

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
РОССИЙСКИЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА

УСПЕХИ
В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ
ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXVIII

№ 9

Москва
2024

УДК 66.01-52
ББК 24. 35
У78

Рецензент:
Российский химико-технологический университет
имени Д. И. Менделеева

У78 **Успехи в химии и химической технологии:** сб. науч. тр. Том XXXVIII,
№ 9 (288). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2024. – 176 с.

В сборник вошли статьи по актуальным вопросам в области теоретической и экспериментальной химии.

Материалы сборника представлены для широкого обсуждения на XX Международном конгрессе молодых ученых по химии и химической технологии «UCChT-2024», XXXVIII Международной конференции молодых ученых по химии и химической технологии «МКХТ-2024», ряде международных и российских конференций, симпозиумов и конкурсов, а также на интернет-сайтах.

Сборник представляет интерес для научно-технических работников, преподавателей, аспирантов и студентов химико-технологических вузов.

УДК 66.01-52
ББК 24. 35

Содержание

Информационные технологии, кибернетика и математика. Цифровые двойники новых материалов и технологий

Бадекина Д.А., Скичко А.С.

Моделирование процесса подавления роста грамположительных бактерий под влиянием наночастиц золота.....8

Верхососова А.И., Аверина Ю.М., Зверева О.В.

PEST-анализ внедрения технологии синтеза автомобильного топлива путем переработки атмосферного воздуха на Российский рынок12

Гавриленко А.И., Предместьин В.Р.

Разработка метода оперативного контроля распределения температуры в каталитическом аппарате с целью контроля степени использования катализатора методом стохастической интерполяции16

Голубев Э.В., Белоусова Д.И., Абрамов А.А., Цыганков П.Ю.

Процессы стерилизации материалов и изделий биомедицинского назначения21

Горшенин М.А.

Исследование теплопроводности в соединениях пластин на основе графитопласта.....25

Дементенко В.А., Скичко Е.А.

Разработка программного модуля расчета ректификации бинарных смесей.....28

Досаев А.А., Меньшуткина Н.В.

Разработка архитектуры базы данных биотехнологических процессов с использованием методов системного анализа31

Дусалин А.К., Семенов Г.Н., Скичко Е.А.

Разработка автоматизированной информационной системы «Университетские субботы».....34

Ермолов А.Г., Ключков Д.Я., Грановский А.М., Кольцова Э.М.

Разработка информационной системы в области водородной энергетики38

Иванов А.А., Васецкий А.М., Приходько В.Н.

Методика автоматизации контроля посещаемости очных занятий по опыту кафедры информационных компьютерных технологий.....42

Кислинская А.Ю., Парфильева Я.В., Цыганков П.Ю.

Микронизация фавипиравира с использованием быстрого расширения сверхкритического раствора47

Курлаева Т.И., Аверина Ю.М., Мозгунов В.А., Зверева О.В.

Анализ нормативно-правовых документов с целью выявления признаков опасных производственных объектов на складах нефтеперерабатывающих предприятий51

Мишачев А.Ю., Лебедев И.В. Моделирование процесса растворения с использованием трехмерного клеточного автомата.....	53
Мохова Е.К., Гордиенко М.Г. Исследование кинетики вакуумной сублимационной сушки суспензии, как перспективного средства доставки лекарственных препаратов при лечении социально значимых заболеваний.....	55
Новиков Н.А., Скичко Е.А. Моделирование ректификации многокомпонентных углеводородных смесей как бинарной ректификации двух псевдокомпонентов	60
Пашкин Е.А., Головкина А.М., Абрамов А.А., Цыганков П.Ю. Аналитические исследования аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса альгинат натрия – хитозан.....	63
Петрикова Е.А., Щербакова Л.А., М.Г. Гордиенко, Р.Р. Сафаров Планирование оптимального эксперимента для определения состава композиции и условий его производства.....	67
Покотиленько Е.А., Скичко А.С. Разработка расчётного модуля для демонстрации бифуркаций в ферментативном процессе с субстратным ингибированием.....	70
Сайтгареева А.И., Абрамов А.А., Щербакова Л.А., Гордиенко М.Г. Разработка конструкции дозирующего порошкового ингалятора	74
Беляев Ю.И., Саксонов М.И. Цветовая идентификация состава воздуха	77
Сидоренко Н.В., Лобанов А.В., Архипов А.М. Разработка программного модуля для автоматизированной визуализации схем химико-технологических производств в 3D представление.....	80
Скичко Е.А., Миронова Е.А., Кольцова Э.М. Математическое моделирование шнекового реактора синтеза углеродных нанотрубок	83
Федоров А.В., Глебов М.Б. Обзор альтернативных методов окисления нефтяных сульфидов.....	86
Кириллова И.Ю., Аверина Ю.М., Бессарабов А.М. Цифровизация аналитического мониторинга и производства фармакопейного ассортимента реактивной продукции	89
Лобанов В.Ю., Василенко В.А., Бессарабов А.М. Виртуальное моделирование аналитического оборудования для инфракрасной спектроскопии	92
Москаленко Д.А., Василенко В.А., Бессарабов А.М. Разработка 3d-моделей плотномера для виртуальной лаборатории	95

Ларреа Лапшина Л.Р., Федотова О.В., Цыганков П.Ю.

Исследование процесса получения нанокристаллов целлюлозы методом гидролиза в субкритической воде.....98

Петрова К.Д., Филиппова Е.Б., Бессарабов А.М.

Виртуальное моделирование аналитического оборудования для масс-спектрометрии .102

Деркач В.С., Гордиенко М.Г.

Разработка и исследование прототипа назальной формы в виде полимерных наночастиц с фавипиравиром.....105

Чекурова С.С., Аверина Ю.М., Богомоллов Б.Б., Рублева С.А.

Моделирование бизнес-процесса разработки рецептуры шихты для производства керамической мембраны109

Хайруллин Д.О., Лопатин А.Г.

Практическое применение теории о моменте инерции. Улучшение качества 3D печати113

Инжиниринг энергоресурсосберегающих химических технологий и инновационных материалов. Логистика ресурсосбережения, технологическая инноватика, стандартизация и сертификация в химической промышленности.

Харитонов А.О., Бусыгина Е.Б., Масленников И.М.

Оптимизация классификации сыпучих материалов методами математического планирования экспериментов117

Маслова В.В., Курбатов А.Ю.

Подбор оптимальных технологических решений процесса озонирования природных вод.....120

Сереброва А.С., Чуднова Т.А., Желудкова Е.А., Аснис Н.А.

Нормативное обеспечение контроля качества конверсионных самозалечивающихся покрытий123

Мухина А.А., Титов И.А., Невмятулина Х.А., Графушин Р.В.

Разработка проекта национального стандарта на базе международного для полиграфии.....126

Шепелев Д.А., Комарова С.Г.

«Умное» производство в индустрии 4.0129

Полякова Л.В., Моисеев Н.А., Монахов И.С., Руссо Д.Р.

Оценка влияния температуры на характеристики прототипа технического устройства с функцией измерения уровня жидкости133

Комарова С.Г., Рязанская Ю.М., Филатова В.С.

Особенности метрологического обеспечения в области использования атомной энергии136

Федорова К.И., Зайцева А.С., Невмятуллина Х.А. Особенности проведения метрологической экспертизы технологической и конструкторской документации	140
Марциохо А.И., Парцева М.Ф., Невмятуллина Х.А., Муравьева И.В. Взаимосвязь стандартизации и метрологии при оценке качества гальванических покрытий	144
Сёмин Н.В., Платонов И.А., Лихачёв Г.А., Захаров С.Л. Методология проектирования теплообменной аппаратуры в программе Компас при использовании фрагментов визуализации в динамике, полученной при использовании Solidworks Flow simulation	147
Черников Д.В., Невмятуллина Х.А. Тенденции по развитию международных стандартов по хранению и обработке конфиденциальной информации	149
Ситников И.А., Ильина С.И., Равичев Л.В., Свитцов А.А. Электрические процессы в химической технологии	152
Зырянова Е. Д., Зубарев А. М., Меньшиков В. В. Проектирование линии по нанесению порошковых красок	155
Нестерова А.В., Зубарев А.М., Меньшиков В.В. Анализ способов интенсификации производства лакокрасочных материалов	160
Шарапова И.И. , Меньшиков В.В. , Болдырев В.С. Перспектива создания высокотемпературных полимерных композиционных материалов	164
Новиков Е.В., Шлома О.А., Абрашов А.А., Гаврилова Н.Н., Жилина О.В. Нанесение противокоррозионных окисно-циркониевых золь-гель покрытий методом погружения	166
Советин Ф.С., Панкрушина А.В., Сафонова В.Д., Асеев К.М., Шумакова О.П. Разработка компьютерной модели технологической схемы процесса улавливания фосгена и хлороводорода	169
Советин Ф. С., Панкрушина А. В., Сеннер С. А., Шаталов К. И., Шумакова О. П. Моделирование процесса получения синтез-газа в реакторе с внутренним теплообменом	172

**Информационные технологии, кибернетика и
математика. Цифровые двойники новых материалов
и технологий**

УДК 004.942

Бадекина Д.А., Скичко А.С.

Моделирование процесса подавления роста грамположительных бактерий под влиянием наночастиц золота

Бадекина Дарья Андреевна – студент группы К- 45;

Скичко Алексей Сергеевич – к.т.н., доцент, доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов; olf_1@list.ru.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.*Работа посвящена разработке математического описания влияния наночастиц золота на рост грамположительных бактерий вида *S. aureus* с изменяющимся во времени параметром гибели клеток. В модели учтены зависимость удельной скорости фазы роста от концентрации наночастиц и накопительный эффект разрушительного действия наночастиц золота на клетки, проявляющийся с некоторым запаздыванием. Обоснованы уравнения модели. Получены аппроксимации параметров модели от концентрации наночастиц золота.**Ключевые слова: наночастицы золота, грамположительные бактерии, математическая модель, аппроксимация, оптимизационная задача.***Modeling of the process of suppressing the growth of gram-positive bacteria under the influence of gold nanoparticles**

Badekina D.A., Skichko A.S.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

*The work is devoted to the development of a mathematical description of the effect of gold nanoparticles on the growth of gram-positive bacteria of the *S. aureus* species with a time-varying parameter of cell death. The model takes into account the dependence of the specific rate of the growth phase on the concentration of nanoparticles and the cumulative effect of the destructive effect of gold nanoparticles on cells, which manifests itself with some delay. The equations of the model are substantiated. Approximations of the model parameters from the concentration of gold nanoparticles are obtained.**Key words: gold nanoparticles, gram-positive bacteria, mathematical model, approximation, optimization problem.***Введение**

Staphylococcus aureus — вид шаровидных грамположительных бактерий из рода стафилококков с диаметром клеток 0,5-1,5 мкм. В мазках из культур, выросших на питательных средах, они образуют скопления, напоминающие виноградные грозди. Золотистый стафилококк обитает на коже и слизистых практически у всех людей и является распространенным патогенным микроорганизмом, который может вызывать различные инфекционные заболевания. Высокая патогенность связана с высокой устойчивостью к антисептикам и факторам внешней среды, выработкой ферментов, защищающих почти от всех антибиотиков пенициллинового ряда и выработкой эндотоксинов, которые могут привести к общей интоксикации организма. Основными типами заболеваний, вызываемыми *S. aureus*, являются: кожные, респираторные, аутоиммунные заболевания, пищевое отравление, остеомиелит и другие [1].

Из-за эволюции бактерий и злоупотребления антибиотиками в последние десятилетия лекарственная устойчивость *S. aureus* значительно выросла. В качестве нового терапевтического подхода для эффективной борьбы с такими резистентными штаммами могут быть использованы нанотехнологии. Наноматериалы, такие как искусственные наночастицы золота (AuNP),

обладают перспективными применениями благодаря своим уникальным химическим, оптическим, электронным и механическим свойствам, а также большой площади поверхности. Эти характеристики отвечают за высокую каталитическую активность, уникальные оптические характеристики, контролируемые электрические свойства и высокую стабильность. Антибактериальная эффективность наночастиц золота происходит за счет повреждения клеточной мембраны, выработки активных форм кислорода, которые подавляют активность ферментов дыхательной цепи и приводят к гибели клетки [2]. Но стоит отметить, что при использовании наночастиц для борьбы с бактериями необходимо учитывать проблемы, связанные с их безопасностью и воздействием на окружающую среду и человека.

Методика эксперимента

Экспериментальные исследования антибактериального эффекта наночастиц золота, синтезированных с помощью биологического метода, проводились в ряде работ индийскими учеными из института науки и технологий Статьябама [3, 4]. 1 г сухого порошка *S. platensis* смешивали с 10 мл деионизированной воды и измельчали с помощью ступки и пестика. Смесь центрифугировали при 5000 об/мин в течение 10 минут, а затем фильтровали. Полученный белковый экстракт добавляли к 10 мл раствора $\text{HAuCl}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ в

соотношении 1:1 (10 мл:10 мл) с последующим добавлением 1 Н NaOH при перемешивании. Раствор выдерживали при постоянном перемешивании в течение 3-х часов и далее инкубировали при комнатной температуре в течение 48 часов. Окрашивание раствора в рубиново-красный цвет указывало на образование наночастиц золота. Полученные наночастицы имели моодисперсную сферическую форму с размером от 2 до 8 нм со средним размером частиц ~ 5 нм. Для исследования кинетики роста бактерий готовили несколько пробирок с суспензией, состоящей из питательной среды и клеток *S. aureus* с примерной концентрацией 10^6 КОЕ/мл. Далее их обрабатывали различными концентрациями (10, 50, 100, 150 и 200 мг/мл) наночастиц Au и инкубировали при 37 °С. Скорости роста бактерий отслеживали путем измерения оптической плотности (OD) при 600 нм, с интервалом в 2 часа. В качестве контроля использовали бактериальные суспензии без AuNPs.

Оцифровка экспериментальных данных

Оцифровка экспериментальных данных проводилась с помощью веб-приложения "Мультискан". Данное веб-приложение позволяет переводить сканированные изображения различных графиков в числовой вид. После загрузки изображения графика, необходимо задать координатную сетку и провести линейно-кусочную аппроксимацию. Для этого на кривых расставляются точки и программа автоматически разбивает каждый участок между точками на прямую. Далее проводится расчет и получение координат точек. Для получения более точных результатов, аппроксимацию и расчет точек необходимо проводить 3 раза и усреднить значения повторных считываний. По полученным числовым значениям координат построены кривые в программе Microsoft Excel.

Разработка математической модели

В экспериментальных работах [3, 4] не фиксировалось изменение состава среды, поскольку предполагалось, что активный рост *S. aureus* в естественных условиях происходит именно в средах, содержащих в достаточном количестве все необходимые компоненты. Поэтому при разработке математического описания процесса в качестве управляющего фактора ингибирования рассматривалась концентрация наночастиц золота. Таким образом, за основу математического описания процесса может быть взято уравнение типа традиционного уравнения Ферхюльста, в котором параметры могут в той или иной степени зависеть от концентрации наночастиц:

$$\frac{dx}{dt} = x r(c) \left(1 - \frac{x}{k(c)}\right) \quad (1)$$

где, x – биомасса, кл/мл,

t – время, ч;

r – удельная скорость роста бактерий, $1/ч$,

k – коэффициент, отвечающий за гибель бактерий, иначе, ёмкость среды, кл/мл.

Однако использование уравнения (1) не дало положительных результатов из-за того, что в расчетах либо появляется продолжительная лаг-фаза, переходящая в фазу экспоненциального роста существенно позже, чем в эксперименте, либо, при попытке ее уменьшить, фаза экспоненциального роста также значительно сокращается и быстро достигается стационарное значение, соответствующее ёмкости среды. Таким образом, стало очевидно, что рост *S. aureus* согласно данным из [3, 4], должен описываться зависимостью, отличной от (1).

Для идентификации типа этой зависимости была проведена аппроксимация типовой кривой роста, которая, как оказалось, прекрасно описывается уравнением:

$$\frac{dx}{dt} = bx \left(\frac{a}{x}\right)^{1/b} \quad (2)$$

где a и b – некие параметры, причем при $b = 0,5$ получается более простая формула:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{0,5a^2}{x} \quad (3)$$

В уравнении (3) скорость роста обратно пропорциональна количеству клеток, что можно объяснить внутривидовой конкуренцией за пространство среды обитания.

Коэффициент a и степень b в уравнении (2) подбирались путём минимизации критерия рассогласования с использованием метода покоординатного спуска:

$$R = \sum_i R_i(r_0, k_0, \Delta r_i, \Delta k_i) = \sum_i \sum_j |x_{i,j}^{\text{эксп}} - x_{i,j}^{\text{расч}}| \rightarrow \min, \quad (4)$$

где индекс i соответствует номеру экспериментальной кривой роста при определённой концентрации AuNPs в среде, а индекс j – номеру экспериментальной точки на i -й кривой роста.

Результатом решения оптимизационной задачи (4) стала некая зависимость параметра a от концентрации AuNPs и значение параметра b , равное 0,5, что подтвердило высказанное ранее предположение о влиянии внутривидовой конкуренции на процесс роста клеток и правомерность перехода от уравнения (2) к уравнению (3). Однако уравнение (3) не учитывает процесс отмирания, наблюдаемый при высоких концентрациях наночастиц, и поэтому требует дальнейшей модификации.

Для учёта фазы отмирания в уравнение (3) было добавлено второе слагаемое по типу уравнения Ферхюльста (1):

$$\frac{dx}{dt} = \frac{0,5a^2}{x} - kx^2 \quad (5)$$

где k – параметр, отвечающий за скорость отмирания.

По экспериментальным данным видно, что наночастицы золота не разрушают клетки сразу, при их добавлении клетки продолжают расти несколько часов (хотя влияние концентрации AuNPs на удельную скорость роста заметно сразу), только после чего рост может остановиться и количество клеток начать уменьшаться. Это свидетельствует о

том, что разрушительное воздействие AuNPs на клетки *S. aureus* носит накопительный характер. Поэтому параметр k должен определённым образом меняться во времени.

Для подбора зависимости $k(t)$ были использованы основы качественной теории дифференциальных уравнений. Поскольку при отсутствии наночастиц отмирания *S. aureus* не наблюдается в принципе, было предположено, что начальное значение $k(t=0)$, соответствующее культуре, не подвергшейся воздействию, должно быть примерно равно 0 (т.е. некоей очень маленькой погрешности, учитывающей случайную гибель отдельных клеток в популяции). На начальном временном отрезке рост $k(t)$ должен быть незначительным, но спустя 10 ч должен достигать некоего ограниченного значения β , поскольку, как показали предварительные вычислительные эксперименты, неограниченный рост $k(t)$ также не соответствует описываемому процессу, поскольку делает фазу отмирания намного более значимой, нежели в эксперименте. Таким образом, для описания $k(t)$ необходимо дифференциальное уравнение, имеющее две неподвижные точки: $k = 0$ по типу репеллер и $k = \beta$ по типу аттрактор. Обоснованному условию будет соответствовать следующее уравнение:

$$\frac{dx}{dt} = k(\beta - k) \quad (6)$$

Таким образом, уравнение (6) будет описывать изменение k от $k_0 \approx 0$ до $k = \beta$ с требуемым эффектом запаздывания во времени, поскольку хотя $k = 0$ и неустойчивая неподвижная точка, изменение системы в её окрестности замедленно, что должно обеспечить требуемый накопительный эффект воздействия AuNPs на клетки.

Подбор k_0 и β проводился методом покоординатного спуска, причём оптимизационная

задача ставилась таким образом, чтобы найти единое значение k_0 для всех концентраций наночастиц, в то время как значения параметра β могли зависеть от этой концентрации. Для случаев небольших концентраций наночастиц, при которых эффект отмирания в экспериментальных исследованиях выявлен не был, в качестве искомого β рассматривались пограничные значения, при которых эффект отмирания в расчётах не проявлялся. Также следует отметить, что в ходе решения данной оптимизационной задачи была выявлена мультивариантность решений с приблизительно равными по значениям критериями рассогласования, поэтому выбранное в качестве итогового значение $k_0 = 10^{-7}$ носит условный характер. При этом стадию отмирания для высоких концентраций наночастиц удалось качественно описать (рис. 1).

