. Оценка силы влияния каждого входного параметра X_i на выходной показатель (комплекс выходных показателей)

Сила параметра X_i определяется как разность между максимальным и минимальным средними значениями выходного показателя в поддиапазонах.

3.3. Оценка резерва «улучшения» выходного показателя (комплекса выходных показателей) по каждому из входных параметров

Резерв возможного «улучшения» выходного показателя за счёт выбора оптимального диапазона значений параметра X_i может быть определён как разность между средними значениями выходного показателя в «лучшем» поддиапазоне и во всей таблице исходных данных.

4. Субоптимизация технологического режима.

Субоптимизация технологического режима осуществляется по модели 1 (см.п.6) путём выбора для каждого параметра того поддиапазона значений, которому соответствует максимальное (минимальное, если выходной показатель необходимо минимизировать) среднее значение выходного показателя.

5. Свойства математических моделей, получаемых с помощью метода восстановления одномерных зависимостей (МВОЗ)

Модели, полученные с помощью МВОЗ:

- объективны - процедура построения модели полностью формализована – априорная информация экспертов не используется;

- информативны – описывают характер зависимости выходного показателя (комплекса выходных показателей) от каждого из входных параметров изучаемой системы;

- наглядны - формулируются в виде формальных непротиворечивых на данном экспериментальном материале гипотез, легко интерпретируемых на языке соответствующей предметной области;

- не чувствительны к коррелиированности параметров, наличию ненаблюдаемых и наблюдаемых, но неизмеряемых параметров;

- конструктивны - позволяют оценить силу влияния каждого входного параметра на выходной показатель (комплекс выходных показателей) и величину резерва по выходному показателю от каждого из входных параметров;

- имеют простые, надёжные и экспрессные методы оптимизации;

- необходимое количество опытов (строк таблицы исходного материала), необходимое для построения модели, не зависит от количества входных параметров.

6. Возможности метода восстановления одномерных зависимостей

С помощью метода восстановления с минимальными затратами времени и средств решаются следующие задачи:

- построения адекватных и высокинформативных математических моделей действующих производств в металлургии, химии, нефтепереработке и других отраслях промышленности по информации, фиксируемой в режиме их функционирования;

- субоптимизации технологического режима по заданному критерию (комплексу критериев);

- технологического аудита - оценки резервов изучаемого производства по заданному выходному показателю (комплексу выходных показателей), которые могут быть реализованы за счёт оптимизации технологического режима на существующем оборудовании, с использованием существующих систем информационного обеспечения и управления, т.е. без дополнительных капитальных затрат.

- определения научно и технологически обоснованных требований к неуправляемым параметрам (например, показателям качества сырья), учитывающих индивидуальность изучаемого процесса.

ВЫВОДЫ

1. Практически все действующие технологические процессы в металлургии, химии, нефтепереработке, биотехнологии и др. отраслях промышленности работают не в оптимальных режимах и имеют существенные резервы по снижению себестоимости, энерго- и ресурсосбережению, повышению производительности и качества продукции, сокращению количества отходов производства и другим показателям.

2. Неоптимальность функционирования действующих производств объясняется в первую очередь отсутствием корректных формальных методов идентификации действующих производств.

3. Для решения задачи существенного и практически беззатратного повышения эффективности работы действующих производств разработан новый метод идентификации (метод восстановления одномерных зависимостей) с помощью которого решаются следующие задачи:

- формального выбора минимально необходимого и достаточного перечня входных параметров;
- корректной формализованной свёртки множества выходных показателей в обобщённый критерий оценки качества функционирования изучаемого технологического процесса;
- построения математической модели на основании информации, фиксируемой в режиме нормальной эксплуатации изучаемого технологического процесса;
- субоптимизации технологического режима - определения условий проведения процесса, которые могут быть реализованы на существующем оборудовании, с помощью существующих систем информационного обеспечения и управления (т.е. без дополнительных капитальных затрат);
- оценка резервов производства, которые могут быть реализованы за счёт оптимизации технологического режима;

4. Практическое использование метода восстановления одномерных зависимостей для изучения и совершенствования действующих технологических процессов в химии, металлургии, нефтепереработке, биотехнологии и других отраслях промышленности позволит повысить качество продуктов, сократить расходные нормы по сырьевым и энергетическим ресурсам, сократить количество отходов производства, увеличить выход продукта и снизить его себестоимость.

- 1) П. Эйхофф. Оценка параметров и структурная идентификация. (Обзор). //Автоматика. –1987. - №6. С. 21-38.
- 2) Давиденко А.М., Кац М.Д. Новые методы изучения и совершенствования действующих производств и их возможности. //Восточно-Европейский журнал передовых технологий. - 2004. - №6. - С.189-193.
- 3) Кац М.Д., Давиденко А.М. Математическое моделирование и оптимизация технологического режима доменной плавки по информации, фиксируемой в режиме нормальной эксплуатации. // Металлургическая и горнорудная промышленность. - 2007. №3. – С. 15-20.

МОДИФИЦИРОВАННАЯ ПРОЦЕДУРА УСТАНОВЛЕНИЯ КОРРЕЛЯЦИИ IN VITRO – IN VIVO ДЛЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Кондратов С.А., Потапенко Э.В., Савяк Р.П., *Тимко В.Г.

Институт химических технологий ВНУ им. В.Даля, kondratov@rune.lg.ua

*Научно-производственная фирма «Микрохим»

В современной фармакологии при установлении биоэквивалентности референтных и генерических препаратов все большее значение приобретают методы математического моделирования, основанные на установлении корреляции между профилями растворения препаратов *in vitro* и его абсорбцией *in vivo* (IVIVC). Один из наиболее популярных методов для установления такой корреляции является метод свертки (конволюции), основанный на представлении изменения концентрации препарата в плазме крови $C(t)$, $\text{нг}\cdot\text{м}^{-1}$, в виде интеграла свертки [1]:

$$C(t) = \int_0^t C_\delta(t-\tau) \cdot F(\tau) d\tau, \quad (1)$$

где C_δ - импульсная функция отклика на введение препарата, F – скорость абсорбции препарата организмом, $\text{нг}\cdot\text{мл}^{-1}\cdot\text{час}^{-1}$.

Значения функции F находят численным решением интегрального уравнения (1) при заданных значениях $C(t)$ и C_δ в одинаковых временных точках, после чего устанавливают

по этим точкам наличие линейной корреляции между F и скоростью растворения препарата, найденной по результатам опытов *in vitro* [1]. Недостаток: задача деконволюции численно неустойчива, и это не позволяет получать надежных результатов по наличию корреляции между F и скоростью растворения W_S

Расчеты IVIVC по уравнению (1) можно существенно упростить и сделать более устойчивыми, если использовать следующий подход. А priori допускаем наличие линейной корреляции между скоростью абсорбции F и скоростью растворения W_S:

$$F = a_0 + a_1 \cdot W_S, \quad (2)$$

Подставим уравнение (2) в (1):

$$\begin{aligned} C(t) &= \int_0^t C_\delta(t-\tau) \cdot [a_0 + a_1 \cdot W_S(\tau)] d\tau = a_0 \cdot \int_0^t C_\delta(t-\tau) d\tau + \\ &+ a_1 \cdot \int_0^t C_\delta(\tau) \cdot W_S(\tau) d\tau = a_0 \cdot X_0(t) + a_1 \cdot X_1(t) \end{aligned} \quad (3)$$

В (3) в состав интегралов X₁(t) и X₂(t) входят только функции, которые известны из эксперимента. Поэтому задача нахождения неизвестных коэффициентов a₀ и a₁ – это задача нахождения коэффициентов линейной регрессии, которая легко выполняется методом наименьших квадратов. Определив эти коэффициенты и подставив их в уравнение (3), можно сопоставить между собой расчетные и экспериментальные значения концентрации в плазме крови C(t), например, с помощью коэффициента детерминации R², который указывает на долю отклонений от среднего, которая определяется наличием линейной связи по уравнению (3). Достоинством рассмотренного подхода является численная устойчивость вычислительных процедур и простота их компьютерной реализации. Подход проиллюстрирован на примере установления корреляции между F и W_S для метопролола по данным [2].

- 1) Pithavala Y.K., Soria I., Zimmerman C.L. Use of the Deconvolution Principle in the Estimation of Absorption and Pre-systemic Intestinal Elimination of Drugs // Drug metabolism and disposition, 1997 – V.25, № 11. - P. 1260-1265.
- 2) Levitt D.G. The use of a physiologically based pharmacokinetic model to evaluate deconvolution measurements of systemic absorption // BMC Clin Pharm., 2003. - № 3. – P. 1-15.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАМКНУТОЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИСКРЕТНО НЕПРЕРЫВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Рыжов Д.А., Зиятдинов Н.Н., Лаптева Т.В., Островский Г.М.

Казанский государственный технологический университет, nnziat@yandex.ru

В докладе дается описание модифицированного метода ветвей и границ для решения задачи дискретно-непрерывной оптимизации замкнутой химико-технологической системы, включающей колонны ректификации. В задаче наряду с непрерывными режимными поисковыми переменными используются дискретные переменные – номера тарелок ввода питания в колонны. Причем, по условиям задачи, из всего множества возможных тарелок ввода питания для каждой колонны может быть выбрана только одна. Задача относится к классу задач смешанного дискретно-непрерывного программирования.

Критерии выбора оптимальных тарелок питания, предложенные во многих работах посвященных проектированию и расчету установок ректификации, так или иначе, связаны с минимизацией термодинамических потерь необратимых процессов смешения. При использовании данных критериев для оптимизации систем ректификационных колонн возникают серьёзные трудности, поскольку выбор оптимальной тарелки питания в задаче дискретно-непрерывной оптимизации даже для разомкнутой системы разделения приводит к задаче оптимизации с разрывной целевой функцией и разрывными ограничениями. Известно, что решение подобных задач крайне трудоемко. Поэтому, задача выбора оптимальных тарелок питания может быть сведена к перебору возможных вариантов ввода питания, решения для каждого из них задачи оптимизации по непрерывным режимным параметрам и выбору в конечном итоге наилучшего варианта. Однако, при большом числе колонн и множестве возможных точек ввода питания в эти колонны решение поставленной задачи становится исключительно трудоемким.

В связи с этим предлагается новый подход к решению задачи дискретно-непрерывной оптимизации разомкнутых и замкнутых систем ректификационных колонн, основанный на совместном использовании метода ветвей и границ (ВГ) и метода структурных параметров.

При использовании метода ВГ ищется нижняя граница минимизируемой функции. Для этого заменим дискретные переменные непрерывными используя подход предложенный ранее в работе [1]. В результате такого перехода задача дискретно-непрерывной оптимизации становится обычной задачей нелинейного программирования.

Алгоритм поиска удобно представить в виде дерева-графа. Каждой вершине будет соответствовать некоторый набор множеств, которые включают в себя множество возможных номеров тарелок питания соответствующих ректификационных колонн. Ветвление проводится по числу тарелок питания в каждом множестве, путем дробления выбранного на данной итерации множества на два подмножества. Верхняя оценка получается решением задачи, в которой максимальное значение поисковой переменной (доли потока) для каждой колонны, полученные при решении непрерывной задачи, округляются до 1. Остальные доли потоков приравниваются нулю. Поиск завершается, когда все множества, будут иметь по одной тарелке питания или когда нижняя и верхняя оценки будут близки с заданной точностью.

Для проверки эффективности работы предложенного алгоритма было проведено компьютерное моделирование химико-технологической системы узла разделения этилен-пропановой фракции производства этилена с использованием моделирующей программы ChemCad. При решении поставленной задачи критерий оптимальности (удельные энергозатраты) принял минимальное значение за 34 шага. Отметим, что простой перебор точек ввода питания потребовал бы 256 шагов.

- 1) Островский Г.М., Волин Ю.М., Зиятдинов Н.Н. Оптимизация в химической технологии. – Казань: Изд-во «Фэн» АН РТ, 2005. – 394 с.

РАСЧЕТ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ МОНОАММОНИЙ ФОСФАТ – НИТРАТ КАЛЬЦИЯ – НИТРАТ АММОНИЯ

Рыщенко И.М., Асеев Г.Г., Савенков А.С., Вецнер Ю.И.

Национальный технический университет "ХПИ", savenkov@kpi.kharkov.ua

Азотнокислотная переработка наиболее перспективна для обедненных фосфоритов, залежи которых достаточно в Украине. Содержание P_2O_5 в них составляет 5-10% масс. Проведенными нами исследованиями получена азотнокислотная вытяжка, обработана аммиачной водой и получены удобрения для различных сельскохозяйственных культур.

Основными компонентами полученного раствора являются, $NH_4H_2PO_4$, $Ca(NO_3)_2$ и NH_4NO_3 . Выбор рациональных методов переработки азотнокислотной вытяжки требует знаний термодинамики, кинетики и различных физико-химических параметров.

На основе разработанной теории межчастичных взаимодействий в стационарных процессах в концентрированных растворах электролитов и ряда выводов из нее предложены методы определения физико-химических параметров многокомпонентных систем. Исследовали следующие свойства растворов $NH_4H_2PO_4 - Ca(NO_3)_2 - NH_4NO_3$: плотность, теплопроводность и динамический коэффициент вязкости. Концентрация компонентов в растворе менялась: $NH_4H_2PO_4$ от 5 до 15 масс.%, $Ca(NO_3)_2$ от 15 до 25 масс.%, NH_4NO_3 от 30 до 50 масс.% в интервале температур от 10 до 100°C.

Плотность растворов рассчитывали по формуле:

$$\rho = \rho_0 + \sum_{i=1}^h c_i (A_{1i} + A_{2i} + A_{3i}), \quad (1)$$

где ρ - плотность раствора ($\text{кг}/\text{м}^3$); ρ_0 - плотность воды($\text{кг}/\text{м}^3$); h – число компонентов раствора; c – концентрация электролита (масс.-%); t – температура (°C); A_{ij} – коэффициенты полученные на основе обработки методом регрессионного анализа собственных экспериментальных данных и приведенных в научной литературе для полученного нами азотно-фосфорного удобрения.

Некоторые результаты расчета плотности раствора представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Зависимость плотности от концентрации $NH_4H_2PO_4$
($C_{Ca(NO_3)_2}=15\text{масс}\%$, $C_{NH_4NO_3}<35\text{масс}\%$)

$t, ^\circ C$	$\rho, \text{кг}/\text{м}^3$		
	5	10	15
$C_{NH_4H_2PO_4}, \%$			
10	1319.8	1346.7	1374.8
30	1315.7	1342.6	1370.1
40	1312.2	1339.1	1367.2
50	1307.9	1334.8	1362.9
60	1302.9	1329.9	1357.9
70	1297.4	1324.3	1352.4
80	1291.3	1318.3	1346.3
90	1284.8	1311.7	1339.8
100	1277.8	1304.7	1332.7

Теплопроводность многокомпонентных растворов электролитов рассчитывали по формуле:

$$\lambda = \lambda_0 (1 + \sum_{i=1}^k \beta_i \cdot c_i), \quad (2)$$

где λ – теплопроводность раствора ($\text{Вт}\cdot\text{м}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$); λ_0 – теплопроводность воды ($\text{Вт}\cdot\text{м}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$); c_i – концентрация i – го компонента в многокомпонентном растворе; k – число компонентов раствора; β_i – коэффициенты полученные методом регрессионного анализа собственных данных и приведенных в научной литературе.

Результаты расчета теплопроводности раствора представлены в таблице 2.

Таблиця 2 – Залежність теплопровідності від концентрації $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ ($C_{\text{Ca}(\text{NO}_3)_2}=15\text{масс\%}$, $C_{\text{NH}_4\text{NO}_3}<35\text{масс\%}$)

$t, {}^\circ\text{C}$	$C_{\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4}, \%$	$\lambda, \text{Bm} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$		
		5	10	15
10		0.536	0.533	0.530
30		0.576	0.572	0.569
40		0.596	0.593	0.589
50		0.616	0.613	0.610
60		0.637	0.633	0.630
70		0.657	0.654	0.650
80		0.678	0.674	0.670
90		0.698	0.694	0.690

Динамічний коефіцієнт вязкості розробленого розчину η (Па·с) рахували по формулі:

$$\eta = \eta_0 \cdot \exp V, \quad (3)$$

$$V = \sum_{i=1}^k c_i (A_{0i} + A_{1i} + A_{2i} \cdot c_i + A_{3i} \cdot t^2),$$

де η_0 – динамічний коефіцієнт вязкості води (Па·с); k – число компонентів електроліту в розчині; c_i – масовий відсоток i -го компонента в многокомпонентному розчині (%); t – температура (${}^\circ\text{C}$); A_{ji} – коефіцієнти, отримані на основі обробки методами регресійного аналізу власних експериментальних даних та приведених в науковій літературі для більшого кількості електролітів їх значення для компонентів розчину представлена в таблиці 3.

Таблиця 3 – Залежність динамічного коефіцієнта вязкості від концентрації $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ ($C_{\text{Ca}(\text{NO}_3)_2}=15\text{масс\%}$, $C_{\text{NH}_4\text{NO}_3}<35\text{масс\%}$)

$t, {}^\circ\text{C}$	$C_{\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4}, \%$	$\eta \cdot 10^{-3}, \text{Pa} \cdot \text{с}$		
		5	10	15
20		1.363	1.560	1.830
30		1.226	1.412	1.667
40		1.112	1.285	1.522
50		1.009	1.167	1.382
60		0.914	1.052	1.243
70		0.821	0.940	1.103

Проведений комплекс фізико-хіміческих досліджень дозволить оптимально розглянути тепломаскообмінні процеси в технології складних добрив на основі обеднених фосфоритів та створити базу даних для автоматизованого математичного моделювання.

- 1) Асеев Г.Г., Рыщенко И.М., Савенков А.С. Электролиты. Физико-химические параметры концентрированных многокомпонентных систем: монография. Харьков: НТУ"ХПИ", 2005. – 448с.
- 2) Асеев Г.Г., Рыщенко И.М., Савенков А.С. Уравнения и определение физико-химических свойств растворов сульфата-нитрата аммония. //Журн. прикл. химии. 2007. - Т.2.-вып.2. – С. 213-220.

РАСЧЕТ РАВНОВЕСНОГО СОСТАВА РАСТВОРОВ $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2\text{-NH}_4\text{OH}$

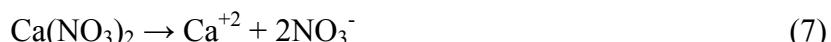
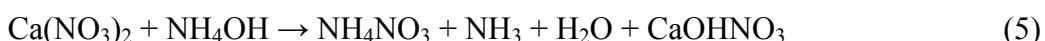
Рыщенко И.М., Довгалова Н.Ж., Белогур И.С., Савенков А.С.

Национальный технический университет "ХПИ", savenkov@kpi.kharkov.ua

Расчет равновесия в системе $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ и NH_4OH определяет направление в создании азотно-фосфорных удобрений из обедненных фосфоритов Украины. Моделирование физико-химических свойств растворов нами было сделано с помощью программ фирмы "Simulation Sciences inc.". Пакет инженерных термодинамических программ PRO/II с приложениями моделирующими свойства растворов "PR Electrolytes" и "Electrolytes utility package", учитывающих термодинамику процессов растворения.

Основой исходного раствора была система $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ - NH_4OH . Нитрат кальция в количестве 30-40% входит в состав азотокислотной вытяжки полученной разложением азотной кислотой Ново-Амвросиевского фосфатного концентрата. Для получения растворов удобрений была проведена нейтрализация азотно-кислотной вытяжки аммиачной водой.

При взаимодействии были рассмотрены следующие маршруты реакций [1]:



При проведении исследований изменяли концентрацию аммиачной воды и температуру. Фрагмент расчета равновесного состава растворов приведен в таблице 1.

Анализ данных, приведенных в таблице 1 показывает, что кроме молекулярных продуктов реакций в растворе (NH_4NO_3 , $\text{Ca}(\text{OH})_2$, NH_3) имеют место ионные формы реагирующих веществ ($(\text{CaNO}_3)^+$, $(\text{CaOH})^+$, NH_4^+ , NO_3^- , Ca^{+2}) и их количество связано с концентрацией вводимой аммиачной воды [2]. Расчетами показано, что увеличение содержание NH_4OH в растворе выше 14% не приводит к повышению содержание аммиачной селитры, и увеличивает ее разложение до NH_3 .

Влияние температуры на этот процесс показал, что выбранном интервале 35 - 80°C наблюдается максимальный выход NH_4NO_3 соответствует температуре 70°C.

Таблица 1 – Зависимость равновесных компонентов системы от увеличения содержания в системе NH₄OH, в масс.% (T=70°C)

Компонент	Исходная часть				
Ca(NO ₃) ₂	37,8	37,8	37,8	37,8	37,8
NH ₄ OH	10	12	14	16	18
H ₂ O	52,2	50,2	48,2	46,2	44,2
Σ	100	100	100	100	100
Компонент	Продуктовая часть				
H ₂ O	56,23	55,09	53,99	53,02	52,04
NH ₃	3,79	3,87	5,47	6,44	7,42
NH ₄ NO ₃	4,66	4,75	5,73	5,74	5,74
Ca(OH) ₂	2,28	2,32	2,85	2,85	2,85
(CaNO ₃) ⁺	8,74	8,57	8,06	8,13	8,20
(CaOH) ⁺	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05
NH ₄ ⁺	0,08	0,09	0,11	0,105	0,101
NO ₃ ⁻	19,65	19,24	19,23	19,18	19,14
Ca ⁺²	4,52	4,43	4,49	4,47	4,44
Σ	100	100	100	100	100

Таблица 2 – Влияние температуры на равновесный выход NH₄NO₃

<i>t, °C</i>	35	45	55	65	70	75	80
Компонент							
H ₂ O	54,4	54,5	54,9	55,0	55,09	55,7	55,8
NH ₃	4,43	4,27	4,09	3,53	3,87	3,6	2,82
NH ₄ NO ₃	1,85	2,66	3,59	4,44	4,75	4,72	3,95
(CaNO ₃) ⁺	7,56	7,84	8,19	8,35	8,57	9,44	10,42
(CaOH) ⁺	0,04	0,04	0,04	0,05	0,05	0,05	0,05
NH ₄ ⁺	0,09	0,04	0,09	0,09	0,09	0,08	0,07
Ca(OH) ₂	0,98	1,11	1,27	2,13	2,32	2,42	2,42
NO ₃ ⁻	22,8	22,13	21,32	20,49	19,24	19,96	20,36
Ca ⁺²	5,77	5,51	5,17	4,81	4,43	4,39	4,34
Σ	100	100	100	100	100	100	100

Рост температуры от 35 до 80°C не способствует образованию твердой фазы, кроме этого при температурах 35-55°C не фиксируется образование газовой фазы.

Анализ данных расчета равновесной системы позволяет установить технологические параметры нейтрализации азотнокислотной вытяжки и получить удобрения заданного состава.

Применение термодинамического метода расчета равновесного состава растворов позволяет получать удобрения заданного состава, в том числе из обедненных фосфоритов Украины.

- 1) Соколовский А.А., Яхотова Е.Л. Применение равновесных диаграмм растворимости в технологии минеральных солей – М.: Химия, 1982. – 264с.
- 2) Морачевский А.Г., Сладков И.Б. Физико-химические свойства молекулярных неорганических соединений. Справочник. – Л.: Химия, 1987. – 187 с

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАЗЛОЖЕНИЯ НИТРАТОВ СЕРЕБРА И ПАЛЛАДИЯ В ТЕХНОЛОГИИ КАТАЛИЗАТОРОВ

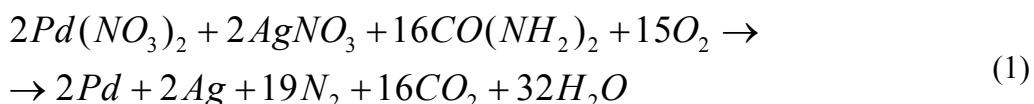
Савенков А.С., Яковишин В.А., Бутенко А.Н.
Национальный технический университет «ХПИ», savenkov@kpi.kharkov.ua

Серебряные катализаторы, используемые при окислительной конверсии метанола в формальдегид, обладают высокой прочностью и термостойкостью, но при этом малоустойчивы к действию каталитических ядов и недостаточно селективные[1]. В связи с этим возникает необходимость в подробном изучении процессов происходящих при производстве таких активных масс.

Нами была изучена кинетика процессов происходящих при термической обработке смеси нитратов серебра и палладия с карбамидом, осуществляющейся при производстве серебряно-палладиевых катализаторов синтеза формальдегида.

Исследуемые образцы готовили совместным осаждением нитратов серебра и палладия с карбамидом из раствора. После сушки, до постоянной массы, образцы подвергали химическому, рентгеноструктурному и дериватографическому анализам.

Данные рентгеноструктурного и химического анализов позволили установить маршрут протекания химической реакции:



Для описания кинетики процесса была предложена следующая математическая модель:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d \alpha}{dT} = K_1 e^{-\frac{E}{RT}} \alpha^n (1 - \alpha)^m \\ \frac{dT}{d\tau} = \frac{\Delta H}{C_p} K_2 e^{-\frac{E}{RT}} \alpha^n (1 - \alpha)^m \end{array} \right. , \quad (2)$$

Систему решали численным методом Рунге-Кута на ЭВМ. Обработка серии экспериментальных данных, соответствующих потере массы образца в температурном интервале 250 - 5500С, который характеризует разложение нитратов, позволила определить параметры указанной выше системы уравнений.

В таблице 1 приведены данные о потере массы образца полученные в ходе эксперимента и путём решения системы дифференциальных уравнений.

Таблица 1 – Зависимость потери массы образца от времени разложения

	Потеря массы, %				
	50 мин	60 мин	70 мин	80 мин	90 мин
эксперимент	0,095	0,18	0,19	0,23	0,28
модель 1	0,12	0,15	0,19	0,23	0,28

На рисунке 1 представлена зависимость потери массы от температуры разложения полученная экспериментально и путём решения системы уравнений.

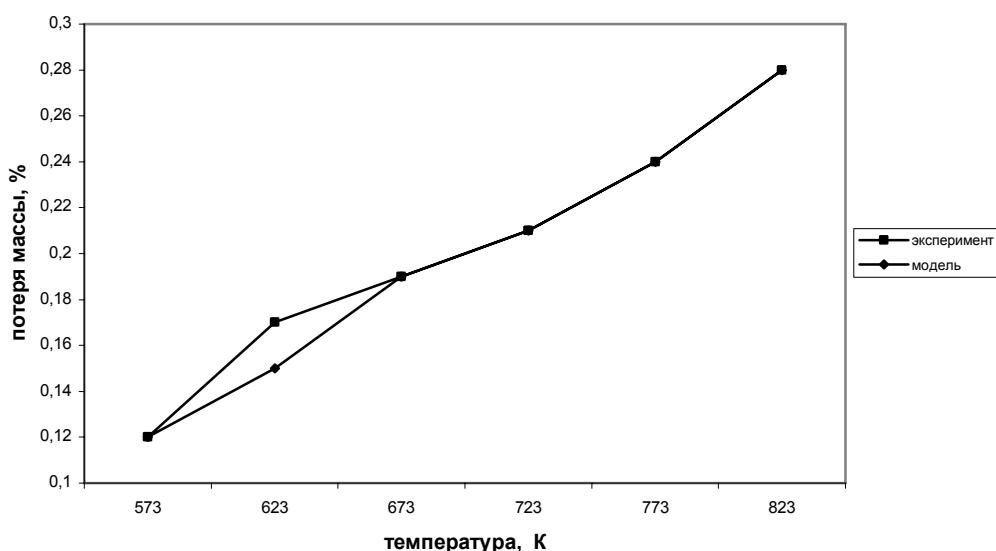


Рис. 1. Зависимость потери массы от температуры разложения

Анализ представленных данных показывает, что выбранная модель достаточно полно описывает изучаемый процесс. В результате решения системы уравнений были получены следующие результаты: $K_1=0.03$; $K_2=225$; $n_1=1.04$; $n_2=1.2$; $\Delta H=5.16 \text{ кДж/моль}$; $C_p=25.5 \text{ Дж/моль К}$

Из представленных выше уравнений, становится возможным определение времени, необходимого для протекания реакции при заданной глубине разложения и температуре.

- 1) Отводенко С.Э., Бутенко А.Н., Савенков А.С., Суворин А.В. Анализ процесса модифицирования каталитических Ag/носитель систем получения метаналя.// Вестник НТУ «ХПИ». Вып.9.-Харьков, 2007. – с. 162 – 172.
- 2) Жаброва Г.М., Каденаці Б.М., Шкарин А.В. Изучение кинетики топохимических процессов в неизотермическом режиме дериватографическим методом.// Журн. Физ. Химии, 1971, т.45, №7. – с. 1702 – 1706.
- 3) Аннопольский В.Ф., Беляев Э.К., Книгавко И.П. К вопросу изучения кинетики твердофазных процессов в неизотермических условиях. // Журн. Физ. Химии, 1973, т.47, №9. – с. 2283 – 2289.
- 4) Светлов Б.С. Методические указания по курсу «Избранные главы химической физики». – М.: МХТИ, 1985: – с. 35.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДИКИ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ

Середа А.А., Безносик Ю.А.

Национальный технический университет Украины «КПИ», seredaalya@yandex.ru

С 2001 года Украина является единственной страной из бывшего СССР, имеющей свою Национальную Фармакопею, которая гармонизирована с Европейской. Государственная Фармакопея Украины (ГФУ) стала неотъемлемой частью фармацевтической жизни страны и помогает перейти на европейские стандарты качества лекарственных средств. В 2004 году вышло в свет первое дополнение к ГФУ1, в которое была включена общая статья «Статистическая обработка результатов химического эксперимента» [1]. По сравнению с аналогичной статьей ГФ СССР 11 издания (ГФ11) [2] она имеет ряд отличий. Наиболее значительное изменение касается введения раздела статистического анализа функции нескольких случайных переменных, который отсутствует в ГФ11. В фармакопейном анализе наиболее часто реализуется методика, в которой параллельно анализируется испытуемый и стандартный растворы.

Цель данной работы – написание программы для прогнозирования общей неопределенности анализа готового лекарственного средства методом ВЭЖХ и ГЖХ для оптимизации методики контроля качества на примере анализа препарата «Диклофенак натрия, 2.5% раствор для инъекций». Необходимо провести анализ качества готового лекарственного средства исходя из теоретически рассчитанной неопределенности пробоподготовки на основании табличных данных для мерной посуды и практически полученной неопределенности хроматографического анализа. Расчет погрешности при помощи программы позволит оптимизировать процесс контроля качества фармацевтической продукции.

Решение о качестве продукции, принимаемое на основании результатов анализа, должно быть метрологически обосновано. Фармакопеи – как Европейская фармакопея (ЕР), так и Американская фармакопея (USP) – используют следующую концепцию: «Результаты анализа принимают во внимание без учета доверительных интервалов». Это предполагает, что пределы содержания и неопределенность анализа должны быть взаимоувязаны.

Можно выделить две составляющие неопределенности анализа (Δ_{As}), которые необходимо учитывать при разработке методики:

- неопределенность конечной аналитической операции (Δ_{FAO});
- неопределенность пробоподготовки (Δ_{Sp}).

Неопределенность конечной аналитической операции (FAO) зависит от конкретной методики и от оборудования. В связи с этим неопределенность FAO необходимо контролировать при каждом выполнении анализа. Для этого в хроматографических методиках в тесте «Пригодность хроматографической системы» регламентируется максимально-допустимое относительное стандартное отклонение (RSD_{max}).

Неопределенность пробоподготовки (Δ_{Sp}), наоборот, легко поддается стандартизации. Использование соответствующей мерной посуды и весов обеспечивает неопределенность операций взвешивания и разбавления, не превышающей известных предельных значений. Указания по оценке неопределенности пробоподготовки и информация о неопределенности объемов для мерных колб, операций взвешивания и для последовательных разведений приведена в ГФУ. Поэтому экспериментальное изучение неопределенности пробоподготовки во многих случаях не требуется – ее можно легко прогнозировать. При этом неопределенность пробоподготовки легко регулируется правильным выбором используемых разведений и навесок.

Для готовых лекарственных средств общая неопределенность анализа должна соответствовать условию [3]:

$$\Delta_{As} \leq 0.32 * B,$$

где B – симметричные допуски содержания.

Прогнозированная полная неопределенность результата анализа (Δ_{As}) может быть рассчитана по формуле:

$$\Delta_{As} = \sqrt{\left(\sum_i \Delta_i\right)^2},$$

где Δ_i – отдельная составляющая неопределенности, выраженная как односторонний относительный доверительный интервал для уровня надежной вероятности 95 %, в процентах.

Обычно полную неопределенность Δ_{As} можно разбить на составляющие, связанные с неопределенностью пробоподготовки (Δ_{Sp}) и с неопределенностью конечной аналитической операции (Δ_{FAO}). В таком случае полная неопределенность результата анализа (Δ_{As}) будет рассчитываться по формуле:

$$\Delta_{As} = \sqrt{\Delta_{FAO}^2 + \Delta_{Sp}^2}.$$

Программа разработана средствами Visual Basic. Программа предназначена как для практических аналитиков контрольно-аналитических лабораторий фармацевтических предприятий, так и для разработчиков аналитической нормативной документации. Имеет дружественный интерфейс и проста в обращении, может применяться для анализа других лекарственных средств методами газовой и жидкостной хроматографии.

Таким образом, разработанная нами программа помимо конкретной практической задачи обработки результатов хроматографического анализа готовых лекарственных средств может быть применима на стадии разработки указанных методик с целью их оптимизации и валидации.

- 1) Статистичний аналіз результатів хімічного експерименту // Державна Фармакопея України / Державне підприємство «Науково-експертний фармакопейний центр». - Доповнення 1.- Харків: РІРЕГ, 2004.- С. 187-214.
- 2) Государственная Фармакопея СССР XI: Вып. 1. Общие методы анализа / МЗ СССР – 11-е изд., доп. – М.: Медицина, 1987. – С. 199-251.
- 3) Валідація аналітичних методик і випробувань // 1-е вид. - Харків: РІРЕГ, 2001. – С. 58-67. – Доповнення 1. – 2004. – С. 2-4.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА АКТИВИРОВАНИЯ УГЛЯ-СЫРЦА

Швец Д.И.*, Сангинова О.В., Гуля Н.В.

*Институт сорбции и проблем эндоэкологии НАНУ,

Национальный технический университет Украины «КПИ», kxtp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Активные угли применяются в промышленности как адсорбенты для разделения и очистки веществ в газовой и жидких фазах, в качестве катализаторов и носителей катализаторов, хемосорбентов и осушителей. Эффективное использование угля для решения той или иной производственной задачи возможно при соответствии его качества (пористая структура, природа поверхности, состав минеральной части, механическая прочность) условиям проведения технологического процесса.

Технологический процесс активирования угля-сырца (конденсированного углерода), заключается в термической обработке его парогазовой смеси при следующих параметрах: температура – 850÷900 °C, давление газа – 0,03 МПа, давление воздуха – 0,3 МПа, водяного пара – 0,6 МПа. Данный процесс является фактически окислением и сопровождается удалением части скелетного углерода в виде оксидов углерода, в результате чего происходит развитие пористой структуры и уголь становится активным, т.е. эффективным поглотителем веществ из газовой среды и растворов (адсорбентом).

Повышение температуры активации выше 900°C приводит к ухудшению качества углерода и графитизации поверхности угля. Понижение температуры ниже 800 - 850°C приводит к резкому снижению интенсивности процесса за счет уменьшения коэффициента разложения пара; последний при оптимальных условиях (850 – 900 °C) составляет 40 - 45%.

Поддержание температуры активации требует притока тепла. Применение программ-симуляторов, таких как Hysys, Unisim, ChemCad, для отыскания оптимальных условий использования тепла, получаемого при сжигании продуктов активации, позволяет снизить себестоимость полученного продукта и количество твердых отходов – золы и пылевидного угля. Основным преимуществом таких программ является то, что пользователю не требуется разрабатывать модели каждого аппарата технологической схемы; он лишь конфигурирует блоки, входящие в состав библиотеки. Каждый блок моделирует часть процесса – аппарат, поток или регулятор.

В данной работе рассмотрены вопросы моделирования процесса активирования угля-сырца в среде ChemCad. На первом этапе моделирования из библиотеки выбираются стандартные блоки, соответствующие элементам технологической схемы. В случае, если требуемые компоненты отсутствуют в библиотеке, в программе ChemCad предусмотрена возможность создания так называемых псевдокомпонентов с заданными химико-физическими свойствами. Далее задаются параметры каждого из блоков, формируется перечень всех химических компонентов и выбирается термодинамический пакет, в соответствии с которым рассчитываются физико-химические свойства компонентов. Следующий этап связан непосредственно с расчетом материального баланса, моделированием различных режимов работы объекта и поиском оптимальных условий проведения процесса. Технологическая схема производства активных углей в ChemCad представлена на рис. 1.

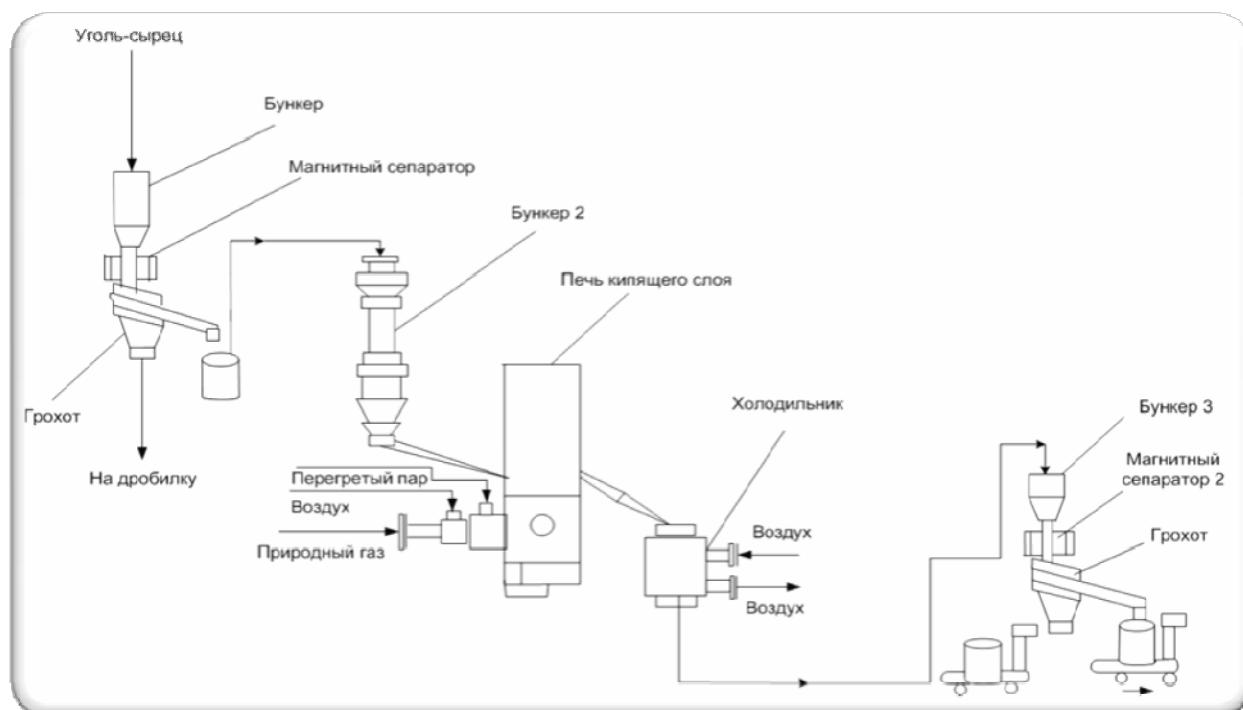


Рис. 1. Схема процесса активирования угля-сырца в ChemCad

В соответствии с технологией активирования угля-сырца взвешенный на весах уголь-сырец (карбонизат) засыпается в приемный бункер, проходит магнитный сепаратор для удаления ферромагнитных примесей (включений), разделяется на грохоте с набором сит по фракциям от 0,3 до 3,0 мм, свыше 3,0 мм и менее 0,3 мм. Емкость бункера - 0,12м³. На конусной части бункера установлено запорное устройство, которое регулирует поступление угля в печь. Загрузка периодическая. Максимальное количество загружаемого угля - сырца в печь - 80 кг.

Для активации угля - сырца в печи кипящего слоя в камере сгорания сжигают газообразное топливо - природный газ. Продукты сгорания смешивают с перегретым водяным паром, подаваемым из теплообменника, где происходит выравнивание температуры смеси за счет дальнейшего перемешивания ее компонентов. Распределаясь под беспровальной колпачковой решеткой, паро-газовая смесь при $t = 950 - 1000^{\circ}\text{C}$ проходит под давлением снизу вверх через слой угля – сырца, псевдоожижая его. Процесс активации происходит при температуре кипящего слоя $800-950^{\circ}\text{C}$ в течении 3 часов. Высота кипящего слоя составляет 300-400 мм. В результате взаимодействия углерода угля-сырца с реагентом (водяным паром), в зависимости от длительности процесса, образуется пористая структура угля, включающая все разновидности пор с адсорбционным объемом $0,4 - 1,0 \text{ см}^3/\text{г}$, при степени выгорания углерода 50 - 60%. Насыпная плотность – $0,3-0,4 \text{ г/ см}^3$. После активации уголь

поступает в разгрузочный бункер для охлаждения. Охлаждение осуществляется атмосферным воздухом от воздуходувки до температуры 40 - 60°C. Межтрубное пространство разгрузочного бункера продувают азотом под давлением 0,03 мПа для создания инертной атмосферы, а в трубы подают атмосферный воздух давлением 0,3 мПа. Охлажденный активный уголь подается в приемочный бункер магнитного сепаратора для удаления ферромагнитных примесей (включений), а затем поступает в грохот с набором сит для фракционирования.

Фракции от 0,5 мм до 2,0 мм (КАУ-1, -2; САУ-1, -2, тип А); от 0,2 мм до 0,63 мм (КАУ-1, -2; САУ-1, -2, тип Б); собирают и передают на склад готовой продукции. Фракции от 0,2 мм и ниже идут в отходы. Твердые отходы (зола и пылевидный уголь) собираются в циклоне и утилизируются как удобрение.

Проведенные расчеты показали, что из 80 кг угля - сырца можно получить около 32 кг готового товарного продукта- активных углей КАУ-1 и КАУ-2, САУ-1 и САУ-2. Выход продукта составляет в среднем 40%.

Поиск оптимальных условий использования тепла, получаемого при сжигании продуктов активации, выполняется для конкретного предприятия отдельно, в зависимости от установленного оборудования. Таким образом, применение программ-симуляторов позволяет снизить стоимость полученного угля-сырца за счет перераспределения потоков тепла, получаемого при сжигании продуктов активации.

MODELLING OF UNCATALYZED OXIDATION OF CYCLOHEXANE

Pohorecki R.A.^a, Moniuk W.I.^a, Wierzchowski P.P.^b

^aWarsaw University of Technology, www.ichip.pw.edu.pl

^bPolish Academy of Science, www.icho.edu.pl

The process of cyclohexane oxidation is widespread in chemical industries all over the world, mostly to get cyclohexanone and cyclohexanol, being in turn processed into caprolactam, adipic acid, and – subsequently – polyamide fibers and plastics (as nylon 6, nylon 66). Practically all of the adipic acid and about 63% of the caprolactam produced in the world in 1990 used cyclohexane oxidation as the first step. The amount of cyclohexane oxidized this way exceeds 4 million t/year. The process is a relatively difficult one, since the desired products (i.e., cyclohexanone and cyclohexanol) are intermediates in a sequence of reactions, and the overoxidation results easily in a number of useless (or hardly recuperable) by-products.

Cyclohexane oxidation is a two – phase process, carried out in a gas – liquid system. The course of the process may be affected both by chemical kinetics and by hydrodynamic factors. One of the processes commercially employed to oxidize cyclohexane is the Polish CYCLOPOL process. In this process, cyclohexane is oxidized by air or mixture O₂/air in a horizontal flow reactor. The reactor is divided into 4 – 6 chambers, to which air is introduced through spargers. In order to keep pace with other leading companies, the owners of the CYCLOPOL process continue to carry on research and development work, aimed at increasing productivity and selectivity of the process.

The mechanism of cyclohexane oxidation is a complicated, multistage, free-radical chain reaction with degenerated chain, comprising different chain inhibition, chain propagation and chain termination steps. A reaction scheme comprising up to 154 reactions has been developed by Tolman, but was never published (at least not in the open literature). A number of simplified kinetic models for both catalytic and noncatalytic oxidation have been described in our earlier paper [1].

An early model of noncatalytic cyclohexane oxidation was presented by Kharkova et al. [2]. The model was based both on the literature data and the author's own experiments. The model comprises 19 reactions, but for some of them only the ranges of values of the reactions rate constants were given, which renders it useless for detailed design purposes.

On the basis of that model and our own experimental data we formulated a new, modified kinetic model shown in Table 1.

Table 1 - Kinetic model of the uncatalyzed oxidation of cyclohexane

1	$\text{RH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{R}^* + \text{HO}_2^*$	12	$\text{RO} + \text{RO}_2^* \rightarrow \text{D} + \text{RO}_2^*$
2	$\text{R}^* + \text{O}_2 \rightarrow \text{RO}_2^*$	13	$\text{ROOH} + \text{R}^* \rightarrow \text{ROH} + \text{RO}^*$
3	$\text{RH} + \text{RO}_2^* \rightarrow \text{ROOH} + \text{R}^*$	14	$\text{ROOH} + \text{R}^* \rightarrow \text{RO}_2^* + \text{RH}$
4	$\text{RH} + \text{RO}^* \rightarrow \text{ROH} + \text{R}^*$	15	$2\text{RO}_2^* \rightarrow \text{RO} + \text{ROH} + \text{O}_2$
5	$\text{ROOH} \rightarrow \text{RO}^* + \text{OH}^*$	16	$\text{ROOH} + \text{D} \rightarrow \text{RO} + \text{H}_2\text{O} + \text{D}$
6	$\text{ROOH} + \text{ROH} \rightarrow 2\text{RO}^* + \text{H}_2\text{O}$	17	$\text{D} + \text{ROH} \rightarrow 2\text{D}$
7	$\text{ROOH} + \text{RO} \rightarrow 0,7\text{RO} + 0,3\text{D} + \text{RO}^* + \text{OH}^*$	18	$2\text{RO}_2^* \rightarrow 2\text{RO}^* + \text{O}_2$
8	$\text{ROOH} + \text{RH} \rightarrow \text{RO}^* + \text{R}^* + \text{H}_2\text{O}$	19	$\text{RH} + \text{OH}^* \rightarrow \text{R}^* + \text{H}_2\text{O}$
9	$\text{ROOH} + \text{RO}^* \rightarrow \text{ROH} + \text{RO}_2^*$	20	$\text{RO}^* + \text{RH} \rightarrow \text{R}^* + \text{D}$
10	$\text{ROOH} + \text{RO}_2^* \rightarrow \text{RO} + \text{ROOH} + \text{OH}^*$	21	$\text{RH} + \text{RO}^* \rightarrow \text{R}^* + \text{D}'$
11	$\text{ROH} + \text{RO}_2^* \rightarrow \text{RO} + \text{RO}^* + \text{H}_2\text{O}$	22	$\text{D} \rightarrow \text{D}'$

D – by-products in the liquid phase; D' – by-products in the gas phase.

Notice: The numbers of hydrogen atoms in cyclohexanol and cyclohexanone radicals are different.

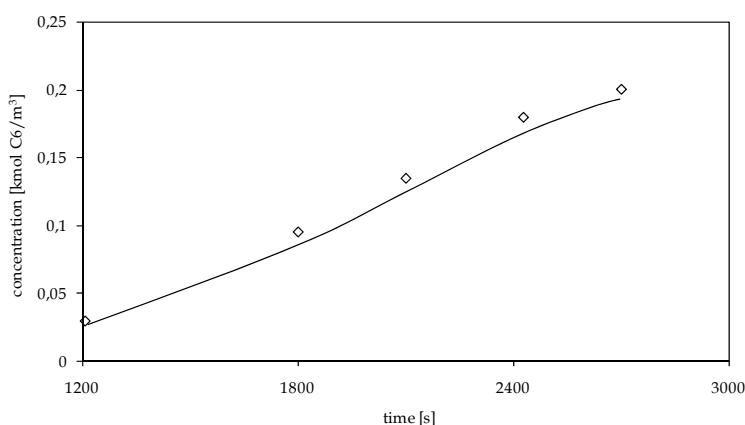


Fig. 1. Dependence of the ROOH concentration on time

In order to determine the reaction (1 – 22; Table 1) rate constants, measurements of the kinetics of the cyclohexane oxidation were performed. Experiments were carried out in a stainless steel PARR reactor with capacity $1 \cdot 10^{-3}\text{m}^3$, with carefully passivated inner surface.

Solving differential equations of the individual reactions (1 – 22) and making use of the experimental data (products concentrations), the reaction rate constants were determined.

A comparison of the results calculated using the kinetic model (Table 1) with the experimental data is shown in Figs. 1 – 4. The concentrations of by-products D and D' are defined as $\text{kmol C}_6/\text{m}^3$, i.e.: number of the molecule moles containing six atoms of carbon per unit solution volume. As it is seen, good agreement between experimental and calculation data has been obtained. Obviously, the comparison shown in Figs. 1 – 4 only illustrates the correctness of the constants fitting. In order to get a comparison of the model results with an independent set of data, a model of an industrial reactor has been used.

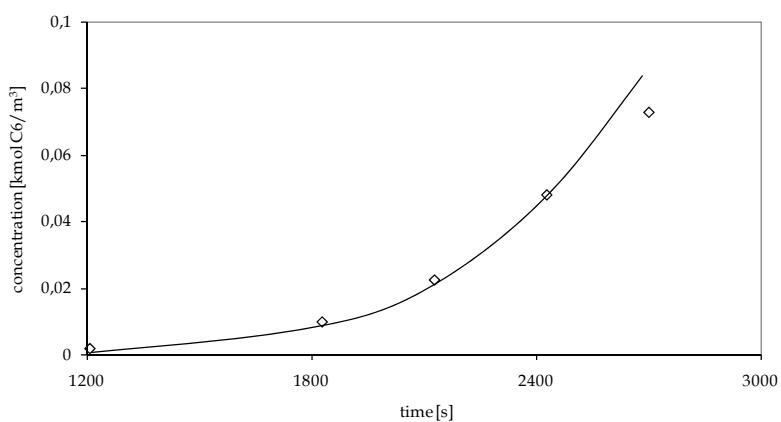


Fig. 2. Dependence of the RO concentration on time

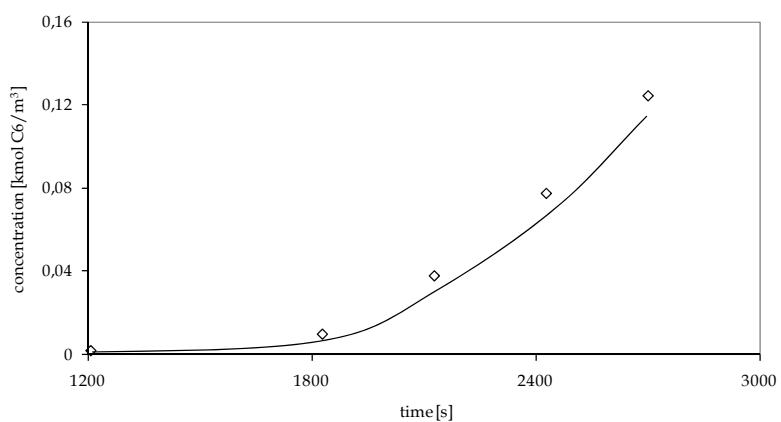


Fig. 3. Dependence of the ROH concentration on time

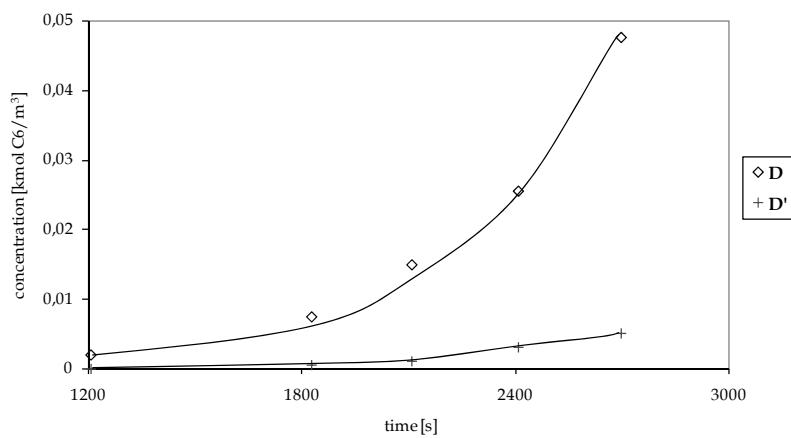


Fig. 4. Dependence of the D and D' concentrations on time

The model of kinetics of the reaction described above , together with a suitable description of hydrodynamics (bubble diameter, gas holdup, interfacial area, liquid mixing), has been used to develop a mathematical model of the industrial reactor in the CYCLOPOL process.

For the bubble diameter calculation the population balance equation was used. For the gas holdup calculations the ASMM model (algebraic slip mixture model) was used. The details of the models used to calculate bubble diameters (population balance) and gas holdup (ASMM model) and the results obtained using these models, have been described in our earlier paper [3].

The mixing of liquid in the reactor was investigated by three methods:

- classical stimulus-response technique using radioactive tracer with Br-82 isotope to measure the residence time distribution curve;
- a specially devised technique, consisting in the employment of a wooden sphere of density identical to that of the reaction mixture, and containing a radioactive isotope La-140. The trajectories of this sphere in the reactor were observed;
- a computational fluid dynamics (CFD) method, used to establish the velocity patterns inside the reactor.

All the three methods gave a good picture of the flow pattern in the reactor.

The mathematical model of the industrial reactor enabled the calculation of the following parameters:

- degree of conversion,
- selectivity towards cyclohexanol,
- selectivity towards cyclohexanone,
- selectivity towards cyclohexyl hydroperoxide,
- amount of the byproducts (reactive and nonreactive),
- concentration profile of all the above species,
- concentration profile of dissolved oxygen,
- concentration of oxygen in the outlet gases.

The process (CYCLOPOL-bis), employing the uncatalyzed oxidation step, has been successfully implemented on industrial scale in the Nitrogen Works Tarnów – Mościce S.A. (Poland) in 2004 [4].

The first step of the process, comprising the uncatalyzed cyclohexane oxidation mainly to the cyclohexyl hydroperoxide is carried out in a multisectional horizontal flow reactor. The second step of the process, comprising the selective catalytic decomposition of the cyclohexyl hydroperoxide is carried out in a reactor of similar shape.

The results of simulations of the uncatalyzed cyclohexane oxidation (first step) were compared with the industrial reactor data (reactor volume = 102 m³). The results of comparison are shown in Table 1.

The data from two independent runs were used. By a run one week work under steady conditions is meant. As it is seen, good agreement between industrial reactor data and results of simulations has been obtained.

Table 1 – Results of calculations and experiments.

		RUN I	RUN II
Degree of conversion (%)	calc.	3,90	3,97
	exp.	3,82	3,95
Hydroperoxide (%)	calc.	1,47	1,47
	exp.	1,35	1,42
Cyclohexanol (%)	calc.	1,90	1,92
	exp.	1,88	1,98
Cyclohexanone (%)	calc.	0,94	0,97
	exp.	0,91	0,97

A new, comprehensive model of the noncatalytic cyclohexane oxidation in the liquid phase, including reaction and mass transfer kinetics, has been developed. This model, together with a suitable description of hydrodynamics (bubble diameter, gas holdup, interfacial area, liquid mixing) has been used to develop a mathematical model of an industrial reactor in the CYCLOPOL-bis process. Numerical simulations of the industrial reactor, performed using this model, gave good agreement with the operating data.

- 1) *Pohorecki, R., Baldyga, J., Moniuk, W., Podgórska, W., Zdrójkowski, A., and Wierzchowski, P.T.*, Kinetic model of cyclohexane oxidation // Chemical Engineering Science – 2001. – vol. 56 – p.p. 1285 – 1291.
- 2) *Kharkova,, T.V., Arest-Yakubovich, I.L., and Lipes, V.V.*, Kinetic model of the liquid – phase oxidation of cyclohexane. I. Homogeneous proceeding of the process // Kinetika i Kataliz (Kinetics and Catalysis) – 1989. – vol. 30 – p.p. 954 – 958 (in Russian).
- 3) *Pohorecki, R., Moniuk, W., Bielski, P., and Molga, E.*, Hydrodynamics and mass transfer in two – phase gas – liquid reactors // Multiphase and multifunction reactors for the basic chemical, biotechnology and environmental protection processes, Burghardt A. (ed.) Algi, Wrocław, Poland // 2003 – pp. 15 – 45 (in Polish).
- 4) Polish Patent Applications, P-358357 (2003); P-365299 (2004).

Acknowledgements: This work was supported by the Nitrogen Works Tarnów – Mościce S.A. (Poland).

СЕКЦІЯ 3

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРИРОДООХОРОННИХ ПРОЦЕСІВ

ПРОГНОЗУВАННЯ ЗАБРУДНЕННЯ ПОВІТРЯ З ВИКОРИСТАННЯМ НЕЙРОННИХ ТА НЕЙРОНЕЧІТКІХ МЕРЕЖ

Бугаєва Л.М., Євхімович Л.В., Ходаківська А.С., Титов М.Ю.

Національний технічний університет України «КПІ», bugaeva_l@ukr.net

Прогнозування є досить складною задачею аналізу з багатьох причин. Це недолік даних, або їх незадовільна якість, зміна середовища, вплив суб'єктивних факторів та ін. Задача прогнозування в загальному випадку зводиться до визначення майбутніх значень на основі вже отриманих. Існують різні алгоритми пошуку закономірностей в даних, але останнім часом для цього часто застосовуються нейромережеві методи.

Загальну схему прогнозування можна описати як можна бачити на рис.1.

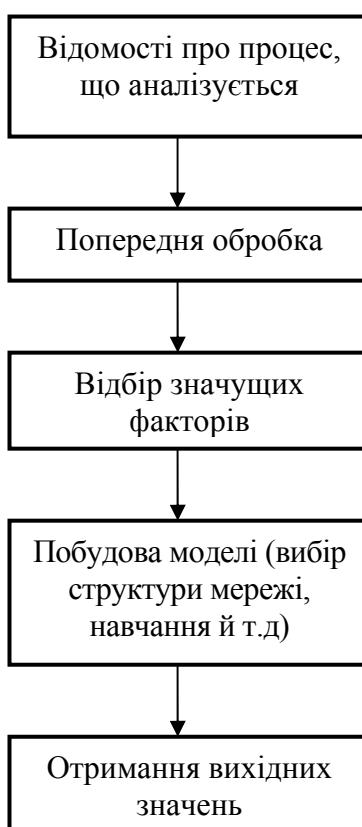


Рис. 1. Загальна схема процесу прогнозування

Стосовно вихідних даних, то по-перше треба вибрати з них максимальну кількість значущих факторів. Таким чином вибирається інтервал спостережень (глибини занурення), тобто, за якою кількістю попередніх значень часового ряду здійснюється прогнозування. Крім цього визначаються додаткові фактори, що впливають на поведінку прогнозуємої величини. Часом необхідно виконати попередню обробку даних: відтворити пропущені дані, ліквідувати аномальні відхилення, видалити шуми. Якісна попередня обробка може значно покращити результати прогнозування.

Відомі моделі для прогнозування – це й звичайні моделі лінійної регресії, й сучасні нелінійні типу нейронних мереж. Принадність нейронних мереж полягає, насамперед, у відсутності суворих математичних вимог, що суттєво спрощує прогнозування при аналізі погано формалізованих процесів.

Задача оцінювання та прогнозування рівня забруднення повітря зводиться до визначення в повітряному басейні вмісту шкідливих домішок. Основною складністю такого прогнозування є те що забруднення характеризується просторово часовою неоднорідністю, яке визначається розташуванням джерел викидів, їх потужністю та зміною погодних умов і режиму викидів в атмосферу.

При моделюванні нейронними мережами прямого розповсюдження були використані дані Центральної геофізичної обсерваторії за 2006 рік по забрудненню повітря знятими з 21 пункту спостереження міста Києва. Ці дані містили відомості про такі забруднники повітря, як двоокис сірки, сульфати, окис вуглецю, фенол та фтористий водень.

Розроблена розподілена система прогнозування рівня забруднення атмосферного повітря базується на архітектурі клієнт-сервер на мові програмування Java в середовищі програмування JBuilder 2006. Була використана операційна система Windows XP, але можливо використання й Unix-системи. Для розгортання web-додатку (сервлету) на ній було інсталювано Apache Tomcat 5.0. Для побудови нейронної мережі використовувався пакет Neural Network Toolbox середовища Matlab R2006b [1].

Для накопичення даних про забруднення атмосферного повітря використовується база даних MySQL 5.0.16.

В роботі було вирішено дві задачі:

1. Прогнозування забруднення повітря на визначену кількість місяців вперед у пунктах спостереження Києва.
2. Прогнозування забруднення повітря в залежності від температури повітря у пунктах спостереження Києва.

Для розв'язку поставлених задач було обрано нейронну мережу прямого розповсюдження з сигмоїдальною та логістичною функціями активації. Результати рішення представлено на рис. 2.

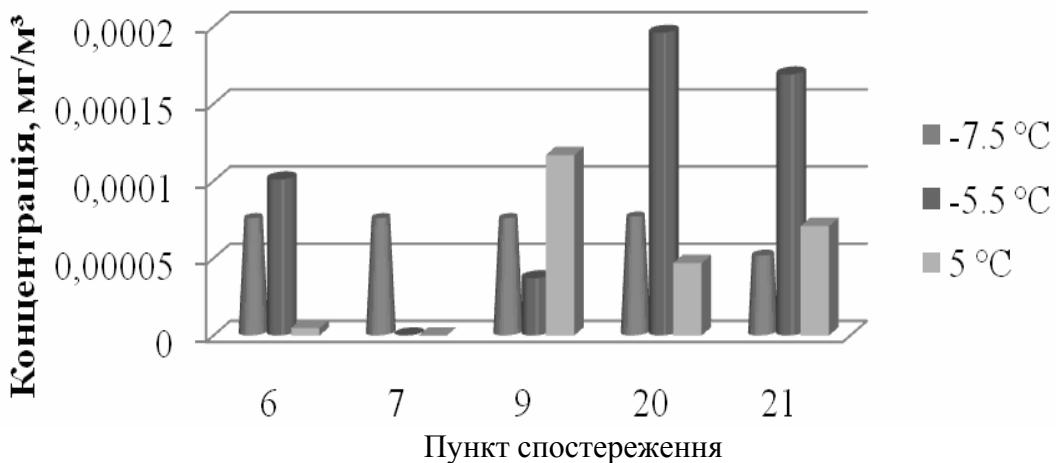


Рис. 2. Результати прогнозування концентрацій фтористого водню

Перевірка результатів прогнозування на контрольній множині даних спостережень показала високу точність прогнозованих значень, що підтвержує ефективність застосування апарату нейронних мереж до задач прогнозування в екології.

Крім прогнозування нейронними мережами, зараз виконується робота по використанню нейронечітких мереж типу Суджено із застосуванням пакету Fuzzy Logic Toolbox по даних 2006 року. Далі мають бути зроблені прогнози по даних забруднення 2007-2008, підібраних з високою щільністю, що не потребує відтворення пропущених даних.

Таким чином, створюється можливість покращити результати прогнозування, а також порівняти його якість при використанні різних видів мереж, в тому числі й гібридних, що враховують нечіткість даних спостережень.

- 1) Дьяконов В.Д. Математические пакеты расширения Matlab. Специальный справочник.
– СПб.: Питер 2004. – 475 с.

МЕТОДОЛОГІЧНІ ОСНОВИ СТВОРЕННЯ АВТОМАТИЗОВАНОЇ СИСТЕМИ БАГАТОРІВНЕВОГО СОЦІО-ЕКОЛОГІЧНОГО МОНІТОРИНГУ

Голуб С.В.

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, fpkpk@cdtu.edu.ua

При розробці автоматизованих систем соціо-екологічного моніторингу (СЕМ) виникають ряд протиріч структурного, методичного та економічного характеру.

Функціонування сучасних моніторингових інформаційних систем (МІС) ґрунтуються на основі вже створених баз даних. Структурне протиріччя проявляється в тому, що основою моніторингу є датчики та прилади з визначення складу об'єктів довкілля, а в структурі сучасних МІС процеси перетворення вимірювальної інформації, за результатами яких формуються бази даних, не враховуються. Разом з тим діючими методиками електрохімічного визначення концентрації техногенних забруднювачів допускається похибка до 40 %.

Складність об'єктів довкілля та значна взаємна залежність характеристик об'єктів, які використовуються для моделювання станів довкілля, приводить до виникнення методичних протиріч між значною кількістю різнопідної інформації про об'єкти довкілля та обмеженими можливостями отримання їх адекватної моделі в аналітичному вигляді існуючими методами.

Відсутність адекватних багатопараметричних моделей об'єктів довкілля, які відображають комплексний вплив техногенних та природних факторів на рівень захворюваності населення, компенсується значною кількістю контролюваних параметрів довкілля. Це породжує економічне протиріччя між обмеженою кількістю фінансових, часових, технічних та людських ресурсів та надлишковою кількістю контролюваних параметрів довкілля.

В результаті декомпозиції процесу перетворення інформації в технологіях СЕМ було виділено три рівні моніторингу із відповідними об'єктами, методами та критеріями якості перетворення інформації. Виявлено, що вирішення структурних та економічних протиріч можливо за умови підвищення різноманітності методів синтезу алгоритмів перетворення інформації. Обмежені можливості цих методів до синтезу моделей об'єктів різних рівнів моніторингу викликає методичні протиріччя.

В результаті проведених досліджень розроблені методи підвищення адекватності відображення властивостей об'єктів довкілля в моделях на кожному рівні моніторингу довкілля. На їх основі розроблена єдина технологія синтезу моделей різних рівнів моніторингу. Вирішена проблема підвищення точності електрохімічних вимірювань складу об'єктів довкілля. Для забезпечення емерджентності системи багаторівневого перетворення інформації отримали подальший розвиток технології багаторівневого моделювання об'єктів окремих рівнів моделювання та зв'язків між агрегатами різних рівнів моніторингу.

Розроблена прикладна інформаційна технологія СЕМ у вигляді автоматизованої системи багаторівневого моніторингу, яка отримала назву „Евристична система спостереження”. Ця технологія впроваджена у практику створення автоматизованих систем управління багаторівневим моніторингом в соціо-екології, економіці, медицині, державному управлінні, освіті.

ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ БАГАТОРІВНЕВИХ ТЕХНОЛОГІЙ ІНФОРМАЦІЙНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Голуб С.В.

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, fpkpk@cdtu.edu.ua

Підвищення ефективності управління об'єктами довкілля є особливо актуальним в сучасних умовах обмеженості ресурсів, бюджетного дефіциту, та залишковості фінансування галузі охорони природи. При проектуванні систем управління (СУ) в галузі соціоекології визначальним чинником є ефективність формування керуючих впливів та технологій їх застосування. Це неможливо забезпечити без достатньої кількості інформації про стан об'єкта управління.

На даний час в переважаючій кількості випадків висновки про стан об'єкта моніторингу отримуються експертним методом на основі статистичної обробки даних. Одним із напрямків вдосконалення СУ в даній галузі є підвищення рівня автоматизації процесу прийняття рішення за рахунок впровадження інформаційних технологій моніторингу довкілля та їх проектування як евристичних систем спостереження (ЕСС). В основі даної роботи — концепція використання ЕСС в технологіях автоматизованого управління довкіллям. ЕСС — інформаційна система моніторингу об'єктів навколошнього середовища, в якій висновки про стан цих об'єктів робляться на основі евристик інформаційних моделей. Моделі отримують за результатами вимірювань характеристик об'єктів довкілля. При застосуванні інформаційних технологій як засобів збору, передачі, зберігання, обробки та аналізу даних значно підвищується оперативність та інтелектуальність доставлених даних, висновки робляться за результатами моделювання об'єктів довкілля, рішення є прорахованими та ефективними.

В цих умовах особливу вагу набуває здатність моделей об'єктів довкілля забезпечити процес прийняття управлінських рішень необхідним рівнем інформації. Застосування класичних алгоритмів інформаційного моделювання, зокрема багаторядного алгоритму за методом групового врахування аргументів (МГУА) [1], в умовах певного рівня інформаційної невизначеності первинного опису об'єкту часто є недостатнім для отримання адекватної моделі. Оскільки обробка даних не збільшує кількості інформації первинного опису [2], постає завдання підвищення „потужності” технології моделювання для більш повного відображення в моделі наявної інформації, яка міститься в масиві експериментальних даних.

Для цієї мети застосовують кілька методів, які можна поєднати єдиним визначенням — багаторівневе моделювання. Цей термін застосовувався для опису технології генерації каскадно-регресійних моделей довготривалого прогнозування [1]. Застосування технології модельного штурму при дослідженні екологічних систем [3] дозволило майже в два рази знизити похибку моделювання. В [4] запропонована ефективна багаторівнева технологія із застосуванням кількох алгоритмів генерації моделей на кожному із рівнів.

Узагальнюючи принципи моделювання подібного типу автором дано визначення технології багаторівневого моделювання: „Комплекс методів та засобів формування первинного опису, генерації моделі, визначення її придатності та використання, в основі яких є процес поєднання моделей, отриманих за завершеними алгоритмами, в єдину систему. Модель, побудована за багаторівневою технологією, повинна містити моделі проміжних рівнів”.

В даній роботі наведено теоретичне обґрунтування ефективності багаторівневих технологій моделювання.

Основною метою моделювання є отримання додаткової інформації певного змісту про досліджуваний об'єкт. В нашому випадку моделювання здійснюється з метою визначити зв'язки цільової функції, яка характеризує стан об'єкта, та параметрів навколошнього середовища.

Оскільки при моделюванні складної системи апріорної інформації не вистачає для побудови адекватної моделі, напрошується висновок про необхідність використання

інформації апостеорної, тобто результатів моделювання типовими алгоритмами, для підвищення рівня адекватності моделі після її створення — калібрування. У всіх описаних в літературі випадках успішного калібрування моделей відбувається поєднання результатів експериментальних досліджень, які містяться в первинному описі об'єкта, із результатами моделювання типовими алгоритмами, формуючи при цьому опис вторинний [1, 3]. Тобто маємо випадок об'єднання підсистеми первинного опису об'єкта спостереження, яка є джерелом інформації, та підсистеми результатів його моделювання (множина повідомлень) в єдину систему, яка генерує багаторівневі моделі.

Ентропія цього об'єднання залежних подій є величиною адитивною і визначається за виразом:

$$H(YX) = H(X) + H(Y/X), \quad (1)$$

де $H(X/Y)$ може бути визначена [4] як ентропія множини ознак із повідомлень від інформаційних джерел, тобто ентропія моделей.

Використавши висновки про числове значення кількості інформації об'єднання підсистем [3], зазначимо, що інформація, яку містить модель Y зв'язки параметрів моделювання X , оцінюється різницею ентропії джерела інформації та апостеорної ентропії об'єкта після застосування моделі:

$$I(Y, X) = H(X) - H(Y/X), \quad (2)$$

де $H(Y/X)$ — є мірою невизначеності моделі.

Підставивши у вираз (1) значення умової ентропії, отримане з виразу (2) отримаємо:

$$H(YX) = H(X) + H(Y) - I(Y, X). \quad (3)$$

Враховуючи висновки [4] можемо зазначити, що ентропія багаторівневої моделі менше суми ентропій моделей попереднього рівня та первинного опису на величину інформації, яка міститься в моделі попереднього рівня про об'єкт на основі його первинного опису. Чим більше інформації первинного опису відображеного в моделі першого рівня, тим менша ентропія об'єднання — багаторівневої моделі.

Таким чином при проектування багаторівневої технології моделювання необхідно забезпечити значення ентропії об'єднання моделей $H(X/Y)$ меншим за ентропію кращої моделі попереднього рівня за рахунок підвищення кількості видобутого з первинного опису інформації, яка міститься в моделях попереднього рівня.

Новою властивістю багаторівневої моделі, отриманої за цим системоутворюючим принципом, є зменшення похибки моделювання при незмінних показниках врівноваженості моделі.

Таким чином на основі положень теорії інформації обґрунтована ефективність багаторівневих технологій моделювання та сформульований принцип проектування багаторівневих моделей об'єктів моніторингу. Враховуючи те, що не кожне поєднання окремих алгоритмів дає систему багаторівневого моделювання, метою наступних досліджень буде визначення умов ефективного поєднання однорівневих моделей в систему.

- 1) *Івахненко А.Г. Степашко В.С.* Помехоустойчивость моделирования. К.: Наук. Думка, 1985. – 216 с.
- 2) *Перегудов Ф.И., Тарасенко Ф.П.* Введение в системный анализ: Учеб. пособие для вузов. М: Высш. шк., 1989.- 367 с.
- 3) *Брусловский П.М., Розенберг Г.С.* Модельный штурм при исследовании экологических систем // Журнал общая биология - 1983. - Т. 44. - № 2. - С. 254-262.
- 4) *Голуб С.В.* Застосування алгоритмів багаторівневого моделювання при проектуванні моніторингових систем // Вісник Хмельницького національного університету. Хмельницький. 2005. - №5. - Ч.1. - Т.2. - С. 31-35.

ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ АДАПТИВНОСТІ АЛГОРИТМІВ СИНТЕЗУ МОДЕЛЕЙ ОБ'ЄКТІВ СОЦІО-ЕКОЛОГІЧНОГО МОНІТОРИНГУ

Колос П.О.

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, dr_peter@cdu.edu.ua

Сучасна екологія містить у собі науку і практичні методи контролю за станом навколошнього середовища - моніторинг, охорону навколошнього середовища, вчення про біогеоценози й антропологічні впливи на природні екосистеми, еколого-економічні й еколого-соціальні аспекти. Усе це визначає і предмет математичної екології, що поєднує математичні моделі і методи, використовувані при вирішенні проблем екології [1].

Будь-яка екосистема складається з нелінійно взаємодіючих підсистем, які можна упорядкувати в деяку структуру взаємопов'язаних елементів. В міру об'єднання компонентів, або підмножин, у більш велики функціональні одиниці, у цих нових одиниць виникають властивості, відсутні в її складових. Наслідком є неможливість вивчення динаміки складних екосистем шляхом їхнього ієрархічного розчленовування на підсистеми і наступного ізольоване вивчення цих підсистем, оскільки при цьому неминуче утрачаються властивості, обумовлені цілісністю досліджуваної системи. Вплив зовнішніх факторів на екологічну систему також не можна розглядати незалежно, тому що комбіновану дію не можна звести до суми діючих факторів. Тим більше складною задачею є кількісний опис реакції складної системи на комплексний вплив різних факторів [1].

Усі ці обставини приводять до неможливості описати складні екосистеми за допомогою простих скорочених моделей. Найкраще в цьому випадку використовувати так звані інформаційні методи моделювання. Моделі цього класу основані на принципах селекції, еволюції та адаптації і звуться методами евристичної самоорганізації [2]. Сюди відносяться різного роду еволюційні алгоритми, індуктивні методи моделювання, нейромережі, генетичні алгоритми тощо. Такі моделі дозволяють об'єднати різномірну інформацію про екологічну або еколого-економічну систему, "програмати" різні сценарії розвитку і виробляти на моделі оптимальні стратегії керування, що неможливо робити на реальній системі в силу її унікальності й обмеженості часу.

В умовах соціо-екологічного моніторингу (СЕМ) об'єкти моделювання мають різну інформаційну визначеність. Часто кількість інформації в їх первинному описі нижче межі інформаційної достатності. Для синтезу адекватних моделей розроблені методи адаптації різноманітності алгоритмів синтезу багаторівневих моделей до рівня інформаційної визначеності об'єкта моніторингу [2]. В евристичних системах спостереження (ЕСС) [3], які реалізують технологію багаторівневого СЕМ, адаптація алгоритмів реалізується конструктором інформаційних моделей ЕСС. Конструювання алгоритмів реалізується поєднанням набору компонент, які містять типові алгоритми інформаційного моделювання, в єдину структуру синтезу моделей [3].

Ефективність конструктора інформаційних моделей доведена при моделюванні залежності рівня захворюваності населення Черкаської області на туберкульоз та ракові захворювання від рівня забрудненості оточуючого середовища. Первинні дані отримані з центру медичної статистики (www.medstat.com.ua), бази даних „Здоров'я для всіх. Україна” (Multipurpose data presentation system), станом на серпень 2006 року. Відносна похибка моделі, синтезованої за адаптивним алгоритмом, на 40% нижча від похибки відповідної однорівневої моделі.

- 1) Г.Ю.Ризниченко. Экология математическая. – М: 2000.
- 2) Голуб С.В. Багаторівневе моделювання в технологіях моніторингу оточуючого середовища. Монографія. - Черкаси: Вид. від. ЧНУ імені Богдана Хмельницького, 2007.
- 3) С.В. Голуб, П.О. Колос. Проектування алгоритмів генерації моделей евристичних систем спостереження // Вісник інженерної академії України. №3-4, 2007.

СТРУКТУРНИЙ АНАЛІЗ І ПРОГНОЗУВАННЯ ЕКОЛОГІЧНИХ КАТАСТРОФ

Полегенько В.І.

Академія пожежної безпеки імені Героїв Чорнобиля, polev2005@mail.ru

Сучасні економічні процеси зумовлюють необхідність посилення фактора екологічної безпеки середовища проживання людини. Прагнення до максимізації норми прибутку, інтенсивна розробка природних родовищ корисних копалин, їх переробка на підприємствах енергетичної, металургійної та хімічної галузей спричиняють катастрофічну динаміку забруднення навколошнього середовища.

За оцінками експертів [1] в Тихому океані плаває смуга пластику, яка вдвічі перевищує континентальну площину США, і ще у 2004 році мала вагу у три мільйони тонн, що у шість раз більше кількості природного планктону. За даними Програми навколошнього середовища ООН відходи є причиною загибелі більше 1 мільйона морських птахів на рік, а також більше 100 тисяч морських ссавців. Наведений приклад є лише однією ілюстрацією сучасного стану навколошнього середовища.

Одним із способів, якщо і не зупинити процеси забруднення, то сповільнити їх динаміку, є прогнозування наслідків екологічних катастроф, що дозволить знайти ефективні механізми їх знешкодження та оптимально розподілити сили і засоби для цього. Відомо [2], що раціональний і ефективний шлях розв'язання такої задачі полягає у системному аналізі проблеми на першому етапі та побудові «повної» моделі еколого-економічної системи, що міститиме опис:

- соціально-економічної системи;
- природної підсистеми;
- антропогенного впливу на природне середовище та оцінку його наслідків;
- впливу природних факторів на життєдіяльність суспільства і здоров'я людини.

Деякі кроки у цьому напрямку зроблені в [3]. Зокрема, запропоновано для моделювання процесів попередження екологічних катастроф використати елементи теорії катастроф.

Оскільки такий комплексний розгляд проблеми межує з проблемою «прокляття розмірності» та накопиченням шумових вимірів, то пропонуємо обмежитись дослідженням забрудненості ґрунту, повітря і води, їх взаємопливами і на цій підставі побудувати інформаційно-математичні моделі, за допомогою яких і можна здійснювати як короткострокове, так і довгострокове прогнозування.

Розглянемо екологічну катаstrofu, зумовлену викидами шкідливих речовин в повітря. Виконаємо прив'язку області катастрофи до певної системи координат і вважатимемо, що джерело катастрофи знаходиться в точці з координатами $(0,0)$ (рис. 1).

Позначимо γ^* – функцію, яка визначатиме рівень концентрації шкідливих речовин, $\gamma = (\gamma_a, \gamma_w, \gamma_s)$, де γ_a – концентрації шкідливих речовин у повітрі, γ_w – у воді, γ_s – в ґрунті.

Очевидно, що концентрація шкідливих речовин буде визначатись координатами місця (x, y) і часом, який пройшов від виникнення катастрофи t , тобто в загальному

$$\gamma = \gamma(x, y, t). \quad (1)$$

Зауважимо, що у більшості випадків мають місце залежності

$$\gamma_a = f_a(\gamma_w, \gamma_s), \quad \gamma_w = f_w(\gamma_a, \gamma_s), \quad \gamma_s = f_s(\gamma_a, \gamma_w), \quad (2)$$

оскільки забруднення повітря випливає на забруднення ґрунту і води та залежить від типу шкідливої речовини. Аналогічні висновки можна зробити і для інших видів забруднень.

У доповіді зроблено ряд зауважень щодо необхідності врахування ряду факторів. Так, концентрація шкідливих речовин у повітрі (спрощуючи задачу, розглядаємо планарний випадок) залежить від напрямку N і швидкості вітру P (припустимо, що швидкість вітру в часі не змінюється), особливостей шкідливої речовини Q (на першому етапі цей фактор не розкриваємо, але вказуємо на те, що у ньому враховані здатність речовини до анігіляції, здатність до випадання на ґрунт чи у воду і т.п.). Концентрація шкідливих речовин на ґрунті залежить майже повністю від тих же факторів, що і їх концентрація у повітрі. Концентрація шкідливих речовин у воді додатково залежить від швидкості V та напрямку W течії води та характеру водойми (озеро, річка, ставок, чисте русло і т.п.).

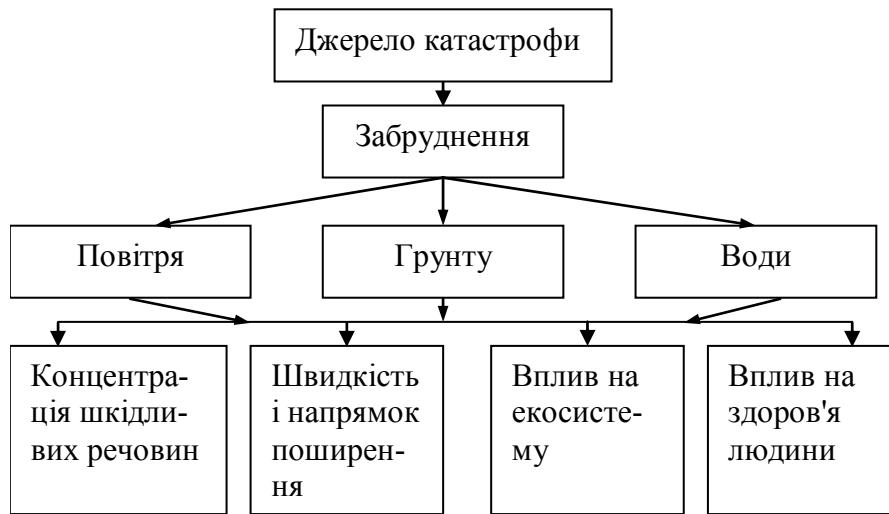


Рис. 1 Структурна схема і взаємовпливі факторів екологічних катастроф

Таким чином, узагальнюючи вищесказане, одержуємо систему моделей:

$$\gamma_a = f_a(\gamma_s, \gamma_w, x, y, t) = f_a(N, P, Q, \gamma_s, \gamma_w, x, y, t),$$

$$\gamma_w = f_w(\gamma_a, \gamma_s, x, y, t) = f_w(V, W, \gamma_a, \gamma_s, x, y, t), \quad (3)$$

$$\gamma_s = f_s(\gamma_a, \gamma_w, x, y, t) = f_s(N, P, Q, \gamma_a, \gamma_w, x, y, t).$$

Особливістю такої системи моделей є взаємозалежність ендогенних характеристик, що становить певні труднощі для ідентифікації як структурної, так і параметричної залежностей (3). Одним із способів подолання такої проблеми є застосування суб'єктивних експертних висновків та елементів теорії нечітких множин.

У доповіді запропоновано розглядати, аналізувати та прогнозувати наслідки екологічних катастроф з позицій системного аналізу, одним з етапів якого є вивчення взаємодії систем, що розглядаються, із навколошнім середовищем. Першим кроком до цього є побудова моделей, які з певною мірою наближення комплексно описують динаміку економічної ситуації, дозволяють здійснювати прогнозування та обґрунтоване прийняття рішень.

В статті описано катастрофи, які залежать від внутрішніх особливостей виробництва, а є ще ж і умови зовнішнього середовища, які можуть посилити, або послабити вплив наслідків катастроф на сферу проживання людини. Крім іншого, і на це направлене наше

моделювання. Зменшити негативні наслідки таких катастроф можна за допомогою моделювання та оптимізації відповідних процесів прийняття рішень. Таким чином, в доповіді виконано аналіз аспектів загальної проблеми моделювання, прогнозування та попередження екологічних катастроф, що дозволить розв'язувати задачі ідентифікації площин, периметру, часу поширення шкідливих речовин, інших можливих наслідків.

- 1) Marks K., Howden D. The world's rubbish dump: a garbage tip that stretches from Hawaii to Japan // Independent. – 2008. – 5 February.
- 2) Ляшенко І.М., Коробова М.В., Столляр А.М. Основи математичного моделювання економічних, екологічних та соціальних процесів. – Тернопіль: Навч. книга-Богдан, 2006. – 304 с.
- 3) Полегенько В.І., Стась С.В. Моделі прогнозування і попередження екологічних катастроф // Вісник ЧДТУ. – 2007. – № 1-2. – С. 71-73.

МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІКИ АДСОРБЦІЙНИХ ПРОЦЕСІВ НА ЦЕОЛІТАХ

Примиська С.О., Безносик Ю.О., *Решетіловський В.П., *Ройшлі К.М.
Національний Технічний Університет України "КПІ", primiska@rambler.ru
*Technisch Universität Dresden, Germany

Аналіз екологічної ситуації на даний момент показує, що найважливішими проблемами на планеті є смог і викиди, що викликають парниковий ефект, утворення кислотних дощів. Що обумовлено вмістом в атмосфері SO_2 , NO_x , CO і деяких вуглеводнів, що виявляють високу хімічну активність. Оксиди азоту NO_x (NO і NO_2) - одні з найбільш небезпечних забруднювачів атмосферного повітря. ГДК (гранична припустима концентрація) оксидів азоту в перерахунку на NO_2 $\text{мг}/\text{м}^3$ для приземного шару атмосфери – $0,086 \text{ мг}/\text{м}^3$.

В даний час на практиці дуже широко використовуються технології зниження викидів оксидів азоту. Одним з перспективних напрямків в очищенні димових газів є сорбційні методи, засновані на поглинанні оксидів азоту різними сорбентами. Найбільш прийнятними адсорбентами в даному випадку можна розглядати синтетичні цеоліти, що володіють дуже розвинutoю внутрішньою поверхнею і здатні вибірково сорбувати молекули з газової суміші.

Метою дійсної роботи є вивчення параметрів адсорбції оксидів азоту з потоку газового середовища та побудова математичного опису даного процесу з наступним використанням його на практиці.

Експериментальне дослідження процесу адсорбції оксидів азоту проводили на синтетичних цеолітах двох типів 13X, LiLSX (Süd Chemie) в ізотермічних умовах, при концентрації оксидів азоту в потоці 5%. У процесі експериментування досліджувався вплив таких параметрів, як витрата газу, температура. Значення концентрації оксидів азоту на виході з адсорбера фіксували методом масо спектрометрії. На основі отриманих даних побудовано характеристичні криві залежності концентрації оксидів азоту на виході з адсорбера з часом . Криві мають практично прямокутну форму (практично миттєво досягається насичення адсорбенту). При збільшенні витрати газу (5 - 15 л/год) та температури ($25 - 35 {}^\circ\text{C}$), прискорюється процес насичення адсорбенту, при T більше $35 {}^\circ\text{C}$ процес прискорюється назначено.

Для математичного опису процесу адсорбції оксидів азоту на цеолітах запропонована математична модель, побудована на основі рівнянь матеріального балансу i -го шару по твердій і газовій фазах (1, 2) [1] з використанням рівняння для розрахування поглинанальної здатності адсорбенту [2], у припущення, що процес адсорбції-десорбції - ізотермічний; залежність ступеня адсорбції від молярної долі компонента лінійна; дифузія речовин незначна, газовий потік через усі канали одинаковий; відсутня дезактивація адсорбенту під час експерименту.

$$\frac{dy_{\text{ex},i}}{dt} = \frac{2RT}{\varepsilon V_i P_t} \left[\frac{FP_t}{RT} (y_{\text{ex},i} - y_{\text{ex},i}) - k \cdot \bar{y}_i \cdot \theta_{V,i} \cdot q_0 \cdot w_i \right], \quad (1)$$

$$\theta_{V,i} = y_{\text{ex},i} \frac{dF}{dt} \frac{P_t M_{\text{NO}}}{RT} \left(t_h - \sum_0^{t_h} \frac{\bar{y}_i}{y_{\text{ex},i}} dt \right), \quad (2)$$

де F - об'ємна витрата газу, л/год; R - газова стала, $(\text{Па}^* \text{м}^3)/(\text{кмоль}^* \text{кг})$; M_{NO} - молярна маса NO (кг/моль); T - температура, К; $\bar{y}_i = (y_{\text{ex},i} - y_{\text{ex},i})/2$ - середня молярна частка газу на i -ом шарі; $y_{\text{ex}} = P_{\text{ex}} / P_t$, $y_{\text{ex},i} = P_{\text{ex},i} / P_t$ - вхідна і вихідна молярна частка адсорбата; $P_{\text{ex}}, P_{\text{ex},i}$ - парціальний тиск адсорбата на вході і виході, Па; P_t - загальний тиск, Па; k - константа адсорбції, с^{-1} ; $\theta_v = (q_0 - q) / q_0$ - адсорбційна здатність; q - кількість адсорбуємого NO на одиницю маси адсорбенту, кмоль/кг; q_0 - поглинена кількість адсорбуємого NO на одиницю маси адсорбенту, кмоль/кг; t_h - час насичення адсорбенту, година; V - об'єм насадки, м^3 ; w - маса насадки, кг; N - кількість шарів; $V_i = V / N$ - об'єм шару, м^3 ; $w_i = w / N$ - маса шару, кг.

На рис. 1 та 2 приведено порівняння експериментальних даних з даними, які отриманими за моделлю. Зображене залежність концентрації оксидів азоту на виході з адсорбера з часом при температурі 25°C і витраті газового потоку 10 л/год на цеолітах 13X, LiLSX відповідно.

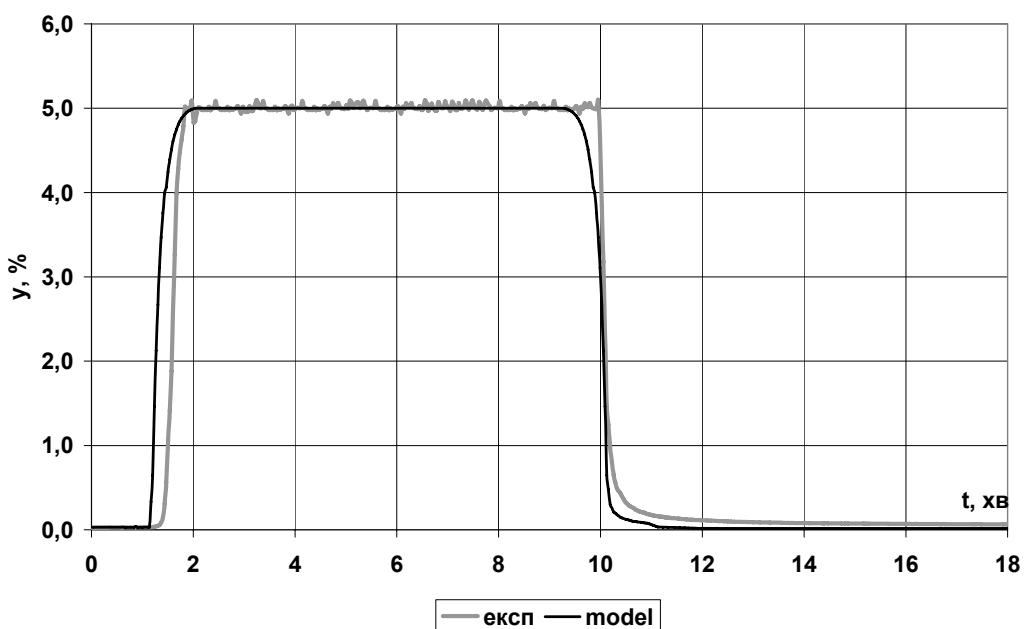


Рис. 1. Залежність концентрації NO на виході з адсорбера з часом при температурі 25°C і витраті газового потоку 10 л/год на цеоліті 13X.

Адекватність моделі даним отриманим у результаті експерименту здійснювали за Критерієм Фішера, розраховане значення якого виявилося значно менше теоретичного. Це говорить про абсолютну адекватність моделі. Таким чином запропоновану модель можна використовувати для опису динаміки процесу адсорбції при удосконаленні і розробки нового обладнання очищення газів від шкідливих речовин.

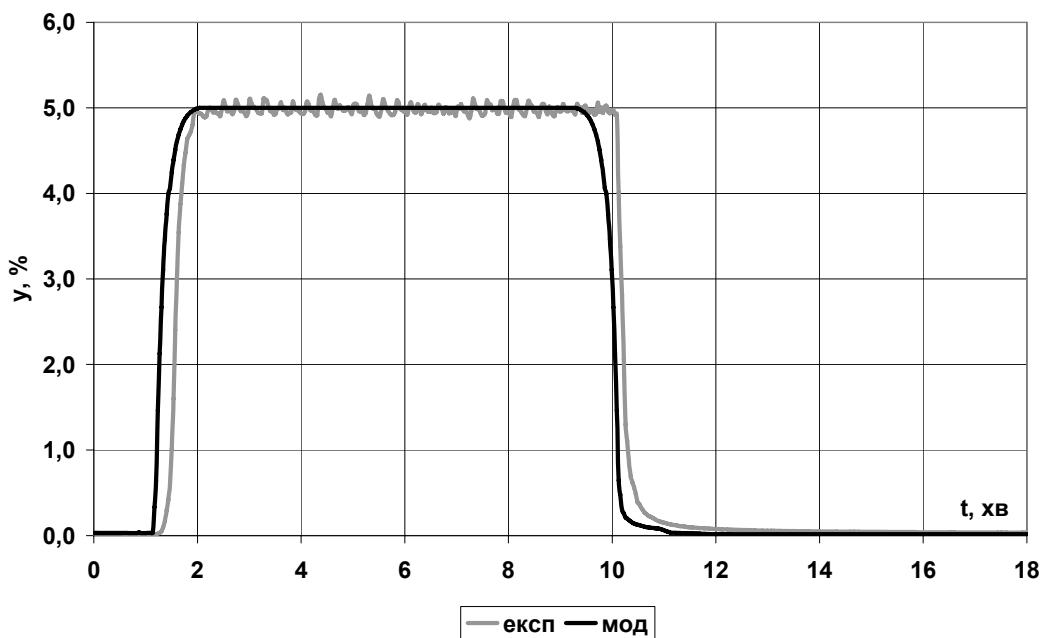


Рис. 2. Залежність концентрації NO на виході з адсорбера з часом при температурі 25 °C і витраті газового потоку 10 л/год на цеоліті LiLSX.

- 1) Примиська С.О., Статюха Г.О., Безносик Ю.О., Решетиловський В.П. Комп'ютерне моделювання адсорбційних процесів очистки газів від оксидів азоту на цеолітах // Наукові Вісті НТУУ “КПІ”. – 2007. - №3(53). – С. 144-149.
- 2) Reschetilowski W. Technisch-Chemisches Praktikum, WILEY-VCH 2002

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРИ ВИЗНАЧЕННІ ЕКОЛОГІЧНИХ ПОКАЗНИКІВ МІСЬКИХ АВТОБУСІВ

Пилипенко О.М., Рубан Д.П.

Черкаський державний технологічний університет, ruban_dimon@mail.ru

Проблема визначення екологічних показників автобусів малого класу в даний час є однією з суттєвих в галузі автобусобудування. Автобуси малого класу широко експлуатуються в містах і відповідно мають вагомий внесок у забрудненні міст. Автобусний парк зростає, що в свою чергу призводить до погіршення стану навколошнього середовища, не зважаючи на те, що вимоги до шкідливості викидів стають більш жорсткими.

З метою зменшення шкідливості викидів нами розроблено математичну модель циклового руху автобусів, яка містить в собі ряд факторів, що впливають на техніко-експлуатаційні показники автобусів малого класу:

- вид палива;
- стиль водіння;
- тривалість маршруту;
- час ефективної роботи;
- температура зовнішнього середовища.

Як відомо одними з кращих видів пального є дизпаливо і природний газ. При використанні природного газу в чистому вигляді досягаються високі екологічні показники. Як відомо природний газ метан без кольору і запаху, тому для виявлення витікання газу із системи додається етилмеркаптан – легколетуча, безколірна рідина, що має яскраво виражений, специфічний запах. Але не всім відомо, що етилмеркаптан – токсичний. Він – сильна отрута, що впливає на центральну нервову систему [1]. При надлишку повітря,

наприклад при роботі газової плити, етилмеркаптан згоряє, але в циліндрах двигуна внутрішнього згоряння меркаптан не горить і вилітає у вихлопну трубу. Із дизельним пальним інша ситуація. Як відомо одним із екологічних показників дизельних двигунів є димність, що утворюється із-за перебагачення робочої суміші, навіть в ідеально відрегульованому двигуні. Дизельний двигун відноситься до двигунів із внутрішнім сумішоутворенням [2]. Одним із факторів впливу на сумішоутворення є навантаження двигуна. Із підвищенням навантаження сумішоутворення погіршується. В цілому пропорції суміші залишаються без змін, але виникають місцеві перебідення та перебагачення суміші. Місцеві перебідення призводять до втрати потужності двигуна. Місцеві перебагачення призводять до утворення сажі, що супроводжується димним вихлопом. Навантаження залежить від стилю їзди і передаточних відношень трансмісії. Комп'ютерне моделювання дасть змогу визначити оптимальний стиль їзди і оптимізувати трансмісію автобусів малого класу.

Виходячи з цього на основі математичної моделі нами складено програму на мові FORTRAN, яка дає змогу зmodелювати рух автобуса і визначити екологічні та економічні показники в залежності від вище названих факторів. Таким чином результати моделювання і експериментальні дослідження дадуть змогу покращити стан довкілля в містах України.

- 1) Корнюшин В.М. Газ-топливо, ухудшающее экологию // Автомобильная промышленность.–2007.–№9.–С.11-12.
- 2) Абрамчук Ф.І., Гутаревич Ю.Ф., Долганов К.Є., Тимченко І.І. Автомобільні двигуни: Підручник.–К.: Арістей, 2005.–476 с.

ВПЛИВ ЗАБРУДНЕННЯ ВІД АВТОТРАНСПОРТНОЇ ЗАГАЗОВАНОСТІ НА КІНЕТИКУ ІМУННОЇ ВІДПОВІДІ

Скіп Б., Зоріна Т., Сташкевич О*.

Чернівецький національний університет ім. Юрія Федьковича, b.skip@chnu.edu.ua

*Чернівецький торговельно-економічний інститут

Здійснено теоретичне дослідження екологічних наслідків забруднення атмосферного повітря викидами від автотранспорту у приміській зоні. Рівень забруднення пов'язано з характером захворювань, що можуть бути спричинені погіршенням якості атмосферного повітря. Отримано модельні результати перебігу природних епідемічних процесів в умовах антропогенного забруднення атмосферного повітря та здійснено якісне порівняння з статистичними даними.

У зв'язку з високою насиченістю міст джерелами забруднення, якість атмосферного повітря в них, як правило, істотно гірша, ніж у пригородах і тим більше в сільській місцевості. Особливістю урбанізованих територій є висока щільність потоків автотранспорту у містах. Саме цей вид джерел забруднення атмосферного повітря є домінуючим у населених пунктах. На відміну від промислових джерел забруднення, прив'язаних до промислових площацок і відділених від житлової забудови санітарно-захисними зонами, автомобіль є рухомим, нестационарним джерелом забруднення. Автомобільні гази – це надзвичайно складна суміш токсичних компонентів з оксидів вуглецю, сірки й азоту, вуглеводнів, альдегідів, поліароматичних сполук й ін [1].

Встановлено, що забруднення атмосфери впливає на показники захворюваності й смертності, зокрема збільшуєчи такі статистичні показники негативних наслідків як рівень смертності, кількість випадків госпіталізації, появу у населення респіраторної симптоматики, зростання прийому протиастматичних ліків, послаблення легеневої функції [2, 3]. Питання визначення порогу сумарного впливу шкідливих речовин у атмосферному повітрі та асиміляційної здатності для населених пунктів є актуальним у плані попередження і прогнозу хімічних інтоксикаційних наслідків аналогічних до Чернівецької хімічної хвороби [4, 5].

Глобальний аналіз впливу джерел забруднення на довкілля передбачає оцінку забруднення атмосферного повітря у конкретній точці простору, підводячи при цьому до необхідності наявності поля концентрацій компонентів вихлопних газів від автотранспорту. Для побудови полів концентрації полютантів зручно використати методи математичного моделювання процесів розсіювання домішок в атмосферному повітрі, реалізовані на ЕОМ. Досліджувана область зображенна на рис. 1. В основі прорахунку лежить рівняння конвективно-дифузійного масопереносу. Прорахунок концентрації СО, пропорційної CO_2 , при різних швидкостях повітряних потоків перпендикулярно полотну дороги та паралельно горизонту, показав, що при відсутності вітру над проїзджою частиною, тобто при врахуванні тільки дифузійних процесів, розповсюдження газової суміші за межі проїждjoї частини є незначною. Зменшення концентрації в 10 раз спостерігається на відстанях, що знаходяться на тротуарах при швидкостях вітру менших за 3 м/с. Висота шару забрудненого повітря найбільша у відсутності вітру і становить 5 м, а при швидкостях вітру 3-7 м/с різко зростає концентрація газової суміші над тротуарами, а отже, і поблизу будівлі, якщо така існує. При швидкостях вітру більших 7 м/с конвективні процеси переносу стають настільки суттєвими, що майже уся речовина зноситься з проїждjoї частини дороги – настає так званий ефект провітрювання. Отримані результати задовільно узгоджуються з даними [6].

Таким чином можна зробити висновок, що найбільш несприятливою є ситуація, коли швидкість вітру становить 3-7 м/с. При більшій швидкості вітру уся речовина зноситься потоком повітря, а при меншій – залишається над дорогою.

Для випадку а) усереднена концентрацію СО в приземному шарі висотою до 1 м становить $3,69 \text{ mg/m}^3$ а для висоти приземного шару від 1 до 2 м – $2,31 \text{ mg/m}^3$ можна використати для подальших розрахунків, внаслідок турбулізації повітряних мас пішоходами. Зважаючи на цю обставину буде відбуватися інтенсивне перемішування повітряних мас та вирівнювання концентрацій у зазначеній області тротуару.

Аналогічно для випадку б) область приземного шару висотою до 1 м, у якій перебувають діти буде мати усереднену концентрацію СО рівну $5,5 \text{ mg/m}^3$. А приземний шар від 1 – 2 м – $5,0 \text{ mg/m}^3$.

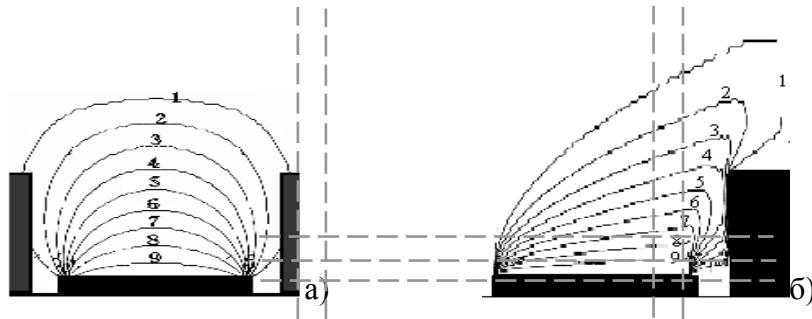


Рис. 1. Схематичне зображення досліджуваної області розсіювання газів, обмеженої будівлями, над проїздjою частиною дороги та тротуаром. Швидкість повітряних потоків перпендикулярно полотну дороги та паралельно горизонту: а) $v_x = 0 \text{ м/с}$, б) $v_x = 6 \text{ м/с}$. Цифри на ізолініях – концентрація СО (мг/м^3).

Таким чином, при наявності кущових посадок вздовж проїждjої частини можна зменшити вплив забруднення автотранспорту на пішоходів нижчих 1 м, тобто дітей. А зелені насадження з густою зеленою кроною на висотах 1 – 5 м ефективно можуть екранувати загазованість та запиленість пішохідних зон вздовж автомагістралей при умові, що відстань вздовж автотраси між кронами біде мінімальною (суцільна "зелена стіна"). У такому випадку буде формуватися повітряний потік з напрямком переміщення повітряних мас вздовж автомагістралі та вверх.

Якщо у розрахунках розсіювання СО [7] з проїждjої частини дороги виходили, що концентрація СО становить 10 mg/m^3 , то концентрації решти компонент газової суміші будуть пропорційні концентрації СО, те ж саме стосується і профілів розсіювання.

Перерахувавши концентрації згідно з профілем концентрацій СО, виявлено, що сумарне забруднення пішохідної зони у відсутності вітру становить 15,9 та 10,0 ГДК для нижньої та верхньої підластей відповідно. При наявності вітру з швидкістю 6 м/с ці ж параметри становлять 23,7 та 21,5 ГДК. Для порівняння, станом на 1999 р. рівень забруднення атмосферного повітря поблизу місць інтенсивного руху автотранспорту для Києва становить 18,5 ГДК. Виходячи з таких високих рівнів забруднення атмосферного повітря поблизу проїзджої частини автомагістралі захисні заходи є більш ніж необхідними.

Цікавим з наукової точки зору є дослідження імунного статусу людей, що вдихають повітря примагістральної зони на прикладі перебігу інфекційного захворювання. Найпростішою математичною моделлю інфікування антигеном організму та відповідної реакції імунної системи є система диференціальних рівнянь. Для перевірки адекватності моделі реальним процесам у організмі та моделі проведена симуляція гострого (швидкого) інфекційного захворювання, наприклад грипу.

Оскільки відомостей щодо однозначного математичного опису зв'язку між концентраційним та кліматичним ризиками у літературі нема, то пропонуємо вважати ці дві величини адитивними, а загальний ризик визначати як суму ризиків і представляти залежністю $Risk=f(C_i, T, \Theta)$, яка відображатиме здатність організму протидіяти інфекціям, яка також відображає (пропорційна) здоровій частці органу на який гіпотетично діє антиген. Залежність усередненої добової температури $T(t)$ та вологості $\Theta(t)$ введена регресійними співвідношеннями [8], оскільки достовірний математичний опис цих процесів на сьогодні неможливий. Аналогічним чином є можливість ввести ризик захворювання від електромагнітного випромінювання, шуму тощо. Склад забрудників повітря обрано наступним: пил, СО, CO₂, SO₂, формальдегід, саджа, вуглеводні.

Результати числового експерименту та їх аналіз

Як контрольний випадок вибрано ситуацію, коли сумарний показник забруднення повітря визначається величиною $\Sigma\Gamma\text{ДК}=0,5$. Для моделювання імунної реакції на антиген обраховано значення функції ризику на 2, 5 та 10 рік використання для дихання повітря такої якості табл. 1.

Таблиця 1 – Залежність функції ризику від якості повітря та тривалості його використання у дозах 2 год на добу щоденно.

Термін, роки	Якість повітря, ГДК							
	0,5	1	1,5	2	10	15,9	21,5	23,7*
2	0,36	0,38	0,41	0,43	0,79	2,63	1,3	3,73
5	0,37	0,43	0,49	0,54	1,44	6,04	2,72	8,79
10	0,41	0,52	0,64	0,75	2,53	11,7	5,1	17,2

* – вага індивіда з ростом до 1 м – 25 кг.

Порівнюючи рис. 2 та 4 можна зробити такі висновки:

1. при збільшенні тривалості перебування у несприятливих умовах (концентраційний фактор) кількість антигенів зростає (криві 1), а отже, і зростає ушкодженість органа (криві 3). Ці ефекти приводять збільшення важкості перебігу інфекційного захворювання та значного навантаження на ресурси організму;
2. наявність полютантів в атмосфері призводить до збільшення часу на ушкодження органа при відсутності масивної відповіді імунної системи організму (по ініціації продукування стовбурових клітин – криві 3): наприклад, для експозиції полютантами 1 рік цей проміжок часу становить 3,5 дні, а для експозиції 5 років – 5 днів. А також зростає тривалість самовідновлення з 4,3 днів у першому випадку до 6 днів – у другому.

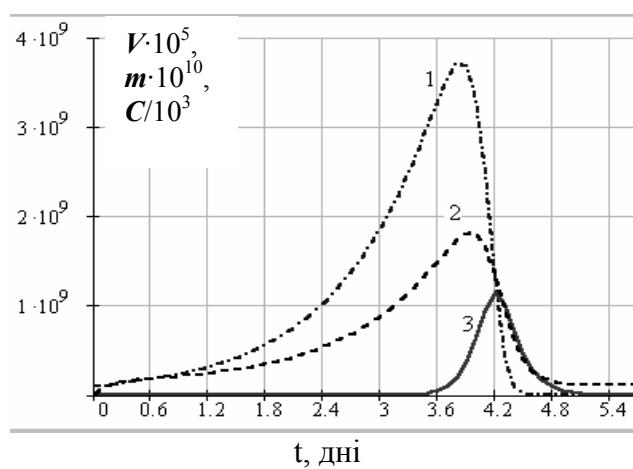


Рис. 2. Динаміка антигенів (3), ушкодженості органа (2) та стовбурових клітин (1)

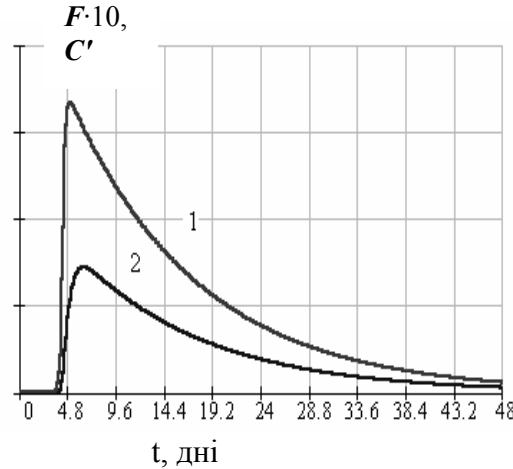


Рис. 3. Динаміка плазмоцитів (1), та антигенів (2): Забруднення повітря – 10 ГДК. Час накопичення дози полютантів 1 рік.

Час експозиції мало впливає на кількість плазмоцитів та антитіл, несуттєво зменшууючи їх кількість у другому випадку.

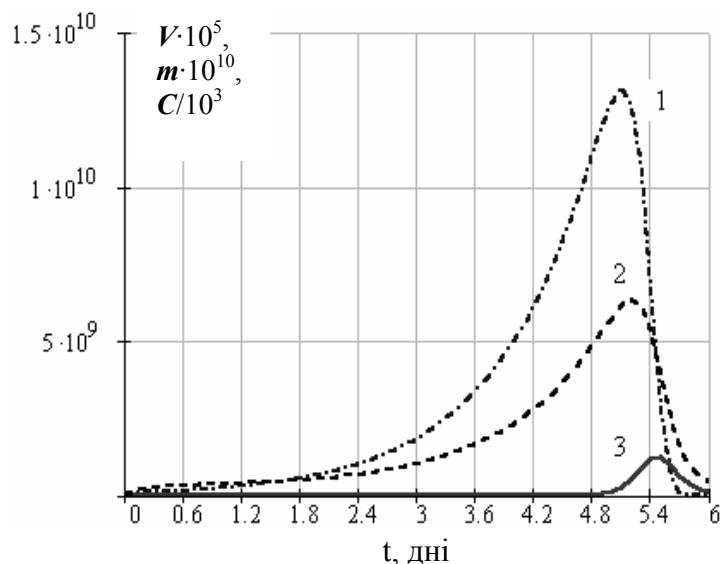


Рис. 4. Динаміка антигенів (3), ушкодженості органа (2) та стовбурових клітин (1)

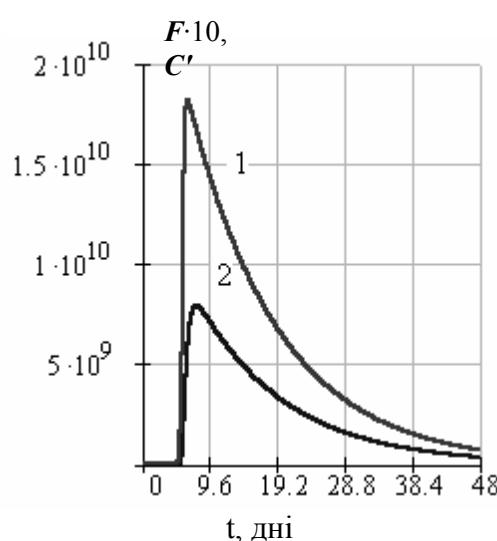


Рис. 5. Динаміка плазмоцитів (1), та антигенів (2): Забруднення повітря – 10 ГДК. Час накопичення дози полютантів 5 років.

- 1) Тищенко Н.Ф. Охрана атмосферного воздуха. Расчет содержания вредных веществ и их распределение в воздухе. М.: Химия, – 1991. – 368 с.
- 2) Boezen H. Marike et al. Effects of ambient air pollution on upper and lower respiratory symptoms and peak expiratory flow in children. // The Lancet. - 1999. - V. 353., № 9156. - p.874-878.
- 3) Солдатов Д.Г., Авдеев С.Н., Кусакина И.А. Ретроспективный анализ эпидемий бронхиальной астмы // Пульмонология. - 1996. - №4. - с.84-88.
- 4) Скин Б. В., Гожда В. В., Стайкевич О. М., Тарасенко Г. П. Асиміляційна здатність повітряного басейну м. Чернівці // Екологія довкілля та безпека життєдіяльності <http://eko.org.ua/ua/magazine/2-2006/>.

- 5) Скіп Б.В. Врахування якості повітря та сезонності при оцінці сумарного впливу на людський організм. Екологія довкілля та безпека життєдіяльності, -2004.- №3. – с. 87–91.
- 6) Скорчено В.Ф. Диффузия и перенос отработавших газов автомобилей на примагистральной территории // Проблемы контроля и защиты атмосферы от загрязнения. -1992. - №17,- с.41-53.
- 7) Хмель Г.М. Порівняльний аналіз викидів продуктів згоряння природного газу при різних висотах викидів. Кваліфікаційна робота. ЧНУ - 2003. - 42с.
- 8) Страшкраба М., Гнаук А. Пресноводные экосистемы. Математическое моделирование. М.: Мир, - 1989. - 376 с.

МОДЕЛЮВАННЯ ТРАНСКОРДОННИХ ПЕРЕНОСІВ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ ВІДПОВІДНО ДО СТРАТЕГІЇ ЕМЕП

Федак І.А.

Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу, iraabush@gmail.com

Дійсна версія моделі переносу важких металів в атмосфері і їхніх випадань включає основні процеси й механізми переносу й виведення домішки з атмосфери - емісію, адвективне перенесення, турбулентну дифузію, сухі й вологі випадання. У модель переносу ртуті також включені блоки, що описують її хімічні трансформації в атмосфері. Модель відноситься до класу моделей ейлеревого типу. Модельними розрахунками охоплюється регіон ЕМЕП (135x111 осередків) із просторовим розширенням 50x50 км. Розрахунковий крок у часі становить 20 хвилин. В основу створення моделі лягли роботи М.Пекар й А.Рябошапко та ін.[2]

Модель операє п'ятьма шарами атмосфери по вертикалі товщиною 100, 300, 700, 1000 й 1800 метрів, охоплюючи весь приграницій шар й істотну частину вільної тропосфери. Емісія залежно від висоти джерела надходить або в перший, або в другий модельні шари. Між шарами обмін здійснюється за рахунок вертикальної турбулентної дифузії й упорядкованих вертикальних потоків. Останні обчислюються на кожному кроці в кожному осередку, виходячи з умови балансу маси повітря. Верхня границя модельного резервуара відкрита для обміну з вище лежачими шарами атмосфери. Бічні грані модельного резервуара також відкриті для обміну з навколошньою атмосферою.

Дійсна версія моделі адаптована для обліку розподілу часток-носіїв за розміром. Проте, у зв'язку з відсутністю необхідної вхідної інформації остаточні розрахунки полів концентрацій і випадань розроблені для монодисперсної домішки.

На відміну від свинцю й кадмію ртуть і її сполуки можуть вступати в хімічні реакції як у газовій фазі, так й у рідкій фазі хмар. Прийнято, що хмари можуть бути присутніми у третьому, четвертому і п'ятому модельних шарах.

Модель описує процеси сухого поглинання розглянутих важких металів підстилаючи поверхнею, а також процеси вимивання опадами.

Схема адвекції була розроблена М.Пекар. У модельних розрахунках для п'ятого шару моделі використовуються метео дані на ізобаричній поверхні 700 гпа, для четвертого - на 850 гпа, для третього - 925 гпа, для другого - 1000 гпа. Швидкість вітру й температура в першому модельному шарі обчислювалися при параметризації приграницішого шару.[4]

Дифузія домішки в горизонтальному напрямку описується відповідно до підходу, викладеного у роботі Ізраеля й ін. Турбулентна дифузія в моделі ґрунтуються на класичному розумінні, відповідно до якого потік речовини пропорційний градієнту концентрації. Коефіцієнтом пропорційності є коефіцієнт турбулентної дифузії, що обчислюється за допомогою параметризації приграницішого шару, описаної М.Пекар. Вертикальна дифузія домішки описується за допомогою непрямої схеми, стійкість якої не залежить від співвідношення часового кроку й коефіцієнта дифузії.

Передбачається, що свинець і кадмій переносяться в атмосфері тільки у вигляді аерозольних часток і навіть якщо вступають у які-небудь хімічні реакції, це не приводить до зміни їх агрегатного стану. На відміну від свинцю й кадмію хімічні трансформації ртути можуть змінювати її агрегатний стан й, відповідно, параметри виведення з атмосфери. Для практичного використання в модельних розрахунках Г.Петерсен запропонував хімічний модуль, що включає найважливіші реакції. На основі даного хімічного модуля розроблена спрощена хімічна схема, що не вимагає більших витрат комп'ютерного часу й може бути використана в оперативних розрахунках.

Відповідно до спрощеної схеми газоподібна елементарна ртуть розчиняється в рідкій фазі крапель хмар (туману) відповідно до закону Генрі. У рідкій фазі проходить процес окислювання ртути розчиненим озоном. Продукти рідкофазового окислення вступають у різні реакції з розчиненими речовинами, а також сорбуються твердими нерозчинними частками, наприклад, частками золи. Реакція двовалентної ртути з іонами сульфіту веде до утворення нестійких ртуть - сульфітних комплексів. Їхній розпад приводить до відновлення ртути до елементарного стану й підвищення концентрації елементарної ртути в розчині. Отже, дана схема припускає наявність негативного зворотного зв'язку, що контролює інтенсивність процесу розчинення газоподібної елементарної ртути.

Можна виділити три групи сполук ртути, що перебувають у рівновазі. Перша група - елементарна ртуть у повітрі й воді, друга - ртуть у складі сульфітного комплексу у водній фазі й на частках золи, третя - вільні іони ртути й хлоридні комплекси ртути в розчині й на частках.

Швидкість сухого поглинання аерозольних часток, що містять важкі метали, розраховують залежно від аеродинамічного діаметра часток, швидкості вітру, типу й шорсткості підстилаючої поверхні. Для елементарної ртути прийнято, що над сушою в період із травня по жовтень включно величина лінійної швидкості сухого поглинання дорівнює 0,03 см/с, в інші місяці року – 0,01 см/с у тому випадку, якщо приземна температура повітря позитивна. В іншому випадку сухого поглинання не відбувається. Для морської поверхні швидкість завжди прийнята рівною нулю. Для окисленої газоподібної неорганічної ртути вважається, що швидкість сухого поглинання становить 0,5 см/с незалежно від сезону й типу підстилаючої поверхні. Для органічних сполук ртути приймається, що поглинання підстилаючою поверхнею відсутнє.

Повітря, яке поступає у модельний домен, містить певні концентрації важких металів. Особливо значимим може бути внесок ззовні для ртути. Цю обставину варто враховувати при моделюванні фонових концентрацій у повітрі, що надходить у модельований резервуар за рахунок адвекції і за рахунок вертикального обміну на верхній границі резервуара. Фонові концентрації можуть бути різні залежно від району утворення повітряних мас і можуть змінюватися з висотою.

На основі літературних даних встановлено, що фонові концентрації газоподібної елементарної ртути й аерозольної ртути постійні в часі й у просторі ($1,5 \text{ й } 0,01 \text{ нг}/\text{м}^3$ відповідно), хоча є помітні розходження для високих і середніх широт. Крім того, був виявлений сезонний хід фонових концентрацій ртути.

На відміну від ртути фонові концентрації свинцю й кадмію можуть варіювати в широких межах, як у просторі, так і в часі. Це обумовлено відносно малим часом життя в атмосфері (дні) і високою мінливістю інтенсивності емісії.

Крім газової й аерозольної фази важкі метали можуть вноситися в модельний резервуар у складі хмарних крапель. Цей процес важливий, головним чином, для ртути, оскільки вона може розчинятися в краплях хмар за межами резервуара.

При чисельному моделюванні переносу забруднюючих речовин важливим є задавання початкових умов.

Для порівняння результатів модельних розрахунків з даними моніторингу вмісту важких металів у повітрі й опадах використовуються найбільш надійні дані вимірювань, виконаних у рамках ЕМЕП. Помітне розходження вимірюваних і розрахункових значень концентрацій, як у повітрі, так і в опадах, може бути пов'язане із двома причинами - або з неадекватністю опису моделлю процесів переносу й випадання важких металів, або з недооцінкою величин емісії. Очевидно, що дані вимірювань теж не ідеальні, але їхня недосконалість може проявлятися для окремих точок, не сильно спотворюючи картину поля концентрацій або випадань у цілому. Порівняння методів вимірювань показали, що лабораторії мереж ЕМЕР- HELCOM-PARCOM-АМАР здатні вимірювати концентрації свинцю й кадмію з похибкою 25% від теоретичного значення. Природно, що всі вхідні параметри моделі мають деяку невизначеність значень. Сукупність невизначеності всіх вхідних параметрів (за винятком емісії) може пояснити невизначеність вихідних параметрів на рівні $\pm 20\%$.

Моделювання трансграничного переносу забруднюючих речовин, як правило, має справу зі складними атмосферними процесами, що відбуваються на величезних територіях (таких, як континент) протягом тривалого періоду часу (рік і більше). Оскільки неможливо врахувати всі деталі фізико-хімічних процесів трансформації забруднювача й виведення його з атмосфери, а також взяти до уваги всі подробиці метеорологічних і географічних умов, то в моделюванні доводиться прибігати до певних наближень і спрощень реальної дійсності. Крім того, вхідна інформація й параметри моделі, що прив'язують моделювання до реальних умов (такі як величина й просторовий розподіл антропогенної емісії й т. ін.), часто також у значній мірі невизначені. Все зазначене вище неминуче приводить до істотної похибки результатів моделювання.[1]

Визначення тензора чутливості дає можливість оцінити відносний вплив різних вхідних параметрів на результати моделювання. Беручи до уваги інформацію про можливі діапазони невизначеності вхідних даних, можна оцінити похибку моделювання внаслідок того або іншого параметра, узятого окремо, і зрівняти індивідуальний внесок різних параметрів у загальну невизначеність моделі. Однак для того, щоб визначити величину загальної невизначеності моделі, варто розглянути одночасний вплив неточності всіх вхідних параметрів. Одним з можливих підходів до рішення цієї проблеми є стохастичне моделювання, засноване на методі Монте-Карло.

Чутливість моделі до деякого параметра досліджувалася за допомогою зміни його варіаційного множника і проведення повного річного розрахунку для кожного значення множника. Як вихідні величини для аналізу чутливості були обрані річне сумарне (сухе й вологе) випадання й середньорічна концентрація забруднювача в приземному шарі, усереднені по всій розрахунковій області. Виявлено, що сумарне випадання й середня концентрація в повітрі найбільш чутливі до антропогенної емісії. Обидві ці величини зростають майже лінійно зі збільшенням варіаційного множника й мають найбільші коефіцієнти чутливості. Сумарне випадання і концентрація в повітрі також досить чутливі до зміни швидкості вітру, до інтенсивності опадів, до висоти шару перемішування й до швидкості сухого осадження. Сумарне випадання трохи зростає зі збільшенням інтенсивності опадів, завдяки збільшенню вологого осадження, і злегка зменшується з ростом швидкості вітру через винос забруднювача за межі розрахункової області. Крім того, збільшення шару перемішування викликає вище підняття часток забруднювача в атмосфері й, зрештою, також приводить до зменшення сумарного випадання. Цілком очевидно, що сумарне випадання зростає зі збільшенням швидкості сухого осадження. На противагу цьому, ріст всіх згаданих вище параметрів приводить до зменшення концентрації забруднювача в повітрі. Природна емісія, хмарність і температура повітря мають найменший вплив на обидві вихідні змінні. Хоча шорсткість підстилаючої поверхні значно впливає на сухе й, як наслідок, на вологе виведення окремо, сумарне випадання практично не залежить від цього параметра.

Одержані точні оцінки невизначеності вхідних параметрів досить складно, особливо для внутрішніх змінних моделі, пов'язаних з фізичними припущеннями й обчислювальними процедурами таких даних як швидкість тертя, висота шару переміщування й ін. Похибка, обумовлена антропогенною емісією, помітно перевищує інші й досягає значення близько 24% в обох випадках. Серед інших параметрів найбільш значна частка у похибку сумарного випадання вноситься інтенсивністю опадів (6,3%), висотою шару переміщування (5,7%) і швидкістю вітру (4,4%). Що стосується концентрації забруднюючої речовини в повітрі, то тут можна виділити сім найбільш значних параметрів - висота шару переміщування (11%), швидкість вітру (10,3%), інтенсивність опадів і параметр вологого виведення (9,3%), швидкість сухого осадження (8,5%), швидкість тертя (8,2%) і шорсткість підстилаючої поверхні (7,5%). Параметри, які періодично змінювали під час обрахунків, такі як швидкість вітру, інтенсивність опадів й ін., вносять значно меншу похибку через істотне осереднення під час рахунку. Дійсно, якщо деякий вхідний параметр (наприклад, швидкість вітру) вводиться в модель кожні 6 годин протягом річного розрахунку й не містить систематичної помилки, то навіть значна випадкова помилка одного з його значень не зробить сильного впливу на остаточні результати.

Щоб оцінити загальну невизначеність моделі внаслідок неточності всіх її параметрів, варто розглянути їхній колективний вплив на результати моделювання. Дотримуючись стохастичного моделювання, заснованого на методі Монте-Карло, для кожного досліджуваного параметра визначається розподіл імовірності, після чого виконується ряд стандартних розрахунків з вибором значень параметрів випадковим чином. Кількість подібних розрахунків вибирається такою, щоб одержати статистично надійні результати моделювання, і залежить від числа розглянутих параметрів. У результаті виконання N розрахунків з різними наборами параметрів ми одержуємо таку ж кількість значень вихідних змінних моделі. Щоб оцінити невизначеність деякої вихідний змінної, ми ділимо весь діапазон її зміни на 10 відрізків і підраховуємо кількість значень, що відносяться до того або іншого відрізка. Гістограма, що відбиває число значень, які потрапили в кожен відрізок, представляє розподіл імовірності даної змінної.

Невизначеність сумарного випадання не перевищує величини 30% на основній частині розрахункової області ЕМЕП. Високі значення похибки (до 50%) у прикордонних районах можуть бути пояснені визначальною роллю похибки граничної концентрації на загальну невизначеність поблизу границь. Слід зазначити, що навіть відносна похибка сумарного випадання до деякої міри корелює з розподілом антропогенної емісії: значні величини похибки (до 30%) досягаються в районах з інтенсивною антропогенною емісією. З іншого боку, випадання в районах, що перебувають далеко від джерел емісії, але не занадто близько до границі, має найменшу похибку (~25%). Варіація невизначеності сумарного випадання по розрахунковій області (за винятком прикордонних районів) порівняно мала й не перевищує 5%. Можна сказати, що в цілому невизначеність концентрації в повітрі більша, ніж невизначеність сумарного випадання й досягає 40% в основній частині розрахункової області. Помітної кореляції між відносною похибкою концентрації свинцю в повітрі й розподілом антропогенної емісії не спостерігається, за винятком того, що райони з найменшою відносною похибкою (~26%) також віддалені від джерел емісії. Вплив граничної концентрації в цьому випадку навіть менший, ніж для сумарного випадання й проявляється тільки в безпосередній близькості від границь, де невизначеність досягає 55%.

Отже, антропогенна емісія відіграє специфічну роль у невизначеності моделі через домінуючий внесок в загальну похибку, як сумарного випадання, так і концентрації забруднювача в повітрі. Крім того, її варто скоріше віднести до вхідним даних, а не до характеристик самої моделі. Тому важливо одержати інформацію про власну невизначеність моделі без впливу антропогенної емісії. Подібного роду розрахунки також були проведені в припущені, що емісія має точне значення. В цьому випадку власна невизначеність моделі в обох випадках значно нижча за невизначеність, що враховує антропогенну емісію.

Похиби, внесені самим формулюванням і чисельною реалізацією моделі можуть бути оцінені тільки шляхом порівняння результатів моделювання з вимірами й з результатами інших моделей далекого переносу [3].

- 1) Белов И.В., Беспалов М.С., Клочкова Л.В., Кулешов А.А., Сузан Д.В., Тишкин В.Ф. Транспортная модель распространения газообразных примесей в атмосфере города. Математическое моделирование, 2000, т. 12, №11.
- 2) Конвенция о трансграничном загрязнении воздуха на большие расстояния от 13 ноября 1979 г.
- 3) Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. — М.: Наука, 1982. — 319 с.
- 4) Протокол по тяжелым металлам к Конвенции 1979 года о трансграничном загрязнении воздуха на большие расстояния /Принят 24 июня 1998 года в г.Орхусе (Дания).

ДО ПИТАННЯ ПРО МОДЕЛЬНИЙ РОЗРАХУНОК ТА АНАЛІЗ МОЛЕКУЛИ ФЛУРЕНІЗИДУ

Францева А.Г., Унрод В.І.

Черкаський державний технологічний університет, gibis@rambler.ru

Логічно-структурний підхід до проблеми виявлення зв'язку фармакологічної активності речовин та вивчення метаболізму хімічних сполук за їх будовою, враховуючи дані квантово-хімічних розрахунків і сучасних фізичних методів аналізу дають принципово нові можливості щодо вивчення будови і хімічних властивостей речовин, суттєво економить час і дає досить точні результати досліджень в порівнянні з експериментальними даними.

В своїй роботі експериментальну речовину вилучали із таблеток флуренізу (рис.1) шляхом розчинення в безводному метанолі та досліджували методом хромато-мас-спектрометрії. Калібрування шкали мас проводили по перфтортретбутиламіну. Умови проведення експерименту: квадрупольний хромато-масс-спектрометр низького розподілення Agilent 6850/5973N виробництва Agilent Technologies, колонка кварцова капілярна HP-5MS діаметром 0,25 мм. Температура: інжектора – 250°C, інтерфейсу мас-спектрометра (transfer line) – 280°C, джерела іонів – 230°C, квадруполя – 150°C. Енергія електронного пучка – 70 eВ, напруга електропомножувача – 1729 В. Діапазон сканування 15-280 а.о.м., поріг – 271. Режим програмування термостата: 90°C – 2 хв., потім підйом до 300°C зі швидкістю – 11°C/хв., та витримування при цій температурі 8,91хв. Швидкість газу-носія (гелій) 1,2 мл/хв. Режим вводу проби: 1 мкл за допомогою автосамплера серії 7683 без поділу потоку (splitless). Після закінчення хроматографування отримали масс-хроматограми (м-х) по повному іонному струму.

Аналіз м-х проводили за допомогою програмного забезпечення AMDIS 32 (автоматизована система мас-спектральної ідентифікації м-х версія 2.1) із використанням мас-спектральної бази даних NIST-02 (національний інститут стандартів і технологій США, 2002р., версія 2.0) EPA (агентства по охороні навколишнього середовища)

Умови обробки м-х: мінімальний фактор збігання – 60, тип аналізу простий, поріг інструменту – низький, товщина компоненту 12 (кількість циклів вимірювання 1/2 висоти самого високого піку). Перекриття суміжними піками – з обох сторін, розподільна здатність (resolution) – середня, чутливість – висока, вимога до форми піку – середня, фон розчинника – 31, фон колонки – 207.

В зв'язку з тим, що летючість речовин низька, вводилася велика кількість проби, при чому, більша частина проби термічно руйнувалася, але невелика кількість проходила крізь хроматографічну колонку до мас-спектрометра.

Ми розглядали весь мас-спектр, але детально зупинилися на піках, більших за 25%. Уламок з $m/z=193$ утворився в результаті розриву зв'язку $N_{15}-C_{16}$, (50%), $m/z=179$ – в наслідок розриву зв'язку $N_{14}-N_{15}$ (30%), $m/z=165$ – C_9-N_{14} (65%), $m/z=106$ - $N_{15}-C_{16}$ (85%), $m/z=78$ - $C_{16}-C_{17}$. (50%).

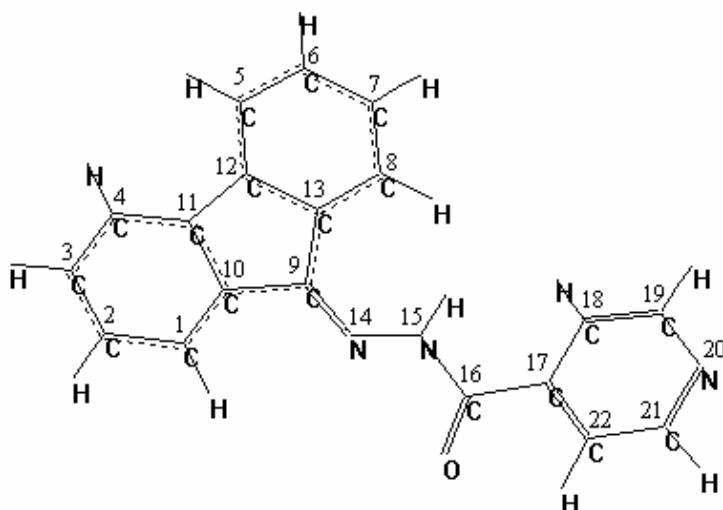


Рис.1. Молекула флуоренізу

Квантово-хімічний розрахунок параметрів молекули ми проводили напівемпіричним методом AM1 (Austin Model 1) [1,2] розглядали нейтральну молекулу флуоренізу та її катіон.

Таблиця 1

Зв'язок	Довжина зв'язку, Å		Порядок зв'язку		Кути, град	
	нейтр	катіон	нейтр	катіон	нейтр	катіон
C ₁ -C ₂	1,405	1,406	1,359	1,342	C ₁ C ₂ C ₃	121
C ₂ -C ₃	1,389	1,387	1,465	1,490	C ₂ C ₃ C ₄	121
C ₃ -C ₄	1,402	1,413	1,362	1,289	C ₃ C ₄ C ₁₁	119
C ₄ -C ₁₁	1,383	1,376	1,447	1,497	C ₄ C ₁₁ C ₁₂	130
C ₅ -C ₆	1,403	1,415	1,367	1,296	C ₁₁ C ₁₀ C ₁	119
C ₅ -C ₁₂	1,383	1,374	1,441	1,509	C ₄ C ₁₁ C ₁₀	121
C ₆ -C ₇	1,391	1,397	1,459	1,398	C ₉ C ₁₀ C ₁₁	108
C ₇ -C ₈	1,404	1,396	1,362	1,436	C ₁₀ C ₉ C ₁₃	105
C ₈ -C ₁₃	1,382	1,402	1,450	1,289	C ₉ C ₁₃ C ₁₂	109
C ₉ -C ₁₀	1,487	1,468	0,984	1,047	C ₁₃ C ₁₂ C ₅	120
C ₁₀ -C ₁₁	1,436	1,444	1,279	1,234	C ₁₂ C ₅ C ₆	119
C ₁₁ -C ₁₂	1,461	1,464	1,021	1,017	C ₅ C ₆ C ₇	121
C ₉ -C ₁₃	1,491	1,451	0,987	1,161	C ₆ C ₇ C ₈	121
C ₁₂ -C ₁₃	1,429	1,447	1,285	1,182	C ₇ C ₈ C ₁₃	118
C ₁₀ -C ₁	1,383	1,388	1,452	1,413	C ₁₀ C ₉ N ₁₄	134
C ₉ -N ₁₄	1,307	1,358	1,768	1,350	C ₉ N ₁₄ N ₁₅	124
N ₁₄ -N ₁₅	1,324	1,272	1,063	1,388	N ₁₅ C ₁₆ O	123
N ₁₅ -C ₁₆	1,414	1,480	0,989	0,798	N ₁₄ N ₁₅ C ₁₆	122
C ₁₆ -O	1,237	1,223	1,840	1,967	N ₁₅ C ₁₆ C ₁₇	114
C ₁₆ -C ₁₇	1,494	1,478	0,919	0,939	C ₁₆ C ₁₇ C ₁₈	118
C ₁₇ -C ₁₈	1,400	1,400	1,402	1,398	C ₁₇ C ₁₈ C ₁₉	118
C ₁₈ -C ₁₉	1,407	1,410	1,379	1,362	C ₁₈ C ₁₉ N ₂₀	123
C ₁₉ -N ₂₀	1,347	1,345	1,433	1,444	C ₁₉ N ₂₀ C ₂₁	117
N ₂₀ -C ₂₁	1,347	1,347	1,433	1,425	N ₂₀ C ₂₁ C ₂₂	123
C ₂₁ -C ₂₂	1,408	1,408	1,382	1,388	C ₂₁ C ₂₂ C ₁₇	118
C ₂₂ -C ₁₇	1,399	1,400	1,399	1,375	C ₂₂ C ₁₇ C ₁₈	119
ΔC-H	1,100	1,103	0,944	0,937	N ₁₄ N ₁₅ H	121
N ₁₅ -H	1,000	1,014	0,876	0,863	C ₁₀ C ₁ C ₂	119
					C ₁₃ C ₉ N ₁₄	120
						119

Як видно з таблиці 1 та даних мас-спектра відчутні зміни параметрів катіону та нейтральної молекули флуоренізу відбувається на зв'язках: N₁₄-N₁₅, N₁₅-C₁₆, C₉-N₁₄, C₁₆-C₁₇, і відповідає зміні порядків відповідних зв'язків, що обумовлює їх руйнування та утворення уламків.

- 1) Компьютеры и суперкомпьютеры в биологии /Под редакцией В.Д. Лахно и М.Н. Устинина. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002, – 528 с.
- 2) Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. – Ростов-на-Дону: Феникс, 1997. – 560 с.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ВОДОСПОЖИВАННЯ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ ПРОГРАМ - СИМУЛЯТОРІВ

Шахновський А.М., Єжовська А*, Квітка О.О., Янишпольський В.В.**

Національний технічний університет України “Київський політехнічний інститут”, кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів, Київ, Україна, kxtp@xtf-ntu-kpi.kiev.ua

*Rzeszów University of Technology, Department of Chemical and Process Engineering,
Poland, ichjj@prz.edu.pl

** ІП "Хоневелл-Україна", Київ, Україна, Vasiliy.Yanishpolskii@honeywell.com

Розробка науково обґрунтованих методів і засобів запобігання шкідливим впливам на водне середовище передбачає підвищення ефективності процесів застосування води на всіх етапах її «життєвого циклу». Мова йде про підвищенні інтенсивності як процесів очищення природних і стічних вод, так і процесів водоспоживання і водовідведення як визначальної ланки водного господарства. Підвищення ефективності процесів очищення води може бути досягнуте і шляхом зменшення об'ємів споживання води. Останнє спричиняє зменшення об'ємів освіти і збільшення ступеня концентрованості стічних вод, що поступають на очищення.

Для підтримки ухвалення проектних рішень на етапах проектування нового підприємства та модернізації підприємства, що функціонує, у світі розроблено ряд алгоритмічних процедур. Так, запропонована у [1, 2] процедура структурної оптимізації технологічних схем промислового водоспоживання, водовідведення і водоочищення (CBC) використовує інструментарій концептуального пінч-аналізу для визначення потенційних можливостей водного господарства з погляду водозберігання, та комбінаторного синтезу для генерації проектних рішень щодо підвищення ефективності використання води, оптимального водопостачання.

При цьому слід зауважити, що при генерації проектних рішень щодо водоспоживання поза розглядом залишається важлива задача: дослідження надійності експлуатації оптимізованих CBC. Під надійністю проектування розуміємо створення універсальних процедур проектування CBC, ефективних з точок зору технолога і математика. Натомість, надійність експлуатації передбачає безпечну і стабільну роботу оптимізованої CBC на всіх стадіях життєвого циклу від монтажу до зняття з експлуатації.

При впровадженні в експлуатацію оптимізованої CBC, як правило, недослідженою залишається зміна в часі кількісних характеристик складу потоків у схемі з повторним використанням води, особливо в нестационарних режимах. Можливі два шляхи забезпечення надійності функціонування оптимізованої CBC:

1. Запровадження автоматизованої системи керування технологічним процесом водоспоживання, як підсистеми у складі автоматизованої системи керування підприємством.
2. Застосування коефіцієнтів запасу водопостачання на стадії проектування CBC, з метою забезпечення стійкості схеми водоспоживання до коливань технологічного режиму.

Останній підхід є менш надійним та ефективним, забезпечує заздалегідь менший ступінь економії свіжої води, проте впровадження автоматизованої системи управління процесом водоспоживання вимагає значних капітальних витрат, і негативно позначається на загальному економічному ефекті від впровадження оптимальних СВС.

Тому у даній роботі у оптимізаційну модель схеми водоспоживання включено коефіцієнти запасу. За літературними даними [3, 4] прийнято значення $\delta = 0,1$.

Вивчення надійності СВС мало на меті перевірку достатності коефіцієнту запасу водопостачання для конкретної СВС, і проводилося методами комп'ютерного моделювання.

Для комп'ютерного моделювання окремих підсистем хіміко-технологічної системи (ХТС) широко застосовними є програми-симулятори хімічних виробництв – пакети універсальних моделюючих програм (УМП), які дозволяють реалізувати на комп'ютерах низку прийомів і методів вирішення завдань моделювання на різних рівнях ієархії хімічного підприємства.

УМП є універсальною програмною оболонкою, в якій реалізуються такі основні режими її роботи:

- «зображення процесу» – для графічного представлення технологічної схеми виробництва;
- «розрахунки» – для виконання обчислень із застосуванням реалізованих у вигляді обчислювальних модулів алгоритмів вирішення завдань комп'ютерного моделювання.

Функціонування УМП передбачає наявність спеціальних модулів, з використанням яких можна побудувати технологічну схему ХТС і вирішувати комплекс завдань його моделювання на комп'ютерах. При цьому дані, необхідні для проведення розрахунків, як, наприклад, фізико-хімічні властивості речовин, алгоритми для обчислення властивостей багатокомпонентних сумішей, різні алгоритми для перевірочно-оцінних і проектних розрахунків апаратів, включені до складу УМП.

Вивчення надійності СВС передбачало наступні етапи:

1) Представлення технологічних одиниць, що складають СВС (специфічні для даної схеми технологічні апарати, що споживають воду, а також дільники і змішувачі потоків, зберігачі води тощо), у форматі моделюючої програми.

2) Моделювання пуску і роботи СВС у нормальному режимі. При цьому, зокрема, стало очевидним, що в початковий момент часу (пуск схеми в експлуатацію) нормативи водоспоживання не виконуються через відсутність води повторного використання.

3) Власне, вивчення надійності СВС шляхом нанесення випадкових збурень імпульсного і східчастого характеру по різних каналах. Досліджувався, наприклад, вплив зміни наступних параметрів на відповідність води в системі технологічним вимогам:

- a) погіршення якості свіжої води зовнішнього джерела;
- b) збільшення обсягу втрат води в апаратах;
- c) погіршення якості води повторного використання через порушення технологічного режиму в одному з апаратів.

Були досліджені з погляду надійності експлуатації отримані раніше на основі структурної оптимізації, з використанням комбінаторного і концептуального підходів СВС ділянок нафтопереробного, целюлозно-паперового, фармацевтичного, харчового виробництв, виробництва будівельних матеріалів.

- 1) Статюха Г.А., Квітка А.А., Ежовски Я., Шахновский А.М. Повышение эффективности схем промышленного водопотребления (на примере из содовой промышленности). // Інтегровані технології та енергозбереження. – 2003. – №3. – С. 57-65.
- 2) Shakhnovskij A., Jezowski J., Kvitka A., Jezowska A., Statiukha G. Optymalizacja sieci wody procesowej przy zastosowaniu programowania matematycznego. // Inzineria chemiczna i procesowa. – 2004. – 25. – p. 1607-1612.
- 3) Koppol A. P. R., Bagajewicz M. J. Financial risk management in the design of water utilization systems in process plants. // Ind. Eng. Chem. Res. – 2003. – №42. – p. 5249-5255.
- 4) Savelski M. J., Bagajewicz M. J. On the optimality conditions of water utilization systems in process plants with a single contaminants // Chemical Engineering Science. – 2000. – v. 55. – p. 2035 – 5048.

**РАДІАЦІЙНИЙ БЛОК СИСТЕМИ ВІЗУАЛІЗАЦІЇ
МЕДИКО-ЕКОЛОГІЧНИХ БАЗ ДАНИХ**

Ячишин А.В., Матвиенко Д.Г., Белоусов В.Ф., Унрод В.І., Почечуев А.М.
Черкаський державний технологічний університет, unrod@mail.ru

За умов значного техногенного забруднення територій України, робота на дану тему сприятиме вирішенню актуального питання про зв'язок показників здоров'я населення (захворюваності, смертності і т.д.) з екологічною обстановкою в місці проживання. Багатовимірний статистичний аналіз і методи візуальної інтерпретації багатовимірних даних (а саме методи факторного, кластерного, регресивного, кореляційного аналізів та методи нелінійного шкалювання) використовуватимуться як апарат дослідження і прогнозування складних медико-екологічних ситуацій, пов'язаних з атмосферним забрудненням великих промислових міст України на фоні їх радіаційного забруднення тощо.

Розглянувши шляхи міграції радіонуклідів після аварійного викиду склали систему диференційних рівнянь, що описують процеси міграції радіонуклідів всередині екосистеми (включаючи трофічні ланцюги, які ведуть до людини). Вона складається з 10 рівнянь і містить 22 параметри, які змінюються відносно пори року.

“Канонічність” даної схеми полягає в її універсальності: враховані такі ланки екосистеми, які мають місце для багатьох радіонуклідів.

Для оцінки процесу міграції радіонуклідів всередині екосистеми була написана програма, що дозволяє наочно, у графічному виді, давати прогноз по переносу радіонуклідів в екологічних і трофічних ланцюгах в даних камерах і по формуванню індивідуальних очікуваних доз для людини за розглянутий період. Дози можна моделювати по внутрішньому опроміненні радіонуклідів для дорослої людини та дітей 1, 5, 10, 15 років з урахуванням різноманітних раціонів харчування. Людина отримує повне опромінення, що складається з зовнішнього і внутрішнього. В свою чергу внутрішнє складається з інгаляційного надходження та заковтування. Маючи значення разового аварійного викиду можна розрахувати динаміку радіонукліду в усіх камерах від декількох днів до декількох років. Модель в перші дні показує нелінійне відпрацювання, яке дає пік, а потім система йде до стаціонарного стану.

**МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД К КОЛИЧЕСТВЕННОМУ АНАЛИЗУ
ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОЧВЫ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ ПРЕДПРИЯТИЯ**

Бойко Т.В., Ищишина А.А.
Национальный технический университет Украины «КПИ», Ischishina@mail.ru

На сучасний день актуальним являється розвиток оцінки впливів на оточуючу середу (ОВОС) в напрямлений розробки процедур количественного анализа загрязнення оточуючої середи (ОС), а також процедури принятия рішень відносно состояния ОС уже на этапе проектирования об'єкта. По мнению авторов для реализации концепции управления техногенной безопасностью хозяйственного об'єкта процедура ОВОС должна заканчиваться не только количественной оценкой, а и принятием решений на основе полученных результатов.

Авторами предложен подход к количественному анализу, базирующийся на суммарном показателе загрязнения почвы для каждого загрязняющего вещества, который определяется по формуле (1):

$$СПЗ_i = \sum_{i=1}^n k_i \cdot \frac{(C_{cp_i} - C_{\phi_i})}{ПДК_i}, \quad (1)$$

где k_i – коэффициент, определяемый по показателю вредности, C_{cp_i} – среднее фактическое

содержание загрязняющего вещества в почве, мг/кг, C_{ϕ_i} – фоновое содержание загрязняющего вещества в почве, мг/кг, (в случае отсутствия значения ПДК принимается значение C_{ϕ_i}).

При принятии решений для поставленной задачи анализа загрязнения почвы авторами предлагалось использовать функцию желательности Харрингтона как критерий оценки загрязнения почвы опасным объектом. Функция желательности использована для расчета желательностей соответствующих показателей загрязнения, то есть приведенных значений суммарного показателя загрязнения почвы по формуле (2):

$$СПЗ_{np} = 1 - d_i = 1 - e^{-(e^{-СПЗ'_i})}, \quad (2)$$

где d_i – функция желательности, $СПЗ'_i$ – некоторая безразмерная величина, которая связана с суммарным показателем загрязнения СПЗ и определяется по формуле (3):

$$СПЗ'_i = \frac{2 \cdot СПЗ_i - (СПЗ_{\max} + СПЗ_{\min})}{(СПЗ_{\max} - СПЗ_{\min})} \quad (3)$$

То есть, рассчитанным значениям суммарного показателя загрязнения почвы СПЗ соответствуют его приведенные значения $СПЗ_{np}$, найденные по формуле (2). Количественный анализ с использованием функции желательности проводился для энергоблока ТЭС и были полученные значения СПЗ и соответственные им желательности $СПЗ_{np}$. Полученному значению суммарного показателя загрязнения почвы $СПЗ=3,87$ соответствует приведенное значение $СПЗ_{np}=0,49$.

При принятии решений относительно проведения мероприятия по уменьшению загрязнения почвы разработана универсальная шкала, учитывающая все факторы, воздействующие на почву, используя шкалу желательности, которая является удобным инструментом при оценке качества, а в нашем случае оценке загрязнения. То есть значению суммарного показателя загрязнения $СПЗ_{np}=0,49$ соответствует умеренно опасная категория загрязненности почвы.

Авторами также проведен сравнительный расчет по нескольким методикам количественного анализа загрязнения почв. При проведении ОВОС для оценки загрязнения почвы вредными веществами используются методические указания [1], где при оценке уровня загрязнения почв учитывается возможное отрицательное влияние на контактирующие среды (воду, воздух), пищевые продукты и прямо или опосредовано на человека, а также на биологическую активность почвы и процессы самоочищения. Оценка уровня химического загрязнения почв населенных пунктов согласно [1] проводится по показателям, разработанным при сопряженных геохимических и гигиенических исследованиях окружающей среды городов с действующими источниками загрязнения (коэффициент концентрации химического вещества K_c и суммарный показатель загрязнения Z_c). Согласно [1] рассчитан суммарный показатель загрязнения почвы для исследуемого объекта $Z_c = 21,25$, и тогда категория загрязнения почвы – умеренно опасная. Как видим в рассмотренной методике [1] этап принятия решений на основе расчета основных количественных показателей отсутствует.

Также авторами рассматривался количественный анализ загрязнения почвы по методике [2], где основными количественными показателями также являются коэффициент концентрации химического вещества K_c и суммарный показатель загрязнения Z_c (измененная форма). Оценка степени опасности загрязнения почв комплексом металлов по показателю Z_c проводится по оценочной шкале, суммарный показатель загрязнения равен $Z_c = 2,25$, а категория загрязнения почвы – допустимая. Проанализировав методику [2], возникает вопрос о необходимости учета количества загрязняющих веществ n при нахождении суммарного показателя загрязнения Z_c и уместности использования шкалы оценки загрязнения.

Некоторыми авторами [3] для количественной оценки загрязнения почвы предлагается использовать коэффициент концентрации химических элементов и показатель интенсивности загрязнения почвы. Так как показатель интенсивности загрязнения почвы для исследуемого объекта равен $P_i=118,15$, то категория интенсивности загрязнения почвы – очень опасная. Проведя анализ данной методики оценки загрязнения почвы, авторы пришли к выводу, что зависимость нахождения показателя интенсивности не соответствует установленным нормам [1]. Исходя из выше сказанного, применение такой методики является проблематичным.

Исходя из проведенного анализа существующих подходов к количественному анализу загрязнения почв, можно сделать вывод об их разрозненности и отсутствии этапа принятия решений, поэтому существует необходимость разработки универсального подхода с принятием решений в системе ОВОС. Предложенный авторами подход основывается на суммарном показателе загрязнения почвы, который учитывает не только превышение допустимых нормативных значений содержания загрязнителей, но и их превышение по показателям вредности. Также разработана универсальная шкала принятия решений относительно загрязненности почвы с применением функции желательности, поэтому, по мнению авторов, предложенный универсальный подход принятия решения относительно загрязненности почвы может быть включен в систему ОВОС как важная составляющая процедуры анализа загрязнения почвы и принятия решений о приемлемости проекта.

- 1) "Методические указания по оценке степени опасности загрязнения почвы химическими веществами" N 4266-87, утверждены МОЗ СССР от 13.04.87.
- 2) Методические указания МУ 2.1.7.730-99 Гигиеническая оценка качества почвы населенных мест, утв. Главным государственным санитарным врачом РФ 7 февраля 1999 г.
- 3) Гуцюляк В.М., Присакар В.Б. Геоэкологічне картування: Методичні вказівки до практичних занять. – Чернівці: ЧНУ, 2004. – 50 с.

ОЦЕНКА ПРИМЕНИМОСТИ РАЗЛИЧНЫХ АДСОРБИОННЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ФАЗ ТВЕРДОЕ ТЕЛО - РАСТВОР

Тымчук А.Ф.

Одесский национальный университет имени И.И. Мечникова, Tymchuk@onu.edu.ua

Сорбция из растворов на твердых поверхностях является основой многих технологических процессов, разработка которых требует целого ряда расчетов, связанных с интерпретацией экспериментальных изотерм сорбции. Использование элементов компьютерного моделирования значительно упрощает подбор наиболее подходящих моделей для описания сорбционных процессов с учетом рассматриваемой границы раздела фаз. Наиболее распространенными теориями являются теория мономолекулярной адсорбции Лэнгмюра, модель нелокализованной адсорбции Хилла–Де Бура, теории полимолекулярной адсорбции Брунауэра–Эмметта–Теллера и Харкинса–Юра, учитывающие представления о многослойной адсорбции.