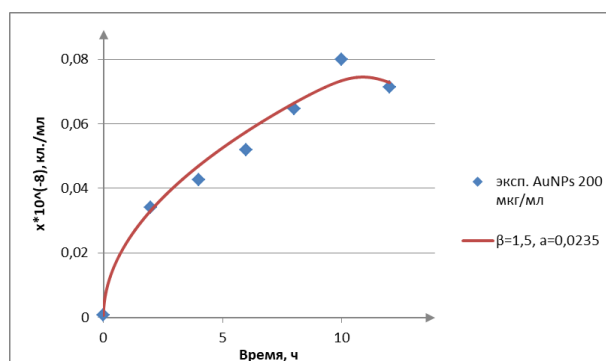
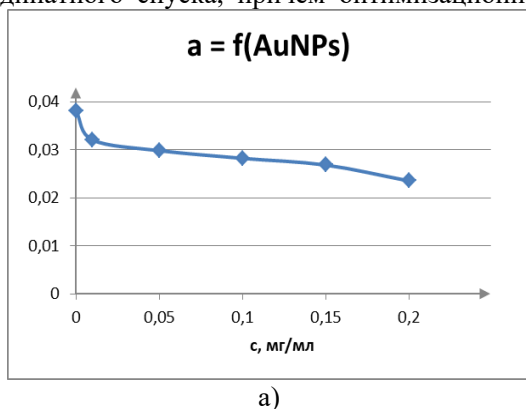
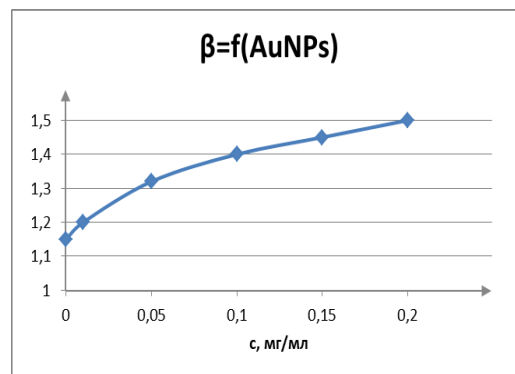


Рис. 1. Кривая роста бактерий *S. aureus*, обработанных 200 мкг/мл AuNPs

На завершающем этапе построения математической модели требовалось получить зависимости параметров a и β от концентрации наночастиц c (рис. 2).



а)



б)

Рис. 2. Зависимости параметра a (а) и β (б) от концентрации наночастиц золота, полученные в ходе решения оптимизационных задач для отдельных концентраций наночастиц

Представленные на рис. 2 зависимости, хоть и имеют характерную тенденцию, оказались достаточно сложными для аппроксимации с использованием встроенной функции Excel “линия тренда”. Поэтому было предложено применить к ним перед аппроксимацией некоторые математические преобразования, которые позволили бы осуществить более простое описание. После ряда вычислительных экспериментов были приняты как “удачные”

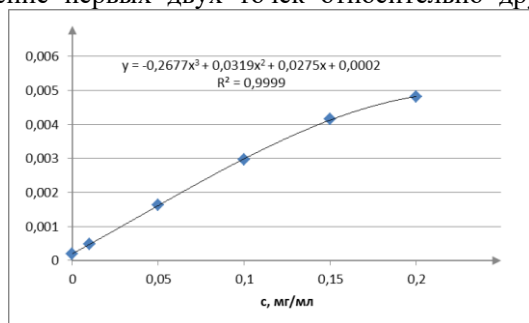
следующие математические преобразования для $a(c)$ и $\beta(c)$:

$$\frac{(c+z)a}{\beta} = \frac{p_1}{(c+p_2)^{p_3}} + p_4 \quad (8)$$

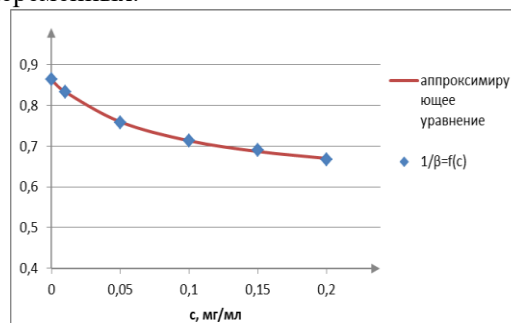
где z - смещение в уравнении (8), наиболее ярко выраженное для первых двух точек, $f(c)$ - некий полином, доступный для функции “линия тренда”,

p_1 - коэффициент пропорциональности,
 p_2 - горизонтальное смещение,
 p_3 - степень, отвечающая за кривизну,
 p_4 - вертикальное смещение.

Константа z в первую очередь позволяет смещать положение первых двух точек относительно друг



а)



б)

Рис.3. Аппроксимация математических преобразований для параметров a (а) и β (б)

Полученные аппроксимации зависимостей $a(c)$ и $\beta(c)$ имеют вид:

$$a = \frac{-0,2677c^3 + 0,0319c^2 + 0,0275c + 0,00019}{c + 0,005} \quad (9)$$

$$\beta = \frac{1}{\frac{0,023}{(c+0,08)^{0,98}} + 0,59} \quad (10)$$

Успешность аппроксимаций (9), (10) можно оценить с помощью рис. 3.

Заключение

Основным результатом данной работы можно считать не только успешное моделирование отдельного взятого процесса подавления роста бактерий наночастицами золота, но и разработку модели данного процесса как концептуального подхода к моделированию аналогичных процессов в целом, поскольку в ходе разработки модели были выявлены, проанализированы и обоснованы

друга, это дало возможность расположить их так, чтобы прослеживалась характерная закономерность.

Параметры p_1 - p_4 подбирались путём минимизации критерия рассогласования R с помощью метода последовательного варьирования переменных.

основные характерные особенности протекания подобных процессов.

Список литературы

1. Chen H. et al. Exploring the Role of Staphylococcus aureus in Inflammatory Diseases //Toxins. – 2022. – Т. 14. – №. 7. – С. 464.
2. Gu X. et al. Preparation and antibacterial properties of gold nanoparticles: A review //Environmental Chemistry Letters. – 2021. – Т. 19. – С. 167-187.
3. Govindaraju K. et al. Unveiling the anticancer and antimycobacterial potentials of bioengineered gold nanoparticles //Process Biochemistry. – 2020. – Т. 96. – С. 213-219.
4. Suganya K. S. U. et al. Blue green alga mediated synthesis of gold nanoparticles and its antibacterial efficacy against Gram positive organisms //Materials Science and Engineering: C. – 2015. – Т. 47. – С. 351-356.

УДК 591.543.4

Верхососова А.И., Аверина Ю.М., Зверева О.В.

PEST-анализ внедрения технологии синтеза автомобильного топлива путем переработки атмосферного воздуха на Российский рынок

Верхососова Анастасия Игоревна – студент; verkhososova@gmail.com.

Аверина Юлия Михайловна – к.т.н., заведующий кафедрой логистики и экономической информатики;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9; averina.i.m@muctr.ru

Зверева Ольга Владимировна – ассистент кафедры логистики и экономической информатики;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9; zvereva.o.v@muctr.ru

В статье рассмотрены факторы, оказывающие влияние на реализацию технологии синтеза автомобильного топлива из атмосферного воздуха на территории Российской Федерации, проведен PEST-анализ, включающий в себя политические, экономические, социально-культурные и технологические критерии оценки влияющих факторов.

Ключевые слова: PEST-анализ; экология; изменение климата; технология синтеза; альтернативные источники энергии; переработка атмосферного воздуха.

PEST-analysis of the introduction of automotive fuel synthesis technology by processing atmospheric air to the Russian market

Verkhososova A. I., Averina J. M., Zvereva O.V.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the factors influencing the realization of the technology of automobile fuel synthesis from atmospheric air in the territory of the Russian Federation, PEST-analysis including political, economic, socio-cultural and technological criteria for assessing the influencing factors is carried out.

Key words: PEST-analysis; ecology; climate change; synthesis technology; alternative energy sources; atmospheric air recycling

Введение

В результате увеличения парникового эффекта ввиду антропогенной деятельности к 2100 году произойдет глобальное изменение климата. Для избежания подобного кризиса, человечеству необходимо уменьшить количество выбросов парниковых газов в атмосферу, самым распространенным из которых является углекислый газ. Главным источником CO₂ является мировая энергетика. Вследствие большого количества автомобилей, использующих двигатели внутреннего сгорания и ископаемое топливо, этот сектор занимает первое место по количеству выбросов. Для его регулировки почти все страны мира договорились обеспечить снижение уровня углекислого газа в атмосфере до нуля к 2100 году. Для снижения количества выбросов углекислого газа в атмосферу в результате работы автомобилей на ископаемом топливе, учеными из Германии была предложена технология синтеза автомобильного топлива из атмосферного воздуха, что на данный момент является самым экологичным видом топлива. На реализацию данной технологии в России может влиять ряд факторов, рассмотренных в PEST-анализе этой технологии. PEST-анализ используется в качестве инструмента стратегического планирования, который исследует факторы внешней среды, влияющие на развитие проекта. Результатом анализа являются выявленные угрозы, риски, а также перспективы и сильные стороны.

Аналитическая часть

К политическим факторам, оказывающим сильное влияние на реализацию технологии на территории РФ можно отнести конкуренцию с нефтегазовыми компаниями (12,86%). Рынок автомобильного топлива принадлежит нефтедобывающим компаниям, альтернативное топливо в России не имеет значительной ценности, в силу наличия больших запасов ископаемых источников энергии [2]. Это может стать разрушающим фактором для внедрения подобной технологии. Однако компании, такие как «Газпром нефть», «Татнефть» и «Лукойл», активно инвестируют в проекты «зеленой энергетики» [3], что может помочь в реализации проекта. Уровень коррупции (11,43%) указывает на отсутствие системных изменений к лучшему в сфере противодействия ей. Это свидетельствует о вероятности гибели проекта вследствие деятельности коррупционеров, но заручившись поддержкой крупных компаний, серьезных последствий можно будет избежать [4, 5]. Участие в международных государственных объединениях (8,57%) может способствовать выделению грантов на развитие и оптимизацию, а также выход на новые рынки, заключение новых контрактов.

Высокое влияние на развитие технологии в России оказывают такие экономические факторы, как товаропроводящие цепи и уровень дистрибуции (11,43). Для регулярной прибыли, нужны отлаженные логистические цепочки, их изменение и образование новых может отразиться только в лучшую сторону, ведь это приведет к увеличению товарного потока и

открытию новых рынков сбыта. В интересах проекта расширяться и завоевывать рынок. Степень глобализации и открытости экономики (11,43%). Образование новых экономических центров за счет открытости экономики, для ведения топливного бизнеса это неотъемлемая часть. Привлечение инвестиций партнеров из Азии, в результате увеличение производства и развитие технологии. Курс валют, как и спад экономики (8,57%) так же оказывают существенное влияние из-за нестабильной мировой ситуации относительно курса рубля, ведь его изменение влияет на экспорт и импорт товаров. Переменчивый и непредсказуемый курс валют грозит ограничениями на покупку оборудования или реактивов за рубежом, а также упущение рынка сбыта товара [6]. В 2022 году экономика России вошла в фазу экономического спада или рецессии. Для проекта это грозит уменьшением инвестирования, ростом цен на оборудование и реактивы, также увеличением налогов. В результате чего возможно увеличение издержек и уменьшение прибыльности производства.

Фактор, показывающий уровень развития предпринимательства и бизнеса (8,57%) рассматривает влияние конкурирующего бизнеса в России на данный проект. Территориальная составляющая специфики производства (8,57%) рассматривает вероятность размещение действующих установок проекта в территориально неподходящем месте, в котором будет недостаточно реагентов, конкретно углекислого газа, что грозит остановкой производства топлива в данном месте. Размещать такую установку в нецелесообразных местах, таких как лес, где концентрация двуокиси углерода минимальна и улавливать буквально нечего. Рассматривается территориальная составляющая, где проект будет лишен прибыли, а не возможности работать.

Существенное влияние на проект оказывают такие социально-культурные факторы, как социальная стратификация в обществе, меньшинства (11,43%). Деление общества на слои, где одни преобладают над другими, так же более яркая обособленность регионов, в силу национальных особенностей, осложнение межрегиональных контактов могут привести к потере точек производства и рынка в разных регионах. Решить данный кризис поможет участие в более крупных проектах и грамотная рекламная кампания. Непредсказуемое отношение к отечественному производителю (8,57%) может увеличить или уменьшить спрос. Новый продукт может быть не воспринят обществом, из-за отношения к отечественному производству и производителю, вследствие чего проект не будет развиваться из-за отсутствия спроса. Под требованиями к качеству продукции и уровню сервиса (8,57%) подразумевается некомпетентность персонала, неграмотное обслуживание оборудования, пробелы в системе проверки качества неизбежно приведут к снижению качества продукции, что впоследствии может привести к остановке производства, задержке поставок и потере

клиентской базы. Во избежание данного кризиса необходима оптимизация производства для достижения высокого качества продукции, свод правил для отбора компетентного обслуживающего персонала, периодические проверки и тренинги для повышения квалификации работающего и обслуживающего персонала, также система проверки и оценки качества товара. Не последнюю роль в реализации технологии в России играет Отношение к экологии и осведомленность населения (2,86%). Низкий уровень экологического образования и экологической культуры населения могут негативно повлиять на развитие проекта [7]. Вероятно, отсутствие спроса в связи с отсутствием интереса к продукту и мотивации пользоваться экологически чистыми продуктами. Данный кризис решается в первую очередь грамотной рекламной кампанией, также нужно участие в экологических проектах, благотворительность.

Технологические факторы рассматривают такие показатели как Уровень технологического развития инфраструктуры (12,86%). Размещение установки на необжитых территориях, где нет развитой инфраструктуры: электросети, дорожное снабжение, наличие постоянных природных катаклизмов не даст возможности проекту реализоваться. В результате чего технология столкнется с дополнительными затратами, и в противном случае не сможет функционировать. Во избежание данной проблемы необходимы локации с развитой инфраструктурой, также реализация, как вспомогательного производства. Технологическое развитие в данной отрасли (8,57%), то есть недостаток или же отсутствие необходимого оборудования в России, в связи с низким развитием зеленой энергетики, может препятствовать реализации проекта из-за отсутствия нужных материалов для оборудования, сложности в ремонте и эксплуатации. Чтобы не допустить возникновения данного кризиса необходимо партнёрство с международными компаниями, а также государственная поддержка проекта. Доступ к новейшим технологиям (8,57%) позволит использовать открытия в области науки, модернизированные детали и материалы необходимые для реализации, а также дальнейшей оптимизации проекта. Особенно нужно партнёрство с международными компаниями, исследовательскими институтами и государственная поддержка проекта.

Значительные расходы на исследования (4,29%), выделения грантов могут оказать как положительное, так и отрицательное влияние. Проект может оказаться слишком дорогим для государственной поддержки, однако если он станет вспомогательным производством, поддержка государства не будет существенной. Степень использования, внедрения и передачи технологий (4,29%). Долгие сроки на реализацию полностью государственных проектов, из-за чего технология может не получить достаточного стимула к развитию. Однако, рассматривая её, как вспомогательную, частные компании могут быть заинтересованы в её быстром развитии (Таблица 1 и Таблица 2).

Таблица 1. Политические и экономические факторы

Россия			
Политические		Экономические	
Фактор	Вес	Фактор	Вес
Конкуренция с нефтегазовыми компаниями государства.	12,86%	Степень глобализации и открытости экономики.	11,43%
Высокий уровень коррупции.	11,43%	Товаропроводящие цепи и уровень дистрибуции.	11,43%
Участие в международных государственных объединениях.	8,57%	Курс валют.	8,57%
Налоговая политика.	5,71%	Развитие экономики (спад).	8,57%
Военные действия.	4,29%	Уровень развития предпринимательства и бизнеса.	8,57%
Законодательство по охране окружающей среды.	2,86%	Территориальная составляющая специфики производства.	8,57%
Будущее и текущее законодательство, регулирующее правило работы в отрасли.	2,86%	Ставка рефинансирования.	5,71%
Прекращение экспорта нефти, угля газа в Европу.	2,86%	Тенденции в банковской сфере.	2,86%
Изменение законодательной базы страны.	2,86%	Изменение уровня безработицы.	2,86%
		Изменение уровня инфляции.	1,43%
Ограничение на экспорт полученного топлива, торговая политика.	2,86%	Уровень располагаемых доходов на душу населения.	1,43%
Выборы на любом уровне гос-ва.	1,43%		

Таблица 2. Социально-культурные и технологические факторы

Социально-культурные		Технологические	
Фактор	Вес	Фактор	Вес
Социальная стратификация в обществе, меньшинства.	11,43%	Уровень технологического развития инфраструктуры.	12,86%
Отношение к отечественному продукту	8,57%	Технологическое развитие данной отрасли.	8,57%
Требования к качеству продукции и уровню сервиса.	8,57%	Доступ к новейшим технологиям.	8,57%
Половозрастная структура населения и продолжительность жизни.	4,29%	Законодательство в области технологического оснащения отрасли.	5,71%
Отношение к экологии.	2,86%	Расходы на исследование.	4,29%
Уровень миграции.	2,86%	Степень использования, внедрения и передачи технологий.	4,29%
Образ жизни, привычки.	2,86%		
Осведомленность населения.	2,86%		
Репутация компании, имидж технологии.	2,86%		
Расовое неравенство.	1,43%		
Уровень показного потребления.	1,43%		

Заключение

На реализацию технологии синтеза топлива из атмосферного воздуха в России самое большое влияние окажет конкуренция с другими поставщиками топлива. Россия богата природными ископаемыми, которых хватит еще на столетие, в связи с этим на данный момент нет необходимости внедрения этой технологии, так как обычное ископаемое топливо в разы дешевле. Менять отлаженную логистическую систему, рынок и способ энергетического снабжения сложный и невыгодный процесс. Однако, если рассматривать предлагаемую технологию не как самостоятельное конкурирующее с ведущими нефтегазовыми компаниями России производство, а как возможность оптимизировать токсичные процессы нефтеперерабатывающих предприятий, она может значительно сократить выбросы парниковых газов в атмосферу, чем поможет России начать путь к углеродной нейтральности

Список литературы

1. Taylor, M RENEWABLE POWER GENERATION COSTS IN 2019 / M Taylor, P. Ralon // International Renewable Energy Agency : электронный журнал. – URL: file:///C:/IRENA_Power_Generation_Costs_2019.pdf. – Дата публикации: 2020. – ISSN 978-92-9260-244-4
2. Уланов В.Л. Влияние внешних факторов на национальную энергетическую безопасность / В.Л.Уланов, Е.Ю.Уланова // Записки Горного института. 2019. Т. 238. С. 474-480. DOI 10.31897/PMI.2019.4.474
3. ЛУКОЙЛ [Электронный ресурс]: сайт. – URL: <https://lukoil.ru/Company> (дата обращения: 03.05.2024)
4. Фалалеев, М. Происшествия / М. Фалалеев // Российская газета - Федеральный выпуск. – 2021. – № 8587. – С. 3-4. – 15 янв.
5. Центр антикоррупционных исследований и инициатив [Электронный ресурс]: портал. – Россия, 1999. – URL: <https://transparency.org.ru/> (дата обращения: 03.05.2024).
6. Туркин, А.А. Влияние курса национальной валюты на экономику России / А.А. Туркин // Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского [Электронный ресурс]: электронный журнал. URL: <https://www.sgu.ru/sites/default/files/textdocsfiles/2022/12/21/065.pdf>. – Дата публикации: 2022.
7. «О Стратегии экологической безопасности Российской Федерации на период до 2025 года»: Указ президента Российской Федерации // Собрание законодательства Российской Федерации. – 2017. – № № 176. – Ст. 20.

УДК 681.384

Гавриленко А.И., Предместин В.Р.

Разработка метода оперативного контроля распределения температуры в каталитическом аппарате с целью контроля степени использования катализатора методом стохастической интерполяции

Гавриленко Александр Игоревич – студент 1 курса магистратуры кафедры химическая технология;

Предместин Владимир Рудольфович – к.т.н., доцент кафедры, docent_77@mail.ru;

ФГБОУ ВО «Новомосковский институт РХТУ им. Д.И. Менделеева»;

Россия, Новомосковск, 301665, ул. Дружбы, дом 8

В статье рассмотрена разработка и применение метода оперативного контроля температуры в каталитическом аппарате методом стохастической интерполяции для контроля степени износа катализатора. Представлена важность контроля активности катализатора и факторы, влияющие на его активность. Приведено описание метода определения износа катализатора по положению горячей точки. Кратко приведен метод оперативного контроля температурного распределения и преимущества его использования при проведении каталитических процессов.

Ключевые слова: активность катализатора, контроль, метод, катализ, горячая точка

Development of a method for operational control of temperature distribution in a catalytic apparatus in order to control the degree of catalyst utilization using the method of stochastic interpolation

Gavrilenco A.I., Predmestin V.R.

Novomoskovsk university of MUCTR, Novomoskovsk, Russian Federation

The article discusses the development and application of a method for online temperature control in a catalytic apparatus using the method of stochastic interpolation to control the degree of wear of the catalyst. The importance of controlling catalyst activity and factors affecting its activity are presented. A description of the method for determining catalyst wear by the position of the hot spot is given. The method of operational control of temperature distribution and the advantages of its use when carrying out catalytic processes are briefly presented.