Целью исследований явилось определение возможности формального применения вышеупомянутых моделей сорбции по отношению к конкретным исследуемым системам.

Математическую обработку экспериментальных изотерм сорбции осуществляли путем их линеаризации с последующим использованием программы «Langmuir». В качестве сорбента использовали высокомолекулярный хитин, полученный из панцирей ракообразных, в качестве сорбатов – анионные и катионные поверхностно-активные вещества (ПАВ) – ряд алкилсульфатов натрия и хлоридов алкилпиридиния с длиной углеводородных радикалов от 12 до 18 атомов углерода.

Экспериментально полученные изотермы сорбции ряда алкилсульфатов натрия хитином относятся к L – типу согласно классификации Гильса. Из всех рассмотренных уравнений для описания сорбции АСН, кроме уравнения Лэнгмюра (на первоначальном участке изотерм), применимы уравнения Хилла – де Бура и БЭТ в более широком интервале концентраций. Уравнение Хилла – Де Бура выполнимо при степенях заполнения сорбента от 0,2 до 0,7. Прямолинейная зависимость в линеаризованных координатах уравнения БЭТ наблюдается в интервале концентраций от 3,0 до $9,0 \cdot 10^{-5}$ моль/л. Выбор сорбционной модели позволил рассчитать параметры, характеризующие процесс сорбции. Параметр κ_1 , учитывающий взаимодействие молекул АСН с поверхностью хитина, лежит в пределах 0,18 - 0,23, с увеличением длины углеводородного радикала АСН незначительно усиливается взаимодействие молекул ПАВ с поверхностью сорбента. Параметр κ_2 , характеризующий ассоциацию молекул на поверхности сорбента, рассчитанный по уравнению Хилла – де Бура, изменяется от 5,32 до 7,25 в зависимости от размера молекулы сорбируемого ПАВ, что соответствует когезии средней силы. Для этих систем использование программы «Langmuir» дает удовлетворительное соответствие величин констант сорбционного равновесия κ_1 и предельной сорбции A_∞ , рассчитанных различными методами.

Изотермы сорбции ряда хлоридов алкилпиридиния относятся к изотермам S-типа и L-типа по классификации Гильса, что ограничивает возможность использования представленных уравнений, поскольку дает существенные отрицательные отклонения величин κ_1 и A_∞ . В ряде случаев удовлетворительно описывает сорбцию хлоридов алкилпиридиния уравнение Хилла – де Бура. Рассчитанный параметр κ_2 выше, чем для анионных ПАВ, и составляет 9,67. В поверхностном слое наблюдается ассоциация молекул ПАВ, которая определяется их строением, что подтверждается наличием плато на изотермах в областях концентраций гораздо меньших критической концентрации мицеллообразования.

Таким образом, формальное применение уравнений сорбции с использованием компьютерных расчетов показывает, что целесообразно использовать несколько уравнений, учитывающих как дополислойную, так и полислойную сорбцию, наблюдающуюся в исследуемых системах.

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМОВ ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ РАДИОЛОГИЧЕСКОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПРОДУКТОВ ПИТАНИЯ

Унрод В.И., *Матвиенко Д.Г., **Ячишин А.В., **Белоусов В.Ф., **Савченко А.Н.

Черкасский государственный технологический университет, unrod@mail.ru

*Черкасский государственный центр стандартизации, метрологии и сертификации

**Харьковский национальный фармацевтический университет

В условиях усиленного техногенного загрязнения территории Украины актуальными являются работы по исследованию и прогнозированию сложных экологических ситуаций методами математического моделирования и многомерного статистического анализа, реализованных в программных средствах. При этом актуальными является разработка и исследование алгоритмов оценок влияния техногенных нагрузок на окружающую среду и человека.

На основе факторного анализа с помощью метода главных компонент был проведен многомерный анализ данных по содержанию радиоактивных металлов (^{137}Cs и ^{90}Sr) в основных продуктах питания (рыбе, мясе, молоке, хлебе, крупах) в 11 районах Черкасской области за четыре года (2000-2003 г.г.) [1, 2], в результате которого мы получили интегральные показатели (факторы 1 и 2) с накопленной дисперсией около 80%. Эти интегральные показатели дают возможность определить структуру взаимосвязей между экологическими данными Черкасского региона, то есть сделать их классификацию [3]. Потом с помощью кластерного анализа проводилось районирование территории Черкасской области по радиоэкологическим показателям содержания ^{137}Cs и ^{90}Sr в основных продуктах

питания и строились карты, которые отражают динамику загрязнения продуктов радионуклидами за последние несколько лет (начиная с 2000-го года) Все данные брались из Радиологической лаборатории центра испытаний пищевой продукции и промышленного сырья, ГП "Черкассыстандартметрология" [http://www.chdcsm.s.neost.com].

Применение вышеперечисленных методов для анализа данных медико-экологического и пищевого мониторингов может быть использовано при принятии одинаковых решений в области контроля данных пищевого мониторинга или здоровья населения.

- 1) Зухин Ю.В., Матвиенко Д.Г. Многомерные подходы к статистической обработке данных радионуклидного загрязнения пищевых продуктов Черкасской области // „Моделювання та інформаційні технології”: Зб. наук. пр. – Київ. – Вип. 28. – К., 2004. – с. 59-67.
- 2) Зухин Ю.В., Матвиенко Д.Г. Многомерные подходы к статистической обработке медико-экологических данных // Збірник тез ХХIV науково-технічної конференції „Моделювання” – К., 11-12 січня 2005. – с. 32-33.
- 3) Матвиенко Д.Г., Яцишин А.В. Комбинированный алгоритм анализа экологической ситуации в регионе // Збірник наукових праць ПМЕ НАН України, 2007.

ВИЗУАЛИЗАЦІЯ ДАННИХ РАДІОЕКОЛОГІЧЕСКОГО МОНІТОРИНГА ЖИТОМИРСКОГО І ЧЕРКАССКОГО РЕГІОНА С ПОМОЩЬЮ ГІС

Унрод В.И., *Яцишин А.В., **Матвиенко Д.Г. *Белоусов В.Ф., *Почечуев А.М.

Черкасский государственный технологический университет, unrod@mail.ru

*Харьковский национальный фармацевтический университет

**Черкасский государственный центр стандартизации, метрологии и сертификации

Актуальность данных разработок заключается, прежде всего, в необходимости принятия решений в условиях многомерной постоянно изменяющейся информации о состоянии окружающей среды.

Основные задачи, которые решались на данной стадии первичной визуализации экологических данных:

- подключение к существующим медико-экологическим базам;
- отображение состояния экологических объектов в виде:
 - тематических карт экологического загрязнения;
 - изолиний и контурных поверхностей.

В работах [1-3] рассматривается архитектура математического пакета, разработанного для получения радиационных прогнозов. Этот пакет реализует модель процессов миграции радионуклидов как точечную модель. Здесь предлагается алгоритм пространственного распределения результатов моделирования с помощью ГІС технологий. Конкретным объектом приложения являются загрязненные после Чернобыльской аварии территории Житомирской области. Этот алгоритм состоит из следующих шагов:

1. Используется база данных паспортизации Житомирской области. В базу входят наиболее загрязненные, в радиационном смысле, районы: Овручский (44 села), Лугинский (49 села), Олевский (44 села), Народичский (46 сел) районы;
2. Данная выборка из базы подвергается нормировке по «наихудшему» эталону, в радиационном смысле, вычисляется коэффициент нормировки X ;
3. Нормируются начальные условия входных данных для радиационного пакета по каждому селу: $X_1 = X \cdot 0,7/1,1$; $X_2 = X \cdot 0,7/0,3$; $X_3 = X \cdot 0,25/0,3$; $X_4 = X \cdot 0,75/0,3$; $X_5 = \dots = X_9 = 0$ и заносятся в электронные таблицы Microsoft Excel XP;
4. С помощью радиационного пакета получаем прогнозы по следующим компартментам: «Наземная часть урожая» (X_1), «Почва под посевами» (X_2), «Пастбищная трава» (X_3), «Почва на пастбище» (X_4), «Подземная часть урожая» (X_5),

«Недоступное депо почвы» (X_6), «Мясо» (X_7), «Молоко» (X_8), «Яйца» (X_9), а также «Эффективная доза», «Вклад в дозу наземной частью урожая», «Вклад в дозу подземной частью урожая», «Вклад в дозу мяса», «Вклад в дозу молока», «Вклад в дозу яиц» для взрослого человека, ребенка 1, 5, 10, 15 лет.

5. Выходные данные из пакета передаются в электронные таблицы Microsoft Excel XP.
 - 5.1. Таблицы связываются с пакетом ГИС MapInfo Professional 6, где происходит оцифровка данных по карте Житомирской области. Создаются диаграммы по каждому селу в зависимости от компартиента.
 - 5.2. Таблицы передаются в пакет ГИС Golden Software Surfer 8, где расчитываются пространственные изолинии Житомирской области в зависимости от компартиента методом $\min_{\text{curvature}}$.

С помощью ГИС Golden Software Surfer 8 смоделированы прогнозные сценарии радиоэкологического состояния территорий, получен характер развития радиоэкологических ситуаций, которые могут быть использованы при поддержки управлеченческих решений.

Итогом исследований, представленных в данной работе, стали следующие результаты:

- Разработана начальная версия системы визуализации медико-экологических баз данных (на примере Житомирской и Черкасской области) [4].
 - Создан ряд тематических карт по влиянию загрязнения радионуклидов (^{137}Cs и ^{90}Sr) пищевых продуктов (мясо-, молокопродукты, рыба, овощи, крупы, хлеб) на заболеваемость населения Черкасской области.
- 1) Сердюцька Л.Ф. Математичне моделювання впливу техногенних навантажень на екологічні системи. / Автореф. дис. д-ра техн. наук. К: 2004. – 42 с.
 - 2) Сердюцька Л.Ф., Каменєва И.П. Системний аналіз і математическое моделирование медико-экологических последствий аварии на ЧАЭС и других техногенных воздействий.-К.: «Медэкол» МНИЦ БІО-ЭКОС МЧС и НАНУ.-172с.
 - 3) Яцишин А.В. Розробка системи візуалізації медико-екологічних баз даних. Радіаційний блок // Збірник наукових праць ІПМЕ НАН України. – Вип.25. – Львів: Світ, 2004. – С. 7–13.
 - 4) Яцишин А.В., Матвиенко Д.Г., Соломенко Л.Л. Разработка концептуальной структуры базы данных по загрязнению продуктов питания ^{137}Cs и ^{90}Sr на примере Черкасской области // Збірник наукових праць ІПМЕ НАН України. – Вип.26. – Львів: Світ, 2004. – С. 3–9.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИ РАЗРАБОТКЕ ИНДИКАТОРНЫХ ТРУБОК ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХРОМА(VI)

Чеботарёв А. Н., Гузенко Е. М., Щербакова Т. М., Ефимова И. С.

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

Проблемы мониторинга объектов окружающей среды ставят задачу создания простых, экспрессных и чувствительных методов определения токсичных веществ, хорошо работающих в режимах визуально-колориметрического тестирования и системах автоматического контроля. Удобны тесты с пределом обнаружения лежащем на уровне и если есть необходимость выше предельно допустимых концентраций (ПДК) определяемых веществ. В этом случае как положительный, так и отрицательный результаты дают информацию о содержании исследуемого вещества в пробе. Широкое распространение получили так называемые индикаторные трубы (ИТ) обладающие всеми известными преимуществами экспресс - методов. Так как основным конструкционным и чувствительным элементом ИТ является слой твёрдого носителя на котором сорбируется из раствора определяемый компонент в динамическом режиме, то особый интерес вызывает исследование в области динамики и кинетики процессов, протекающих в такой системе. Данные таких исследований дают возможность смоделировать гетерогенную систему, работающую в динамическом режиме.

Одним из высокотоксичных элементов, требующих строгого контроля в природных и промышленных водах, является хром(VI), для определения которого используют различные органические реагенты (**ОР**), позволяющие получить окрашенный продукт реакции с последующим использованием его химико-аналитических свойств при разработке визуально-колориметрических экспресс - методов. В настоящей работе в качестве ОР для определения хрома(VI) были использованы 1,5-дифенилкарбазид (**ДФК**) и кармоазин (**КАН**). Известно что хром(VI) с ДФК в кислой среде ($pH = 1$) образует положительнозаряженный, красно-фиолетовый комплекс - дифенилкарбазонат хрома (III) (**ДФКАТ-Cr(III)**), а с кармоазином при $pH = 2$ — отрицательнозаряженный комплекс красно-фиолетового цвета - кармоазонат хрома(III) (**КАТ-Cr(III)**). В качестве сорбентов указанных выше комплексов использовали сильнокислотный катионит КУ-2-8 и сильноосновный анионит АВ-17-8 соответственно.

С целью разработки ИТ на основе гетерогенной системы типа (**I**) – КУ-2-8 – ДФКАТ-Cr(III) ранее были изучены кинетические и динамические особенности процесса сорбции в ней и построена соответствующая математическая модель (**ММ**) [1 - 4]. Для подтверждения адекватности используемой ММ в гетерогенных системах подобных (**I**), выбрана аналогичная, с химической точки зрения системе (**I**), система (**II**) – АВ-17-8 – КАТ-Cr(III). В данной работе использована ММ массопереноса на основании представлений теории пограничного слоя, учитывающая продольную диффузию поглощаемого комплекса по высоте слоя, характерные особенности гидродинамики процесса, хорошо согласующаяся с экспериментальными данными, а также описывающая процессы в слое ионита во внутри- и внешнедиффузионной областях, и состоящая из [5]:

- 1) уравнения материального баланса с использованием коэффициента продольной диффузии $\frac{\partial c_{\text{ост}}}{\partial \tau} + V_{\text{об}} \frac{\partial c_{\text{ост}}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{c}}{\partial \tau} = D_L \frac{\partial^2 c_{\text{ост}}}{\partial x^2}$; 2) уравнения кинетики сорбции $\frac{\partial \bar{c}}{\partial \tau} = \beta(c_{\text{ост}} - c^*)$; 3) уравнения изотермы сорбции $\bar{c} = \frac{c^*}{a + bc^*}$; 4) начальных и граничных условий, необходимых для решения системы уравнений (1) – (3):

$$\left. \begin{array}{l} \tau = 0: c_{\text{ост}} = c_{\text{нач}}; \bar{c} = 0; \\ x = 0: c_{\text{ост}} = c_{\text{нач}}; \\ x = \infty: c_{\text{ост}} = 0; \end{array} \right|,$$

где $c_{\text{ост}}$ - остаточная концентрация комплекса в растворе; \bar{c} - концентрация комплекса в фазе ионита; c^* - равновесная концентрация комплекса на границе зерно ионообменника – раствор; $c_{\text{нач}}$ - начальная концентрация комплекса в растворе; D_L - коэффициент продольной диффузии; τ - продолжительность сорбции; $V_{\text{об}}$ – объёмная скорость потока жидкой фазы; x - координата; β - коэффициент массообмена; a , b - константы, определяемые экспериментально.

При изучении динамики сорбции в колонку с внутренним диаметром 10 мм помещали ионит массой 0,50 г, фракцией 0,43÷0,50 мм [1 - 4]. Через колонку пропускали водные растворы, содержащие, предварительно полученные по известным методикам комплексы (ДФКАТ-Cr(III)) и (КАТ-Cr(III)) с фиксированной концентрацией по хрому(VI). В указанных условиях получены выходные кривые сорбции хрома(VI) с объёмными скоростями ($V_{\text{об}}$) пропускания растворов комплексов от 0,3 до 20,0 мл/мин.

Для системы I установлены две группы динамических кривых [1 - 3]. К первой группе относятся кривые с диапазоном объёмных скоростей $V_{\text{об}} = 0,5 \div 6,0$ мл/мин с двумя плато. Первое плато небольших размеров, отвечает мономолекулярной адсорбции комплекса ДФКАТ-Cr(III) на поверхности катионита за счёт сил кулоновского притяжения и начала формирования монослоя в результате чего поверхность частично гидрофобизируется.

Дополнительное закрепление обусловлено гидрофобными взаимодействиями имеющими место между углеводородными фрагментами комплекса и поверхностью КУ-2-8. Второе продолжительное плато, свидетельствует об образовании полислоёв, за счёт дальнодействующих гидрофобных сил. Ко второй группе с диапазоном скоростей $V_{\text{об}} = 6,0 \div 20,0$ мл/мин относятся кривые, имеющие классическую форму выходной кривой динамики сорбции с образованием достаточно прочного монослоя, практически по всей высоте слоя сорбента, что и отражается в виде одного продолжительного плато.

В системе II в диапазоне скоростей $V_{\text{об}} = 0,5 \div 20,0$ мл/мин получены динамические кривые с одним продолжительным плато. Исходя из изотерм сорбции полученных для обеих систем механизм формирования адсорбционных слоёв на поверхности АВ-17-8 аналогичен предложенному для системы I. Однако соответствующие выходные кривые имеют только одно продолжительное плато, что является следствием достаточно больших геометрических размеров и молекулярной массы комплекса КАТ-Cr(III) по сравнению с ДФКАТ-Cr(III).

На основании полученных данных установлено время ($\tau_{\text{выр}}$) достижения условия $c_{\text{нач}} \equiv c_{\text{ост}}$, рассчитан коэффициент массообмена (β) при вариациях объёмных скоростей пропускания раствора комплексов (КАТ-Cr(III)) или (ДФКАТ-Cr(III)) через слой ионита. На рис. 1, 2 приведены экспериментальные и полученные расчётным путём, с помощью приведенной выше ММ. Графические зависимости $\tau_{\text{выр}} = f(V_{\text{об}})$ и $\beta = f(V_{\text{об}})$, позволяют судить об её адекватности к изучаемым системам. Различие экспериментальных значений и полученных расчётным путём с помощью ММ составляет 10 - 15%.

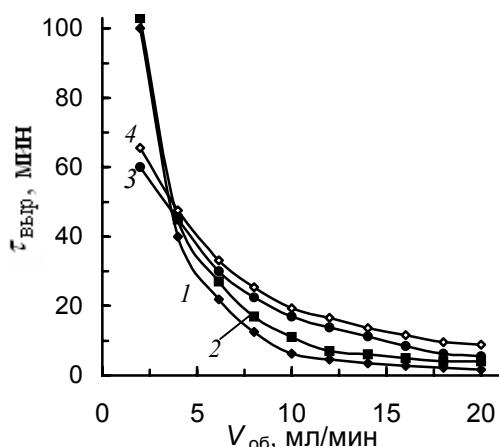


Рис. 1. Зависимость времени выравнивания от объёмной скорости пропускания раствора комплекса через слой ионита.

1, 3 – экспериментальные данные,
2, 4 – полученные с помощью ММ, $d_k = 10$ мм,
 $m_c = 0,5$ г, $c_{\text{нач}} = 0,10$ мкг/мл (система I,
кривые 1, 2), $c_{\text{нач}} = 0,43$ мкг/мл
(система II, кривые 3, 4).

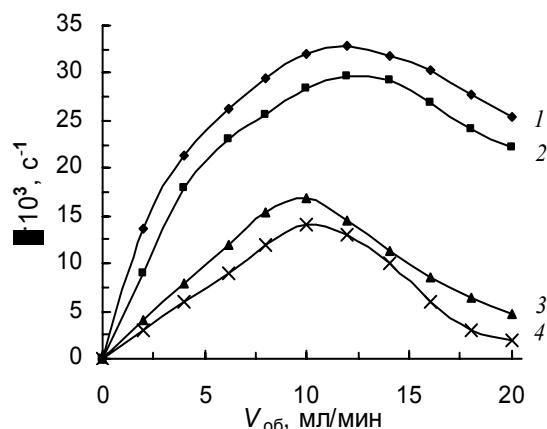


Рис. 2. Зависимость коэффициента массообмена от объёмной скорости пропускания раствора комплекса через слой ионита.

1, 3 – экспериментальные данные,
2, 4 – полученные с помощью ММ, $d_k = 10$ мм,
 $m_c = 0,5$ г, $c_{\text{нач}} = 0,10$ мкг/мл (система I,
кривые 3, 4), $c_{\text{нач}} = 0,43$ мкг/мл (система
II, кривые 1, 2).

Необходимо обратить внимание на форму кривых приведенных на рис. 2. Рост значений коэффициента β по мере достижения диапазона объёмных скоростей от 7,5 \div 12,5 мл/мин, и дальнейшее уменьшение этих значений при больших $V_{\text{об}}$, свидетельствует об определённой смене механизма формирования адсорбционных слоёв на поверхности ионитов. Как указано выше, при достаточно больших $V_{\text{об}}$ невозможно образование полислоёв комплекса на поверхности ионита, и как следствие из этого скорость процесса сорбции и коэффициент массообмена резко уменьшается по мере увеличения $V_{\text{об}}$. Причём данная закономерность наблюдается в двух исследуемых системах. Этот факт подтверждает сопоставимость систем I и II с химической точки зрения. Однако, на кривых 3, 4 (рис. 2),

отвечающих системе I, при увеличении $V_{об}$ происходит резкое изменение коэффициента β , по сравнению с системой II (кривые 1, 2, рис. 2). Это можно объяснить с точки зрения стериометрии комплексов ДФКАТ-Cr(III) и КАТ-Cr(III) и их стехиометрическом соотношении в растворе, что и обуславливает необходимость различия в продолжительности формирования адсорбционных слоёв. Следовательно, при изучении гетерогенных систем подобных с физико-химической точки зрения, специфика образования адсорбционных слоёв может быть аналогичной предложенному механизму в данной работе.

В заключение следует отметить, что используемая ММ в принципе позволяет учитывать как химико-аналитические и сорбционные свойства исследуемой гетерогенной системы, так и объяснять зависимость метрологических характеристик предлагаемого варианта экспресс-метода определения хрома(VI) от целого ряда факторов. В целом использование подходов математического моделирования позволяет расчётным путём оптимизировать сорбционные процессы извлечения того или иного компонента из раствора, а также существенно сократить объём экспериментальной работы и время внедрения результатов разработки с учётом конструкционных особенностей разрабатываемых ИТ при варьировании таких параметров. Наиболее важными, по нашему мнению, являются объёмная скорость прохождения анализируемого раствора через слой сорбента ИТ, коэффициент массообмена и время достижения динамического равновесия в системе.

- 1) Чеботарев О.М., Щербакова Т.М., Гузенко О.М. Гідродинамічні та масообмінні характеристики процесу сорбції комплексу хрому(VI) з дифенілкарбазидом катіонітом КУ-2-8 // Вісник ОНУ. Серія Хімія - 2000. - Т. 5. - Вип. 2. - С. 45 - 50.
- 2) Чеботарев А.Н., Гузенко Е.М., Щербакова Т.М. Особенности динамики адсорбции комплекса хрома(VI) с 1,5-дифенилкарбазидом катионитом КУ-2-8 из водных сред // Межд. научно-техн. конф. "Современные проблемы хим. технологии неорг. веществ", Сб. науч. трудов, Одесса, 2001.- Т. 1. - С. 193 - 195.
- 3) Чеботарев О.М., Гузенко О.М., Щербакова Т.М. Вивчення кінетики сорбції комплексу дифенілкарбазонату хрому(III) на катіоніті КУ-2-8 // Вісник ОНУ. Серія Хімія - 2002. - Т. 6. - Вип. 7 - 8. - С. 73 - 78.
- 4) Чеботарев А.Н., Гузенко Е.М., Щербакова Т.М. // Моделирование динамического процесса сорбции комплекса хрома(VI) с 1,5-дифенилкарбазидом на катионите КУ-2-8 // Вест. ОНУ. Серия Химия - 2004. - Т. 11. - Вып. 9 - 10. - С. 107 - 116.
- 5) Иониты в химической технологии / Под ред. Б.П. Никольского, П.Г. Романкова. – Л.: Химия, 1982. 416 с.

ФАКТОРНО-КЛАСТЕРНЫЙ АЛГОРИТМ АНАЛИЗА ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ СИТУАЦИИ В РЕГИОНЕ

Яцишин А.В., Матвиенко Д.Г., Унрод В.И., Агапова А.В., Савченко А.Н.

Черкасский государственный технологический университет, unrod@mail.ru

Для получения интегральных показателей радиоэкологического загрязнения использовался факторный анализ и метод главных компонент, целью которых является сокращение числа переменных. Автор показывает, что эти данные можно разбивать по двум факторам (дисперсия более 80%), что потом можно достаточно легко интерпретировать. Применяя к этим данным метод кластерного анализа, автор получил на географических картах районирование исследованной территории.

Применение вышеперечисленных методов для анализа данных медико-экологического и пищевого мониторингов может быть использовано при принятии одинаковых решений в области контроля данных пищевого мониторинга или здоровья населения.

Использование метода факторного анализа в данной работе дает возможность получить интегральные показатели радиоэкологического загрязнения Черкасской области, а применение метода кластерного анализа – дает возможность разбить на кластеры Черкасский регион и сделать его районирование.

В виду того, что существующие методы, не отвечают поставленным задачам, целесообразно использовать алгоритм, основанный на двух методах факторного и кластерного анализа, так как он дает возможность сделать оценку состояния окружающей среды и контролировать влияния интегральных техногенных нагрузок на экологическое состояние и здоровье населения отдельных регионов. С помощью метода факторного анализа происходит сокращение числа переменных для данных медико-экологического и пищевого мониторингов. Затем методом кластерного анализа проводится районирование территории по радиоэкологическим показателям содержания ^{137}Cs и ^{90}Sr в основных продуктах питания, и строятся карты, которые отражают динамику загрязнения продуктов радионуклидами исследованного региона за последние несколько лет (начиная с 2000-го года).

На основе факторного анализа с помощью метода главных компонент был проведен многомерный анализ данных по содержанию радиоактивных металлов (^{137}Cs и ^{90}Sr) в основных продуктах питания (рыбе, мясе, молоке, хлебе, крупах) в 11 районах Черкасской области за четыре года (2000-2003 г.г.), в результате которого мы получили интегральные показатели (факторы 1 и 2) с накопленной дисперсией около 80%. Эти интегральные показатели дают возможность определить структуру взаимосвязей между экологическими данными Черкасского региона, то есть сделать их классификацию.

MINIMIZATION OF WATER USAGE AND WASTEWATER TREATMENT COST BY SYSTEMATIC APPROACHES

Jezowski J., Statyukha G.* , Jezowska A., Shakhnovsky A.* , Dzhygyrey I.*

Rzeszów University of Technology, Department of Chemical and Process Engineering, Poland,
ichjj@prz.edu.pl; *National Technical University of Ukraine, Department of Cybernetics of
Chemical Technology Processes, Ukraine, kxtp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Introduction. Minimization of process water consumption in chemical and relative industries is of great economic and environmental significance. A decrease of water usage means a decrease of wastewater generation in consequence. A substantial reduction of both freshwater and wastewater flow rates can be achieved by wastewater reuse and regeneration. Further drop of cost of wastewater treatment is achievable by deliberate distribution of streams. To reach a significant progress in all cases it is necessary to find flow rates of streams and their composition in a system consisting of water using operations and regeneration/treatment processes. Note that this also means determining of system topology. This complex problem is commonly formulated as water network (WN) optimization. Total water network design is very complex and, thus, commonly divided into two parts - designing of network of water usage processes (water usage network – WUN) and designing of wastewater treatment network (WTN). Scientists from Rzeszów University of Technology (RUT) and National Technical University of Ukraine (KPI) have investigated both problems – partially separately but usually in close cooperation. Here, we would like to show some more important results of common works. We will start with water usage network and, then, will proceed to wastewater treatment. However, it is worthwhile noticing at the beginning that developed approaches to both problems are from the category of systematic, optimization based methods.

Water usage network optimization. Due to space limitations we address here a simplified WUN, i.e. the network with wastewater reuse only (wastewater reuse network - WWRN). Thus, the network doesn't contain regeneration processes. Therefore, a reduction of freshwater consumption can be achieved due to appropriate scheme of mixing fresh water stream with contaminated streams leaving the processes. Such combined streams are, then, fed to water using processes. WWRN design problem can be briefly formulated as follows. There are P water using processes. In each process

certain known contaminants are transferred to water. The loads of contaminants are given as well as maximal permissible values of contaminants concentrations at process inlet and outlet. Thus, water-using processes are treated as simple counter current mass exchangers. There are also some freshwater sources with fixed values of contaminants concentrations. The objective is to design WWRN that minimizes certain performance index. Usually freshwater consumption is employed as the goal function, however, we used also more complex index involving structural features. The final result has to provide flow rates of all streams in the network and, also, contaminant concentrations at both inlet and outlet to processes.

As mentioned in the preceding we have applied optimization-based techniques to deal with the task. More precisely, we applied superstructure optimization concept. First, we have developed the superstructure that contains all possible structures. Then, the optimization model was developed. Finally, solution technique was developed and tested. The major difficulty is that superstructure optimization model is nonlinear, and, additionally may contain both discrete and continuous variables – mixed-integer nonlinear programming (MINLP). The problem is difficult to manage with existing, even commercial optimizers. The large-scale tasks are practically unmanageable. To cope with the problem we have investigated two main strategies: using meta-heuristic/stochastic optimization approaches and applying deterministic solvers, sometimes with some problem modification. The main achievements of the cooperation are in the latter. They were presented in many journals and conference papers, e.g. in [1-4] to list a few. Here we limit ourselves to brief characteristic of main developments. We developed in [3] linear programming model for calculating the minimum attainable freshwater usage at targeting stage. The approach is more general than those published to date. After all we managed in developing systematic approach for designing optimal WWRN, see for instance [1, 2]. Nonlinear model has been developed with some valid relaxation that allows robust and efficient solution with existing optimization solvers for medium scale cases. Also, the approach allows accounting for costs of pipelines. More recently the method was proposed for analysis of data under uncertain conditions, e.g. [5]. This increases potential for industrial applications. Finally, we have also developed robust and efficient optimization approach for WUN consisting of processes that are modelled as non-mass transfer operations [4]. Such networks exist in eco-industrial districts and large public houses like hotels.

Wastewater treatment network optimization. In addition to the reduction of wastewater generated in WUN the decrease of cost of water treatment can be achieved by proper design of treatment plant. Application of a distributed wastewater treatment systems is a key mean for reducing cost of treatment stations. A segregation or combination of separate wastewater streams in treatment systems is a crucial mean to reach the aim. The investment cost and treatment plant's operation costs depend on a proper choice of system structure and parameters of wastewater streams treated in various processes. In distributed wastewater treatment, streams are either treated separately or only partially mixed which reduces the flow rate to be processed when compared to centralized wastewater treatment systems. This, in turn, reduces total expenses because they, for most treatment operations, are proportional to the total flow of wastewater. This suggests that the design of effluent treatment systems should segregate the streams for treatment and only combines them if it is appropriate.

We have developed an efficient, robust and designer controlled systematic approach for designing optimal WTN. The designing method is sequential and applies insight-based techniques followed by mathematical programming. First, water pinch analysis and wastewater degradation concept are employed to develop an initial structure. Then, a superstructure is created for WTN. The solution from the first step is the good starting point for nonlinear optimization. Nonlinear programming problem is formulated on the basis of WTN superstructure that is represented by stream split coefficients. We found that even simple direct optimization procedures can be successfully employed. The design approach can be used for synthesis and also for retrofit of wastewater treatment networks. The foundations of the method and results of tests for typical literature examples were presented in [8]. Then, the method has been largely extended to account for more rigorous models of processes. Also, operating and piping costs have been included into

goal function. More rigorous mathematical models of treatment processes were applied at the optimisation stage to take into account a relation between the removal ratio of a treatment process and treatment flow rate and/or contaminant concentration. Also it allowed capturing material losses and gains in a treatment process and, in result, changes of total flow rate in WTN within design procedure. The mathematical models are based on the revised and/or new design procedures of treatment units. The procedures had been re-organized into simulation ones in order to obtain relations for determining removal ratios of contaminants in dependence of wastewater flow rate, contaminant concentrations and also other process and apparatus parameters. Overall goal function is the sum of wastewater treatment cost and piping cost. The piping costs are function of pipe length and wastewater stream flow rate. The design procedure is automated so it can be used for retrofitting WTN of various industrial plants. The applications of the extended and modified approach for various industrial cases have been shown in [6, 7].

Some other common works and summary. The investigations on water network optimization were accompanied by other common works. We have performed several researches on clean chemical industry and ecological aspects of industry in general. The results were published in two journals. Next, we have also analysed tools and techniques for computer aided process engineering. The cooperation embedded also common researches on some aspects of stochastic optimization, particularly Adapting Random Search technique that was found very useful for designing optimal subsystems by researchers of RUT. Next, we have started cooperative investigations on heat integration and heat exchanger network design, the scope where RUT specialised from many years. Finally, it is worth mentioning some common initial works on gas purification - the problem KPI is leading research team.

Summing up one can conclude significant achievements of common cooperation in very important fields of chemical and process engineering. It is also worth noting that the researches concentrated on scopes that are of significance for industry and ecology. We plan to continue the cooperation in these and, also, new problems.

Acknowledgements: The authors of this contribution would like to give sincere thanks to co-workers: L. Bugaeva, O. Kvitka, Y. Beznosik from KPI and G. Poplewski, K. Wałczyk from RUT.

- 1) *Shakhnovsky A.M., Jeżowski J., Kvitka A., Jeżowska A., Statiukha G.* Investigations on optimisation of water networks with the use of mathematical programming // Chemical and Process Engineering.-2004.-No 3/3.-C. 1607-1612.
- 2) *Шахновський А. М., Єжовський Я.М., Статюха Г. О., Квітка О. О.* Проблема оптимальності в задачах синтезу схем промислового водоспоживання. // Наукові вісті НТУУ “КПІ”. – 2004. – №6. – с. 35-41
- 3) *Jeżowski J., Walczyk K., Shakhnovsky A.* Systematic methods for calculating minimum flow rate and cost of water in industrial plants // Chem. Proc. Eng. –2006. –No 27. – C. 1137-1154.
- 4) *Walczyk K., Poplewski G., Jeżowski J., Jeżowska A., Shakhnovsky A.* Optimization of Water Network with Models of Non-Mass Transfer Processes // Chemical and Process Engineering. –2007. –No 28. – C. 515-525.
- 5) *Shakhnovsky A., Kvitka A., Statiukha G., Jeżowski J., Jeżowska A.* On the statistical analysis of data for the water usage systems networks synthesis // Chemical and Process Engineering. –2007. –No 28. – C. 493-503.
- 6) *Statyukha G., Kvitka O., Dzhygyrey I., Jeżowski J.* Optimal Design of Wastewater Treatment Network – Case Study of Synthetic Organic Dye Manufacturing Plant // Chemical and Process Engineering. -2007. –No 28. – C. 505-514.
- 7) *Kvitka O., Dzhygyrey I., Jeżowski J.* Optimal Design of Wastewater Treatment Network for Glass Container Plant // Chemical Engineering Transactions. -2007. –No 12. – C. 327-332.
- 8) *Statyukha G., Kvitka O., Dzhygyrey I., Jeżowski J.* A simple sequential approach for designing industrial wastewater treatment networks // Journal of Cleaner Production. –2008. –No 16. – C. 215-224.

СЕКЦІЯ 4

КОМП'ЮТЕРНА ПІДТРИМКА ВИРОБНИЧИХ ПРОЦЕСІВ (ІНТЕЛЕКТУАЛІЗАЦІЯ, ПРОЕКТУВАННЯ, АВТОМАТИЗАЦІЯ)

SCADA-СИСТЕМА КЕРУВАННЯ СКЛОВАРЕННОЮ ПІЧЧЮ

Бондаренко С.Г., Федоренко С.М.

Національний технічний університет України «КПІ», sgb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

На сучасному етапі розвитку промисловості до багатьох виробництв ставляться високі вимоги по надійності, безпеці, економічності та ефективності. Відомо, що більшість аварій на виробництвах трапляється через помилки операторів та за відсутності сучасних інтегрованих комп'ютерних комплексів, котрі б завадили зробити ці помилки. Тому, диспетчерське керування і збір даних (SCADA - Supervisory Control And Data Acquisition) є основним і у наш час залишається найбільш перспективним методом автоматизованого керування складними динамічними системами.

SCADA-системи дозволяють в реальному часі реалізувати процес збору інформації про об'єкт для її подальшої обробки, аналізу. Необхідність роботи системи в реальному часі зумовлена необхідністю безперервного контролю параметрів процесу, а також видачі всіх необхідних повідомлень і даних на центральний інтерфейс оператора (диспетчера). Апаратний комплекс SCADA - системи має дворівневу структуру. На нижньому рівні знаходяться контролери, лічильники та інші пристрої, а на верхньому – мережа робочих станцій.

На українському ринку представлено багато інструментальних середовищ, які дозволяють реалізовувати диспетчерський контроль технологічних процесів.

Однією з таких систем є середовище ESM 2.1 (Engineering system manager) . Вона приваблює невисокою ціною, надійністю та простотою у використанні.

Система диспетчеризації скловареної печі, була побудована за допомогою інструментального середовища ESM 2.1. Вона являє собою сукупність взаємодіючих модулів. Кожен модуль виконує певну функцію.

При розробці системи диспетчеризації в середовищі ESM 2.1 було:

- детально проаналізовано технологічний процес виробництва, і встановлені параметри, які необхідно відобразити в системі диспетчеризації;
- з'ясовано стан технологічного обладнання, а також підібрані мікропроцесорні засоби для реалізації системи керування;
- для модулів вводу/виводу встановлені параметри підключенного до системи диспетчеризації технологічного обладнання, які представляються в системі у вигляді точок диспетчеризації, визначені точки вводу/виводу;
- за допомогою базового модуля встановлено зв'язок між точками вводу/виводу й точками диспетчеризації;
- за допомогою модуля візуалізації розроблена мнемосхема, що являє собою динамічне схематичне відображення об'єкта диспетчеризації, засобів управління і параметрів регулювання та контролю в реальному часі;
- і на заключному етапі налаштовані модулі архівування, обчислень, SMS, звітів, тривог, а також здійснено підключення модуля протоколування.

Таким чином, була створена система диспетчеризації скловареної 3-х зонної регенеративної ванної печі з поперечним розташуванням пальників. Створена система диспетчеризації дозволяє:

- в режимі реального часу спостерігати за технологічними параметрами процесу скловаріння та змінювати їх в технологічно допустимих межах за допомогою елементів керування;
- стежити за станом технологічного обладнання та відслідковувати виникнення аварійних ситуацій;
- зберігати інформацію про хід технологічного процесу та дії оператора;
- блокувати хибні дії оператора, що підвищує безпеку виробництва;
- графічно відображати зміну параметрів технологічного процесу варіння скла за вказані проміжки часу та інше.

ОПТИМІЗАЦІЯ СХЕМ ВОДООЧИЩЕННЯ ЯК ІНСТРУМЕНТ ПІДВИЩЕННЯ ЕКОНОМІЧНОЇ ЕФЕКТИВНОСТІ ПРИРОДООХОРОННИХ ВИТРАТ ПІДПРИЄМСТВА

Джигирей І.М., Квітка О.О.

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

Раціональне природокористування в ринкових умовах залежить від економічних важелів. Промислове підприємство витрачає на природоохоронні заходи значні кошти. у даній роботі пропонується включити до еколого-економічної оцінки проектів будівництва та реконструкції систем очищення стічних вод аналіз розподілу матеріальних потоків у схемі очисних споруд. Структурна оптимізація схеми водоочищення призводить до зменшення витрат промислового підприємства на природоохоронні заходи за рахунок зниження об'ємів оброблюваних стічних вод, збільшення початкової концентрації забруднюючих речовин і, в свою чергу, підвищення ефективності очисних споруд.

Методика розроблення системи очищення стічних вод промислових підприємств складається з етапів (1) синтезу і (2) оптимізації схеми водоочищення. Перший етап базується на водному пінч-аналізі та термодинамічному підході [1], другий – на структурній оптимізації узагальненої схеми, технологічні зв'язки якої відображаються коефіцієнтами розділення водних потоків [2]. Пінч-аналіз схеми водоочищення є графоаналітичним методом, тому в дослідженні вирішена окрема задача виключення графічної складової з метою алгоритмізації цієї процедури. Для оптимізації узагальненої схеми використовується метод покриття кластерів із адаптацією. Цільова функція є величиною необхідних сукупних експлуатаційних витрат і капітальних вкладень в здійснення природоохоронних заходів, зведених до річного розміру з урахуванням часового фактору. Вона використовується для вибору економічно кращого варіанту розподілу потоків стічних вод у схемі очищення [3]. Капітальні та експлуатаційні витрати відображаються за допомогою вартісних функцій, які залежать від об'ємів оброблюваних стічних вод і концентрації забруднюючих речовин у них. Синтез оптимальної схеми проводиться за умови, що кінцева концентрація забруднюючих речовин не буде перевищувати встановлені допустимі норми. Передбачена можливість введення додаткових обмежень, зокрема значення верхньої або нижньої межі концентрації забруднюючої речовини на вході в процес очищення, обов'язкове виключення або включення певного технологічного зв'язку тощо. Ефективність очисних споруд у процедурі розроблення схеми очищення з оптимальним розподілом потоків стічних вод пропонується відображати на основі математичних моделей процесів очищення [4]. Моделі дозволяють врахувати залежність ефективності окремого процесу очищення щодо певної забруднюючої речовини від таких параметрів як об'єм водного потоку і концентрація забруднюючої речовини на вході в очисну споруду. Застосування математичних моделей дозволяє врахувати фактори специфічні для окремих методів очищення.

Аналіз варіантів схем очищення стічних вод промислових підприємств показує зменшення об'ємів стічних вод в очисних спорудах у середньому на 20% в порівнянні зі схемами до оптимізації, що складає у середньому до 10% зменшення очікуваних сумарних річних зведених витрат промислового підприємства на природоохоронні заходи.

- 1) Kuo W.J., Smith R. Effluent treatment system design. - Chemical Engineering Science. 1997, V.52, No.23, pp. 4273-4290.
- 2) Квітка А.А., Джигирей И.Н. Проектирование систем канализирования сточных вод промышленных предприятий: Комбинированный подход // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 2006. – № 2. – С. 72–77.
- 3) Statyukha G.O., Kvitka O.O., Dzhigirey I.M., Jezowski J. A simple sequential approach for designing industrial wastewater treatment networks // Journal of Cleaner Production. – 2006. – PRES Special Issue.
- 4) Статюха Г.А., Квітка А.А., Бойко Т.В., Джигирей И.Н. Использование математических моделей процессов очистки для проектирования распределенных систем очистки сточных вод // Химия и технология воды. – 2006. – № 6.– т. 28. – С. 517–530.

ЗАВАДОСТІЙКЕ КОДУВАННЯ В СУЧАСНИХ SCADA-СИСТЕМАХ

Жураковський Я.Ю., Жураковська О.С., Величко Д.С.

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

У сучасному виробництві і технологічних процесах часто потрібно з'єднання приладів і систем, які відокремлені великими відстанями. Вони можуть розташуватися на відстанях від декількох метрів до тисяч кілометрів. Телеметрія використовується, щоб послати команди, програми і отримувати інформацію від віддалених місць. Програмно-апаратні комплекси збору даних та керування, так звані SCADA-системи [3] базуються на сумісному використанні телеметрії та збору даних. SCADA-система виконує збір інформації, переносячи її до центральної бази даних, здійснюючи необхідну обробку та аналіз і відображає цю інформацію на дисплеї оператора. Необхідні керуючі дії передаються на об'єкт керування. Таким чином сучасні SCADA-системи містять значну кількість джерел та одержувачів інформації, пов'язаних між собою каналами зв'язку.

Показники ефективності таких систем багато у чому визначаються достовірністю передачі, зберігання та обробки інформації, яка функціонує в системі.

Однією з основних характеристик технічних систем з передачею та обробкою інформації є їх завадостійкість, тобто властивість системи протидіяти впливу сторонніх збурень (зavad). Іншою важливою характеристикою системи є її надійність, тобто безвідмовної роботи системи за тої чи іншої інтенсивності відмов та збоїв у роботі елементів системи.

Підвищення завадостійкості передачі інформації в SCADA-системах і, як наслідок її достовірності, може виконуватися як за рахунок удосконалення каналу передачі інформації (збільшення потужності сигналу, вибір оптимальної форми сигналу, удосконалення приймальних пристрій з метою зменшення внутрішніх шумів і збільшенню відношення сигнал/завада тощо), так і за рахунок використання завадостійкого кодування [3].

Традиційно, розробниками та авторами публікацій на тему передачі даних у якості завадостійких використовуються двійкові коригуючі коди [3]. Це пояснюється простотою операцій у двійковій системі числення, які виконуються мікропроцесорними пристроями при обробці, накопиченні та зберіганні інформації у SCADA-системах та мережах.

У той же час, використання комбінованих видів модуляції при передачі даних, таких як амплітудна відносна фазова модуляція, квадратурна амплітудна модуляція тощо [1,2] дозволяє, не ускладнюючи значно технічну реалізацію комунікаційної системи (КС), набагато підвищити швидкість передачі даних у порівнянні з двійковими системами. Логічно у таких КС, для підвищення достовірності передачі повідомень та ефективності функціонування КС по каналах з завадами, використання завадостійких кодів з алфавітом $q > 2$, які, подібно до двійкових, дозволяють виявляти та виправляти помилки при передачі, але вже у межах недвійкової символіки. Такі коди одержали назву недвійкових [2]. Не дивлячись на те, що деякі надмірні недвійкові коди, такі як узагальнений код Хеммінга, код Ріда-Соломона та інші, одержали досить широке застосування в КС [2], питання застосування недвійкового завадостійкого кодування у КС SCADA-систем залишаються досить актуальними.

Слід зазначити, що кратність помилок, що виправляються недвійковими кодами вища у порівнянні з двійковими, через те що виправлення одного елемента q -коду відповідає виправленню $\log_2 q$ двійкових одиниць.

- 1) Игнатов В.А. Теория информации и передачи сигналов. - М.: Радио и связь. - 280 с.
- 2) Цымбал В.П. Теория информации и кодирование. - К.: Вища школа, 1992. - 263 с.
- 3) Park J., Mackay S., Wright E. Practical Data Communications for Instrumentation and Control. -Oxford: Newnes, 2003.- 390p.

РОЗРОБКА СТРАТЕГІЙ ДЕЗАКТИВАЦІЇ КАТАЛІЗATORA В УМОВАХ ПРОМИСЛОВОЇ КОНВЕРСІЇ МЕТАНУ З МЕТОЮ ОТРИМАННЯ ОКИСУ ВУГЛЕЦЮ

Жученко А.І., Колпаков В.В., Рязанцев М.І.* Жученко О.А

Національний технічний університет України “КПІ”, Kolpakov@ntu-kpi.kiev.ua

*Северодонецький ЗАТ “Азот”

У промислових умовах гетерогенно-кatalитичні реакції найчастіше здійснюються в реакторах з нерухомим шаром каталізатора. Істотним недоліком апаратів даного типу є дезактивація використованого каталізатора, що приводить при сталості робочих умов проведення технологічного процесу до зниження ступеня перетворення реагентів на виході з реактора. Об'єктом досліджень у роботі, що представляється, є реакційна піч риформінгу конверсії метану у виробництві оцтової кислоти. Головною відзначкою розглянутого технологічного процесу є необхідність підтримки константи рівноваги процесу у межах максимального виходу окису вуглецю. Дослідження наведені у доповіді було проведено з метою оцінки можливості оптимізації виробництва за критерієм мінімізації собівартості кінцевого продукту за стратегіями температурного та концентраційного навантаження реакційної зони.

Оскільки режимні змінні (температура, парціальний тиск реагентів і продуктів, швидкості подачі потоків навантаження, час перебування та інш.) впливають на швидкість протікання основних реакцій і реакцій дезактивації, то вони можуть бути використані в якості керуючих змінних, що компенсують зниження активності каталізатора і забезпечують підтримку на виході постійних значень конверсії [1,2]. При цьому стадія хімічного перетворення може здійснюватися безупинно.

Найбільш розповсюдженою і найбільш дослідженою стратегією керування каталітичними процесами і дезактивуючими каталізаторами є зміна в часі температури процесу [3], орієнтована на підтримку постійної конверсії реагентів. Значно менше інформації мається в літературі щодо зміни навантаження, що забезпечує при незмінному температурному режимі постійний ступінь перетворення на виході з каталітичного шару [4].

Під час досліджень аналізувалася процедура визначення стратегії зміни температури і швидкості подачі навантаження, при яких забезпечується постійна конверсія на виході з печі риформінгу з нерухомим шаром дезактивуючогося каталізатора. Висновки досліджень базуються на результатах пасивного експерименту з використанням даних накопичених в умовах зміни навантаження конвертора метану і дозволяють визначати для заданої конверсії метану, терміни служби каталізатора і продуктивність процесу. За результатами обробки експериментальних даних зроблені висновки про можливість послідовної комбінації обох стратегій. З метою формування висновків розглядалась наступна задача оптимізації – визначити порядок проходження і тривалість обох стратегій, що приводять до поліпшення характеристик процесу – збільшенню термінів служби каталізатора і виходу продукту. Треба відзначити що на обидві керуючі змінні накладені обмеження зверху і знизу. Початкова лінійна швидкість подачі навантаження в реактор може варіюватися від максимального значення (вище цього значення починається псевдоожиження каталізатора) до мінімального значення (нижче цієї температури процес починає лімітуватися дифузією в прикордонному шарі навколо часток каталізатора). Термін служби каталізатора і продуктивність були об'єднані однією змінною, названою швидкістю виробництва $V_{\text{вир}}$, що визначається відношенням сумарної продуктивності G до загального часу реалізації обох стратегій $\tau_{\text{конверсії}} = \tau_T + \tau_G$.

По результатам досліджень зроблено висновок що залежності змінної $V_{\text{вир}}$ від початкової температури носять або екстремальний характер, проходячи через точку максимуму, більш чітко виражені при менших значеннях чергування стратегій керування та можуть зростаюти при збільшенні початкової температури.

З побудованих залежностей зроблено висновок, що реалізація спочатку температурного керування, а потім керування по швидкостях навантаження дозволяє

проводити процес при більш високій швидкості утворення продукту реакції. За результатами проведених робіт показано, що послідовність реалізації в практичних умовах стратегій відповідного зміни в часі чи температури швидкості подачі навантаження, орієнтованих на підтримку постійної конверсії на виході з реактора, дозволяє інтенсифікувати процес, а саме забезпечити більш високий термін служби катализатора і продуктивність (у порівнянні з варіантом здійснення тільки однієї зі стратегій.) Якщо керування ведеться спочатку по швидкості подачі навантаження, а потім по температурі, то це приводить до подовження терміну служби катализатора, тобто до більшої тривалості робочого циклу. Такий результат варто мати на увазі, особливо, якщо вартість регенерації катализатора висока у порівнянні з ціною самого продукту.

Якщо основна увага при рішенні задачі оптимізації приділена збільшенню продуктивності, то керування повинне вестися спочатку по температурі, а потім по швидкості подачі навантаження. Таке сполучення обох стратегій керування дає більш високу швидкість одержання продукту, оскільки активність катализатора протягом циклу падає менше, ніж протягом циклу. В обох випадках наприкінці роботи активність не залежить від порядку чергування керуючих стратегій.

Можна відзначити, що зміна в часі температури процесу і послідовне варіювання швидкості подачі навантаження дозволяє, у цілому, забезпечити високу продуктивність і високу середню швидкість одержання продуктів протягом усього терміну служби катализатора.

У висновку слід зазначити, що для того, щоб зробити узагальнені висновки, що стосуються вибору оптимальної стратегії керування, необхідно провести аналіз з урахуванням економічних показників процесу, включаючи усі вартості окремих етапів і складових.

- 1) Control of temperature peaks in adiabatic fixed-bed tubular reactor. *Giger G.K., Matharasan R., Coughanover D.R.* Ind. And Eng. Chem. Fundam., 1981, 19, №4. - 389-396.
- 2) Examination of a model for asciilating heterogeneously catlyzed reactions. *Lynch D.T., Wanke S.E.* Con. J. Chem. Eng., 1981, 59, №6. - 766-770.
- 3) Кваско М.З., Жученко А.І., Колпаков В.В., Рязанцев М.І. Система керування температурними та концентраційними хвилями уздовж реакційної зони каталітичних трубчатих реакторів в умовах зміни навантаження за сировино та несталого постачання енергоносіїв. // Матеріали Шостої Промислової міжнародної науково-технічної конференції "Ефективність реалізації наукового, ресурсного і промислового потенціалу в сучасних умовах". Славсько, 2006. - с 357-358.
- 4) Коваленко В.С., Тривайло М.С., Колпаков В.В., Анхель Р. Гонзалес (CU), Анхель Ф. Фалкон (CU), Анхель М/ Дельфрадес (CU) Пристрій для піролізу вуглеводнів. Деклараційний патент України на корисну модель U200604059.// Бюл. №9, 2006.

КЕРУВАННЯ ПРОЦЕСОМ ГРАФІТАЦІЇ В ПЕЧАХ ПОСТІЙНОГО СТРУМУ

Коржик М. В., Жученко А. І.

Національний технічний університет України «КПІ», korzhyk@rst.kiev.ua

Графітація вуглецевих матеріалів в електричних печах постійного струму є надзвичайно енергоємним процесом. Відомо [1], що непродуктивні витрати теплоти тим менші, чим швидше відбувається розігрів керна печі графітації, при цьому швидкість розігріву обмежується термічною міцністю виробів.

В динамічному відношенні піч графітації є складним нестационарним електро-термічним об'єктом з просторовим розподілом параметрів, які мають істотну залежність від поточної температури. Нестационарне температурне поле спричиняє напружений стан заготовок, що є головним чинником руйнування виробів під час кампанії графітації. На сучасному виробництві графітацію виробів великого діаметра здійснюють з деяким обмеженням швидкості розігріву керна печі для гарантованого запобігання утворенню

дефектів, а визначення моменту припинення кампанії графітації здійснюється опосередковано, за питомими витратами електроенергії, що встановлені для кожного типу виробів на основі тривалої практики. Зазначені обставини часто призводять до значних перевитрат електроенергії.

Оптимізація енерговитрат на кампанію графітації потребує створення алгоритму керування розігрівом виробів. При реалізації алгоритму за критерій керування обрано границю міцності матеріалу виробів на розтягнення, яку легко визначити в лабораторних умовах для кожної партії заготовок:

$$\left\{ s_r(t) = \sigma_r^{tens} - \xi \right\} \text{ or } \left\{ s_z(t) = \sigma_z^{tens} - \xi \right\},$$

де σ_z^{tens} , σ_r^{tens} - границі міцності на розтягнення матеріалу виробів в осьовому та радіальному напрямках; s_r , s_z – відповідно максимальні абсолютні радіальні та осьові напруження у виробах на кожному кроці навантаження; ξ – задана точність визначення напружень у виробах.

Для оцінки термопружного стану виробів розроблена модель температурного поля печі графітації, що має адаптивну процедуру визначення теплофізичних параметрів матеріалів печі для забезпечення необхідної точність результату в умовах неповної інформації про об'єкт керування. На основі розрахункового температурного поля визначається поле механічних напружень виробів та у відповідності з алгоритмом керування формується оптимальний керуючий вплив на кожному кроці навантаження печі.

Для визначення моменту припинення кампанії графітації в алгоритмі керування застосовано розрахунковий метод [2] оцінювання ступеня графітації готової продукції, що використовує інформацію про температурне поле печі.

Впровадження системи керування процесом графітації в печах постійного струму на основі вказаного алгоритму дозволить мінімізувати витрати електроенергії при забезпеченні високої якості кінцевої продукції та істотно скоротити тривалість кожної кампанії, що забезпечить підвищення продуктивності технологічного обладнання переділу графітації.

- 1) Соседов В.П., Чалых Е.Ф. Графитация углеродистых материалов. – М.: Металлургия, 1987. – 176 с.
- 2) Спосіб графітації / М.В.Коржик, І.Л.Шилович, А.І.Жученко та ін. – Патент України на винахід 66270A, кл. МПК⁷ C01B 31/04, H05B 3/60. – Опубл. 15.04.2004. – Бюл. № 4.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СИСТЕМ ЦИФРОВОГО КЕРУВАННЯ АНАЛОГОВИМИ ОБ'ЄКТАМИ

Кубрак А.І., Аверіна Т.В., Ханіцький М.А.

Національний технічний університет України «КПІ», la_21@ukr.net

Алгоритми розрахунку неперервних (аналогових) систем автоматичного керування зараз добре відпрацьовані. Вони достатньо наочні і при використанні комп'ютерів дозволяють досліджувати системи будь-якого порядку, у тому числі і такі, які мають елементи з розподіленими параметрами. При комп'ютерному моделюванні систем безпосереднього цифрового регулювання з аналоговими об'єктами (що, зокрема, характерно для систем автоматизації у хімічній та харчовій промисловості, в енергетиці) математичну модель аналогових елементів приводять до дискретної форми. Цей процес є досить трудомістким, що змушує дослідника загrubляти модель. Подальші розрахунки цифрової системи є настільки формалізованими, що дослідник-початківець виявляється нездатним критично оцінювати отримувані результати. Його досвід, набутий при дослідженні аналогових систем, не спрацьовує. У той же час можливості сучасних комп'ютерів дозволяють без проблем моделювати як частотні, так і перехідні характеристики гібридної

(аналоговий об'єкт – цифровий регулятор) системи з використанням аналогових моделей (у тому числі і для цифрового регулятора).

Виводяться формули для звичайних (аналогових) передатних функцій модулятора, цифрового регулятора, демодулятора (фіксатора нульового порядку), а також формули для розрахунку відповідних частотних характеристик. Разом з відповідними передатними функціями об'єкта (для конкретності розглядається об'єкт з дробово-раціональною передатною функцією з запізнюванням) отримуємо аналогову модель системи, яку досліджуємо класичними методами.

Розроблено програму на Турбо Паскалі, що дозволяє оцінювати стійкість системи за критерієм Найквіста, виконувати розрахунок настроїки на заданий показник коливності. Усе це - в графічному режимі з демонстрацією годографів, амплітудно-фазових характеристик розімкненої системи при будь-яких періодах квантування, з вибором будь-якого з п'яти типових законів регулювання (П, І, ПД, ПІ, ПІД) при довільних настройках регулятора.

При формуванні графіків реакції системи на будь-який наперед заданий вхідний сигнал передбачено можливість вибирати завідомо малий крок числового інтегрування, що дає можливість досліднику контролювати не лише значення вихідної величини у момент квантування, а і в проміжках між ними. Можна формувати серії графіків для співставлення, оцінювання впливу періоду квантування, порівняння з аналоговою системою, оцінювання чутливості системи до варіювання настроєчних параметрів.

Формування окремого графіка, годографа займає на комп'ютері частки секунди. Програма має зручний інтерфейс, що дозволяє за лічені секунди ввести усі необхідні дані та виконати необхідні розрахунки.

Формули та розроблене програмне забезпечення утворюють базу для формування програмних продуктів з більш широкими можливостями, зокрема, для врахування нелінійних ефектів при дослідженні систем, що мають елементи з розподіленими параметрами тощо.

ВИМІРЮВАННЯ ГРАНУЛОМЕТРИЧНОГО СКЛАДУ ПСЕВДОЗРІДЖЕНОГО ШАРУ НЕПРЯМIM СПОСОБОМ

Ладієва Л. Р., Снігур О. В.

Національний технічний університет України «КПІ», ladieva_lr@users.ntu-kpi.kiev.ua

В даний час проблемам підвищення ефективності технологічних процесів, устаткування і якості гранулювання і зневоднення приділяється велика увага [1]. Стосовногалузей виробництва, пов'язаних з термообробкою виробів, ці вимоги повинні знайти своє відображення в скороченні тривалості технологічних процесів, зниженні питомої витрати енергії, підвищенні якості готових виробів і продуктивності праці, поліпшенні санітарногігієнічних умов роботи.

Одним із способів підвищення ефективності роботи існуючого устаткування є введення систем автоматичного управління процесом гранулоутворення в апарат киплячого шару з безпосереднім контролем якості вихідного продукту.

При детальному дослідженні процесу гранулювання була виявлена залежність частоти пульсацій шару зі зростанням діаметру гранул. Розроблений новий метод вимірювання, який дозволяє визначати діаметр гранул безпосередньо в процесі роботи гранулятора псевдозрідженого шару. Основою методу являється розроблена авторами оптична система стеження. Система складається з випромінювача світлового сигналу і приймача. Випромінювачем є джерело направленого світла, з довжиною хвилі 0,75 мкм. Приймач – матриця фотодіодів. Випромінювач і приймач були обрані таким чином щоб спектральні характеристики перекривалися мінімум на 85% [2]. Данна система дозволяє працювати як з прямим так і відбитим сигналом, завдяки високій чувствительності оптичних датчиків. Фотодіодна матриця має достатню довжину і висоту щоб охопити межу киплячого шару.

Сигнал, що випромінюється світлодіодом має форму синусоїди з частотою, яка в делять разів перевищує частоту пульсацій шару. При роботі гранулятора, шар гранул пульсує з певною частотою, із збільшенням діаметру гранул частота падає. Гранули потрапляючи на вісь світлового випромінювача привносять перешкоди в сигнал. Визначення діаметру гранул полягало в тому що кожен певний проміжок часу визначалася власна частота пульсацій шару і зіставлялася з певним діаметром, оскільки тільки гранули саме цього діаметра можуть створити таку частоту пульсацій шару.

На основі данного методу вимірювання діаметра гранул була впроваджена система керування процесом гранулювання гуміново-мінеральних добрив на пілотній установці кафедри МАХНВ ІХФ НТУУ «КПІ». Впровадження системи керування процесом гранулоутворення в грануляторах псевдозрідженого шару на основі вказаного алгоритму дозволила мінімізувати витрати електроенергії при забезпеченні високої якості кінцевої продукції та скоротила тривалість кожного циклу грануляції, що забезпечить підвищення продуктивності технологічного обладнання.

- 1) Подмогильный Н.В., Корниенко Я.Н., Сильвестров А.Н. Управление качеством гранулирования минеральных удобрений. – К.: «Такі справи». 1998.–200 с. – (Промышленность села) – ISBN 966-7208-04-4
- 2) Оптоэлектронные устройства в радиолюбительской практике: Справ. пособие/ Ю.А. Быстров, А.П. Гапунов, Г.М. Персианов. – М.: Радио и связь, 1995.160 с.: ил. – (Массовая радиобиблиотека; Вып.1209).

ПРОБЛЕМИ РЕПЛІКАЦІЇ БАЗ ДАНИХ

Медведєва В.М., Німчук І.Б.

Національний технічний університет України «КПІ», romyald@voliacable.com

Поява обчислювальних систем з базами даних привела до зміни колишньої парадигми обробки даних, у якій для кожного додатка визначалися й підтримувалися власні набори даних, на нову, у якій усі дані визначалися й підтримувалися централізовано. Технологія розподілених баз даних [1], що одержала в наш час широке поширення, сприяє зворотному переходу від централізованої обробки даних до децентралізованої. Робота територіально віддалених філіалів, різноманітних служб доставки, підрозділів по обслуговуванню клієнтів і т.д. неможлива без наявності власних баз даних, інформація в яких постійно змінюється, що приводить до необхідності синхронізації даних між різними підрозділами організації.

Розуміючи актуальність даної проблеми, багато виробників реляційних СУБД пропонують в складі своїх продуктів готові рішення для реплікації даних. Але в повсякденній практиці досить часто виникає необхідність побудови гетерогенних рішень, тобто використання в рамках корпоративної інформаційної системи СУБД різних типів. Тому наявність механізмів синхронізації даних між різними частинами системи стало насущною необхідністю. Досі не знайдено універсального алгоритму, що забезпечують повну автоматизацію синхронізації даних без участі кваліфікованого адміністратора.

Для розробки сучасних корпоративних додатків необхідне рішення, яке б дозволило об'єднати в єдине інформаційне середовище і сервери масштабу підприємства, і робочі станції, і ноутбуки співробітників, і навіть кишеневі комп'ютери. При цьому необхідно, щоб кожний співробітник отримував тільки ту інформацію, що необхідна тільки йому, а також міг обмінюватись інформацією, знаходячись поза офісом. І при цьому система має бути надійною і виставляти мінімальні вимоги до адміністрування.

Розроблено програмне забезпечення по синхронізації баз даних з різних СУБД. В класичній праці "Міфічний людино-місяць, або як створюються програмні системи" Фредерік Брукс писав: "Тільки коли пишеш, стають видимі пропуски і виступають неузгодженості. В процесі написання виникає необхідність прийняття сотень міні-рішень, і їх наявність відрізняє чітку і ясну картину від розплівчатої ". При розробці продукту виявились приховані проблеми та вимоги до такого типу програмного забезпечення.

Кожний вузол розподіленої системи в розробленому додатку розглядається як філіал, який має в своєму розпорядженні набір баз даних для синхронізації. Для збереження метаданих та налаштувань програми створена службова база кожного філіалу. В ній зберігається така інформація як структура філіалів, властивості кожного філіалу, налаштування підключення до баз синхронізації. Екземпляр додатка підключається до цієї метабази та управляє процесом синхронізації філіалу.

Підготовку до процесу реплікації проводиться в декілька етапів. Спершу додаток вимагає підключення до існуючої службової бази реплікатора або як варіант пропонує підготувати нову службову базу. Центральний філіал інсталюється простим створенням службової бази додатку та підготовкою його баз до синхронізації, тобто створити набір тригерів, змінити певним чином таблиці або інші об'єкти бази. Другорядні філіали створюються із спеціального файлу, що підготовлений в батьківському вузлі та містить копії його баз даних. Таким чином розширяється ієрархічна філіальна структура реплікатора (рис. 1).

Механізм збору змін в базі даних реалізований через спеціальні функції-тригери. Вони відслідковують операції вставки, зміни та видалення записів та записують інформацію в спеціальне сховище даних, на даний момент це спеціальні таблиці в самій базі. Єдина проблема такого підходу — це неможливість відловлення виникнення виключної ситуації в самому тригері реплікатора в СУБД MSSQL 2000. Звичайно, виняткова ситуація може виникнути, але вона в жодному разі не має бути причиною відхилення транзакції, що викликала зміни даних. Як альтернатива збору змін через тригери розглядається варіант аналізу журналу транзакцій бази даних, недоліком якого є залежність від його налаштувань адміністраторами. Кожен із способів збору змін в базі даних накладає певні обмеження на бази, адже процес реплікації є нетривіальною задачею.

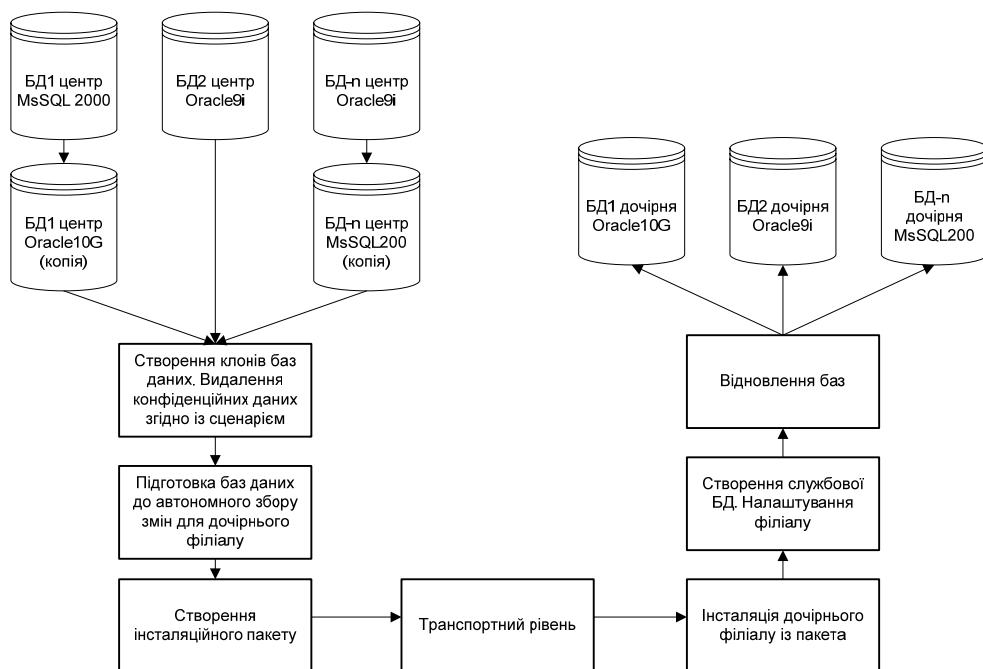


Рис. 1. Процес створення дочірнього філіалу

Необхідно відмітити можливість в розробленому ПЗ створення сценаріїв, правил, згідно з якими обмежуються дані для синхронізації. Правилом реплікації є умова, що визначає допустиму множину даних в таблиці. Набір правил визначають сценарій реплікації. Таким чином, центральний філіал може автоматично обмежити зміни, що попадуть до регіонального філіалу або навпаки. В процесі роботи можна створювати нові і змінювати існуючі правила реплікації, підключати нові таблиці і розширювати структуру філіалів для обміну. Більшість виробників аналогічного програмного забезпечення частково підтримують

таку можливість, тобто після змін правил вимагають побудови філіальної структури наново, що неможливе в працючій корпоративній мережі.

Об'єми інформації, що задовольняє вимоги бізнес-задач, досить швидко збільшуються - до сотень тисяч записів. Те ж саме загрожує базам даних Інтернет ресурсів, якщо це, наприклад, інтернет-магазин або інтернет-каталог. При щоденному процесі реплікації в них необхідно виконувати мільйони запитів. А якщо реплікація між базами даних відбувається через Internet, вона буде виконуватись так повільно, що втратить будь-який смисл. Постає проблема швидкості. В даному додатку реалізована так звана відкладена реплікація. Тобто зміни на одному вузлі розподіленої системи не переносяться відразу на інший. Обмін даними про зміни відбувається за допомогою пакетів. Пакет зміни це є по суті XML документ, що містить інформацію про філіал відправник, одержувач, інформацію про базу, з якої збиралися зміни, характеристики змін, час збору змін і т.д.. Перед відсланням пакет архівується алгоритмом ZIP та передається заданим каналом зв'язку. Потрібно зазначити, що стискання даних виявилося вельми раціональним рішенням. Це дозволило зменшити об'єми даних, що транспортуються, від 35 до 55 відсотків. Каналами обміну даних можуть служити електронна пошта, файловий обмін (використання зовнішніх носіїв, такі як дискети, оптичні диски, flash-носії), FTP, а також прямий обмін через TCP/IP протокол.

Підтримка декількох видів СУБД створює додаткові складнощі в розробці. Різниця в них полягає у відмінності діалектів мови SQL [2], своєрідності в реалізації алгоритму збору інформації про зміни в даних, типах даних. Кожен вид має свої характерні риси в об'єктній моделі бази даних. Процес реплікації в розробленому додатку є незалежним від типу СУБД. Пакет синхронізації несе в собі таку інформацію про кожну зміну: назва таблиці, тип зміни, перелік колонок та значень, що є сереалізованими .Net об'єктами. Збір та застосування змін на кожній базі виконується специфічними для кожного типу СУБД об'єктами, що мають спільний інтерфейс. Таким чином, наприклад, зміни бази MSSQL 2000 переносяться на базу в ORACLE8 (рис. 2). Для підтримання інших типів баз даних необхідно реалізувати обмежену кількість інтерфейсів. Так звана plug-in архітектура додатку дозволяє без перекомпіляції розширяти можливості програмного комплексу простим копіюванням файлів та перезапуском додатка.

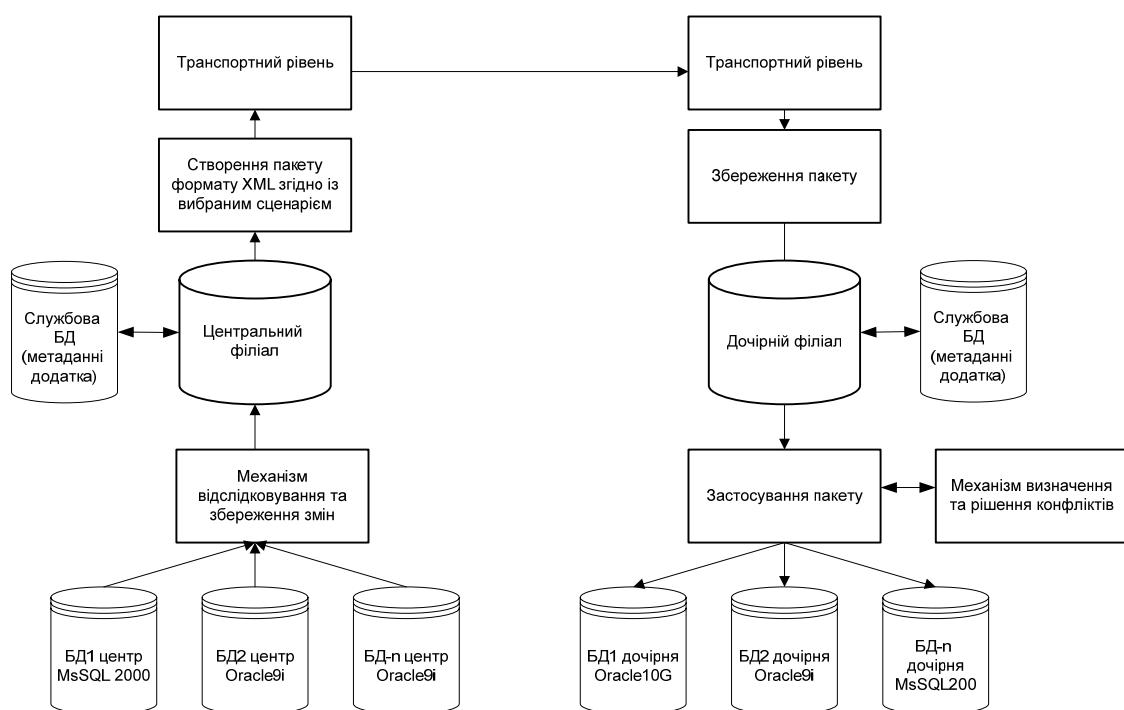


Рис. 2. Механізм синхронізації баз різних типів СУБД

Транспортне питання тісно пов'язане із питанням безпеки. Важливість шифрування пакетів даних при передачі та відновлення процесу транспорту після збоїв важко переоцінити в сучасному інформаційному світі. Як опція, перед архівацією пакет зашифровується асиметричним RSA алгоритмом. Зашифровується пакет за допомогою відкритого ключа філіалу-одержувача та підписується закритим ключем філіала-відправника. На стороні одержувача перевіряється підпис та розшифровується пакет. Додаток перед відсиланням та після одержанням пакету зберігає його в службову базу реплікатора. Після отримання пакету відправнику опціонально відсилається особливий вид пакету, що підтверджує отримання змін синхронізації. У випадку збоїв при передачі пакету передбачена можливість повторного відсилання пакету.

Під час роботи в розподіленій системі із великими об'ємами даних неможливо уникнути виникнення конфліктних ситуацій, які пов'язані із порушенням логічної цілісності даних або бізнес логіки корпоративної системи. Програмний додаток дозволяє правильно розпізнавати такі ситуації та має варіанти їх рішення по замовчуванню. Для підтримки різноманітних бізнес-правил, специфічних для кожної системи, додаток підтримує можливість поповнення бази алгоритмів знаходження та рішення конфліктів реплікації.

Проблема часових поясів виникає, коли дві бази даних працюють в різних часових поясах, а відповідно порівняння часу в полях TIMESTAMP не дозволяє визначити, який запис змінювався раніше, а який - пізніше. Проблема тут лише в тому, що можливість розміщення серверів баз даних в різних часових поясах часто опускається із виду. В даному додатку така проблема легко вирішується. До властивостей філіалу додано додаткове поле часовий пояс, маючи на увазі обмеження, що всі філіальні бази знаходяться в одному поясі. При аналізі конфлікту для баз, що не підтримують UTC формат часу використовується вказаний часовий пояс філіалу.

Розробка програмних додатків для синхронізації не може бути прив'язана до якоєї конкретної системи в підприємстві. Можливість застосування різноманітних бізнес-правил через запуск додаткових скриптів на різних етапах проведення реплікації - життєво необхідна для підтримки логічної цілісності даних в базі. Перед підготовкою копій баз даних для дочірніх філіалів можна додатково вказати xml-файл певної структури, що містить SQL скрипти для приведення бази до корпоративних вимог, наприклад перекомпіляція тригерів, надання прав на об'єкти бази і т.д.. Цей файл буде використаний на стороні філіалу-отримувача після інсталяції клонів баз із філіалу-відправника.

Попри всю складність програмного комплексу, користування ним має бути максимально простим і зручним. Будь-яке налаштування системи має бути під владним мало ознайомленим із корпоративними особливостями адміністраторам системи в регіональних філіалах. Створення мережі філіалів, налаштування правил реплікації, робота із пакетами синхронізації на рівні інтерфейсу користувача об'єднана в набір інтуїтивно зрозумілих візардів. Дружній інтерфейс користувача, у поєднанні із детальною можливістю налаштування, роблять проект легким та гнучким у використанні при інтеграції із різноманітними системами.

Враховуючи актуальність синхронізації даних і попит на ринку можна зробити висновок, що даний додаток рекомендований для застосування на малих та середніх підприємствах, що використовують розподілену обробку даних.

- 1) Цегелик Г.Г. Системи розподілених баз даних. – Львів: Світ, 1990. – 168 с.
- 2) Дейт К.Дж. Введення в системи баз даних, 8-е видання: Пер. з англ. – М.: Видавничий дім «Вільямс», 2005. –1328 с.

АВТОМАТИЗАЦІЯ ПРОЕКТУВАННЯ УСТАНОВОК ПОМ'ЯКШЕННЯ ВОДИ МАЛОЇ ПРОДУКТИВНОСТІ

Мітченко Т.Є., Квітка О.О., Козлов П.В., Галиш М.Ф.

Національний технічний університет України «КПІ», ecos@ln.ua, alkvi@ukr.net

Розвиток сучасних технологій водопідготовки забезпечив появу локальних водопідготовчих установок малої та середньої продуктивності (від 0,1 до 10 м³/год), потреби в яких стрімко зростають. Це обумовлено сучасними вимогами до якості питної та технологічної води з одного боку, та суттєвим погіршенням якості поверхневих і підземних вод з іншого. В зв'язку з досить великою жорсткістю природних вод в Україні, однією з головних задач водопідготовки є пом'якшення води.

При експлуатації локальних систем пом'якшення води методом Na-катіонування для енергетичних та водогрійних установок малої та середньої продуктивності, а також для води побутового призначення, які традиційно використовують схему з прямотічною регенерацією, виникають серйозні екологічні проблеми, що викликані утворенням великої кількості високомінералізованих рідких відходів – розчину NaCl. На промислових високо-продуктивних установках Na-катіонування води для зниження експлуатаційних витрат та кількості відходів використовується протитічний режим регенерації, зокрема найбільш ефективна з існуючих – технологія UPCORE, розроблена компанією Dow Chemical [1]. Однак, для установок Na-катіонування малої та середньої продуктивності цей прийом вважається малоекективним [2].

В ході попередніх дослідів нами встановлено ряд факторів, що позитивно впливають на економічні та екологічні показники процесу глибокого пом'якшення води на установках малої та середньої продуктивності [3]. Це в першу чергу – тип іонообмінного матеріалу та режим регенерації. Так в результаті чисельних експериментів показано, що найкращими кінетичними та ємносними властивостями з широкого ряду досліджених сильнокислотних катіонітів володіє Dowex Marathon C [1]. Саме використання цього катіоніту поряд зі зміною режиму регенерації з прямотічного на протитічний дозволяє вирішити проблему одностадійного пом'якшення води до концентрації меншу за 0,02 мг-екв/л, тобто до рівня вимог, що висуваються до води для живлення парових та водогрійних котлів, з одночасним суттєвим зниженням експлуатаційних та капітальних витрат і екологічних збитків.

Досягнення найкращих показників процесу пом'якшення води виконується шляхом варіювання ряду параметрів, а саме швидкості пропускання очищуваної води через шар сорбенту, висоти цього шару, розходу NaCl на регенерацію, жорсткості регенераційного розчину та інших. Вибір оптимальних умов реалізації процесу здійснюється на стадії проектування установок пом'якшення води. Дано робота саме направлена на вирішення задачі автоматизації проектування установок пом'якшення води малої та середньої продуктивності.

Для автоматизації процесу проектування типових установок пом'якшення води малої продуктивності було розроблене програмне забезпечення (ПЗ), що моделює і розраховує технологічні параметри, та пропонує необхідне апаратурне оздоблення процесу. ПЗ надає користувачу можливість одночасно працювати з декількома проектами, порівнювати їх результати. До складу ПЗ входять бази даних використованого обладнання (іонообмінних фільтрів, ємкостей для регенераційного розчину, керуючих клапанів), технологічних та економічних характеристик. Ці бази даних проектувальник при необхідності може відредактувати за допомогою вікна налаштування. Роботу користувача на всьому етапі розробки проекту у режимі діалогу супроводжує «майстер». Після розрахунку технологічних параметрів процесу з бази даних обирається кілька варіантів необхідного устаткування, для порівняння яких розраховується капітальні та експлуатаційні витрати (рис. 1).

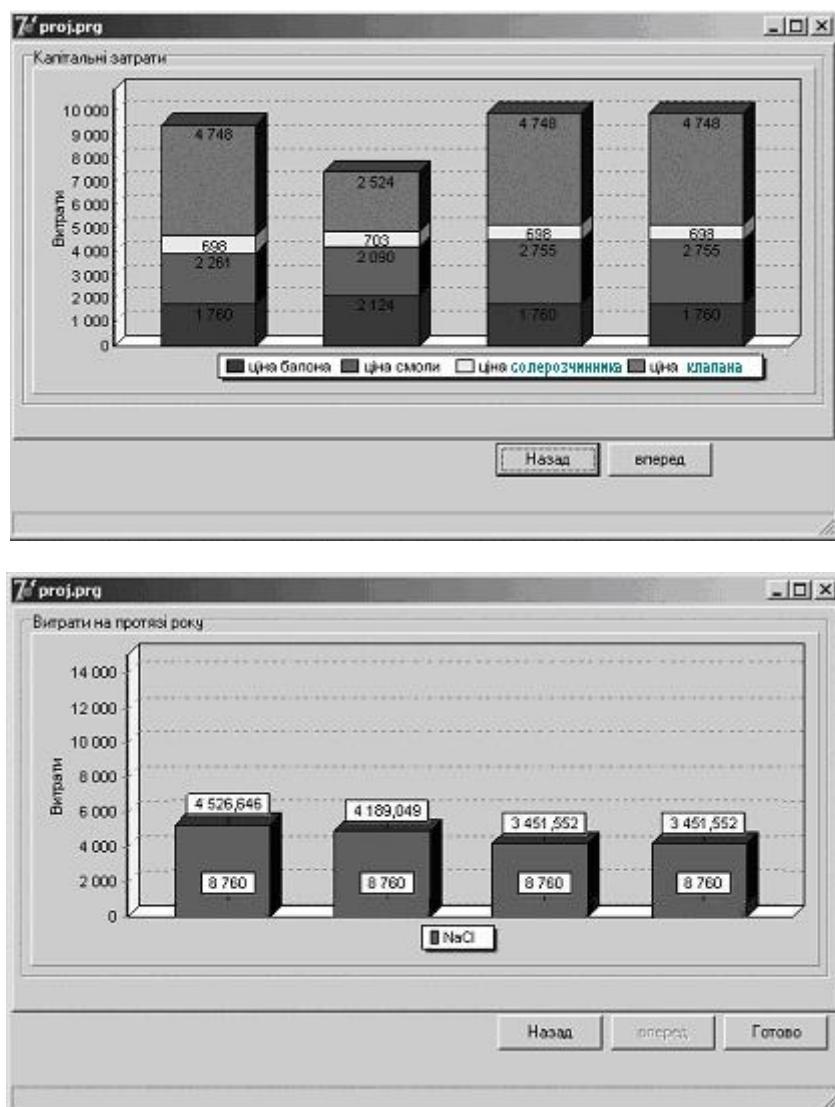


Рис. 1. Вікна, що відображують відповідно капітальні та експлуатаційні затрати

Тестування розробленого ПЗ було проведено на багатьох прикладах, що відповідають стандартам споживання води для парогенераторів, котлів, та для побутового використання, відповідно – 0,02, 0,05, 0,1 мг-екв/літр. Воно працює під керуванням різних версій операційної системи сімейства Windows (Windows XP Home Edition, Windows XP Professional, Windows 2003 Server, Windows Vista).

Розроблене ПЗ орієнтовано на використання технологами та проектувальниками, має зручний інтерфейс та необхідний сервіс. Воно дозволяє автоматизувати процес проектування локальних установок пом'якшення води малої та середньої продуктивності, вибирати оптимальні режими та технологічне устаткування. Це не тільки забезпечує мінімізацію капітальних та експлуатаційних витрат, а й дозволяє зменшити викиди високомінералізованих розчинів в каналізацію.

- 1) Сайт фірми Dow Chemical, www.dowex.com
- 2) Рябчиков Б. Е. Современные методы подготовки воды для промышленного и бытового использования. // М., ДелоПrint, 2004. – 301 с.
- 3) Митченко Т. Е., Козлов П. В., Макарова Н. В., Стендер П. В., Ермоленко И. С., Резаненко В. А. Сравнительная оценка эффективности действия катионитов в установках умягчения воды малой и средней производительности // Вода і водоочисні технології. – 2005. - №1(13) березень. – с. 33-36.

ПРИНЦИПИ СТВОРЕННЯ СИСТЕМИ КЕРУВАННЯ СКЛОВАРНОЮ ПІЧЧЮ ВАННОГО ТИПУ.

Ситников О.В.

Національний технічний університет України «КПІ», axv_sitnikov@mail.ru

У сучасній промисловості процес скловаріння дуже енергоємкісний, потребує великих затрат палива для розплаву шихти та доведення до температури 1500 °C. Як паливо використовується природний газ, що є досить дорогим в сучасній економіці.

Керування тепловим режимом ванної скловарної печі є забезпеченням сталої температури і термічної однорідності вироботочного потоку скломаси - від цих параметрів залежить стійкість роботи вироботочних пристрій та якість отриманого продукта. Величина середньої інтегральної за часом температури скломаси вироботочного потоку певним чином залежить від загальної кількості тепла, отриманого скломасою в варочній частині печі.

Для отримання динамічних характеристик на неперервнодіючий скловарній печі планується експеримент [1] і проводиться серія відповідних вимірювань при різних режимах її роботи і дотриманні умов зіставлення.

Ефективним, економічним засобом інтенсифікації згорання природного газу можуть застосовуватися газові фурми з попереднім зменшенням газу з частиною повного згорання газу. Вони можуть застосовуватися як при боковому, так і при нижньому подаванні газу замість фурм з повітряним наддувом.

Внутрішні шари шихти тривалий час залишаються відносно холодними, тоді як поверхня шихти розігріта до температури плавлення. Факт сілікато- і склоутворення в поверхневих шарах шихти лочти відразу ж після її залігання в пекти добре відомий. Отриманий теоретично результат свідчить про правильність прийнятих передумов при побудові моделі плавлення шихти [2].

Критеріями оптимальності служать для різних режимів печі мінімум витрати палива, стабілізація зони варива або максимальне збільшення продуктивності варильної зони. Коли в печі спостерігаються коливання межі зони шихти і піни, необхідно підібрати такий температурний режим, який зведе ці коливання до мінімуму, а при стабільному положенні шихти і піни слід забезпечити мінімум витрати палива. Нарешті, при достатній швидкості освітлювання і хорошої хімічної однорідності скломаси, що поступає на вироблення, ставиться завдання збільшення продуктивності течії. При цьому, на моделі можна розрахувати різні варіанти температурного режиму і вибрати той, який при заданих технологічних обмеженнях дає максимальне збільшення продуктивності варної зони.

- 1) Бузикін М.В. Дослідження динаміки плавлення скляної шихти в ванах скловарних пічах // Автоматизовані системи керування у виробництві будівельного скла // М. - 1982 - с.68-75.
- 2) Малишев С.Н. Дослідження динаміки температури газового простору ванної скловарої печі // Автоматизація технологічних процесів у виробництві скла // М.-1985 - с.46-54.

ВПРОВАДЖЕННЯ КОНЦЕПЦІЇ БІЛЬШ ЧИСТОГО ВИРОБНИЦТВА НА ХМЕЛЬНИЦЬКІЙ АЕС

Статюха Г.О., Сангінова О.В., Фатькіна О.А.

Національний технічний університет України «КПІ», kxtp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Сучасні підприємства виявляють все більшу зацікавленість у досягненні позитивних екологічних характеристик, оскільки охорона навколошнього середовища є економічно вигідною. Досвід провідних компаній довів, що можна досягти щонайменше 1% фінансових заощаджень від загального обороту компанії шляхом впровадження концепції Більш Чистого Виробництва (БЧВ).

На відміну від звичайного підходу до охорони навколишнього середовища, БЧВ – це систематично працюючий підхід, що містить ідентифікацію причин виникнення відходів, оцінку пропонованих мір і реалізацію вибраних заходів. Вперше цей підхід був запроваджений у США; тут вперше було доведено, що охорона навколишнього середовища приносить значний економічний ефект шляхом зниження виробничих витрат, що у свою чергу, підвищує ефективність і конкурентоспроможність підприємства.

Останнім часом в Україні відбуваються значні зрушения в бік покращення ситуації в галузі охорони навколишнього середовища. Все більше підприємств розуміють, що застосування методів Більш Чистого Виробництва не тільки запобігатиме забрудненню навколишнього середовища, але й поліпшить якість продукції, умови праці та збільшить прибутки. У даній роботі викладено досвід впровадження методів БЧВ на Хмельницькій атомній електростанції (ХАЕС).

В рамках проекту БЧВ на Хмельницькій АЕС проаналізовано джерела утворення та викиду забруднюючих речовин у повітря. Встановлено, що доля викидів пускорезервної котельні (ПРК) досягає 95% від загальної кількості викидів шкідливих речовин ХАЕС, тобто ПРК є основним джерелом забруднення повітря на електростанції. Тому впровадження БЧВ почалося саме з цього об'єкту.

З метою визначення основних цілей проекту БЧВ на ХАЕС було вивчено можливі варіанти запобігання забрудненню навколишнього середовища, серед яких такі: встановлення систем очищення від оксидів сірки і сажі, оскільки такі системи проектом не передбачені; заміна сировини - мазута; зменшення кількості спалювального мазуту за рахунок перерозподілу теплових та енергетичних потоків ПРК; зменшення часу використання ПРК як джерела тепла і пари для технологічних потреб і потреб міста Нетішина.

Оцінювання запропонованих варіантів виконувалося із залученням провідних фахівців ХАЕС. Для практичної реалізації обрано варіант зменшення часу використання пускорезервної котельні. Очікувані результати: зниження валових викидів забруднюючих речовин в атмосферу; скорочення екологічних платежів за забруднення атмосферного повітря, що в загальному підсумку приводить до позитивного економічного ефекту; істотне зниження кількості спалюваного мазуту; зниження витрат на придбання мазуту.

Розрахунок кількості викидів забруднюючих речовин для кожного варіанту виконувався за допомогою програмного модулю, розробленого відповідно до «Методичного посібника з проведення комплексних еколого-теплотехнічних випробувань казанів, що працюють на газі і мазуті. Інститут газу АН України, 1992». Питомі величини викидів забруднюючих речовин розраховані на базі “Технічного звіту про виконану роботу: Еколого-теплотехнічні випробування котлів ГМ-50-14\250 Хмельницької АЕС при спалюванні мазуту”. За основу розрахунку були прийняті максимальні навантаження котлоагрегатов №№ 1, 2, 3, 4 при їх одночасній роботі. Програмний модуль дозволяє розраховувати кількість таких шкідливих викидів, як оксиди азоту NOx в перерахунку на діоксид азоту NO₂; оксиди сірки SOx в перерахунку на діоксид сірки SO₂; оксиди вуглецю; п'ятиокис ванадію; метан; сажа.

Відповідно до проекту БЧВ було розраховано три варіанти експлуатації пускорезервної котельні:

1 варіант: енергоблоки № 1 та № 2 працюють у режимі стабільної роботи. Планово-попередкувальні ремонти на обох енергоблоках співпадають у часі. Загальний час роботи котельні не перевищує 110 діб (2640 годин), витрати мазуту становлять приблизно 9135 т/рік.

2 варіант: енергоблоки працюють у режимі стабільної роботи. Планово-попередкувальні ремонти на енергоблоках не співпадають у часі. Витрати палива не перевищують 100 т/рік.

3 варіант: енергоблоки працюють у режимі стабільної роботи. Планово-попередкувальні ремонти на енергоблоках не співпадають у часі. Витрати палива не перевищують 15 т/рік.

Результати розрахунків подані у табл. 1 та на рис. 1.

Таблиця 1 – Результати розрахунків викидів забруднюючих речовин у повітря

Назва речовини	Розрах. обсяги викидів, т	Загальні суми зборів, грн.
1 варіант		123958,74
оксиди азоту	28,673	7593,38
оксиди сірки	423,623	112186,72
п'ятиокис ванадію	4,043	4015,11
оксид вуглецю	5,502	54,65
сажа	10,962	108,88
2 варіант		1296,73
оксиди азоту	0,311	82,36
оксиди сірки	4,383	1160,74
п'ятиокис ванадію	0,052	51,64
оксид вуглецю	0,060	0,60
сажа	0,140	1,39
3 варіант		194,68
оксиди азоту	0,047	12,45
оксиди сірки	0,657	173,99
п'ятиокис ванадію	0,008	7,94
оксид вуглецю	0,009	0,09
сажа	0,021	0,21

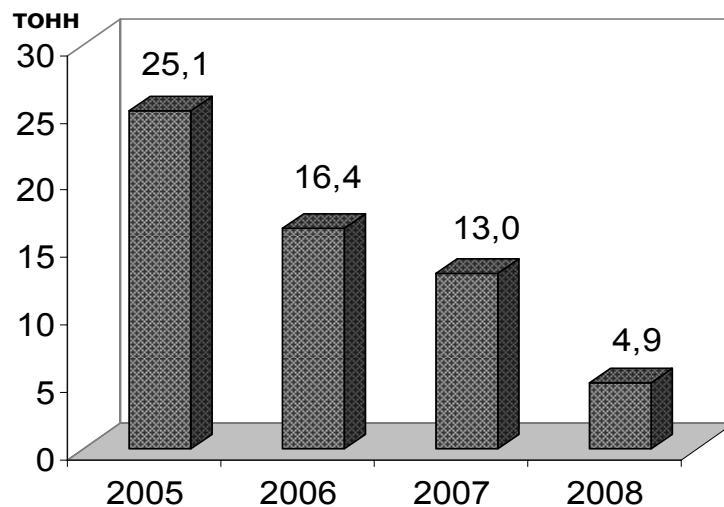


Рис. 1. Кількість викидів забруднюючих речовин у повітря

В результаті впровадження проекту Більш Чистого Виробництва на Хмельницькій АЕС очікується зниження валових викидів забруднюючих речовин в атмосферу з 25.1 тонн до 4.9 тонн та зменшення екологічних платежів за забруднення атмосферного повітря зі 124 тис. грн. до 195 грн.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РІВНОВАЖНИХ СКЛАДІВ У СИСТЕМІ ФОРМАЛЬДЕГІД-МЕТАНОЛ-ВОДА

Хількова Л.О., Кондратов С.О., Немоловська Л.Л.

Філіал Східноукраїнського національного університету імені В. Даля, kondratov@rune.lg.ua

Формальдегід – один з базових продуктів хімічної промисловості і одночасно – один з небезпечних забруднювачів навколошнього середовища. Головне джерело забруднення – стадія абсорбції водою суміші формальдегід-метанол-вода, що створюється на стадії окислення. Для вирішення задач оптимального проектування абсорбційних колон та комп'ютерного управління виробництвом необхідна модель, що описує рівноважний склад цієї суміші.

За допомогою методів фізичної хімії скласти таку модель неможливо внаслідок її складності (наявністю великої кількості сполук у системі, сильного відхилення системи від ідеальної внаслідок наявності сильної міжмолекулярної взаємодії між компонентами). Тому для її побудови ми використали сучасні методи аналізу даних, спираючись на великий масив експериментальних даних [1]. Задача моделювання – одержання аналітичної залежності вихідних змінних (вмісту компонентів у паровій фазі: формальдегіду (y_1 , % мас), метанолу (y_2 , % мас) та температури (y_3 , °C) від входних змінних: вмісту формальдегіду (x_1 , % мас), метанолу (x_2 , % мас) у жидкій фазі, тиску (x_3 , мм рт.ст.). Технологія моделювання спирається на особливості таблиць експериментальних даних, які дозволяють використання послідовних “зрізів” по змінним:

а) на першому етапі за допомогою МНК підбирали нелінійну залежність кожної з вихідних змінних як функції від однієї із входних змінних при фіксованих значеннях x_2 та x_3 :

$$y_i = f(x_1, \mathbf{a}), \quad (1)$$

де \mathbf{a} – вектор параметрів моделі;

б) на другому етапі підбирали нелінійну залежність кожного з компонентів \mathbf{a} від x_2 при фіксованих значеннях x_3 :

$$a_i = f(x_2, \mathbf{b}), \quad (2)$$

де \mathbf{b} – матриця параметрів залежності компонентів вектору \mathbf{a} від x_2 ;

в) на третьому етапі підбирали нелінійну залежність кожного з компонентів \mathbf{b} від x_3 ;

г) на останньому етапі проводили синтез моделі у вигляді системи нелінійних рівнянь та підгонку коефіцієнтів по усій сукупності експериментальних даних.

Отримані моделі вмісту у паровій фазі формальдегіду (Y_1), метанолу (Y_2) і температури (Y_3):

$$Y_1 = \frac{b_{11} \cdot \ln(x_3) + b_{12} + (b_{21} \cdot \ln(x_3) + b_{22}) \cdot x_2}{1 + (b_{31} \cdot \ln(x_3) + b_{32}) \cdot x_2 + (b_{41} \cdot \ln(x_3) + b_{42}) \cdot x_2^2} \cdot x_1, \quad (4)$$

$$Y_2 = \left(\begin{array}{l} (c_{11} \ln(x_3) + c_{12}) \cdot x_1^2 + \\ (c_{21} \ln(x_3) + c_{22}) x_1 + \\ (c_{31} \ln(x_3) + c_{32}) \end{array} \right) \cdot x_2 \Bigg/ \left(1 + \left(\begin{array}{l} (d_{11} \ln(x_3) + d_{12}) \cdot x_1^2 + \\ (d_{21} \ln(x_3) + d_{22}) x_1 + \\ (d_{31} \ln(x_3) + d_{32}) \end{array} \right) \cdot x_2 \right), \quad (5)$$

Модель температури:

$$Y_3 = \left(\begin{array}{l} (c_{11} \ln^2(x_3) + c_{12} \ln(x_3) + c_{13}) \cdot x_1^2 + \\ (c_{21} \ln^2(x_3) + c_{22} \ln(x_3) + c_{23}) x_1 + \\ (c_{31} \ln(x_3) + c_{32}) \end{array} \right) \Bigg/ \left(1 + \left(\begin{array}{l} (d_{11} \ln^2(x_3) + d_{12} \ln(x_3) + d_{13}) \cdot x_1^2 + \\ (d_{21} \ln^2(x_3) + d_{22} \ln(x_3) + d_{23}) x_1 + \\ (d_{31} \ln(x_3) + d_{32}) \end{array} \right) \cdot x_2 \right), \quad (6)$$

Методом растрової візуалізації показано, що параметри моделі відповідають глобальному мінімуму функціонала МНК. Коефіцієнти детермінації для усіх моделей складають 0,98-0,995. Це робить отримані моделі здатними для прогнозування складу парової фази системи у практичних цілях.

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПАКЕТОВ СХЕМОТЕХНИЧЕСКОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ALLTED И HSPICE

Безносик А. Ю.

Национальный технический университет Украины “КПИ”, sasha@cad.kiev.ua

Данная работа посвящена исследованию эффективности алгоритмов статического и временного анализа, используемых в пакетах схемотехнического проектирования ALLTED (All-Technology Designer) [1] и Synopsys HSPICE [2]. Проведенное исследование включает изучение численной сходимости процедур статического анализа, а также скорости и точности работы алгоритмов временного анализа, путём моделирования ряда плохо обусловленных и жёстких тестовых задач из эталонного набора описаний электронных схем, разработанного Центром микроэлектроники Северной Каролины [3].

В рамках исследования, с помощью разработанного на кафедре САПР НТУУ “КПИ” конвертора Spice-to-Allted, было проведено преобразование исходных описаний схем с языка SPICE в язык описания объектов пакета ALLTED. В то же время, задание на моделирование было транслировано в ALLTED вручную с сохранением основных задач моделирования. Кроме того, для обеспечения одинаковых начальных условий, были приведены в соответствие значения определённых управляемых констант, таких как относительная погрешность метода Ньютона, локальная погрешность метода интегрирования, минимальный временной шаг и т.п.

В ALLTED и HSPICE используются различные подходы для вычисления погрешностей, выбора шага, различные методы интегрирования, что затрудняет оценивание полученных результатов. Однако можно отметить, что при выполнении статического анализа ALLTED находит решение быстрее при использовании метода по умолчанию (метод Ньютона-Рафсона с линейным поиском длины шага вдоль выбранной траектории решения), хотя применение данного метода не всегда приводит к получению надлежащих результатов. При использовании же оригинального, реализованного в ALLTED метода, основанного на поиске гиперлинии, соединяющей текущую предполагаемую точку и точку решения, адекватные результаты были получены, хотя и за большее число итераций, чем в HSPICE.

Временной анализ примерно в половине случаев ALLTED также выполняет за меньшее число итераций. Однако нельзя быть уверенным, что результаты, полученные в ALLTED и HSPICE, имеют одинаковую точность, так как процедура выбора временного шага в HSPICE, в отличие от ALLTED, не принимает во внимание значение локальной погрешности метода интегрирования, а использует количество итераций на текущем шаге, отношения значений решения на текущем и предыдущем шагах и их абсолютную разницу. Кроме того, HSPICE использует по умолчанию метод интегрирования первого порядка (также можно вручную задать использование метода второго порядка), в то время как в ALLTED используется автоматический метод интегрирования переменного порядка (с первого по шестой), что в ряде случаев обеспечивает получение более точных результатов. Таким образом, использование в качестве критерия только лишь общего числа итераций является недостаточным для объективного сравнения пакетов ALLTED и HSPICE.

- 1) Petrenko A. I. et al. ALLTED – a computer-aided engineering system. Melbourne, 1997.
- 2) HSPICE: Elements and Device Models, Volume II. Meta-Software Inc., 1996.
- 3) CircuitSim90 Benchmark Information. http://www.cbl.ncsu.edu/CBL_Docs/cs90.html.

ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ПРОГРАММ И БАЗ ДАННЫХ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИИ РЕМОНТА ИЗДЕЛИЙ ИЗ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Глоба А.В., *Шевченко О.А.

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

*Национальный авиационный университет. Украина, O.A.SHEV@nau.edu.ua

Представлена система анализа прочности элементов конструкций из полимерных композиционных материалов с эксплуатационными повреждениями и принятия оптимальных решений по их ремонту. Даны описания и особенности функционирования: программного комплекса для анализа прочности элементов с повреждениями, экспертной системы для оценки критичности повреждений и выбора оптимального метода и технологии ремонта.

В современных конструкциях изделий все более широко применение находят полимерные композиционные материалы (ПКМ), которые имеют высокую удельную прочность и жесткость.

Проблема поддержания элементов из ПКМ в работоспособном состоянии на протяжении длительного срока становится в особенности актуальной на современном этапе развития авиационной техники, поскольку на первое место выходят проблемы эффективности эксплуатации при значительной конкуренции между фирмами производителями. Поэтому одним из основных факторов, по которым оценивается эффективность типа самолета, являются эксплуатационные затраты на 1 час налета.

ПКМ являются стойкими к усталости и к влиянию разных условий эксплуатации, однако чувствительные к ударам, поэтому в процессе эксплуатации конструкции или при техническом обслуживании в элементах конструкций из данных материалов могут возникать значительные дефекты и повреждения, которые можно считать эксплуатационными. Ремонт таких дефектов и повреждений, особенно в условиях эксплуатации, является довольно сложным, поскольку связан с ограниченностью ремонтных средств и доступа к ремонтным зонам, а его результаты могут повлиять на безопасность полетов.

Функционирование специального программного комплекса (ПК) для оценки прочности элементов из ПКМ, которые получили дефекты или повреждение на этапе эксплуатации. В данном комплексе предусмотренная также возможность проведения оценки влияния на прочность ремонтных накладок. Высокие стоимость и ответственность отдельных видов конструкций из ПКМ требует тщательного изучения напряженного состояния конструкции и степени надежности его работы при наличии того ли другого дефекта или повреждения. Анализ прочности разных элементов из ПКМ при наличии эксплуатационных дефектов и повреждений, а также прочность после проведения ремонта, является важной проблемой, которая требует своего решения.

Значительного внимания к возможным эксплуатационным повреждениям уже на стадии проектирования элементов конструкции с ПКМ требует реализация технического обслуживания и ремонта по техническому состоянию. Поврежденность элементов конструкций из ПКМ оценивают, начиная с этапа предпроектных исследований и разработки технического предложения на основе прогнозируемых условий эксплуатации и статистических данных по эксплуатационным повреждениям аналогичных конструкций из ПКМ, которые уже находятся в эксплуатации. ПК по расчету напряженно-деформированного и предельного состояний плоских элементов с вырезами и типовыми повреждениями, был разработан на основе метода граничных интегральных уравнений. Этот комплекс может быть использован как на стадии проектирования, так и на стадии эксплуатации элементов из ПКМ, но после соответствующей доработки.

ПК, предназначен для автоматизации процесса разработки, исследований и анализа элементов конструкций из ПКМ, если в них имеются такие эксплуатационные повреждения, как сквозные пробоины и трещины. На этапе проектирования использование комплекса позволит конструкторам, технологам и специалистам по расчетам на прочность:

устанавливать местоположения и допустимые размеры технологических дефектов и эксплуатационных повреждений; выбирать рациональные конструктивно-технологические решения и методы по ограничению развития повреждений; определять уровни допустимых напряжений и деформаций. На этапе эксплуатации элементов из ПКМ использование ПК даст возможность проводить выбор оптимальной с точки зрения эффективности и трудоемкости стратегии ремонта элемента из ПКМ и сохранение данных по эксплуатационным повреждением для дальнейшего анализа.

На этапе проектирования при выполнении расчетов на прочность элементов из ПКМ для их различных частей должны быть определены возможные размеры типовых повреждений в направлениях главных напряжений.

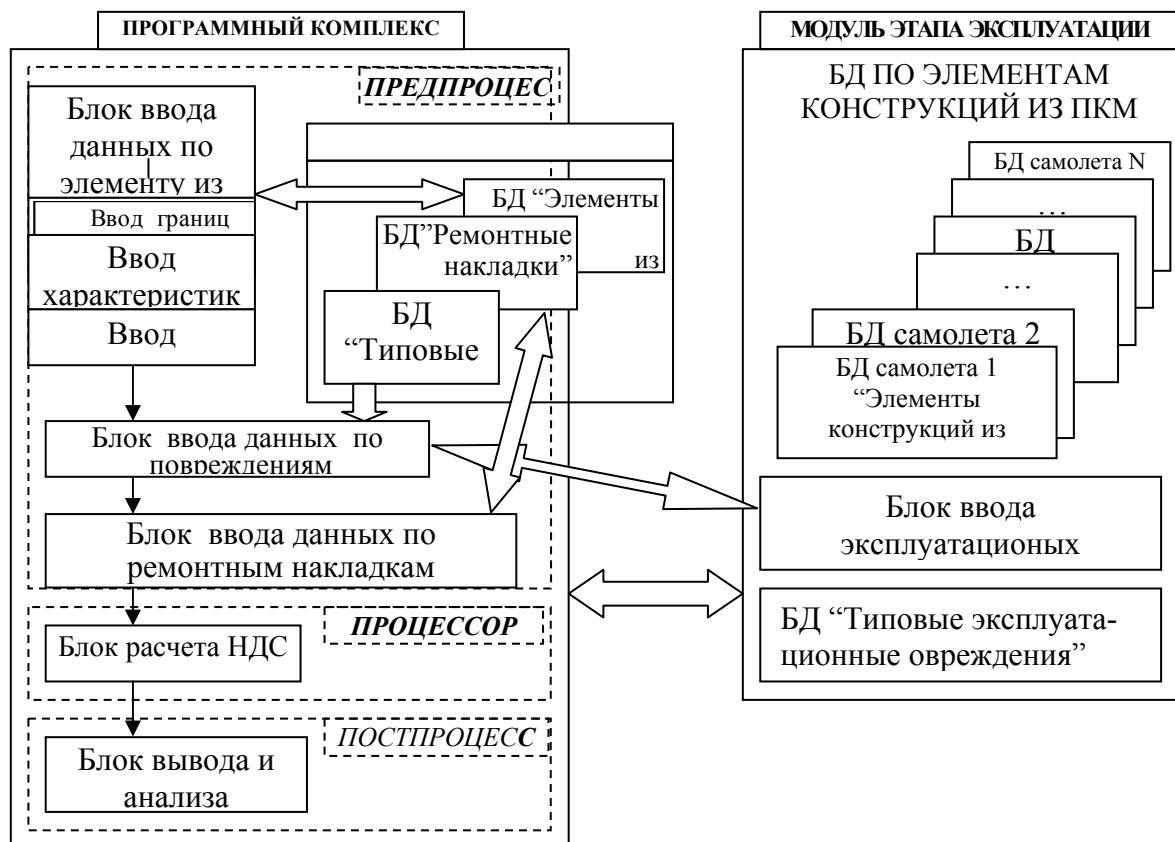


Рис. 1. Структурная схема программного комплекса с модулем этапа эксплуатации

Окончательный выбор экстремальных случаев нагружения элементов из ПКМ проводится на этапе испытаний и сертификации конструкции. Должны быть уточнены окончательные размеры допустимых повреждений и сделана оценка остаточной прочности по уточненным моделям с учетом этих повреждений. На этапе эксплуатации расчетные условия для элемента и значения внешних погрузок должны быть уточнены. Окончательные данные по элементу, его расчетные нагрузки (через граничные условия) с учетом допустимых повреждений должны переноситься и сохраняться в соответствующей базе данных для возможности дальнейшего анализа данного элемента.

При появлении эксплуатационных повреждений ПК должен позволить проводить анализ их влияния на прочность элемента с целью выбора стратегии и методов ремонта и для дальнейшего предотвращения данного повреждения (если это возможно). Информация, которая накапливается в модуле “Банк данных” по эксплуатационным повреждением позволит или учесть их влияние, или избежать их появления в ЛА данной серии, а также при проектировании и изготовлении следующих элементов из ПКМ.

Необходимость быстрого продолжения эксплуатации самолета, после повреждения, возрастает ответственность принятия решения о проведении оперативного ремонта повреждения, которое было выявлено. В этом случае должно быть быстро принято верное решение, значительную помощь в принятии которого может предоставить автоматизированная система. С целью быстрого проведения анализа Разработчик передает Эксплуатанту "Модуль этапа эксплуатации" по каждому самолету в отдельности или по нескольким самолетам данного типа. Модуль должен иметь набор баз данных "Элементы конструкций из ПКМ". Наличие баз данных, которые содержат информацию по каждому элементу из ПКМ каждого самолета данного типа, позволит учесть индивидуальные особенности элементов из ПКМ такие как доработки конструкции, ремонтные зоны и усиливающие накладки. По каждому элементу в базе данных хранится его твердотельная модель, в которую внесены соответствующие изменения по доработкам и ремонтным зонам, если такие имеются.

Поскольку особенностью ПКМ является то, что такие повреждения, как пробоина, трещина или вмятина, которые были вызваны ударной погрузкой, практически не увеличиваются в эксплуатации при действии переменных нагрузок, то важной задачей на этапе разработки элементов является определение размера критического типового повреждения для каждого элемента. При этом должны быть учтены нагрузки, которые отвечают наиболее опасному расчетному случаю (или нескольким случаям) соответствующих норм летной годности. Модуль этапа эксплуатации включает базу данных "Типовые эксплуатационные повреждения" элементов конструкций из ПКМ самолетов данного типа, которая может позволить быстро выбрать типовое повреждение, соответствующее обнаруженному в эксплуатации.

В случае возникновения (и выявление) в конструктивном элементе из ПКМ эксплуатационного повреждения, такой как сквозной пробой, трещина или вмятина, должны быть быстро зафиксированные точные размеры и координаты его местоположения в конструкции. Соответствующий элемент выбирается из базы данных "Модуль этапа эксплуатации" и размеры повреждения сравниваются с критическим размером для данного типа дефекта в конкретном элементе из ПКМ и делается вывод о критичности повреждения. В случае недостаточной информации или при нетипичном повреждении информация по нему заносится в "Блок ввода эксплуатационных повреждений" и далее по электронной сети передается и концентрируется в соответствующем отделе у Разработчика или в специальном сервисном центре, на который могут быть частично возложенные функции по оперативному проведению ремонтов.

В системе существует специализированный ремонтный блок. Этот блок позволяет подобрать, используя соответствующую базу данных, форму, размеры и схему армирования необходимой ремонтной заплаты и метод ее постановки, а также быстро провести анализ их влияния на прочность элемента с целью выбора стратегии и методов ремонта и для предотвращения дальнейшего развития данных повреждений.

Если в результате анализа выяснилось, что размеры повреждения не являются критическими с точки зрения прочности и, что его размеры не будут увеличиваться при дальнейшей эксплуатации, а необходимый ремонт есть довольно сложным, то может быть выполнен временный ремонт. Предлагается для повреждений типа пробоин и трещин, характерные размеры которых в соответствующих направлениях меньше чем допустимые для данной зоны конструктивного элемента, проводить ремонт в условиях эксплуатации постановкой временных накладных заплат с неотверженных слоев стеклопластикового препрега с дальнейшей полимеризацией на месте установки, или приклеивание стеклопластиковой НЛ. Данная временная НЛ может быть установлена очень быстро, так как ее постановка не требует высокой квалификации, больших затрат и проведения дополнительных подготовительных работ. НЛ необходимая для защиты ПКМ в зоне повреждения от влияния климатических условий (влаги и температуры), а также для предупреждения возможности увеличение повреждение от аэродинамических погрузок. Полный ремонт повреждения

может быть сделан на базе Эксплуатанта или у Производителя с использованием информации о повреждении и про проведенный временный (косметический) ремонт, которая была передана по сети для сохранения в соответствующей базе данных.

На этапе разработки нормативно–технической документации по ремонту эксплуатационных повреждений в элементах из ПКМ невозможно предсказать все возможные виды дефектов, особенно это касается площадных и множественных дефектов. Данная проблема решается путем разработки автоматизированных программ оценки влияния данного дефекта на прочность.

Комплексное определение показателей ремонта позволяет подобрать технологию ремонта ПКМ, не только удовлетворяющую эксплуатационным требованиям, предъявляемым к ЛА, но и обеспечивающую минимальную стоимость выполнения ремонтных работ.

Экспертная система на основании информации, содержащейся в базе технологических знаний и в математической модели детали из ПКМ и технологии ее обработки, принимает автоматически следующие решения:

- о необходимом наборе средств малой механизации, просмотреть их характеристики;
- подобрать необходимый набор режущего инструмента;
- сформировать план обработки детали (набор операций и переходов);
- получить полную документацию на технологию выполнения ремонта.

Выбирается оптимальный вариант, который и реализуется с использованием разработанного универсального комплекта ручного механизированного инструмента (РМИ) предназначенного для подготовки поверхностей под последующие ремонтно-восстановительные работы по устранению эксплуатационных повреждений элементов конструкций летательных аппаратов, выполненных из ПКМ (киль, отклоняемые носки крыла, капот и д.р.).

Задачи ремонта элементов из КМ могут быть решены комплексно. На основании анализа характера повреждения и его местоположения выбирается соответствующая стратегия ремонта (например: заделка повреждения с помощью накладки или без таковой). Если постановка накладки необходима, то ее форма и размеры выбираются с использованием разрабатываемого программного комплекса. После введения в программный комплекс места, формы и размеров данного повреждения или эквивалентного повреждения, выбираются оптимальные размер и форма накладки (или несколько эквивалентных вариантов), которые, затем, анализируются с позиций их аэродинамической, весовой и стоимостной приемлемости. Выбирается оптимальный вариант, который и реализуется с использованием разработанного ремонтного комплекса, в состав которого входит пневмоинструмент, позволяющий выполнять операции по подготовке места ремонта в соответствии с выбранной схемой ремонта.

Технолог может согласиться или не согласиться с предлагаемыми машиной решениями. Если предложенное решение не устраивает пользователя по какой-либо причине, то в диалоговом режиме технолог может внести свое решение (при этом он опирается на данные, содержащиеся в банке данных).

Система за счет базы технологических данных легко переналаживается на любой вид оборудования.

Выводы. В работе предложена комплексная система поддержания летной годности элементов ЛА из ПКМ, которая включает программный комплекс по анализу прочности конструкций из ПКМ, имеющих эксплуатационные повреждения, и автоматизированную экспертную систему, базирующуюся на сравнении действительного размера повреждения с его критическим размером в данной зоне элемента. Ремонтный блок данной системы позволяет выбрать оптимальный метод и технологию ремонта, основные операции которой могут быть выполнены с использованием ремонтного комплекта на основе универсального пневмопривода с набором сменных технологических насадок для выполнения ремонтных

операций. Предложено выполнять оперативной ремонт пробоин и трещин в условиях эксплуатации методом постановки временных накладных заплат с последующим контролем состояния элемента.

Дальнейшие исследования будут связаны с определением влияния накладных заплат на прочность и жесткость отремонтированных элементов из ПКМ а также с оптимизацией технологий их ремонта.

- 1) Серенсен С.В., . Зайцев уняев Г.М. Структура и свойства полимерных композитов.– М.: Химия, 1981. – 230 с.
- 2) Глоба А.В. Ремонт виробів з листового композиційного матеріалу. Наука, техника, виробництво. Експрес-новини. – К.: № 5-6. 1999. С. 17-19.
- 3) Шевченко О.А. Особливості функціонування програмного комплексу на етапі експлуатації елементів конструкцій з композиційних матеріалів// Вісник НАУ – К. – 2002. – №2. – С. 99– 103.
- 4) Шевченко О.А. Программный комплекс по расчету напряженно– деформированного состояния плоских элементов с вырезами и типовыми повреждениями методом граничных элементов// Вісник НАУ – К.– 2001.– №1. –С. 109– 115.

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ТРЕНАЖЕР ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ ОПЕРАТОРОВ УСТАНОВКИ ПРОИЗВОДСТВА АММИАКА

Дозорцев В.М., Владов Р.А., Федоренко Д.Ю., Янишпольский В.В.
ИП «Хоневелл Украина», info.ukraine@honeywell.com

В данной статье представлен компьютерный тренажерный комплекс для обучения операторов установки производства аммиака, успешно внедренный компанией Honeywell для ОАО «Одесский припортовый завод» (г.Южный, Украина) (далее – ОПЗ). Проект реализован в течение 2004-2006 гг. и приобретенный при этом опыт представляет интерес в свете все большего внимания, уделяемого современным системам подготовки оперативного персонала директивными органами обеспечения промышленной безопасности и руководством промышленных предприятий.

Характеристика технологического объекта и состав тренажерной модели

Производство аммиака – потенциально опасный технологический объект из-за присутствия токсичных веществ и аппаратов под высоким давлением. С учетом большой производительности аммиачных установок это определяет существенную уязвимость производства с точки зрения человеческого фактора, поскольку цена ошибочных действий оперативного персонала чрезвычайно высока. Сложность технологических процессов обуславливает длительное время подготовки операторов и в такой ситуации компьютерный тренинг персонала представляется реальной эффективной альтернативой.

Учитывая важность обучения всему объему операторских функций, тренажерная модель включает практически все технологические блоки установки (рис. 1).

Адекватность и детальность модели являются достаточными для выполнения различных технологических операций, связанных с эксплуатацией агрегата, например, пуск (в том числе, из холодного состояния), процедуры планового и аварийного остановов, ведение технологического процесса в заданных пределах изменения параметров.

Техническое решение

Тренажер выполнен в среде ПО Shadow Plant (далее - ПО SP) разработки компании Honeywell. ПО SP использует мощный инструмент имитационного моделирования, позволяющий реализовать компьютерный операторский интерфейс, идентичный используемому на реальном объекте (на данной технологической площадке эксплуатируется РСУ Honeywell TDC3000).

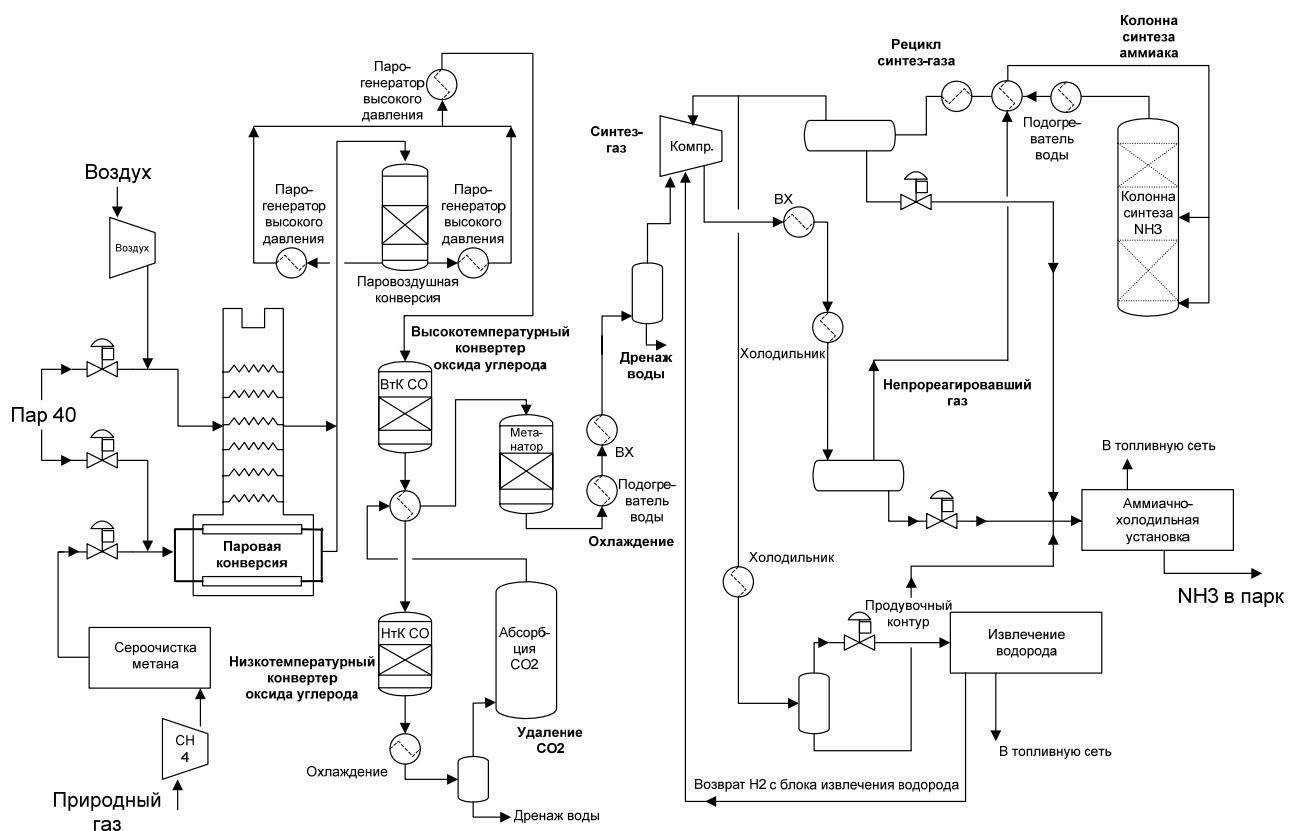


Рис. 1. Технологическая схема установки производства аммиака.

Тренажер является самостоятельной (локальной) системой (рис. 2), располагающейся в выделенном помещении цеха производства аммиака.

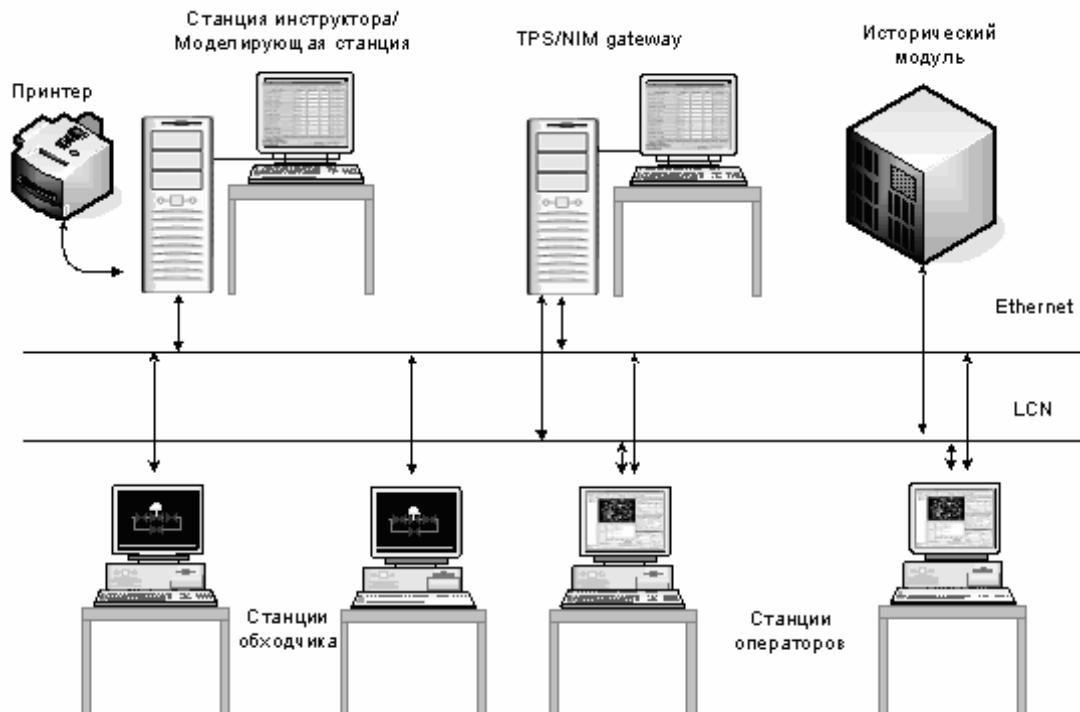


Рис. 2. Техническая структура тренажера

В состав комплекса входят:

- две станции оператора-технолога, идентичные используемым в реальной системе управления на ЦПУ,
- две станции оператора-обходчика,
- модуль прикладных программ APP (TPS/NIM gateway), который выступает в качестве связующего звена между системой моделирования и РСУ,
- исторический модуль, необходимый для работы узлов РСУ,
- инструкторская станция, используемая также для эмуляции контроллеров РСУ, системы ПАЗ и для моделирования ТП.

Установленное на станциях оператора-технолога программное обеспечение позволяет использовать на Тренажере мнемосхемы из реальной системы управления агрегатом без изменений, либо с минимальными изменениями, связанными с объемом моделирования ТП.

На станции оператора-обходчика установлено ПО ShadowPlant Remote RTG, позволяющее отображать графические экраны системы моделирования ShadowPlant и управлять ТП с помощью специальных элементов управления. Для этой станции специально разработаны экраны, включающие все вошедшие в объем моделирования инструменты полевого управления: клапаны, кнопки управления по месту, локальные измерительные приборы и т.п. Эти экраны доступны также инструктору.

Рабочее место инструктора (используемое также для администрирования и разработки системы) совмещено с аппаратным обеспечением платформы для моделирования. Помимо моделирования технологического процесса на этом же компьютере осуществляется эмуляция контроллеров РСУ и ПАЗ.

Вспомогательный компьютер-шлюз осуществляет связь моделируемых в системе ShadowPlant компонентов (входов-выходов тренажерной модели, элементов РСУ и ПАЗ) с РСУ. Установленное здесь ПО TPS-Sim осуществляет эмуляцию сети нижнего уровня управляющих контроллеров РСУ.

Программное обеспечение тренажера

В качестве программных средств моделирования в тренажере использован продукт Shadow Plant® Professional Edition компании Honeywell, позволяющий осуществлять как обучение операторов, так и инженерные исследования установки. Указанное ПО обеспечивает среду для взаимодействия инструктора и обучаемых на базе рабочих станций оператора и операторских консолей.

ПО SP обеспечивает высокоточное моделирование массо- и теплообменных процессов, гидравлики и кинетики на всех технологических операциях, включая пуск, остановку, работу в нештатных, предаварийных и аварийных состояниях. Полнофункциональный инструкторский интерфейс поддерживает как самостоятельное, так и управляемое инструктором обучение.

В состав пакета также входят: ПО для создания графических экранов со схемами ТП для станций инструктора и оператора-обходчика, включающее расширяемый набор графических элементов для отображения различных технологических аппаратов и управления ими, ПО для конвертирования БД реальной РСУ в БД эмулированной РСУ, конвертирования логики ПАЗ, нахождения отличий в БД, программа эмуляции контроллеров РСУ, включающая в себя основные функциональные блоки, различные типы регуляторов, а также аналоговые и дискретные входы-выходы, логические точки и т.д.

Программное обеспечение тренажера содержит приложения как для разработки, так и для сопровождения моделей процесса и системы управления. Для этого используется графический редактор экранов модели, позволяющий работать с технологическими схемами ТП. Он также содержит базу данных оборудования и потоков модели. Графический редактор доступен для использования специалистами ОПЗ для обновления экранов модели при изменениях технологии, либо для разработки собственных экранов. Кроме того, при

изменении конфигурации контроллеров реальной РСУ существует возможность самостоятельно вносить эти изменения в БД эмулированной РСУ Тренажера.

Методика комп'ютерного тренинга

Станция инструктора снабжена следующими инструментами, обеспечивающими современные методики компьютерного обучения:

- Создание пользователей ПО SP. Существует три типа пользователей ПО SP:
 - Оператор
 - Инструктор
 - Инженер.

Инструкторы и Операторы используют ПО SP для проведения сеансов обучения под надзором и без него. Инженер по построению или сопровождению моделей отвечает за создание и обновление имитационной модели, которая отражала бы эксплуатационные условия реального процесса.

- Выбор, загрузка и запуск модели.
- Приостановка/возобновление моделирования.
- Ускорение/замедление моделирования. По умолчанию модель выполняется в режиме реального времени. Ускорение необходимо, когда при управлении моделируемой установкой некоторые операции на практике протекают медленно и не представляют особого интереса для обучения. Замедление необходимо при детальном разборе быстрых операций, которые должен усвоить обучаемый оператор.

- Выбор начальных условий. Число начальных состояний неограниченно. Два начальных состояния (нормальный режим и холодный старт) обязательны. Инструктор может запомнить любое текущее состояние тренажерной модели и объявить его начальным.

- Автоматическое и ручное запоминание моментальных снимков. В дополнение к начальным условиям имеется возможность в любой момент времени или периодически запоминать состояние моделируемой установки. Моментальный снимок может использоваться как для инициализации прошлых состояний модели при разборе действий обучаемого оператора, так и для запоминания начальных условий.

- Инициализация прошлых состояний модели. Используется для воспроизведения прошлых состояний модели с помощью запомненных моментальных снимков.

- Отказы. Инструктор может вводить нарушения хода ТП (например, отказы насосов), а также задавать степень нарушения (например, процент открытия отказавшего клапана). Среди возможных отказов, в частности, прекращение подачи сырья, пара, обратной воды, топлива, электроэнергии, воздуха КИП; отказы ротационного оборудования; отказы регулирующих клапанов и запорной арматуры в разнообразных положениях; дрейф трансмиттеров; засорение теплообменников и печей; разгерметизация аппаратов и трубопроводов.

- Инструкторские переменные используются для внесения инструктором изменений в ход моделируемого ТП, которые недоступны из РСУ или со станции полевого оператора (например, величина потока из другой установки, давление пара, состав сырья, состояние окружающей среды и пр.).

- Тренировочные упражнения реализуются с помощью отказов или инструкторских переменных и служат для выработки у обучаемого оператора навыков правильных действий при неожиданном возникновении симптомов нарушений хода ТП. Сборник упражнений снабжен описанием симптоматики нарушений и действий, требуемых для компенсации их нежелательных последствий. Некоторые из упражнений, реализованных в тренажере приведены в табл.1.

- Удаленное управление реализуется со станций оператора, инструктора или полевого оператора и позволяет выполнять такие действия, как закрытие/открытие отсечных клапанов, сборку/разборку байпасов, включение/выключение насосов и пр.

Таблица 1 – Примеры тренировочных упражнений

1.	Пропуск котловой воды на котле 101СА производства пара (подъемная труба).
2.	Пропуск котловой воды на котле 101СВ производства пара (подъемная труба).
3.	Пропуск котловой воды на котле 102С производства пара (подъемная труба).
4.	Пропуск котловой воды на котле 103С производства пара (подъемная труба).
5.	Остановка компрессора природного газа 102J .

- Сценарии. Программируемые последовательности изменений инструкторских переменных, переменных процесса, отказов. Сценарии могут создаваться инструктором до сеанса тренинга, затем запоминаются и инициируются в момент, который инструктор сочтет нужным. Инструктор также может записать последовательность своих действий по внесению возмущений в ход технологического процесса во время сеанса обучения и сохранить ее как сценарий, который затем может быть использован во время других сеансов. Действие сценария может быть приостановлено или прервано инструктором в любой момент.

- Исторические тренды переменных ТП (с возможностью масштабирования по значению и по времени).

- Мониторинг моделируемого процесса. Для отражения хода моделируемого процесса на станции инструктора имеются специальные графические экраны, воссоздающие технологическую схему ТП и содержащие другую необходимую информацию о текущих и исторических значениях технологических переменных. Инструктор может также осуществлять мониторинг моделируемого ТП, включая доступ к параметрам любых физических потоков.

- Оценка действий оператора (мониторинг ключевых переменных ТП и вычисление оценочного критерия при выполнении оператором тренировочных упражнений).

- Протоколирование действий оператора и инструктора. Все действия инструктора и полевого оператора фиксируются в протоколе на инструкторской станции

- Тренинг без инструктора (возможность для оператора практиковаться в выполнении процедур, следуя заранее созданным сценариям). Этот режим используется в основном для разучивания оператором длительных стандартных процедур управления (пуск, переход с режима на режим, плановый останов), не требующих постоянного присутствия инструктора.

Развитие тренажерного комплекса

Удачный старт тренажерного проекта еще не означает его эффективного использования в течение всего жизненного цикла тренажера. С целью поддержания и развития его высоких потребительских свойств уже проводятся и планируются следующие мероприятия.

- Постоянное отслеживание и реализация изменений, необходимость которых выявляется при эксплуатации тренажера. В начальный период - это исправление неточностей модели или конфигурации РСУ, обнаруживаемых при интенсивном использовании, а далее – поддержание состояния конфигурации модели и РСУ в тренажере адекватным изменениям в реальной системе управления.

- Расширение методической базы тренажера может быть осуществлено с помощью специальных средств предтренажерной подготовки. Компания Honeywell располагает автоматизированными системами обучения персонала, ориентированными на такую подготовку. Система АФОН предназначена для выработки у оператора навыков базового управления процессом и реализует две методики обучения: прогнозирование последствий

наступивших событий (*Что произойдет, если...?*) и генерация возможных причин наблюдаемых отклонений. Система ДИАГНОСТ ориентирована на формирование навыка диагностирования причин нарушений хода ТП путем выбора эффективных информационных запросов о его состоянии. Обе системы основаны на базе знаний о причинно-следственных связях в ТП, легко пополняемой Пользователем и служащей, таким образом, эффективным хранилищем реального опыта, накапливаемого на предприятии.

- Наряду с отработкой аварийных ситуаций непосредственно на тренажере необходимы специализированные средства для изучения Планов локализации аварийных ситуаций (далее – ПЛАС). Разработка компании Honeywell (система ПЛАС+) сочетает электронный учебник и редактор ПЛАС с эксклюзивной компьютерной методикой обучения, основанной на создании оператором элементов ПЛАС в режимах тренировки и экзамена. Данную и описанные выше автоматизированные системы обучения предлагается использовать совместно с тренажерным комплексом.

- Чрезвычайно важным усилением компьютерного тренинга является синхронизация состояния тренажерной модели с текущим состоянием моделируемого ТП. При этом появляется возможность проводить обучение в условиях, приближенных к текущему режиму ТП, демонстрировать обучаемому «историю» ведения процесса, анализировать и сравнивать альтернативные способы управления. У компании Honeywell имеется система ProcessSync, решающая такие задачи и проверенная во множестве тренажерных проектов. Эта система получает информацию о состоянии моделируемого объекта от реальной РСУ, специальным конфигурируемым образом обрабатывает ее и переводит состояние модели в требуемое. Кроме описанных выше «учебных» функций ProcessSync может быть использован инженерным персоналом для анализа нештатных ситуаций на модели и выработки правильной последовательности действий операторов в подобных ситуациях.

Заключение

Представленный тренажерный комплекс стал одним из первых полномасштабных тренажеров от мирового производителя, внедренных в странах бывшего СССР, и одним из первых полномасштабных тренажеров для установок производства аммиака. Успешная реализация этого проекта позволило расширить опыт моделирования ТП и внедрения тренажерных систем в практику обучения, имеющийся у команды разработчиков из отдела систем компьютерного обучения компании Honeywell, на новые технологические процессы. Ведь не секрет, что основной составляющей проекта по внедрению компьютерного тренажера является собственно разработка модели.

Не случайно в этой связи продолжение силами компании Honeywell аналогичных работ для предприятий производства аммиака в г.Черкассы (Украина), г.Антверпен (Бельгия) и г. Череповец (Россия).

- 1) Дозорцев В.М., Владов Р.А., Федоренко Д.Ю., Янишпольский В.В. Компьютерный тренажер для обучения операторов установки производства аммиака Одесского припортового завода // Химическая техника. – 2007. - №2. - С. 18-23.
- 2) Назин Р.А. Автоматизированные системы обучения персонала технологических установок // Автоматизация в промышленности. – 2006. - №6. - С. 10-14.
- 3) Дозорцев В.М., Кнеллер Д.В. Технологические компьютерные тренажеры: все что вы всегда хотели знать // Промышленные АСУ и контроллеры. – 2004. - №12. - С. 1-13.
- 4) Дозорцев В.М. ДИАГОСТ: Автоматизированная система тренинга эффективных стратегий принятия операторских решений // Автоматизация в промышленности. – 2003. - №7. - С. 24-29.

МОДИФИКАЦИИ ИГРОВЫХ КРИТЕРИЕВ ОПТИМАЛЬНОСТИ НА ОСНОВЕ Л-КРИТЕРИЯ УДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНОСТИ

Лега Ю.Г., Златкин Артур А., Златкин Александр А.
Черкасский государственный технологический университет, chemistry2007@mail.ru

Целью данной работы является расширение функциональных возможностей игровых критериев оптимальности для применения при принятии удовлетворительных решений в сложных процессах дискретного управления, возмущенных неопределенным параметром.

Анализируются крайне пессимистические минимаксные и максиминные игровые критерии оптимальности Вальда и Сэвиджа в терминах выигрыш и рисков соответственно, критерии оптимальности крайнего оптимизма в тех же терминах и критерий оптимальности пессимизма-оптимизма Гурвица, объединяющий крайне пессимистические и крайне оптимистические критерии путем введения коэффициента χ , $0 \leq \chi \leq 1$, так, что при $\chi = 1$ критерий Гурвица вырождается в критерий Вальда или Сэвиджа, а при $\chi = 0$ – в критерий крайнего оптимизма.

Все перечисленные критерии анализируются применительно к решению класса задач игры с природой т.е. неантагонистической игры с учетом неопределенного возмущающего фактора при принятии решений в процессах дискретного управления. При этом предполагается, что неопределенный возмущающий параметр $w \in W$, где W - множество неопределенностей, изменяется в предполагаемом диапазоне и принимает в нем ряд предполагаемых значений x_0^j , $j = 1, 2, \dots, n$, где $w_j = x_0^j$ может быть, например, начальным состоянием дискретного процесса, изменяющегося по закону.

$$x_{k+1} = f(x_k, y_k), k = 0, 1, \dots, N-1; i \text{ .н. } x_0^j, j = 1, 2, \dots, n.$$

Для входного сигнала y_k задается допустимая область Y_k , $y_k \in Y_k, k = 0, 1, \dots, N-1$, и разыскивается не максимум I^* критериальной функции выигрыша I , а потеря выигрыша, т.е. риск $r = I^* - \bar{I}$, определяемый Л-критерием удовлетворительности, предложенным проф. Легой Ю.Г. [2].

$$\bar{E} = I^* - \bar{I} \leq \varepsilon(\bar{y}_j, x_0^j), j = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n,$$

где вектор \bar{y}_i – принятое решение, обусловливающее в силу его неоптимальности потерю выигрыша и $\bar{y} \neq y^*$.

Величина ε -окрестности вычисляется на основе дискретного принципа максимума Понтрягина [3] по формуле для соответствующих векторов управляющей переменной $\bar{y}_i = (\bar{y}_{i0}, \dots, \bar{y}_{i,N-1})$, переменной состояния \bar{x} и двойственной (сопряженной) переменной \bar{p} , входящих в функцию Гамильтона H , т.е.

$$\varepsilon(\bar{y}_i, x_0^j) = \sum_{k=0}^{N-1} \max_{y_k \in Y_k} [H(\bar{p}_{k+1}, \bar{x}_k, y_k) - H(\bar{p}_{k+1}, \bar{x}_k, \bar{y}_k)].$$

Здесь $H(\bar{p}_{k+1}, \bar{x}_k, \bar{y}_k) = \langle \bar{p}_{k+1}, f(\bar{x}_k, \bar{y}_k) \rangle$, $k = 0, 1, \dots, N-1$, $\bar{p}_k \left[\frac{\partial f(\bar{x}_k, \bar{y}_k)}{\partial x_k} \right]^{\dot{\omega}} \bar{p}_{k+1}$, $k = N-1, \dots, 1$, при

известном конечном граничном значении \bar{p}_N двойственной переменной \bar{p}_{k+1} , входящей в скалярное произведение, обозначенное скобками $\langle \cdot \rangle$ и индекс « $\dot{\omega}$ » указывает на транспонирование матрицы в квадратных скобках.

Если игровая матрица выигрышней с элементами I_i^j , $i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n$, содержит седловую точку и в ней выполняется условие

$$\min_j \max_i I_i^j = \max_i \min_j I_i^j = I^*, i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n,$$

то точка оптимума I^* будет соответствовать наименьшему при изменении j значению среди максимумов по i столбцов матрицы. [1] В этом случае \ddot{E} -критерий удовлетворительности модифицируется в виде критерия \ddot{E}_1 , равного выражению

$$\begin{aligned} \ddot{E}_1 &= I^* - \bar{I} = \min_j \max_i I_i^j - \bar{I}_i^{j*} = I_{i\max}^{j\min} - \bar{I}_i^{j\min} = \\ &= I_{j\min, i\max} - \bar{I}_i^{j\min} \leq \varepsilon^1(\bar{y}_i, x_0^{j*}) = \varepsilon^1(\bar{y}_i, x_0^{j\min}), i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n, \end{aligned}$$

где $I^* = \min_j \max_i I_i^j = I_{i\max}^{j\min} = I_{j\min, i\max}$; $\bar{I}_i^{j*} = \bar{I}_i^{j\min}$; $x_0^{j*} = x_0^{j\min}$.

Следовательно, здесь индекс j^* определяет предполагаемое начальное состояние $x_0^{j^*}$, при котором достигается минимаксная точка оптимума I^* , т.е. наименьшее по j значение выигрыша среди максимумов выигрышней по i (среди максимумов столбцов матрицы), а индекс i характеризует величину отклоненного от точки оптимума выигрыша \bar{I}_i^{j*} в силу принятого неоптимального решения $\bar{y}_i \neq y_i^*$ в столбце $x_0^j = x_0^{j*} = x_0^{j\min}$.

Эта модификация Л-критерия удовлетворительности является крайне пессимистической, т.к. опирается на крайне пессимистический минимаксный критерий Вальда [1]

$$W = \min_j \max_i I_i^j, i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n.$$

Противоположным является крайне оптимистический Л-критерий удовлетворительности \ddot{E}_2 вида [2]

$$\begin{aligned} \ddot{E}_2 &= I^* - \bar{I} = \max_j \max_i I_i^j - \bar{I}_i^{j*} = I_{i\max}^{j\max} - \bar{I}_i^{j\max} = \\ &= I_{j\max, i\max} - \bar{I}_i^{j\max} \leq \varepsilon^0(\bar{y}_i, x_0^{j*}) = \varepsilon^0(\bar{y}_i, x_0^{j\max}), i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n, \end{aligned}$$

где $I^* = \max_j \max_i I_i^j = I_{i\max}^{j\max} = I_{j\max, i\max}$; $\bar{I}_i^{j*} = \bar{I}_i^{j\max}$; $x_0^{j*} = x_0^{j\max}$.

Очевидно, здесь индекс j^* определяет то начальное состояние $x_0^{j^*}$, при котором достигается уже не минимаксная, а максимаксная точка оптимума I^* , т.е. наибольшее по j значение выигрыша среди максимумов выигрышней по i (среди максимумов столбцов матрицы). При этом индекс i характеризует отклоненное от точки максимаксного выигрыша I^* значение выигрыша $\bar{I}_i^{j*} = \bar{I}_i^{j\max}$ в силу принятого неоптимального решения $\bar{y} \neq y_i^*$ в столбце $x_0^{j*} = x_0^{j\max}$

Крайне оптимистическая модификация Л-критерия удовлетворительности опирается соответственно на крайне оптимистический максимаксный критерий оптимальности вида

$$V_{j\max, i\max} = \max_j \max_i I_i^j, i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n.$$

Промежуточной между модификациями \ddot{E}_1 и \ddot{E}_2 является модификация \ddot{E} -критерия удовлетворительности \ddot{E}_3 вида

$$\begin{aligned}\ddot{E}_3 &= \chi \ddot{E}_1 + (1-\chi) \ddot{E}_2 = \chi \left(\min_j \max_i I_i^j - \bar{I}_i^{j\min} \right) + (1-\chi) \left(\max_j \max_i I_i^j - \bar{I}_i^{j\max} \right) \leq \\ &\leq \varepsilon^\chi \left(\bar{y}_i, x_0^j \right), i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n; 0 \leq \chi \leq 1.\end{aligned}$$

Очевидно: при $\chi = 1$ получим $\ddot{E}_3 = \ddot{E}_1$ и $\varepsilon^\chi \left(\bar{y}_i, x_0^j \right) = \varepsilon^1 \left(\bar{y}_i, x_0^{j\min} \right)$,
при $\chi = 0$ будет $\ddot{E}_3 = \ddot{E}_2$ и $\varepsilon^\chi \left(\bar{y}_i, x_0^j \right) = \varepsilon^0 \left(\bar{y}_i, x_0^{j\max} \right)$.

Следовательно, промежуточная модификация Л-критерия удовлетворительности \ddot{E}_3 является критерием пессимизма-оптимизма и опирается соответственно на критерий оптимальности пессимизма-оптимизма Гурвица (\tilde{A} – критерий) вида [1]

$$\tilde{A} = \chi \min_j \max_i I_i^j + (1-\chi) \max_j \max_i I_i^j$$

Последний при $\chi = 1$ преобразуется в минимаксный критерий Вальда, а при $\chi = 0$ – в максимаксный критерий оптимальности.

Рассмотренные модификации Л-критериев удовлетворительности и соответствующих им критериев оптимальности получены на основе игровой матрицы выигрышей, но могут быть составлены в терминах матрицы рисков.

Выводы

Сравнивая полученные модификации Л-критерия удовлетворительности с соответствующими критериями оптимальности легко видеть их отличия, обусловленные расширением области принятия оптимальных решений до границ принятия удовлетворительных решений в пределах ε -окрестности точки оптимума.

Этот основной результат на практике часто оказывается целесообразнее поиска оптимального решения в условиях неопределенности по возмущающему параметру, т.к. при принятии удовлетворительных решений нет необходимости в обеспечении минимального риска, когда достаточно, чтобы он был ограничен менее жестко в пределах здравого смысла (в удовлетворительных пределах). «Погоня» за оптимумом (максимумом или минимумом критериальной функции) не всегда оправдана, если имеется возможность «не тратить много сил» и средств и удовлетвориться достигнутым результатом в пределах ε -окрестности точки оптимума.

На примере конструирования Л-критерия удовлетворительности и его модификаций показано, как можно расширить функциональные возможности классических критериев оптимальности Вальда, Сэвиджа, Гурвица и распространить модификации этих критериев в виде соответствующих модификаций Л-критерия удовлетворительности на класс задач принятия решений в условиях неопределенности по возмущающему параметру (класс задач игры с природой).

- 1) Зайченко Ю.П. Исследование операций. – К.: Издательский дом «Слово», 2003. – 685 с.
- 2) Лега Ю.Г., Златкин А.А. Построение Л-критериев и их применение в задачах принятия удовлетворительных решений в неопределенных условиях // Вісник Черкаського державного технологічного університету. – 2007. – №1. – С.81-86.
- 3) Понtryagin L.S., Boltyanskij V.G., Gamkrelidze R.B., Miщенко E.F. Математическая теория оптимальных процессов. – М.: Наука, 1969. – 384с.

МОДЕЛЬ ПРОЦЕССОВ КАРБОНИЗАЦИИ УГЛЕРОД-УГЛЕРОДНОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА

Карпенко А.В., Скачков В.А., Грицай В.П., *Фильченков А.С.
Запорожская государственная инженерная академия, colourmet@zgia.zp.ua
*ОАО «Запорожский механический завод»,

Применение углерод-углеродного композиционного материала (УУКМ) с низкой плотностью (до 0,2 г/см³), термической устойчивостью до 3000 °C и теплопроводностью до 0,4 Вт/(м·К) позволяет в 2...5 раз снизить тепловые потери электровакуумных печей по сравнению с агрегатами, оснащенными экранной теплоизоляцией на основе тугоплавких металлов.

Проблема формирования карбонизованных углеродных композиционных материалов с заданной структурой и физико-механическими свойствами является актуальной, а методы расчета технологических режимов таких материалов представляют несомненный научный интерес.

В процессе карбонизации углеродных композитов происходят сложные физико-химические преобразования всех компонентов композиционного материала. При этом выделяются летучие газообразные вещества различного состава и реализуются процессы термохимической усадки, температурного расширения и порообразования. Такое многообразие процессов обуславливает образование микротрещин, микропор и формирование поля структурных напряжений.

Для расчета данных процессов возможно использование методов микромеханики композитов [1]. При этом классические подходы микромеханики композитов дополняются учетом процессов разрушения и изменения свойств компонентов, как в результате механических нагрузок, так и температурного воздействия [2].

Моделирование процесса карбонизации базируется на представлении углеродных композиционных материалов микронеоднородной средой класса В₂. Для модельной среды с изменяемыми свойствами в процессе термообработки физические уравнения могут быть представлены в следующем виде:

$$\xi_{ij} = \sum_{k=1}^N Q_{ij\alpha\beta}^k \cdot (1 - \omega^k) \cdot \lambda_k \cdot \left[\varepsilon_{\alpha\beta} - \sum_{k=1}^N b_{\alpha\beta}^k \cdot (1 - \psi^k) \cdot \lambda_k \cdot \Delta T \right], \quad (1)$$

где ξ_{ij} , ε_{ij} – микроструктурные напряжения и деформации соответственно; Q_{ijmn}^k – случайные модули упругости k -того компонента углеродного композиционного материала при температуре T ; ω^k – случайные термоструктурные функции, которые устанавливают зависимость упругих свойств компонентов композиционного материала от степени структурных преобразований при температуре T ; b_{ij}^k - случайные коэффициенты термического расширения k -того компонента; ψ^k – случайные термоусадочные функции, которые устанавливают зависимость термической усадки k -того компонента от температуры карбонизации; T – температура процесса; N – количество компонентов в углеродном композиционном материале; λ^k – случайная индикаторная функция. В (1) и далее по повторяющимся индексам производится суммирование от 1 до 3.

В настоящей работе для уравнения (1) разработана методика построения случайных термоструктурных функций ω^k , которая представляется в виде произведения двух случайных функций, одна из которых характеризует процесс дефектообразования, вторая – изменение упругих характеристик компонентов углеродного композиционного материала при температуре процесса.

Определение параметров случайных термоструктурных функций Ψ^k базируется на расчетно-экспериментальном методе.

Для оценки изменения свойств в процессе карбонизации композиционных материалов строится математическая модель процесса карбонизации. Модель основана на решении статистической краевой задачи микромеханики композиционных материалов, которая позволяет определять микроструктурные напряжения и оценивать уровень микроструктурных преобразований, изменение упругих свойств и коэффициентов термохимической усадки в компонентах композиционного материала (углеродных волокнах, порообразователях и матрице).

Статистическая краевая задача включает уравнение (1) дополненное уравнениями равновесия, геометрическим соотношением и граничными условиями:

$$\xi_{i\alpha,\alpha} = 0, \quad (2)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (\chi_{i,j} - \chi_{j,i}), \quad (3)$$

$$\chi_i|_s = 0, \quad (4)$$

где ξ_{ijk} , ε_{ij} - микроструктурные напряжения и деформации соответственно; χ_i - вектор случайных микроструктурных перемещений.

Решение задачи (1)...(4) относительно флуктуаций микронапряжений запишется в виде:

$$\begin{aligned} \zeta_{ij}^0 &= \sum_{k=1}^N \theta_{ij\alpha\beta}^{0,k} (1-\omega^k) \left[\lambda^k e_{\alpha\beta} + e_{\alpha\beta}^0 \cdot \sum_{k=1}^K b_{\alpha\beta}^k (1-\psi^k) \lambda^k \cdot \Delta T \right] - \\ &- \sum_{i=1}^N C_{ij\alpha\beta}^k \cdot \omega^k \cdot \lambda^k \left[e_{\alpha\beta}^0 + e_{\alpha\beta}^0 \cdot \sum_{k=1}^N b_{\alpha\beta}^k (1-\psi^k) \cdot \lambda^k \cdot \Delta T \right] \end{aligned} \quad (5)$$

Представленная модель позволяет с использованием специально разработанной программы осуществлять на ПК выбор и обработку экспериментальных данных, определять средние значения и дисперсии микронапряжений в компонентах углеродных композиционных материалов, выполнять оценку поврежденности компонентов, оценивать изменение упругих свойств, коэффициентов термохимической усадки и линейного термического расширения композита для произвольных температур карбонизации углеродных композиционных материалов в зависимости от уровня действующей температуры.