Key words: catalyst activity, control, method, catalysis, hot spot

Введение

В данной статье рассматривается разработка метода оперативного контроля активности катализатора и определения степени его износа. Контроль активности катализатора является важной задачей в процессе большинства химических производств. При эксплуатации катализатора в промышленных условиях активность катализатора постепенно снижается, что приводит к изменению режима работы технологического оборудования [1].

Главное требование, предъявляемое к катализатору в каталитическом процессе – высокая активность. Однако активность катализатора может зависеть от множества факторов, влияющих на протекание процесса. Также следует отметить, что большинство тепловых каталитических процессов проводятся при физических условиях, граничащих с критическими [2].

Активность зависит от количества активных центров в составе катализатора. Активность катализаторов при гетерогенных каталитических процессах сильно зависит от геометрических параметров и состояния поверхности, поэтому также важен способ производства катализатора [3].

Скорость деградации катализатора может зависеть от локальных скоростей потока в данной точке среды, такое изменение называют утомлением. Это явление наиболее ярко проявляется при воздействии на катализаторный слой каталитических ядов или оседании на активную поверхность не

удаляемых продуктов реакции из-за недостаточной скорости отвода. При процессах, носящих нестационарный характер скорость падения активности высокая и наиболее сильно ощущается. Активность катализатора может также измениться вследствие десорбции вещества. Значительно повлиять на каталитическую активность может также температура [4].

Кратко подводя итоги вышеизложенного можно сделать вывод что каталитическая активность является важным показателем в каталитических процессах и на нее влияют следующие факторы:

- воздействие каталитических ядов;
- деградация катализатора;
- десорбция вещества;
- локальные скорости процесса;
- перекрытие активной поверхности катализатора;
- способ производства катализатора;
- тип процесса (гетерогенный или гомогенный);
- температура проведения процесса;
- не стационарность процесса.

На данный момент существующие методы позволяют проводить контроль активности катализатора, но они не являются оперативными и не применимы в процессе непрерывного производства. Существующие математические модели не позволяют достоверно определить тепловое распределение по высоте катализатора поскольку они строятся с рядом допущений и не учитывают

возможные изменения локальных параметров в процессе производства.

В статье будет рассмотрено создание метода оперативного контроля температуры каталитического аппарата для аппаратов с неподвижным каталитическим слоем, в которых при изменении температуры изменяется активность каталитических процессов.

Теоретическая часть

В данной работе будут рассматриваться процессы, протекающие в неподвижном слое катализатора. Основная форма падения активности в неподвижном слое заключается в равномерном изменении активности в меньшую сторону, которая может происходить во всём объёме. Такое изменение катализатора, определяемое только временем его работы, называют старением.

При постоянном режиме работы и составе входной среды, состав продуктов реакции со временем смещается в сторону состава входной среды и в некоторый момент, когда активность катализатора падает настолько, что дальнейшее использование становится убыточным, производят замену или регенерацию отработанного катализатора.

Приведем понятие активности катализатора. Под активностью катализатора понимается количество исходного вещества, прореагировавшего на единице поверхности за единицу времени т.е. [1]:

$$A_s = \frac{\Delta C}{\Delta S \cdot \Delta \tau} \quad (1)$$

где, A_s - активность катализатора,

ΔC - изменение количества исходного вещества,

$\Delta \tau$ - изменение времени реакции катализа,

ΔS - изменение поверхности катализатора.

От поверхности катализатора часто переходят к объемной оценке активности катализатора.

Также существует понятие относительной активности катализатора, которое можно записать в следующем виде:

$$K_A = \frac{A_\tau}{A_0} \quad (2)$$

где, A_0 - начальная активность катализатора,

A_τ - активность катализатора в текущий момент времени.

Эта величина характеризует уровень снижения активности катализатора относительно исходной активности катализатора, т.е. степень износа.

Для определения работоспособности каталитического слоя можно аналогично ввести понятие уровня активности каталитического слоя в аппарате, который можно записать в следующем виде:

$$K_A(V) = 1 - \frac{V_{om}}{V} \quad (3)$$

где, V_{om} - объём отработанного катализатора,

V - полный объём катализатора в реакторе.

Для реакторов, имеющих постоянные геометрические размеры по высоте каталитического слоя, и можно записать в следующем виде:

$$K_A(V) = 1 - \frac{X_{om}}{X} \quad (4)$$

$$K_u(V) = \frac{X_{om}}{X} \quad (5)$$

где X_{om} - границы раздела отработанного и неотработанного катализатора;

X - общая высота каталитического слоя.

Далее в статье в качестве контролируемого параметра, характеризующего, будем использовать степень износа каталитического слоя $K_u(V)$.

Практическая часть

Рассмотрим реактора идеального вытеснения с неподвижным слоем катализатора, работающего в статическом режиме, активность которого со временем падает, и где протекает реакция преобразования сырья из вещества А в продукт В (рис. 1) [5].

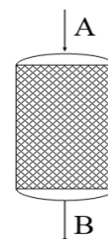


Рис. 1 Реактор идеального вытеснения

В большинстве современных процессов, работающих по принципу близкому к реактору идеального вытеснения, происходит отвод тепла из реакционной зоны в случае экзотермической реакции или подводом тепла в случае эндотермической реакции.

Для определения зависимости между износом каталитического слоя $K_u(X)$ и распределением температуры в контролируемом объекте $T(X)$ поставим следующую задачу, которая примет вид:

$$K_u(x) = \kappa \{T(x)\} \quad (6)$$

В результате исследований можно сделать вывод что процесс протекающие при синтезе аммиака и винилхлорида приближенные к модели реактора идеального вытеснения имеют следующее распределение теплового поля, рис. 2.

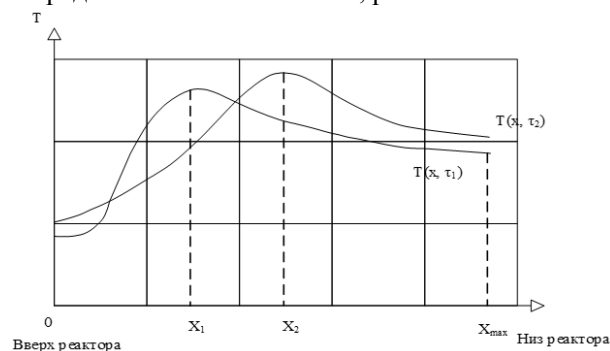


Рис. 2 Распределение температуры

Как видно из приведенного выше рисунка, распределение температуры имеет выжаренный экстремум. В этой зоне скорость каталитического процесса максимальна. Так же в процессе работы по мере эксплуатации аппарата этот экстремум, так называемая "горячая точка", смещается от верха реактора вниз, что обусловлено отработкой верхних слоев катализатора. Таким образом, степень износа каталитического слоя можно оценивать следующим образом:

$$K_u(x_{max}) = \frac{x_{max}}{x} \quad (7)$$

где, x_{max} - текущее положение "горячей точки", а графически это будет ступенчатая функция вида, показанного на рис. 3.

Величина $K_U(x_{max})$ представляет собой уровень износа катализаторного слоя представлена на рис. 3.

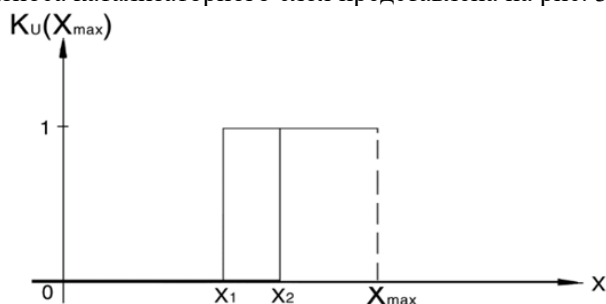


Рис. 3 Ступенчатая функция, степени износа катализатора

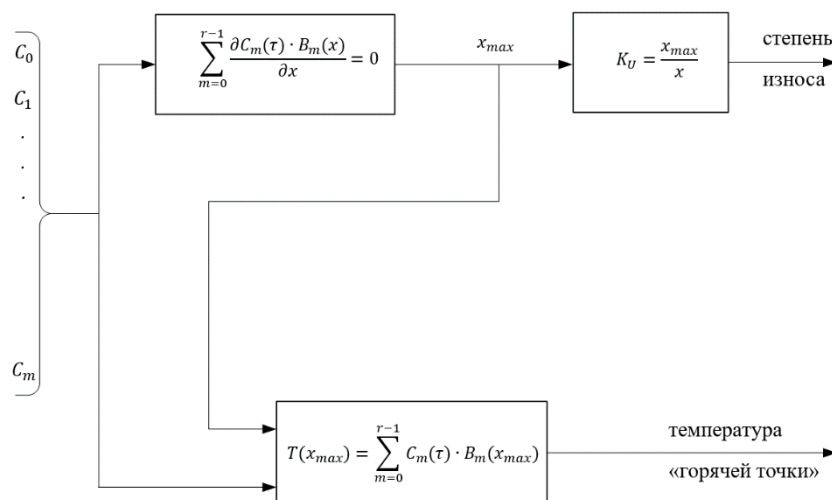


Рис. 4 – Структурная схема устройства реализующего метод оперативного контроля

В верхней части происходит расчет высоты "горячей точки" после чего мы можем судить о степени износа катализаторного слоя, в то время как в нижней части мы производим расчет температуры "горячей точки", что позволяет нам контролировать максимальную температуру в аппарате.

Данный метод также имеет преимущество в виде контроля «горячей точки», что помогает предотвратить аварийные ситуации. К примеру, превышение температуры «горячей точки» в катализаторе колонны синтеза может привести к спеканию катализатора, а это в свою очередь создает аварийную ситуацию.

Экспериментальная часть

За основу для эксперимента были взяты данные графиков распределения температур по высоте катализатора в аппаратах синтеза винилхлорида снятые в различные временные отрезки эксплуатации представленные на рис. 5.

В процессе рабочего цикла слой катализатора постепенно изнашивается и реакционная зона ("горячая точка") перемещается от нулевой точки, расположенной вверху реактора вниз. Из опыта эксплуатации реактора синтеза винилхлорида можно сделать вывод что, средний срок жизни катализатора составляет 150 дней. В зависимости от соблюдения

Допустим, что модель объекта получена в следующем виде:

$$T(x) = \sum_{m=1}^{r-1} C_m(\tau) \cdot B_m(x) \quad (8)$$

где, $C_m(\tau)$ - коэффициенты разложения $T(x, \tau)$, $B_m(x)$ - пространственные моды разложения, $r - 1$ - количество элементов разложения.

Используя метод анализа функции на экстремум продифференцируем (8) по высоте и решив уравнение:

$$\frac{\partial T(x, \tau)}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

Определяя высоту «горячей точки», а затем исходя из высоты и степень износа устройства со следующей структурной схемой представленной на рис. 4. Делая предположения, что значения коэффициентов уравнения уже известны, алгоритм контроля можно представить следующей схемой.

регламентных параметров и рекомендаций по эксплуатации реактора, в частности поддержание температурного режима срок жизни катализатора может уменьшаться или увеличиваться.

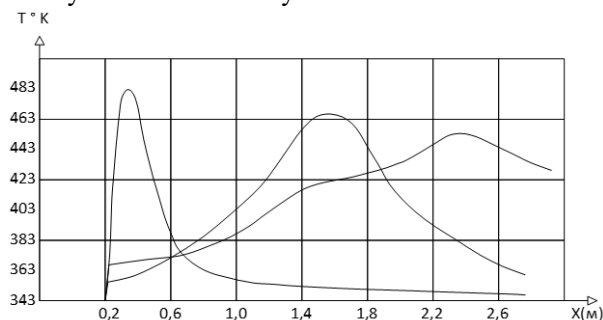


Рис. 5 Кривые распределения температуры в реакторе

Для сбора данных о связях между положением «горячей точки» и износом катализатора на протяжении 160 дней проводились наблюдения температурного распределения катализаторов в 5 установках синтеза винилхлорида. С использованием «скользящей термопарой» была произведена фиксация теплового распределения по высоте катализатора. Для охвата различных ситуаций измерения производились в различные промежутки времени при различных режимах работы. Результаты наблюдений приведены в табл. 1.

Таблица 1. Результаты экспериментов

№ реактора	Время работы (дни) X_{max}									
1	τ	1	7	16	43	44	56	81	114	152
	X_{max}	0,35	0,4	0,48	0,77	1	0,9	1,1	1,53	2,2
2	τ	2	8	12	22	71	85	115	137	160
	X_{max}	0,37	0,4	0,48	0,63	0,88	1,2	1,55	1,65	1,8
3	τ	2	5	18	28	32	40	61	104	158
	X_{max}	0,38	0,42	0,52	0,65	0,63	0,5	0,64	0,97	1,27
4	τ	4	14	16	20	26	30	33	62	74
	X_{max}	0,36	0,54	0,65	0,97	1,08	1,52	1,79	2,09	2,44
5	τ	1	6	14	32	58	72	98	115	159
	X_{max}	0,39	0,49	0,6	0,94	1,25	1,18	1,57	1,91	2,27

Данные представленные в табл. 1 были обработаны по методу МНК. В качестве аппроксимирующего уравнения использовалась следующая зависимость, имеющая вид [6]:

$$x_{max} = A_0 + A_1 \cdot \tau \quad (10)$$

Проанализировав результаты эксперимента можно сделать сказать, что в начале рабочего цикла положение "горячей точки" имеет различные положения, но в среднем составляет 0,35 м. Учитывая это слой активированного угля засыпанный на 0,25 м, то положение "горячей точки" начале рабочего цикла находится на расстоянии 0,1 м от границы катализаторного слоя и слоя активированного угля.

Исходя из того, что высота «горячей точки» составляет 0,1м делаем вывод что степень износа катализатора равна 0%. После запуска в рабочий цикл в зависимости соблюдения технологического режима эксплуатации, износ катализаторного слоя происходил по-разному в различных аппаратах. Если для аппаратов с номерами 1, 2, 3, 5 снижение активности слоя происходило в соответствии с нормой и жизненный цикл катализатора превышал среднее значение в 150 дней, то в аппарате номер 4 он составляет всего 79 дней. В частности, это происходило из-за превышения температуры "горячей точки" и ускоренной деградации катализаторного слоя на высоте «горячей точки».

Сделав вывод можно получить уравнение, показывающие зависимость между степенью износа катализаторного слоя от положения "горячей точки". Учитывая, что высота слоя активированного угля составляет 0,25м, то высота слоя катализатора будет составлять 2,75м, а высота «горячей точки» в конце рабочего цикла будет равна 2,25 м от уровня закладки катализатора, определим степень износа катализатора при расположении «горячей точки» равном 2,25м:

$$K_U(x_{max}) = \frac{2,25-0,1}{2,75-0,1} \cdot 100\% = 81,13 \quad (11)$$

Тогда уравнение, описывающее связь $K_U(x_{max})$ и x_{max} , можно представить в следующем виде:

$$K_U(x_{max}) = (0,38 \cdot x_{max} - 0,038) \cdot 100\% \quad (12)$$

В уравнении (12) для реактора синтеза винилхлорида получена основная зависимость необходимая для проектирования устройства контроля износа катализаторного слоя.

Методом локальной аппроксимации экспериментальных кривых была разработана математическая модель для нахождения положения «горячей точки». Для учета возможности колебаний температурного поля, характеризующих различные ситуации во время эксплуатации, были обработаны кривые распределения полученные с 5 реакторов при различных режимах работы. После расчета различных моделей с различными показателями СКО лучшие показатели имела модель с СКО=3°K, полученными в процессе "прямого хода", которая имеет вид:

$$\hat{T}(x) = \begin{cases} \sum_{m=0}^5 C_m \cdot Q_m(x) & 0,25 \leq X \leq 1,05 \text{ м} \\ \sum_{m=0}^4 C_m \cdot Q_m(x) & 1,05 \leq X \leq 2,55 \text{ м} \end{cases} \quad (13)$$

где $Q_m(x)$ - многочлены Лежандра.

Поскольку погрешность измерения термопары имеет СКО=6°K, модель составленная при "обратном проходе" имеет меньшее количество коэффициентов по сравнению с "прямым проходом". Соответственно для решения задачи была принята модель составленная при «обратном ходе»

Для получения интерполяционного уравнения определения максимальной температуры по высоте реактора были обработаны ранее упомянутые кривые распределения температуры пяти реакторов полученные путем измерения «скользящей термопарой».

По высоте реактора температура измерялась в 21 точке с шагом 0,12 м от 0,2 м до 25 м ниже уровня верхней трубной решетки. Всего была получена 81 кривая. Положение температурного максимума было различно (таблица 2).

Таблица 2. Положение температурного максимума

Расстояние (м)	0,32	0,43	0,56	0,66	0,78	0,89	1,01	1,32	1,24	1,35
Количество кривых	4	4	11	7	6	5	8	4	3	4
Расстояние (м)	1,47	1,56	1,70	1,81	1,93	2,04	2,15	2,27	2,38	2,50
Количество кривых	2	1	6	3	2	1	4	2	1	3

На этих экспериментальных данных методом, было построено интерполяционное уравнение восстановления температурного поля [7]:

$$\hat{T}(x) = \sum_{i=1}^N \hat{T}_u(a_i) \cdot \varphi_i(x), x \in [0, L] \quad (14)$$

При построении уравнения (14) среднеквадратическая ошибка средств измерения температуры была задана равной 2°C. В процессе синтеза уравнения (14) оценка СКО шумовой составляющей в исходных данных $\sqrt{(\mu^2)}$ оказалась равной 1°C, что соответствует погрешности измерения температуры с помощью термопары.

Оказалось, что для определения максимальной температуры с СКО равным 2°C необходимо установить 17 термопар, что является трудной задачей, учитывая малый диаметр измерительного канала. При построении уравнения (14) и учета шумовой составляющей в экспериментальных данных были выбраны все точки для установки термопар.

Исследования показали, что установки 11 термопар по высоте от уровня верхней трубной решетки достаточно и при использовании для каждого из четырех выделенных участков своего интерполирующего базиса СКО определения максимальной температуры будут равны: 1,9°C, 1,75°C, 2,04°C и 1,46°C для 1, 2, 3 и 4 участков соответственно.

Созданная по методу система сбора информации о температурном распределении состоит из 6 установленных на высоте от 0.25 до 1.05 м и 5 на высоте 1.05 – 2.55 м от уровня закладывания катализатора, что составляет всего 11 термопар по сравнению с необходимыми 17.

По результатам эксперимента было проведено моделирование процесса в результате которого были получены результаты, совпадающие с результатами, полученными в ходе эксперимента (рис.6).

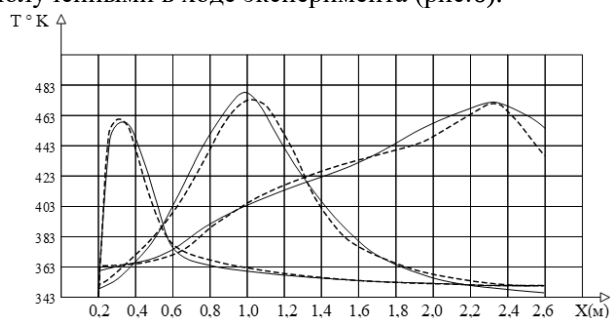


Рис. 6 Экспериментальная проверка

Можно сделать вывод что метод оперативного контроля распределения температуры дает достаточную точность при определении температуры и положения горячей точки.

Заключение

В статье рассмотрен метод оперативного контроля распределения температуры в каталитической коробке реактора и определения степени износа катализатора по положению горячей точки.

Данный метод позволяет оперативно проводить контроль за горячей точкой катализатора что более точно проводить процессы близкие к экстремальным что повысит их эффективность, а также позволяет преждевременно определять срок выхода катализатора из строя, что позволит улучшить планирование технологического оборудования и уменьшит затраты времени на обслуживание.

Список литературы

1. Крутский Ю.Л. Общая химическая технология, Электронная книга Новосибирский государственный технический университет, 2021 г. 127 с.
2. Решетников С.И., Быков В.И. Управляемый катализ. Задачи оптимального регулирования каталитических процессов и реакторов, Монография, Новосибирский государственный технический университет, 2021 г. 387 с
3. Гейтс Б., Кетцир Дж., Шуйт Г. Химия каталитических процессов, Перевод с английского к.х.н. Лунина В.В. под редакцией доктора хим.наук профессора Плата А.Ф. Издательство «Мир», 1981 г. 550 с.
4. Аветисов А.К., Л.Г. Брук Прикладной катализ, Электронная книга Лань, 2021 г. 198 с.
5. Смирнова Д. А., Сибаров Д. А. Катализ, каталитические процессы и реакторы, Электронная книга Лань, 2024 г. 199 с.
6. Жидков Е.Н. Вычислительная математика. Учебник, 2013 г. 208 с.
7. Беляев Ю.И. «Синтез линейных схем оценивания скалярного поля методом стохастической интерполяции.» Киев, Автоматика № 4, 1987. с. 37-43.

УДК 66.083

Голубев Э.В., Белоусова Д.И., Абрамов А.А., Цыганков П.Ю.