- 1) Волков С.Д., Ставров В.П. Статистическая механика композитных материалов. Минск: БГУ. 1978. 206с.
- 2) Соколкин В.А., Скачков В.А., Танкеева М.Г., Исследование процессов деформирования и разрушения композиционных материалов и конструкций при сложном нагруженном состоянии // Механика конструкций из композиционных материалов. Новосибирск: Наука. 1984. с.97-101.

КОМПЬЮТЕРНАЯ ПОДДЕРЖКА ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЯ ПРИ ВЫБОРЕ СОСТАВА ХИМИЧЕСКОГО ПРЕПАРАТА

Кочкарев Ю.А., *Осипенкова И.И.

Черкасский инженерно-научный центр, ЧДТУ, chemistry2007@mail.ru

*Черкасский государственный технологический университет

Специалистам приходится принимать решение при разработке химических препаратов на различных этапах:

- на стадии разработки рецептуры – при выборе компонентов препарата;
- на стадии организации производства – при выборе поставщиков компонентов;
- на стадии организации сбыта- при выборе партнеров.
- формирования набора критериев (K) - параметров, факторов, обстоятельств, условий и т.п.
- формирования множества A .

Все принимаемые решения можно условно разделить на повторяющиеся и уникальные. Оптимизации повторяющихся решений посвящено большое количество работ по исследованию операций. Методы поддержки принятия решений, обсуждаемые в данной работе, рассчитаны на помочь в принятии уникальных решений.

Практически все операции принятия решения сводятся к выбору наиболее приемлемого варианта из некоторого конечного множества альтернатив (A), представляющих множество Парето, т.е. множества, из которого нельзя исключить априорно никакую A без возможной потери оптимального варианта. Таким образом, принятие решений (ПР) по существу есть не что иное, как выбор, состоящий из этапов:

Наиболее известный метод упорядочения A по выбранному множеству критериев представляет собой взвешенную сумму, т.е скалярное произведение вектора весовых коэффициентов критериев на вектор оценок A по этим критериям.

К сожалению, эта схема, имеет ряд недостатков.

В [1] строго доказано, что взвешенная сумма корректна только тогда, когда все критерии попарно независимы по предпочтению. Кроме того, указанная сумма основана на неявном постулате: "низкая оценка по одному критерию может быть компенсирована высокой оценкой по другому". Однако, этот постулат верен отнюдь не для всех моделей сравнительной оценки "качества". Простейший пример – ухудшение качества стирки не может быть компенсировано улучшением цены стирального состава. Кроме того, сами веса критериев являются непростой самостоятельной проблемой многокритериального упорядочения A , так как эксперт или ЛПР не всегда способен непосредственно назначать критериям корректные численные веса.

В настоящее время наиболее развитым подходом к решению задачи ПР является метод анализа иерархий (МАИ) [2]. В нем используется нижеприведенная унифицированная шкала предпочтений при попарном сравнении, как для альтернатив, так и для критериев:

- 1 - альтернативы (критерии) A и B равнозначны;
- 3 - незначительное преимущество A над B ;
- 5 - заметное преимущество A над B ;
- 7 - значительное преимущество A над B ;
- 9 - подавляющее преимущество A над B .

Для обозначения промежуточных уровней преимущества используются также четные числа. В случае преимущества альтернативы (критерия) B над A используются обратные величины.

Решение задачи ПР с помощью МАИ и с использованием указанной шкалы предпочтений состоит из следующих этапов:

- формулировка цели, отбор для анализа N критериев и M альтернатив;
- формирование и обработка матрицы сравнения критериев размером $N \times N$, в результате которой определяются нормированные (от 0 до 1) весовые коэффициенты критериев W_1, W_2, \dots, W_n ;

- формирование и обработка N матриц размером $M \times M$ сравнения альтернатив по каждому критерию, в результате которой определяются также нормированные оценки X_{ij} альтернативы A_i по критерию K_j ;

- вычисление взвешенных сумм, т.е скалярных произведений вектора весовых коэффициентов критериев W на векторы оценок альтернатив.

Принятие решения осуществляется путем выбора альтернативы с наилучшей взвешенной суммой.

Достоинством МАИ является единобразность подхода для решения самых разнообразных задач ПР, а также единый алгоритм для структурирования множества как критериев, так и альтернатив.

В работе приводится описание программного инструментального пакета **OZB** для компьютерной поддержки принятия решений в области химических технологий, разработанного в порядке сотрудничества между Черкасским инженерно-научным центром и кафедрой общей химии ЧДТУ.

Использование **OZB** позволяет обеспечить ПР при производстве химических препаратов на всех этапах жизненного цикла изделия – разработке, собственно производстве, сбыте, модернизации, утилизации даже уничтожении препарата. Важно отметить, что пакет **OZB** обеспечивает единобразный, легко осваиваемый подход для различных задач ПР, причем не только в области химических технологий.

- 1) Кини Р.Л., Райфа Х. Принятие решений при многих критериях: предпочтения и замещения. - М.: Радио и связь, 1981.
- 2) Саати Т., Кернс К. Аналитическое планирование. Организация систем. Пер с англ. "Радио и связь", 1991.

РАСЧЕТ ГИДРАВЛИЧЕСКИХ СЕТЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА НЕЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

Медведева В.Н., Щербашин Ю.Д., Котлинская Н.С.

Национальный технический университет Украины «КПИ», vnm@aprodos.ntu-kpi.kiev.ua

В работе [1] предложен метод решения задач нелинейного программирования, покрывающий достаточно представительный класс практических задач оптимального проектирования и оптимального управления в энергетике, химической технологии, нефтепереработке и т.п. В данной работе рассматривается более детализированный и упрощенный вариант алгоритма [1].

1. Постановка задачи. Во многих практических приложениях общая задача математического программирования может быть сформулирована следующим образом.

$$\text{Найти } \mathbf{X}^* = \arg\max(\varphi_0(\mathbf{X})), \quad \mathbf{X} \in \Omega \subset E_n, \quad (1)$$

если область допустимых решений Ω определяется системой ограничений:

$$y_i \equiv a_i X + b_i = 0, \quad i \in \{1..m\}, \quad (2)$$

$$z_i \equiv \varphi_i(X) = 0, \quad i \in \{1..c\}, \quad (3)$$

$$v'_i \equiv x_i - X_i^{\min} \geq 0, \quad i \in \{1..n\}, \quad (4)$$

$$v''_i \equiv -x_i + X_i^{\max} \geq 0, \quad i \in \{1..n\}, \quad (5)$$

где: $X = \text{col}\{x_j, j=1..n\}$ – вектор искомых переменных, $\varphi_0(X)$ – максимизируемая функция цели, y_i, z_i – уклонение [2] в точке X от i -ой ограничивающей (гипер)плоскости из числа (2) ограничивающей поверхности $\varphi_i(X) = 0$, a_i – вектор-строка (нормаль) i -ой ограничивающей

плоскости общего положения, b_i - свободный член – смещение i -ой плоскости относительно начала координат, $\varphi_i(X)$ - i -ое нелинейное ограничение-равенство, $X_i^{\min}(X_i^{\max})$ – нижняя (верхняя) граница допустимого изменения искомой переменной x_i , v_i' (v_i'') – уклонение в точке X от нижней (верхней) границы изменения переменной x_i ,

Задачи (1)-(5) встречаются при расчете гидравлических, электрических многоконтурных сетей, при оптимизации технологических процессов, оптимальном проектировании технологических аппаратов и т.п. Их характерной особенностью является ограниченная с двух сторон область изменения искомых переменных (4),(5), наличие линейных ограничений-равенств общего вида (2) - например, уравнений материального или теплового баланса в аппаратах технологического процесса, а также нелинейных ограничений-равенств (3), описывающих функциональные зависимости между искомыми переменными. Функция цели $\varphi_0(X)$ может быть нелинейной или линейной.

2. Общее описание алгоритма. Геометрическая интерпретация процесса решения задачи – это движение изображающей точки $X^{(k)}$ в n -мерном евклидовом пространстве E_n :

$$X^{(k+1)} \equiv X^{(k)} + \Delta X^{(k)} = X^{(k)} + \lambda^{(k)} \sigma^{(k)}, \quad (6)$$

где: $\sigma^{(k)}$ - луч, исходящий из $X^{(k)}$, движение вдоль которого не нарушает немедленно удовлетворенные в $X^{(k)}$ равенства из (2),(3), $\lambda^{(k)} > 0$ - длина шага вдоль $\sigma^{(k)}$.

По сравнению с $X^{(k)}$ точка $X^{(k+1)}$ должна либо уменьшить (ликвидировать) невязку одного из неудовлетворенных в $X^{(k)}$ равенств при сохранении ранее удовлетворенных равенств, либо (при нахождении $X^{(k)}$ в области допустимых решений Ω) улучшить функцию цели (1). Рассматриваемый метод относится к классу методов аппроксимирующего программирования. Как и в линейном программировании, здесь на каждой итерации определяется набор из n эффективных (имеющих нулевые уклонения) ограничивающих плоскостей, образующих базисный конус. Однако, в отличие от симплексных методов (движения по одному из ребер базисного конуса), метод [1] допускает также движение "внутрь" многогранника за счет одновременного изменения нескольких уклонений.

В качестве начального приближения искомых переменных принимается их нижняя граница: $X^{(0)} = \text{col}(X_1^{\min}, \dots, X_n^{\min})$, а в качестве базисных переменных – уклонения v_j' , $j=1, \dots, n$. Решение разбивается на 2 этапа: Этап I - последовательное введение в базис уклонений v_i , $i=1, \dots, m$ и удержание их в базисе до конца решения задачи; Этап II - аппроксимация нового эффективного в текущей точке нелинейного ограничения-равенства $\varphi_p(X^{(k)})=0$; введение в базис z_p вместо z_s , для которого $\varphi_s(X)$ в текущей точке $X^{(k)}$ стало ненулевым ($|\varphi_s(X^{(k)})| > \varepsilon_s$), или вместо $v_s'(v_s'')$, по которому уклонялись.

На рис.1 приведен пример решения по предлагаемому алгоритму двумерной задачи оптимизации $x_1 \rightarrow \max$ при наличии одного нелинейного ограничения-равенства $\varphi_1(X)=0$ и двух двусторонних тривиальных ограничений-неравенств: $0 \leq x_1 \leq X_1^{\max}$, $0 \leq x_2 \leq X_2^{\max}$.

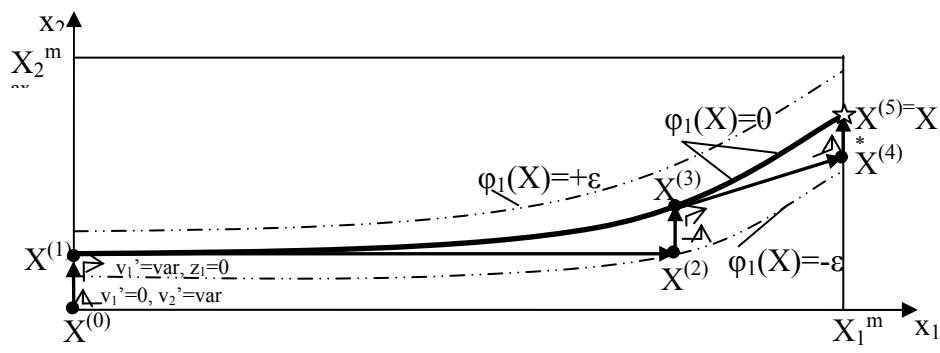


Рис. 1.

Процесс решения задачи начинается из точки $\mathbf{X}^{(0)}$. Нормали начального базисного конуса соответствуют координатным осям (показаны малыми стрелками). Этап I здесь отсутствует, поскольку нет линейных ограничений-равенств. В точке $\mathbf{X}^{(0)}$ значение функции $\varphi_1(\mathbf{X})$, выходит за рамки инженерной точности: $z_i < (-\varepsilon_i)$. Для устранения невязки выполняем следующие действия:

- 1) В точке $\mathbf{X}^{(0)}$ вычисляем градиент для $\varphi_1(\mathbf{X})$ и находим наибольший положительный коэффициент, в данном случае – это $\partial \varphi_1(\mathbf{X}) / \partial x_2$.
- 2) Движемся вдоль ребра $x_1=0$ до встречи с поверхностью $\varphi_1(\mathbf{X})=0$ (точка $\mathbf{X}^{(1)}$).
- 3) В новой точке уточняем градиент, вводим в базис z_1 и исключаем из базиса v_2' , выполняя над обратной матрицей G необходимые жордановы преобразования. Таким образом, вектор уклонений от базисных плоскостей $\mathbf{V}^{(1)} = \text{col}(v_1', z_1)$.

Точка $\mathbf{X}^{(1)}$ принадлежит области допустимых решений Ω , поэтому начинаем улучшать функцию цели. Поскольку $z_1=0$, уклоняться можем только изменения v_1' в положительную сторону. В результате попадаем в точку $\mathbf{X}^{(2)}$, где $\varphi_1(\mathbf{X})$ вновь нарушено. Оставаясь в том же базисе, движемся по ребру $v_1'=\text{const}$, $z_1=\text{var}$ – направлению наиболее быстрого устранения невязки z_1 . В $\mathbf{X}^{(2)}$ изображающая точка отошла от границ тривиальных ограничений, поэтому можно снять ограничения на знак изменения базисных переменных $\Delta v_1'$, $\Delta v_2'$. Из точки $\mathbf{X}^{(3)}$, где $\mathbf{V}^{(3)} = \text{col}(v_1', z_1)$, движемся по ребру $v_1'=\text{var}$, $z_1=0$ до встречи с верхней границей x_1 . Из $\mathbf{X}^{(4)}$, где $\mathbf{V}^{(4)} = \text{col}(v_1'', v_2')$, движемся по ребру $v_1''=0$, $v_2'=\text{var}$ до встречи с поверхностью $\varphi_1(\mathbf{X})=0$. Точка $\mathbf{X}^{(5)}$ является точкой оптимума, поскольку $\mathbf{X}^{(5)} \in \Omega$ и функция цели достигла максимального значения.

3. Контроль уклонений от эффективных ограничений. Направление $\sigma^{(k)}$ должно быть выбрано таким образом, чтобы вдоль него уменьшалась невязка неудовлетворенного в $\mathbf{X}^{(k)}$ равенства из числа (2),(3) или улучшалась функция цели.

Для определения $\sigma^{(k)}$ используем в качестве базиса независимых переменных уклонения от эффективных ограничивающих плоскостей. Исходная задача (1)-(5) в качестве базиса имеет координаты x_1, \dots, x_n искомых переменных, а в качестве зависимых от базиса величин – уклонения y_i, z_i, v_j', v_j'' . Задача состоит в алгебраическом преобразовании, где зависимыми переменными становятся x_1, \dots, x_n , а независимыми (базисными) – п уклонений из перечисленных выше:

$$\mathbf{X} = G * \mathbf{Y}_B + \mathbf{b}.$$

Здесь: $\mathbf{X} = \text{col}\{x_j, j=1..n\}$ – вектор искомых переменных, G - обратная матрица размерности $n \times n$ зависимости искомых переменных от уклонений от ограничивающих плоскостей текущего базисного конуса, $\mathbf{Y}_B = \text{col}\{y_i, z_i, v_j', v_j''\}$ – n -мерный вектор уклонений от плоскостей текущего базиса, $\mathbf{b} = \mathbf{X}$ – вектор свободных членов – вершина базисного конуса.

На этапе I необходимо последовательно в цикле ввести в базис y_1, \dots, y_n (соответственно изменения матрицу G и вектор \mathbf{b}). По окончанию цикла обратная матрица имеет структуру: $G = (L, H, \mathbf{b})$, а вектор искомых переменных

$$\mathbf{X} = L * \mathbf{Y} + H * \mathbf{V} + \mathbf{b}, \quad (7)$$

где: $\mathbf{Y} = \text{col}(y_1, y_2, \dots, y_m)$ – m -мерный вектор уклонений от плоскостей-линейных ограничений (2), $\mathbf{V} = \text{col}\{v_j', v_j''\}$ – $(n-m)$ -мерный вектор уклонений от базисных тривиальных плоскостей, \mathbf{b} – вектор свободных членов – вершина базисного конуса, L, H – подматрицы обратной матрицы G размерности $n \times m$ и $n \times (n-m)$ соответственно.

Из (7) следует, что в момент окончания этапа I изображающая точка $\mathbf{X}^{(m)}$ - вершина базисного конуса, равна \mathbf{b} . Используем $\mathbf{X}^{(0)} = \mathbf{b}$ как начальную точку для этапа II, где вычисления будем производить в приращениях в соответствии с алгоритмом (6). Поскольку на этапе II линейные ограничения-равенства (2) никогда не выходят из базиса, т.е. $\mathbf{Y} = \mathbf{0}$ до

конца решения задачи, то в дальнейшем можно оперировать только уклонениями \mathbf{V} и их приращениями $\Delta\mathbf{V}$. При этом приращение вектора неизвестных

$$\Delta\mathbf{X} = \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{H}^* \Delta\mathbf{V}.$$

4. Определение длины шага. Длина допустимого шага $\lambda^{(k)}$ определяется соответственно одному из условий: 1) достигнута гиперповерхность р-го нарушенного в $\mathbf{X}^{(k)}$ равенства $\varphi_p(\mathbf{X})=0$, 2) нарушена инженерная точность $\pm\epsilon_s$ удовлетворенного в $\mathbf{X}^{(k)}$ равенства $\varphi_s(\mathbf{X})=0$, 3) достигнут экстремум функции цели вдоль луча $\boldsymbol{\sigma}^{(k)}$.

Таким образом:

$$\lambda = \min \{\lambda', \lambda'', \lambda'''\},$$

где: $\lambda' = \min \{\lambda'_j \mid \lambda_j > 0, j \notin B\}$ - длина шага до j-ой ограничивающей гиперплоскости тривиальных ограничений (4),(5)), не входящей в базис; $\lambda'' = \min \{\lambda''_i \mid \lambda_i > 0, i \in B\}$ - длина шага до возникновения невязок эффективных в X^t нелинейных базисных ограничений (3), превышающих инженерную точность; λ''' - длина шага до нарушенного ограничения $\varphi_p(X^{(t)})$ или до максимума $\varphi_0(X^{(t)})$ вдоль направления $\boldsymbol{\sigma}$. Причем, для вычисления λ'', λ''' будем использовать квадратичную аппроксимацию:

$$\Delta\varphi_i(X, \boldsymbol{\sigma}, \lambda) \approx \alpha_i \lambda + \beta_i \lambda^2, \quad (8)$$

где

$$\alpha_i = d\varphi_i / d\lambda \Big|_{X=X^{(t)}}, \quad \beta_i = 0.5 \cdot d^2\varphi_i / d\lambda^2 \Big|_{X=X^{(t)}}.$$

Как правило, методы, использующие квадратичную аппроксимацию нелинейностей $\varphi_i(X)$, требуют применения матрицы вторых производных (матрицы Гессе), что непомерно увеличивает объем вычислений на каждой итерации. Поскольку нам необходимо значение второй производной *только по направлению* $\boldsymbol{\sigma}$, эту трудность можно обойти, используя приближенное численное дифференцирование вдоль $\boldsymbol{\sigma}$ вместо аналитического расчета β_i . Таким образом, предлагаемый метод сочетает экономичность методов, использующих только первую производную, с «далнодействием» квадратичных методов. Предложенный метод может быть использован также для расчета установившихся режимов потокораспределения, например, в гидравлических сетях. При этом в качестве функции цели можно использовать одно из контурных уравнений

$$\varphi_0 \equiv -(\sum_{j=1}^m B_{cj} s_j x_j |x_j|)^2 \longrightarrow \max,$$

где: B – матрица контуров системы, s_j – гидравлическое сопротивление j-ой ветви схемы, x_j – неизвестный расход на ветви.

Таким методом был рассчитан фрагмент трубопровода ТЭЦ-5 (18 узлов, 24 ветви). Решение получено за 22 итерации (аналогичное решение получено методом поконтурной увязки перепадов давлений за 28 итераций). В целом, при расчета схем большой размерности данный метод сходится на 20-30% быстрее.

- 1) Щербашин Ю.Д. Метод решения задач нелинейного программирования с использованием базиса переменной размерности. // Проблемы управления и информатики. -2006.-№3.-С.27-36.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОИЗВОДСТВА АКРИЛОВЫХ КРАСОК

Медведев Р.Б., Оникиенко И.И.

Национальный технический университет Украины «КПИ», kxtp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Акриловые краски – это водная (чаще всего) взвесь полимерной смолы. Замечательная особенность такого состава в том, что в жидким виде они легко смываются водой. С другой стороны, после высыхания они становятся устойчивы к разным воздействиям. Они перестают быть растворимыми и прочно оседают практически на любой поверхности. Краски безвозвратно теряют свои свойства, если температура хранения опустится ниже нуля. После нанесения – им ничего не страшно. Хотя акриловые краски считаются универсальными – то есть подходящими для любой поверхности, для получения лучших результатов стоит подбирать краску специально адаптированную для той или иной цели. Это краски для стен, потолка, бумаги, дерева, бетона, в том числе для окрашенной поверхности; для стекла и керамики; витражные краски; для ткани [1].

Одни из основных свойств красок – это укрывистость и стойкость к мытью. Укрывистость – это способность пигмента или пигментированного лакокрасочного материала при равномерном нанесении на поверхность делать невидимым цвет последней или в случае нанесения на черно-белую поверхность уменьшать контрастность между черными и белыми участками поверхности вплоть до полного исчезновения разницы по светлоте между ними [1]. Стойкость к мытью (истиранию) – это свойство высохшей окрашенной поверхности хорошо переносить мытье при помощи щетки и моющего средства (поверхность не истирается) без изменения своих свойств [1].

В настоящее время существует проблема в получении новых рецепты акриловых красок с заранее заданными свойствами – укрывистость и стойкость к мытью. Предлагается комбинированная математическая модель, в которой наряду с классической статистической регрессионной моделью, также будет использоваться модель, содержащая экспертные оценки [2]. С помощью такой модели можно делать прогноз интересующих свойств.

В качестве факториальных признаков были взяты: x_1 – вода; x_2 – диспергатор; x_3 – гидроксиэтилцеллюлоза; x_4 – титановое белило; x_5 – тальк; x_6 – карбонат кальция; x_7 – функциональный наполнитель; x_8 – стерол-акриловая дисперсия; x_9 – синтетический загуститель.. Как результативные признаки рассматривались Y_1 – укрывистость и Y_2 – стойкость к мытью.

В результате расчетов получена модель вида (1):

$$Y_1 = 495.88q_1 + 4961q_2 + 3191.q_3 + 451.94q_4 + 462.9q_5 + 469.84q_6 + 426.29.29q_7 - 511.27q_8 - 3854.6q_9$$

Табличное значение критерия Фишера F_t для уровня значимости $q = 0.1$ и чисел степеней свободы $f_1 = 8$, $f_2 = 36$ равно 1,8841. Расчетное значение критерия Фишера $F_p = 2,551$. Вывод: так как $F_p > F_t$, модель адекватна.

В результате расчетов получена модель вида (2):

$$Y_2 = 16.528x_1 - 47.58x_2 - 29.518x_3 + 1.0179x_4 + 6.3453x_5 + 13.561x_6 + 5.5264x_7 - 32.356x_8 + 26.542x_9$$

Табличное значение критерия Фишера F_t для уровня значимости $q = 0.1$ и чисел степеней свободы $f_1 = 8$, $f_2 = 36$ равно 1,8841. Расчетное значение критерия Фишера $F_p = 4,9182$. Вывод: так как $F_p > F_t$, модель адекватна.

Данные модели получены с помощью программы STAT-SENS. [3] По этим моделям можно спрогнозировать такие свойства краски, как укрывистость (Y_1) и стойкость к мытью (Y_2), а также дает возможность получать новые рецепты с экономией времени и ресурсов.

- 1) Нельсон Р.Э. Что полиграфист должен знать о красках. 2005. – с. 57 – 69.
- 2) Орловский С.А. Проблемы принятия решений при нечеткой исходной информации. Наука, 1981. – с. 15 – 45.
- 3) Статюха Г.О., Петрань А.Г. Разработка компьютерной системы подготовки и обработка данных в пределах применения экспериментально-статистических методологий для химико-технологических систем. Наукові Вісті НТУУ «КПІ» №1, 2000. – с. 100-106.

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ НЕОРГАНИЧЕСКОГО СВЯЗУЮЩЕГО С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

Потяженко І.А., Телицына Н.Е., Бондаренко Е.С.

Национальный технический университет Украины «КПІ», natashakxtp@mail.ru

В производстве светотехнических изделий широкое применение находят порошкообразные материалы, предназначенные для образования люминофорных и эмиссионных покрытий, вакуум-плотных швов, геттеров, резисторов и других деталей источников света. Обычно эти материалы перерабатывают в виде паст и суспензий, необходимым компонентом которых является связующее.

В данном докладе рассмотрен процесс получения неорганического связующего – оксинаитрата алюминия – с заданными реологическими свойствами (максимальная адгезия к стеклу), а также нахождение оптимальных технологических условий его получения.

При исследовании процесса применялся метод центрального композиционного ротатабельного планирования (ЦКРП).

Согласно априорной информации и кинетическим исследованиям было решено, что существенное влияние на y_1 - выход оксинаитрата алюминия, %; y_2 - молекулярное соотношение $Al_2O_3:N_2O_3$ оказывают такие переменные - x_1 – температура процесса, $^{\circ}C$; x_2 – количество концентрированной азотной кислоты, мл; x_3 – количество гидроксида алюминия, мл; x_4 – время протекания химической реакции, мин.

Области изменения указанных факторов в планируемом эксперименте устанавливались исходя из технологических условий, с учетом возможностей аппаратуры и целей, преследуемых постановкой задачи.

В результате проведения активного эксперимента и статистической обработки экспериментальных данных и после отбраса незначимых коэффициентов, получены такие уравнения:

$$y_1 = 2,042 + 0,33 \cdot x_1 + 0,125 \cdot x_2 + 0,0583 \cdot x_3 + 0,1586 \cdot x_4 - 0,1875 \cdot x_1 x_2 - 0,1 \cdot x_1 x_3 + 0,0375 \cdot x_2 x_3 - 0,025 \cdot x_2 x_4 + 0,0625 \cdot x_3 x_4 - 0,0213 \cdot x_2^2 + 0,01636 \cdot x_3^2 + 0,02$$

$$y_2 = 80,371 + 1,937 \cdot x_1 - 0,0458 \cdot x_2 + 0,129 \cdot x_3 - 1,445 \cdot x_4 - 1,23 \cdot x_1 x_2 - 0,468 \cdot x_1 x_3 - 0,818 \cdot x_1 x_4 - 1,243 \cdot x_2 x_3 + 1,4 \cdot x_2 x_4 + 0,49 \cdot x_3 x_4 + 1,379 \cdot x_1^2 + 1,329 \cdot x_2^2 + 1,354 \cdot x_3^2 + 1,616 \cdot x_4^2$$

Так как качество исследуемого объекта оценивается не единственным критерием или показателем качества, а двумя, которые одинаково значимы, то такая постановка задачи приводит к задаче оптимизации целевой функции

$$F(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = F(F_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n), F_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n))$$

В качестве целевой функции мы предлагаем использовать *обобщенную функцию желательности Харрингтона D* [1].

С обобщенной функцией желательности можно проделывать все вычислительные операции, как и с любым откликом системы, наиболее важно то, что его можно использовать как критерий оптимизации системы при поиске компромиссных решений.

Мультикритериальный поиск допустимых решений в четырехфакторном пространстве $\{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ осуществлен с помощью функции Харрингтона, с итерационным использованием метода Монте-Карло (для многомерного случайного сканирования) [2].

Сгенерировано $N=15\,000$ случайных равномерно распределенных точек (условий проведения процесса) в диапазоне $-1 \leq x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \leq +1$ и рассчитано по 15 000 значений критериев качества. Соответственно каждому составу рассчитаны частные функции желательности по формуле [2]:

$$d_i(x_1, x_2 \dots x_n) = e^{-e^{-v}}$$

$$\text{где } v = \frac{-\ln\left(\frac{\ln(good)}{\ln(bad)}\right) \cdot y_{min_i} + \ln(-\ln(bad)) \cdot y_{max_i} - \ln(-\ln(bad)) \cdot y_{min_i}}{y_{min_i} - y_{max_i}} + \frac{\ln\left(\frac{\ln(good)}{\ln(bad)}\right)}{y_{min_i} - y_{max_i}} \cdot y_i(x_1, x_2, \dots x_n)$$

Ограничения по каждому показателю качества выбирались исходя из требований к задаче: $1,5 < y_1 < 3$, $80 < y_2 < 100$.

В итоге получены 100 составов, удовлетворяющим условию $D > 0,4$.

Процедуру выбора из этих точек лучших составов можно продолжить, увеличивая значение критерия D .

Для лучшей интерпретации результатов следует проанализировать по каждому фактору положение области компромиссных решений посредством полигонов распределений уровней факторов.

Анализируя гистограмму распределений факторов, можно сделать вывод, что при дальнейшей оптимизации состава в более узкой области температуру процесса нужно варировать на укороченном отрезке от 0,8 до +1; также нужно поступить с количеством гидроксида алюминия и временем проведения реакции, а вот количество концентрированной азотной кислоты можно зафиксировать на нижнем уровне – повышение ее концентрации не ведет к увеличению выхода продукта и оптимальному соотношению $Al_2O_3:N_2O_3$. Точка с наибольшим значением D: $x_1 = 1$; $x_2 = -1$; $x_3 = 1$; $x_4 = 1$, $y_1 = 2,4$, $y_2 = 87,32$.

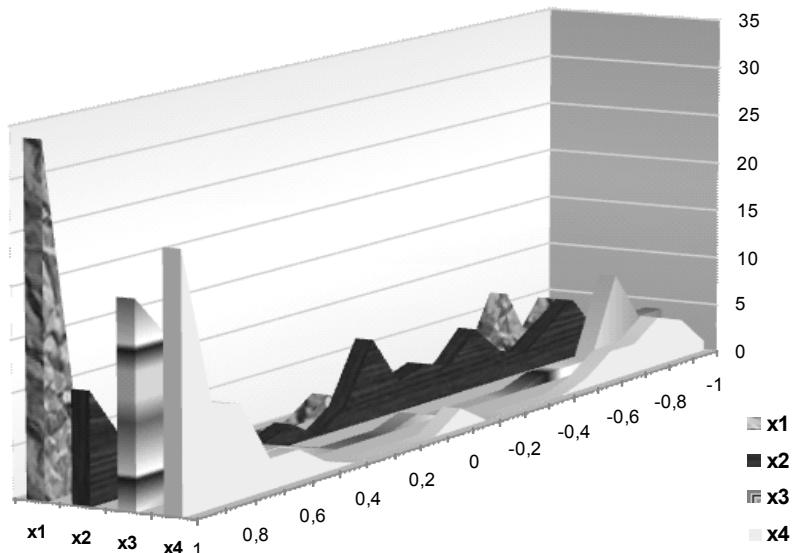


Рис. 1. Полигоны распределений уровней факторов компромиссных составов

Данные, полученные из графика можно использовать в построение следующей зоны оптимума, в которой тоже можно реализовать определенное количество вычислительных данных технологического процесса с последующим отбором оптимальных по функции Харрингтона.

- 1) Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии, 2 изд, М., «Высшая школа», 1985 – 529 с.
- 2) Статюха Г.А., Телицына Н.Е., Яменко А.Б., Суруп И.В. Оптимизация состава сухой строительной смеси с использованием метода Монте-Карло и функции желательности

СИНТЕЗ СИСТЕМ ТРАНСПОРТА ГАЗА

Статюха Г.А., Безносик Ю.А., Риахи Р., Плашихин С.В.

Національний технічний університет України «КПІ», yu_beznosyk@ukr.net

В систему транспорта газа входять источники газа, контуры, состоящие из сегментов трубопровода, компрессорных станций и мест передачи. Проектирование или расширение системы транспорта газа включает капитальные расходы и расходы по эксплуатации и техническому обслуживанию. При синтезе газотранспортных систем, связанном, чаще всего, с проектными изменениями и увеличением числа единиц оборудования, необходимо учитывать много факторов, таких как оптимальное число компрессорных станций и оптимальное расположение этих компрессорных станций, диаметр труб для каждого контура сети, текущие перепады давления газа в компрессорах и трубопроводе в целом, процессы теплообмена. Критерием оптимальности могут служить общие минимальные затраты в год, включая капитальные затраты и расходы по эксплуатации и техническому обслуживанию.

В докладе представлены результаты использования для синтеза газотранспортных сетей комбинацию Pinch-метода совместно с эксергетическим анализом. Такой анализ позволяет более детальное и углубленное понимание эксергетического качества, количества и направленности потока газа на Pinch-диаграмме. Обычно такими эффектами при проектировании пренебрегают, принимая незначительное понижение эксергии в процессе. Однако, иногда, анализ энергии должен быть применен к части процесса, вовлекающего большие изменения давления, например расширитель, соединенный непосредственно с компрессором. В таком случае, изменения теплосодержания не указывают ни на качество, ни на направление потока энергии между потоками, обменивающими энергию. Pinch-техника метод для анализа и синтеза процессов, где теплообмен между процессом и полезными потоками играет важную роль. Если поток газа сжимается, то изменяется эксергия газа, и это может быть отражено на Pinch-диаграмме.

Давление – важный параметр процесса транспорта газа. Об активных для давления единицах процесса подобно компрессорам или расширителям было объяснено на Pinch-диаграмме. Существует, по крайней мере, три причины представить большие изменения давления на диаграмме:

1. Как температура, так и давление сильно влияют на термодинамический анализ процесса.
2. Изменения теплосодержания не говорят достаточно о качестве, количестве и направлении потока энергии между двумя потоками процесса.
3. Истинная стоимость энергии для процесса зависит как от количества, так и от качества используемой энергии.

Термодинамическая эксергия или пригодность – мера работы, которая существует в потоке энергии.

Уравнение (1) для анализа эксергии потока газа:

$$E_x \equiv -(\Delta H_{l \rightarrow e} - T_e \Delta S_{l \rightarrow e}), \quad (1)$$

Эксергия E_x всегда измеряется относительно параметрам окружющей среды. В компрессоре, работа поставляется газу таким образом, что теплосодержание H , температура T , и давление p , может быть отнесено и к реальным, и к идеальным газам. Это выражено в следующих уравнениях (2-4) с изменением теплосодержания ΔH , энтропии, ΔS , и эксергии, ΔE_x от начального состояния (1) к конечному состоянию (2) в общей форме:

$$\Delta H = C_p(T_2 - T_1) + H_2^R - H_1^R \quad (2)$$

$$\Delta S = C_p \ln(T_2 / T_1) - R \ln(p_2 / p_1) + S_2^R - S_1^R \quad (3)$$

$$\Delta E_{x(1 \rightarrow 2)} = \Delta H - T_e(\Delta S) \quad (4)$$

$$\text{где } H^R / (RT) = -T \int_0^p (\partial Z / \partial T)_p dp / p \quad (5)$$

$$S^R / R = -T \int_0^p (\partial Z / \partial T)_p dp / p - \int_0^p (Z - 1) dp / p \quad (6)$$

Поэтому, ΔH и ΔS являются расчетными от соответственных идеально-газовых и остаточных свойств единым дополнением. H^R и S^R определяются по уравнениям (5) и (6). Фактор сжимаемости (Z) рассчитывается по выражению $Z = pV/RT$. Значения Z , (dZ/dT) и P расчетные и определяются непосредственно по экспериментальным данным p , V , T .

Умножив эксергию E_x на расход потока q_n получим энергетическую пригодность потока P_x :

$$P_x = q_n E_x \quad (7)$$

Умножив разницу теплосодержаний ΔH на расход потока q_n , получим:

$$\Delta I = q_n \Delta H \quad (8)$$

Энергетические значения пригодности входного потока и потоков компрессора выхода могут быть рассчитаны следующим набором уравнений (9-12):

$$P_{x1} = q_n [C_p(T_e - T_1) - T_e \Delta S_{1 \rightarrow e}] \quad (9)$$

$$P_{x2} = -q_n [C_p(T_e - T_2) - T_e \Delta S_{2 \rightarrow e}] \quad (10)$$

$$\Delta S_{1 \rightarrow e} = C_p \ln(T_e / T_1) - R \ln(p_e / p_1) \quad (11)$$

$$\Delta S_{2 \rightarrow e} = C_p \ln(T_e / T_2) - R \ln(p_e / p_2) \quad (12)$$

При использовании уравнений (1-12), могут быть вычислены все свойства (ΔH , ΔS , ΔE_X и ΔP_X) расширителя или компрессора. Затем в Pinch-диаграмме строятся энергетические уровни пригодности потоков газа. Для контура сети, содержащего несколько компрессоров/расширителей, строится сложная составляющая кривая структурной схемы и определяется положение Pinch-точки, делящей нашу газотранспортную сеть на две подсистемы. Для каждой из подсистем и определяются оптимальные параметры их функционирования. Таким образом, комбинация обычного Pinch-анализа и новый энергетический анализ пригодности потока позволяют анализировать сложные газотранспортные сети, когда давление и температура важны для эффективного понимания процессов.

Данную методику предполагается использовать при анализе и проектировании газовых сетей в Исламской Республике Иран.

КЛАДОЧНЫЙ РАСТВОР КАК ЭЛЕМЕНТ СИСТЕМЫ СТРОИТЕЛЬНОЙ КОНСТРУКЦИИ

Статюха Г.А., Телицына Н.Е., Суруп И.В.

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

При проектировании состава сухой строительной смеси для кладочных работ с заданными свойствами в ходе выявления основных закономерностей процесса ее получения рациональным путем есть применение системного подхода, где кладочный раствор рассматривается как элемент системы «кладка».

Система «кладка» – это нечто большее, чем просто сумма «кладочный раствор + кладочные элементы» - она обладает качественно новыми (эмержентными¹) свойствами, которые отсутствуют у ее составляющих. Кроме того она сама является подсистемой для строительной конструкции в целом, и, соответственно, вместе с армирующими и другими элементами формирует свойства этой сложной системы.

Для лучшего понимания анализируемой системы, объект исследования следует рассматривать в трех аспектах:



Агрегирование частей системы в единое целое приводит к появлению новых качеств, не сводящихся к качествам элементов системы в отдельности. Это свойство и является проявлением внутренней целостности системы - системообразующим фактором. Новые качества системы определяются в очень сильной степени характером связей между частями и могут варьироваться в весьма широком диапазоне в зависимости от качественных показателей элементов системы и свойств внешней среды.

Кладочный раствор - композиционный материал, и его показатели изменяются в зависимости от характеристик материалов составляющих эту композицию, от условий твердения и последующей эксплуатации, а также характера прилагаемой нагрузки.

Поэтому при проектировании состава новой сухой строительной смеси необходим учет всех перечисленных факторов и связей между ними для получения продукта с необходимыми качественными показателями, т.е. достаточно важна полнота и всесторонность рассмотрения проблемы. Основной особенностью системного подхода есть сочетание формальных методов и неформализованного (экспертного) знания. Последнее помогает неформализованным путем найти новые пути решения проблемы, не содержащиеся в формальной модели, а затем учесть последствия решений в модели, т.е. формализовать их, за счет чего непрерывно развивать модель и методы поддержки принятия решений. Для эффективного моделирования систему удобно представить в виде схемы (рис. 1).

¹ Эмерджентность (англ. emergence — возникновение, появление нового) в теории систем — наличие у какой-либо системы особых свойств, не присущих ее подсистемам и блокам, а также сумме элементов, не связанных особыми системообразующими связями, т.е. это несводимость свойств системы к сумме свойств её компонент. В классификации систем эмерджентность может являться основой их систематики как критериальные признаки системы.

При системном рассмотрении проблемы очень важным является учет внешних факторов системы – желания потребителей, климатического региона, политико-экономической ситуации в регионе предполагаемой реализации продукта.

Желания потребителей продукции не всегда коррелирует с возможностью производителя производить продукт именно с такими характеристиками. При проектировании и/или усовершенствовании изделия, возникают трудности интеграции усилий разработчиков, конструкторов и маркетинга, вынужденных работать вместе для получения продукта, который будет отвечать требованиям потребителя. В этом случае в рамках системного подхода мы использовали метод QFD (*Quality Function Deployment – технология развертывания функций качества*) [1]. Метод QFD представляет собой технологию проектирования изделий и процессов, позволяющую преобразовывать пожелания потребителя в технические требования к изделиям и параметрам процессов их производства. QFD – это экспертный метод, использующий табличный способ представления данных, причем со специфической формой таблиц, которые получили название "домиков качества". Технология QFD – это последовательность действий производителя по преобразованию фактических показателей качества изделия в технические требования к продукции, процессам и оборудованию.



Рис. 1. Характеристика исследуемой системы «кладка»

Метод QFD применялся впервые для проектирования сухой строительной смеси с учетом потребительских желаний и требований ГОСТ.

Его использование позволило нам учсть потребительские свойства на всех стадиях производства продукции, для всех элементов системы и, тем самым, повысить степень удовлетворенности потребителя, а также снизить затраты на процессы проектирования и подготовки изделий к производству, в связи с целенаправленным формированием свойств смеси.

- 1) Hummel, Karl "Abstracting the QFD: Applying the Power of QFD to Strategic Planning Transactions from the Eighth Symposium on Quality Function Deployment / International Symposium on OFD '96, Nori, Michigan. Ann Arbor, MLQFD Institute, pp. 93-108. ISBN 1-889477-08-7, 1996.

К ВОПРОСУ О ВИБОРЕ ОПТИМАЛЬНЫХ СОСТАВОВ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ЦИТРОГИПСА

Унрод В.И., Агапов В.А., Агапова А.В., Бененко С.П..

Черкасский государственный технологический университет, sbenenko@yandex.ru

Черкасское региональное отделение Украинской Технологической Академии

Одним из наиболее распространенных и крупнотоннажных отходов являются твердые кальцийсодержащие отходы, к которым относится и отход производства лимонной кислоты – цитрогипс.

Цитрогипс – отход биохимического производства лимонной кислоты; объемы этого отхода в Украине достигают тысячи тонн.

В производстве лимонной кислоты ежегодно образуется свыше 5,5 тыс. т. цитрогипса, который до настоящего времени практически не нашел своего применения. Отдельные компоненты цитрогипса используются в качестве минерализатора почв, однако большая часть, как правило, сбрасывается в отвалы.

В связи с тем, что цитрогипс на 97% состоит из $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, находящегося в мелкодисперсном состоянии, представляется возможным после термообработки использовать в целях получения пигмента-наполнителя для лакокрасочной промышленности.

Для производства основной массы наполнителей сырьем являются природные минералы и лишь сравнительно небольшое количество наполнителей изготавливается из вторичных ресурсов.

Ведущими в количественном отношении наполнителями являются следующие: карбонат кальция CaCO_3 (мел, кальцит), двойной карбонат кальция и магния $\text{CaCO}_3 \cdot \text{MgCO}_3$ (доломит), карбонат бария BaCO_3 (витерит) и карбонат магния MgCO_3 (магнезит).

Для получения пигментов-наполнителей в лакокрасочной промышленности применяется большое количество природного мела. Расход мела только для одного лакокрасочного предприятия ориентировочно составляет около 200 тонн в год. В связи с этим замена мела другими материалами позволит более рационально использовать природные ресурсы и сократить количество техногенных кальцийсодержащих отходов, что тем самым позволит снизить антропогенное влияние на окружающую природную среду.

В настоящее время на кафедре общей химии Черкасского государственного технологического университета проводятся научные исследования в области выбора оптимальных составов пленкообразующих композиций с целью утилизации отходов производства биохимического синтеза лимонной кислоты. Критерием качества структурных композиций является комплекс физико-химических характеристик, а именно, времени и степени высыхания, вязкости, кислотного числа, цвета, влияние и воздействие окружающей среды.

DESIGN OF OPTIMAL GAS PURIFICATION SCHEMES BY MEANS PINCH ANALYSIS

Statjukha G.¹, Jeżowski J.², Jeżowska A.², Beznosyk Y.¹, Bugaeva L.¹

¹ National Technical University of Ukraine "KPI", 37, yu_beznosyk@ukr.net

² Technical University of Rzeszów, Poland, ichjj@prz.rzeszow.pl

In the presentation, the synthesis of mass exchanged network (MEN) for remove of combustion products such as carbon dioxide (CO_2), nitrogen oxides (NO_x) and hydrogen chloride (HCl) is considered. The MEN synthesis task solution supposes creation of the system which includes the processes of simultaneous absorption of gases mixture. At the moment, the problem of synthesizing the different MEN is actual in chemical and power industry.

The problem of MEN synthesis is stated by El-Halwagi M. M. as follows.

Given a number N_R of rich streams (waste sources) and a number N_S of lean streams (mass separation agents - MSA). Given also are the flow rate of each waste stream J_i , its inlet composition y_i^S and target (outlet) compositions y_i^t , where $i = 1, 2, \dots, N_R$. In addition, the supply and target compositions x_j^S and x_j^t are given for each MSA, where $j = 1, 2, \dots, N_S$. The MSA flow rates are unknown and are to be determined so as to minimize the network cost.

Besides the lean (pure) streams (N_{SP}) for process MSA, we can consider a number (N_{SE}) external MSA. So $N_{SP} + N_{SE} = N_S$. The flow rate of each process MSA is bounded by its availability in the plant. The external MSA flow rates are to be determined according to the overall economic consideration of the MEN.

It is desired to synthesize a cost-effective network of mass exchangers that can transfer undesirable species from the waste streams to the MSA.

This study examines the flow sheet for cleaning of gas stream shown on fig. 1. There are two gases streams (R_1 and R_2) in the schema, each of them have to be cleaned from pollutants: CO_2 , NO_x and HCl . Some processes are used for pollutant removal.

On the initial stage, these two streams are purified from the most toxic nitrogen oxides by carbamide (stream S_2). Then, absorption of carbon dioxide by monoethanolamine (stream S_1) is occurred. After that, the process of absorption of hydrogen chloride by water (stream S_3) takes place. For the more cleaning additional absorption by absorbents, Na_2CO_3 (stream S_4) and NaOH (stream S_5) may be foreseen.

The synthesis of MEN can be carried out by means of algebraic, graphic approaches or mathematical programming. In the study, the mathematical programming approach was applied for the synthesis of MEN.

The problem of synthesizing MEN is solved in two stages as optimization task. At the first stage we have to solve the problem minimizing absorbents cost as a task of linear programming. On this stage, we determine flow rates of the streams S_1 , S_2 , and S_3 . The obtained flow rates of streams S_4 and S_5 are equal to 0. Therefore, S_4 and S_5 will be excluded from the further consideration.

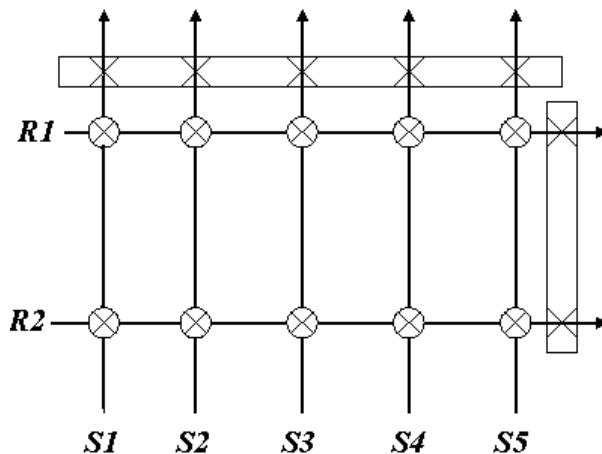


Fig. 1. MEN for cleaning gas stream from NO_x , CO_2 , HCl

On the second stage, a problem of minimization of absorber amount is solved. A Pinch-point breaks up MEN on two subnets. Next, the mass flow rates for every stream above and below a Pinch-point are determined. It is now possible to formulate the problem of synthesizing MEN as a task for the linear programming. Above a Pinch-point (subnet of $m = 1$), there are four possible interaction points of streams: R_1-S_1 , R_1-S_2 , R_2-S_1 and R_2-S_2 . Hence, it is required to define four binary variables ($E_{1,1,1}$, $E_{1,2,1}$, $E_{2,1,1}$ and $E_{2,2,1}$). Similarly, below a Pinch-point (subnet of $m = 2$), we have to define four binary variables ($E_{1,1,2}$, $E_{1,3,2}$, $E_{2,1,2}$, $E_{2,3,2}$), which correspond to interaction R_1-S_1 , R_1-S_3 , R_2-S_1 and R_2-S_3 . So, a goal function will be looked as follows:

$$\text{Min } E_{1,1,1} + E_{1,2,1} + E_{2,1,1} + E_{2,2,1} + E_{1,1,2} + E_{1,3,2} + E_{2,1,2} + E_{2,3,2}$$

The task solution is obtained by means of the Lingo program. The obtained results indicate that network contains seven absorbers, in which mass transfer between streams R_1-S_1 , R_1-S_2 and R_2-S_2 above a Pinch-point and R_1-S_1 , R_1-S_3 , R_2-S_1 and R_2-S_3 below a Pinch-point are occurred. Loads of each absorber is calculated by adding of the mass flow rates within a subnet. The results may be used to create the optimal MEN shown in a fig. 2.

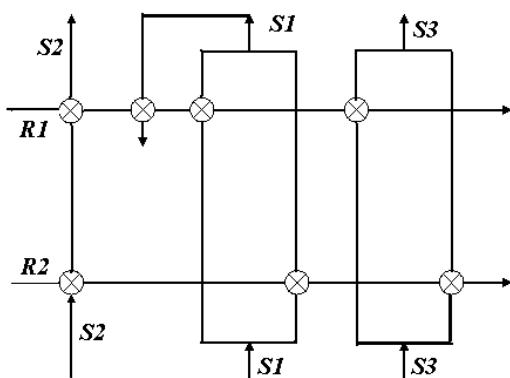


Fig. 2. The optimal MEN for purification of gas stream from NO_x , CO_2 , HCl

- 1) *El-Halwagi M. M. Pollution Prevention through Process Integration.* – Academic press. Elsevier Science (USA). – 1997.
- 2) Смит Р., Клемеш Й., Товажнянський Л.Л. и др. Основы интеграции тепловых процессов. - Харьков: НТУ «ХПИ», 2000. – 456 с.
- 3) Безносик Ю., Бугаєва Л., Статюха Г. Синтез реактивных массообменных сетей. – Вестник Вінницького політехнічного інститута № 6, 2005. – с. 30 – 35.

СЕКЦІЯ 5

КОМП'ЮТЕРНО-ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ

В БАГАТОРІВНЕВІЙ ВИЩІЙ ОСВІТІ

ІНТЕГРОВАНА КОМП'ЮТЕРНО-МІКРОПРОЦЕСОРНА НАВЧАЛЬНА СИСТЕМА

Жученко А.І., Ковалевський В.М., Лукіннюк М.В.

Національний технічний університет України "КПІ", zhaniv@ukr.net

У сучасних системах керування технологічними процесами різних виробництв широко використовуються мікропроцесорні пристрії, регулятори і контролери, які через інтерфейс RS-485 обмінюються даними з ПК, що управляє. При підготовці бакалаврів і магістрів по автоматизації технологічних процесів можна застосовувати імітаційні комп'ютерні програми з хорошою універсальністю в конфігурації контурів керування і вивчені їх характеристик. Такі комп'ютерні імітаційні програми без реальних мікропроцесорних регуляторів і контролерів не забезпечують повною мірою здобуття студентами практичних навичок і знань з особливостей налаштування і застосування мікропроцесорних пристрій, що управляють.

На кафедрі автоматизації хімічних виробництв Київського політехнічного інституту розроблена і застосовується інтегрована комп'ютерно-мікропроцесорна навчальна система на основі мікропроцесорних пристріїв мазкі «МІКРОЛ» [1], призначена для реалізації слідуючих задач: надання студентам можливості практично працювати з реальними мікропроцесорними регуляторами і контролерами; забезпечення вивчення методик налагодження мікропроцесорних пристрій і блоків для контурів контролю та регулювання технологічних параметрів; створення за допомогою комп'ютерних моделей типових апаратів умов для вивчення особливостей роботи одноконтурних і багатоконтурних мікропроцесорних систем керування. За допомогою інтегрованої навчальної системи можна об'єднати в навчальному процесі завдання з різних навчальних курсів: технічні засоби автоматизації; технологічні вимірювання параметрів; програмування прикладних програм C++; моделювання технологічних об'єктів керування; ідентифікація статичних і динамічних характеристик контурів регулювання; мікропроцесорна техніка і пристрой; оптимізація параметрів налаштувань мікропроцесорних керувальних пристрій. Всі ці завдання реалізуються за допомогою навчальних стендів, на яких змонтовано мікропроцесорний ПІД регулятор МІК-21, мікропроцесорний регулятор співвідношення параметрів МІК-25 і мікропроцесорні контролери МІК-51, які через перетворювач інтерфейсу БПІ-52 взаємодіють з персональним комп'ютером. Одним із основних елементів інтегрованої навчальної системи є програмні модулі на мові C++, які студенти самі розробляють на кожному етапі підготовки даних для роботи з мікропроцесорними регулювальними регуляторами та контролерами. Це дозволяє студентам одержувати практичні навички з програмування нестандартних функцій, як складових частин навчальної системи.

У разі підключення мікропроцесорних регуляторів і контролерів до комп'ютерних математичних моделей типових апаратів у навчальній системі можна створювати контури регулювання на мікропроцесорних регуляторах МІК-21 і МІК-25 і потім такі ж задачі керування реалізовувати за допомогою мікропроцесорного контролера МІК-51. Вивчення роботи мікропроцесорних контурів керування починається з етапу формування студентами масивів даних для статичного режиму роботи технологічного апарату.

За допомогою використовуваної моделі реактора розраховуються значення регулюючих і збурювальних параметрів для формування масивів даних (по 60 значень кожного параметра) для мінімальної, середньої та максимальної продуктивностей реактора. Дані з масивів параметрів по 60 точок записуються в конструктор компоненти Tchat програми, компільованої в середовищі C++ Builder. Компонента Tchat після виклику її в C++ програмі буде графіки зміни технологічних параметрів реактора в часі і ці значення

вибираються для передачі за допомогою інтерфейсу RS-485 через блок БПІ-52 в підключений до моделі мікропроцесорний регулятор або контролер. За сигналами, які надійшли з регулятора або контролера, в C++ програмі для реактора перераховуються значення технологічних параметрів. Останні записуються в масиви даних, за якими друга компонента Tchat будує порівняльні криві в часі з початковими розрахунковими 60 точками для мінімальної, середньої і максимальної продуктивностей реактора. Такий режим роботи C++ програми, що моделює процес змішування компонент у реакторі, забезпечує студентам можливість формувати, спостерігати й аналізувати статичний режим зміни параметрів технологічного об'єкту керування.

Для дослідження переходів процесів контурів регулювання при створенні обурувальних впливів перерахунок регульованих параметрів і регулювальних впливів виконується C++ програмою, що моделює процеси реактора, за допомогою отриманих рівнянь динаміки. На основі цих рівнянь в C++ програму записуються передаточні функції, за допомогою яких будуються графіки переходів процесів під час налаштування оптимальних коефіцієнтів мікропроцесорного контролера МІК-51, ПІД регулятора МІК-21 і регулятора співвідношення МІК-25.

Досвід застосування інтегрованої комп'ютерно-мікропроцесорної навчальної системи показав, що у процесі підготовки даних для досліджень мікропроцесорних контурів регулювання студенти добре засвоюють взаємозв'язок і вплив технологічних параметрів процесу в типових апаратах. Також під час нормування стандартного фізичного сигналу під діапазон зміни контролльованого технологічного параметра чіткіше визначається функціональне призначення кожного мікропроцесорного пристроя, що працює в контурі з регуляторами та контролерами. Розрахунки за критеріями оцінки якості переходів процесів, виконувані C++ програмою, у разі змінювання параметрів налаштувань регуляторів і контролерів дозволяють краще зрозуміти стандартні закони регулювання, на які можуть налаштовуватись мікропроцесорні керувальні пристрой.

- 1) Каталог продукції МІКРОЛ для промислової автоматизації підприємств. – Івано-Франківськ, 2007. – 170 с.: іл.
- 2) Гельперин Н. И. Основные процессы и аппараты химической технологии: В двух книгах. – М.: Химия, 1981. – 812 с.: ил.

ВИКЛАДАННЯ КОМП'ЮТЕРНОЇ ГРАФІКИ - ВИМОГИ НОВОГО ЧАСУ

Ізволенська А.Є., Селіна І.Б.

Національний технічний університет України «КПІ», izvolenskaiy@ukr.net

Комп'ютерна графіка виникла за потребою конструкторів та дизайнерів, вона різноманітна і багатофункціональна. Основний акцент практичної частини курса комп'ютерної графіки треба зробити на вивченні графічних редакторів: програм, пристосованих для створення і редагування комп'ютерних зображень. Необхідно сказати, що робота з графічним редактором неминуче підвищує загальну комп'ютерну грамотність студента, яка у наш час є однією з ознак освіченості людини. Навіть людині, яка зовсім не знайома з комп'ютером, комп'ютерна графіка дає необхідні початкові навички роботи, які людина успішно засвоює, тому що це є дрібні етапи в досягненні програми максимуму: побудови креслення, схем, діаграм. Для успішної роботи з графічним редактором (при побудові креслень, планів, схем та інше), студентам необхідно засвоїти теоретичні положення, які надають уявлення о графічних даних.

В прикладному виконанні практично вся інженерна графіка побудована на векторній платформі. В векторній графіці зображення уявляється у вигляді набора геометричних фігур - дуг, відрізків, багатокутників та ін.. з тими чи іншими атрибутиами (кольором, товщиною контуру, видом заливання). Векторна графіка дозволяє масштабувати зображення без змін якості.

Багато пакетів оздоблено можливістю створювати тривимірні моделі деталей, як ілюстрації до креслення. Всі сучасні графічні редактори мають розвинуту систему роботи з кольором. Це дозволяє працювати з 32 мільйонами кольорів, створювати різноманітні світлові і кольорові

ефекти, повністю використовувати виразні та емоційні властивості кольору і світла. Засвоївши найпростіші функції графічного редактора (креслення відрізків, кіл та інше) студент здатен створювати креслення, які виглядають професійно, навіть при малих художніх здібностях і витратах. Вивчення програм, зв'язаних з інженерною графікою, дає можливість зрозуміти наскільки збільшується продуктивність праці інженера - конструктора, дизайнера, наскільки збільшується якість роботи. Адже машина може витримувати ДСТУ до ліній (тип, товщина), надписів, абсолютно точно, не допускає ніяких помилок. Комп'ютерна графіка, як освітня дисципліна, швидко розвивається. Сьогодні її метою є підвищення ефективності застосування людиною комп'ютера як інструмента.

ПРИКЛАДНА НАВЧАЛЬНА C++ ПРОГРАМА – ІНСТРУМЕНТ У ПІДГОТОВЦІ БАКАЛАВРІВ ПО АВТОМАТИЗАЦІЇ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

Ковалевський В.М.

Національний технічний університет України "КПІ", kovalevsky_v@users.ntu-kpi.ua

При підготовці бакалаврів велику роль у навчальному процесі грає якість самостійної роботи студента. Бакалаврам по автоматизації технологічних процесів необхідно одержати знання по типовим технологічним процесам хімічних виробництв; по конструкціях типових хімічних апаратів; по програмуванню прикладних керуючих програм; навички по розробці схем автоматизації процесів; вивчити правила проектування принципових схем технологічної сигналізації і аварійного захисту, а також освоїти методи ідентифікації і моделювання технологічних об'єктів керування. Усі ці теми навчальних курсів спеціальності студенти можуть самостійно вивчати в процесі розробки прикладної навчальної C++ програми для Windows.

На кафедрі автоматизації хімічних виробництв КПІ самостійна робота студентів 2 і 3 курсів виконується шляхом розробки прикладних навчальних C++ програм. Кожен бакалавр 2 курса у 3 семестрі спочатку створює навчальну C++ програму з назвою "Мнемосхема технологічного процесу хімічного виробництва". Для розробки такої навчальної C++ програми студент одержує завдання у вигляді схеми технологічного процесу хімічного виробництва і з цієї схеми процесу також вивчає 3 конструкції апаратів, як об'єктів керування. Меню команд такої C++ програми і навчальна інформація формуються в інтегрованому середовищі програмування C++ Builder двома способами: для першого варіанта меню команд навчальної програми застосовується компонента MainMenu; для другого - створюється графічне меню команд, що обробляється подією OnMouseMove для маніпулятора "мишка". Наприклад, меню команд навчальної програми "Мнемосхема технологічного процесу хімічного виробництва" може мати вигляд, показаний на рис.1 та алгоритм обробки команд у меню "ТЕХНОЛОГІЯ" на рис. 2.



Рис.1 Меню команд прикладної навчальної C++ програми.

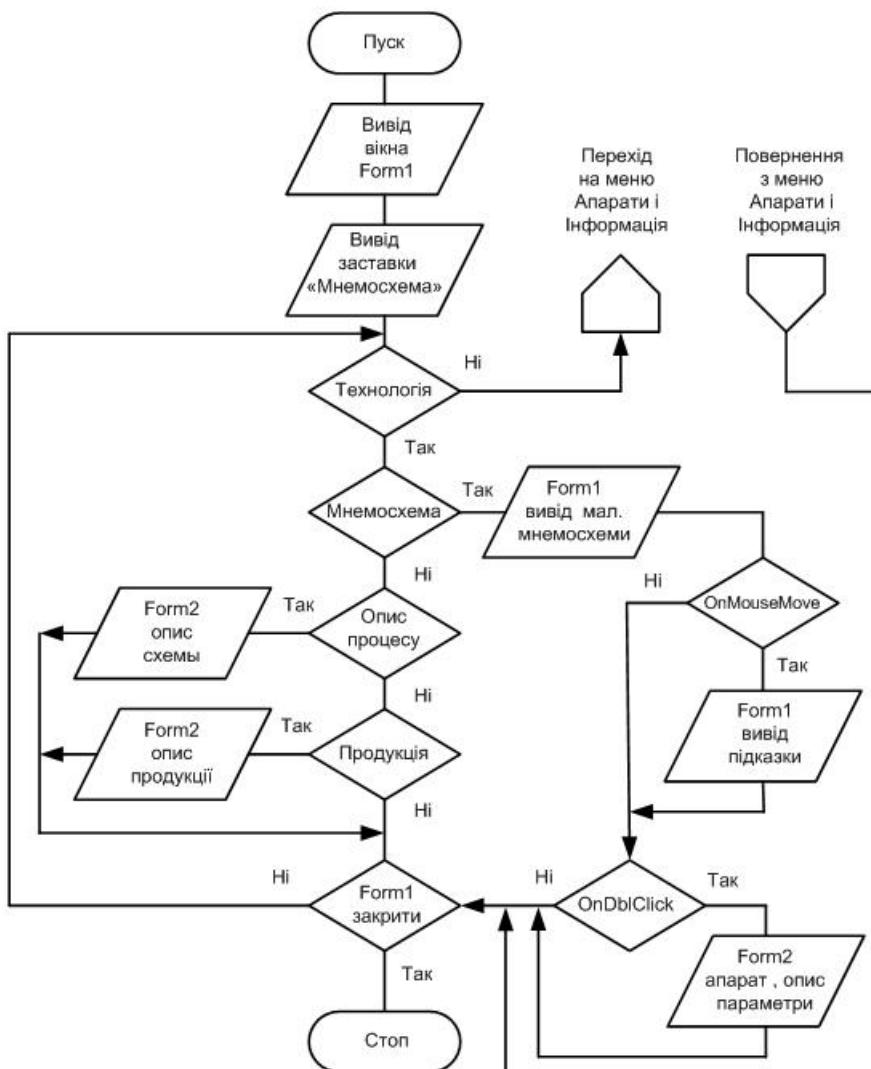


Рис. 2 - Алгоритм обробки команд у меню “ТЕХНОЛОГІЯ” навчальної C++ програми.

При виконанні курсової роботи з курсу "Комп'ютерні технології" до розділу "Програмування мовою C++" дане меню команд навчальної програми розширяється командою "КЕРУВАННЯ", у яку включаються такі пункти: автоматизація процесу; керування абсорбером; керування теплообмінником; керування випарником; анімація контуру регулювання технологічного параметра. У цьому випадку прикладна навчальна C++ програма одержує назву "Автоматизація і керування технологічним процесом хімічного виробництва". Виконуючи курсову роботу з курсу "Технічні засоби автоматизації" студенти додають у C++ програму меню "СХЕМИ" і навчальну інформацію з розроблених принципових електрических схем дистанційного керування електричними моторами, по схемах аварійної і технологічної сигналізації, аварійного вимикання живлення електромоторів, та по схемах комутації приладів і пристрій у контурах регулювання параметрів заданих технологічних апаратів.

Досвід застосування прикладних навчальних C++ програм у самостійної роботі бакалаврів та у курсовому проектуванні показує, що студенти добре вивчають задані конструкції апаратів технологічного процесу і робота по розробці схем і програмуванню навчальної інформації дає можливість бачити більш повно зв'язки між пристроями на схемах автоматизації, принципових та на комутаційних схемах контурів регулювання параметрів технологічного процесу хімічного виробництва.

- 1) Архангельский А.Я. Программирование в C++ Builder 6.-М.: ЗАО “Издательство БИНОМ”, 2002,-1152 с.ил.

**БЕЗПЕРЕВНА КОМП'ЮТЕРНА ПІДГОТОВКА
СТУДЕНТІВ СПЕЦІАЛЬНОСТІ ХТНР**

Концевой А.Л., Безносик Ю.О., Квітка О.О.

Національний технічний університет України «КПІ», kontsev@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Комп'ютерна підготовка студентів спеціальності «Хімічна технологія неорганічних речовин» в НТУУ «КПІ» реалізується зусиллями двох кафедр – кібернетики хіміко-технологічних процесів і технології неорганічних речовин та загальної хімічної технології (Табл. 1).

Таблиця 1 – Дисципліни, що забезпечують комп'ютерну підготовку студентів спеціальності

<i>Семестр</i>	<i>Назва дисципліни (модуля)</i>	<i>Обсяг, (год.) Всього, лекцій, практич., комп'ютерні заняття</i>	<i>Основні теми</i>	<i>Програмне забезпечення</i>
				<i>5</i>
<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>
1	Інформаційні технології. Модуль 1. Основи інформатики	108 18 10 26	Операційні системи. Текстові редактори. Електронні таблиці. Пакет ChemOffice. Комп. мережі.	Windows XP MS Word, MS Excel. ChemOffice Без занять в Internet (режим CPC)
2	Інформаційні технології. Модуль 2. Основи програмування	108 18 10 26	Основи алгоритмізації та програмування (типові алгоритми та характерні прийоми програмування)	Qbasic
2	Комп'ютерна графіка	108, 18 - 36	Побудова креслень	Компас
3	Обчислювальна математика та програмування. Модуль 1. Алгоритмізація і програмування	108 18 - 36	Функції та підпрограми. Програмування в Excel (макроси, функції введення/виведення, доступ до аркуша, форми користувача)	Qbasic MS Excel VBA
4	Обчислювальна математика та програмування Модуль 2. Числові методи	126 18 18 18	Нелінійні рівняння. Системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Методи інтерполяції, апроксимації, інтегрування. Диференційні рівняння. Основи статистичної обробки даних, лінійна кореляція	Qbasic MS Excel VBA
6	<i>Комп'ютерна обробка інформації – (з 2008/2009 н.р.)</i>	72 - - 36	Сканування і обробка текстів, машинний технічний переклад, графічні пакети	FineReader, Prompt, Компас, Visio

1	2	3	4	5
7	<i>Методологія наукових досліджень</i>	144 36 8 28	Розрахунки кінетичних параметрів, моделей першого і другого порядків, Інтернет	Qbasic, MS Excel
8	<i>Прикладні розділи технологій неорганічних речовин</i>	108 13 - 26	Матеріальні, теплові і конструктивні розрахунки	MS Excel
8	Математичне моделювання та оптимізація процесів хімічної технології	108 26 - 26	Детерміновані і статистичні моделі. Методи оптимізації	MathCAD
8	<i>Дипломне проектування OKP «Бакалавр»</i>		Розрахунки за темою дипломного проекту	MS Excel
9	<i>Алгоритмізація і програмування технологічних розрахунків Виконання курсових проектів зі спеціалізації</i>	90 - - 54	Матеріальні, теплові і конструктивні розрахунки складних об‘єктів ХТНР	MS Excel (ітерації, чисельне інтегрування, функції ЛІНЕЙН і статистичні, надбудови Поиск Решения, Подбор Параметра), MathCAD
10	<i>Проектування виробництв неорганічних речовин</i>	126 18 - 54	Технологічні схеми, плани, розрізи, генплани	Компас
11	<i>Інформаційне забезпечення наукових досліджень (для магістрів)</i>	108 10 - 28	БД, програмування науково-технічних розрахунків	MS Excel VBA
11	<i>Дипломне проектування OKP «Спеціаліст»</i>		Розрахунки, креслення	MS Excel Компас MathCAD

Примітка: курсивом надані дисципліни, що викладаються кафедрою ТНР та ЗХТ.

Аналіз таблиці показує, що лише в 5-му семестрі відсутні аудиторні заняття з застосуванням комп’ютера. Це не заважає кращим студентам працювати самостійно в рамках вивчених дисциплін та автономно вивчених програмних пакетів. Головна мета вивчення комп’ютерних дисциплін – вміння майбутніх фахівців вільно працювати в середовищах MS Word, MS Excel, Visual Basic for Applications (VBA), MathCAD, виконувати креслення різного рівня складності в Компасі, сканувати та редагувати документи за допомогою пакету Fine Reader, перекладати тексти в пакеті Prompt, знаходити потрібну інформацію в Інтернет. Набутий нами багаторічний досвід впровадження безперервної комп’ютерної підготовки показує, що завдяки їй при виконанні дипломних проектів, як на рівні бакалавра, так і на рівні спеціаліста (магістра) студенти виявляють досить професійний рівень владіння комп’ютерними технологіями, як при вирішення фахових задач, так і при оформленні своїх робіт. Зважаючи на розвиток інформаційних технологій та при умові достатнього рівня комп’ютерної підготовки у випускників шкіл, в майбутньому планується при вивчені основ алгоритмізації та програмування (Модуль 2. «Основи програмування», 2 семестр) використовувати середовища програмування Visual Basic for Applications (Visual Basic).

ВИКОРИСТАННЯ КОМП'ЮТЕРНО-ІНФОРМАЦІЙНОЇ МОДЕЛІ FURNACE ДЛЯ ПІДГОТОВКИ ФАХІВЦІВ З КОЛЬОРОВОЇ МЕТАЛУРГІЇ

Нестеренко Т.М., *Касьян К.М., Иванов В.И.

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

*Запорізький національний технічний університет

Сучасні комп’ютерно-інформаційні технології дозволяють зберігати, опрацьовувати і надавати інформацію наочно та доступно, створюючи засоби навчання нового покоління. Одним з таких засобів, що активізує сприйняття матеріалу студентами під час вивчення фахових дисциплін є відеофільми.

Розроблена комп’ютерна модель FURNACE (рис. 1) являє собою електронний навчальний посібник для вивчення технологій виплавляння алюмінієвих сплавів і лігатур. Створений електронний посібник містить каталоги за типами плавильних агрегатів. У кожному каталозі міститься текстова й анімаційна інформація, яка описує будову та принцип дії металургійної печі, а також технологічний процес плавлення вторинної алюмінієвої сировини в печі, що розглядається. Технологічний процес плавлення алюмінієвих відходів і брухту наданий у динаміці з використанням кольорових анімаційних зображень, які послідовно змінюються від завантаження сировини у піч до зливання металу та видалення шлаку з печі. Студенти за допомогою комп’ютерно-інформаційної моделі FURNACE вивчають монтаж-демонтаж печей різних типів. Програма контролює правильність монтажу печі. Вона дозволяє змінювати місце точки спостереження і завдяки цьому спостерігати за процесом у тримірному просторі.

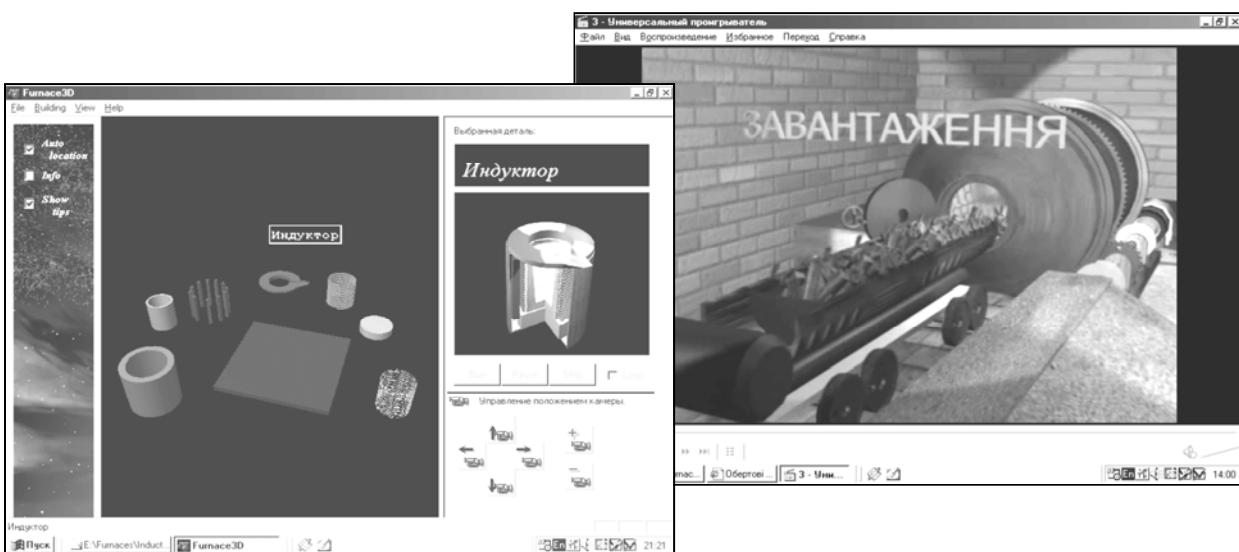


Рис. 1. Інтерфейс комп’ютерної моделі FURNACE

Комп'ютерно-інформаційна модель FURNACE зручна і досить проста в експлуатації. Її інтерфейс повністю знаходиться у межах стандарту Windows. Термінологія меню та діалогів, що використовується, традиційна і зрозуміла для фахівців, які працюють у кольоровій металургії.

Використання моделі FURNACE у навчальному процесі підготовки фахівця з кольорової металургії активізує зорове сприйняття лекційного матеріалу, поліпшує його наочність і доступність, підвищує ефективність проведення лабораторного практикуму, а також допомагає студентам швидше адаптуватися на виробництві.

**СИСТЕМА КОМП'ЮТЕРНОЇ ПІДГОТОВКИ ФАХІВЦІВ 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

Фахівці зі спеціальності «Комп'ютерно-інтегровані технологічні процеси і виробництва» відповідно до освітніх стандартів повинні мати знання та вміти виконувати такі функції:

- здійснювати комп'ютерне моделювання технологічних процесів та систем, застосовувати математичні методи для пошуку оптимальних рішень, дослідження та прийняття рішень при розробці нових або удосконаленні діючих виробництв;
- створювати системи керування технологічними процесами;
- використовувати сучасні програмні продукти для розрахунку, комп'ютерного моделювання та оптимізації інтегрованих процесів та технологій;
- розроблювати ефективні алгоритми для розв'язку окремих задач та реалізувати їх у вигляді програмних продуктів за допомогою сучасних середовищ програмування;
- створювати та застосовувати інформаційні та експертні системи на базі новітніх інформаційних технологій.

На кафедрі кібернетики хіміко-технологічних процесів НТУУ «КПІ» базова комп'ютерна підготовка, що забезпечує формування у майбутніх фахівців вказаних знань та вмінь, здійснюється на першому (бакалаврському) рівні вищої освіти за допомогою дисциплін, які можна розділити на три групи (табл. 1). До першої відносяться ті дисципліни, що безпосередньо пов'язані з вивченням тих або інших комп'ютерних технологій та програмних пакетів, тобто – виконують навчальну функцію. Другу групу складають дисципліни, що виконують підтримуючу (з точки зору комп'ютерної підготовки) функцію, – застосовують програмні пакети для розв'язку практичних задач. Частина дисциплін при вирішенні відповідних задач знайомлять студентів з спеціалізованими програмними пакетами, тобто виконують змішану функцію.