Процессы стерилизации материалов и изделий биомедицинского назначения

Голубев Эльдар Валерьевич – магистрант 1 курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; e-mail: eldgo101@gmail.com;

Белоусова Дарья Ильинична – бакалавр 2 года факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Абрамов Андрей Александрович – ассистент кафедры химического и фармацевтического инжиниринга РХТУ им. Д.И. Менделеева;

Цыганков Павел Юрьевич - кандидат технических наук, доцент, старший научный сотрудник кафедры химического и фармацевтического инжиниринга РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Российский химико-технологический университет им Д.И. Менделеева, Москва, Россия

125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д.20.

Постоянно усложняющиеся свойства и структура материалов и изделий биомедицинского назначения, а также их чувствительность к внешнему воздействию обуславливает актуальность разработки инновационных и безопасных методов стерилизации. Кроме того, зачастую, традиционные методы, такие как паровая/сухая термическая обработка, стерилизация этиленоксидом и гамма-облучение, не могут обеспечить сохранение функциональности и целостности обрабатываемого материала. Одним из наиболее перспективных подходов к стерилизации изделий и материалов биомедицинского назначения является стерилизация с использованием сверхкритических флюидов. За счет использования нетоксичных стерилизующих агентов и мягких условий проведения процесса данный подход позволяет сохранить структуру и свойства конечных изделий. В данной работе рассмотрены основные преимущества и недостатки методов и подходов к проведению процесса стерилизации биомедицинских материалов и изделий, рассмотрены перспективы развития процесса сверхкритической стерилизации в области медицины и фармацевтической промышленности.

Ключевые слова: стерилизация, сверхкритические технологии, материалы биомедицинского назначения.

Sterilization processes of biomedical materials and products

Golubev E.V., Belousova D.I., Abramov A.A., Tsygankov P. Yu.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The ever-increasing properties and structure of biomedical materials and products, as well as their sensitivity to external influences, determine the relevance of developing innovative and safe sterilization methods. In addition, often traditional methods such as steam/dry heat treatment, ethylene oxide sterilization and gamma irradiation cannot ensure the preservation of the functionality and integrity of the processed material. One of the most promising approaches to sterilization of biomedical products and materials is sterilization using supercritical fluids. Due to the use of non-toxic sterilizing agents and mild process conditions, this approach allows you to preserve the structure and properties of the final products. In this paper, the main advantages and disadvantages of methods and approaches to the sterilization process of biomedical materials and products are considered, the prospects for the development of the supercritical process are considered.

Key words: sterilization, supercritical technologies, biomedical materials.

Введение

В настоящий момент инфекции в отрасли здравоохранения являются одной из наиболее значимых проблем. Загрязнение при производстве фармацевтических препаратов и изделий медицинского назначения патогенными микроорганизмами является существенной проблемой, не только из-за безопасности пациентов, но и из-за нарушения стабильности фармацевтических препаратов, свойств и структуры изделий. В свою очередь сочетание асептических методов и подходящего метода стерилизации материалов и изделий медицинского назначения является одним из способов к снижению рисков развития инфекции [1]. Таким образом, целью проведения процесса стерилизации является полная инактивация микроорганизмов, включая вегетативные и спорулирующие бактерии, дрожжи, грибы и вирусы.

Несмотря на разнообразие методов и подходов к проведению процесса стерилизации предъявляются определенные требования, которые регламентируются ГОСТ Р ИСО 14937-2012 «Стерилизация медицинской продукции», а именно: высокая эффективность, активность, проникающая способность стерилизующего агента, нетоксичность и безопасность, масштабируемость, воспроизводимость, возможность контроля экономичность. Согласно описанным требованиям выделяют ряд методов стерилизации, включая физические (такие как паровая стерилизация или автоклавирование [2], обработка ультрафиолетовым излучением [3], радиационная стерилизация [4]) и химические (газовая стерилизация окисью этилена [5]). Однако, параметры процессов, при которых реализуются данные методы, могут негативно влиять на структуру и свойства материалов и изделий

биомедицинского назначения.

Существующие методы стерилизации, одобренные регламентирующими органами, а именно тепловая или паровая стерилизации, стерилизации окисью этилена и гамма-облучением, являются наиболее применимыми в промышленном масштабе. Однако, данные подходы имеют определенные недостатки, которые связаны с разрушающим воздействием стерилизующего агента на структуру и свойства конечных изделий. В наибольшей степени это характерно для материалов и изделий, изготовленных на основе биополимеров, гидрофильных и термолабильных соединений и веществ.

Развитие медицины и фармацевтической промышленности стимулирует разработку новых материалов и изделий, которые обладают строго заданными свойствами. В настоящий момент не существует единого комплексного подхода к стерилизации изделий, которые могут быть получены из термолабильных, гидрофильных материалов или материалов биологического происхождения. Таким образом, исследование и развитие методов стерилизации, которые используют мягкие условия и не приводят к разрушению структуры конечных изделий, является крайне актуальной задачей. Одним из наиболее перспективных подходов является стерилизация с использованием сверхкритического флюида.

Сверхкритическая флюидная стерилизация

Стерилизация в среде сверхкритического флюида является перспективным направлением исследований, поскольку с помощью данного метода

возможно достичь эффективной стерилизации медицинских инструментов и изделий. Кроме того, сверхкритическая стерилизация является экологически чистым и ресурсосберегающим процессом, что играет важную роль при масштабировании процесса.

Одним из наиболее перспективных флюидов для проведения процесса сверхкритической стерилизации является диоксид углерода [6]. Сверхкритический диоксид углерода обладает низкой вязкостью, отсутствием поверхностного натяжения и высокой проникающей способностью, что позволяет ему диффундировать в сложные структуры и пористые материалы. Благодаря своей низкой реакционной способности, сверхкритический диоксид углерода не вызывает образования свободных радикалов или реакционноспособных соединений, которые могут повлиять на структуру и механические свойства материала подобно радиационной стерилизации или стерилизации окисью этилена. Данный метод стерилизации считается безопасным и экологичным, поскольку не оставляет токсичных соединений в материале и не требует специальных условий эксплуатации.

Оборудование для проведения процесса сверхкритической флюидной стерилизации должно включать в себя несколько основных узлов: насосы и аппараты высокого давления, нагревательные элементы, контрольно-измерительные приборы, а также запорную и регулируемую арматуру для регулирования потока диоксида углерода (Рис. 1). Однако конфигурация оборудования может варьироваться в зависимости от целей стерилизации и характеристик материалов.

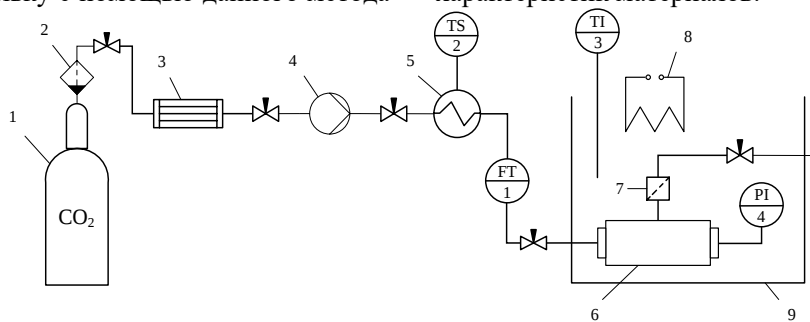


Рис. 1. Принципиальная схема установки для проведения процесса стерилизации сверхкритическим диоксидом углерода: 1 – баллон с диоксидом углерода, 2 – фильтр-осушитель, 3 – конденсатор, 4 – насос высокого давления, 5 – теплообменник, 6 – аппарат высокого давления, 7 – фильтр, 8 – нагревательный элемент, 9 – водяная баня, FT1 – массовый расходомер, TS2 – термостат, PI3 – температурное реле, PI4 – манометр

Процесс начинается с загрузки стерилизуемого материала в предварительно продезинфицированный аппарат высокого давления (6). Водяная баня (9), в которой находится аппарат высокого давления, прогревается до необходимой температуры с использованием нагревательного элемента (8). Контроль температуры осуществляется с помощью термометра PI3. Далее подается диоксида углерода из баллона (1) через фильтр-осушитель (2) в конденсатор (3), где он охлаждается до температуры 5°C с целью предотвращения перехода в газовую фазу. Затем диоксид углерода поступает в насос (4), в

котором нагнетается необходимое давление. В теплообменнике (5) происходит предварительный нагрев диоксида углерода, после чего он подается в аппарат высокого давления (6). Контроль температуры в теплообменнике осуществляется с помощью реле TS2. В аппарате стерилизуемый объект обрабатывается статическим методом в течение определенного времени. Контроль давления внутри аппарата осуществляется с помощью манометра PI4. После завершения этапа статической стерилизации на выходе из аппарата открывается вентиль для осуществления стерилизации

динамическим методом. Массовый расход диоксида углерода контролируется с помощью массового расходомера FT1. Перед вентиляем устанавливается фильтр (7) для предотвращения уноса стерилизуемых объектов небольшого размера. После окончания этапа динамической стерилизации происходит сброс давления путем постепенного открытия выходного вентиля.

Некоторые установки для сверхкритической стерилизации могут быть оснащены линией для подачи дополнительного стерилизующего агента (например, пероксида водорода) с отдельным насосом (Рис. 2) [7].

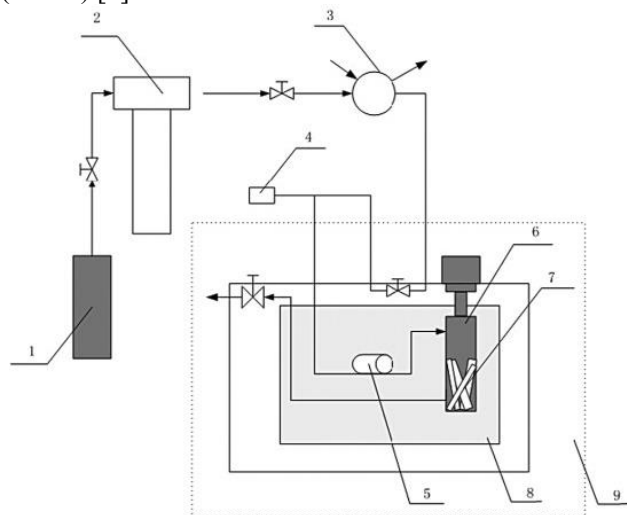


Рис. 2. Схема установки для проведения процесса сверхкритической стерилизации, оснащенной линией подачи дополнительного стерилизующего агента: 1 – баллон с диоксидом углерода, 2 – насос высокого давления, 3 – шестипортовый клапан впрыска жидкости, 4 – клапан избыточного давления, 5 – теплообменник, 6 – картридж, 7 – образцы, 8 – нагревательный блок, 9 – аппарат высокого давления ISCO SFX 2-10

Предварительно нагретый диоксид углерода поступает в один из двух картриджей высокого давления (6) (на схеме показан только один из двух параллельных картриджей), которые встроены в изотермический нагревательный блок (8) для поддержания необходимой температуры. Давление в аппарате нагнетается насосом (2). Диоксид углерода поступает в картриджи через шестипортовый клапан для впрыска жидкости (3). По завершении процесса сверхкритической стерилизации проводится сброс давления.

Принимая во внимание сложность структуры патогенных микроорганизмов, изучение воздействия различных параметров процесса сверхкритической стерилизации на эффективность их инактивации является крайне важной задачей. Сверхкритическая стерилизация включает следующие параметры: давление, температура, время стерилизации, и использование дополнительных стерилизующих агентов.

При проведении сверхкритической стерилизации в среде диоксида углерода интервал рассматриваемых давлений, обычно, составляет от 8 до 40 МПа [8].

В ряде работ показано, что увеличение давления приводит к увеличению скорости инактивации микроорганизмов. В работе [9] экспериментально доказано, что увеличение давления способствует инактивации микроорганизмов. С увеличением давления растворимость диоксида углерода повышается, что ускоряет процесс диффузии в клетку через плазматическую мембрану. Однако существует ограничение, вызванное предельной растворимостью диоксида углерода в воде.

Температура также играет важную роль в процессе стерилизации сверхкритическим диоксидом углерода. Более высокие значения температуры способствуют инактивации микроорганизмов за счет увеличения растворимости диоксида углерода и проницаемости клеточной мембраны [10]. Однако при давлении около или выше критического, более высокие температуры способствуют снижению растворимости диоксида углерода из-за резкого изменения его плотности [11]. В настоящее время установлено, что более высокие температуры могут усиливать инактивацию бактерий и спор, сокращая при этом время стерилизации [12].

Для увеличения скорости инактивации в сочетании со сверхкритическим диоксидом углерода используются дополнительные стерилизующие агенты. В качестве дополнительных стерилизующих агентов часто используются метанол, этанол, пероксид водорода или надуксусная кислота [13]. Эти вещества могут значительно усилить эффективность стерилизации, особенно в сочетании со сверхкритическим диоксидом углерода. Надуксусная кислота является одним из наиболее эффективных агентов, инактивирующих микроорганизмы и их споры, поскольку нетоксична и способна разлагаться на уксусную кислоту и пероксид водорода. Последний, в свою очередь, обладает бактерицидным, фунгицидным, вирулицидным и спороцидным действием.

Кроме того, в качестве дополнительного стерилизующего агента в процессе сверхкритической стерилизации может использоваться пероксид водорода. В работе [14] оценивалась эффективность стерилизации с использованием пероксида водорода в среде сверхкритического диоксида углерода. Показано, что при использовании 5 мкл пероксида водорода происходит полная инактивация спор *B. Anthracis* в более мягких условиях, чем при автоклавировании или химической стерилизации пероксидом водорода.

Заключение

В настоящий момент процессы сверхкритической стерилизации являются перспективной альтернативой существующим традиционным методам. На основании научно-технической литературы установлено, что сверхкритическая стерилизация является наиболее перспективным методом за счет менее агрессивных условий проведения процесса. Это позволяет не только расширить спектр возможных материалов для

стерилизации, но и сохранить заданную структуру конечных изделий, что является несомненно важным для биомедицинских изделий и материалов. Однако существенным ограничением для внедрения данного метода в промышленность является отсутствие единого стандарта проведения процесса и необходимых нормативных документов.

В настоящий момент сверхкритическая стерилизация доказала свою эффективность в области стерилизации биоматериалов. Актуальным и перспективным является использование данного процесса в области стерилизации одноразовых медицинских инструментов с целью снижения материальных затрат. Данные материалы изготовлены из термолабильных материалов, которые не могут быть подвергнуты традиционным методам стерилизации. Кроме того, сверхкритический диоксид углерода, в том числе с дополнительными стерилизующими агентами может быть рассмотрен как эффективный подход к стерилизации матриц для роста клеток тканей и органов на основе биополимеров, с заданными свойствами и развитой высокопористой структурой.

Сверхкритические флюидные технологии доказали свою эффективность при получении высокопористых материалов со строго заданными свойствами на основе различных биополимеров. Безусловно, совмещение существующих сверхкритических процессов с процессом сверхкритической стерилизации может значительно расширить и упростить процесс получения изделий биомедицинского назначения, которые соответствуют предъявляемым требованиям.

Таким образом, авторы работы считают, что дальнейшие исследования процесса сверхкритической стерилизации будут направлены на развитие теории и повышение эффективности данного метода. Кроме того, актуальным является исследование совмещенных процессов сушки и стерилизации с использованием сверхкритического диоксида углерода с целью повышения энерго- и ресурсоэффективности.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда №23-73-01216

Список литературы

1. Федотов А.Е. Производство стерильных лекарственных средств // Фармацевтические технологии и упаковка. 2014. № 9(247). С. 38-41.
2. Тапальский Д.В., Осипов В.А., Сухая Г.Н., Ярмоленко М.А., Рогачев А.А., Рогачев А.В. Биосовместимые композиционные антибактериальные покрытия для защиты имплантатов от микробных биопленок // Проблемы здоровья и экологии. 2013. Т. 36. № 2. С. 129-134.
3. Chansoria P., Narayanan L.K., Wood M., Alvarado C., Lin A., Shirwaiker R.A. Effects of Autoclaving, EtOH, and UV Sterilization on the Chemical, Mechanical, Printability, and Biocompatibility Characteristics of Alginate // ACS Biomaterials Science & Engineering. 2020. V. 6. № 9. P. 5191-5201.
4. Воробьев В., Божкова С.А., Тихилов Р.М., Черный А.Ж. Современные способы обработки и стерилизации аллогенных костных тканей (обзор литературы) // Травматология и ортопедия России. 2017. Т. 23. № 3. С. 134-147.
5. Немойкина А.Л., Бабкина О.В., Алексеенко К.В., Вайтулевич Е.А. Изучение влияния режимов стерилизации окисью этилена на свойства гликолидлактидных нитей // Вестник Томского государственного университета. 2014. № 382. С. 230-233.
6. Soares G.C., Learmonth D.A., Vallejo M.C., Davila S.P., González P., Sousa R.A., Oliveira A.L. Supercritical CO₂ technology: The next standard sterilization technique? // Materials Science and Engineering. 2019. Т. 99. С. 520-540.
7. Santos-Rosales V., Ardao I., Alvarez-Lorenzo C., Ribeiro N., Oliveira A.L., García-González C.A. Sterile and Dual-Porous Aerogels Scaffolds Obtained through a Multistep Supercritical CO₂-Based Approach // Molecules. 2019. V. 24. № 5. P. 871.
8. Hossain Md.S., Nik Norulaini N.A., Banana A.A., Mohd Zulkhairi A.R., Ahmad Naim A.Y., Mohd Omar A.K. Modeling the supercritical carbon dioxide inactivation of Staphylococcus aureus, Escherichia coli and Bacillus subtilis in human body fluids clinical waste // Chemical Engineering Journal. 2016. V. 296. P. 173-181.
9. Furukawa S., Watanabe T., Koyama T., Hirata J., Narisawa N., Ogihara H., Yamasaki M. Inactivation of food poisoning bacteria and Geobacillus stearothermophilus spores by high pressure carbon dioxide treatment // Food Control. 2009. V. 20. № 1. P. 53-58.
10. Garcia-Gonzalez L., Geeraerd A.H., Spilimbergo S., Elst K., Van Ginneken L., Debevere J., Van Impe J.F., Devlieghere F. High pressure carbon dioxide inactivation of microorganisms in foods: The past, the present and the future // International Journal of Food Microbiology. 2007. V. 117. № 1. P. 1-28.
11. Tomasko D.L., Li H., Liu D., Han X., Wingert M.J., Lee L.J., Koelling K.W. A Review of CO₂ Applications in the Processing of Polymers // Industrial & Engineering Chemistry Research. 2003. V. 42. № 25. P. 6431-6456.
12. Chen Y.Y., Temelli F., Gänzle M.G. Mechanisms of Inactivation of Dry Escherichia coli by High-Pressure Carbon Dioxide // Applied and Environmental Microbiology. 2017. V. 83. № 10. P. 1-10.
13. White A., Burns D., Christensen T.W. Effective terminal sterilization using supercritical carbon dioxide // Journal of Biotechnology. 2006. V. 123. № 4. P. 504-515.
14. Zhang J., Dalal N., Matthews M.A., Waller L.N., Saunders C., Fox K.F., Fox A. Supercritical carbon dioxide and hydrogen peroxide cause mild changes in spore structures associated with high killing rate of Bacillus anthracis // Journal of Microbiological Methods. 2007. V. 70. № 3. P. 442-451.

УДК 66.017

Горшенин М.А.

Исследование теплопроводности в соединениях пластин на основе графитопласта

Горшенин Михаил Артемович – заместитель начальника производства ООО «НИАГАРА»

Россия, г. Москва, вн.тер.г. Муниципальный Округ Якиманка, ул. Донская, д. 6, стр. 2

Прогресс радиоаппаратуры не стоит на месте и требует того же от материалов, которые используются для отвода тепла. С появлением композиционных материалов, в частности, графитопластов, всё больше работ направлено на исследование данных материалов, так как они имеют ряд преимуществ перед металлами. На данный момент уже существуют материалы, значение коэффициента теплопроводности которых достаточно для отвода тепла. В данной работе рассмотрено влияние на теплопроводность двух плит из графитопласта в зависимости от типа их неразъемного соединения.

Ключевые слова: теплопроводность, отвод тепла, неразъемное теплопроводное соединение

Investigation of thermal conductivity in the joints of plates based on graphitoplast

Gorshenin M.A.

ООО «НИАГАРА», Moscow, Russian Federation

The progress of radio equipment does not stand still and requires the same from the materials that are used to remove heat. With the advent of composite materials, in particular, graphitoplastics, more and more work is directed at the study of these materials, since they have a number of advantages over metals. At the moment, there are already materials whose thermal conductivity coefficient is sufficient to remove heat. In this paper, the effect on the thermal conductivity of two plates made of graphite plastic, depending on the type of their permanent connection, is considered.

Keywords: thermal conductivity, heat dissipation, non-removable heat-conducting connection

Введение

В настоящее время в отрасли приборостроения произошёл технологический скачок. Приборы и аппаратура имеют меньшие габариты, но большую вычислительную мощность. В следствии чего тепловая нагрузка на единицу площади установочной платы увеличивается. Данная проблема актуальна для большого количества областей жизни человека: от стационарных компьютеров, ноутбуков, смартфонов и т.п. до приборов и вычислительной техники, использующаяся в гражданской и военной авиации. Основное решение проблемы теплонагруженности является отвод тепла.

Существует большое количество способов отвода тепла. Основной проблемой является передача тепла от термически нагруженного участка к участку охлаждения (сброса тепла). В физике существует несколько основных способов передачи тепла:

1. Теплопроводность – молекулярный перенос тепла между частями среды. Возникает, когда температура частей различна.
2. Конвекция – перенос тепла вместе с перемещением объемов жидкости или газа (текучая среда) между по-разному нагретыми областями.
3. Излучение (радиация) – распространение тепла в виде электромагнитных волн. Обусловлено только температурой и оптическими свойствами среды. Внутренняя энергия одного тела превращается в лучистую энергию, переносится в виде волн и поглощается другим телом, т.е. наоборот лучистая энергия превращается во внутреннюю. [1]

Для эффективного отвода тепла от теплонагруженных элементов используют материалы с достаточным коэффициентом теплопроводности. В основном – это металлы, т.к. они имеют более плотную структуру материала и наименьшее расстояние между молекулами. Данные материалы подвержены коррозии и имеют большую удельную плотность, что является недостатками для некоторых областей приборостроения. Одна из отраслей, где ведутся работы по созданию материала, устойчивого к коррозии и имеющий достаточно низкую удельную плотность – авиастроение. Одно из решений, которое предлагает современная наука – это композиционные материалы на основе графита. Наиболее распространенный материал – это графитопласт.

Графитопласты – пластмассы, содержащие в качестве наполнителя природный и искусственный графит или карбонизованные продукты (например, кокс, термоантрацит). Связующими в графитопласте могут быть феноло-альдегидные, эпоксидные смолы, полиамиды, фторопласты и др. [2] Одна из сфер, где активно применяются графитопласты является авиастроение. В настоящее время активно ведутся работы по внедрению графитопластов, как основного материала для создания корпусов охлаждения авиаприборов. Одна из проблем, с которой столкнулись инженеры при создании данных корпусов – это Т-образное соединение 2-х плит графитопласта.

Существует несколько решений, одними из которых являются:

1. Механическое соединения с помощью метизов. Основным недостатком данного решения

является воздушная прослойка, образующаяся на стыке, что даёт большое сопротивление и не обеспечивает передачу тепловой энергии в достаточном объёме

2. Клеевое соединение. Основными недостатками данного способа являются: тепловое сопротивление клеевого шва (у клеев недостаточно высокая теплопроводность), что так же окажет

негативное влияние на теплопередачу. В работе [3] представлены графики, где теплопроводность клея составляет не более $1,5 \text{ кВт/м}^2$

В данной работе представлены результаты еще одного способа соединения двух графитопластов. Схемы данного соединения представлены на рисунке 1.

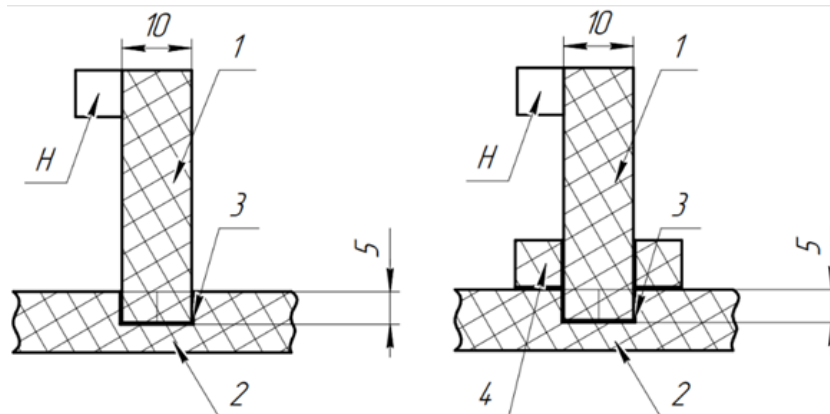


Рис. 1. Типы соединений Т-паза. 1 – графитопласт, на который оказывается термическая нагрузка, 2 – графитопласт для отведения тепла, 3 – шов, состоящий из теплопроводной пасты на основе мелкодисперсного графита (толщина слоя не более 0,1 мм), 4 – приливы из графитопласта, Н – нагреватель.

Данный тип соединений представляет собой соединение двух пластин толщиной 10 мм по схеме Т-обр. паза. Для их соединения в пластине 2 изготавливается паз глубиной 5 мм. В данный паз вставляется пластина 1. Для их соединения используется специальная теплопроводная паста на основе мелкодисперсного графита, что позволяет обеспечить достаточную теплопроводность. На соседней схеме добавляются блоки 4. Данный блоки имеют размерность 10x10 мм и так же соединяются с помощью теплопроводной пасты.

Схема исследования

В ходе данного исследования, конструкция Т-паза помещалась в специальную установку, состоящую из теплоизоляционного материала, нагревателя и термопар (рис. 2). Нагреватель передаёт тепло на пластину 1. Тепловая энергия проходит вдоль пластины 1, где термопары фиксируют температуру пластины с определенным шагом.

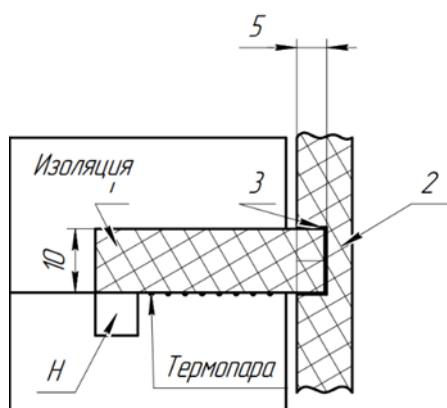


Рис. 2. Схема эксперимента.

Фиксировалась температура нагревателя, а также температура пластины 1 с определенным шагом. С помощью этих данных проводились расчёты, показывающие динамику тепловой энергии вдоль пластины 1.

Расчёты

Основной принцип данных исследований – измерение теплопроводности пластины. Данные измерения проходили в 3 этапа:

1. Измерение теплопроводности пластины 1
2. Измерение теплопроводности пластины 1 с Т-обр. соединением пластины 2
3. Измерение теплопроводности пластины 1 с Т-обр. соединением пластины 2 и дополнительными блоками 3

Основные расчёты производились по формуле

$$\lambda = \frac{P}{S} / \frac{dT}{dx} \quad (1)$$

где, λ – коэффициент теплопроводности, Вт/м·К;

P – мощность теплового потока, Вт;

S – площадь пластины, м^2 ;

$\frac{dT}{dx}$ – функция изменения температуры, К/м.

Фиксируя температуру на поверхности пластины 8-ю термопарами, мы получаем разницу температур на поверхности пластины 1. Далее при помощи формулы (1) мы высчитываем теплопроводность пластины в 3х случаях.

При анализе таблицы 1 мы видим, что теплопроводность пластины 1 изменяется в допустимых значениях (не более 8% от первоначального значения).

Таблица 1. Результаты измерения теплопроводности в 3х случаях

Образец	Теплопроводность (λ), Вт/м·К
Пластина 1	68
Пластина 1 с Т-обр. соединением пластины 2	66
Пластина 1 с Т-обр. соединением пластины 2 и дополнительными блоками 3	63

Заключение

В настоящее время, при стремлении получить наиболее эффективное соотношение размеров корпуса, его веса и способности отводить тепло от высокотемпературных приборов без помощи дополнительного оборудования, а только при помощи физических процессов, количество

исследований в области неразъёмных соединений с использованием графитопластов и специальных теплопроводящих паст будет расти.

Данное исследование показало, что неразъёмные соединения Т-образного типа имеют право на существование, а значения теплопередачи варьируются в допустимых значениях, что позволяет осуществить сбрасывание тепла без использования дополнительного оборудования

Список литературы:

1. Основы теории и методы расчёта теплопередачи: учебное пособие/ А.Б. Мазо – Казань: Казан. ун-т, 2013. – 5 с.
2. Большая российская энциклопедия. Графитопласты/ д.т.н. Золкин Пётр Иванович, 2023
3. Полимерные клеи. Создание и применение/ Кардашов В.А., Петрова А.П., 1983 г. -115 с.

УДК 66.048.3.069.835, 004.942

Дементьенко В.А., Скичко Е.А.

Разработка программного модуля расчета ректификации бинарных смесейДементьенко Виктория Александровна – студент группы КС-40; ms.vika.1604@mail.ru.

Скичко Евгения Абдулмуталиповна – старший преподаватель кафедры Информационных компьютерных технологий;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрен процесс ректификации бинарной смеси «бензол-толуол». Была реализована математическая модель разделения бинарных смесей в тарельчатой ректификационной колонне. Расчет проводился при помощи метода разрывной коррекции, в рамках которого исходная система разбивается на подсистемы, которые решаются последовательно. Для решения уравнений математической модели разработан программный модуль, позволяющий рассчитывать материальный и тепловой баланс колонны.

Ключевые слова: ректификация, разделение смесей, парожидкостное равновесие, математическое моделирование

Development of a software module for calculating of the binary mixture rectification

Dementienko V.A., Skichko E.A.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the process of rectification of the binary mixture "benzene-toluene". A mathematical model for the separation of binary mixtures in a tray rectification column was implemented. The calculation was carried out using the discontinuous correction method, in which the initial system is divided into subsystems that are solved sequentially. To solve the equations of the mathematical model, a software module has been developed that allows calculating the material and heat balance of the column.

Key words: rectification, separation of mixtures, vapor-liquid equilibrium, mathematical modeling

Для моделирования химико-технологических процессов активно используется зарубежное программное обеспечение, преимущественно Aspen Hysys и Unisim Design. В настоящее время задача импортозамещения в области технологических наук является наиболее актуальной. Отправной точкой для моделирования сложных ректификационных процессов: экстрактивной, многокомпонентной ректификации, хеморектификации – является разработка программного модуля бинарной ректификации, на основе которого будет возможно дальнейшее моделирование.

Для моделирования были взяты данные по разделению бинарной смеси «бензол-толуол» из статьи [1].

В публикации описывается смоделированный процесс ректификации бинарной углеводородной смеси «бензол-толуол» в программной среде Aspen Hysys. На тарелку питания поступает жидкая разделяемая смесь, подогретая до температуры, близкой к температуре кипения, соответствующей давлению на тарелке. Происходит процесс ректификации, заключающийся в итерационном подогреве жидкости снизу колонны, в ребойлере, и охлаждении пара сверху колонны, в конденсаторе. Часть сконденсированной жидкости собирается, как дистиллят, другая часть ее возвращается на верхнюю тарелку колонны как флегма. В текущей работе рассматривается стационарный режим ректификационной колонны, колонна содержит 30 тарелок. На первом этапе работы процесс был смоделирован в Unisim Design (рис.1). На схеме представлен полный конденсатор.

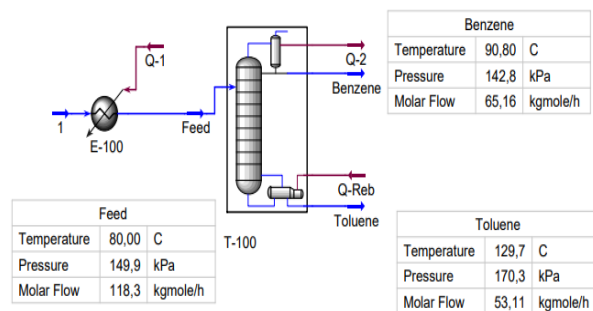


Рис.1. Модель ректификационной колонны в Unisim Design.

Математическая модель бинарной ректификации представлена в различных источниках, в данной работе за основу взята модель [2, 3]. Допущения, принятые при моделировании:

1. Тарелки нумеруются сверху вниз.
2. Моделируется разделение идеальной смеси.

Математическое описание процесса ректификации состоит из следующих уравнений:

1. Уравнение расчета общего материального баланса:

$$F_i + L_{i-1} - L_i + V_{i+1} - V_i = 0 \quad (1)$$

где F – расход потока питания, кмоль/ч,

L – расход потока жидкости, кмоль/ч,

V – расход потока пара, кмоль/ч,

i – номер тарелки.

2. Уравнение расчета покомпонентного материального баланса:

$$F_i x_{i,j}^F + L_{i-1} x_{i-1,j} - L_i x_{i,j} + V_{i+1} y_{i+1,j} - V_i y_{i,j} = 0 \quad (2)$$

где x – концентрация компонента в жидкой фазе, мольные доли,

y – концентрация компонента в паровой фазе, мольные доли,

j – номер компонента.

3. Уравнение расчета теплового баланса:

$$F_i \Delta h_i^F + L_{i-1} \Delta h_{i-1} - L_i \Delta h_i + V_{i+1} \Delta H_{i+1} - V_i \Delta H_i + \Delta Q_i^n = 0 \quad (3)$$

где Δh_i^F – энтальпия питания, кДж/моль,

Δh_i – энтальпия жидкого потока, кДж/моль,

ΔH_{i+1} – энтальпия парового потока,

кДж/моль,

ΔQ_i^n – энергетический поток, кДж/ч.

4. Уравнение расчета мольной доли легколетучего компонента в паровом потоке, покидающем тарелку:

$$y_{i,j} = y_{i+1,j} + E_{i,j}(y_{i,j}^{(*)} - y_{i+1,j}) \quad (4)$$

где E_j – эффективность тарелки по компоненту,

$y_{i,j}$ – концентрация компонента в паре,

мольные доли,

$y_{i,j}^{(*)}$ – равновесная мольная доля компонента

в паре, которая рассчитывается по объединенному закону Дальтона-Рауля.

Для расчета ректификационной колонны при заданных спецификациях (расход дистиллята и доля легколетучего компонента в дистилляте) нужно решить систему из двух линейных уравнений (5) для определения расхода кубовой жидкости и доли легколетучего компонента в кубовой жидкости.

$$\begin{cases} F * x_F - D * x_D - W * x_W = 0, \\ F - D - W = 0. \end{cases} \quad (5)$$

где D – расход потока дистиллята, кмоль/ч,

W – расход потока кубовой жидкости, кмоль/ч.

В процессе разработки проверочной модели ректификационной колонны было обнаружено, что температуры, указанные в статье [1], не соответствуют требуемым по термодинамическим законам температурам. В связи с этим был реализован метод расчета температур кипения при заданном давлении и оценке температур, введенных в модель. Метод основан на решении системы двух уравнений (6), при решении которой подбираются температуры кипения сверху и снизу колонны, учитываемые в уравнении Антуана.

$$\begin{cases} \sum_j^n x_{D,j} P_{D,j}^0 - P_D = 0, \\ \sum_j^n x_{W,j} P_{W,j}^0 - P_W = 0. \end{cases} \quad (6)$$

где P_D – давление верха колонны, мм рт ст,

P_W – давление низа колонны, мм рт ст.

Для решения уравнения теплового баланса необходимо знать тепловые потоки, для этого рассчитываются энтальпии потоков (7-8) и нагрузка на конденсатор (10) и ребойлер (14).

$$\Delta h_i = \sum_{j=1}^n \Delta h_{i,j}^{ind} x_{i,j} \quad (7)$$

$$\Delta H_i = \sum_{j=1}^n \Delta H_{i,j}^{ind} y_{i,j} \quad (8)$$

где $\Delta h_{i,j}^{ind}$ – энтальпия образования индивидуальных веществ в жидком потоке, кДж/моль,

$\Delta H_{i,j}^{ind}$ – энтальпия образования индивидуальных веществ в паровом потоке, кДж/моль.

Для расчета энтальпий образования индивидуальных веществ были применены полиномы NASA 7.

$$\Delta H_{i,j}^{ind} = RT * \left(a_1 + \frac{a_2 T}{2} + \frac{a_3 T^2}{3} + \frac{a_4 T^3}{4} + \frac{a_5 T^4}{5} + \frac{a_6}{T} \right) \quad (9)$$

где R – универсальная газовая постоянная,

$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$ и a_7 – известные коэффициенты для каждого вещества.

Аналогично рассчитывается энтальпия образования индивидуальных веществ в жидком потоке. Числовые коэффициенты для полиномов NASA различны для паровой и жидкой фаз, и выбираются для температурного диапазона ниже 1000K, поскольку в ректификационных колоннах для разделения бинарных смесей температура не поднимается выше указанной.

Нагрузка на конденсатор рассчитывается из закона сохранения энергии.

$$Q_{cond} = Q_{to_cond} - Q_{D,R} \quad (10)$$

где Q_{cond} – тепловая нагрузка на конденсатор, кДж/ч,

Q_{to_cond} – тепловой поток, поступающий в конденсатор с верхней тарелки колонны, кДж/ч,

$Q_{D,R}$ – тепловой поток, состоящий из тепловых потоков дистиллята и флегмы, кДж/ч.

$$Q_{to_cond} = V_1 * \Delta H_1 \quad (11)$$

где V_1 – поток пара, поступающий с верхней тарелки в конденсатор, кмоль/ч,

ΔH_1 – энтальпия парового потока, поступающего с верхней тарелки в конденсатор, кДж/моль.

$$Q_{D,R} = (D + \Phi) * \Delta h_c \quad (12)$$

где Φ – расход флегмы, кмоль/ч,

Δh_c – энтальпия потока, покидающего конденсатор и состоящего из дистиллята и флегмы, кДж/моль.

Поток флегмы рассчитывается из уравнения (16), при заданных спецификациях: флегмовое число и расход дистиллята.

$$R = \frac{\Phi}{D} \quad (13)$$

где R – флегмовое число.

Нагрузка на ребойлер рассчитывается аналогично.

$$Q_{reb} = Q_{boilup} + Q_W - Q_{to_reb} \quad (14)$$

где Q_{reb} – тепловая нагрузка на ребойлер, кДж/ч,

Q_{boilup} – тепловой поток, поступающий в нижнюю тарелку колонны из ребойлера, кДж/ч,

Q_W – тепловой поток кубовой жидкости, кДж/ч,

Q_{to_reb} – тепловой поток, поступающий в ребойлер с нижней тарелки колонны, кДж/ч.

$$Q_{boilup} = V_{reb} * \Delta H_{reb} \quad (15)$$

где V_{reb} – поток пара, поступающего из ребойлера в нижнюю тарелку колонны, кмоль/ч,

ΔH_{reb} – энтальпия парового потока, поступающего из ребойлера в нижнюю тарелку колонны, кДж/моль.

$$Q_W = W * \Delta h_W \quad (16)$$

где Δh_W – энтальпия кубовой жидкости, кДж/моль.

$$Q_{to_reb} = L_N * \Delta h_0 \quad (17)$$

где L_N – поток жидкости, поступающий в ребойлер с нижней тарелки колонны, кмоль/ч,

Δh_0 – энтальпия потока жидкости, поступающего в ребойлер с нижней тарелки колонны, кДж/моль.

Для решения уравнений математической модели был разработан программный модуль на языке Python.

Для работы с массивами данным была подключена библиотека NumPy. Для решения систем нелинейных алгебраических уравнений в математической модели была подключена библиотека SciPy, которая включает в себя функцию решения систем нелинейных уравнений методом Ньютона-Рафсона.

Для того чтобы моделировать разделение неидеальных смесей возможно подключение библиотеки Thermo.

Результаты моделирования UniSim Design и результаты работы разработанного программного модуля представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты моделирования UniSim и результаты разработанного программного модуля

	Массовый расход куб. жидкости, кг/ч	Мольная доля нк компонента в куб. жидкости	Расход флегмы, кг/ч	Нагрузка ребойлера, кДж/ч	Нагрузка конденсатора, кДж/ч
Эксперимент	4990	0,0048	8400	–	–
UniSim Design	4889.670	0.0057	8687.560	5.935e+006	5.356e+006
Разработанная программа	4890.0	0.0056	8659.588	6.017e+006	5.383e+006
Относительная ошибка расчета, %	0.007	1.754	0.322	1.382	0.504

В разработанной модели также присутствуют методы перерасчета из массовых единиц в мольные, и наоборот, из мольных единиц в массовые, что помогает при выведении результатов сравнивать их с экспериментом.

Заключение

Разработанная математическая модель предназначена для проверочного расчета разделения бинарной смеси в тарельчатой ректификационной колонне с ребойлером и полным конденсатором. Для расчета необходимо задать данные потока питания, количество тарелок, тарелку питания, оценку давления и температур в колонне, флегмовое число, расход дистиллята и состав дистиллята. Относительная ошибка разработанного программного модуля находится в пределах от

0,0067 до 66,67 %. Результаты тестирования показали, что данная модель хорошо справляется с расчетом разделения бинарных смесей в тарельчатой ректификационной колонне.