Таблиця 1 – Дисципліни, що забезпечують комп'ютерну підготовку

Дисципліна	Семестр	Комп'ютерні технології (програмні продукти)	Функція
1	2	3	4
Комп'ютерна техніка та організація обчислювальних робіт	1 2	Опер. системи., Windows, MS Office, системне ПЗ, MS Excel	Н
Алгоритмізація та програмування	1, 2, 3, 4	Qbasic, VBA, VB	Н
Комп'ютерна графіка	3	AutoCAD	Н
Основи комп'ютерно-інтегрованого управління та комп'ютерні мережі	3	Мережеві технології та протоколи	Н
Інформаційні системи та комплекси	4	Visual FoxPro, MS Access	Н
Теорія ймовірності	4	MS Excel, VBA, VB	П
Технічні засоби автоматизації та мікропроцесорна техніка	5	Experion PKS	3
Прикладні комп'ютерні системи в хімічній технології	6	MathCAD, MatLab, Aspen Plus, HYSYS, ChemCAD, PRO II	Н
Числові методи і математичне моделювання на ЕОМ	5 6	MS Excel, VBA, VB MathCAD	П
Теорія автоматичного керування	6, 7	MathCAD, MatLab, VBA, VB	П
Методи оптимізації хіміко-технологічних процесів	7	MS Excel, VBA, VB, Delphi	П

Дисципліна	Семе стр	Комп'ютерні технології (програмні продукти)	Функ- ція
1	2	3	4
Системний аналіз складних хіміко-технологічних комплексів	7	MathCAD, MatLab Simulink, Aspen Plus, HYSYS, ChemCAD, PRO II	П
Основи САПР і автоматизація хімічних процесів	7	Aspen Plus, HYSYS, ChemCAD, PRO II, MatLab Optimization Toolbox, VBA, VB, Delphi	П
Основи роботи з сучасними інтегрованими комплексами	7 8	Delphi MathCAD	Н П
Макрокінетика та хімічна гідрогазодинаміка	7, 8	MathCAD, MatLab, VBA, VB	П
Ідентифікація та моделювання процесів автоматизації	8	STAR, MathCAD, MatLab	З
Осн. проект. систем автоматизації і систем керування експериментом	8	MS Excel, VBA	П
Методи штучного інтелекту та їх застосування в хім. технології	8	Prolog, Neural Net Toolbox, MatLab, VBA	П
Автоматизація бізнес-процесів	8	MS Excel, MathCAD, MatLab Simulink, MS Project	П

Примітка. Функції дисциплін щодо комп'ютерної підготовки позначені літерами: Н – навчальна, П – підтримуюча, З – змішана.

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) та пакет MS Office з поглибленим вивченням можливостей MS Excel для виконання інженерних розрахунків;
- «Алгоритмізація та програмування», що забезпечує перш за все алгоритмічну підготовку з розв'язку типових задач та відпрацювання методів алгоритмізація в середовищі програмування Qbasic (1 курс) та вивчення мов програмування Visual Basic for Application (VBA) та Visual Basic (VB) і застосування їх до розробки програмних модулів (2 курс);
- «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 і прикладна механіка», «Типові виробничі процеси та обладнання об'єктів автоматизації», тощо) та при підготовці дипломного проекту;
- «Інформаційні системи та комплекси», яка вивчає види та методи побудови інформаційних систем, технологій пошуку даних на базі пакету Visual FoxPro;
- «Прикладні комп'ютерні системи в хімічній технології», що призначена для вивчення майбутніми фахівцями програмних пакетів, таких, як MathCAD, MatLab, Aspen Plus, HYSYS, ChemCAD, PRO II, які дозволяють вирішувати задачі аналізу, синтезу та оптимізації складних ХТС;
- «Основи роботи з сучасними інтегрованими комплексами», де вивчається сучасне середовище програмування Delphi та набуваються навички розробки програмних модулів для розв'язку практичних задач.

На наступному рівні освіти (підготовка спеціаліста/магістра) широко застосовується базова комп'ютерна підготовка, отримана в рамках бакалаврату. Крім того, в деяких дисциплінах застосовуються спеціалізовані програмні продукти (зокрема, розроблені на кафедрі пакети STATSENS, STAR).

Система комп'ютерної підготовки, що склалася на кафедрі, є одним із ключових складових конкурентоспроможності наших фахівців на ринку праці, тому ця система постійно вдосконалюється у відповідності до прогресу інформаційних технологій та зміни вимог роботодавців.

ПІДГОТОВКА СУЧАСНИХ ФАХІВЦІВ З ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ

Чередниченко В.М.

Дніпродзержинський державний технічний університет, shkirko@yandex.ru

Підготовка сучасних фахівців з хімічної технології та інженерії в багаторівневій вищій освіті базується на комп’ютерно-інформаційних технологіях. Фахівець повинен вміти користуватися ”інструментами” управління процесами, проектування, наукових досліджень, якими є сучасні інтелектуальні системи управління технологічними процесами (АСУ ТП), системи автоматизованого проектування (САПР), автоматизовані системи наукових досліджень (АСНД). Для підготовки фахівців, здатних працювати в середовищах цих комп’ютерно-інформаційних систем, слід використовувати сучасну методологію і інформаційні технології навчання, такі як інформаційно-освітні системи, учебові САПР та АСНД і дополучати студентів до їх створення.

На межі тисячоліть почалась нова ера в історії людства – інформаційне суспільство, в якому знання і інформація стали основною продуктивною силою. Наука перейшла від накопичення знань до створення засобів оволодіння накопиченим. Інтеграційні процеси, що відбуваються у світі у всіх сферах людської діяльності, торкнулись також системи освіти. Виникла необхідність появи нової освітньої культури, формування єдиного освітнього простору. В Європі створюється система освіти, відома під назвою Болонський процес, основним принципом якого є універсалізація знання через глобальні інформаційно-освітні мережі та забезпечення доступу учнів навчальних закладів кожній державі до освітніх ресурсів інших держав через Європейську мережу національних інформаційних центрів.

Для вступу до Болонської співдружності, Україні потрібно визначити шляхи модернізації вітчизняної системи освіти в контексті європейських вимог з метою її удосконалення на основі кращого світового досвіду. Пріоритет розвитку освіти – інформаційно-комунікаційні технології для потреб дистанційного навчання, створення сучасних засобів навчання, що відповідають світовому науково-технічному рівню. Особливе місце слід відвести новій філософії освіти, що полягає в набутті студентами тих знань та умінь, які необхідні для професійної саморегуляції в швидкоплинному світі.

В останнє десятиріччя відбулися революційні зміни в царині управління технологічними процесами, які вивели його на новий якісний рівень – розробку і впровадження інтелектуальних виробництв. До того ж, Україна швидко інтегрується в світ і на підприємствах впроваджуються СУ і використовуються засоби автоматизації різних світових виробників. Номенклатура засобів автоматизації розширяється і рухається в сторону покращення технологічних, метрологічних і функціональних характеристик. Кожного року така тенденція на ринку засобів прискорюється. За таких умов очевидно, що для підготовки хіміків-технологів, здатних управляти технологічними процесами в середовищі нового покоління інтерфейсів оператора, слід використовувати сучасну методологію і інформаційні технології навчання.

Статичні носії навчальної інформації – підручники і довідники - не встигають за швидкоплинними змінами, не відображають поточний стан розвитку засобів автоматизації і систем управління. Найновіша інформація міститься в номенклатурних каталогах численних виробників, що перевидаються щорічно, але вони часто недоступні і неосяжні. Зараз найбільш доступним і динамічним джерелом нової навчальної інформації є Internet, і студентам слід рекомендувати адреси сайтів ведучих розробників і виробників продукції автоматизації, а в перспективі – це національні та глобальні інформаційно-освітні центри та мережі.

Щоб дати студентам-технологам ключ від дверей в безмежний світ управління процесами, слід ознайомити їх з основними революційними відкриттями, філософією, принципами, можливостями і тенденціями розвитку сучасних СУ ТП.

Цифрова революція почалася понад 10 років тому, коли компанія Fisher-Rosemount представила гіbridний HART-протокол (удосконалення струмової петлі 4-20 мА до лінії

цифрової або інтелектуальної комунікації). Другим важливим моментом у розвитку СУ ТП було відкриття цією ж фірмою шини Fieldbus, яка дозволяє підключати до сучасних систем управління датчики будь-яких виробників. На даний момент HART-протокол, поряд з FOUNDATION Fieldbus та Profibus PA є найбільш поширеним відкритим світовим стандартом на сигнали обміну даними і управління процесами.

Використання цієї технології разом з застосуванням мікропроцесорної техніки всередині датчиків і виконавчих механізмів відкрило шлях до інтелектуального польового обладнання. Датчики і клапани перестали бути одноканальними комунікаційними пристроями, вони тепер мають додаткові можливості діагностики, конфігурування, калібрування на відстані. Живлення, аналогова перемінна, додаткова інформація про вимірювання, параметри процесу, конфігурування, калібрування і діагностику в цифровому форматі HART одночасно передаються по парі проводів.

Відкриття інтелектуальних приладів поставило нові вимоги до систем управління (СУ). Щоб СУ не захлинулися в суцільному потоці інформації від польових приладів, вона повинна бути побудована на основі сучасних технологій, викликаних цифровою революцією, і разом з інтелектуальними польовими приладами і цифровими комунікаціями являти цифрову архітектуру, що забезпечує точну і своєчасну інформацію для управління технологічним процесом.

Першою в світі СУ ТП, створеною для цифрового світу, була масштабована система Delta V, розробки компанії Fisher-Rosemount (1996 р). Відгук користувача, менеджера по системам, Chinook Chemicals: „Тільки попрацювавши з Delta V, ми усвідомили, яким проривом в технології вона являється. Впевнений, що інші розробники прийдуть в майбутньому до архітектури того ж типу”. Голова Ради директорів і керівник Microsoft Білл Гейтс писав: „Я захоплююсь тим, як Fisher-Rosemount використовує технології Microsoft в серії розробок, що знаменують собою технологічний прорив.”

Залишалась остання проблема – відсутність єдиного інтерфейсу для множини систем. СУ не може бути, як остров, ізольована в світі, де ключами до успіху є управління поставками, ланцюгом „виробництво - продаж”, запасами, глобальна конкуренція, електронна комерція в Internet. Виникла необхідність розробки відкритого сумісного промислового стандарту, який об’єднав би на підприємстві два раніше ізольованих світи: виробництво і бізнес. За допомогою Microsoft Fisher-Rosemount був розроблений стандарт сумісного інтерфейсу для промислового управління технологічними процесами і ділового середовища OPC (OLE для технологічних процесів) і OPC Foundation, який забезпечує можливість інтеграції додатків з іншою частиною підприємства.

Завдяки цим революційним відкриттям (HART, FOUNDATION Fieldbus, Delta V, OPC) виникла можливість створення інтелектуальних виробництв, що складаються з інтелектуальних компонентів: „розумних” польових пристройів, „розумних” комунікаційних мереж і „розумних” систем управління технологічними процесами, що працюють як єдиний інтелект. Інтелектуальні польові пристрої взаємодіють з масштабованими системами управління на базі Windows NT, де використовується потужне модульне програмне забезпечення. Така ідея лежить в основі Plant Web, яка забезпечує: конфігурування і калібрування інтелектуальних польових пристройів з робочої станції оператора-технолога, оперативне управління виробництвом, інтеграцію виробництва на рівень АСУП на основі стандарту OPC (OLE для управління процесами).

Відтоді як виникла сама автоматизація, найбільш революційним просуванням в управлінні технологічними процесами стали саме засоби „Управління активами” (обладнанням) - додатки, які разом з польовою архітектурою Plant Web, дозволяють досягти великої економії на технічному обслуговуванні польового обладнання (за розрахунками користувачів вона складає 15-40% щорічної вартості випускаемої продукції).

Отже сучасні системи управління це - інтелектуальні, розподілені, гіbridні, відкриті, масштабовані і інтегровані системи, призначенні для задоволення всіх потреб автоматизації технологічних процесів. Вони створюються для роботи в „цифровому світі” і втілюють

найкращі досягнення в царині управління процесами і революційні можливості управління обладнанням. Вони мають програмований гібридний контролер з процесором управління, що працює в середовищі Windows і сервер з вбудованими стандартними екранами, куди виводиться інформація про процес, а також інтерфейси для зв'язку з суміжними і вищими СУ. Процесор управління має пакет стандартних програм для підтримки і розробки стратегій управління процесом.

Змінилася і філософія проектування СУ: від розробки СУ до конфігурування інтелектуальної системи управління, на базі якої розробляється АСУ ТП, для виконання конкретних задач управління процесом.

Підвищення фундаментальної підготовки майбутніх фахівців можна досягнути тільки через осучаснення педагогічного мислення, приведення навчання у відповідність до досягнутого рівня знань і одночасне долучення студентів до методологічної культури.

Тому так важливо ознайомити студентів-технологів з сучасним “інструментом” управління процесами – засобами і системами автоматизації, а також широким спектром сучасних рішень з управління, оптимізації і безпеки виробництва; новітніми сучасними технологіями в царині автоматизації; тенденціями розвитку сучасних засобів автоматизації, їх функціональними можливостями, принципами дії, умовами застосування; філософією, компонентами і архітектурою сучасних систем управління; основами експлуатації та проектування систем автоматизації.

Звітними роботами фахівців при закінченні університету є дипломні проекти або науково-дослідні роботи. В контексті підвищення методологічної культури освіти одним з напрямів модернізації освіти є впровадження концепції учебових систем автоматизованого проектування (САПР) і автоматизованих систем наукових досліджень (АСНД) при підготовці фахівців. Сучасна методологія проектування і наукових досліджень передбачає використання таких систем і сучасний фахівець повинен вміти користуватися цими “інструментами”.

Можна сформулювати ряд попередніх умов, або методологічних вимог, які необхідно враховувати при розробці таких систем в університетах. Їх основне завдання – пропонувати варіанти формування таких систем. Для побудови таких систем необхідна робота експертного характеру, в ході якої пропонуються, оцінюються і доопрацьовуються різні варіанти таких систем, але вже зараз очевидно, що вони повинні створюватися в межах глобальних інформаційно-освітніх мереж за галузевим принципом.

Впровадження учебових САПР і АСНД, як власне, і інформаційно-освітніх систем – це така багатовимірна задача проектного характеру, рішення якої вимагає на нинішньому етапі упорядковану, скоординовану роботу багатьох фахівців, що представляють різні галузі знань. Для цього попередньо необхідно створити цілісну, інтегральну картину таких систем, в якій знайшли б своє місце всі складові – об'єкти, задачі, методи проектування і дослідження, алгоритмічні та програмні модулі і блоки, накопичений досвід розробки галузевих САПР і АСНД.

На кафедрі технологій неорганічних речовин ДДТУ накопичений певний досвід долучення студентів до розробки програмного забезпечення учебових САПР. Цей процес вимагає глибокого проникнення в сутність поставленої задачі і в процесі її розв'язання дотику до широкого кола питань, пов'язаних з використанням ЕОМ при проектуванні. Створені програми розрахунку апаратів, процесів хімічної технології, очисних споруд, систем регулювання технологічних параметрів використовуються при курсовому і дипломному проектуванні.

З точки зору загальної мети створення таких систем дозволяє організаційно і “технологічно” оформити процес виконання студентських проектних і дослідницьких робіт; дати студентові методологію користування такими системами як інструментом при вирішенні проектних і дослідницьких задач; формувати уміння використання знань, навчити їх порівнювати, зіставляти й аналізувати варіанти при прийнятті проектних рішень.

Саме для цього потрібно змінити освітні стандарти і філософію їх формування.

РАЗРАБОТКА ИНТЕРАКТИВНОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ ОБУЧАЮЩЕЙ СИСТЕМЫ «ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗМЕРЕНИЯ»

Бондаренко С.Г., Сангинова О.В., Мелихов Л.А.

Национальный технический университет Украины «КПИ», sgb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Одной из важных задач информатизации ВУЗа является внедрение передовых информационных технологий для объектов учебного и учебно-методического назначения с целью повышения качества подготовки специалистов. Внедрение в учебный процесс информационно-обучающих систем позволяет существенно повысить качество подготовки, а их использование в дистанционном обучении (ДО) – получать необходимые знания большему количеству обучающихся. Государственную политику в области ДО определяет концепция его развития, разработанная в Украине в 2000 году. Кроме того, в Украине постановлением КМУ №1494 от 23.09.2003 года утверждена «Программа развития системы дистанционного обучения на 2004-2006 годы», а приказом МОНУ № 802 от 04.12.2003 года утверждены мероприятия по реализации этой программы. Положения о дистанционном обучении размещены на сайте НТУУ «КПИ» [1]. Система ДО в Украине ориентирована на интернет-технологии и на электронные средства обучения.

Обычно при разработке и применении интерактивных информационных обучающих систем рассматривают следующие задачи: разработка и адаптация программных обучающих систем на основе средств мультимедиа; разработка баз данных и баз знаний; интеграция в региональные и другие внешние сети; подготовка и переподготовка преподавателей. Все перечисленные задачи, в свою очередь, включают ряд подзадач в области информатизации. Следует учитывать также, что учебный процесс специфицируется по видам занятий, специальностям и предметным областям или дисциплинам.

В последние годы произошло существенное обновление средств измерений и автоматизации. На украинском рынке с успехом работают и внедряют свои разработки и продукцию мировые лидеры в производстве средств измерений и автоматизации, такие как Honeywell, Siemens и другие. Оснащение ВУЗовских лабораторий современным дорогостоящим оборудованием во всем его многообразии не целесообразно в связи с высокой стоимостью последнего и большой скоростью обновления номенклатуры. Поэтому на кафедре кибернетики ХТП разрабатывается виртуальная лаборатория, позволяющая студентам знакомиться с новыми средствами измерений и автоматизации и закреплять знания, полученные при работе на реальном оборудовании в лабораториях КИП и А. В состав лабораторного практикума «Технологические измерения» входит ряд лабораторных работ, предназначенных для изучения курсов: «Технические средства автоматизации» и «Метрология, технологические измерения и приборы» [4].

Система разрабатывалась с использованием широко используемых в мировой практике FLASH - технологий. Выбор Flash компании Macromedia[2,3] обусловлен тем, что в одной программе объединено множество мощных идей и технологий. Использование векторной графики делает Flash незаменимым средством разработки различных мультимедийных проектов. С его помощью получаются файлы относительно небольших размеров даже при работе со сложными рисунками. Любой разработанный во Flash продукт может быть выпущен как интерактивный фильм, как видео ролик, пригодный для просмотра на компьютерах либо как исполняемая программа, распространяемая на компакт дисках.

Фактически лабораторный WEB практикум можно использовать для обучения (в том числе и дистанционного) как в глобальной, так и в локальной сети или же на компакт дисках.

При разработке лабораторного компьютерного практикума были предусмотрены следующие возможности:

- знакомство с необходимыми теоретическими сведениями, посвященными материалам данной работы; предусмотрена возможность обновления и корректировки данного раздела (рис.1, поз. 4);

- изучение описания виртуальной лабораторной установки и порядка выполнения работы (рис.1, поз. 4);
- запись результатов в специально подготовленные таблицы раздела протоколирования (рис.1, поз. 3);
- контрольные вопросы по пройденному материалу (рис.1, поз. 4).

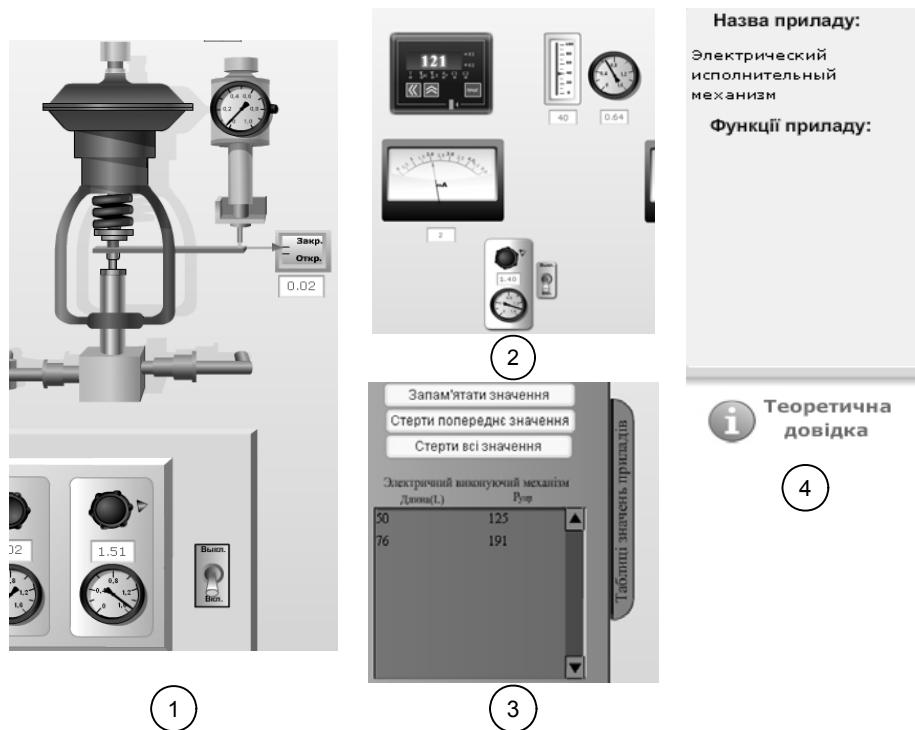


Рис. 1 Фрагменты окон виртуальной лаборатории

Важным аспектом лабораторного компьютерного практикума является визуализация исходных данных, адекватная зрительному восприятию человека и удобная для однозначного толкования полученных результатов. Предусмотрено разветвленное меню, контекстная помощь, продумана цветовая гамма. Все это делает виртуальную лабораторию достаточно удобной для работы.

Обучение ведется с использованием имитационных моделей изучаемых объектов. Акцент делается на графическое представление с элементами анимации (рис.1, 1, 2) и оформление информации. Процесс учебной работы проходит в режиме свободного учебного исследования и близок по своему характеру к профессиональной деятельности специалиста КИП и А.

Данный комплекс позволит студентам качественно подготовиться к будущей профессиональной деятельности, поскольку применение интерактивных информационных обучающих систем повышает динамику и содержательность учебных заданий. А возможности разработанной системы оперативно обращаться к обширным и легко обновляемым базам знаний и банкам данных технических средств автоматизации, использовать разновидности коллективного обучения в локальных и глобальных сетях активизируют процессы обучения на всех его этапах.

- 1) <http://www.ntu-kpi.kiev.ua/>
- 2) Рейнхард Р., Ленц Д. Flash 5 .Біблія пользователя.: Пер. с англ./М., Іздательский дом “Вильямс”.-2002.-1164с.+34 с. краткого справочника.
- 3) Вогелір Д., Пицци М. Macromedia Flash MX Professional 2004. Полное руководство. Пер. с англ./М., Іздательский дом “Вильямс”.-2004.-832с.
- 4) Лукінюк М.В. Технологічні вимірювання та прилади: Навч. Посіб./К.,НТУУ «КПІ». - 2007.-436с.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МИРОВОГО ОПЫТА ИНТЕГРАЦИИ CAPE-ПРИЛОЖЕНИЙ В УЧЕБНЫЕ КУРСЫ .НАПРАВЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ ИНЖЕНЕРИИ

Бугаева Л.Н., Статюха Г.А., Холоднов В.А.* , Jeżowska A.**

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

*Санкт-Петербургский технологический институт, **Жешувска Политехника, Польша

Данная работа посвящена проблеме изучения студентами всех уровней образования направления химическая инженерия компьютерных средств, которые в мире известны как CAPE (Computer Aided Process Engineering). Необходимость использования CAPE - средств объясняется тем, что методы и средства математического моделирования за последние полтора десятилетия претерпели существенное изменение по причине интенсивного применения информационных технологий и вычислительной техники [1-3].

В книге [1], которая является основой для многих изучаемых курсов ведущих университетов США и Европы, приводится следующая классификация программных средств, использующихся для решения задач в химической инженерии: электронные таблицы (Excel и др.), математические пакеты (Mathcad, Matlab и др.), моделирующие программы или симуляторы (Aspen, HYSYS и др.).

В начале нового тысячелетия международный методический центр интеграции компьютерных средств в учебные курсы студентов химической инженерии SACHE (Computer Aided Chemical Engineering) определил основные тенденции изучения и использования программных продуктов в учебном процессе. Например, в курсах программирования и управления процессами в Техасском техническом университете (TTU) предпочтение отдается программным средам Excel и Matlab. В университете Колорадо используются Mathcad, Excel, VBA и Matlab. Для решения задач гидродинамики рекомендуется использовать программу FEMLAB, созданную на основе пакета PDE Matlab и имеющую модули химико-технологических процессов. При изучении дисциплин, связанных с моделированием процессов и химико-технологических схем, используются программы-симуляторы ASPEN PLUS, HYSYS, CHEMCAD и PRO-II.

Этот путь интеграции современных компьютерных средств в учебный процесс проходят и университеты бывшего СССР, а также стран Восточной Европы. Например, в учебном процессе Санкт-Петербургского технологического университета (СПбТУ) успешно применяются Mathcad, FEMLAB и др.[2]. В Жешувской политехнике (Польша) при изучении нескольких дисциплин используются программы семейства HYSYS [4]. В учебных курсах НТУУ «КПИ», связанных с системным анализом CXTС, а также в дисциплинах по моделированию, читаемых магистрам всех специальностей, предлагается использовать системы компьютерной математики Mathcad, Matlab, Simulink Matlab, FEMLAB [2]. При расчетах материальных и тепловых балансов в университетах НТУУ «КПИ» и СПбТУ используется электронная книга на базе Mathcad «Material & Energy Balances», разработанная в ТТУ. В учебном процессе этих же университетов при изложении дисциплины «Системный анализ CXTС» рассматриваются возможности основных программ-симуляторов ASPEN PLUS, HYSYS, CHEMCAD и PRO-II.

Следует отметить, что продвижению современных программных продуктов в учебный процесс способствует многолетний обмен опытом авторов в области системного анализа, моделирования и оптимизации химико-технологических процессов и систем.

- 1) Seider W. D., Seader J. D., Lewin D.R. Process design principles: synthesis, analysis, and evaluation. Wiley: New York. 1999. - 824p.
- 2) Бугаєва Л.М., Безносик Ю.О., Статюха Г.О. Аналіз та синтез хіміко-технологічних систем. К.: Політехніка, 2004. - 104 с.
- 3) Холоднов В.А., Дьяконов В.П. и др. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов:- СПб.: «Профессионал», 2003. – 480с.
- 4) Jeżowska A., Jeżowski J. Wprowadzenie do projektowania systemow technologii chemicznej. Wydawnicza Politechniki Rzeszowskiej. 2002. - 286p.

КОМПЛЕКС РАСЧЕТНЫХ ДОКУМЕНТОВ ПО ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ НА MATHCAD CALCULATION SERVER

Коробов В.И., Очков В.Ф.* , Хрень Е.П.

Днепропетровский национальный университет, korvik58@mail.ru

*Московский энергетический институт (ТУ) OchkovVF@mpei.ru

Технология сетевых расчетов на Mathcad Calculation Server (MCS), впервые разработанная в Московском энергетическом институте [1], доказала свою эффективность за более чем трехлетний период эксплуатации. Кроме того, что MCS является мощной вычислительной средой, он еще и в значительной степени решает проблему использования нелицензионных программ: для проведения вычислений пользователю нет необходимости устанавливать на свой компьютер дорогостоящий программный продукт (например, систему Mathcad 11-14), достаточно лишь иметь доступ в Интернет. По адресу www.vpu.ru/mas можно осуществлять различные инженерные расчеты в режиме удаленного доступа.

На сегодняшний день коллекция документов по химической кинетике на MCS (<http://twt.mpei.ac.ru/TTHB/1/ChimKin.html>) включает более 40 сетевых версий расчетных документов, охватывающих все основные типы кинетических расчетов. Хотя основная часть документов имеет выраженную образовательную направленность, иллюстрируя основные закономерности кинетики простых и сложных реакций, они вполне могут быть применимы для полноценных расчетов, включая прогнозирование эволюции химической системы во времени, а также определение основных кинетических параметров реакций на основании экспериментальной информации. Основные подходы к решению прямой и обратной задач химической кинетики в среде Mathcad 11.2 изложены нами в [2].

Отличительной особенностью сетевых версий расчетных документов является также их многоязычность: по желанию пользователя можно выбрать один из языков комментария расчетов (английский, русский, украинский).

На базе MCS разработан универсальный кинетический симулятор (Mathcad 14), позволяющий решать прямую кинетическую задачу для произвольной кинетической схемы, заданной пользователем в текстовом окне. При работе симулятора автоматически формируются стехиометрическая матрица, вектор скоростей элементарных стадий и вектор правых частей системы дифференциальных уравнений, описывающий изменение концентрации всех участников реакции во времени. Далее по задаваемым пользователем значениям констант скоростей элементарных реакций и начальных концентраций реагентов рассчитываются их кинетические кривые. При этом имеется возможность выбора из предлагаемого списка конкретной встроенной функции для численного интегрирования системы (Adams, AdamsBDF, BDF, Radau, rkfixed, Rkadapt). Предусмотрены средства блокирования расчетов при неправильных действиях пользователя.

Разработанные документы используются в учебном процессе кафедр физической химии ДНУ и Технологии воды и топлива МЭИ.

Авторы выражают благодарность Стюарту Браффу (Великобритания) за любезно предоставленные некоторые подпрограммы-утилиты.

- 5) Mathcad Calculation/Application Server: опыт трехлетней эксплуатации в России. Труды межвузовской конф. "Практика применения научного программного обеспечения в образовании и исследованиях". – СПб., 2007. – С. 9-18.
- 6) Коробов В.И., Очков В.Ф. Решение задач химической кинетики в средах Mathcad и Maple. Тез. 13-й межд. конф. "Математика, компьютер, образование". г. Пущино, 2007. – С. 122.

СЕКЦІЯ 6
СТАЛИЙ РОЗВИТОК РЕГІОНІВ –
ОСНОВНИЙ НАПРЯМОК РЕФОРМ В УКРАЇНІ

ТЕХНОГЕННА БЕЗПЕКА В АСПЕКТІ СТАЛОГО РОЗВИТКУ

Бойко Т.В., Бендюг В.І., Комариста Б.М.

Національний технічний університет України «КПІ», Vio77@mail.ru

У якості узагальнюючого показника сталого розвитку країн Єльським Центром екологічної політики і права при Єльському університеті (США) був розроблений так званий Індекс природоохоронної ефективності (EPI). Метою створення даного показника було висвітлення наступних цілей: здоров'я навколошнього середовища та життездатність екосистем. Індекс природоохоронної ефективності (EPI) складається з шести категорій індикаторів: екологічне здоров'я, забруднення повітря, забруднення води та водозабезпечення, біорізноманіття та життєве середовище, відновлювані природні ресурси, зміна клімату. Для досягнення поставленої задачі було обрано 25 показників-індикаторів серед яких: негативний вплив на навколошнє середовище, відповідність санітарним нормам, стан питної води та забезпеченість нею, забруднення повітря, наявність та кількість мікрочасток в міському повітрі, викиди SO_2 та ін. До переліку індикаторів, що враховує показник EPI 2008, безпосередньо не входять індикатори для оцінки техногенної безпеки. Проте рівень техногенної безпеки не може не впливати на загальний рівень стійкості певного регіону. Безпечність регіонів є невід'ємною частиною сталого та екологічно безпечно розвитку [1].

Ми пропонуємо розроблений нами показник використати як один із індикаторів сталого розвитку.

Індикатор техногенної небезпеки

$$I_{TD} = \bar{\rho}_R \cdot J_{TD_\Sigma}$$

де $\bar{\rho}_R$ – відносна щільність населення в регіоні, J_{TD_Σ} – узагальнений індекс техногенної небезпеки регіону.

Щільність населення в регіоні

$$\rho_R = \frac{N_R}{S_R}$$

де ρ_R – щільність населення в регіоні, чол./ км^2 ; N_R – кількість населення в регіоні, чол.; S_R – площа, яку займає регіон, км^2 .

Відносна щільність населення в регіоні

$$\bar{\rho}_R = \frac{N_R/1000}{S_R/100}$$

Узагальнений індекс техногенної небезпеки регіону

$$J_{TD_\Sigma} = \sum_{i=1}^n J_{TD_i}$$

де J_{TD_i} – індекс техногенної небезпеки окремого промислового об'єкту; n – кількість потенційно небезпечних об'єктів в регіоні.

Індекс техногенної небезпеки промислового об'єкту

$$J_{TD} = R_{DG} \cdot D_{RL}$$

де D_{RL} – індексу відносної небезпечності окремого джерела небезпеки; R_{DG} – індекс регіональної небезпечності.

Величина індексу відносної небезпечності окремого джерела небезпеки промислового підприємства D_{RL_i} , обчислюється за формулою [2]:

$$D_{RL_i} = \sqrt[4]{I_{PT_i} \cdot I_{RS_i} \cdot I_{EX_i} \cdot I_{TX_i}},$$

де I_{PT_i} – індекс потенційної шкоди окремого джерела небезпеки; I_{RS_i} – індекс ризику окремого джерела небезпеки; I_{EX_i} – індекс пожежовибухонебезпечності окремого джерела небезпеки; I_{TX_i} – індекс токсичної небезпечності окремого джерела небезпеки.

Для компактно розташованого підприємства (у межах однієї огороженої території незалежно від її розмірів) результатуючим індексом небезпечності є максимальний індекс з ряду індексів, які розраховані для окремих видів небезпек. Для територіально розподілених підприємств індекси небезпечностей їх окремих частин розраховуються як для окремих підприємств.

Індекс відносної небезпечності змінюється в інтервалі від 0 до 1, при цьому 1 відповідає найгірше значення [3].

Таблиця 1 – Категорія небезпеки

Значення індексу відносної небезпечності D_{RL}	Номер категорії	Найменування категорії небезпеки
$0,00 < D_{RL} \leq 0,20$	1	Безпечні підприємства
$0,20 < D_{RL} \leq 0,37$	2	Малонебезпечні підприємства
$0,37 < D_{RL} \leq 0,63$	3	Підприємства середньої небезпечності
$0,63 < D_{RL} \leq 0,80$	4	Небезпечні підприємства
$0,80 < D_{RL} \leq 1,00$	5	Особливо небезпечні підприємства

Індекс регіональної небезпечності обчислюється за формулою:

$$R_{DG} = \sum_{i=1}^l r_{RF_i},$$

де r_{RF_i} - коефіцієнт урахування місцевих особливостей; l - кількість регіональних факторів, що враховуються.

До коефіцієнтів урахування місцевих особливостей відносяться:

- коефіцієнт урахування чисельності населення, підданого ризику впливу небезпечного об'єкта;
- коефіцієнт урахування цінності навколошнього середовища (заповідна чи курортна зона);
- коефіцієнт врахування можливості трансграничного впливу небезпечного підприємства (враховує відстань до кордону з іншими державами);
- коефіцієнт урахування можливості розповсюдження аварійних викидів небезпечних речовин у водному середовищі, він визначається належністю промислового майданчика джерела небезпечності тому чи іншому водному басейну (незалежно від близькості берегової лінії та обов'язково для всіх промислових підприємств).

Використання індикатора техногенної безпеки, на нашу думку, дозволить повніше висвітлити рівень стійкості окремих регіонів і країн в цілому, та дасть змогу побачити рівень техногенного навантаження в регіонах з урахуванням чисельності населення на одиницю площини.

- 1) *Statyukha G., Pidmohilnyy M., Bojko T. and Bendyug V. Assessment explosion-proof and fire risk industrial targets in a context of strategy of sustainable development // Summaries of 16th International Congress of Chemical and Process Engineering "CHISA 2004". – Praha (Czech Republic), 2004. – Р 5.70.*
- 2) *Бендюг В.І. Оцінка техногенної безпеки промислових підприємств: методологія та програмне забезпечення // Зб. наук. пр. Луганського державного аграрного університету. Сер. техніч. науки. – 2004. – №40(52). – С. 366-374.*
- 3) *Статюха Г.О., Бойко Т.В., Бендюг В.І., Терлецький П.І. Використання індексних показників для ідентифікації об'єктів підвищеної небезпеки // І-й Всеукраїнський з'їзд екологів (ECOLOGY-2006). Зб. мат. Міжнар. наук.-практич. конф. – Вінниця: УНІВЕРСУМ-Вінниця, 2006.- С. 46-50.*

ВАРИАНТ РІШЕННЯ НАЦІОНАЛЬНОЇ І РЕГІОНАЛЬНОЇ ПРОБЛЕМИ ЕКОЛОГІЧНОГО СТАЛОГО РОЗВИТКУ В УКРАЇНІ

Дуган О.М., Ігнатюк О.А.

Національний технічний університет України «КПІ», biotech@ntu-kpi.kiev.ua

Всесвітній саміт ООН, що відбувся в Ріо-де-Жанейро в 1992 році проголосив, що основою рішення гострих екологічних проблем є перехід до моделі сталого розвитку. Це означає, що концепція сталого розвитку повинна стати домінуючою ідеологією у формуванні суспільства у ХХІ столітті. Однак новий стратегічний підхід до рішення згаданих проблем реалізується вкрай повільно, тобто надмірна експлуатація природи та її ресурсів продовжується і найближчим часом не видно реальних шляхів виходу з цієї ситуації.

Українським інститутом досліджень навколошнього середовища і ресурсів РНБОУ, Міністерством екології і природних ресурсів і Національною академією наук України до Саміту в Йоганнесбурзі (2002 рік) була підготовлена „Національна доповідь України про стан виконання положень „Порядку денного на ХХІ століття” за десятирічний період (1992-2001 рр.)” У цьому документі подані основні положення національної стратегії переходу до сталого розвитку, особливості формування національної стратегії сталого розвитку, а також проведений аналіз динаміки показників сталого розвитку.

У 2002 році пройшла Всеукраїнська конференція зі сталого розвитку. Вона була організована Академією сприяння освіти за підтримкою Агентства США з міжнародного розвитку, Програми розвитку ООН і Регіонального екологічного центру м Києва. У конференції взяли участь представники недержавних організацій України, представники уряду, місцевих і національних органів влади, керівники приватних і державних підприємств, вчені і представники ЗМІ. За результатами роботи конференції були розроблені декілька редакцій проекту Концепції сталого розвитку України.

Нова редакція національної Стратегії сталого розвитку, розроблювачем якої є Міністерство охорони навколошнього середовища України, була завершена у 2004 році.

На сьогоднішній день елементи екологічної стратегії сталого розвитку України визначаються офіційними документами, такими, як: „Основні напрями державної політики України в сфері охорони довкілля, використання природних ресурсів та забезпечення екологічної безпеки”, „Національна програма екологічного оздоровлення басейну Дніпра та поліпшення якості питної води” (затверджена Постановою Верховної Ради України в лютому 1997 року).

У травні 2003 року Президент України своїм Указом затвердив „Положення про Національну Раду зі сталого розвитку України та її персональний склад”. Основними завданнями цього органу є:

- упорядкування пропозицій з національної стратегії переходу України на принципи сталого розвитку;
- оцінка реалізації державної політики у частині створення екологіко-економічних передумов для переходу України до сталого розвитку;
- координація діяльності органів державної влади, наукових і громадських організацій з питань сталого розвитку України;
- розробка пропозицій, спрямованих на виконання рішень і рекомендацій Комісії сталого розвитку України.

В контексті згаданого, на нашу думку, доречно зазначити, що переход економіки на рейки сталого розвитку неможливо уявити без розробки та впровадження високих технологій, зокрема сучасних біотехнологій, які не лише використовують найбільш передові досягнення біологічної науки та спрямовують їх на користь суспільству, а й дозволяють істотно зменшити негативний вплив на довкілля. До беззаперечних переваг біотехнології слід віднести наступне: використання в технологічному циклі мікроорганізмів дозволяє значно зменшити енергетичні витрати на синтез продукції, біотехнологічна переробка побутових та промислових відходів дає змогу одночасно зменшити забруднення довкілля та отримати корисний продукт, біологічна очистка стокових вод суттєво знижує навантаження на гідросферу, а використання біометодів та біопрепаратів у сільському господарстві не лише збільшує врожай, але й підвищує його якість.

ПЕРСПЕКТИВНІ НАПРЯМКИ ЕКОБІОТЕХНОЛОГІЙ В КОНТЕКСТІ РЕАЛІЗАЦІЇ ПРОГРАМИ СТАЛОГО РОЗВИТКУ

Ігнатюк О.А., Дуган О.М.

Національний технічний університет України «КПІ», biotech@ntu-kpi.kiev.ua

Взаємодія людини та природи, яка реально триває на планеті Земля багато тисячоліть, за останні сторіччя істотно змінилася як в якісному, так і в кількісному відношенні. Розгляд згаданих відносин з природничо-наукових позицій дозволяє помітити та відзначити багато проблем, зокрема досить суттєвий екологічний парадокс – збільшуючи свій добробут, людство тим самим погіршує умови свого існування. Подібна ситуація не може тривати довго: біологічний вид, умови існування якого швидко погіршуються, приречений на вимирання. Ідеї необхідності пошуку компромісних шляхів розвитку людства та альтернативних способів використання природних ресурсів знайшли своє відображення в так званій концепції «сталого розвитку» (sustainable development), яка фактично є лише глобальним стратегічним завданням, яке в свою чергу потребує конкретних тактичних рішень регіонального масштабу. Саме тому сьогодні розгляд питань екологічної безпеки неможливо відокремити від питань безпеки економічної та національно-політичної. Одним з аспектів екологічної безпеки є комплекс заходів по збереженню, а бажано й відтворенню, біологічного різноманіття. Згадані заходи, особливо якщо вони проводяться системно (на основі наукового аналізу та прогнозів), слід вважати природоохоронними технологіями.

Згадані проблеми є вкрай важливими і для України, оскільки, з одного боку, вона приєдналася до Картахенського протоколу про біобезпеку та до конвенції про біорізноманіття, що була прийнята в Монреалі у лютому 2000р., а з іншого – є «притулком» для 70 тис. видів диких рослин та тварин.

«Біологічне різноманіття», незважаючи на його значне поширення та досить регулярне використання, як науковий термін (поняття) залишається словосполученням досить широкого змісту. Воно включає не лише видове багатство та видове розмаїття (кількість і співвідношення існуючих біологічних видів), а й категорії більш низького та більш високого ієрархічних рівнів – різноманіття геномів у межах генофонду виду (популяції) та різноманіття умов існування видів (фактично – різноманіття ландшафтів та екосистем). Загальноприйняті заходи по підтриманню та збереженню біологічного різноманіття, зазвичай, передбачають виявлення рідкісних або зникаючих видів та виділення (на основі складеного списку червонокнижних видів) природоохоронних територій відповідного статусу (заповідників, заказників, національних парків, екомереж тощо). Згадані заходи є, безумовно, правильними та необхідними, однак, на сьогоднішній день для успішної реалізації напрямку збереження біорізноманіття в цілому їх може виявитися недостатньо.

Існуючі природоохоронні біотехнології (екобіотехнології), які у світі набувають все більшої популярності та значного поширення, успішно використовують біологічні агенти з метою очистки стічних вод, переробки відходів та рекультивації ґрунтів, розробляють ефективні та безпечні засоби захисту культурних рослин та відшукують альтернативні джерела енергоносіїв. Певну позитивну роль, на нашу думку, може відіграти екобіотехнологія і у вирішенні питання збереження біологічного різноманіття, одним з аспектів якого слід вважати саме проблему відтворення біорізноманіття (штучне відтворення популяцій тих видів рослин і тварин, які зникли або зникають).

Принципова можливість клонування певних видів живих організмів у лабораторних умовах доведена. Практичне використання подібних біотехнологій – питання, яке дуже складно реалізувати технічно. До того ж, з позицій теоретичної екології неоднозначною є також його доцільність. Тому сьогодні можливість успішного застосування молекулярних біотехнологій до вирішення проблеми збереження та відтворення рідкісних та зникаючих видів слід вважати «дискусійним питанням на перспективу». Необхідно зазначити, що відтворення біорізноманіття може відбуватися ще й іншим, альтернативним шляхом – у деяких випадках може йти мова про успішну реінтродукцію видів, які нещодавно зникли з певної території, однак за оцінками фахівців можуть (могли б) тут успішно існувати.

Реінтродукція – складний та багатоступінчатий процес повернення у колишній місця існування представників флори та фауни, який передбачає не лише заходи по безпосередньому переселенню особин, але й біотехнічний супровід відповідної популяції, який має включати не лише «піклування» (підгодівллю, охорону) на певних етапах життєвого циклу, а й оптимізацію відповідних біоценотичних процесів, спрямованих на відновлення її екологічної ніші. Успішність реінтродукції залежить, безумовно, від багатьох моментів, зокрема від правильної послідовності та спрямування відповідних дій фахівця, який цю реінтродукцію здійснює. Сподіватися на успішність випадкової (не продуманої, не підготованої, не спланованої тощо) інтродукції не слід. Успішною може бути лише науково-обґрунтована, продумана та прописана до дрібниць реінтродукція. У такому випадку процес реінтродукції фактично стає технологією, яка за своїм змістом та спрямуванням є природоохоронною біотехнологією, інакше кажучи екобіотехнологією.

Тому ми пропонуємо розглядати реінтродукцію як один з можливих та перспективних напрямків сучасної екобіотехнології, який потребує підтримки та розвитку і може успішно сприяти реалізації зasad сталого розвитку та гармонізації відносин людина - природа.

ОСВІТА ДЛЯ СТАЛОГО РОЗВИТКУ ТА ЇЇ ЗНАЧЕННЯ ДЛЯ ЕКОЛОГО-ЗБАЛАНСОВАНОГО РОЗВИТКУ СУСПІЛЬСТВА

Нагорнюк О.М.

Національний аграрний університет, onagornuk@ukr.net

Сталий розвиток (за визначенням Доповіді Міжнародної комісії з навколошнього середовища і розвитку, 1987 р.) – це такий розвиток, який забезпечує врівноважене прийняття рішень соціально-економічних та екологічних завдань і проблем збереження сприятливого навколошнього середовища та природно-ресурсного потенціалу з метою раціонального задоволення потреб нинішніх та майбутніх поколінь людей. Тобто глибинна суть його концепції полягає в необхідності збереження людства і біосфери Землі за рахунок зменшення антропогенного тиску на природне середовище [3].

Освіта – це первинний і найважливіший елемент трансформації суспільства до еколо-збалансованого розвитку, яка дає можливість людям втілювати своє уявлення про станий розвиток в житті. Саме тому на Всесвітньому саміті про станий розвиток (2002) Генеральною Асамблеєю ООН була проголошена і прийнята Резолюція «Про Декаду ООН освіти для стального розвитку починаючи з 1 січня 2005 року» [2]. Освіта розглядається не як самоціль, а як основний механізм зміни знань, цінностей, поведінки та способу життя, що необхідно для забезпечення стального розвитку. Крім того, освіта – основоположне право людини.

Відповідний рівень освіти дає можливість кожній людині брати участь у вирішенні та попередженні соціальних, економічних та екологічних проблем, що є основним завданням, яке стоїть перед світовою спільнотою. Декларація, прийнята в Ріо-де-Жанейро у 1992 р. починається словами: «Люди є головною турботою стального розвитку. Вони мають право на здорове і продуктивне життя в гармонії з природою». Лідери держав, які брали участь у Всесвітньому саміті в Йоганнесбурзі (2002 р.) зобов'язались створити гуманне, рівноправне і уважне до проблем людини суспільство, яке визнає, що кожний член цього суспільства має свою людську гідність [4].

В 2003 р. в Резолюції Генеральної Асамблеї ООН проголошено Десятиліття грамотності ООН, де сказано, що загальна грамотність сама забезпечить стійкий розвиток, мир і демократію [3]. Тому якість освіти – необхідна умова досягнення мети Освіти для стального розвитку.

Саме освіта сприяє вирішенню таких важливих питань збалансованого розвитку, як боротьба з бідністю, розвиток сільських регіонів, медицини, попередження розповсюдження ВІЛ/СНІДу, вирішення екологічних проблем, проблем раціонального використання відтворюваних і не відтворюваних природних ресурсів, створення гендерно-чутливої системи освіти на всіх рівнях, питань етичного і правового характеру, зокрема, загальнолюдські цінності та права людини.

Нині досягнуто значного прогресу у розповсюдженні нового погляду на освіту, інформування громадськості та підготовку в якості основних механізмів забезпечення стального розвитку. Проте, зберігається помилкове розуміння того, що станий розвиток стосується головним чином навколошнього природного середовища, а «освіта в інтересах стального розвитку» є лише переходом до поняття «екологічна освіта».

Наслідки нового погляду на «освіту в інтересах стального розвитку» для систем офіційного навчання є серйозні і поєднані з переосмисленням значення систем державної освіти, які більше не прийнятні для задоволення потреб суспільства і виробництва. Традиційно метою освіти була передача існуючих знань, вмінь, навичок та традицій. Новий погляд спонукає до переорієнтації освіти з точки зору того, яким чином готувати людей до життя, до вирішення питань гарантованої зайнятості, до вимог суспільства в умовах швидкого розвитку, до технічних змін, які сьогодні торкаються усіх сторін нашого життя, до забезпечення щастя, добробуту та якості життя. Освіта нині розглядається як безперервний процес протягом усього життя, який потрібно не тільки коригувати, а й змінювати та

перетворювати в міру необхідності. Основна мета освіти для сталого розвитку полягає в сприянні становлення всебічно освіченої соціально активної особистості, яка розуміє нові явища та процеси суспільного життя, володіє системою поглядів, моральних, культурних та етичних принципів, норм поведінки, що забезпечить готовність до соціально-відповідальної діяльності і безперервну освіту протягом життя. Мета Декади ОСР – зміцнення міжнародного співробітництва і обмін інноваційними методами навчання за програмами, практикою та політикою збалансованого розвитку [3].

Універсальної моделі освіти для сталого розвитку не існує. Не дивлячись на згоду країн щодо спільної концепції, підходи до освіти в кожному регіоні, кожній країні будуть відмінні в силу національних особливостей і пріоритетів. Кожна країна сама визначає свої пріоритети і план дій, а також цілі, акценти і процеси, виходячи зі своїх екологічних, соціальних і економічних умов і відповідні шляхи вирішення проблем. Освіта для сталого розвитку важлива як для розвинутих країн, так і для країн, що розвиваються.

З часу проведення Конференції ООН з навколошнього середовища та розвитку багато вищих навчальних закладів, організацій, державних установ та окремих осіб прикладало великих зусиль для включення питань про станий розвиток в учебні програми, заходи та діяльність на місцях.. Особливо важливими для сталого розвитку є два аспекти: процес пізнання протягом усього життя, за якого підприємницький сектор наблизений до університету; та управлінням учебним процесом в університетах, за якого здатність сприяти зміні поглядів та процедур є найвищою. Значні досягнення зроблені у справі впровадження міждисциплінарного підходу у сфері викладання та дослідження. При розробці великих дослідницьких проектів підтримується ідея взаємодоповненості дисциплін. Відповідні матеріали про станий розвиток включені до програм підготовки журналістів, інженерів, менеджерів, лікарів, юристів, економістів, адміністраторів та представників багатьох інших професій, а також у спеціальні програми для викладачів, керівників виробництв, місцевих політиків та лідерів. Завдяки зусиллям таких організацій як Організація університетських лідерів у підтримку сталого майбутнього, Міжнародної асоціації університетів та ЮНЕСКО вдалося розширити партнерські відношення та посилити взаємодію.

Після проведення Конференції ООН з навколошнього середовища та розвитку на значно вищому рівні визнається роль освіти у сприянні екологічно-збалансованого розвитку виробництва з метою зміни відносин та поведінки людей як виробників і споживачів, так і громадян, на яких лежить колективна відповідальність та обов'язки. Однак ця сфера діяльності все ще залишається на початковому етапі розвитку.

Необхідно відзначити, що нині в галузі освіти зберігається хронічна проблема недостатнього фінансування. Об'єм фінансових засобів, які виділялися з моменту проведення Конференції з метою підтримки конкретних компонентів освіти в інтересах сталого розвитку невідомий, але й, мабуть, недостатній, бо крім збільшення об'єму фінансування необхідна також координаційна ясність і, якщо це можливо і доречно, мобілізація фінансових ресурсів на освіту на національному та місцевому рівнях.

Неформальна освіта (включаючи інформування населення) представлена у розділі 36 «Порядку денного на ХХІ століття» як ключовий механізм [1]. Загальновідомо, що зміни в системах формальної освіти відбуваються дуже повільно. Для неформальних каналів розповсюдження нової інформації та виявлення нових підходів та методів навчання і пізнання є більш легким завданням. В сфері професійного навчання значні сподівання покладаються на неформальний сектор, який все в більшій мірі розглядається як доповнення до формального навчання, саме тому роль неурядових організацій та різних асоціацій, а також представників засобів масової інформації та творчої інтелігенції стає ще більш важливою.

З часу проведення Конференції значно збільшилися роль та значення основних груп у справі виконання розділу 36. Комітет ЮНЕСКО із зв'язків з неурядовими організаціями, який представляє близько 350 професійних неурядових організацій в галузі освіти, створив спеціальну комісію мобілізації своїх членів для підтримки Всесвітньої зустрічі на вищому

рівні із стального розвитку. Групи з проблем освіти та молоді Комісії із стального розвитку налагоджують співробітництво з іншими групами з проблеми освіти як міждисциплінарної теми. Комітет зі стального розвитку Конференції неурядових організацій, які мають консультативний статус при ЕКОСОС та Комітет з проблем освіти також призначенні впливати на розвиток системи освіти в інтересах стального розвитку.

Після проведення Конференції були висунуті численні регіональні ініціативи в галузі освіти в інтересах стального розвитку. Організація американських держав та ЮНЕСКО профінансували міжнаціональний проект з просвітництва з метою виховання почуття громадянства та забезпечення стального розвитку в багатонаціональних суспільствах у контексті подальшої діяльності за підсумками другої Всеамериканської зустрічі на вищому рівні (1998 р.) та подальшої Всеамериканської наради міністрів освіти (1998 р.). Європейська комісія організувала у Європі Конференцію з екологічного просвітництва та підготовки (1999 р.), яка стала визначальною у створенні нових мереж в межах Європейського союзу. Канада організувала для 50 франкомовних країн конференцію "Planet ERE" (1996 р.). У листопаді 2001 р. у Парижі (Франція) відбулася друга конференція "Planet ERE 2". Організація економічного співробітництва та розвитку (ОЕСР) організувала нараду з проблем освіти в інтересах стального розвитку, яка відіграла важливу роль у визначені даного аспекту висвітленого у розділу 36.

Таким чином, переорієнтація систем освіти є процесом, який принесе наслідки лише у довгостроковій перспективі. Неформальна освіта, включаючи інформування населення, може принести результати в більш короткий термін. Але й те, й інше мають важливе значення для підготовки освіти до стального розвитку.

В області формальної освіти у майбутньому зусилля повинні бути спрямовані на :

- сприяння освіті для всіх як основоположного права людини та на виконання поставлених міжнародних завдань;
- реформування системи середньої та вищої освіти з точки зору учебових програм та методів навчання;
- переорієнтація підготовки викладачів з метою підвищення якості навчання.

Що стосується неформальної освіти (включаючи інформування населення), то пріоритетну увагу слід приділяти:

- розвитку системи освіти в інтересах стального розвитку;
- сприянню підсиленню екологічно-балансованих дій з боку учебових закладів, неурядових організацій, молоді та інших основних груп населення на національному та місцевому рівнях.

Потрібно також більш глибоко вивчати зв'язки між різними міжнародними планами дій та юридичними документами, що пов'язані з освітою та інформуванням населення, особливо на національному рівні, та з урахуванням не тільки конференцій ООН, але й більш спеціалізованих міжнародних конференцій, які організовуються системою ООН. Такі зусилля повинні бути спрямовані на:

- запобігання розпорощуванню зусиль або дублювання функцій в рамках цих різних програм дій;
- покращення координаційної діяльності системи ООН на національному рівні;
- забезпечення того, щоб освіта та інформування населення були складовими частинами національних стратегій стального розвитку та інших відповідних планів національного розвитку.

- 1) Программа действий, повестка дня на 21 век, Раздел 36, Публ. Центра "За наше общее будущее". - Женева, 1994 – С. 57.
- 2) Степаненко С.Н. Десятилетие ООН по образованию для устойчивого развития (2005-2014). – Одесса: ОГЭУ, 2005. – 20 с.
- 3) Стратегія ЄЕК ООН Освіти для стального розвитку. – Одеса: Екологія, 2005. – 43 с.
- 4) Шевчук В.Я., Білявський Г.О., Саталкін Ю.М., Навроцький В.М. Ноосферогенез і гармонійний розвиток.- К.: Геопrint, 2002.- 127 с.

РОЗРОБКА РЕЄСТРУ ВИКІДІВ І ПЕРЕНЕСЕННЯ ЗАБРУДНЮВАЧІВ У ЧЕРКАСЬКІЙ ОБЛАСТІ

Свояк Н.І.

Черкаський державний технологічний університет, Svojak@list.ru

Після конференції ООН 1992 р. присвяченої навколошньому середовищу та створенню національних реєстрів викидів і перенесення забруднювачів (РВПЗ), як засобу поліпшення управління станом навколошнього середовища на національному рівні, Організація економічного співробітництва (ОЕСР) у 1994 р. почала роботу по розробленню керівництва щодо надання допомоги державам у створенні РВПЗ, яке було видане у 1996 р. і стало основним міжнародним документом з РВПЗ.

РВПЗ є каталогом або базою даних про викиди і перенесення потенційно небезпечних речовин, що містить інформацію про природу і кількість таких викидів. Дані для РВПЗ збираються з окремих стаціонарних джерел забруднення, таких як фабрики, заводи, та розсіяних-сільське господарство, транспорт. РВПЗ включає дані про викиди у повітря, воду, ґрунт; відходи, які перевозяться до місця переробки та захоронення, і є засобом отримання систематичної, періодично оновлюваної інформації, про викиди і перенесення хімічних речовин та засобом забезпечення доступу до інформації тих, хто може бути в ній зацікавлений або кого вона стосується. Це дає змогу розглядати РВПЗ як один із блоків екологічного моніторингу стану довкілля, його інформаційно-програмну базу.

17-19 січня 2000 р. у м. Києві на базі Інституту медицини праці АМН України за участю і сприяння ЮНЕП Кемікал, Міністерств екології та природних ресурсів, охорони здоров'я та інших проходив міжнародний семінар, де було відмічено, що, незважаючи на наявність форм державної статистичної звітності, в Україні відсутня інтегрована система реєстрації викидів забруднюючих речовин у навколошнє середовище та не напрацьовані дійові механізми збору і ефективного використання даних. Тому створення такої інтегрованої системи реєстрації викидів для України з її складною екологічною ситуацією та розташуванням у центрі Європи є дуже актуальним. Визначено, що першочергово мають бути розроблені региональні РВПЗ у Черкаській, Дніпропетровській та Донецькій областях з подальшим створенням Національного реєстру викидів і перенесення хімічних забруднювачів України (НРВПЗ).

В Черкаській області проведення даної розробки здійснювалося за підтримки фонду охорони навколошнього природного середовища, розпорядником якого є Обласна Рада. Виконавці РВПЗ в Черкаській області: Черкаська обласна санепідстанція, науковці Черкаського державного технологічного університету, Черкаського Національного університету імені Богдана Хмельницького та Черкаського регіонального відділення Української технологічної академії. Програмне забезпечення здійснено згідно пакету прикладних програм (ППП) MAGIK, який розроблений у відділі медичної інформатики Інституту гігієни і медичної екології ім. А.Н.Марзеєва АМН України і не має вітчизняних або закордонних аналогів. ППП призначений для аналізу впливу шкідливих факторів навколошнього середовища на стан здоров'я населення та довкілля.

При побудові РВПЗ області, враховано еколого-географічні особливості регіону та здійснено контроль :

- за розсіюванням шкідливих речовин, за умов відсутності вираженої рози вітрів;
- за якістю води, за умов великої площі мілководь у Кременчуцькому водосховищі та можливості поширення забруднювачів вниз по течії р. Дніпро у зону розташування великих міст Придніпров'я.

Також враховані особливості виробництв. У викидах підприємств у повітря превалують окисники довкілля, такі як оксиди азоту, сірки, вуглецю. Останні можуть призводити до утворення кислотних дощів і, як результат, створення умов для закислення чорноземів, враження рослинності та інших негативних наслідків.

ВИБІР ПРИОРИТЕТІВ СТАЛОГО РОЗВИТКУ УКРАЇНИ ЗА РЕЗУЛЬТАТАМИ ВИВЧЕННЯ СУСПІЛЬНОЇ ДУМКИ

Сокол Л.М., Підліснюк В.В.

Національний аграрний університет України, lesya_german@bigmir.net

В стрімкому розвитку провідних зарубіжних країн значну роль відіграє процес впровадження власних стратегій та планів сталого розвитку, що передбачає гармонійне поєднання економічного розквіту, соціальної підтримки населення та захисту навколошнього середовища.

На сьогодні в розвинутих країнах світу сформовано засади збалансованого розвитку суспільства, створено відповідні органи (ради та комісії), завданням яких є інституційна підтримка процесу. В Україні проходять демократичні зміни, трансформація суспільства, тому необхідним слід вважати розвиток країни на умовах сталості.

Одним із перших кроків діяльності органів із сталого розвитку є вивчення ставлення громадськості до даного питання. Тобто важливою умовою переходу від нераціональних моделей розвитку до гармонійного розвитку є сприяння розумінню задекларованої мети всіма верствами суспільства. Можливість впровадження такої мети залежить від готовності всього суспільства брати участь в широкому співробітництві і діалозі та від усвідомлення самостійної ролі, зобов'язань і потенціалу кожного громадянина.

Порядок денний на ХХІ століття виділяє основні групи суспільства, участь яких позитивно впливає на політику сталого розвитку. Це неурядові громадські організації, урядовці, молодь, жінки, місцеві громади.

Світова практика показує, що прийняття рішень з питань екології та сталого розвитку в тому числі ґрунтуються на результатах соціологічних опитувань. З цією ціллю протягом 2005-2006 років нами було проведено три етапи опитування представників різних груп населення: урядових структур центрального й місцевого рівнів, викладачів університетів та студентської молоді. Загальна чисельність опитаних становила 585 осіб.

Всього було опитано 270 державних службовців (98 чоловіків і 172 жінки віком від 25 до 70 років), серед яких були працівники Верховної Ради України, державні службовці м. Бориспіль, Бориспільської районної ради та сільської Ради с. Мирного Бориспільського району Київської області. Всі респонденти мали вищу освіту, 12 з них були кандидатами або докторами наук. Анкета містила питання, відповіді на які дали можливість встановити рівень обізнаності та компетенцію даної групи респондентів.

Аналіз одержаних результатів свідчить про наступне. Про сталий розвиток раніше чули 68,2% респондентів і вони трактують його як гармонізацію суспільства в трьох взаємопов'язаних факторах: економіка, екологія та соціальні аспекти – 51,4%; як поліпшення якості життя населення – 25,0%; як баланс між економічним зростанням і збереженням довкілля – 17,4%; як поняття еквівалентне “економічному зростанню” – 4,2%. Серед власних варіантів відповідей респонденти вказали на наступне: сталий розвиток це визнання України на міжнародній арені та як можливість забезпечення потреб нинішніх і майбутніх поколінь. Основними інформаційними джерелами з питань сталого розвитку для респондентів є: телебачення, періодичні видання, Інтернет, а також колеги та друзі. В цілому, серед загальної чисельності опитаних позитивно оцінюють ідею сталого розвитку 226 осіб, негативно – 4 і не сприймають взагалі – 28 осіб.

Важливим питанням стало визначення пріоритетів сталого розвитку. Серед пріоритетів 40% респондентів зазначили створення умов для кращого життя населення; 24 – розвиток економічного сектора; 21 – зменшення екологічного навантаження на довкілля і 12 – демократизація суспільства.

На думку представників влади, законодавчою базою з питань сталого розвитку в Україні має слугувати спеціальний закон – 53%; постанова Кабінету Міністрів України – 19 та указ Президента України – 18%, а опікуватися сталим розвитком має Верховна Рада України – 29%; Кабінет Міністрів України – 23; Адміністрація Президента України – 15;

Міністерство екології – 14; Міністерство економіки – 11%. 98% опитаних переконані, що переход сільського господарства в Україні на шлях сталого розвитку є вкрай необхідним, і лише 2% це заперечують. Майже 80% респондентів наголошують на тому, що громадськість обов'язково повинна брати участь у виборі пріоритетів розвитку економічного, екологічного та соціального секторів, а участь у прийнятті рішень, на думку опитаних, має бути переважно на стадіях ініціювання та обговорення.

Отже, не зважаючи на те, що про сталий розвиток чули лише 184 особи з 270, опитана група на 88% позитивно оцінює його ідею та визначає такі найголовніші пріоритети розвитку суспільства: створення умов для кращого життя населення, розвиток економіки й зменшення негативного навантаження на навколишнє природне середовище. Представники влади визнають необхідність створення законодавчої бази в Україні з питань сталого розвитку та участі громадськості у виборі його пріоритетів.

Нинішня молодь зростала в умовах відсутності тоталітарних ідеологій і тому мислить демократично, молоді притаманне інше бачення світу. Саме тому ще одне опитування було проведено серед студентства м. Києва. Опитували студентів 4-5 курсів Національного аграрного університету (72 студента: 52 жінки та 20 чоловіків; екологи, агрохіміки, економісти, фінансисти); Київського Національного торгово-економічного університету (107 студентів: 80 жінок і 27 чоловіків; менеджери зовнішньо-економічної діяльності, економісти); Міжрегіональної академії управління персоналом (38 студентів: 24 жінки та 14 чоловіків; менеджери, банкіри), Академії муніципального управління (53 студента: 40 жінок та 13 чоловіків; менеджери, економісти); Київського національного університету ім. Тараса Шевченка (22 студента: 21 жінка і 1 чоловік; соціологи та філологи). Загальна кількість респондентів становила 292 особи, відповідно 217 жінок і 75 чоловіків.

Згідно з результатами опитування, ідею сталого розвитку позитивно оцінюють 88% опитаних, негативно – 3 і не сприймають - 9%. 33% опитаних студентів визнали суть сталого розвитку, як гармонійний розвиток економічної, екологічної та соціальної сфер, причому таке тлумачення домінує в анкетах студентів всіх вузів, крім Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Останні вважають, що сталий розвиток – це швидше баланс між економічним зростанням і збереженням довкілля без урахування соціальних аспектів життя. 25,5% опитаних переконані, що сталий розвиток передбачає, крім переліченого, ще й поліпшення якості життя населення, лише 65,5% опитаних чули про “сталий розвиток” раніше, переважно в процесі навчання. Найбільша частка обізнаних припадає на студентів Національного аграрного університету, що пов’язано з викладанням одним із авторів статті дисципліни з основ сталого розвитку та сталого розвитку суспільства, починаючи з 2002 року. Всі опитані студенти пропонують впровадити окремі курси із сталого розвитку в своїх навчальних закладах або ввести елементи сталого розвитку в існуючі курси, створити інформативні програми із сталого розвитку в засобах масової інформації. Крім лекцій, іншими джерелами поінформованості студентів з питань сталого розвитку є Інтернет, телебачення, періодичні видання.

Найголовнішими пріоритетами сталого розвитку студенти вважають: створення умов для кращого життя населення - 28%; розвиток економічного сектора - 24; зменшення екологічного навантаження на довкілля - 18; боротьбу з бідністю - 13% та ін. Водночас, 76,3% переконано в необхідності участі громадськості у виборі пріоритетів сталого розвитку, особливо на стадіях обговорення, ініціювання та реалізації.

Більша частина респондентів (63%) вважає, що державний рівень влади є головним у популяризації та впровадженні ідей сталого розвитку. В освіті з питань сталого розвитку головним, на думку студентства, є інформативні програми у засобах масової інформації (29,2%); впровадження нових курсів з основ сталого розвитку (24,0%), введення елементів сталого розвитку в існуючі курси (17,4%), створення спеціальних курсів для представників влади (13,5%), спеціальних курсів для абітурієнтів (8,7%).

Слід зазначити, що 94% опитаних респондентів переконані у необхідності переходу сільського господарства України на шлях сталого розвитку; 47,1% вважають зелений

сільський туризм одним із пріоритетних напрямів розвитку українського села, проте лише 51% студентів чули про нього.

У процесі опитування студенти надали численні власні коментарі. Серед них є пропозиції широкого поширення інформації про сталий розвиток у суспільстві, збільшення публікацій та передач на дану тему на телебаченні. Також вони висловили бажання скорішого впровадження ідей сталості в політику держави.

Відповіді державних службовців і студентів в основному збігаються. Відмінності стосуються визначення сталого розвитку: студенти визначають його як баланс між економічним та екологічним розвитком, а службовці - як поліпшення умов життя населення.

Крім описаних раніше досліджень, було проведено фокусне опитування професорсько-викладацького складу університетів Автономної Республіки Крим. Серед опитаних були викладачі Таврійського екологічного інституту, Таврійського державного університету та Кримського агротехнічного університету. При визначенні ступеня значної обізнаності цієї групи респондентів з названих питань було використано Q-методологію, розроблену в Університеті Джорджія (США). Опитано 23 особи, серед яких 16 чоловіків і 7 жінок віком від 26 до 78 років (середній вік – 50 років). Обробка результатів показала наступне. Серед опитаних 73,9% респондентів вважають, що сталий розвиток передбачає гармонізацію суспільства у трьох взаємопов'язаних напрямах: економіка, екологія та соціальні аспекти; 47,8% вказали, що сталий розвиток означає знаходження балансу між економічним зростанням і збереженням довкілля; 30,4 визнали, що сталий розвиток гарантує розвиток світової економіки та економічних моделей майбутнього; 17,4% респондентів вважають, що “сталий розвиток” та “економічне зростання” є еквівалентними поняттями, така сама кількість опитаних заперечує останнє твердження.

Цікавими видаються відповіді на питання, що стосуються вибору пріоритетів сталого розвитку. Респонденти зазначили наступні пріоритети: захист природи не може розглядатися окремо від рішень про економічне зростання (43,5%); екологічні дані мають використовуватися при розробці планів розвитку окремої території чи громади (34,8%); створення умов для кращого життя українців (30,4%); інтегрування екологічних аспектів в економічний розвиток (26,1%); стабілізація чи зменшення екологічного навантаження на довкілля (21,7%); врахування думки науковців в управлінні природними ресурсами (21,7%); заміна всіх технологій на “екологічно дружні” (17,4%).

Вирізняється думка викладачів щодо можливостей впровадження освіти для сталого розвитку в Україні. 39,1% опитаних переконані, що поняття “сталого розвитку” є міждисциплінарним і має поширюватися на всі освітні рівні; 21,7 - визнають необхідність співпраці у впровадженні різних типів організацій (урядових структур, приватних фірм, громадських неурядових організацій); 17,4 - переконані в необхідності навчальних семінарів для представників влади зі сталого розвитку та охорони довкілля; 17,4% допускають, що дійсне досягнення сталого розвитку в Україні нині є неможливим через відсутність середнього класу, проте така ж чисельність респондентів це заперечує. Категоричне заперечення одержали наступні твердження: концепція сталого розвитку є досить нечіткою, вона можлива лише у разі розвинутої ринкової економіки, міжнародні угоди та зустрічі є неефективними у випадку сталого розвитку.

Окремо розглядалися питання, які стосуються ролі громадськості у виборі пріоритетів і впровадження ідей сталого розвитку: 39,1% вважають, що найважливішим аспектом сталого розвитку є посилення ролі громадськості й включення в процес прийняття рішень усіх верств населення. Опитані позитивно ставляться до твердження, що успіх сталого розвитку в Україні залежить від активної участі в цьому русі кожної особи – 34,7%.

Відповіді опитувань показують достатній рівень обізнаності громадян України з питань сталого розвитку. Найголовнішим у формуванні й модернізації політики України опитані вважають подолання бідності, створення середнього класу та забезпечення потреб населення при одночасному збереженні якісного довкілля.

ЕКОПРОФІЛЬ РЕГІОNU – ІНСТРУМЕНТ ВІДОБРАЖЕННЯ Й АНАЛІЗУ СКЛАДОВИХ СТАЛОГО РОЗВИТКУ ДОВКІЛЛЯ

Статюха Г.О., Джигирей І.М., Коломієць Д.Р., Чашник Д.В., Тишенко І.А.

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

Необхідність у розробці індексів та індикаторів сталого розвитку була відзначена в «Порядку денному на 21 століття», прийнятому на Конференції ООН по навколошньому середовищу та розвитку в Ріо-де-Жанейро у 1992 р. Аналіз існуючих систем індикаторів сталого розвитку показує, що використання такої системи оцінювання сталого розвитку довкілля як ESI-2005 [1] дає в руки особам, що приймають рішення, інструмент, що прокладає курс до виконання національних природоохоронних показників і полегшує порівняльний політичний аналіз; сприяє впровадженню кількісного підходу в прийнятті рішень на основі досвіду. Система ESI була розроблена як міжнаціональна, а тому враховує широкий спектр показників, частина з яких не відповідає національним пріоритетам сталого розвитку окремих країн. Наприклад, показник «Смерті від повеней, циклонів і посух» можливо є необхідним на міжнаціональному рівні, але очевидно не дозволяє провести адекватний аналіз на більш низьких рівнях: частина країни, регіон, область, місто тощо. Крім того, система ESI зі зрозумілих причин не включає такі життєво важливі для України показники як радіаційна забрудненість території, поширення екзогенних геологічних процесів і т.д. Тому, на основі системи оцінювання сталого розвитку довкілля ESI був розроблений регіональний індекс сталого розвитку довкілля для суб-національного рівня, а саме для областей України, який враховує особливості і пріоритетні напрями охорони навколошнього середовища та екологічного аспекту сталого розвитку України.

Запропонований регіональний індекс сталого розвитку довкілля включає три компоненти, які базуються на 13 індикаторах, а індикатори, у свою чергу, містять загалом 44 змінні:

SYS – компонент «Системи навколошнього середовища»

SYS_AIR – індикатор «Повітря»

SYS_BIO – індикатор «Біорізноманітність»

SYS_LAN – індикатор «Земля»

SYS_WQL – індикатор «Якість води»

SYS_WQN – індикатор «Кількість води»

SYS_RAD – індикатор «Радіаційна та екологічна небезпека»

STR – компонент «Зменшення навантаження на навколошнє середовище»

STR_AIR – індикатор «Зменшення забрудненості повітря»

STR_ECO – індикатор «Зменшення навантаження на екосистему»

STR_WST – індикатор «Зниження споживання і вироблення відходів»

STR_WAT – індикатор «Зниження навантаження на воду»

GLO – компонент «Глобальне управління»

GLO_COL – індикатор «Участь в екологічних проектах»

GLO_GHG – індикатор «Викиди парникових газів»

GLO_TBP – індикатор «Зниження навантаження на трансграничну екологію»

Вихідні дані для розрахунку значень індикаторів, компонентів і, нарешті, індексу сталого розвитку довкілля області були отримані з екологічних паспортів регіонів за 2006 р. (Державне управління охорони навколошнього природного середовища у регіоні), Національної доповіді про стан навколошнього природного середовища, даних Міністерства економіки України тощо.

Необхідно відмітити, що результати, одержані після статистичної обробки вихідних даних зручно відобразити у вигляді екопрофілів окремих областей як за окремими компонентами (рис. 1), та і за індикаторами сталого розвитку довкілля (рис. 2). Екопрофіль дозволяє наочно та швидко проаналізувати недоліки і переваги сталого розвитку навколошнього середовища області, виявити складові, які вимагають негайного втручання, вдосконалення, покращення, прийняття необхідних рішень.

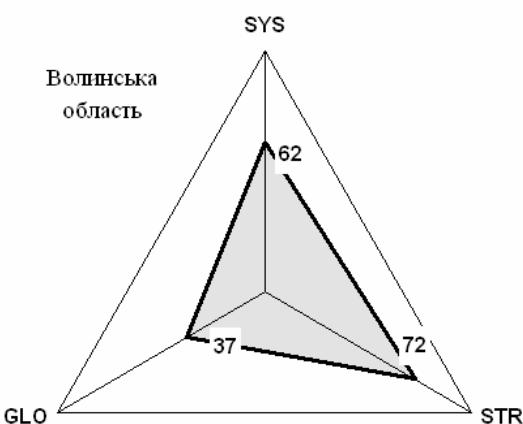


Рис. 1 Покомпонентний екопрофіль Волинської області

Наприклад, покомпонентний екопрофіль Волинської області (див. рис. 1) свідчить про необхідність покращення, вдосконалення всіх або окремих показників, які складають компонент «Глобальне управління», а саме: кількість громадських організацій, що діють на території області; обсяг освоєних коштів з державного та обласного фондів на природоохоронні заходи; викиди парникових газів; зниження навантаження на трансграничну екологію; відходи передані іншим підприємствам, у т.ч. іншим країнам. Детальний екопрофіль Вінницької області (див. рис. 2) відображає проблеми пов’язані з низькою кількістю доступної населенню води, порівняно значними викидами парникових газів, слабкою участю області в екологічних проектах.

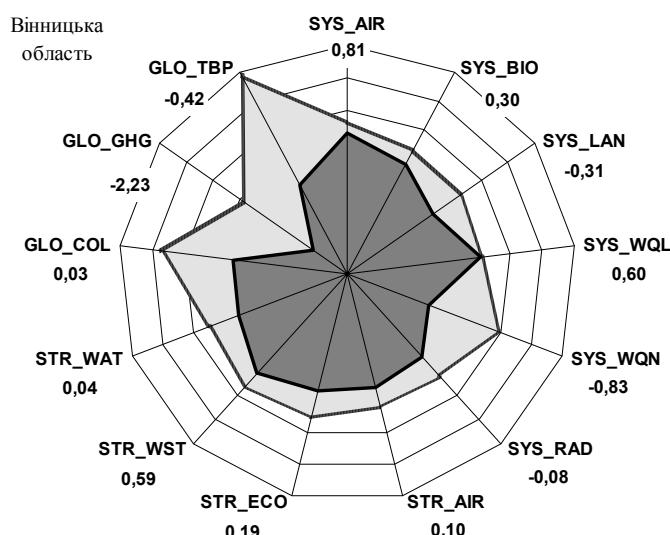


Рис. 2. Екопрофіль Вінницької області:

- – індикатори Вінницької області;
- – максимальні значення індикаторів по Україні

Можна стверджувати, що екологічний профіль є зручним інструментом аналізу проблем регіону у сфері екології і сталого розвитку, дозволяє проводити оцінювання екологічного статусу області поряд з региональним індексом сталого розвитку довкілля та необхідний для прийняття адекватних і своєчасних політичних рішень.