Список литературы

1. Хайруллина Г.Р. Моделирование системы управления в программной среде ASPEN HYSYS // Научные вести. – 2019. – №6. – С. 148-157.
2. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие. М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с.
3. Глебов М.Б, Дудоров А.А. Моделирование массообменных процессов химической технологии. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2015. – 111 с.

УДК 004.65:663

Досаев А.А., Меньшутина Н.В.

Разработка архитектуры базы данных биотехнологических процессов с использованием методов системного анализа

Досаев Александр Алексеевич - аспирант; кафедра кибернетики химико-технологических процессов; a.dosaev93.muctr@mail.ru.

Меньшутина Наталья Васильевна – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой химического и фармацевтического инжиниринга;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В настоящее время во многих отраслях биотехнологии активно используются биореакторные системы разнообразного конструкционного исполнения. Вследствие данного разнообразия возникает проблема выбора биореактора под конкретный биотехнологический процесс. Для ее решения необходима разработка системы поддержки принятия решений по выбору биореактора. На первом этапе разработки проведен системный анализ предметной области – биотехнологических процессов с использованием биореакторов. С помощью системного подхода определены объекты предметной области в виде архитектуры хранения данных.

Ключевые слова: биотехнология, биореакторы, биотехнологические процессы, биореакторы системный анализ.

Development of an architecture for storing biotechnological process data using systems analysis methods

Dosaev A.A., Menshutina N.V.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation.

Currently, bioreactor systems of various designs are actively used in many branches of biotechnology. Due to this diversity, the problem of choosing a bioreactor for a specific biotechnological process arises. To solve this problem, it is necessary to develop a decision support system for choosing a bioreactor. At the first stage of development, a system analysis of the subject area was carried out - biotechnological processes using bioreactors. Using a systems approach, domain objects are defined in the form of a data storage architecture.

Key words: biotechnology, bioreactors, biotechnological processes, bioreactors, system analysis.

Введение

Биореакторы (ферментеры) - инженерные устройства, предназначенные для осуществления биотехнологических процессов культивирования микроорганизмов, клеток, тканей, органоидов, а также производства химических и биологически активных веществ в контролируемых условиях [1]. Биореакторы широко используются в различных областях деятельности человека: тканевой инженерии, микробиологии, фармацевтике, медицине, микробиологической очистке воды и утилизации твердых бытовых отходов, промышленном производстве (например, химической, пищевой и косметической промышленности), а также активно применяются в научных исследованиях [2]. В настоящее время разрабатывается множество разнообразных биореакторных систем в новом конструктивном исполнении с большим набором технических характеристик [3]. Вследствие данного разнообразия возникает проблема выбора наиболее оптимального биореактора под конкретный биотехнологический процесс [4]. Данная проблема усложняется необходимостью обработки множества разнородных данных (например, типа биологического объекта и продукта, масштаба и задач производства, различных технологических параметров — концентрации растворенного кислорода, температуры, скорости

перемешивания в биореакторе, pH и т.д.). Для решения данной проблемы предложено создание системы поддержки принятия решений по выбору биореактора под конкретный биотехнологический процесс. В структуру системы будет включена база данных с полным описанием всех составляющих биотехнологического процесса. Для построения архитектуры хранения данных необходимо проведение системного анализа предметной области, что является целью данного исследования.

Экспериментальная часть

В результате первого шага разработки системы поддержки принятия решения, проведен системный анализ предметной области (биотехнологических процессов с использованием биореакторов). С использованием системного подхода выделены элементы (сущности) предметной области. Для каждого элемента определены его характеристики — атрибуты. Установлены связи между элементами, построена модель хранения данных [5]. В силу большого масштаба на схеме архитектуры хранения данных указаны только сущности предметной области (рис.1).



Рис. 1. Архитектура хранения данных биотехнологической системы

Схема включает в себя таблицы основных сущностей (выделены цветом) биотехнологического процесса, (биореакторы, биообъекты, несущие элементы, среда для осуществления биотехнологического процесса, биотехнологический процесс, продукты), а также таблицы второстепенных сущностей (культуры, гены, клеточные линии, ферменты, массогабаритные параметры биореактора, технические параметры биореактора, конструктивное исполнение биореактора, устройства перемешивания, насосы, мембраны, область применения биореактора, масштаб биореактора, факторы роста, литературные источники).

В архитектуру хранения данных включен «объект-связка» — «Биотехнологическая система», который содержит всю основную информацию с

ключевых таблиц, необходимую для осуществления биотехнологического процесса, с указанием достоинств и недостатков. Также в ней приведены оптимальные условия процесса. В таблицу внесен показатель эффективности процесса — полученная концентрация продукта, с помощью которого возможен выбор наиболее оптимальных составляющих биотехнологической системы, в том числе оборудования.

В таблице «Биореакторы» представлены ключевые данные, характеризующие биореакторные системы (название, тип оборудования и тип осуществляемого перемешивания, рабочий объем, стерильность, многократность использования, а также страна и фирма производитель, примерная стоимость). Для наиболее полного описания биореакторного оборудования выделены следующие второстепенные сущности: «Массогабаритные параметры биореактора» (включает в себя описание веса и габаритов оборудования, значение основного объема); «Технические характеристики биореактора» (рабочие диапазоны оборудования, включающие температуру, pH, скорости перемешивания и потока газа, а также значение потребляемой энергии в сутки); «Конструктивное исполнение биореактора» (описание элементов биореактора: устройства перемешивания, насоса, мембраны, датчиков температуры, pH и растворенного кислорода, системы подвода газов и пеногашения, аэратора).

Таблица «Биообъекты» содержит информацию из вспомогательных таблиц «Культура», «Клеточные линии», «Гены» и «Ферменты» в зависимости от того, какой объект используется в биотехнологическом процессе, с указанием параметра биобезопасности. Вспомогательные таблицы содержат данные, наиболее целостно описывающие биологический объект. В таблице «Культура» представлена характеристика микроорганизмов (морфология, тип дыхания, окраска по Граму, подвижность, патогенность, а также, среда и регион выделения микроорганизма). Таблица «Ферменты» содержит информацию об основных классификационных параметрах ферментов (по типу катализируемой реакции, по связи с клеткой, по реакции на условия среды). В таблице «Гены» представлены данные о семействе гена, количестве аминокислот, в том числе приведено значение молекулярной массы. Таблица «Клеточные линии» содержит атрибуты «Название клеточной линии», «Тип клеточной линии» и данные об источнике клеточных линий.

Объект «Среда для осуществления биотехнологического процесса» помимо характеристик питательной среды содержит информацию из таблицы «Факторы роста» о дополнительных элементах, вносимых в нее при протекании процесса. В разделе «Продукты» приведена информация о получаемых продуктах биотехнологического процесса с указанием возможной области применения. Объект «Несущие элементы» содержит описание трехмерных структур для поддержки роста клеток и тканей. В таблице

«Биотехнологический процесс» указан тип осуществляемого процесса. Таблицы «Масштаб биореактора» и «Область применения биореактора» содержат информацию о масштабе оборудования (промышленном, пилотном, лабораторном, микромасштабе) и области использования конкретной биотехнологической системы, включающей биореактор, соответственно. В объект «Литературные источники» занесена информация о типе научного издания, названии публикации, информация об авторах, годе и стране публикации с указанием идентификатора литературного источника.

Таким образом, представленная архитектура хранения данных содержит полное описание биотехнологического процесса с учетом всех его составляющих. Создание в дальнейшем базы данных на основе разработанной архитектуры поможет быстро и в полном объеме получить необходимую информацию.

Заключение

Для решения проблемы выбора биореактора под конкретный биотехнологический процесс проведен системный анализ данной предметной области. С использованием системного подхода определены сущности, наиболее целостно характеризующие биотехнологический процесс. Представлена схема архитектуры хранения данных, которая включает в себя 6 ключевых и 14 второстепенных сущностей. Для наиболее быстрого предоставления основной информации в архитектуру хранения данных включен «объект-связка» – «Биотехнологическая система», который будет содержать информацию со всех

ключевых таблиц. База данных на основе разработанной архитектуры поможет быстро и в полном объеме получить необходимую информацию.

Список литературы

1. N.V. Menshutina, E.V. Guseva, R.R. Safarov, J. Boudrant. Modelling of hollow fiber membrane bioreactor for mammalian cell cultivation using computational hydrodynamics // Bioprocess and biosystems engineering. – 2020.- Т.43. – С. 549-567.
2. C. Ge, P.R. Selvaganapathy, F. Geng. Advancing our understanding of bioreactors for industrial-sized cell culture: health care and cellular agriculture implications // American Journal of Physiology-Cell Physiology. – 2023. - Т. 325. - № 3. – С. 580-591.
3. Titova M., Popova E., Nosov A. Bioreactor Systems for Plant Cell Cultivation at the Institute of Plant Physiology of the Russian Academy of Sciences: 50 Years of Technology Evolution from Laboratory to Industrial Implications // Plants. – 2024. – Т. 13. – №. 3. – С. 430.
4. Р.Р. Сафаров, Моделирование гидродинамики и массообмена в полволоконном мембранном биореакторе (на примере культивирования клеток млекопитающих). дис. канд. техн. наук. Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 2016.
5. В.В. Кафаров, И.Н. Дорохов И., Н.М. Жаворонков. Системный анализ процессов химической технологии: основы стратегии 2-е изд., пер. и доп. монография. Юрайт, 2018.

УДК УДК 004.658

Дусалин А.К., Семенов Г.Н., Скичко Е.А.

Разработка автоматизированной информационной системы «Университетские субботы»

Дусалин Амаль Кинжагалеевич – студент группы КС-43; dekart416@yandex.ru.

Семенов Геннадий Николаевич – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий;

Скичко Евгения Абдулмуталиповна – старший преподаватель кафедры информационных компьютерных технологий;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрены подходы и этапы разработки автоматизированной информационной системы для сопровождения просветительско-профориентационных мероприятий. Представлена реализация информационной системы для проекта «Университетские субботы», которая обеспечивает автоматическую рассылку приглашений и уведомлений, также статистическую обработку информации по мероприятиям.

Ключевые слова: тематические проекты для школьников, информационная система, автоматическая рассылка приглашений

Development of an automated system “University Saturdays”

Dusalın A.K., Semenov G.N., Skichko E.A.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the approaches and stages of developing an automated information system to support educational and career guidance activities. The implementation of an information system for the “University Saturdays” project is presented, which provides automatic distribution of invitations and notifications, as well as statistical processing of information on events.

Key words: thematic projects for schoolchildren, information system, automatic sending of invitations

Введение

Департамент образования и науки г. Москвы проводит различные тематические проекты для школьников на базе высших учебных заведений. Одним из них является просветительско-профориентационный проект «Университетские субботы», в рамках которого профессорско-педагогический состав московских вузов проводит мероприятия для школьников: лекции, мастер-классы, квесты, игры и т.д. РХТУ им. Д.И. Менделеева участвовал в проекте «Университетские субботы» на протяжении последних 7 лет, проводя мероприятия очно и дистанционно онлайн. Успешному проведению проекта сопутствует большая и четкая организационная работа, включающая в том числе рассылку приглашений и уведомлений о проведении мероприятий, рассылку напоминаний, рассылку сертификатов участникам мероприятий, дополнительно рассылку в интересах РХТУ об олимпиадах/днях открытых дверей, а также разнообразную статистическую обработку информации по мероприятиям и участникам. Для выполнения этих задач с наименьшими затратами времени требуется информационная система с возможностью автоматической рассылки.

Модель данных

Одной из задач при реализации системы стал сбор данных о сущностях, используемых при проведении мероприятий. Проведя системный анализ данных о предметной области, был выделен ряд сущностей с их атрибутами, покрывающий все необходимые сценарии при работе по сопровождению мероприятия, а также

при получении аналитических данных по проводимым мероприятиям: Факультет, Кафедра, Сотрудник, Человек, Статус обучения, Образовательная организация, Участник мероприятия, Мероприятие.

На первом этапе был осуществлен выбор между моделями представления данных: реляционной и не реляционной. Была выбрана реляционная модель, так как система управления базой данных (СУБД), реализующая ее, чаще всего поддерживают стандарт SQL, который широко распространен и поддерживает объединенные выборки сущностей [1].

В результате наложения ряда необходимых сущностей на реляционную модель и их реализацию в была разработана информационно-логическая модель базы данных (БД) предметной области в виде диаграммы «сущность-связь» (ER-диаграммы) (рис. 1).

На втором этапе был осуществлен выбор самой СУБД. Среди множества решений была выбрана PostgreSQL, как бесплатная и мощная СУБД, позволяющая работать как с небольшими проектами, так и с высоконагруженными системами, что может быть полезным при дальнейшем развитии проекта [2].

Архитектура

Одним из этапов разработки ИС является выбор архитектуры приложения. Была разработана модель требований к ИС, архитектурные требования которой:

- удобное использование ИС на локальной машине пользователя;
- возможность доработки различных частей ИС;
- возможность разворачивания системы на сервере кафедры и дальнейшая ее доработка до многопользовательской системы.

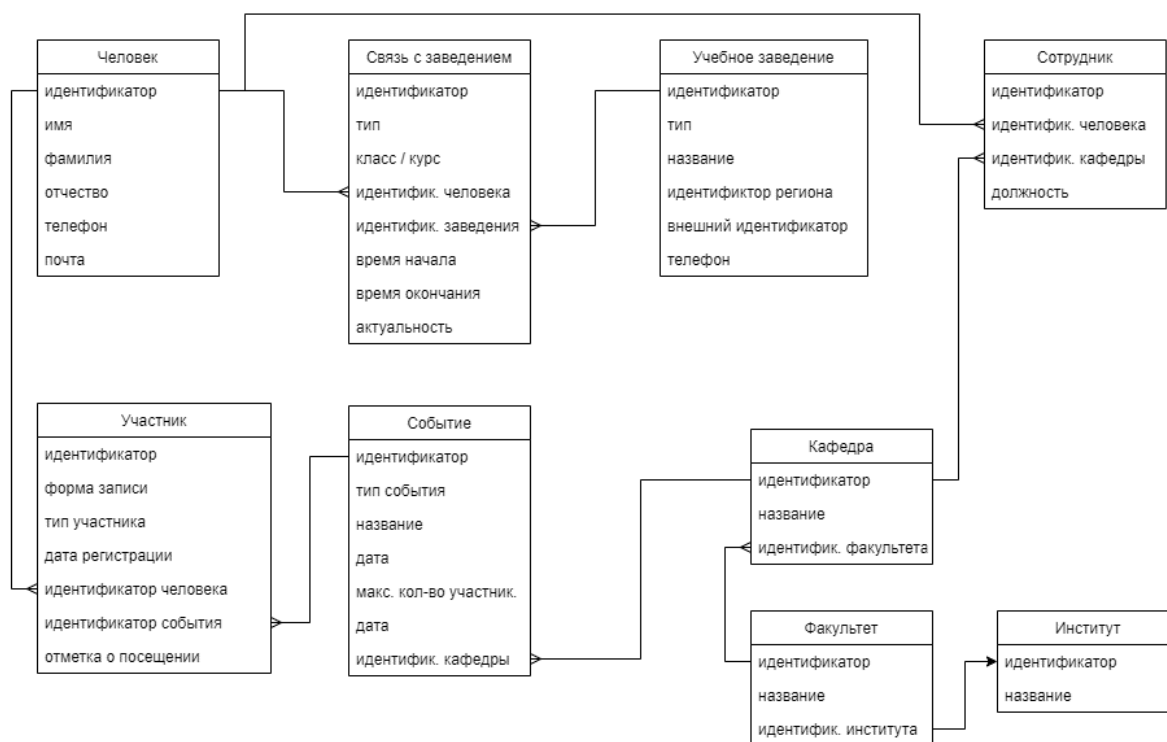


Рис.1. Информационно-логическая модель предметной области

Представленным требованиям отвечает классическая клиент-серверная архитектура ИС.

Такая архитектура достаточно модульная для независимой доработки, например, клиентской или серверной частей, а, возможно, и полной их переработке при соблюдении контракта API между частями системы.

Также, использование данной архитектуры по определению предполагает разворачивание ИС на сервере, что позволит перевести ее в многопользовательский режим через сервер кафедры при доработке и внедрении ролевой системы.

Единственным недостатком может считаться неудобство разворачивания систем, построенных на такой архитектуре, на локальных машинах, но, для решения этой проблемы в системе было использовано программное обеспечение Docker, которое решило проблему разворачивания. Docker — программное обеспечение для автоматизации развёртывания и управления приложениями в средах с поддержкой контейнеризации, контейнеризатор приложений [3].

Соответственно, использование ПО Docker позволило разворачивать сервер на машине пользователя вводом одной команды и решило единственное несоответствие выбранной архитектуры требованиям.

После выбора архитектуры требуемый к реализации функционал был нанесен на логическую модель архитектуры (рис. 2).

На рисунке выше видно классическое разделение ИС на три глобальных модуля, а именно СУБД, сервер и клиент.

Импорт мероприятий

На основе выбранной архитектуры приложения и модели данных был реализован функционал импорта данных мероприятий в систему.

Импорт представляет собой преобразование внешних *xlsx* файлов, содержащих данные по мероприятию, в разработанную модель данных ИС, хранящуюся в СУБД.

Импорт мероприятий является ключевым функционалом системы, так как отвечает за создание данных в системе, а также открывает возможность для работы с ними (анализ, использование в рассылке).

Функционал реализован с использованием всех трех модулей архитектуры, но, основная часть работы — преобразование в модель, осуществляется на сервере, что показывает диаграмма последовательностей функционала импорта (рис. 3).

Рассылка приглашений

Одним из важных функциональных требований это автоматическая рассылка приглашений и оповещений участника мероприятий. В рамках ИС был реализован функционал верстки и отправки писем-приглашений участникам мероприятия. Реализация рассылки позволяет ускорить работу пользователя по сопровождению мероприятий, а также уменьшить вероятность ошибки при составлении письма или же его отправки самому.

Данный функционал разбит на две части: непосредственно отправка приглашений (рис. 4) и валидационный предпросмотр, позволяющий избежать массовой рассылки ошибочного письма (рис. 5).