- 1) Statyukha G., Zgurovskiy M. Systems approach for the estimation and management of sustainable development // Proceedings of European Congress of Chemical Engineering (ECCE-6) Copenhagen, 16-20 September 2007.
- 2) 2005 Environmental Sustainability Index. Main Report. – Yale Center for Environmental Law and Policy, USA, 2005.

ВПЛИВ РАДІАЦІЙНОГО ЗАБРУДНЕННЯ НА ЛІСОВЕ ГОСПОДАРСТВО ЧЕРКАСЬКОГО РЕГІОNU

Унрод В.І., Артеменко О.Д., Скалько Н.А.

Черкаський державний технологічний університет, chemistry2007@mail.ru

Українська Технологічна Академія, Черкаське регіональне відділення

Сучасний екологічний стан лісів зумовлюється як рівнем та інтенсивністю антропогенного впливу, так і зростаючим техногенним навантаженням, що порушує природну стійкість і середовищно - формуючі функції лісових екосистем. Лише за останнє десятиріччя в Україні загинуло від промислових викидів 2,5 тис. гектарів лісових насаджень, радіаційного забруднення через аварію на Чорнобильській АЕС зазнали понад 4,6 млн. гектарів земель у 74 районах 11 областей, у тому числі 3,1 млн. гектарів ріллі. З використання вилучено 119 тис. гектарів сільськогосподарських угідь, у тому числі 65 тис. гектарів ріллі.

Як відомо, ліси переважно виконують захисні водоохоронні та екологічні функції. Продукція лісового господарства широко використовується, тому вона повинна бути екологічно безпечною. Для цього вона має пройти радіологічний контроль. Відзначається, що лісові масиви внаслідок особливостей міграції радіонуклідів самоочищаються тільки в результаті радіоактивного розпаду, тому особливо актуальним є вивчення міграційних процесів для складання довгострокових прогнозів по використанню лісу і лісової продукції і для розробки реабілітаційних заходів.

Дослідження радіоактивного впливу на екологічні системи є складним процесом, що виходить за рамки однієї науки, оскільки вимагає використання досягнень у галузі фізики, екології, біології, застосування служб радіологічного контролю та моніторингу. Основою досліджень радіоактивного забруднення та його впливу на навколошнє середовище є вивчення фізичних властивостей радіоактивного випромінювання, розпаду радіоактивних речовин та впливу радіонуклідів на біологічні об'єкти, а також на екологічні системи.

- 1) *И.И. Марадулин, А.В. Панфилов, Т.В. Русина.* Лесное хозяйство, подвергшееся радиоактивному воздействию. // Химия в сельском хозяйстве.-1996.-№1.-с.11-13.
- 2) *Козлов Ф.В.* Справочник по радиационной безопасности. - 4-е изд. перераб. и доп. - М.: Энергоатомиздат, 1991. - 352 с.
- 3) Звіти управління екології та природних ресурсів в Черкаській області за період 1996-2007 pp.

ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ АСПЕКТЫ УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ: СОСТОЯНИЕ, ПРОБЛЕМЫ И ПРЕДЛОЖЕНИЯ

Згуровский М.З., Статюха Г.А.

Национальный технический институт Украины «КПИ», gen.statyukha@gmail.com

Исключительно важный документ ООН «Десятилетие образования в интересах устойчивого развития, 2005-2014» (резолюция 59/237, ПАРИЖ, 11 апреля 2005 г.) предполагает включить ценности, присущие устойчивому развитию, во все аспекты обучения с целью оказания содействия изменению образа поведения в интересах создания более справедливого и устойчивого общества для всех.

Образование в интересах устойчивого развития является начинанием, рассчитанным на всю нашу жизнь и в нем должны участвовать отдельные лица, институты и общества для того, чтобы рассматривать завтрашний день как день, принадлежащий всем нам, ибо в противном случае он не будет принадлежать никому.

Концепция устойчивого развития непрерывно развивается. Поэтому для обеспечения образования в интересах устойчивого развития необходимо иметь в определенной степени четкое представление о том, что означает устойчивое развитие и какие цели оно преследует.

Курс "Анализ устойчивого развития общества" принадлежит к числу новейших образовательных курсов и предполагает междисциплинарный и системный подход к изучению основных проблем взаимодействия человека и окружающей среды с точки зрения принципов устойчивого развития. В соответствии с рекомендациями Конференции ООН по окружающей среде и развитию (Рио-де-Жанейро, 1992г.) изучение проблем устойчивого развития должно либо входить составной частью в программы соответствующей подготовки, либо быть организовано отдельным общим курсом. Постановка данного курса в НТУУ «КПИ» реализует второй подход. При изучении курса студенты получают комплекс знаний по трем направлениям устойчивого развития: **общество, окружающая среда и экономико–технологическое направление как движущая сила устойчивого развития.**

- **Общество:** понимание того, что представляют собой общественные институты, а также их роли в преобразовании и развитии устойчивого развития, равно как и демократических систем, позволяющих обеспечить выражение мнения, укреплять консенсус и преодолевать разногласия.
- **Окружающая среда:** осознание того, какие у физической окружающей среды имеются ресурсы, насколько она нестабильна и как на нее влияют деятельность и решения человека, с проявлением твердого намерения учитывать экологические обеспокоенности при разработке социальной и экономической политики.
- **Экономико–технологическое направление:** учет всех связанных с промышленным и экономическим ростом ограничений и потенциальных возможностей и их воздействие на общество, и окружающую среду при стремлении определить тот уровень личного и общественного потребления, который вызывает обеспокоенность с точки зрения окружающей среды и социальной справедливости.

Отдельное внимание обращается развитию идеи природного капитала, как основы экономико – технологического направления в развитии общества, направленного на сбережение природных ресурсов.

Курс рассчитан на 36 часов лекций и 18 часов семинарских занятий и включен в программу подготовки магистров. Лекции представлены четырьмя разделами и 17 темами:

Раздел 1. Общие вопросы устойчивого развития.

Тема 1. Предыстория и основные понятия устойчивого развития.

Тема 2. Проблемы глобализации и устойчивого развития.

Тема 3,4. Основные документы мирового сообщества по устойчивому развитию.

Тема 5. Проблемы устойчивого развития Украины.

Раздел 2. Измерение устойчивого развития (индикаторы и индексы).

Тема 6. Индикаторы и индексы устойчивого развития.

Тема 7. Интегральные показатели устойчивого развития – индексы.

Тема 8. Индекс устойчивого развития ESI-2005 (Environmental Sustainable Index)

Тема 9. Система глобальных измерений устойчивого развития.

Тема 10. Мониторинг природной среды.

Раздел 3. Устойчивое развитие и технология.

Тема 11. Устойчивое развитие, технология и роль инженерии.

Тема 12. Устойчивые технологии и концепция «Более чистые производства» (Cleaner Production).

Тема 13. Устойчивое развитие, технология и стандарты. Примеры использования стандартов.

Тема 14. Устойчивое развитие, технология и техногенная безопасность.

Раздел 4. Устойчивое управление ресурсами.

Тема 15. Природный капитализм (natural capitalism). – Что это такое?

Тема 16. Основы теории управления материальными ресурсами.

Тема 17. Моделирующие системы: границы роста и за границами роста – или удастся ли человечеству избежать глобальной катастрофы и обеспечить устойчивое будущее?

В настоящее время разрабатываются различные варианты дисциплины, учитывающие объектную направленность магистерской специальности или группы специальностей (технология, электроника, вычислительная техника, менеджмент, социология и др.), а также предусматривается расширение возможностей курса за счет семинарских занятий и курсового проекта.

- 1) Згуровський М.З. Сталий розвиток у глобальному та регіональному вимірах. Київ, НТУУ«КПІ», Політехніка, 2006.
- 2) Згуровский М.З., Статюха Г.А. Роль инженерной науки и практики в устойчивом развитии общества. Системні дослідження та інформаційні технології, №1, 2007. - с.19-38.
- 3) Згуровский М.З., Статюха Г.А. Системный подход к оценке и управлению устойчивым развитием общества. Системні дослідження та інформаційні технології, №3, 2007. - с.7-27.
- 4) Zgurovskiy M, Statyukha G, Kvitka O., Shakhnovsky A, Dzhygyrey I. The Systems Approach to Design of Optimal Water Usage and Wastewater Treatment Networks. Abstracts of International Conference on Environment: Survival and Sustainability. 2007, 19–24 February, Nicosia – Northern Cyprus. – MT-14. – P. 623-624.
- 5) Zgurovskiy M., Statyukha G. Systems approach for the estimation and management of sustainable development. // Proceedings of European Congress of Chemical Engineering (ECCE-6) Copenhagen, 16-20 September 2007. – t. 1, p.977 – 978.
- 6) Zgurovskiy M. Sustainable development global simulation: quality of life and security of the world population. Kyiv, NTUU"КПІ", Polytechnika, 2007.

КОНЦЕПЦИЯ ВЫХОДА УКРАИНЫ В ЛИДЕРЫ МИРОВОЙ ЦИВИЛИЗАЦИИ

Кац М.Д.

Рубежанский химико-технологический институт Восточно-украинского национального университета им. В.Даля, kats@is.ua

Процветание любой страны определяется в первую очередь величиной положительного сальдо во внешнеэкономической деятельности. Если эта стратегическая задача не решена, даже полное решение тактических задач, таких как усовершенствование конституции, искоренение коррупции, обеспечение свободы слова, повышение рождаемости, создание системы управления инновационным развитием, оптимизация налоговой политики, создание дополнительных рабочих мест и др. не смогут обеспечить в энергодефицитной стране с большим объемом малонакоемких промышленных производств (именно такой страной и является Украина) реального повышения уровня жизни населения.

Возможность получения положительного сальдо определяется наличием высоконакоемких (прорывных) технологий, позволяющих производить уникальную продукцию, или продукцию, пользующуюся спросом на мировом рынке, с меньшей себестоимостью и более высоким качеством, чем другие страны.

К сожалению, экспортный потенциал Украины в основном определяется продукцией металлургической, химической, нефтехимической, машиностроительной и металлообрабатывающей отраслей промышленности и сельского хозяйства, характеризующихся низкой научностью и, соответственно, низкими рентабельностью и конкурентоспособностью.

Около 90% продукции, которая производится в Украине, не соответствует современным требованиям. Украина занимает 58 место в мире по конкурентоспособности экономики. Перед нами Зимбабве, на 59 месте Россия. А всего в этой "номинации" 60 мест. (Освіта України. 16.08. 2000).

В настоящее время основными тенденциями в мировой экономике являются:

- создание научноемких технологий с последовательной минимизацией доли материальных и энергетических ресурсов в общей себестоимости продукции;
- разработка информационных технологий (в которых доля материальных и энергетических ресурсов в общей себестоимости продукции стремится к нулю).

В 21 веке прогнозируется глобализация и расслоение мировой экономики.

“Страны, промышленная политика которых направлена на перевод своей национальной индустрии на производство “чистого продукта” (знаний, информационных ресурсов, технических идей, технологий, патентов и инвестиционных проектов), станут всё более недосягаемыми лидерами во всех сферах экономической и политической жизни. Всем остальным, не имеющим ни достойной науки, ни новейших технологических разработок, ни информационной инфраструктуры, придётся довольствоваться положением сырьевых придатков и “грязных цехов” глобальной индустрии”. (П.Бабич, Н.Туров. Эстафета успеха. с.52-57, ММ Деньги и Технологии. 4/2002 г.)

Коммерциализация имеющихся в Украине разработок в области высоких технологий (авиационных, космических, военных, биотехнологических и др.) сдерживается серьезной конкуренцией, необходимостью больших капиталовложений для поддержания мирового уровня разработок и рядом других объективных причин. *«Поэтому говорить о перспективах скорого прорыва высоких украинских технологий на международные рынки, а тем более об опережающем развитии этих технологий, преждевременно. Ни одно решение из сферы высоких технологий не может быть реализовано эффективно за 2-3 года. Обычно они реализуются 5-10 лет».* (Сиденко С. Украина и глобальная конкуренция // Деньги и Технологии. - 2002. – № 1, С. 20-25).

Таким образом, с помощью имеющихся в Украине высоких технологий основная экономическая задача страны в ближайшее время не может быть решена.

Бум в развитии информационных технологий (компьютерных программ, экспертных систем и т.п.) объясняется высокой эффективностью их приложений и высокими доходами от их реализации. Наиболее динамично развиваются те страны, в которых наблюдается устойчивая тенденция роста доли информационных технологий в общем национальном продукте.

В последнее время наблюдается переход некоторых высокоразвитых стран от постиндустриального общества, характеризуемого преобладанием высоконаучноемких технологий, к информационному, в котором всё большая часть валового национального продукта получается за счет информационных технологий.

В отличие от индустриального в информационном обществе стратегическим ресурсом является не капитал, а информация. Информационное общество может позволить себе не изготавливать необходимые для него товары, производство которых требует высоких энерго- и ресурсозатрат или связано с загрязнением окружающей среды. Их проще покупать у других.

В Японии, например, которая собственной нефтью обеспечена лишь на 1% и только на 15% энергетическими ресурсами всех видов, разработки в области информационных обеспечивают поддержание жизнеспособности экономики и покрытие расходов на импорт нефти, пищевых продуктов и сырья.

Несмотря на то, что Украина имеет высокий интеллектуальный потенциал (большое количество высококвалифицированных программистов и постановщиков задач), развитие информационных технологий в Украине проблематично. В этой области существует самая жёсткая конкуренция – даже если развитые страны по каким-либо причинам не смогут затормозить эти разработки, то заблокируют их выход на международный рынок.

Эффективность использования информационных технологий основана на создании программных продуктов, сочетающих формализованные знания самых квалифицированных

специалистов в различных предметных областях и использовании возможностей компьютерной техники для колоссального сокращения трудозатрат на выполнение рутинных работ.

Формализация знаний высококвалифицированных специалистов в информационных системах с одной стороны существенно повышает профессиональные возможности рядовых специалистов, а с другой – накладывает принципиальные ограничения на возможность корректного решения множества наиболее важных задач, связанных с изучением и совершенствованием так называемых "больших систем".

К "большим системам" относятся объекты (процессы, системы, явления), обладающие следующими информационными характеристиками: большим количеством (>10) входных параметров, определяющих поведение изучаемого объекта; существенным взаимным влиянием различных сочетаний этих параметров на выходные показатели процесса; большое количество (>1) выходных показателей, характеризующих эффективность функционирования (поведения) изучаемой системы и др.

Такими информационными характеристиками обладают практически все реальные объекты окружающего нас мира (технические, биологические, медицинские и др.). Оптимальность функционирования этих объектов в конечном счете и определяет качество выпускаемой продукции и услуг, их себестоимость и, соответственно, конкурентоспособность на внешнем рынке.

Ограниченнность психофизиологических возможностей человека при познании «больших систем» и отсутствие корректных формальных методов построения их математических моделей, привели к тому, что человечество создало вокруг себя удивительно неоптимальную среду обитания:

- Практически все технологические процессы в промышленности и сельском хозяйстве избыточно затратны по энергетическим, сырьевым и трудовым ресурсам.
- Отсутствуют формальные методы разработки новых технологических процессов, обеспечивающих получение продукта с минимальной себестоимостью и заданным качеством.
- Отсутствуют формальные методы разработки новых композиционных материалов, обеспечивающих получение материала с заданным комплексом потребительских свойств.
- Отсутствуют надёжные методы дифференциальной диагностики в медицине и ветеринарии.
- Отсутствуют надёжные методы выбора оптимальной стратегии лечения конкретных болезней с учётом индивидуальных особенностей больного.
- Не существует корректных психологических тестов для оценки профессиональной пригодности, таланта, совместимости и т.п.

Т.е. в настоящее время практически все реальные объекты окружающего нас мира недостаточно изучены и, соответственно, имеют большие резервы по повышению эффективности их функционирования. Эффективность капиталовложений в создание любого сложного объекта (системы) по тем же причинам всегда значительно ниже оптимальной.

"Успех решения ряда проблем определяется изобретением новых методов теоретических и математических обобщений научного опыта. Эти изобретения можно рассматривать как своего рода научные открытия. Большие методические изобретения так же, как и научные открытия могут привести к созданию целой научной области и к решению основных задач, стоящих перед наукой уже много времени. (Академик П. Капица).

В настоящее время такое методическое открытие сделано, и сделано оно в Украине. Разработана, апробирована и прошла успешную экспериментальную проверку при решении широкого класса научно-исследовательских и прикладных задач в различных областях науки и техники интеллектуальная методология изучения и совершенствования «больших» систем. (ИМИБС).

В отличие от информационных технологий, основанных на знаниях экспертов, в интеллектуальной методологии решена основная проблема искусственного интеллекта – формализована процедура извлечения новых, не известных ранее экспертам знаний, из экспериментальных данных. Эти знания представляются в виде формальных, непротиворечивых на используемом экспериментальном материале гипотез, отображающих зависимости выходного показателя (или любых комплексов этих показателей) от входных параметров. Полученные гипотезы однозначно интерпретируются на языке конкретной предметной области.

Таким образом, с помощью интеллектуальной технологии реализуется предвидение американских специалистов по информационным технологиям Р.Форсайта, Т.Стониера, З.Рада и др. о том, что *"знания представляют собой столь редкий и дорогой ресурс и в настоящее время столь остро ощущается потребность автоматизировать процесс получения знаний, что рано или поздно его начнут производить в больших количествах"*.

Следует также отметить, что при использовании интеллектуальной технологии для разработки новых товаров и услуг, а также для совершенствования существующих технологий, достигаемые технико-экономические показатели значительно выше, а затраты существенно ниже, чем при использовании для тех же целей традиционных подходов, в том числе и информационных технологий.

Если возможности информационных технологий ограничены знаниями экспертов, то возможности интеллектуальной технологии при изучении и совершенствовании сложных объектов окружающего нас мира во много раз превосходят человеческие.

Открытие интеллектуальной технологии позволяет осуществить прорыв в неизведанную ранее область системных закономерностей сложных объектов окружающего нас мира и, практически без дополнительных затрат, решить множество важнейших научных и прагматичных задач, решение которых с помощью известных методов принципиально невозможно.

К таким задачам, например, относятся.

В области технологий:

– Существенное повышение эффективности действующих производств в базовых отраслях промышленности Украины – металлургии, химии и нефтехимии, обеспечивающих более половины всех валютных поступлений. Именно эти производства в настоящее время являются одними из самых низконаукоемких и, соответственно, малорентабельных. Использование ИМИБС в этих отраслях позволяет выявить имеющиеся в действующих производствах резервы по экономическим, экологическим, энергетическим и потребительским показателям и найти нормы технологических режимов обследуемых производств, позволяющие на существующем оборудовании, с помощью существующих систем информационного обеспечения и управления (т.е. практически без дополнительных затрат) реализовать выявленные резервы и получить продукт с минимальной себестоимостью и заданным качеством.

– Использование интеллектуальной технологии при разработке новых технологических процессов позволяет решать главную задачу: «Найти условия проведения технологического процесса, обеспечивающие получение продукта с минимальной себестоимостью и заданным качеством». В случае, когда по какому либо продукту спрос начнёт превышать предложение, будет решаться 2-ая главная задача: «Найти условия проведения технологического процесса, обеспечивающие получение продукта с максимальной прибылью».

В области материаловедения:

Разработка новых композиционных материалов (металлов, сплавов, резин, пластмасс, катализаторов, выпускных форм красителей и пигментов, смесевых лекарственных форм и т.д.) с заданными комплексами физико-химических, механических, биологических и других свойств.

В этом случае интеллектуальная технология исследования выступает как формализованный алгоритм изобретения.

Чтобы понять, насколько сложна такая задача, снова процитируем академика П. Капицу. *"Несмотря на то, что все механические свойства металлов сейчас хорошо и быстро измеряются, количественной теории, связывающей эти свойства вещества с его химическим составом и физической структурой, пока нет, хотя природа сил между атомами хорошо известна.*

Математическая задача столь сложна, что даже не может быть сформулирована.

Нужно признать, что проблема научного создания новых сплавов с заданными свойствами более чем из трех компонентов не разрешена.

Задача науки – выявить эти закономерности, но метод решения таких сложных проблем до сих пор не найден, и это, несомненно, одна из проблем будущего".

С помощью ИМИБС можно создавать композиционные материалы с неограниченным количеством компонентов.

Композиционные материалы из доступных компонентов, разработанные с помощью интеллектуальной технологии, после патентования и организации производства могут экспортirоваться за рубеж. В случае, когда по каким-то причинам организация производства этих материалов в Украине нецелесообразна, можно продавать ноу-хау по технологиям их получения.

В области медицины:

- Разработка методов корректной компьютерной дифференциальной диагностики внутри групп близких по проявлениям заболеваний.
- Разработка методов прогноза последствий и осложнений болезни (например, будущих осложнений инфаркта миокарда по информации, собираемой в день его проявления).
- Разработка методов диагностики хронических опасных для жизни заболеваний (раковой болезни, хронической почечной недостаточности и др.) в латентном периоде.
- Разработка методов выбора оптимальной стратегии лечения конкретной болезни с учетом индивидуальности больного.
- И многие другие.

Поскольку человеческий организм бесконечно сложен, основные задачи медицины – дифференциальная диагностика трудноразличимых заболеваний и выбор оптимальной стратегии лечения конкретной болезни с учетом индивидуальности больного – в настоящее время остаются уделом талантливых профессионалов, что, кстати, не избавляет во многих случаях от серьезных ошибок.

Использование интеллектуальной технологии для решения этих задач позволит превратить медицину в строгую науку, обеспечивающую практически безошибочную диагностику и выбор оптимальной стратегии лечения для каждого больного.

Широкое применение в медицине программных продуктов, полученных с помощью интеллектуальной технологии, позволит существенно увеличить продолжительность жизни и активное долголетие населения Украины.

Уникальные программные пакеты для дифференциальной диагностики, прогноза последствий и осложнений конкретной болезни по информации, полученной в ее начальном периоде, выбора оптимальной стратегии лечения конкретной болезни и многие другие будут обладать высокой потребительской стоимостью и большим спросом на мировом рынке.

В области машиностроения:

Для высоконаукоемких технологий машиностроительного комплекса (производства турбин, авиационных двигателей и т.п.) применение интеллектуальной технологии позволит выявить системные свойства изучаемых технических систем, определить оптимальные режимы их производства, вскрыть резервы повышения качества и улучшения технико-

экономических характеристик разрабатываемых изделий и, наконец, дать возможность специалистам получить новые знания об их системных зависимостях.

Это позволит сократить время и материальные затраты на испытания и выпуск готовых изделий, улучшить их энергетические и эксплуатационные характеристики.

При синтезе новых химических соединений:

Построение математических моделей зависимости между строением определенного класса химических соединений и комплексом их потребительских свойств.

На основании этих моделей решаются задачи:

– Формального получения объективных, неизвестных ранее гипотез, описывающих зависимость потребительских свойств от различных сочетаний элементов структуры молекулы. Содержательная интерпретация этих гипотез специалистами является их вкладом в науку.

– Прогнозирования свойств новых, еще не синтезированных соединений по их химическим формулам.

– Формального синтеза формул химических соединений изучаемого класса, потенциально обладающих заданным комплексом физико-химических, биологических и др. свойств.

Использование интеллектуальной технологии позволяет значительно сократить сроки и затраты на разработку новых высококачественных биологически активных веществ, лекарственных препаратов, синтетических красителей, пигментов и химических соединений, используемых в других областях.

В области психологии: Разработка специфичных тест-комплексов для оценки способностей к выполнению определенных видов работ, прогноза поведения в экстремальных условиях, и др.

В других областях:

– Для изучения, прогноза поведения, диагностики и оптимизации объектов (процессов, систем, явлений) любой физической природы, информация о функционировании (поведении) которых может быть представлена в виде таблицы, каждая строка которой содержит значения входных параметров и выходных показателей в одной реализации наблюдаемого объекта.

Потенциальные возможности интеллектуальной методологии изучения «больших» систем – методологическая основа для решения глобальной экономической задачи Украины – существенного повышения величиной положительного сальдо во внешнеэкономической деятельности.

Широкомасштабное использование интеллектуальной технологии позволит:

– За счет оптимизации действующих металлургических, химических, нефтехимических и др. производств без дополнительных капитальных затрат существенно сократить энерго- и ресурсопотребление, количество отходов производства, снизить себестоимость и повысить качество выпускаемых продуктов и тем самым повысить их конкурентоспособность на внешних рынках.

– При разработке новых технологических процессов, композиционных материалов, высококачественных биологически активных веществ, лекарственных препаратов, синтетических красителей, пигментов, катализаторов и т.п. вывести на внешний рынок множество новых, защищенных патентами высококачественных продуктов, или ноу-хау на технологии их получения.

– При разработке программных пакетов дифференциальной диагностики внутри групп близких по проявлениям заболеваний, прогноза последствий и осложнений болезни, диагностики раковой болезни в латентном периоде, оптимизации стратегии лечения для каждой из болезней и др. выставить на внешний рынок уникальные продукты, обладающие высокой потребительской стоимостью, практически неограниченным спросом и не имеющие конкурентоспособных аналогов.

Решение этих задач не возможно без участия отраслевых научно-исследовательских и академических институтов. Широкомасштабное использование интеллектуальной технологии позволит реанимировать науку Украины (обеспечить полноценное финансирование практических всех отраслевых научно-исследовательских и академических институтов) и существенно повысить эффективность и рентабельность их работы).

Широкомасштабное использование интеллектуальной технологии при решении важнейших научно-исследовательских и прагматических задач в самых разных областях науки и народного хозяйства позволит за счет получения товаров и услуг, обладающих высокой конкурентоспособностью, решить проблему получения достаточно высокого положительного сальдо во внешнеторговых операциях и обеспечить фактическую экономическую независимость Украины и существенный рост благосостояния ее населения.

В настоящее время высшей ступенью развития страны считается создание информационного общества, в котором большая доля национального продукта обеспечивается за счет информационных технологий.

По мнению американских экономистов (*К.Фарелл, М.Мандель, К.Пеннар*):

– *"В наши дни и в ближайшем будущем страна, которая контролирует знание и умело использует его, получает в свое распоряжение мощный институт власти и влияния и может претендовать на роль лидера цивилизации"*.

В настоящее время Украина монопольно владеет интеллектуальной методологией получения новых знаний, но к сожалению объемы ее практического использования ничтожны.

При существующих реалиях у Украины есть только один шанс не превратиться в сырьевой придаток и “грязный цех” высокоразвитых стран, а, наоборот, выйти в лидеры мировой цивилизации. Этот шанс – поставить перед страной и последовательно решать задачу организации перехода Украины от индустриального общества (минуя постиндустриальную и информационную стадии развития) к наиболее передовому – интеллектуальному обществу.

Методологической основой этого перехода является Интеллектуальная методология изучения «больших» систем. Дополнительная информация о возможностях и необходимости широкомасштабного использования интеллектуальных технологий приведена в работах [1-4].

ВЫВОДЫ

1. Широкомасштабное использование Интеллектуальной методологии изучения «больших» систем во всех возможных сферах ее применения позволит Украине из индустриального общества, минуя постиндустриальную и информационную стадии развития, перейти к наиболее передовому – интеллектуальному обществу, в котором основная доля национального продукта будет получаться за счет интеллектуальных технологий, и тем самым обеспечить себе роль мировой цивилизации.

2. Интеллектуальная методология изучения «больших» систем может и должна стать методологической основой «Интеллектуального прорыва» (в рамках Украинского прорыва), предложенного премьер-министром Ю. Тимошенко.

- 1) Кац М.Д. Стратегия выхода Украины в лидеры мировой цивилизации // Стратегія розвитку України. (економіка, соціологія, право). -2003. - №1. – С.147-154.
- 2) Кац М.Д. Стратегія державного управління економікою // Стратегія розвитку України (економіка, соціологія, право). - 2004.- №1-2. - С. 137-146.
- 3) Кац М.Д., Диденко С.П., Давиденко А.М. Интеллектуальная методология исследования «больших» систем – методическая основа комплексного решения проблем устойчивого развития. // Сборник научных статей 13 международной научно-практической конференции: Экология и здоровье человека. – Харьков. - 2005. - Т.1. - с. 236-249.
- 4) M. Kats. Intellectual methodology of big system research - basis of the methodological complex solution of stable development problems. //System research and open system management. - 2006. - №1. - P. 44-56.

К ВОПРОСУ РАЗРАБОТКИ ИНДИКАТОРОВ УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ ПРИБРЕЖНОЙ ЗОНЫ КРЫМА

Панкратова Н.Д., Бугаева Л.М., Безносик А.Ю.

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

Разработкой региональных индикаторов устойчивого развития (УР) сейчас занимаются в разных организациях, как мира, так и Украины. Можно найти примеры разработки специфических индикаторов для отдельных территорий России, отдельных промышленных комплексов и даже городов.

Необходимость разработки «своих» индикаторов диктуется особенностями развития того или иного региона, где некоторые антропогенные, экзогенные и техногенные факторы выражены в разной степени. Поэтому полученная на их основе экологическая составляющая индекса УР, например ESI-2005, может складываться как из разных перечней индикаторов, куда могут входить и новые, так и учитывать одни и те же индикаторы с различными весами или в имеющиеся индикаторы могут входить разные наборы переменных с разными весами. Понятно, что для обоснованного выбора индикаторов, переменных и весов нужно организовывать специальные процедуры экспертного оценивания, например, на основе метода Дельфи, метода анализа иерархий и др.

Проблемами устойчивого развития Крыма занимаются Крымская академия наук, различные исследовательские институты и университеты Украины. Во всех имеющихся документах и публикациях подчеркивается, что главное богатство Крыма - это исключительные природные данные, благодаря которым Крым имеет высочайший рекреационный потенциал. Сохранение и восстановление природных ресурсов и экологии является основой УР региона.

Учеными Крымской академии наук был проведен анализ экологического состояния полуострова и сделан вывод о том, что экологическое состояние Крыма можно охарактеризовать как напряженное с отдельными очагами предкризисной ситуации. По степени загрязненности территории полуострова были разделены на пять групп: условно-чистые, умеренно грязные, загрязненные, сильно загрязненные и чрезмерно загрязненные с признаками экологической катастрофы. Согласно введенной градации, прибрежная зона в районе ЮБК относится к условно-чистым и слабо загрязненным территориям, а вот приморские города Севастополь, Феодосия, Керчь и др. относятся к сильным и чрезвычайно сильным загрязненным регионам.

Рассмотрим специфику прибрежной зоны (ПБЗ) Крыма с точки зрения разработки индикаторов экологической составляющей ESI-2005. Известно, что Крым имеет почти 1000 км морского побережья, из которых половину составляют песчаные пляжи. При этом также известно, что именно в прибрежных акваториях Крыма скапливается до 90% всей массы загрязняющих веществ, поступающих с суши.

Уровень антропогенной нагрузки в некоторых районах жемчужины Крыма ЮБК уже превышает восстановительные возможности прибрежных экосистем. Известна проблема горного массива Ай-Петри, где тысячи туристов и стихийная инфраструктура для их обслуживания может привести к непоправимым изменениям в экологии этого одного из самых привлекательных уголков Крыма. Отсутствие цивилизованной сферы обслуживания, систем выведения сточных вод и удаления твердых отходов, не только напрямую влияет на привлекательность Ай-Петри для туристов, особенно иностранных, но и приводит к загрязнению почвы и подземных вод. В смысле антропогенной нагрузки в более выигрышном положении находится природный заповедник Кара Дага. Однако естественные экзогенные процессы характерны для всей ПБЗ, включая даже ее не горные участки. Наиболее яркий пример – это «сползание» Ливадийского дворцового парка. По данным экологического паспорта АРК 2006г. в Крыму насчитывается 1351 оползень (из них активных 241) общей площадью 1562 км².

Хотя в настоящее время промышленное развитие Крыма в основном сводится к обслуживанию отдыхающих и потребностей массовой застройки, но оставшиеся промышленные предприятия оказывают значительное влияние на экологию Крыма. Например, завод «Титан» (г. Армянск) имеет кислотонакопитель площадью 42 км², на дне которого лежат сотни тысяч тонн вредных отходов. К сожалению, крушения морских судов в последнее время значительно повлияли на экологическое состояние ПБЗ, особенно на ее биоразнообразие. Захоронение радиоактивных отходов в Крыму также не способствует рекреационной привлекательности Крыма. Основным источником загрязнения воздуха оксидами азота, серы и углерода в прибрежной зоне Крыма является автотранспорт. Кроме этого, предприятия тепловой энергетики также способствуют загрязнению воздуха. Сейчас действуют программы перехода на альтернативные виды энергетики в Крыму, однако, это пока что дорогая энергетика.

Исходя из специфики проблем Крыма вообще и его прибрежной зоны в частности, можно предложить кроме общепринятых следующий перечень регионально значимых индикаторов и переменных в структуре этих индикаторов.

Ввести индикатор **ALT_ENER**, как доля энергии произведенной альтернативными источниками (типа ветроэнергетики) по отношению ко всей энергии, произведенной на территории Крыма.

В структуре индикатора (**STR_AIR**) – «Уменьшение загрязненности воздуха» увеличить значимость переменной «выбросы загрязняющих веществ от автомобильного транспорта за год» (**CAR_SKM**, т/м²).

В состав индикатора биоразнообразие (**SYS_BIO**), можно ввести переменную, которая бы характеризовала не только площади и количества заповедных зон Крыма, но и протяженность береговой линии в км, которая принадлежит этим заповедникам.

Аналогично, можно ввести показатель уровня загрязнения морской воды ПБЗ нефтепродуктами в результате судоходства **OIL_WST**. Здесь возможна проблема с получением адекватных данных и выбором единиц измерения.

Следует отметить, что экзогенные процессы в ПБЗ Крыма имеют значительное место. Отсюда возможно использование отдельного индикатора **SLIDE** или переменной **SLIDE** в структуре индикатора Земля. При этом в новом индикаторе можно использовать такие переменные как: 1) Общая площадь оползней (км²); 2) Площадь активных оползней (м²); 3) Количество техногенных оползней (шт); 4) Противооползневые мероприятия (финансирование) (тыс. грн).

Эти данные можно взять из экологического паспорта АРК.

Учитывая возможность измерения ПБЗ в «погонных км», можно предложить оценивать общую или относительную протяженность оползневых участков в береговой полосе, выделяя при этом активные оползни.

В списке индикаторов ESI-2005 нет составляющих, которые характеризовали бы радиационное загрязнение. Такой индикатор **SYS_RAD** для регионов Украины было предложено ввести в работах по УР НТТУ «КПИ». В состав **SYS_RAD** входят переменные:

1. Радиационное загрязнение территории;
2. Потенциальная радиационная опасность;
3. Радиоактивно загрязненные земли, которые не используются в хозяйственной деятельности, % от площади территории;
4. Количество радиационно опасных предприятий, шт.;
5. Количество разрешений, выданных на сбережение и использование опасных химических веществ.

Развитие атомной энергетики в Крыму приостановлено, хотя и имеется захоронение радиоактивных отходов в Ленинском районе АРК (.21504 м³ на 2006 г.). Поэтому для прибрежной зоны Крыма возможен упрощенный вариант индикатора **SYS_RAD**, который могут характеризовать всего 2 переменные (первая и четвертая).

В соответствии с существующими уровнями иерархии УР можно представить и иерархическую структуру индексов от верхнего уровня ESI-2005 до уровня индикаторов, введенных для ПБЗ Крыма. Пересечение множеств индикаторов на всех уровнях и должно стать основой для определения экологической составляющей ПБЗ АКР.

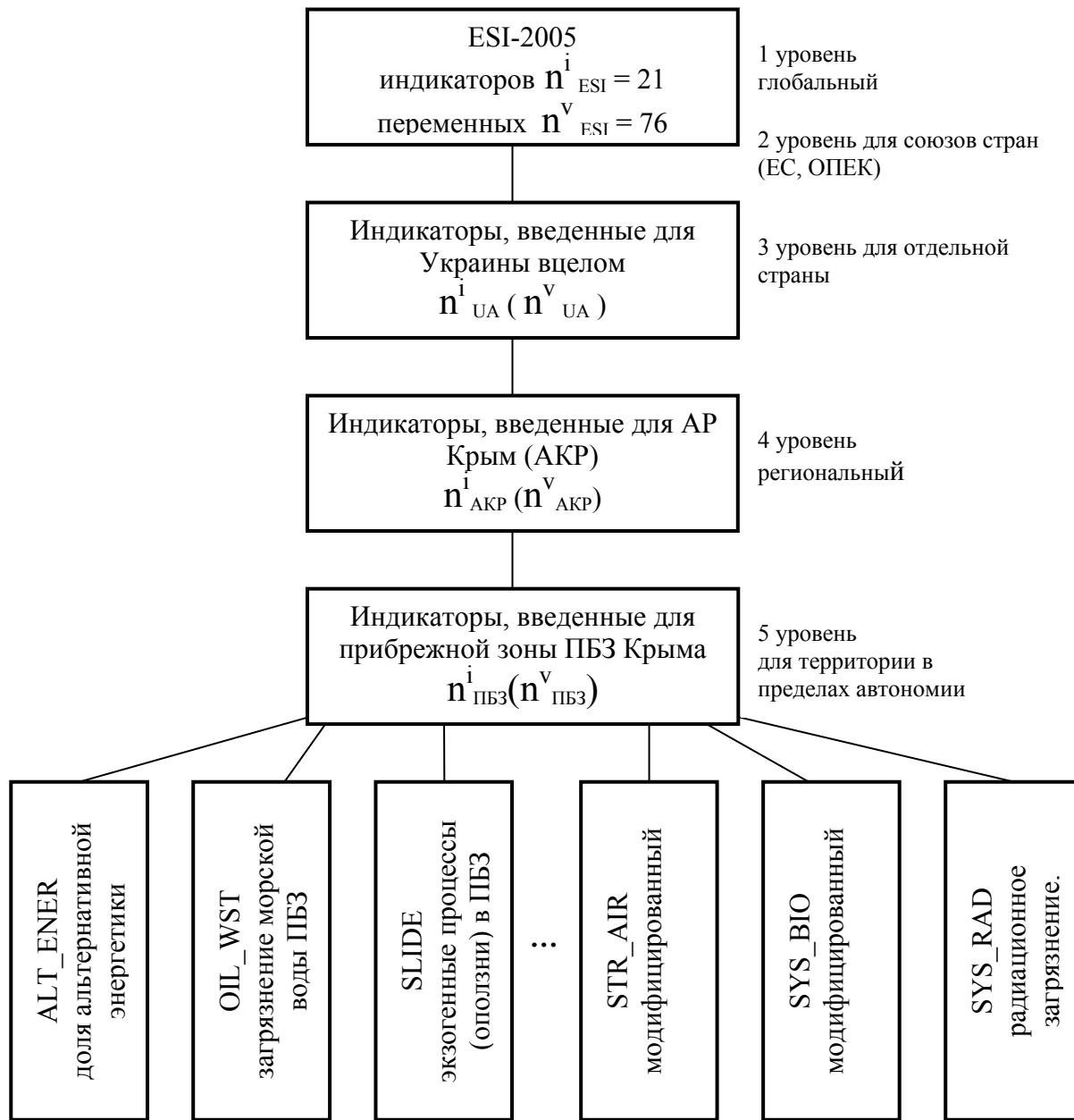


Рис. 1. Уровни иерархии индикаторов для оценки УР прибрежной зоны АР Крым

По состоянию на 2006 г. в систему мониторинга окружающей среды Крыма входило в общей сложности 1136 пунктов наблюдений различных ведомств, из которых по воздуху 272, морской воде 124, подземным водам 425, грунтам 74 и т.д. Поэтому можно ожидать, что имеющиеся в наличии станции мониторинга обеспечат данными возможность определения значений переменных в предложенных индикаторах УР.

Кроме основной задачи оценки УР прибрежной зоны Крыма по предлагаемым переменным и показателям экологической составляющей, параллельно может быть осуществлено принятие соответствующих решений по достижению уровня требований для пляжей под так называемым «голубым флагом», поскольку основная цель программы по УР Крыма - это повышение его рекреационной привлекательности.

РАЗРАБОТКА КОЕФФІЦІЕНТА УСТОЙЧИВОГО РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЯ НА ОСНОВЕ ОЦЕНКИ ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА

Статюха Г.А., Джигирей И.Н., Комаристая Б.Н.

Национальный технический университет Украины «КПИ», dzhigirey@gmail.com

Ряд последних работ в направлении усовершенствования методологии измерения устойчивого развития раскрывают многообещающие возможности применения здесь теории природного капитала [1]. Ключевым элементом теории является идея, что экономика сдвигается от упора на человеческую продуктивность к радикальному увеличению ресурсной продуктивности. Этот сдвиг мог бы обеспечить более значимую оплату семейного труда, лучшие мировые стандарты жизни для тех, кто в этом нуждается и существенное снижение воздействия человека на окружающую среду.

В теории выделяются три основных вида природного капитала: запасы возобновляемых и невозобновляемых ресурсов, земля и экосистемы. Для оценки связей переменных природного капитала – переменных запаса, потоков и состояния – следует представить, как они связаны. Одно из наиболее глубоких исследований в этом направлении принадлежит Д.И. Люри, развившего идею ресурсных циклов [2]. Под ними здесь понимаются квазизамкнутые круговороты используемых человеком материалов по типу "ресурс-отход-ресурс". В результате добычи и последующей переработки в продукт все ресурсы рано или поздно превращаются в отходы, которые полностью или частично восстанавливаются обратно в ресурсы посредством природных или антропогенных механизмов (рис. 1).



Рис. 1. Взаимодействие общества и природы в процессе ресурсопользования при возобновлении ресурсов как за счет естественных, так и за счет антропогенных механизмов

В схемах по Д.И. Люри используется понятие эффективность ресурсопользования, под которым понимается отношение объемов ресурсопользования (т.е. всего количества используемых обществом ресурсов – природных и техногенных) к общим затратам (на добычу и регенерацию). Чем выше эффективность, тем дешевле достается обществу каждая единица ресурса, тем больше остается людям для личного и общественного потребления. С точки зрения решения проблемы управления устойчивым развитием идея количественной оценки эффективности ресурсопользования заслуживает особого внимания.

Предыдущий анализ однозначно подводит нас к выводу, что системные требования в оценке и управлении устойчивым развитием можно удовлетворить на основе теории природного капитала и с использованием ресурсных циклов «потребление – восстановление ресурсов природы» [3, 4]. Рассмотрение процессов на любом уровне иерархии общества в виде циклов «потребление – восстановление ресурсов природы» открывает перед нами перспективу построения приближённой, но идеологически выдержанной модели «круговорота» компонентов природных ресурсов в некоей подсистеме и возможность построения индекса устойчивого развития, с помощью которого можно управлять процессом устойчивого развития (рис. 2).

Баланс потоков системы удобнее всего оценить с помощью единой метрики – экономической (затраты в денежном выражении). Можно построить некий коэффициент устойчивого ресурсосбережения η , который будет характеризовать способность системы восстанавливать забранные у нее ресурсы, а также компенсировать ресурсы взятые ранее:

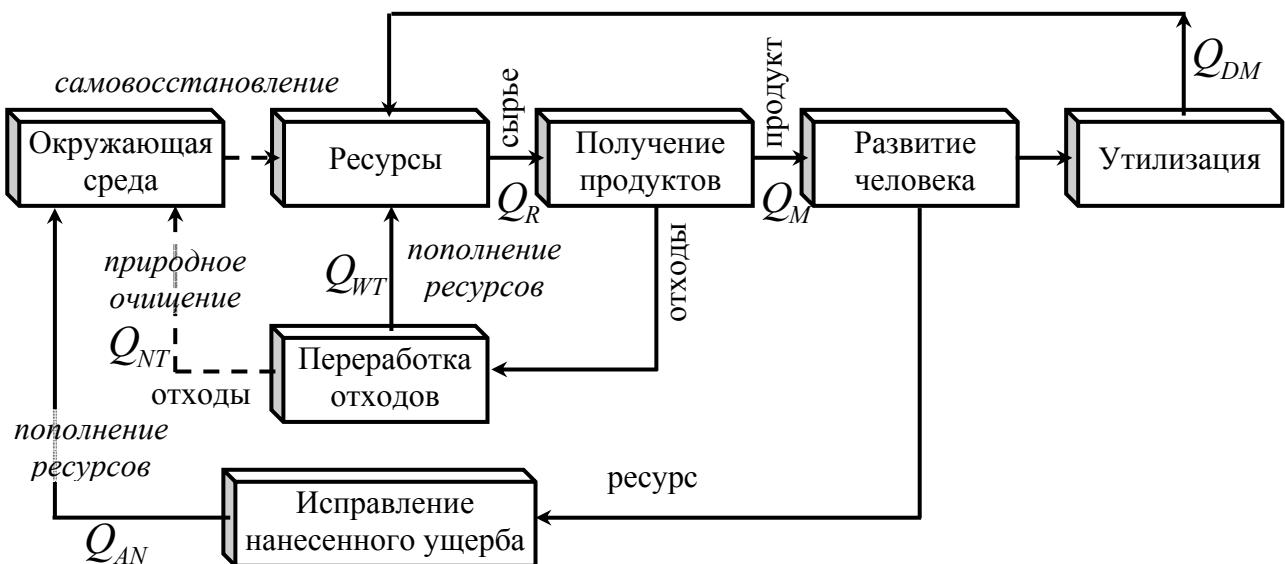


Рис. 2. Цикл «использование-восстановление» ресурсов природы

$$\eta = \frac{Q_R + Q_M}{Q_{WT} + Q_{DM} + Q_{NT} + Q_{AN}},$$

где Q_R – затраты на использование сырья (добыча, транспортировка и т.д.); Q_M – затраты на изготовление и использование продукта (производство продукта, доставка потребителю и т.д.); Q_{WT} – затраты на переработку отходов; Q_{DM} – затраты на утилизацию продукта; Q_{NT} – затраты на технологию природной очистки; Q_{AN} – затраты на исправление ранее нанесенного природе ущерба (возобновление ресурсов за счет антропогенных механизмов).

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 политические решения на уровнях соответствующей иерархии должны быть такими, чтобы добиваться значения $\eta \leq 1$, как за счет снижения затрат ресурсов и усовершенствования технологий производства продуктов, так и за счет увеличения затрат на восстановление и пополнение ресурсов.

Расчет значения коэффициента устойчивого ресурсосбережения удобно проводить на основе оценки жизненного цикла (*LCA*, ОЖЦ) продукцииной системы. А именно, путем построения жизненного цикла продукта (*PLC*), с учетом возобновления ресурсов, в том числе, и за счет антропогенных механизмов, и детального анализа управления запасами жизненного цикла или инвентаризационного анализа (*LCI*), который является вторым этапом ОЖЦ согласно ИСО 14040 «Управление окружающей средой. Оценка жизненного цикла. Принципы и структура» (рис. 3).

Инвентаризационный анализ включает в себя процедуры сбора и расчета данных с целью количественного определения соответствующих входных и выходных потоков данных

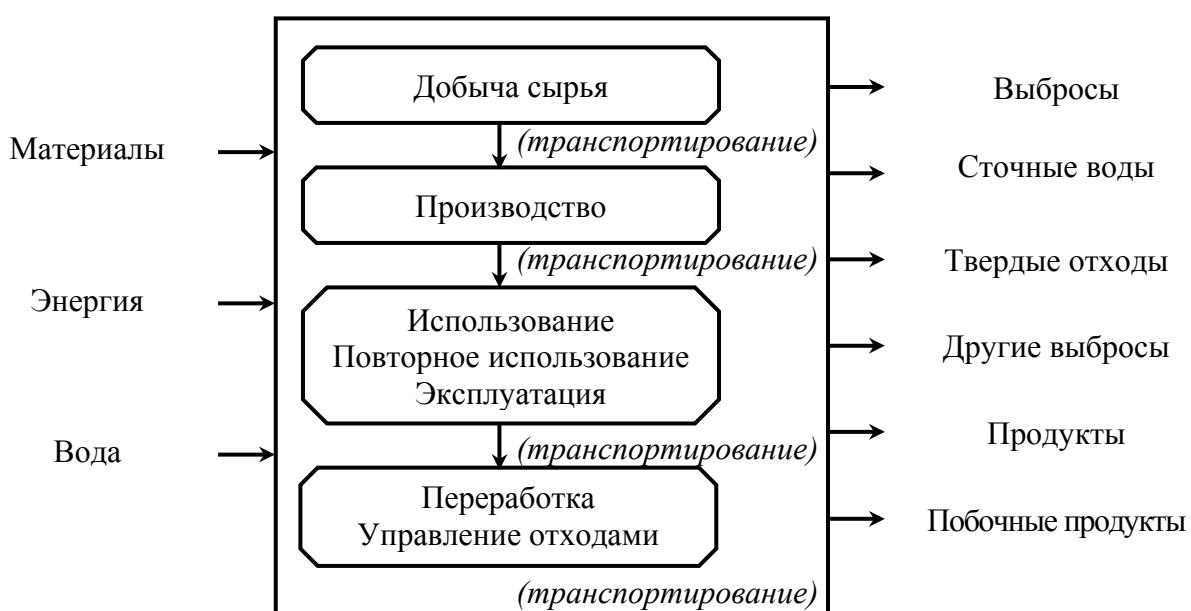


Рис. 3. Анализ управления запасами жизненного цикла

продукционной системы. Процесс инвентаризационного анализа является итерационным. По мере сбора данных и изучения системы могут быть установлены новые требования к ней или новые ограничения, что потребует изменения в процедурах сбора данных для достижения цели исследования [5]. Использование инвентаризационного анализа, наряду с получением полного жизненного цикла продукцииной системы с учетом исправления нанесенного ранее ущерба, позволяет получить коэффициент устойчивого ресурсосбережения, характеризующий данную систему.

- 1) Хокен П., Ловинс Э., Ловинс Х. Естественный капитализм. Грядущая промышленная революция. М., 2003.
- 2) Люри Д.И. Развитие ресурсопользования и экологические кризисы. М., Дельта, 1997, 238с.
- 3) Згуровский М.З., Статюха Г.А. Роль инженерной науки и практики в устойчивом развитии общества. Системні дослідження та інформаційні технології. № 1, 2007, с. 19 – 38.
- 4) Згуровский М.З., Статюха Г.А. Системный подход к оценке и управлению устойчивым развитием общества. Системні дослідження та інформаційні технології, №3, 2007, с. 7 – 27.
- 5) ИСО 14040 – Управление окружающей средой. Оценка жизненного цикла. Принципы и структура.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО

Воляр Р.Н., Егоров С.Г., Червоный И.Ф.

Запорожская государственная инженерная академия, г. Запорожье, rot@zgia.zp.ua

При выращивании монокристаллов кремния методом Чохральского из расплава в выращиваемом монокристалле создается тепловое поле, которое зависит от количества расплава в тигле, конструкции теплового узла и ростовой камеры установки выращивания. Выращивание производилось в промышленных условиях по методу Чохральского в установках типа «Редмет-30» в вакууме при протоке инертного газа аргона при следующих технологических режимах: скорость выращивания составляла 1,8 мм/мин в начале процесса и 0,7 мм/мин в конце процесса выращивания, скорость вращения тигля 5 мин⁻¹, скорость вращения кристалла 15 мин⁻¹, расход инертного газа аргона составлял 30 л/мин. Масса загрузки составляла 40 кг, диаметр кварцевого тигля 356 мм. Распределение температуры по радиусу выращиваемого монокристалла кремния описывается уравнением

$$\frac{T}{T_0} \approx \left[1 - \frac{ah}{2} \cdot \left(\frac{r}{a} \right)^2 \right] \cdot \exp \left[-\frac{z}{a} \cdot (2ah)^{\frac{1}{2}} \right],$$

где T – текущая температура монокристалла, К; T_0 – температура кристаллизации кремния, К; a – радиус выращиваемого монокристалла кремния м; $h=a/\lambda$, α – коэффициент теплоотдачи с поверхности монокристалла, λ – теплопроводность; r и z – радиальная и осевая координаты соответственно.

Реальное распределение температуры в монокристалле в процессе выращивания приведено на рисунке. За начало координат принимается линия фронта кристаллизации. Распределение температуры по длине монокристалла фиксировалось при изменении скорости выращивания от 1,5 мм/мин в начале процесса выращивания до 0,6 мм/мин в конце процесса.

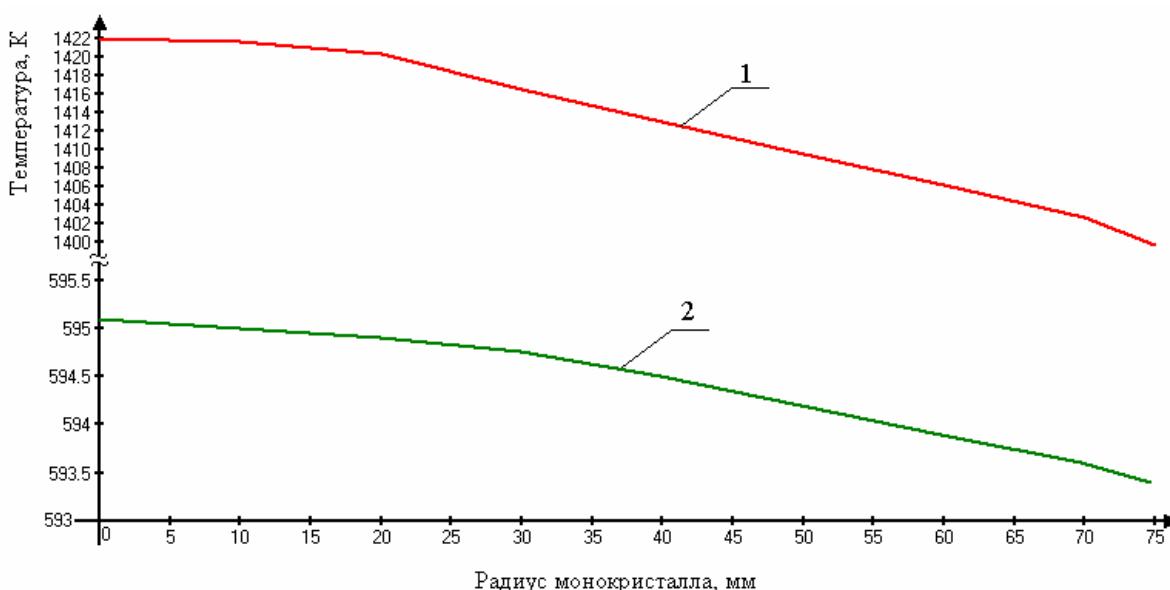


Рис. 1. Распределение температуры по оси монокристалла кремния

1 – расстояние 50 мм от фронта кристаллизации

2 – расстояние 750 мм от фронта кристаллизации

Как видно из рисунка, распределение температуры по длине монокристалла в реальном процессе выращивания отличается от теоретического распределения. Такое отличие распределения температуры можно объяснить применением экранирования нагревателя для сокращения тепловых потерь в камере выращивания.

ПРИМЕНЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ПАКЕТОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВИЖЕНИЯ РАСПЛАВА

Егоров С.Г., Воляр Р.Н., Червоный И.Ф.

Запорожская государственная инженерная академия, г. Запорожье, rot@zgia.zp.ua

При индукционной бестигельной зонной плавки (БЗП) выращивание монокристаллов кремния осуществляется из расплавленной зоны. Процессы, протекающие в этой зоне, играют определяющую роль в формировании электрофизических свойств монокристалла [1, 2]. Наличие тепловой, центробежной, термокапиллярной и электродинамической конвекций вызывает движение расплава. Вид потоков и их скорость движения зависят от таких технологических параметров как скорость прохода зоны и частоты вращения монокристалла [3, 4]. Движение расплава оказывает влияние на распределение температуры и примесей, как в объеме расплава, так и на фронте кристаллизации.

Для проведения исследований была построена математическая модель движения расплава в жидкой зоне при БЗП кремния, которая основывалась на совместном решении системы уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска с уравнениями переноса тепла и массы (решение осуществлялось с помощью математического пакета *Femlab 2.3*):

$$-\eta \nabla^2 U + \rho(U\nabla)U + \nabla P = F, \\ \nabla U = 0 \quad (1)$$

$$\nabla(-k\nabla T + \rho \cdot C_p \cdot TU) = Q_T, \quad (2)$$

$$\nabla(-D\nabla C + CU) = Q_C, \quad (3)$$

где η – динамическая вязкость; U – вектор скорости; ρ – плотность; P – давление; F – внешние силы; T – температура; k – коэффициент теплопроводности; C_p – теплоемкость; Q_T – источник тепла; D – коэффициент диффузии; Q_C – источник вещества.

Решение системы (1)-(3) производилось при следующих граничных условиях:

- ось симметрии: $u = 0, \partial v / \partial x = 0, w = 0, \partial T / \partial x = 0, \partial C / \partial x = 0;$
- фронт плавления: $u = v = 0, w = \omega_{cm} R_{cm}, T = T_{nl}, C = 1;$
- свободная поверхность расплава: $u = f(x), v = f(y), w = const, T = f(x), \partial C / \partial y = 0;$
- фронт кристаллизации: $u = v = 0; w = \omega_{kp} R_{kp}, T = T_{kp}, f_c(1 - k_0)C + D \cdot grad C = 0,$

где u, v, w – радиальная, осевая и азимутальная составляющие вектора скорости движения расплава; ω_{cm}, ω_{kp} – частота вращения исходного стержня и монокристалла соответственно, с^{-1} ; f_c – скорость прохода зоны, $\text{мм}/\text{мин}$; k_0 – равновесный коэффициент распределения примеси.

Зависимость толщины диффузационного слоя от частоты вращения монокристалла:

$$\delta = 1,6 \frac{D^{1/3} \cdot v^{1/6}}{\omega_{kp}^{1/2}}, \quad (4)$$

где v – кинематическая вязкость расплава кремния, $v = 3,5 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}.$

Выражая частоту вращения кристалла через азимутальную составляющую скорости и учитывая, что кроме вращения существует и радиальное движение расплава, можно получить зависимость толщины диффузационного слоя от скорости движения расплава:

$$\delta_D = 1,6 \cdot D^{1/3} \cdot v^{1/6} \cdot \frac{R_{kp}^{1/2}}{(u^2 + w^2)^{1/4}}. \quad (5)$$

В зависимости от режимов плавки в расплаве преобладающей становится тепловая конвекция, характеризующаяся радиальной составляющей скорости движения расплава, или центробежная конвекция, характеризующаяся азимутальной составляющей. Управляя режимом перемешивания расплава можно выращивать монокристаллы кремния с заданным радиальным распределением примеси

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ С ЦЕЛЬЮ ОПТИМИЗАЦИИ СОСТАВА ШЛАКА ШАХТНОЙ СВИНЦОВОЙ ПЛАВКИ

Косенко В.Н., Грицай В. П.

Запорожская государственная инженерная академия, colour@zp.ua

Ежегодно на поверхности складируются миллионы тонн силикатных промышленных отходов, что порождает серьезные экологические проблемы, занимая сотни тысяч гектаров плодородных земель.

В то же время народное хозяйство нуждается в огромных количествах дешевых видов строительных материалов для промышленного, гражданского сельского, жилищного и дорожного строительства. Замена горных пород, при изготовлении строительных материалов силикатными промышленными отходами, в большинстве случаев улучшает их качество.

Одним из основных направлений совершенствования комплексности переработки сырья с целью извлечения из него ценных составляющих является оптимизация состава шлаков металлургического производства.

В данной работе рассмотрен в качестве исследуемой системы - шлак шахтной плавки вторичного свинцового сырья.

Основой исследований стали результаты анализов 780 проб шлака шахтной печи завода "Укрцинк" с целью определения оптимального состава шлака при шахтной плавке вторичного свинецсодержащего сырья методами математического моделирования.

В основу решения задачи нахождения оптимального состава шлака положен аналитический метод корреляционного анализа статистических данных пассивного наблюдения над составом шлака. Целью исследований являлось изучение зависимости потерь свинца со шлаком от содержания в нем шлакообразующих компонентов.

Проверка гипотезы нормальности распределений показала, что распределения исследуемых факторов близки к нормальнм. Это позволило в первом приближении проанализировать распределение и оценить связи между параметрами по коэффициентам парной корреляции.

На основании полученных линии регрессии авторами сделан вывод, что при увеличении содержания оксида кальция в шлаке потери свинца уменьшаются, причем наиболее резкое снижение потерь свинца в шлак наблюдается при содержании в нем оксида кальция 15-21%, когда зависимость между ними близка к линейной.

Зависимости потерь свинца от содержания оксида железа, диоксидов кремния и алюминия имеют экстремальный характер с точками минимума и максимума соответственно: 20-24%; 31-40%; 13-16%.

Для обоснования полученных результатов проведены эксперименты в лабораторных условиях, целью которых являлось изучение поведения свинца при плавке в зависимости от состава шлака, температуры плавки, продолжительности выдержки.

План эксперимента представляют в виде матрицы полного факторного эксперимента.

Ввиду того, что факторы различны по физической природе и изменяются в различных динамических диапазонах, для дальнейшей формализации процесса анализа и независимости полученных результатов от изменения масштаба входных величин факторы предварительно кодируем.

Введены следующие обозначения:

x_1 - изменение содержания SiO_2 в шлаке (31-40%);

x_2 - изменение содержания FeO в шлаке(20-24 %);

x_3 - изменение содержания CaO в шлаке (15-24%).

Вычисленные по приведенным формулам значения δ_1 и x_i^0 равны:

$$\delta_1 = 4,5 \quad \delta_2 = 2 \quad \delta_3 = 4,5 \quad x_i^0 = 35,5 \quad x_i^0 = 22 \quad x_i^0 = 19,5$$

План и результаты эксперимента (\bar{y}^3), полученные в лабораторных условиях.

Таблица 1

№ п/п	x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1 * x_2$	$x_1 * x_3$	$x_2 * x_3$	$x_1 * x_2 * x_3$	\bar{y}^3
1	+	+	+	+	+	+	+	+	2,4
2	+	+	—	+	—	+	—	—	1,4
3	+	—	+	+	—	—	+	—	1,2
4	+	+	+		+	—	—	—	2,3
5	+	—	—	+	+	—	—	+	0,9
6	+	+	—	—	—	—	+	+	1,6
7	+	—	+	—	—	+	—	+	2,0
8	+	—	—	—	+	+	+	—	1,9

По результатам 24 анализов шлаков, полученных в ходе лабораторных плавок, вычислены средние значения потерь свинца со шлаком - \bar{y}^3 для каждой из восьми серий опытов и занесены в таблицу 1.

Проанализировав результаты лабораторных исследований, авторы сделали вывод, что оптимальным составом шлака для шахтной плавки вторичного свинец содержащего сырья является шлак, содержащий: 31% оксида кремния, 20% оксида железа, 24% оксида кальция. При таком составе шлака потери свинца минимальны и составляют 0,9%, что меньше допустимых санитарными стандартами содержания свинца (1%). Отвальный шлак такого состава может быть рекомендован как сырье для нужд промышленного, гражданского, сельского, жилищного и дорожного строительства.

- 1) Косенко В.Н., Крысенко Н.С. / Снижение потерь металлов со шлаком вторичной свинцовой плавки. / Металлургия (сборник научных трудов) Запорожье, 1998 , с.59-62
- 2) Шелудяков Л.Н. / Исследование комплексной переработки отвальных шлаков цветной металлургии. / Автореферат дис. докт. техн. наук. М., 1973, 50с.
- 3) Руминский Л.З. Математическая обработка результатов эксперимента. - М.: Наука, 1971.-192с.

КИНЕТИКА РАСТВОРЕНИЯ ГУБЧАТОГО ТИТАНА В ЭЛЕКТРОЛИТАХ

Лукошников И.Е., Червоный И.Ф.

Запорожская государственная инженерная академия, г. Запорожье, rot@zgia.zp.ua

Известно, что процесс электрохимического рафинирования поливалентных металлов (например, титана) можно осуществить путем использования вторичных окислительно-восстановительных реакций в циркулирующих расплавах. При этом рафинируемый материал может быть неполяризованным, а ионы металла высшей валентности, доставляются от анода к поверхности рафинируемого материала и, восстанавливаясь сами, растворяют рафинируемый металл с образованием ионов низшей валентности. Указанный способ рафинирования и процессы, происходящие при нем, описаны в работе [1].

При электролизе с растворимым анодом такие реакции могут протекать в глубоких слоях анодного материала или на его поверхностях, омываемых электролитом, но экранированных от постоянного тока.

Целью исследований являлось определение зависимости скорости коррозии низкосортного губчатого титана ТГ-Тв трех основных разновидностей, различающихся по степени развития общей поверхности, перерабатываемого методом электролитического рафинирования от концентрации ионов титана в расплаве, средней их валентности и температуры хлоридных титансодержащих расплавов.

В кварцевый стакан помещали электролит, основой которого являлась эквимолярная смесь NaCl-KCl. Титан вводили в виде твердого плава NaCl-KCl-TiCl₂-TiCl₃, содержащего 5...18 % растворенного титана (Ti_p). После этого стакан с солями устанавливали в герметичную ячейку, состоящую из реторты и титановой камеры охлаждения с отверстием, закрытым резиновой пробкой, через которую в процессе опытов вводили исследуемые образцы из губчатого титана и термопару.

Электролитическую ячейку в процессе нагрева до 673 К откачивали форвакуумным насосом ВН-461М, заполняли аргоном до 0,1...0,2 ати и доводили температуру до значения 993...1123 К. После получасовой выдержки электролита при заданной температуре в расплав погружали исследуемый образец и подвергали растворению в течение одного часа. Затем его поднимали в камеру охлаждения и отмывали от электролита в 1 % растворе соляной кислоты с последующей промывкой в чистой воде. Образцы взвешивали до и после опыта и определяли убыль массы на единицу погруженной в расплав поверхности, рассчитанной на основании размеров сторон образца. По этим данным рассчитывали скорость коррозии. Из полученного значения вычитали скорость саморастворения титана в чистом эквимолярном расплаве NaCl-KCl, которую определяли в параллельных опытах. Разность указанных величин в дальнейшем принимали за истинную скорость коррозии.

Результаты опытов показали, что кинетика растворения является диффузионной, скорость растворения всех разновидностей губчатого титана в 1,8...2 раза больше скорости коррозии компактного титана [2] и при параметрах, характерных аналогичным для электролитического рафинирования на опытно-промышленном заводе Института титана (993...1050 К, концентрация Ti_p = 1,5...3 % масс., n_{CP} = 2,3...2,6) может составить 0,15...0,3 г/(см²·ч).

- 1) Волейник В.В. Об объемном электрохимическом рафинировании поливалентных металлов и их соединений // Электрохимия. 1981. 17. Вып. 11. С.1613-1620.
- 2) Волейник В.В., Галицкий Н.В., Лукошников И.Е., Павлов В.В. Электродные процессы при объемном электрохимическом рафинировании / В кн.: VI Всесоюзн. конференция по электрохимии. Тезисы докладов. М., 1982. С.251-252.

ПРОИЗВОДСТВО ТИТАНОВЫХ ПОРОШКОВ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОЛИЗА

Лукошников И.Е., Червоный И.Ф.

Запорожская государственная инженерная академия, г. Запорожье, rot@zgia.zp.ua

Исследовали распределение примесей (никеля, меди, олова) в электролитических титановых порошках крупностью -2 мм.

В качестве исходного материала брали титановый порошок крупностью -2 мм ($m = 2$ кг). Отбирали контрольную навеску порошка массой 100 г и анализировали на содержание никеля, меди и олова по методике, разработанной в Институте титана. Точность анализа составляла $10^{-4} \dots 10^{-3}$ % масс. Оставшийся порошок титана фракции -2 мм рассевали на лабораторных ситах на узкие фракции: $-2 +1,25$ мм; $-1,25 +0,8$ мм; $-0,8 +0,63$ мм; $-0,63 +0,2$ мм; $-0,2 +0,16$ мм; $-0,16 +0,08$ мм; $-0,08$ мм.

Далее металл каждой фракции анализировали на содержание в нем вышеуказанных примесей отдельно. Для исключения ошибки анализа каждое определение каждого элемента выполняли три раза и за истинное содержание примеси в металле принимали среднеарифметическое значение. При этом аномальные величины из рассмотрения исключали. Результаты проведенных анализов представлены в табл.1.

Таблица 1 – Распределение примесей никеля, меди олова по узким фракциям электролитического титанового порошка

Фракция, мм	Содержание примесей, % масс, не более		
	Ni	Cu	Sn
$-2,0$	0,007	0,015	0,008
$-2 +1,25$	0,007	0,015	0,008
$-1,25 +0,8$	0,008	0,016	0,009
$-0,8 +0,63$	0,008	0,016	0,009
$-0,63 +0,2$	0,009	0,017	0,011
$-0,2 +0,16$	0,009	0,018	0,012
$-0,16 +0,08$	0,010	0,039	0,011
$-0,08$	0,011	0,048	0,014

Из табл.1 видно, что по мере уменьшения крупности катодного металла, содержание примесей в нем возрастает, причем в большей степени для порошков $-0,63$ мм. Это может быть объяснено тем, что для порошков титана меньшей крупности величина активной поверхности частиц больше, чем для частиц крупных. Так, металл фракции $-0,16 +0,08$ мм содержит меди в 2,6, а фракции $-0,08$ мм уже в 3,2 раза больше, чем принятый для сравнения порошок фракции -2 мм. Массовые доли никеля и олова в указанных титановых порошках также возрастают весьма существенно: соответственно на 48,0 и 37,5 %.

Возможными источниками попадания указанных примесей в катодный металл являются стальные конструкционные детали рафинировочного электролизера, анодный материал (титан губчатый твердый марки ТГ-Тв), а также технический хлорид калия. Кроме того, источником попадания меди и олова в порошки титана, по-видимому, являются латунные и бронзовые проволочные сетки, применяемые для классификации на Запорожском опытном металлургическом заводе Института титана.

- 1) Волейник В.В. Об объемном электрохимическом рафинации поливалентных металлов и их соединений // Электрохимия. 1981. 17. Вып. 11. С.1613-1620.
- 2) Волейник В.В., Галицкий Н.В., Лукошников И.Е., Павлов В.В. Электродные процессы при объемном электрохимическом рафинации / В кн.: VI Всесоюзн. конференция по электрохимии. Тезисы докладов. М., 1982. С.251-252.

ОСОБЕННОСТИ ПОДГОТОВКИ СЫРЬЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА МАГНИЯ

Червоный И. Ф., Бачурский Д.В.

Запорожская государственная инженерная академия, г. Запорожье, rot@zgia.zp.ua

Для производства магния электролитическим способом в промышленной практике используется карналлит или хлористый магний титанового производства. Каждый из этих видов сырья не является химически чистым веществом. Они содержат в своем составе примеси, которые могут оказывать негативное влияние на процесс электролиза и существенно ухудшать технико-экономические характеристики производства магния.

К наиболее вредным примесям, присущим карналитовому сырью, относятся бор, сульфаты, марганец железо. Возвратный хлористый магний титанового производства может содержать титан и никель. Указанные примеси могут также присутствовать в материалах, которые обычно вводят в электролит в качестве корректирующих добавок (технические NaCl, KCl, CaF₂). Кроме того, существенное влияние на процесс электролиза оказывает влага, поступающая в электролит, как с сырьем, так и в результате контакта электролита с атмосферным воздухом, а также оксид магния, являющийся продуктом гидролиза хлорида магния. Опыт промышленной эксплуатации поточной линии показал, что содержание примесей в сырье оказывает более сильное влияние на работу непрерывного процесса, так называемого «потока», чем на работу электролизеров работающих в индивидуальном режиме. Из всех существующих на сегодняшний день способов подготовки хлормагниевого сырья к электролизу наиболее приемлемыми и используемыми на действующих производствах являются гравитационное, химическое и электролитическое рафинирование.

В «поточной» линии применяют комбинированную подготовку сырья, которая включает в себя выше указанные способы. Аппаратурное оформление данного способа состоит из головного агрегата и рафинировочных проточных электролизеров.

В головном агрегате идет гравитационное осаждение твердых взвесей и разложение постоянным током кислородных соединений (MgOHCl), а также хлорирование оксида магния выделяющимся на анодах хлором.

Сущность электрохимической очистки электролита заключается в восстановлении на катоде более электроположительных и окислении на аноде более электроотрицательных ионов примесей. Применяемые параметры электрохимического рафинирования расплава от титана: катодная плотность тока 0,3...0,4 A/cm², температура расплава 740 °C, концентрация хлористого магния - 40 масс. %.

Из головного агрегата расплав поступает в рафинировочные электролизеры, где он проходит окончательную электрохимическую очистку. При электрохимическом рафинировании поддерживают плотности тока, превышающие суммарную величину предельных плотностей тока для выделяемых примесей, а напряжение – выше напряжения разложения соли получаемого металла. Такой режим максимально снижает потери магния в период интенсивного выделения примесей.

При использовании хлористого магния каждый рафинировочный электролизер может обеспечить нормальную работу 10...12 электролизеров.

Существенное влияние на рафинирование сырья и работу электролизеров оказывает и температура расплава. При заливке хлористого магния в головной агрегат происходит резкое повышение температуры расплава на 45...50 °C в течение 5 минут за счет теплоты смешения, которая равна 100 кВт/т MgCl₂. Влияние такого резкого скачка температуры в головном агрегате на изменение температуры в рафинировочных и проточных электролизерах, а также на их работу на сегодняшний день достаточно не изучено и требует дополнительных исследований и испытаний.

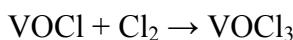
Таким образом, успешная работа поточной линии в значительной степени зависит от подготовки сырья – его комплексной очистки.

ПОЛУЧЕНИЯ ВАНАДИЯ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ ТИТАНОВОЙ ГУБКИ

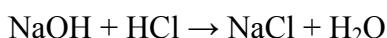
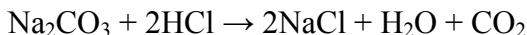
Червоный И.Ф., Кругляк Д.О., Иващенко В.И.

Запорожская государственная инженерная академия, г. Запорожье, rot@zgia.zp.ua

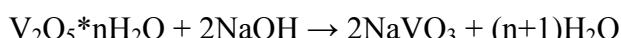
Исходным сырьем при получении губчатого титана и диоксида титана в основном являются ильменитовые и рутиловые концентраты, которые содержат в качестве примеси ванадий, от которой в ходе технологии очищаются. При среднем содержании в техническом четыреххлористом титане 0,1 % ванадия, только при получении губчатого титана удаляется около 608 т ванадия. При этом теряется не только ценный металл, но и отравляется окружающая среда. Следует подчеркнуть, что ванадиевые соединения являются экологически вредными веществами. Ванадий в кеках находится в виде твердых соединений трехвалентного ванадия (VOCl) и четырехвалентного ванадия (VOCl_2). Оба соединения более растворимы в кислых растворах. При $\text{pH } 2\ldots 3$ гидролизуются с частичным выделением в осадок пятиокиси ванадия. Это приводит к распределению ванадия между водным раствором и осадком и осложняет извлечение в товарный продукт пятиокись ванадия. Поэтому стремятся провести окисление валентных соединений ванадия до пятивалентного состояния. В рассматриваемой схеме окисление ванадиевых соединений проводят газообразным хлором по реакциям:



Оксихлорид ванадия растворим в HCl , гидролизуется следами воды с образованием гидрата пентаоксида ванадия. При рассматриваемом процессе происходит не только окисление 3^x и 4^x валентных соединений ванадия, но и предпочтительное выделение пятиокиси ванадия. Для осуществления гидролиза в раствор добавляют соду (или щелочь). При этом протекают следующие реакции:

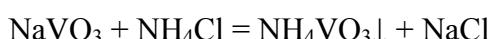


Ванадий переводится в растворимое состояние щелочью натрия по реакции



Примеси титана, железа и других соединений остаются в осадке и при последующей фильтрации отделяются от ванадийсодержащего раствора. Расход щелочи на операции растворения и промывки двухкратный против стехиометрии.

Из раствора ванадий осаждают действием хлористого аммония:



Ванадат аммония мало растворим в воде при 20…30 °C. Хлорид натрия и некоторые примеси удаляются с маточным раствором. Расход хлористого аммония зависит от содержания ванадия в растворе. Избыток его составляет 3…5 раз больше по стехиометрии по реакции. После фильтрации осадок ванадата аммония сушится и прокаливается в трубчатой вращающейся печи при температуре 560…600 °C. Газообразные и пылевидные продукты поступают в систему пылеулавливания сухой циклон, мокрый скруббер. В результате получали пятиокись трех квалификаций: «химически чистый», «чистый для анализа», «чистый». Теоретические расчеты показали возможность образования тетрахлорида и трихлорида ванадия в присутствии углеродистого восстановителя и при соответствующем парциальном давлении хлора. Важным является решение принципиальной задачи, а именно разработка непрерывного способа разделения четыреххлористых солей титана и ванадия или их смесей, позволяющего получать в качестве конечного продукта индивидуальные металлы или их сплавы.

ВЛИЯНИЕ НАТЕКАНИЯ НА КАЧЕСТВО ГУБЧАТОГО ТИТАНА

Червоный И.Ф., Листопад Д.А., *Масленников А.Н.