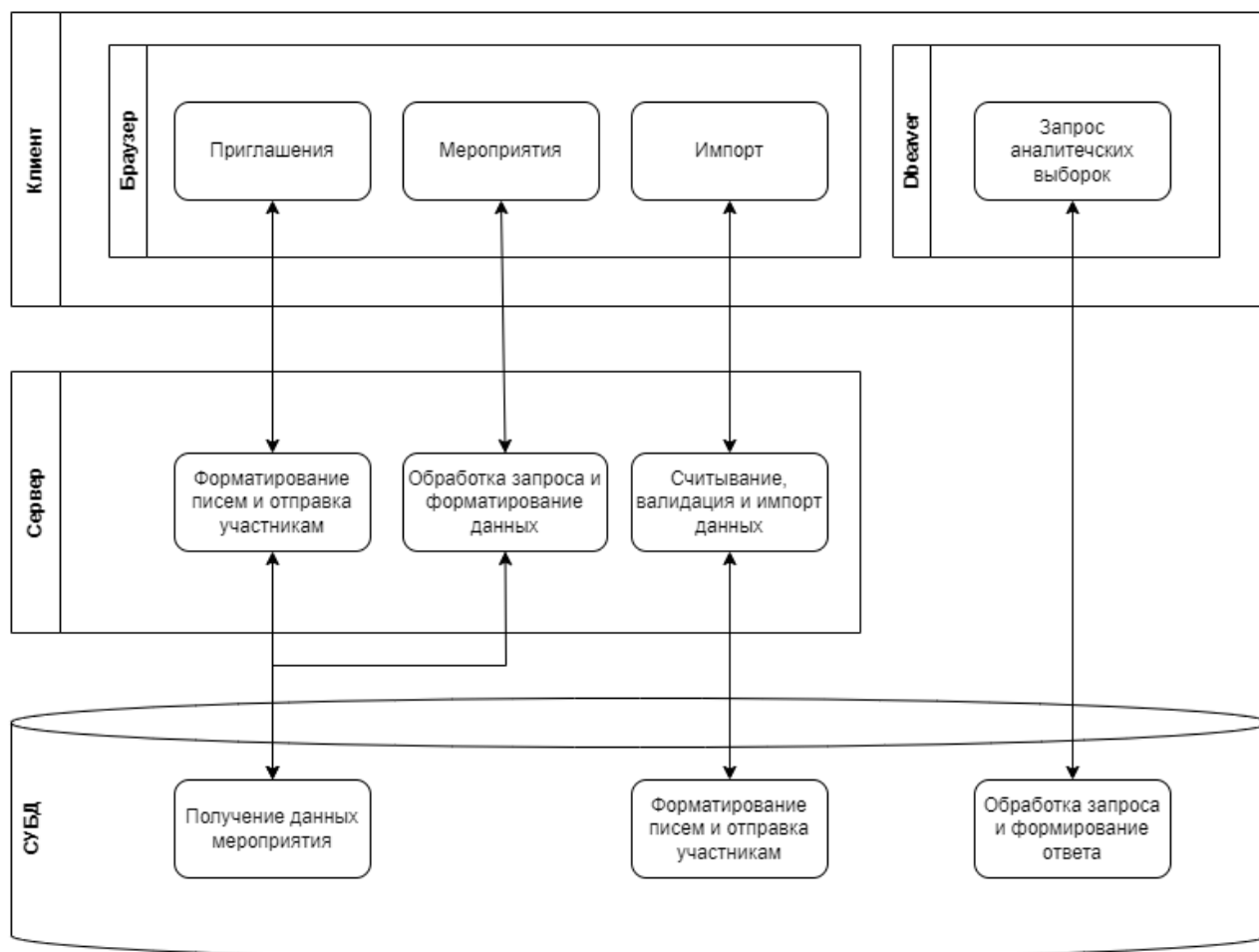


Рис.2. Логическая модель архитектуры

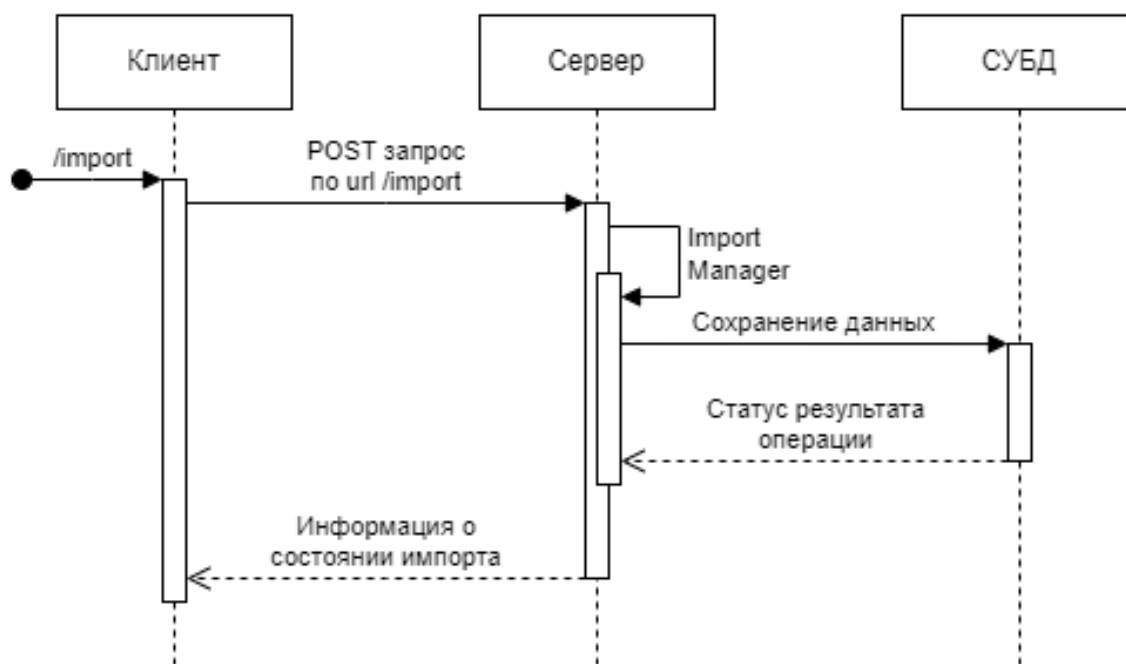


Рис.3. Диаграмма последовательностей функционала импорта

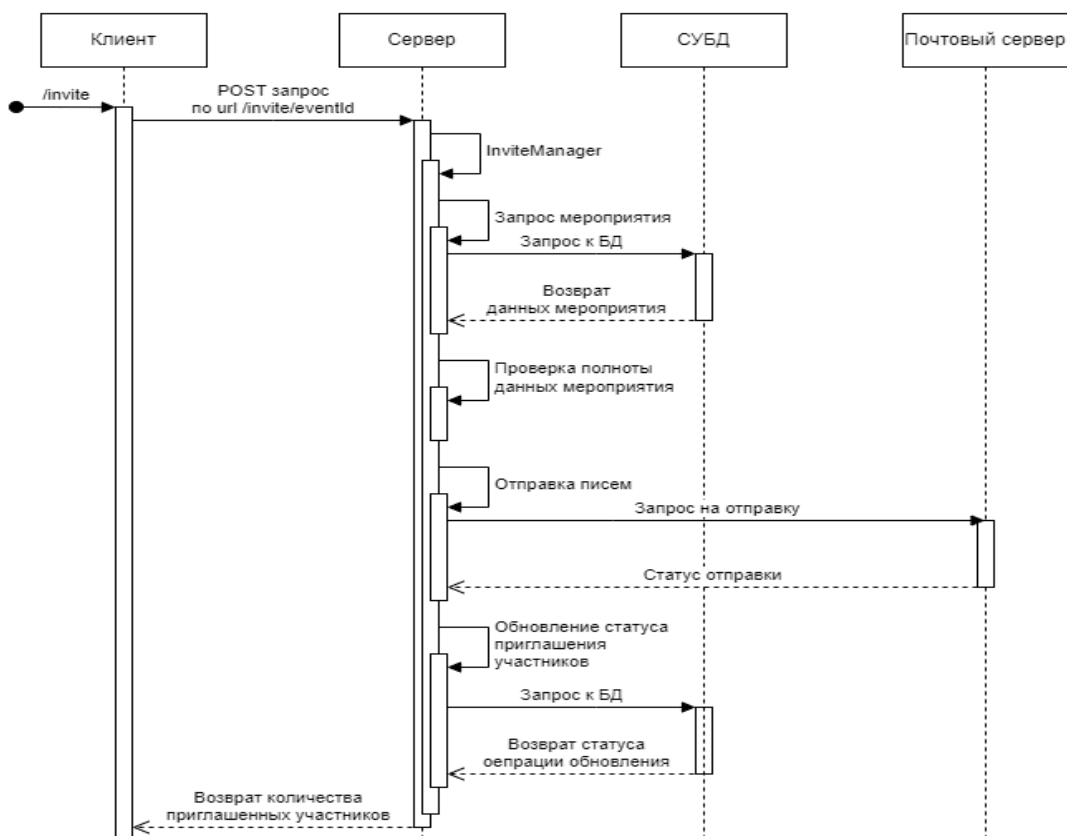


Рис.4. Диаграмма последовательностей функционала рассылки

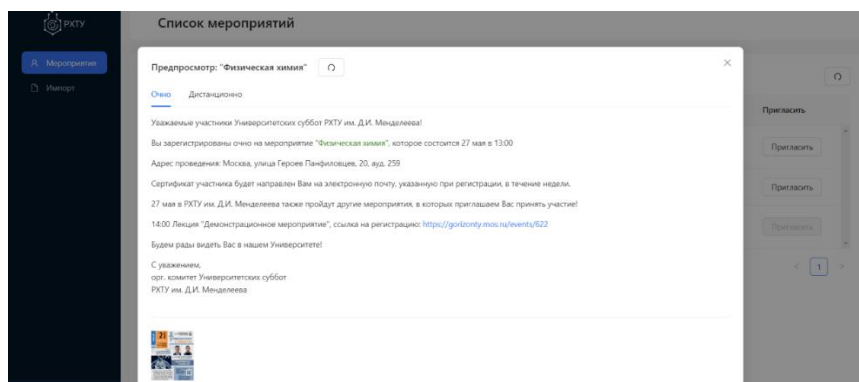


Рис.5. Валидационный предпросмотр

Отправка писем происходит через email. В ИС используется подключение к удаленному SMTP-серверу. На момент реализации системы данным сервером является почтовый сервис компании Mail.ru.

Но, в рамках разработки системы была предусмотрена возможность подключения к любому другому SMTP-серверу без правки кода, лишь поменяв параметры в файле настроек.

Заключение

Была разработана ИС «Университетские субботы», позволяющая осуществлять сопровождение мероприятий, и предоставляющая возможность получать аналитику по проведенным мероприятиям. Использование данной системы позволит сэкономить время и уменьшит объем

рутинной работы по сопровождению проводимых мероприятий.

Список литературы

1. «Выбираем базу данных» [Электронный ресурс]. – Режим доступа <https://nuancesprog.ru/p/5155> (дата обращения: 15.04.2024).
2. «Postgres Pro — СУБД для высоконагруженных систем» [Электронный ресурс]. – Режим доступа <https://postgrespro.ru/blog/media/5970129> (дата обращения: 15.04.2024).
3. Буров В. С. Автоматизация развертывания системы "умный город" // Информационные технологии. – 2019. – С. 134-135.

УДК 004.42

Ермолов А.Г., Клочков Д.Я., Грановский А.М., Кольцова Э.М.

Разработка информационной системы в области водородной энергетики

Ермолов Андрей Геннадьевич – студент 4 курса бакалавриата кафедры информационных компьютерных технологий; ermolovandrej@gmail.com;

Клочков Денис Ярославович – студент 4 курса бакалавриата кафедры информационных компьютерных технологий;

Грановский Артем Михайлович – студент 4 курса бакалавриата кафедры информационных компьютерных технологий;

Кольцова Элеонора Моисеевна – д.т.н., профессор, заведующий кафедрой информационных компьютерных технологий;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрен подход к созданию информационной системы в области водородной энергетики с применением фреймворка Laravel языка программирования PHP. Авторами проведён анализ предметной области и разработаны реляционная модель хранения данных, программные модули и логика взаимодействия между ними. Были отмечены и описаны использованные при разработке инструменты и модули фреймворка, сущности, модули и блоки модулей информационной системы, соединённые в единый конечный веб-ориентированный сервис. В качестве результатов разработки продемонстрированы сущность задаваемых одиночных свойств и аналитического модуля системы.

Ключевые слова: информационная система, водородная энергетика, реляционная модель данных, PHP, фреймворк Laravel.

Development of an information system in the field of hydrogen energy

Ermolov A.G., Klochkov D.Ja., Granovskii A.M., Koltsova E.M.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the approach of developing an information system in the field of hydrogen energy using the Laravel framework of the PHP programming language. The authors analyzed the subject area and developed a relational data storage model, software modules and the logic of interaction between them. The tools and modules of the framework used in the development, entities, modules and blocks of modules of the information system connected to a single final web-oriented service were noted and described. As the results of the development, the entity of the specified single properties and the analytical module of the system are demonstrated.

Key words: information system, hydrogen energy, relational data model, PHP, Laravel framework.

Введение

В современном мире запасы энергии становятся всё более ограниченными, а окружающая среда испытывает негативное влияние от традиционных источников энергии. Водородная энергетика является одним из перспективных направлений, предлагая использование водорода как экологически чистого и универсального альтернативного источника энергии. Внедрение экологичных технологий производства водорода и увеличение научной деятельности в этой области создаёт проблему хранения получаемых данных для дальнейшего исследования темы [1].

В связи с этим авторы данной работы предлагают создать информационную систему, хранящую в себе данные о материалах, используемых в водородной энергетике, их физических и химических характеристиках, структуре, электрохимических свойствах и других важных исследуемых параметрах. Система представляет собой веб-ориентированный сервис, позволяющий с использованием различных устройств в короткое время добавить или найти необходимую информацию среди большого количества данных. В данном случае для разработки выбран фреймворк Laravel, который отлично подходит для создания информационных систем и

API-методов, а также для интеграции с внешними ресурсами данных.

Анализируя подобные системы, авторы выяснили, что схожие продукты на данном фреймворке создаются в основном в коммерческих целях, в научных же работах они касаются других областей науки [2, 3]. В данной статье представлено более подробное описание фреймворка Laravel и его применение, а также сущностей разрабатываемой информационной системы.

Описание языка программирования и фреймворка

Язык программирования PHP популярен в сфере создания различных клиент-серверных веб-приложений, однако на сегодняшний день сложность программ сильно возросла, вследствие чего программный код в большинстве своём не разрабатывают с нуля [4]. Для ускорения и структурирования процесса разработки используют различные фреймворки, имеющие архитектурный шаблон Модель-Представление-Контроллер (MVC), где каждый компонент логически разделён и выполняет свою функцию:

- модель (Model) необходима для доступа к данным, их обработку и валидацию и выполнения операций с базой данных, таких как создание, чтение, обновление и удаление записей;
- представление (View) — для отображения данных пользователю;
- контроллер (Controller) — для обработки запросов от пользователя, извлечения данных из моделей, передачи данных в представление и выполнения необходимых действий.

PHP-фреймворк Laravel с открытым исходным кодом предназначен для разработки веб-приложений с помощью встроенных функций, которые активно используют разработчики [5]. Среди них выделяют следующие:

- интерфейс командной строки Artisan, позволяющего автоматически генерировать миграции, модели, контроллеры, тесты и т.д.;
- модульная упаковочная система с управлением зависимостями, позволяющая, не создавая с нуля, добавлять в код функциональные возможности.
- объектно-реляционное отображение базы данных с помощью механизма Eloquent ORM, представляющего таблицы в виде классов;
- система авторизации и аутентификации, автоматическое тестирование и многое другое.

Также в современной разработке активно используют Rest API архитектуру, которая, как считается, лучше всего применяется именно в данном фреймворке [4, 5].

Описание работы информационных систем во фреймворке Laravel

В Laravel модель хранения данных реализуется через две сущности фреймворка – *класс модели*, в котором описываются преобразования полей, отношения между сущностями и статические методы для работы с моделью, и *миграция*, где описываются практически все возможные операторы SQL [5].

Логика всей системы разрабатывается через *классы контроллеров* с набором методов для оперирования сущностями. Они взаимодействуют с *классами моделей* и оперируют данными сущностей системы, после чего данные преобразуются и передаются на публичную часть сервиса.

Визуальную часть информационной системы можно реализовать помощью стандартного шаблонизатора Blade с HTML и CSS, но в большинстве своём этим занимается front-end разработчики, используя, например, JavaScript-фреймворки.

Описание предметной области на программном уровне

При создании информационной системы прежде всего необходимо выделить основные сущности предметной области и разработать модели хранения данных. В работе [6] был описан подход к созданию модели хранения данных для области композитных материалов, на основе которой авторами разрабатывается информационная система в области водородной энергетики. Список основных сущностей модели данной работы представлены далее в таблице 1.

Таблица 1. Базовые сущности модели хранения данных

Сущность	Имя в модели хранения данных	Краткое описание
Элемент	elements, element_translations	Химические элементы таблицы Менделеева как элементарная сущность
Материал	materials, materials_translations	Материалы, состоящие из нескольких химических элементов
Образец	samples, sample_types, sample_types_translations	Образцы, над которыми проводят исследования и по которым хранят данные
Состав	compositions, composition_elements	Состав соединения – тип матрицы или наполнителя и процентное содержание
Матрица	matrix_types, matrix_type_closure, matrix_type_translations	Тип матрицы
Наполнитель	filler_types, filler_type_closure, matrix_type_translations	Тип наполнителя
Свойство	properties, property_translations, property_categories, property_category_translations, units, unit_translations,	Свойства и их базовые параметры – наименование и единицы измерения
Значения свойств	single_prop_values, multi_prop_values, multi_prop_tables, conditions	Значения свойств и зависимостей
Газовая фаза	gas_phase_compositions, gas_phase_elements, gas_phase_element_translations	Элементы газовой фазы как элементарная сущность
Источник	articles, article_translations, article_categories, article_category_translations, countries, country_translations	Литературные источники – хранят данные по материалам

Информационная система должна хранить и отображать данные по образцам и их составляющим. Они могут быть разного типа и с разным количеством компонентов, вследствие чего исходя из его состава пользователи смогут выбрать:

- простой тип образца — компонент состоит из одного материала со 100% содержанием;
- композитный материал: — компонент состоит из более чем одного материала, при этом в материалах можно задавать содержания вместе с типом матрицы и наполнителя;
- ячейку — может состоять из более чем одного материала. В материалах может быть как обычный материал, так и композитный. Также указывается тип ячейки – катод, анод, электролит. В ходе программной реализации был доработан модуль, отвечающий за состав образца. На данный

момент в нём реализованы методы сохранения одиночных и множественных свойств. Данные этого раздела в дальнейшем будут использоваться в задаче аналитики данных — по образцам и по статьям. Хранение множественных свойств подразумевает заполнение из разных статей, вследствие чего нужно было проработать связку образец–статья–множественный свойства. Для реализации хранения были созданы соответствующие таблицы, позволяющие хранить привязку образца и статьи вместе с несколькими значениями свойства. В схеме базы данных за это отвечают таблицы: *multi_prop_tables*, *multi_prop_values*, *properties*, *conditions* и *gas_phase_compositions*. Структура базы данных с данными таблицами изображена на рисунке 1.

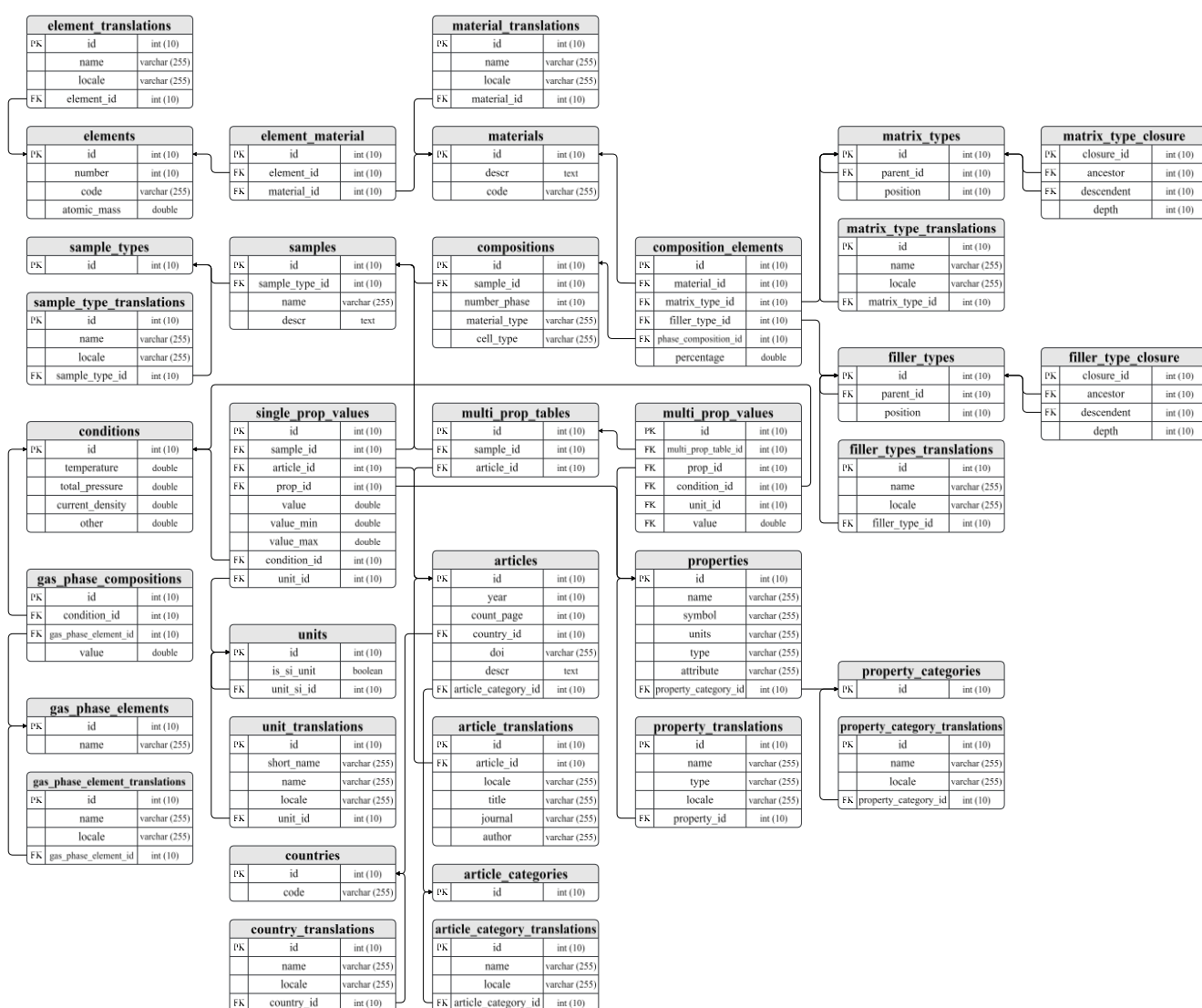


Рис.1 Структурная схема модели предметной области.