Запорожская государственная инженерная академия, г. Запорожье, rot@zgia.zp.ua

*Казенное предприятие «Запорожский титано-магниевый комбинат»

Производство губчатого титана основано на магнитермическом восстановлении тетрахлорида титана с образованием блоков, поверхность которых подвергается очистке от слоев губки с повышенным содержанием примесей. Примеси попадают на поверхность и в объем блока по таким возможным источникам: железо и никель - в результате диффузии компонентов из стали реторты, в которой проводят процесс; азот и кислород - из воздуха: натеканием в реторту при вакуумной сепарации реакционной массы (РМ), адсорбцией на продуктах реакции и стенках реактора при перемонтаже, а также с исходными веществами.

Интенсивное поглощение титаном водорода начинается при 250 °, кислорода при 400 ° и азота при 600 °С. С дальнейшим повышением температуры активность титана резко возрастает. Несмотря на меньшую активность титана по отношению к азоту, чем к кислороду, он является единственным элементом, способным гореть в азоте. Так же как и кислород, азот образует с α- и β-фазами титана твердые растворы внедрения. Предельная растворимость азота в β-фазе (2 %) примерно такая же, как и кислорода, а в α-фазе несколько ниже (7,5 %). Азот также является сильным стабилизатором α-фазы. При высоких содержаниях азота в титане образуются промежуточные фазы типа нитридов титана

Наиболее резко повышают прочность и снижают пластичность титана азот и кислород, поэтому содержание примесей этих элементов строго регламентируются. При содержании 0,5 % азота титан становится хрупким, при 0,5 % кислорода титан достаточно пластичен. При 0,75 % кислорода титан еще подвергается ковке. В малых количествах (до 0,2 %) кислород можно вводить в титан специально с целью его упрочнения, тогда как азот при этом содержании приводит к образованию хрупкой α-фазы мартенситного типа.

Зависимость массы (χ) попадающего азота и кислорода от величины натекания и длительности сепарации рассчитывается по формуле (1):

$$\chi = \omega \cdot \tau \cdot n \cdot 60 \cdot 1.7012 \cdot 10^{-6}, \quad (1)$$

где ω - массовая доля азота и кислорода в воздухе [N₂ – 0,7550 и O₂ – 0,2310]; τ - продолжительность сепарации, часов (36 часов для 1-го сорта РМ, 39 часов для 2-го сорта РМ, 42 часа для 3-го сорта РМ,); n - численное значение натекания, л·мкм. рт. ст./мин; 60 - коэффициент пропорциональности - количество минут в часе при расчете продолжительности сепарации в часах; 1,7012·10⁻⁶ - коэффициент пропорциональности численно равный массе воздуха попадающего в реторту через неплотности при натекании равном 1 л·мкм. рт. ст./мин.

Доля (η) газовых примесей азота и кислорода от величины натекания и длительности сепарации рассчитывается по формуле (2):

$$\eta = \omega \cdot \tau \cdot n \cdot \frac{60}{9 \cdot 10^5} \cdot 1,7012 \cdot 10^{-6} \cdot 100 \%, \quad (2)$$

где 9·10⁵ - коэффициент пересчета в массовые проценты, численно равен средней массе губчатого титана получаемого за один цикл восстановления-сепарации.

Максимально допустимое содержание азота в ТГ составляет от 0,02 до 0,3 % (по массе), поэтому, если предположить что весь азот поступить в ТГ только через натекание то максимально допустимое натекание составляет 50 л·мкм. рт. ст./минуту) что составляет 10 кратное превышение от допустимого по технологическим нормам.

ТЕРМОДИНАМИКА СИСТЕМЫ Si[B]

Червоный И.Ф., Панченко О.В., Осипова Л.В.

Запорожская государственная инженерная академия, г. Запорожье, rot@zgia.zp.ua

Изучение процессов теплового движения молекул и атомов основа статистических законов термодинамики. Статистические взаимодействия связаны с размещением структурных элементов по определенным позициям кристаллической решетки и оказывают влияние на конфигурационную энтропию системы. Существует прямая связь энтропии и вероятности нахождения атома (молекулы) в каком-либо положении. Для расчета термодинамической вероятности нахождения бора в той или иной позиции выбраны четыре варианта легирования кремния бором: $3,7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$; $1,23 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; $1,29 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$; $3,7 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$.

Конфигурационная энтропия определяется уравнением Больцмана:

$$\Delta S = k \ln W = k \ln \frac{N!}{n!(N-n)!} = k [\ln N! - \ln n! - \ln(N-n)!], \quad (1)$$

где N – число узлов кристалла, т.е. сумма атомов Si и B, см^{-3} ; n – число атомов B, см^{-3} ; $(N-n)$ – число атомов Si, см^{-3} .

Используя приближение Стирлинга $\ln x! = x \ln x - x$ и, преобразовав уравнение (1) с введением мольной доли A атомов Si и мольной доли B атомов B, получили упрощенную формулу конфигурационной энтропии

$$\Delta S_{(x_B)} = -R [x_B \ln x_B + (1-x_B) \ln (1-x_B)]. \quad (2)$$

Известно, что по мере возрастания концентрации бора от $1,1 \cdot 10^{15}$ до $6 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ возрастает доля этой примеси в электрически неактивной форме, т.е. происходит образование комплексов. Была рассчитана конфигурационная энтропия с учетом ф-параметра комплексообразования. В данном случае ф-параметр отражает объемную долю в расплаве группировок атомов с преимущественно ковалентным типом связи.

$$\Delta S_{(x_B)} = -R \left[x_A (1-\varphi) \ln \frac{x_A (1-\varphi)}{x_A (1-\varphi) + x_B} + x_B \ln \frac{x_B}{x_A (1-\varphi) + x_B} \right]. \quad (3)$$

Получена зависимость конфигурационной энтропии от степени легирования атомов примеси. Зависимость $\Delta S(x_B)$ показана на рисунке.

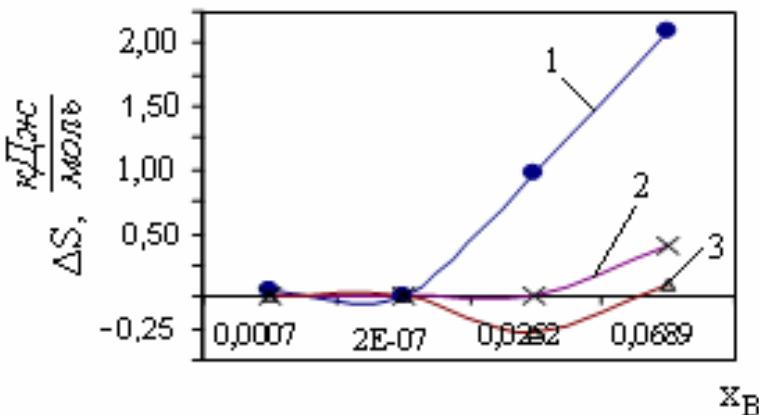


Рис. 1. – Зависимость конфигурационной энтропии от степени легирования

Полученная величина термодинамической вероятности нахождения атомов в определенных местах кристаллической решетки показала, что с ростом уровня легирования монокристаллов Si примесью B скачкообразно растет и число способов смешения атомов.

ОСОБЕННОСТИ ПРОИЗВОДСТВА ТЕХНИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

Червоный И.Ф., Сорокина Е.В.

Запорожская государственная инженерная академия, г. Запорожье, rot@zgia.zp.ua

Кремний - основной материал, применяемый в современной микроэлектронике, силовой электронике, солнечной энергетике и микромеханике.

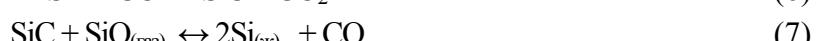
Получение технического кремния из кварцита осуществляется за счет восстановления его углеродсодержащим восстановителем. Наиболее приемлемыми восстановителями считаются ретортный древесный уголь, нефтяной кокс и молодые малозольные каменные угли. Углеродистые восстановители должны быть малозольными, иметь невысокое содержание летучих веществ, обладать высокой реакционной способностью.

Термодинамические расчеты реакций восстановления кремния из кварцита и возможных промежуточных реакций в карботермическом методе восстановления показали существенное влияние температуры на протекания реакций.

Восстановление кремнезема в электрических печах карботермическим способом происходит при 2073...2673 К по реакции



При восстановлении кремнезема углеродом протекает ряд побочных реакций образования летучих соединений кремния



Термодинамические характеристики реакций приведены на рисунке.

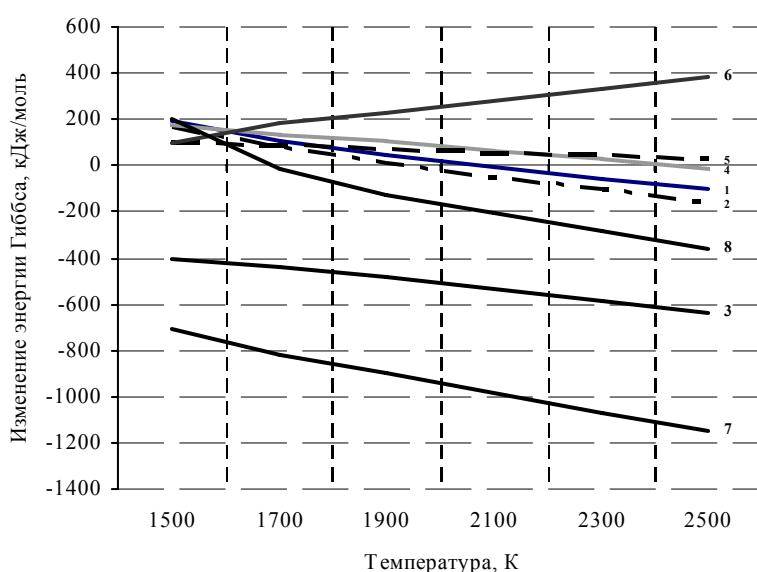


Рис. 1. – Зависимость энергии Гиббса реакций (1)-(8) от температуры

Можно предположить, что при высоких температурах наблюдается прямое взаимодействие жидкого кремния с углеродом. Образующийся в процессе плавки карбид кремния неустойчив при температурах выше 2000 К, но играет роль восстановительного транспорта в процессе образования кремния из монооксида и диоксида по реакциям (7) и (8).

СПИСОК УЧАСНИКІВ

Аверіна Тетяна Володимирівна
доцент Національного технічного університету
України «КПІ», la_21@ukr.net

Агалова Анна Володимирівна
студентка Черкаського державного
технологічного університету

Анохіна Євгенія Олександрівна
магістрантка кафедри автоматизації хімічних
виробництв Національного технічного
університету України „КПІ”

Артеменко Ольга Дмитрівна
ст. викл. Черкаського регіонального відділення
Української Технологічної академії

Ассєєв Г.Г.
співробітник кафедри загальної і неорганічної
хімії Національного технічного університету
«ХПІ»

Бараков Роман Юрійович
студент кафедри загальної хімії Черкаського
державного технологічного університету

Баркатова С.С.
студентка кафедри хімічної технології
неорганічних речовин, каталіза та екології
Національного технічного університету «ХПІ»

Безносик Анастасія Юріївна
магістрантка учебово-наукового комплексу
"Інститут прикладного системного аналізу"
Національного технічного університету України
«КПІ», nastya_beznosyk@ukr.net

Безносик Олександр Юрійович
асистент кафедри систем автоматизованого
проектування учебово-наукового комплексу
"Інститут прикладного системного аналізу"
Національного технічного університету України
«КПІ», sasha@cad.kiev.ua

Безносик Юрій Олександрович
к.т.н., доцент, зам. зав. кафедри кібернетики
хіміко-технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
yu_beznosyk@ukr.net

Бендюг Владислав Іванович
к.т.н., ст. викл. кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
vio77@mail.ru

Бененко Сергій Петрович
асpirант кафедри загальної хімії Черкаського
державного технологічного університету,
sbenenko@yandex.ru

Бєлікова Світлана Володимирівна
магістрантка Національного університету
водного господарства та природокористування,
svetik_belik@mail.ru

Бєлогур І.С.

м.н.с. кафедри хімічної технології неорганічних
речовин, каталіза та екології Національного
технічного університету «ХПІ»

Близнюк О.Н.

к.т.н., кафедра фізичної хімії Національного
технічного університету «ХПІ»

Бойко Тетяна Владиславівна

к.т.н., доцент, зам. зав. кафедри кібернетики
хіміко-технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
kxtrp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Болотін Олександр Вікторович

асистент кафедри аналітичної хімії ДВУЗ
«Український державний хіміко-технологічний
університет», alexandr_bolotin@mail.ru

Бондаренко Василь Васильович

ст. викл. Чернігівського державного
технологічного університету,
vv.bondarenko@gmail.com

Бондаренко Олена Сергіївна

к.х.н., доцент кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»

Бондаренко Сергій Григорович

к.т.н., доцент кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
sgb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Борозенець Наталія Василівна

студентка Національного технічного
університету України «КПІ»

Бражко Олександр Анатолійович

д.б.н., професор кафедри хімії Запорізького
національного університету, керівник
лабораторії фізіологічно активних речовин

Бугаєва Людмила Миколаївна

к.т.н., доцент кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
bugaeva_l@ukr.net

Буряков Володимир Григорович

головний інженер-програміст Інституту
кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України,
Vbur@yandex.ru

Бутенко А.Н.

к.т.н., кафедра загальної і неорганічної хімії
Національного технічного університету «ХПІ»

Буяльська Наталія Павлівна

к.т.н., доцент кафедри екології та охорони
природи Чернігівського державного
педагогічного університету

Василькевич Олександр Іванович
к.х.н., доцент кафедри органічної хімії та
технології органічних речовин Національного
технічного університету України «КПІ»,
www.reaktor@kpi.kiev.ua

Величко Дмитро Сергійович
студент кафедри автоматизації хімічних
виробництв Національного технічного
університету України «КПІ»

Верещак Віктор Григорович
к.т.н., доцент кафедри технології неорганічних
речовин ДВУЗ «Український державний хіміко-
технологічний університет»

Вецнер Ю.І.
студент кафедри хімічної технології
неорганічних речовин, каталіза та екології
Національного технічного університету «ХПІ»

Владов Роман Олександрович
магістр, керівник проектів ІП «Хоневелл
Україна», roman.vladov@honeywell.com

Галаган Ростислав Львович
ст. викл. кафедри загальної і неорганічної хімії
Черкаського національного університету ім. Б.
Хмельницького, garol@ukr.net

Галиш Михайло Федорович
студент кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
misha_kpi@list.ru

Глоба Олександр Васильович
к.т.н., с.н.с., доцент Національного
технічного університету України «КПІ»,
G_A_V@ukr.net

Головченко Валерій Миколайович
к.т.н., доцент, завідувач кафедри технології
бродильних виробництв Черкаського
державного технологічного університету

Голуб Сергій Васильович
к.т.н., доцент Черкаського національного
університету ім. Б. Хмельницького,
fpkpk@cdu.edu.ua

Гребенюк Анатолій Георгійович
к.х.н., с.н.с. Інституту хімії поверхні
ім. О.О.Чуйка НАН України,
grebenyuk_ag@ukr.net

Грицай Володимир Петрович
к.т.н., доцент кафедри металургії колювових
металів Запорізької державної інженерної
академії, colourmet@zgia.zp.ua

Гузенко Олена Михайлівна
асистент кафедри аналітичної хімії Одеського
національного університету ім. І.І. Мечнікова,
mig@farlep.net

Гуля Наталя Вікторівна
студентка кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»

Даєвиденко Олексій Маркович
асpirант Національного університету «ХПІ»

Дем'яненко Євгеній Миколайович
асpirант Інституту хімії поверхні
ім. О.О.Чуйка НАН України,
Demianenko_EN@mail.ru

Джигурей Ірина Миколаївна
к.т.н., асистент кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
dzhygurey@gmail.com

Довгалова Н.Ж.
співробітник кафедри хімічної технології
неорганічних речовин, каталіза та екології
Національного технічного університету «ХПІ»

Дозорцев Віктор Михайлович
д.т.н., професор, керівник відділу систем
комп'ютерного навчання ЗАТ «Хоневелл»
(Росія), victor.dozortsev@honeywell.com

Дуган Олексій Мартем'янович
д.б.н., професор, декан факультету
біотехнології і біотехніки Національного
технічного університету України «КПІ»,
biotech@ntu-kpi.kiev.ua

Єхімович Людмила Вікторівна
магістрантка кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
f_lip@ukr.net

Єжовський Яцек
д.т.н., професор кафедри хімічної та
процесової інженерії Жешувського
університету технології (Польща),
ichjj@prz.rzeszow.pl

Єжовська Аліна
ад'юнкт кафедри хімічної та процесової
інженерії Жешувського університету технології
(Польща), ichjj@prz.rzeszow.pl

Єфимова Ірина Сергіївна
асpirант кафедри аналітичної хімії Одеського
національного університету ім. І.І. Мечнікова

Жураковська Оксана Сергіївна
к.т.н., доцент кафедри автоматизованих
систем обробки інформації і управління
Національного технічного університету України
«КПІ», oxana@asu.ntu-kpi.kiev.ua

Жураковський Ярослав Юрійович
ст. викл. кафедри автоматизації хімічних
виробництв Національного технічного
університету України «КПІ»,
zhurakovsky@bigmir.net

Жученко Анатолій Іванович

д.т.н., професор, зав. кафедри автоматизації хімічних виробництв Національного технічного університету України «КПІ»,

Захаров Іван Іванович

д.х.н., доцент кафедри технології неорганічних речовин і екології Технологічного інституту Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля, zvonus@rambler.ru

Зіядінов Надір Нізамович

д.т.н., професор, зав. кафедри системотехніки Казанського державного технологічного університету (Російська Федерація), nnziat@yandex.ru

Згуровський Михайло Захарович

д.т.н., професор, зав. кафедри учбово-наукового комплексу "Інститут прикладного системного аналізу" НТУУ «КПІ», академік НАН України, ректор Національного технічного університету України «КПІ», mzz@ntu-kpi.kiev.ua

Зоріна Тетяна

студентка Чернівецького національного університету

Іванов Віктор Ілліч

ст. викл. кафедри металургії кольорових металів Запорізької державної інженерної академії, colourmet@zgia.zp.u

Ігнатюк Олексій Анатолійович

к.б.н., доцент кафедри екобіотехнології та біоенергетики Національного технічного університету України «КПІ», biotech@ntu-kpi.kiev.ua

Ізовленська Ада Євгенівна

ст. викл. кафедри нарисної геометрії та інженерної і комп'ютерної графіки Національного технічного університету України «КПІ», izvolenskaiy@ukr.net

Іщішина Алла Олексandrівна

асpirантка кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», ischishina@mail.ru

Касьян Костянтин Миколайович

к.т.н., доцент кафедри комп'ютерних систем та мереж Запорізького національного технічного університету

Кац Марк Давидович

д.т.н., професор кафедри обчислювальної математики і комп'ютерних технологій Хіміко-технологічного інституту Східноукраїнського національного університету ім. В.Даля, kats@is.ua

Квітка Олександр Олександрович

к.х.н., доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», al-kvi@yandex.ru

Клепач Микола Іванович

к.ф.-м.н., ст.н.с., член-кор. Інженерної академії наук, доцент кафедри електротехніки та автоматики Національного університету водного господарства та природокористування, klepach@nuwm.rv.ua

Ковалевський Валерій Михайлович

к.т.н., доцент кафедри автоматизації хімічних виробництв Національного технічного університету України «КПІ», kovalevsky_vm@users.ntu-kpi.ua

Козлов Павло В'ячеславович

аспірант кафедри технології неорганічних речовин та загальної хімічної технології Національного технічного університету України «КПІ», paul_g@ukr.net

Коломієць Денис Ростиславович

аспірант кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», disclaimer@innovativemarketing.com.ua

Колос Петро Олексійович

аспірант кафедри математичного та програмного забезпечення автоматизованих систем Черкаського національного університету ім. Б. Хмельницького, dr_peter@cdu.edu.ua

Колпаков В.В.

ст. викл. Національного технічного університету України «КПІ», Kolpakov@ntu-kpi.kiev.ua

Комариста Богдана Миколаївна

аспірантка кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», danita81@mail.ru

Кондратов Сергій Олексійович

д.х.н., професор, зав. кафедри вищої математики і комп'ютерних технологій Рубіжанського філіалу Східноукраїнського національного університету ім. В.Даля, kondratov@rune.lg.ua

Конишев Валерій Васильович

директор науково-виробничої фірми «Ірком-ЕКТ», irkom@ekt.kiev.ua

Концевий Андрій Леонідович

к.т.н., доцент кафедри технології неорганічних речовин та загальної хімічної технології Національного технічного університету України «КПІ», kontsev@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Концевий Сергій Андрійович
асистент кафедри технології неорганічних
речовин та загальної хімічної технології
Національного технічного університету України
«КПІ», serkon@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Копищець Володимир Іванович
к.х.н., ст.н.с. Фізико-механічного інституту
ім. Г.В.Карпенка НАН України,
kornii@ipm.lviv.ua

Коржик Михайло Володимирович
ст. викл. кафедри автоматизації хімічних
виробництв Національного технічного
університету України «КПІ»,
korzhyk@rst.kiev.ua

Корнєт Марина Миколаївна
аспірант кафедри хімії Запорізького
національного університету

Корній Сергій Андрійович
к.т.н., н.с. Фізико-механічного інституту
ім. Г.В.Карпенка НАН України,
kornii@ipm.lviv.ua

Коробов Віктор Іванович
к.х.н., доцент, зав. кафедри фізичної хімії та
електрохімії Дніпропетровського національного
університету, korvik58@mail.ru

Корчик Наталя Михайлівна
к.т.н., доцент кафедри хімії Національного
університету водного господарства та
природокористування

Котлинська Наталія Станіславівна
магістрантка кафедри автоматизації
проектування енергетичних процесів та систем
Національного технічного університету України
«КПІ», myshka_kns@mail.ru

Кочкарьов Юрій Олександрович
д.т.н., професор, Черкаський інженерно-
науковий центр, ЧДТУ, chemistry2007@mail.ru

Кравченко Андрій Анатолійович
м.н.с. Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка
НАН України, kravchenko@zeos.net

Кубрак Анатолій Іванович
к.т.н., професор Національного технічного
університету України «КПІ»

Лабенська Ірина Борисівна
аспірантка кафедри хімії Запорізького
національного університету,
Labenska@rambler.ru

Ладієва Леся Ростиславівна
к.т.н., доцент кафедри автоматизації хімічних
виробництв Національного технічного
університету України «КПІ»,
Ladieva_lr@users.ntu-kpi.kiev.ua

Лаптєва Тетяна Володимирівна
к.т.н., доцент кафедри системотехніки
Казанського державного технологічного
університету (Російська Федерація),
tanlapteva@yandex.ru

Литвин Валентина Анатоліївна
магістрант Черкаського національного
університету ім. Б. Хмельницького,
litvin_valentina@ukr.net

Лобанов Віктор Васильович
д.х.н., с.н.с., в.о. зав. відділу Інституту хімії
поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України,

Лукінюк Михайло Васильович
ст. викл. кафедри автоматизації хімічних
виробництв Національного технічного
університету України «КПІ»,
lukinuk@alive.net.ua

Максимчук Світлана Леонідівна
студентка кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»

Медведєв Ромуальд Броніславович
к.т.н., професор кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
kxtp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Медведєва Валентина Миколаївна
к.т.н., доцент кафедри автоматизації
проектування енергетичних процесів та систем
Національного технічного університету України
«КПІ», romyald@voliacable.com

Меліхов Леонід Олександрович
студент кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
melikhov07@ukr.net

Мисіна Оксана Іванівна
асистент кафедри хімії Національного
університету водного господарства та
природокористування, oksana_mysina@inbox.ru

Мінаєв Борис Пилипович
д.х.н, професор, зав. кафедри органічної хімії
Черкаського національного університету,
bfmin@rambler.ru

Мінаєва Валентина Олександровна
к.х.н., доцент кафедри загальної та
неорганічної хімії Черкаського національного
університету

Мітченко Тетяна Євгенівна
д.т.н., зав. іонного обміну і адсорбції хіміко-
технологічного факультету Національного
технічного університету України «КПІ»,
ecos@ln.ua

Мрачковський Дмитро Віталійович
студент кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»

Нагорнюк Оксана Миколаївна
к.с.-г.н., доцент кафедри методики навчання
Національного аграрного університету,
onagornuk@ukr.net

Немоловська Лариса Леонідівна
студентка Рубіжанського філіалу
Східноукраїнського національного університету
ім. В. Даля

Немоловський Віталій Вікторович
асистент кафедри вищої математики і
комп'ютерних технологій Рубіжанського філіалу
Східноукраїнського національного університету
ім. В. Даля

Нестеренко Тетяна Миколаївна
к.т.н., доцент кафедри металургії кольорових
металів Запорізької державної інженерної
академії, colourmet@zgia.zp.ua

Нікітенко Євгеній Васильович
к.ф.-м.н., доцент Чернігівського державного
технологічного університету,
ev.nikitenko@gmail.com

Николенко Микола Васильович
д.х.н., професор, зав. кафедри загальної
хімічної технології ДВУЗ «Український
державний хіміко-технологічний університет”

Німчук Ігор Богданович
студент кафедри автоматизації проектування
енергетичних процесів та систем
Національного технічного університету України
«КПІ», totemkpi@mail.ru

Омельянчик Людмила Олександрівна
д.фарм.н., професор, зав. кафедри хімії
Запорізького національного університету

Оникієнко Ігор іванович
магістрант кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
igor_onik@bigmir.net

Осипенкова Ірина Іванівна
к.т.н., доцент Черкаського державного
технологічного університету,
chemistry2007@mail.ru

Осовик Алла Петрівна
асистент кафедри екології та охорони природи
Чернігівського державного педагогічного
університету

Островський Геннадій Маркович
д.т.н., професор кафедри системотехніки
Казанського державного технологічного
університету (Російська Федерація),
nnziat@yandex.ru

Очков Валерій Федорович
д.т.н., професор кафедри технології води і
топлива Московського енергетичного інституту
(Російська Федерація), OchkovVF@mpei.ru

Панкратова Наталья Дмитрієвна
д.т.н., професор кафедри математичних
методів системного аналізу учебово-наукового
комплексу "Інститут прикладного системного
аналізу" Національного технічного університету
України «КПІ», ndp@mmsa.ntu-kpi.kiev.ua

Петренко Ліна Володимирівна
м.н.с. кафедри фізичної хімії та електрохімії
Дніпропетровського національного
університету

Пилипенко Олександр Михайлович
д.т.н., професор зав. кафедри автомобілів
Черкаського державного технологічного
університету

Підліснюк Валентина Вікторівна
д.х.н., ст.н.с. Українського державного
університету фінансів та міжнародної торгівлі,
начальник відділу міжнародних зв'язків,
pidlisnyuk@voliacable.com

Плашихин Сергій Володимирович
магістрант кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
plashihin@rambler.ru

Полегенько Вадим Іванович
пошукач інституту пожежної безпеки ім. Героїв
Чорнобиля, інспектор центру пропаганди
Головного управління МНС України в
Черкаській області, polev2005@mail.ru

Потапенко Едуард Володимирович
к.х.н., доцент, директор Інституту хімічних
технологій Східноукраїнського національного
університету ім. В.Даля

Потяженко Іван Олександрович
к.т.н., доцент кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»

Похмурський Василь Іванович
д.т.н., професор Фізико-механічного інституту
ім. Г.В.Карпенка НАН України, заст. директора
з НДР, член-кор. НАН України,
pokhmurs@ipm.lviv.ua

Примиська Світлана Олексіївна
аспірантка кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
primiska@rambler.ru

Ратушная Л.Н.
н.с. кафедри хімічної технології неорганічних
речовин, каталіза та екології Національного
технічного університету «ХПІ»

Рахлицька Олена Михайлівна
доцент кафедри аналітичної хімії Одеського національного університету ім. І.І. Мечнікова

Решетіловський Володимир
д.т.н., професор Інституту технічної хімії Дрезденського технічного університету (Німеччина),
vladimir.reschetilowski@chemie.tu-dresden.de

Рижов Денис Олександрович
аспірант кафедри системотехніки Казанського державного технологічного університету (Російська Федерація), rygov_da@mail.ru

Рищенко І.М.
к.т.н., доцент кафедри загальної та неорганічної хімії Національного технічного університету «ХПІ»

Piaxi Реваз
аспірант кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», r4530877@yahoo.com

Рубан Дмитро Петрович
асистент кафедри електротехнічних систем Черкаського державного технологічного університету, аспірант Національного транспортного університету, ruban_dimon@mail.ru

Рязанцев М.І.
нач. цеху ЗАТ “Азот”, м. Северодонецьк

Савенков А.С.
д.т.н., професор кафедри хімічної технології неорганічних речовин, каталіза та екології Національного технічного університету «ХПІ»

Саєяк Роман Прокопович
к.х.н., ст. викл. кафедри технології високомолекулярних сполук Інституту хімічних технологій ім. В.Даля

Сангінова Ольга Вікторовна
к.т.н., доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», kxtp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Свояк Наталія Іванівна
к.б.н., доцент кафедри екології Черкаського державного технологічного університету, Svojak@list.ru

Селивоненко Богдан Олександрович
студент кафедри екології та охорони природи Чернігівського державного педагогічного університету

Селіна Ірина Борисівна
асистент кафедри нарисної геометрії та інженерної і комп’ютерної графіки Національного технічного університету України «КПІ», izvolenskai@ukr.net

Сергієнко Іван Васильович
д.ф.-м.н., професор, академік НАН України, директор Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України

Середа Алевтина Олександровна
магістрантка кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», seredaalya@yandex.ru

Сидоренко Олександр Володимирович
інженер ЗАТ „Северодонецький ОРГХІМ”

Ситников Олексій Володимирович
асистент кафедри автоматизації хімічних виробництв Національного технічного університету України «КПІ», axv_sitnikov@mail.ru

Скалько Наталія Анатоліївна
аспірант кафедри загальної хімії Черкаського державного технологічного університету, skalkon@mail.ru

Скачков Віктор Олексійович
к.т.н., доцент кафедри металургії кольорових металів Запорізької державної інженерної академії, colourmet@zgia.zp.ua

Скіп Борис Васильович
к.х.н., доцент кафедри фізичної хімії і екології хімічних виробництв Чернівецького національного університету, b.skip@chnu.edu.ua

Смотров Євген Іванович
студент Рубіжанського філіалу Східноукраїнського національного університету ім. В.Даля

Снігур Олександр Володимирович
асистент кафедри автоматизації хімічних виробництв Національного технічного університету України «КПІ»

Сокол Леся Михайлівна
аспірантка Національного аграрного університету України, lesya_german@bigmir.net

Солодовник Тетяна Володимирівна
к.х.н., доцент кафедри загальної хімії Черкаського державного технологічного університету, soltav@chiti.uch.net

Старчак Валентина Георгіївна
д.т.н., професор кафедри екології та охорони природи Чернігівського державного педагогічного університету, chgru@chgru.cn.ua

Статюха Геннадій Олексійович
д.т.н., професор, зав. кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», gen.statukha@gmail.com

Сташкевич Отто Михайлович

к.х.н., доцент кафедри хімії Чернівецького торговельно-економічного інституту

Степанов Микола Борисович

зав. лабораторією Національного технічного університету України «КПІ», ОКБ "Штурм"

Сурул Ірина Володимирівна

магістрантка кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ»

Сухіна Ганна Михайлівна

інженер науково-виробничої фірми „Мікрохім”

Тарас Тетяна Миколаївна

к.х.н., доцент кафедри теоретичної і прикладної хімії Прикарпатського національного університету ім. В.Стефаника

Тарасенко Юрій Олександрович

д.х.н., професор, зав. відділом сорбційних методів глибокого очищення речовин Інституту сорбції та проблем ендоекології НАН України, tarasenko@ispe.kiev.ua

Теліцина Наталія Євгенівна

асистент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», natashakxtp@mail.ru

Тимчук Алла Федорівна

к.х.н., доцент кафедри фізичної та колоїдної хімії Одеського національного університету ім. I.I. Мечнікова, Tymchuk@onu.edu.ua

Титов Юрій Михайлович

інженер кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», mttov@ukr.net

Титула Віктор Миколайович

інженер кафедри аналітичної хімії Одеського національного університету ім. I.I. Мечнікова

Тишенко Ігор Анатолійович

магістрант кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», tyshenko@gmail.com

Тімко Володимир Григорович

зам. директора з науки і маркетингу НВФ «Мікрохім»

Ткач Юрій Едуардович

асистент Чернігівського державного технологічного університету, ytkach@gmail.com

Унрод Володимир Ізяславович

к.т.н., професор, зав. кафедри загальної хімії Черкаського державного технологічного університету, директор Черкаського регіонального відділення Української Технологічної Академії, unrod@mail.ru

Фатькіна Олена Анатоліївна

студентка кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», kxtp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Федак Ірина Андріївна

асистент кафедри екології Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу, iraabush@gmail.com

Федоренко Денис Юрійович

магістр, консультант відділу систем комп'ютерного навчання ЗАТ «Хоневелл» (Росія)

Федоренко Станіслав Миколайович

студент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», fedorenko_st@ukr.net

Федорів Андрій Степанович

асpirант кафедри теоретичної і прикладної хімії Прикарпатського національного університету ім. В.Стефаника

Федорів Мар'яна Зіновіївна

асpirантка кафедри теоретичної і прикладної хімії Прикарпатського національного університету ім. В.Стефаника, pavush@rambler.ru

Фатькіна Олена Анатоліївна

студентка кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України «КПІ», kxtp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Филипчук Леонід Вікторович

асpirант кафедри електротехніки та автоматики Національного університету водного господарства та природокористування, leonmail@ukr.net

Фільченков Олександр Сергійович

директор ВАТ «Запорізький механічний завод», colourmet@zgia.zp.ua

Францева Алла Григорівна

викладач кафедри загальної хімії Черкаського державного технологічного університету, gibis@rambler.ru

Хаврюченко Володимир Дмитрієвич

к.х.н., с.н.с. відділу сорбційних методів глибокого очищення речовин Інституту сорбції та проблем ендоекології Національної Академії Наук України, vkhavr@compchem.kiev.ua

Ханіцький Максим Анатолійович

студент Національного технічного університету України «КПІ», la_21@ukr.net

Хількова Лариса Олександровна
ст. викл. кафедри вищої математики і
комп'ютерних технологій Рубіжанського філіалу
Східноукраїнського національного університету
ім. В.Даля

Ходаківська Анна Сергіївна
магістрантка кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
dimaania@mail.ru

Холоднов Владислав Олексійович
д.т.н., проф., зав. кафедри математичного
моделювання і оптимізації технологічних
процесів Санкт-Петербурзького державного
технологічного інституту, holodnow@ya.ru

Хома Руслан Євгенійович
к.х.н., доцент кафедри аналітичної хімії
Одеського національного університету
ім. І.І. Мечникова,

Хоменко Олена Михайлівна
к.х.н., доцент, зав. кафедри екології
Черкаського державного технологічного
університету, homenko@uch.net

Хрень Олена Павлівна
студентка Дніпропетровського національного
університету

Чашник Дмитро Вікторович
магістрант кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
matrox@style-r.com.ua

Чеботарьов Олександр Миколайович
к.х.н., доцент, зав. кафедри аналітичної хімії
Одеського національного університету
ім. І.І. Мечникова, alexch@ukr.net

Чередниченко Валентина Миколаївна
ст. викл. кафедри технології неорганічних
речовин Дніпродзержинського державного
технічного університету, shkirko@yandex.ru

Шахновський Аркадій Маркусович
к.т.н., ст. викл. кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»,
arcadyshakhn@mail.ru

Швець Дмитро Іванович
д.т.н., професор, зам. директора по науковій
роботі Інституту сорбції і проблем ендоекології

Шевченко Олег Анатолійович
к.т.н., доцент Національного авіаційного
університету, O.A.SHEV@nau.edu.ua

Шевченко Олександр Володимирович
аспірант, кафедри екології Черкаського
державного-технологічного університету

Щербакова Тетяна Михайлівна
к.х.н., доцент кафедри аналітичної хімії
Одеського національного університету
ім. І.І. Мечникова

Щербашин Юрій Дмитрович
к.т.н., доцент кафедри автоматизації
проектування енергетичних процесів та систем
Національного технічного університету України
«КПІ», romyald@voliacable.com

Яковишин В.А.
аспірант кафедри хімічної технології
неорганічних речовин, каталіза та екології
Національного технічного університету «ХПІ»

Янишпольський Василь Вікторович
інженер ІП "Хоневелл-Україна",
Vasiliy.Yanishpolskii@honeywell.com

Янко Тарас Богданович
аспірант кафедри металургії кольорових
металів Запорізької державної інженерної
академії, colourmet@zgia.zp.ua

Яровий Роман Валерійович
студент кафедри загальної хімії Черкаського
державного технологічного університету

Ярощук Ірина Вікторівна
к.т.н., доцент Московського державного
гірничого університету (Російська Федерація),
Irvic1@mail.ru

Ярощук Людмила Дем'янівна
к.т.н., доцент Національного технічного
університету України «КПІ», Vicleon@i.ua

Яценко Светлана Олександровна
інженер кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів Національного
технічного університету України «КПІ»

Яцков Микола Васильович
к.т.н., с.н.с., зав. кафедри хімії Національного
університету водного господарства та
природокористування

Moniuk Władysław Ivanovich
Ph. D., senior lecturer, Warsaw University of
Technology, Faculty of Chemical and Process
Engineering, Division of Chemical Reactors and
Bioprocesses, moniuk@ichip.pw.edu.pl

Pohorecki Ryszard Arturovich
Ph. D., D. Sc., Full Professor of Chemical
Engineering, Professor Emeritus, Warsaw
University of Technology, Faculty of Chemical and
Process Engineering, Division of Chemical
Reactors and Bioprocesses,
pohorecki@ichip.pw.edu.pl

Wierzchowski Piotr Piotrovich
Ph. D., adjunct, Polish Academy of Sciences,
Institute of Organic Chemistry,
piowie@icho.edu.pl

АДРЕСИ УСТАНОВ

ДВУЗ «Український державний хіміко-технологічний університет» – 49005, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна

Дніпродзержинський державний технічний університет – 51918 м. Дніпродзержинськ, Дніprobудівська, 2

Дніпропетровський національний університет – 49050, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 72

Дрезденський технічний університет – D-01062, Dresden, Mommsenstrasse 13

Жешувський університет технології – 6 Powstanców Warszawy Ave., 35-959 Rzeszów, Poland

Запорізька державна інженерна академія - 69006, м. Запоріжжя, МСП-248, пр. Леніна, буд. 226

Запорізький національний технічний університет - 69063, м. Запоріжжя, вул. Жуковського, буд. 64

Запорізький національний університет – 69118, м. Запоріжжя, вул. Чапаєво, 180

ЗАТ “Азот” – м. Северодонецьк, вул. Хіміків, 3

ЗАТ „Северодонецький ОРГХІМ” – 93400, м. Северодонецьк, пр. Гвардійський, 32

ЗАТ «Хоневелл» - Российская Федерация, Москва, ул. Профсоюзная, 65

Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу – 76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України - м. Київ, пр. Академіка Глушкова, 40

Інституту сорбії та проблем ендокології НАН України – м. Київ, вул. Ген. Наумова, 13

Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України – 03164, вул. Генерала Наумова, 17, Київ, Україна

ІП «Хоневелл Україна» - Київ, бульв. І. Лепсе, 4, «Сільвер Центр»

Казанський державний технологічний університет – 420015, Российская Федерация, г. Казань, ул. Карла Маркса, 68, КГТУ

Московський державний гірничий університет – Российская Федерация, Москва, Ленінський проспект, 6

Московський енергетичний інститут – 111250, Российская Федерация, Москва, Красноказарменная, 14, МЭИ (ТУ)

Національний авіаційний університет – 03058, Київ, пр. Комарова, 1

Національний аграрний університет – м. Київ, вул. Генерала Родимцева, 1а/616

Національний технічний університет України «КПІ» – 03056, м. Київ, пр. Перемоги, 36

Національний технічний університет «ХПІ» – 61002, м. Харків, вул. Фрунзе, 21

Національний університет водного господарства та природокористування – 33028, м. Рівне, вул. Соборна, 11

Науково-виробнича фірма „Мікрохім” – 93010, м. Рубіжне Луганської обл., вул. Леніна, 33

Одеський національний університет ім. І.І. Мечникова – 65026, м. Одеса, вул. Дворянська, 2

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника – 76025, м. Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57

Рубіжанський філіал Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля – 93010, м. Рубіжне Луганської обл., вул. Леніна, 31

Санкт-Петербургський державний технологічний інститут (Технічний університет) – 198013, Российская Федерация, Санкт-Петербург, пр. Московский, 26

Українська Технологічна Академія – 01133, м. Київ, вул. Кутузова 18/7-118

Українська Технологічна Академія Черкаське регіональне відділення – 18006, м. Черкаси, бул. Шевченка, 460

Український державний університет фінансів та міжнародної торгівлі – 01601, м. Київ, вул. Чигоріна, 57

Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України – 79601, м. Львів, вул. Наукова, 5

Центр пропаганди Головного управління МНС України в Черкаській області – м. Черкаси вул. Ярославська, 1

Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького – 18031, м. Черкаси, бул. Шевченка, 81

Черкаський державний-технологічний університет – 18006, м. Черкаси, бул. Шевченка, 460

Чернігівський державний педагогічний університет – 14013, м. Чернігів, вул. Гетьмана Полуботка, 53

Чернігівський державний технологічний університет – 14027, м. Чернігів, вул. Шевченко, 95

Institute of Organic Chemistry of Polish Academy of Sciences – 01 – 224 Warszawa, Kasprzaka 44/52, Poland

Warsaw University of Technology – 00 – 645 Warszawa, Waryńskiego 1, Poland

АВТОРСЬКИЙ ВКАЗІВНИК

Аверіна Тетяна Володимирівна	143
Агапова Анна Володимирівна	134, 183
Агапов Володимир Олександрович	183
Анохіна Євгенія Олексandrівна	66
Артеменко Ольга Дмитрівна	216
Асєєв Г.Г.	88
Бараков Роман Юрійович	16
Баркатова С.С.	74
Бачурський Д.В.	237
Безносик Анастасія Юріївна	225
Безносик Олександр Юрійович	155
Безносик Юрій Олександрович	46, 82, 94, 111, 179, 183, 190
Бендюг Владислав Іванович	202
Бененко Сергій Петрович	183
Бєлікова Світлана Володимирівна	64
Бєлогур І.С.	74, 91
Бєлоусов В.Ф.	126, 129, 130
Близнюк О.Н.	76
Бойко Тетяна Владиславівна	126, 202
Болотін Олександр Вікторович	33, 79
Бондаренко Василь Васильович	34
Бондаренко Олена Сергіївна	177
Бондаренко Сергій Григорович	80, 138, 198
Бондарчук Сергій	53
Борозенець Наталія Василівна	70
Бражко Олександр Анатолійович	21
Бугаєва Людмила Миколаївна	82, 103, 183, 193, 200, 225
Буряков Володимир Григорович	54, 56
Бутенко А.Н.	93
Буяльська Наталія Павлівна	27
Василькевич Олександр Іванович	80
Величко Дмитро Сергійович	140
Верещак Віктор Григорович	79
Вецнер Ю.І.	88
Владов Роман Олександрович	160
Воляр Р.Н.	231
Галаган Ростислав Львович	66
Галиш Михайло Федорович	149
Глоба Олександр Васильович	156
Головченко Валерій Миколайович	54, 56
Голуб Сергій Васильович	105, 106
Гребенюк Анатолій Георгійович	17, 18, 20
Грицай Володимир Петрович	31, 48, 169, 233
Гузенко Олена Михайлівна	131
Гуля Наталя Вікторівна	96
Давиденко Олексій Маркович	83
Дозорцев Віктор Михайлович	160
Дем'яненко Євгеній Миколайович	18
Джигирий Ірина Миколаївна	135, 139, 214, 228
Довгалова Н.Ж.	91
Дуган Олексій Мартем'янович	204, 205
Євхімович Людмила Вікторівна	103
Єгоров С.Г.	231, 232
Єжовський Яцек	135, 183
Єжовська Аліна	124, 135, 183, 200
Єфимова Ірина Сергіївна	131

Жураковська Оксана Сергіївна	140
Жураковський Ярослав Юрійович	140
Жученко Анатолій Іванович	141, 142, 186
Жученко О.А.	141
Захаров Іван Іванович	38
Згурівський Михайло Захарович	216
Златкин Олександр О.	166
Златкин Артур О.	166
Зоріна Тетяна	114
Зіятдинов Надір Нізамович	87
Іванов Віктор Ілліч	48, 192
Іващенко В.І.	238
Ігнатюк Олексій Анатолійович	204, 205
Ізволенська Ада Євгенівна	187
Іщишина Алла Олександровна	126
Карпенко А.В.	169
Касьян Костянтин Миколайович	192
Кац Марк Давидович	39, 83
Квітка Олександр Олександрович	124, 139, 149, 190, 193, 218
Клепач Микола Іванович	57
Ковалевський Валерій Михайлович	186, 188
Козлов Павло В'ячеславович	149
Коломієць Денис Ростиславович	214
Колос Петро Олексійович	108
Колпаков В.В.	141
Комариста Богдана Миколаївна	202, 228
Кондратов Сергій Олексійович	19, 61, 62, 86, 154
Конишев Валерій Васильович	14
Концевой Андрій Леонідович	63, 190
Концевой Сергій Андрійович	63
Копилець Володимир Іванович	24
Коржик Михайло Володимирович	142
Корнет Марина Миколаївна	21
Корній Сергій Андрійович	24
Коробов Віктор Іванович	45, 201
Корчик Наталя Михайлівна	64
Косенко В.Н.	233
Котлинська Наталія Станіславівна	172
Кочкарьов Юрій Олександрович	171
Кравченко Андрій Анатолійович	20
Кругляк Д.О.	238
Кубрак Анатолій Іванович	143
Лабенська Ірина Борисівна	21
Ладієва Леся Ростиславівна	66, 144
Лаптєва Тетяна Володимирівна	87
Лега Ю.Г.	166
Листопад Д.А.	239
Литвин Валентина Анатоліївна	66
Лобанов Віктор Васильович	20
Лукінок Михайло Васильович	186
Лукошніков І.Є.	235, 236
Максимчук Світлана Леонідівна	68
Масленіков А.Н.	239
Матвиєнко Д.Г.	126, 129, 130, 134
Медведєв Ромуальд Броніславович	176
Медведєва Валентина Миколаївна	145, 172
Мєліхов Леонід Олександрович	198
Мисіна Оксана Іванівна	71

Мінаєв Борис Пилипович	16, 22, 23, 53
Мінаєв Олексій	53
Мінаєва Валентина Олександрівна	16, 22, 23
Мітченко Тетяна Євгенівна	149
Мрачковський Дмитро Віталійович	124
Нагорнюк Оксана Миколаївна	207
Немоловський Віталій Вікторович	19
Немоловська Лариса Леонідівна	154
Нестеренко Тетяна Миколаївна	192
Нікітенко Євгений Васильович	34
Николенко Микола Васильович	79
Німчук Ігор Богданович	145
Омельянчик Людмила Олександровна	21
Оникієнко Ігор Іванович	176
Осипенкова Ірина Іванівна	171
Осипова Л.В.	240
Осовик Алла Петрівна	27
Островський Геннадій Маркович	87
Очков Валерій Федорович	201
Панкратова Наталья Дмитрієвна	225
Панченко О.В.	240
Петренко Ліна Володимирівна	45
Пилипенко Олександр Михайлович	113
Підліснюк Валентина Вікторівна	211
Плашихин Сергій Володимирович	179
Полегенько Вадим Іванович	109
Потапенко Едуард Володимирович	86
Потяженко Іван Олександрович	177
Похмурський Василь Іванович	24
Почечуев А.М.	130
Примиская Світлана Олексіївна	111
Ратушная Л.Н.	74
Рахлицька Олена Михайлівна	49
Решетіловський Володимир	111
Рижов Денис Олександрович	87
Рищенко І.М.	88, 91
Piaxi Реваз	179
Ройшлі К.М.	111
Рубан Дмитро Петрович	113
Рязанцев М.І.	141
Савенков А.С.	74, 76, 88, 91, 93
Савченко А.Н.	126, 129, 134
Савяк Роман Прокопович	61, 86
Сангінова Ольга Вікторовна	68, 96, 151, 198
Свояк Наталія Іванівна	210
Селивоненко Богдан Олександрович	27
Селіна Ірина Борисівна	187
Сергієнко Іван Васильович	54
Середа Алевтина Олександрівна	94
Сидоренко Олександр Володимирович	62
Ситников Олексій Володимирович	151
Скалько Наталія Анатоліївна	216
Скачков Віктор Олексійович	31, 48, 169
Скіп Борис Васильович	114
Смотров Євген Іванович	19
Снігур Олександр Володимирович	144
Сокол Леся Михайлівна	211
Солодовнік Тетяна Володимирівна	16, 70

Сорокіна Є.В.	241
Старчак Валентина Георгіївна	27
Статюха Геннадій Олексійович	4, 135, 151, 179, 181, 183, 193, 200, 214, 216, 228
Сташкевич Отто Михайлович	114
Степанов Микола Борисович	80
Суруп Ірина Володимирівна	181
Сухіна Ганна Михайлівна	61
Тарас Тетяна Миколаївна	29
Тарасенко Юрій Олександрович	46
Теліцина Наталія Євгенівна	177, 181
Тимчук Алла Федорівна	128
Титов Юрій Михайлович	103
Титула Віктор Миколайович	49
Тищенко Ігор Анатолійович	214
Тімко Володимир Григорович	86
Ткач Юрій Едуардович	34
Унрод Володимир Ізяславович	122, 129, 130, 134, 183, 216
Фатькина Олена Анатоліївна	151
Федак Ірина Андріївна	118
Федоренко Денис Юрійович	160
Федоренко Станіслав Миколайович	138
Федорів Андрій Степанович	29
Федорів Мар'яна Зіновіївна	29
Филипчук Леонід Вікторович	57
Фільченков Олександр Сергійович	31, 48, 169
Францева Алла Григорівна	122
Хаврюченко Володимир Дмитрієвич	46
Ханіцький Максим Анатолійович	143
Хількова Лариса Олександровна	154
Ходаківська Анна Сергіївна	103
Холоднов Владислав Олексійович	200
Хома Руслан Євгенієвич	49
Хоменко Олена Михайлівна	29
Хренъ Олена Павлівна	201
Чашник Дмитро Вікторович	214
Чеботарьов Олександр Миколайович	49, 131
Червоний І.Ф.	231, 232, 235, 236, 237, 238, 239, 240, 241
Чередниченко Валентина Миколаївна	195
Шахновський Аркадій Маркусович	124, 135, 193
Швець Дмитро Іванович	68, 96
Шевченко Олег Анатолійович	156
Шевченко Олександр Володимирович	22, 23
Щербакова Тетяна Михайлівна	131
Щербашин Юрій Дмитрович	172
Яковишин В.А.	76, 93
Янишпольський Василь Вікторович	160
Янко Тарас Богданович	31
Яровий Роман Валерійович	70
Ярошук Ірина Вікторівна	70
Ярошук Людмила Дем'янівна	70
Яценко Светлана Олександровна	46
Яцишин А.В.	126, 129, 130, 134
Яцков Микола Васильович	64, 71
Moniuk Władysław Ivanovich	98
Pohorecki Ryszard Arturovich	98
Wierzchowski Piotr Piotrovich	98

ЗМІСТ

Статюха Г.О. <i>Наукова школа «Математичне і комп'ютерне моделювання хімічних і технологічних процесів та систем»</i>	4
Конишев В.В. Фірма « <i>Ірком-ЕКТ</i> » – виробник фасувального обладнання	14

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

Бараков Р.Ю., Солодовнік Т.В., Мінаєв Б.П., Мінаєва В.О. Комп'ютерне моделювання геометрії і електронної структури глюкозаміну та глюкози методами квантової хімії	16
Гребенюк А.Г. Квантовохімічне моделювання взаємодії проникаючих сіток у наночастинках каркасних бінарних сполук	17
Дем'яненко Є.М., Гребенюк А.Г. Теоретичний аналіз елементарних стадій окиснення аскорбінової кислоти на поверхні кремнезему	18
Кондратов С.О., Немоловський В.В., Смотров Є.І. Математичне і комп'ютерне моделювання молекулярно-масового розподілу В лінійної поліконденсації	19
Кравченко А.А., Гребенюк А.Г., Лобанов В.В. Теоретичне дослідження взаємодії поверхні кремнезему з водними розчинами фтороводню	20
Лабенська І.Б., Корнет М.М., Бражко О.А., Омельянчик Л.О. Молекулярний дизайн біорегуляторів серед S-(2-метилхінолін-4-іл)заміщених L-цистейну	21
Мінаєв Б.П., Мінаєва В.О., Шевченко О.В. Комп'ютерне моделювання зв'язування Ферум(II) порфірину з молекулою кисню методом теорії функціоналу густини B3LYP та методом PM3	22
Мінаєв Б.П., Мінаєва В.О., Шевченко О.В. Комп'ютерне моделювання структури та ІЧ-спектрів Ферум(II) порфірину за допомогою різних методів теорії функціоналу густини	23
Похмурський В.І., Корній С.А., Копилець В.І. Комп'ютерне моделювання взаємодії деформованих інтерметалідів CuAl ₂ та CuAl ₂ Mg із корозивним середовищем	24
Старчак В. Г., Осовик А.П., Селивоненко Б.О., Буяльська Н.П. Комп'ютерне моделювання утворення металохелатних наноструктур при поверхневій модифікації матеріалів	27
Федорів М.З., Тарас Т.М., Федорів А.С. Порівняльна характеристика реакційної здатності похідних 9,10-антрахінону за допомогою квантово-хімічних розрахунків	29
Хоменко О.М. Використання квантово-хімічних розрахунків у моделюванні механізмів формування заборонених переходів у молекулі озону	29
Янко Т.Б., Фільченков А.С., Скачков В.О., Грицай В.П. Моделювання процесу анодного окислення алюмінію	31
Болотин А.В. Математическое и компьютерное моделирование колебательных электрохимических процессов	33
Бондаренко В.В., Нікітенко Е.В., Ткач Ю.Э. Решение задачи кластеризации молекул в распределенной системе DistributeME	34
Захаров И.И. DFT-расчеты изомеров азотистого ангидрида N ₂ O ₃ . Квантовохимическое свидетельство нового изомера	38
Кац М.Д. Компьютерное моделирование новых химических соединений	39
Коробов В.И., Петренко Л.В. Моделирование процессов пассивации металлов и сплавов при их анодной поляризации	45
Тарасенко Ю.А., Безносик Ю.А., Хаврюченко В.Д., Яценко С.А. Компьютерное моделирование процессов окислительной сорбции сероводорода на активированных углях	46
Фільченков А.С., Грицай В.П., Скачков В.А., Іванов В.И. Моделирование процесса износа подшипников скольжения на основе баббита	48
Чеботарев А.Н., Хома Р.Е., Рахлицкая Е.М., Титула В.Н. Компьютерное моделирование состава равновесной системи «вода – гексафтогоркремнієвая кислота – піперидин»	49
Bondarchuk S., Minaev A., Minaev B. Quantum chemical modeling of Meerwein reactions. The role of the triplet state of arendiazonium salts and spin catalysis	53

СЕКЦІЯ 2
КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ
ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ

23.	Буряков В.Г., Сергієнко І.В., Головченко В.М. Комп'ютерне моделювання процесу ректифікації етилового спирту	54
24.	Головченко В.М., Буряков В.Г. Моделювання процесу ректифікації спирто-ефірного розчинника	56
25.	Клепач М.І., Филипчук Л.В. Моделювання зміни параметрів pH та Eh води	57
26.	Кондратов С.О., Савяк Р.П., Сухіна Г.М. Комп'ютерне моделювання подібності лікарських препаратів	61
27.	Кондратов С.О., Сидоренко О.В. Виявлення найбільш впливових факторів процесу ізомеризації в умовах виробництва	62
28.	Концевой А.Л., Концевой С.А. Моделювання процесу синтезу аміаку	63
29.	Корчик Н.М., Яцков М.В., Белікова С.В. Формування регулюючого впливу на комбіновані системи очищення стічних вод	64
30.	Ладієва Л.Р., Анохіна Е.О. Математична модель процесу випаровування в роторному плівковому апараті	66
31.	Литвин В.А., Галаган Р.Л. Побудова рК-спектрів синтетичних гумінових речовин за даними потенціометричного титрування	66
32.	Швець Д.І., Сангінова О.В., Максимчук С.Л. Комп'ютерне моделювання процесу переробки після спиртової барди	68
33.	Яровий Р.В., Солодовнік Т.В. Використання комп'ютерних технологій для розрахунків в кількісному аналізі	70
34.	Ярощук Л.Д., Ярощук І.В., Борозенець Н.В. Використання нейронних мереж для ідентифікації інерційних технологічних об'єктів	70
35.	Яцков М.В., Мисіна О.І. Математична модель процесу магнітного очищення речовин від домішок	71
36.	Белогур И.С., Савенков А.С., Баркатова С.С., Ратушная Л.Н. Определение кинетических параметров азотнокислого выщелачивания из низкосортных фосфоритов Украины	74
37.	Близнюк О.Н., Савенков А.С., Яковишин В.А. Исследование кинетики восстановления оксидов азота аммиаком	76
38.	Болотин А.В., Верещак В.Г., Николенко Н.В. Компьютерное моделирование процессов грануляции нанодисперсного диоксида циркония	79
39.	Бондаренко С.Г., Степанов Н.Б., Васильевич А.И. Анализ качества нефтепродуктов по комплексному параметру	80
40.	Бугаєва Л.М., Безносик Ю.А. Разработка гибридных процессов для очистки газовых выбросов	82
41.	Кац М.Д., Давиденко А.М. Идентификация и субоптимизация действующих химико-технологических процессов	83
42.	Кондратов С.А., Потапенко Э.В., Савяк Р.П., Тимко В.Г. Модифицированная процедура установления корреляции <i>in vitro – in vivo</i> для лекарственных препаратов	86
43.	Рыжов Д.А., Зиятдинов Н.Н., Лаптева Т.В., Островский Г.М. Компьютерное моделирование замкнутой химико-технологической системы для решения задачи дискретно непрерывной оптимизации	87
44.	Рищенко И.М., Асеев Г.Г., Савенков А.С., Вецнер Ю.И. Расчет физико-химических свойств системыmonoаммоний фосфат – нитрат кальция – нитрат аммония	88
45.	Рищенко И.М., Довгалова Н.Ж., Белогур И.С., Савенков А.С. Расчет равновесного состава растворов $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2\text{-NH}_4\text{OH}$	91
46.	Савенков А.С., Яковишин В.А., Бутенко А.Н. Математическое моделирование процессов разложения нитратов серебра и палладия в технологии катализаторов	93
47.	Середа А.А., Безносик Ю.А. Моделирование методики контроля качества лекарственных средств	94
48.	Швець Д.І., Сангінова О.В., Гуля Н.В. Комп'ютерне моделювання процесса активування угілля-сирца	96
49.	Pohorecki R.A., Moniuk W.I., Wierzchowski P.P. Modelling of uncatalyzed oxidation of cyclohexane	98

СЕКЦІЯ 3

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРИРОДООХОРОННИХ ПРОЦЕСІВ
50. Бугаєва Л.М., Євхімович Л.В., Ходаківська А.С., Титов М.Ю. Прогнозування забруднення повітря з використанням нейронних та нейронечітких мереж 103
51. Голуб С.В. Методологічні основи створення автоматизованої системи багаторівневого соціо-екологічного моніторингу 105
52. Голуб С.В. Теоретичні основи багаторівневих технологій інформаційного моделювання 106
53. Колос П.О. Забезпечення адаптивності алгоритмів синтезу моделей об'єктів соціо-екологічного моніторингу 108
54. Полегенько В.І. Структурний аналіз і прогнозування екологічних катастроф 109
55. Примиська С.О., Безносик Ю.О., Решетіловський В.П., Ройшлі К.М. Моделювання динаміки адсорбційних процесів на цеолітах 111
56. Пилипенко О.М., Рубан Д.П. Комп'ютерне моделювання при визначенні екологічних показників міських автобусів 113
57. Скіп Б., Зоріна Т., Сташкевич О. Вплив забруднення автотранспортної загазованості на кінетику імунної відповіді 114
58. Федак І.А. Моделювання транскордонних переносів важких металів відповідно до стратегії ЕМЕП 118
59. Францева А.Г., Унрод В.І. До питання про модельний розрахунок та аналіз молекули флуоренізуїду 122
60. Шахновський А.М., Єжовська А., Квітка О.О., Мрачковський Д.В. Комп'ютерне моделювання процесів водоспоживання із використанням програм - симулаторів 124
61. Яцишин А.В., Матвиенко Д.Г., Белоусов В.Ф., Унрод В.І., Почечуев А.М. Радіаційний блок системи візуалізації медико-екологічних баз даних 126
62. Бойко Т.В., Йишина А.А. Методологический подход к количественному анализу загрязнений почвы при проектировании предприятия 126
63. Тымчук А.Ф. Оценка применимости различных адсорбционных моделей для границы раздела фаз твердое тело – раствор 128
64. Унрод В.И., Матвиенко Д.Г., Яцишин А.В., Белоусов В.Ф., Савченко А.Н. Разработка алгоритмов оценки влияния радиологического загрязнения продуктов питания 129
65. Унрод В.И., Яцишин А.В., Матвиенко Д.Г. Белоусов В.Ф., Почечуев А.М. Визуализация данных радиоэкологического мониторинга Житомирского и Черкасского региона с помощью ГИС 130
66. Чеботарёв А.Н., Гузенко Е.М., Щербакова Т.М., Ефимова И.С. Математическое моделирование при разработке индикаторных трубок для определения хрома(VI) 131
67. Яцишин А.В., Матвиенко Д.Г., Унрод В.И., Агапова А.В., Савченко А.Н. Факторно-кластерный алгоритм анализа экологической ситуации в регионе 134
68. Jezowski J., Statyukha G., Jezowska A., Shakhnovsky A., Dzhygyrey I. Minimization of water usage and wastewater treatment cost by systematic approaches 135

СЕКЦІЯ 4

КОМП'ЮТЕРНА ПІДТРИМКА ВИРОБНИЧИХ ПРОЦЕСІВ (ІНТЕЛЕКТУАЛІЗАЦІЯ, ПРОЕКТУВАННЯ, АВТОМАТИЗАЦІЯ)
69. Бондаренко С.Г., Федоренко С.М. SCADA-система керування скловареною піччю 138
70. Джигирей І.М., Квітка О.О. Оптимізація схем водоочищення як інструмент підвищенння економічної ефективності природоохоронних витрат підприємства 139
71. Жураковський Я.Ю., Жураковська О.С., Величко Д.С. Завадостійке кодування в сучасних SCADA-системах 140
72. Жученко А.І., Колпаков В.В., Рязанцев М.І., Жученко О.А. Розробка стратегії дезактивації каталізатора в умовах промислової конверсії метану з метою отримання окису вуглецю 141
73. Коржик М.В., Жученко А.І. Керування процесом графітації в печах постійного струму 142
74. Кубрак А.І., Аверіна Т.В., Ханіцький М.А. Комп'ютерне моделювання систем цифрового керування аналоговими об'єктами 143
75. Ладієва Л.Р., Снігур О.В. Вимірювання гранулометричного складу псевдозрідженої шару непрямим способом 144
76. Медведєва В. М., Німчук І. Б. Проблеми реплікації баз даних 145

77.	Мітченко Т.Є., Квітка О.О., Козлов П.В., Галиш М.Ф. Автоматизація проектування установок пом'якшення води малої продуктивності	149
78.	Ситніков О.В. Принципи створення системи керування скловарною піччю ванного типу	151
79.	Статюха Г.О., Сангінова О.В., Фатькіна О.А. Впровадження концепції більш чистого виробництва на Хмельницькій АЕС	151
80.	Хількова Л.О., Кондратов С.О., Немоловська Л.Л. Комп'ютерне моделювання рівноважних складів у системі формальдегід-метанол-воді	154
81.	Безносик А.Ю. Сравнительное исследование пакетов схемотехнического проектирования ALLTEC и HSPICE	155
82.	Глоба А.В., Шевченко О.А. Применение компьютерных программ и баз данных для оптимизации технологии ремонта изделий из композиционных материалов	156
83.	Дозорцев В.М., Владов Р.А., Федоренко Д.Ю., Янишпольский В.В. Компьютерный тренажер для обучения операторов установки производства амиака	160
84.	Лега Ю.Г., Златкин Артур А., Златкин Александр А. Модификации игровых критериев оптимальности на основе Л-критерия удовлетворительности	166
85.	Карпенко А.В., Скачков В.А., Грицай В.П., Фильченков А.С. Модель процессов карбонизации углерод-углеродного композиционного материала	169
86.	Кочкарев Ю.А., Осипенкова И.И. Компьютерная поддержка принятия решения при выборе состава химического препарата	171
87.	Медведева В.Н., Щербашин Ю.Д., Котлинская Н.С. Расчет гидравлических сетей с использованием метода нелинейного программирования	172
88.	Медведев Р.Б., Оникиенко И.И. Математическая модель производства акриловых красок	176
89.	Потяженко И.А., Телицына Н.Е., Бондаренко Е.С. Оптимизация процесса получения неорганического связующего с использованием метода Монте-Карло	177
90.	Статюха Г.А., Безносик Ю.А., Риахи Р., Плашихин С.В. Синтез систем транспорта газа	179
91.	Статюха Г.А., Телицына Н.Е., Суруп И.В. Кладочный раствор как элемент системы строительной конструкции	181
92.	Унрод В.И., Агапов В.А., Агапова А.В., Бененко С.П. К вопросу о выборе оптимальных составов материалов на основе цитрографа	183
93.	Statjukha G., Jeżowski J., Jeżowska A., Beznosyk Y., Bugaeva L. Design of optimal gas purification schemes by means pinch analysis	183

СЕКЦІЯ 5 КОМП'ЮТЕРНО-ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В БАГАТОРІВНЕВІЙ ВІЩІЙ ОСВІТІ

94.	Жученко А.І., Ковалевський В.М., Лукінюк М.В. Інтегрована комп'ютерно-мікропроцесорна навчальна система	186
95.	Ізволенська А.Є., Селіна І.Б. Викладання комп'ютерної графіки – вимоги нового часу	187
96.	Ковалевський В.М. Прикладна навчальна C++ програма – інструмент у підготовці бакалаврів по автоматизації технологічних процесів	188
97.	Концевой А.Л., Безносик Ю.О., Квітка О.О. Безперервна комп'ютерна підготовка студентів спеціальності ХТНР	190
98.	Нестеренко Т.М., Касьян К.М., Іванов В.І. Використання комп'ютерно-інформаційної моделі FURNACE для підготовки фахівців з кольорової металургії	192
99.	Статюха Г.О., Квітка О.О., Бугаєва Л.М., Шахновський А.М. Система комп'ютерної підготовки фахівців зі спеціальності «Комп'ютерно-інтегровані технологічні процеси і виробництва»	193
100.	Чередниченко В.М. Підготовка сучасних фахівців з хімічної технології	195
101.	Бондаренко С.Г., Сангінова О.В., Мелихов Л.А. Разработка интерактивной информационной обучающей системы «Технологические измерения»	198
102.	Бугаєва Л.Н., Статюха Г.А., Холоднов В.А., Jeżowska A. Использование мирового опыта интеграции CAPE-приложений в учебные курсы направления химической инженерии	200
103.	Коробов В.И., Очков В.Ф., Хренъ Е.П. Комплекс расчетных документов по химической кинетике на MathCad Calculation Server	201

СЕКЦІЯ 6
СТАЛИЙ РОЗВИТОК РЕГІОНІВ –
ОСНОВНИЙ НАПРЯМОК РЕФОРМ В УКРАЇНІ

104.	Бойко Т.В., Бендюг В.І., Комариста Б.М. Техногенна безпека в аспекті сталого розвитку	202
105.	Дуган О.М., Ігнатюк О.А. Варіант рішення національної і регіональної проблеми екологічного сталого розвитку в Україні	204
106.	Ігнатюк О.А., Дуган О.М. Перспективні напрямки екобіотехнологій в контексті реалізації програми сталого розвитку	205
107.	Нагорнюк О.М. Освіта для сталого розвитку та її значення для екологозбалансованого розвитку суспільства	207
108.	Свояк Н.І. Розробка реєстру викидів і перенесення забруднювачів у Черкаській області	210
109.	Сокол Л.М., Підліснюк В.В. Вибір пріоритетів сталого розвитку України за результатами вивчення суспільної думки	211
110.	Статюха Г.О., Джигирей І.М., Коломієць Д.Р., Чашник Д.В., Тищенко І.А. Екопрофіль регіону – інструмент відображення й аналізу складових сталого розвитку довкілля	214
111.	Унрод В.І., Артеменко О.Д., Скалько Н.А. Вплив радіаційного забруднення на лісове господарство Черкаського регіону	216
112.	Згуровский М.З., Статюха Г.А. Образовательные аспекты устойчивого развития: состояние, проблемы и предложения	216
113.	Кац М.Д. Концепция выхода Украины в лидеры мировой цивилизации	218
114.	Панкратова Н.Д., Бугаєва Л.М., Безносик А.Ю. К вопросу разработки индикаторов устойчивого развития прибрежной зоны Крыма	225
115.	Статюха Г.А., Джигирей И.Н., Комаристая Б.Н. Разработка коэффициента устойчивого ресурсосбережения на основе оценки жизненного цикла	228
116*.	Воляр Р.Н., Егоров С.Г., Червоный И.Ф. Распределение температуры при выращивании монокристаллов кремния методом Чохральского	231
117.	Егоров С.Г., Воляр Р.Н., Червоный И.Ф. Применение математических пакетов для моделирования движения расплава	232
118.	Косенко В.Н., Грицай В.П. Применение методов математического моделирования с целью оптимизации состава шлака шахтной свинцововой плавки	233
119.	Лукошников И.Е., Червоный И.Ф. Кинетика растворения губчатого титана в электролитах	235
120.	Лукошников И.Е., Червоный И.Ф. Производство титановых порошков методом электролиза	236
121.	Червоный И.Ф., Бачурский Д.В. Особенности подготовки сырья для электролитического производства магния	237
122.	Червоный И.Ф., Кругляк Д.О., Іващенко В.І. Получение ванадия при производстве титановой губки	238
123.	Червоный И.Ф., Листопад Д.А., Масленников А.Н. Влияние натекания на качество губчатого титана	239
124.	Червоный И.Ф., Панченко О.В., Осипова Л.В. Термодинамика системы Si[B]	240
125.	Червоный И.Ф., Сорокина Е.В. Особенности производства технического кремния	241
	Список учасників	258
	Авторський вказівник	262

* позасекційні матеріали



www.busel.ua

БУСЕЛ

СКЛО В АРХІТЕКТУРІ ТА ІНТЕР'ЄРІ



Дизайн-Студія
м.Київ, вул.Прорізна, 22
тел.: (044) 279 50 91
278 60 35
факс: (044) 238 68 28

Офіс і ШОУ-РУМ
вул. М.Ракової, 11
3 - й поверх
тел.: (044) 239 22 67
391 17 04
факс: (044) 239 22 65

Склад і виробництво
м. Вишнєве
вул. Київська, 13-А
тел./факс: (044) 239 05 56

Гуртові поставки скла

- float 2-19мм (max розмір 3210x6000мм)
- тоноване у масі та по поверхні
- скло, що очищується саме
- енергозберігаюче
- безпечне (триплекс, гартоване)
- матоване (сатин, декоративне)
- візерункове (понад 100 видів)
- дзеркало листове
- розкій скла

Меблі зі скла та дзеркал

- готові вироби та на замовлення
- встановлення та доставка
- фурнітура для скловиробів
- склоблоки (понад 100 видів)
- фарбоване скло, вітражі

Обладнання (нове та вживане)

- для обробки скла Bavelloni
- для загартування скла Tamglass
- для виробництва склопакетів Simec
- продаж, монтаж, сервіс, гарантія
- професійний інструмент

Склопакети

- велиki розміри
- декоровані вітражами, матованим склом
- різні види та форми
- для структурних фасадів
- найбагатший в Україні вибір шпросів
- комплектуючі до склопакетів

Спеціалізована доставка скла

- гуртом, листами розміром до 3210x6000мм
- великогабаритних склопакетів
- вивантаження, монтаж

БУСЕЛ

Україна, 02660, м. Київ, вул. М.Раскової, 11

тел: (044) 239-2265, 391-1704

Факс: (044) 239-2267



WWW.BUSEL.UA

Компанія “БУСЕЛ” займає лідеруючі позиції на українському ринку архітектурного і меблевого скла. Компанія здійснює поставки флоат-скла, тонованого, енергозберігаючого, ламінованого, візерункового скла і дзеркал від провідних світових виробників, таких як “GLAVERBEL”, “PILKINGTON”, “PPG”, “SAINT-GOBAIN”, розвиває високоякісні виробництва з обробки скла і виготовлення сертифікованих склопакетів з селективними властивостями, виконує оформлення інтер'єрів (склом, дзеркалами, склоблоками, вітражами), представляє краще професійне обладнання для обробки “Z. BAVELLONI” та загартування скла “TAMGLASS”, лінії по виробництву склопакетів італійської компанії “SIMEC”.

Компанія “БУСЕЛ” впродовж багатьох років спеціалізується на переробці листового скла. Власне виробництво з обробки скла та дзеркал обладнане найсучаснішими верстатами італійського концерну “Z. BAVELLONI”. З листового скла виготовлюються різноманітні за геометрією полички, дверцята, столешні, мийки, барні стійки, ексклюзивні меблі, дзеркала тощо.

Наша компанія може забезпечити верстатами весь виробничий цикл заводу по обробці скла й дзеркал, або виробництва по випуску склопакетів. Представленний широкий спектр устаткування від столів для розкрою скла, верстатів для обробки прямолінійних і криволінійних країв, свердлильних і гравірувальних верстатів, мийних машин до складних універсальних комплексів по обробці скла. Часто ми поставляємо машини й для окремих виробничих процесів на вже укомплектовані підприємства, що проводять технічне переоснащення, або починаючі підприємства, що бажають сьогодні почати роботу з більш скромними фінансовими інвестиціями.

Паралельно із продажами нового обладнання ми, силами наших фахівців, робимо капітальне відновлення машин, що були у використанні, і так само конструюванням і випуск машин власного виробництва (столи порізки, автоматичні машини для матування скла, свердлильні верстати та ін.).

Легкість ліній, прозорість форм, елегантність рішень. Все це про скло. Насправді, важко переоцінити роль скла у формуванні сучасного стильного інтер'єру. Візерункове та матоване скло, вологостійкі дзеркала, скляні меблі, вітражі, склоблоки, скляні двері та перегородки, виготовлені нами, підкреслять індивідуальність Вашої оселі. Орієнтуючись на потреби індивідуальних замовників в центрі Києва працює дизайн-студія “Скло в інтер'єрі”, що знаходиться за адресою вул. Прорізна 22.

Завжди в наявності широкий асортимент меблевої фурнітури відомих торгових марок (“REI”, “SAMBEAT”, “MAESTRO” – Іспанія та “POLIPLAST” – Італія), кольорових склоблоків (“VETROARREDO” – Італія), комплектуючих до склопакетів, інструменту для роботи зі склом.

Висока якість, вищуканий дизайн, індивідуальний підхід до кожного клієнта, розгалужена мережа представництв по всій Україні - все це притаманне торгівельній марці “Бусел” та складає основу філософії нашої команди.

Оргкомітет конференції КМХП-2008

СПІВГОЛОВИ:

Згуровський М.З. – академік НАН України, проф., д.т.н., ректор НТУУ «КПІ»;

Лега Ю.Г. – професор, д.т.н., ректор ЧДТУ

ЧЛЕНИ ОРГКОМИТЕТУ:

Качала Т.Н. – професор, д.е.н., проректор з НДР ЧДТУ;

Нестеров В.П. – професор, д.т.н., президент Української технологічної академії;

Астрелін І.М. – професор, д.т.н., декан ХТФ НТУУ «КПІ»;

Статюха Г.О. – професор, д.т.н., зав. кафедри НТУУ «КПІ»;

Тимченко А.А. – професор, д.т.н., зав. кафедри ЧДТУ;

Кочкарьов Ю.А. – професор, д.т.н., зав. кафедри ЧДТУ;

Унрод В.І. – професор, к.т.н., зав. кафедри ЧДТУ;

Мінаєв Б. П. – професор, д.х.н. ЧНУ;

Столяренко Г.С. – професор, д.т.н., зав. кафедри ЧДТУ;

Безносик Ю.О. – доцент, к.т.н., НТУУ «КПІ»;

Солодовнік Т.В. – доцент, к.х.н., ЧДТУ

Наукове видання

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ
В ХІМІЇ ТА ТЕХНОЛОГІЯХ**

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

Першої науково-практичної конференції
з міжнародною участю

Черкаси, 12-16 травня 2008 року

Під загальною редакцією
проф. Статюхи Г.О. і проф. Унрода В.І.

Матеріали конференції видано в авторській редакції

Укладач:

Безносик Ю.О.

Комп'ютерна верстка:

Джигирей І.М.

Обкладинка:

Алексенко Н.М.

Відповідальна за випуск:

Солодовнік Т.В.

Підп. до друку 10.04.2008 р. Формат 60×84 1/8. Папір офсетний. Гарнітура Times New Roman.
Друк оперативний. Умов.-друк. арк. 16,15. Облік.-вид. арк. 21,1. Наклад 200 прим.

Надруковано в типографії Черкаського ЦНТЕІ
18000, Україна, м. Черкаси, бул. Шевченка, 205.
Тел.: (0472) 45-28-13