Представление работы аналитического модуля информационной системы

Аналитический модуль состоит из графической аналитики, в котором можно отобразить графики по образцам или статьям. В каждом из разделов графической аналитики выбирается зависимое свойство и основное, также можно указать шкалу

измерения координат. На самом графике (рисунок 2) предусмотрена динамическая настройка шкал — максимальные и минимальные значения, шаг, цвет. Под графиком находится легенда с данными об образце и статьях.

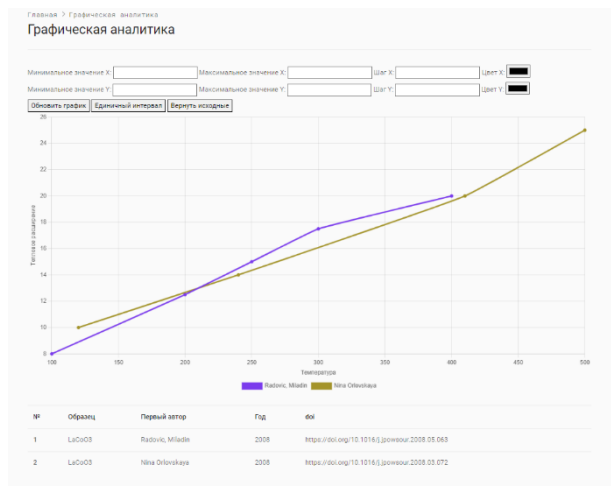


Рис.2 Графическая аналитика.

Дальнейшее развитие аналитического модуля: построение перекрёстных сравнений и дальнейшая обработка этих данных и аналитика по различным проектам – электрохимические, термодинамические и другие.

Заключение

В данной работе представлена информационная система в области водородной энергетики, разработанная с использованием фреймворка Laravel. Система отражает ключевые сущности предметной области и включает в себя модель хранения данных.

Авторы учли возможные нагрузки из-за большого объема данных и увеличения числа пользователей.

Они продолжают работу над улучшением системы и рассматривают возможность ее дальнейшего расширения. Эта работа представляет собой значительный вклад в развитие информационных систем в области водородной энергетики.

Список литературы

1. Felderhoff M. Hydrogen storage: the remaining scientific and technological challenges // Phys. Chem. Chem. Phys. 2007. Vol. 9, № 21. P. 2643–2653.
2. Ji Y., Yao X., Liu S., Ma C., Tian M., Yuan T., Li L. Development and application of agriculture data collection and management system based on Laravel framework. Acta Agriculturae Shanghai, 2019, vol. 35, no. 4, pp. 107–113.
3. Yunita L., Nurjayadi M., Hariwibowo H. Developing the Computer-Based Test (CBT) on the basic chemistry throughout a web-based application. J. of Physics: Conf. Ser., 2021, vol. 1869, no. 1, art. 012026. DOI: 10.1088/1742-6596/1869/1/012026.
4. Скляр Д. Руководство по созданию интерактивных веб-сайтов // Вильямс, 2017. С. 464.
5. Stauffer M. Laravel: Up & Running: A Framework for Building Modern PHP Apps. CA, O'Reilly Media Publ., 2019, 531 p.
6. Кольцова Э.М., Кириллов Н.Д. Разработка модели хранения данных для области композитных материалов // Вестн. Академии Международных Исследований. Информатика, Экология, Экономика. 2020. Т. 22. С. 34–41.

УДК 004.93:331.103.255

Иванов А.А., Васецкий А.М., Приходько В.Н.

Методика автоматизации контроля посещаемости очных занятий по опыту кафедры информационных компьютерных технологий

Иванов Артемий Андреевич – студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Васецкий Алексей Михайлович – старший преподаватель кафедры информационных компьютерных технологий;

Приходько Валентина Николаевна – старший преподаватель кафедры информационных компьютерных технологий;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В работе представлена методика контроля посещения занятий с использованием Google таблиц и сканера QR-кодов. С помощью достаточно простых и доступных средств автоматизации, не требующих программистских решений удалось сократить потери времени занятий на контроль посещаемости больших потоков обучающихся.

Ключевые слова: посещаемость, контроль, автоматизация, таблицы, QR-код

Methodology for automating attendance control of face-to-face courses based on the experience of the Department of Information Computer Technologies

Vasetsky A.M., Filippova E.B., Prikhodko V.N.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The paper presents a method for monitoring class attendance using Google spreadsheets and a QR code scanner. With the help of fairly simple and accessible automation tools that do not require programming solutions, it was possible to reduce the loss of class time for monitoring the attendance of large flows of students.

Key words: attendance, control, automation, tables QR-code

Введение

Контроль посещаемости занятий – важная составляющая учебного процесса. Результатом такого контроля может быть стимулирование обучающихся к посещению занятий путем добавления им рейтинговых баллов за каждое посещение. Однако в случае больших потоков в несколько десятков человек такой контроль может представлять определенные сложности.

На практике преподаватели используют различные методы для осуществления подобного контроля, которые имеют те или иные недостатки.

Переключка – надёжный метод, однако, для больших потоков занимает слишком много времени. Например, для потока около ста человек она может занимать примерно 15 минут. Кроме того, она не дает гарантии присутствия человека, поскольку за него может откликнуться его товарищ, а в условиях цейтнота преподавателю довольно сложно отследить такой отклик.

Отметка посещения старостами – быстрый, но самый неэффективный метод. Поскольку практика показывает, что старосты либо кого-то не замечают в силу невнимательности или по иным причинам, или же отмечают отсутствующих как присутствующих на занятии в силу личных привязанностей или коллективизма.

Регистрация по пропуску – быстрый метод. Однако при его использовании здесь возможны сложности, связанные с разглашением персональных данных студентов при доступе к базе пропусков.

Различные мобильные системы регистрации – в последнее время разрабатывается ряд подобных систем, которые обеспечивают регистрацию обучающихся на территории учебного заведения. Их недостаток в том, что, как правило, они не способны локализовать присутствие обучающегося в конкретной аудитории. Так же, как и регистрация по пропуску требуют доступа к базам данных с доступом к персональным данным.

Личная роспись обучающегося в журнале посещения – более медленный метод, чем отметка старостами. Имеет те же недостатки, что и переключка. Помимо прочего, создаются очереди к журналу. Однако данный метод допускает возможность его автоматизации с использованием компьютерных технологий. Причём без угрозы разглашения персональных данных.

Основная часть

По опыту чтения лекций, нами была разработана методика построения информационной системы, которая позволяет намного сократить время регистрации обучающихся. Причём её аналог может создать любой преподаватель, поскольку в ней не используется программирование. Она базируется на считывании цифровых QR-кодов и её основными составляющими являются Google таблицы и мобильное приложение для считывания QR-кодов.

Google таблицы служат для генерации QR-кодов, а также для хранения журнала посещения. В случае

невозможности использования Google таблиц в силу каких-либо ограничений, QR-коды могут генерироваться любым другим методом.

Вторым компонентом служит мобильное приложение, предназначенное для считывания QR-кодов с телефонов обучающихся. Основное требование к нему, это максимально быстрое считывание QR-кода, его расшифровка на экране для

контроля его правильности, и сохранение в виде текстового или CSV-файла.

Рассмотрим основные этапы построения данной информационной системы.

Исходными данными является список обучающихся, который находится в Google таблицах. Обычно, это журнал групп в виде нескольких вкладок, по одной на каждую группу. На рис. 1 представлен пример такого журнала.

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
		КС-20/2023-24										
	ID	ФИО	6/9	7/9	7/9	20/9	21/9	21/9	4/10	5/10	5/10	18/10
1	v1	Матвей Сергеевич	+		2	+			н			
2	v2	Егор Вячеславович	+		1	+	1		+			
3	v3	Анна Алексеевна	+		2	+	1	4	+	1		
4	v4	Павел Алексеевич	+		2	+	1	4	+	1		
5	v5	Заурбек Алиевич	+		2	н		3,2	+	1	3,2	
6	v6	Павел Юрьевич	+		2	+	1	3,5	н	1		
7	v7	Даниил Максимович	+		2	+			н			

Рис. 1. Пример электронного журнала группы преподавателя

Для начала требуется сгенерировать QR-коды для каждого обучающегося. Для этого используются возможности Google таблиц, которых нет у ряда подобных продуктов. На первом этапе следует создать запись, которая будет закодирована в QR-коде. Особенностью генератора QR-кодов Google таблиц является необходимость отсутствия пробелов в кодируемой строке. Поэтому задачей вспомогательного скрипта является сборка целевой строки без пробелов. Рекомендуется формировать данную строку на основании ФИО студента и номера группы. Можно включить и иную вспомогательную информацию пригодную для дальнейшей обработки.

Отдельно следует заметить, что в случае отказа студента использовать свои ФИО для подобных целей, можно использовать любой другой уникальный персональный идентификатор.

Пример формулы, которая производит преобразование исходного текста в данные для QR-кода, приведен ниже. Пусть в ячейке C3 находится строка «Иванов Иван Иванович», а в ячейке C1 строка «_КС-20/2023-24. Поместим в ячейку C8 формулу (1), формирующую строку для кодирования в QR-код:

$$=SUBSTITUTE(\$C3;" ";"_") & \$C\$1 \quad (1)$$

Легко видеть, что формула (1) просто заменяет пробелы на знаки подчёркивания и добавляет в конец строки постоянную строку из ячейки C1.

Разместим в ячейке D8 формулу (2), которая будет генерировать QR-код на основании значения ячейки C8:

$$=image("https://chart.googleapis.com/chart?cht=qr&chs=250x250&chl=" & C8) \quad (2)$$

Для корректности отображения QR-кода потребуется вручную расширить границы строк, содержащих QR-коды. Это делается путем их выделения и использования контекстного меню, вызываемого правой клавишей мыши, как показано на рис. 2. Далее задается высота строки, достаточного размера. Здесь можно рекомендовать подобрать такой размер, чтобы на экране телефона помещалось не более одного QR-кода.

Формулы 8-й строки (C8 – D8) можно распространять вниз на любое количество строк. На этом подготовительная часть работы будет завершена. Результат заполнения двух строк приведен на рис. 3.

Далее обучающиеся открывают свой QR-код на смартфоне прямо со страницы журнала, или предварительно скопировав его в память телефона. На выходе из аудитории они демонстрируют его на экране контролирующему преподавателю, который считывает эти коды с помощью приложения-сканера на своем смартфоне или планшете.

Для считывания QR-кодов можно применять разные приложения, благо их существует довольно большое количество. Однако по опыту использования подобных программных продуктов были выдвинуты следующие требования к ним:

- автоматическое сканирование QR-кодов – для считывания не должны осуществляться никакие дополнительные действия кроме наведения на код и автоматической фокусировки камеры;

- импорт считанных данных напрямую в Google таблицы или в виде некоторого результирующего файла, который можно легко конвертировать в них.

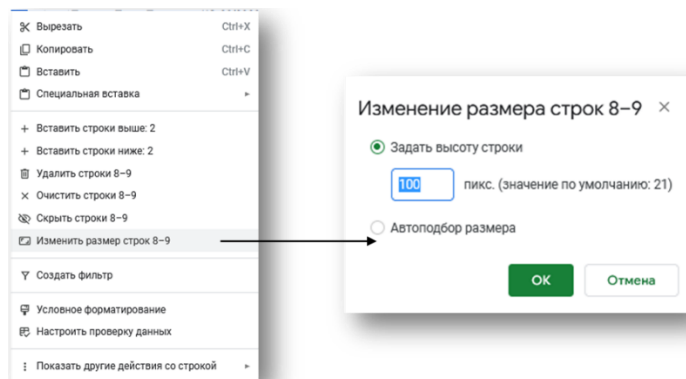


Рис. 2. Контекстное меню для изменения ширины строк

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1			КС-20/2023-24											
2		ID	ФИО	06.09	07.09	07.09	20.09	21.09	21.09	04.10	05.10	05.10	18.10	19.10
3	1	v1	Иванов Иван Иванович	+			Н			Н				
4	2	v2	Петров Петр Петрович	+			Н			Н				
5														
6														
7														
8	1	v1	Иванов_Иван_Иванович_КС-20/2023-24											
9	2	v2	Петров_Петр_Петрович_КС-20/2023-24											

Рис. 3. Пример генерации персональных QR-кодов

При предварительном тестировании были использованы два мобильных приложения: «Scan-IT to Office» (100 тыс.+ скачиваний) [1] и «QR and Barcode Scanner» («Сканер QR и штрих-кодов») компании Gamma Play (100 млн.+ скачиваний) [2].

«Scan-IT to Office» – это комплексное решение для мобильного сбора данных и сканирования штрих-кодов. С помощью мобильного приложения (доступно для Android и iOS) собираются данные штрих-кодов, изображения, геоданные GPS. Далее можно передать эти данные в компьютерные приложения (Windows и macOS), электронные таблицы Excel, документы, базы данных и прочие целевые приложения.

«QR and Barcode Scanner» – позиционируется производителем, как самый быстрый сканер кодов.

Преимуществом «Scan-IT to Office» является то, что данные из него могут быть напрямую записаны в Google таблицы. Но его недостатком является необходимость ручного сканирования кодов, в то время как «QR and Barcode Scanner» производит сканирование автоматически. Другим недостатком «Scan-IT to Office» явилось то, что он оказался очень медленным при фокусировке. Оба этих недостатка

сильно замедлили процесс сканирования с использованием данного приложения.

«QR and Barcode Scanner» может работать в пакетном режиме, собирая все считанные данные в единый файл, который удобно в дальнейшем импортировать, как в Google таблицы, так и в любое аналогичное приложение. С учётом быстродействия этого приложения выбор был сделан именно в его пользу.

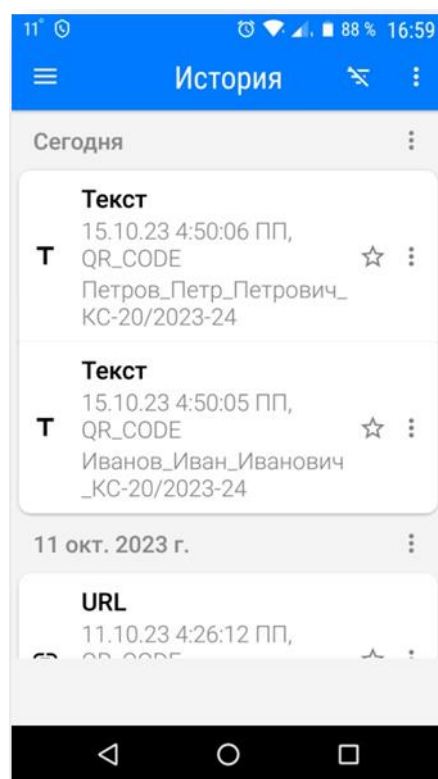
Обработка в пакетном режиме потока из примерно 80 присутствующих на занятии обучающихся занимает около пяти минут.

Пример скриншота мобильного приложения QR and Barcode Scanner показан на рис. 4а. Следует обратить внимание, чтобы на экране у обучающихся находился только один QR-код. Иначе приложение очень быстро считает оба и придется в ручном режиме удалять неправильный код, что отнимает некоторое время.

Далее возможно два варианта. Можно сохранить текущие данные в CSV-формате. Его вид показан на рис. 5. Процедура импорта CSV-файла в Google таблицы достаточно просто изложена, например, в [3]. Аналогично производится импорт и в другие табличные редакторы.



а



б

Рис. 4. Экран QR and Barcode Scanner в пакетном режиме работы (а); экран QR and Barcode Scanner. Раздел «История» (б)

1	date,time,Часовой пояс,format,text,favorite,date_utc,time_utc,notes,details
2	10-15-2023,16:50:06,"Москва, стандартное время",QR_CODE,Петров_Петр_Петрович_КС-20/2023-24,0,10-15-2023,16:50:06,,
3	10-15-2023,16:50:05,"Москва, стандартное время",QR_CODE,Иванов_Иван_Иванович_КС-20/2023-24,0,10-15-2023,16:50:05,,
4	

Рис. 5. Результирующий CSV-файл

Если не планируется использовать данные о дате и времени посещения, то можно ограничиться упрощенным текстовым форматом, который легче импортируется в таблицы просто через буфер обмена без специальной процедуры, которая требуется для CSV-файлов.

Сохранение текстового файла производится из раздела «История» совершенно аналогично CSV-файлу. Пример сохранённого текстового файла представлен на рис. 6.

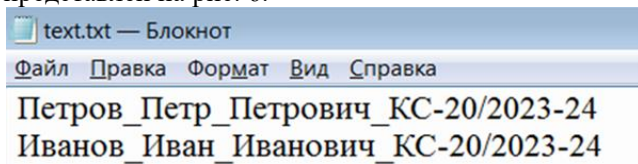


Рис. 6. Пример результирующего текстового файла

После перенесения в журнал данных QR-кодов последним шагом является их обработка. Итогом обработки данных является проставление условного знака «+»/«н», отмечающих присутствие.

Для автоматизации данного процесса также можно воспользоваться достаточно простой формулой (3).

$$=if(ISERROR(MATCH(C8;C11:C12;0)); "н";"+") \quad (3)$$

Где в ячейке C8 содержится эталон QR-кода (см. рис. 3), а в диапазоне C11:C12 содержится скопированный из CSV-файла или текстового файла список считанных QR-кодов. Приведенная формула (3) просто сопоставляет их и в случае нахождения соответствия заданному коду в списке считанных кодов проставляет «+», а в случае неудачи «н». Пример работы формулы (3) также представлен на рис. 3. Даты в журнале даны условные.

Заключение

Данная методика была успешно опробована на ряде занятий кафедры информационных компьютерных технологий РХТУ им. Д.И. Менделеева для контроля посещаемости студентов. Экономия времени на самом занятии составила более десяти минут по сравнению с традиционной переключкой. Количество студентов на занятиях колебалось в среднем от 70 до 100 человек.

В ходе апробации данной методики были выработаны следующие рекомендации:

- Следует заранее оповещать обучающихся о необходимости представлять только один QR-код на экране. Поскольку если на нём представлено больше кодов, то они считаются все сразу.

- При изменении фамилии или иной информации, следует отдельно напомнить об этом обучающемуся, т.к. использование старого варианта QR-кода приводит к некорректному подсчёту посещений.

- Проверку посещения целесообразно производить на выходе из аудитории, поскольку так удобнее избегать повторного показа кодов.

- Контроль досрочно покидающих занятие обучающихся можно осуществлять с использованием CSV-файлов, где присутствуют временные отметки.

- Если существует необходимость контроля опоздавших, тогда можно производить проверку, наоборот, при входе в аудиторию. По тому же CSV-файлу в таком случае можно определить точное время опоздания. Но данный вариант является более трудоёмким, поскольку количество опоздавших, как правило, превышает количество досрочно покидающих занятие. Кроме того, заполнение

аудитории может происходить за достаточно длительный отрезок времени, в ходе которого сложно контролировать передвижение в ней.

Представленный метод не может считаться идеальным. Однако простота в его использовании явилось большим подспорьем в организации учебного процесса, позволив сэкономить достаточно много учебного времени.

Список литературы

1. Scan-IT to Office Удаленный сбор данных и сканирование штрихкодов : сайт. URL: <https://www.tec-it.com/ru/software/mobile-data-acquisition/scan-it-to-office/overview/Default.aspx> (дата обращения: 15.10.2023)

2. Gamma Play : официальный сайт. URL: <https://gammaplay.com/> (дата обращения: 15.10.2023)

3. Как открыть CSV в Google Таблицах : сайт. URL: <https://btip.ru/kak-otkryt-csv-v-google-tabliczah/> (дата обращения: 15.10.2023)

УДК 66.083

Кислинская А.Ю., Парфильева Я.В., Цыганков П.Ю.

Микронизация фавипиравира с использованием быстрого расширения сверхкритического раствора

Кислинская Алина Юрьевна – аспирант 3-го года обучения кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, kislinskaia.a.i@muctr.ru

Парфильева Яна Вячеславовна – студент 1-го года магистратуры кафедры химического и фармацевтического инжиниринга.

Цыганков Павел Юрьевич – кандидат технических наук, доцент, научный сотрудник кафедры химического и фармацевтического инжиниринга;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье описан процесс микронизации фавипиравира с помощью быстрого расширения сверхкритического раствора. Представлены результаты аналитических исследований сканирующей электронной микроскопии, распределения частиц по размерам, рентгенофазового анализа исходных частиц и полученных с помощью данного процесса при 338 К и 20 МПа. Проведены сравнительные исследования проницаемости через мембрану исходных частиц фавипиравира и микронизированных. Средний размер исходных частиц составил 12,5 мкм, в результате микронизации были получены частицы со средним размером 0,4 мкм преимущественно с аморфной структурой.

Ключевые слова: сверхкритическая микронизация, быстрое расширение сверхкритического раствора, фавипиравир, нано-, микрочастицы.

Micronization of favipiravir using rapid expansion of a supercritical solution

Kislinskaya A.Yu., Parfileva Ya.V., Tsygankov P. Yu.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article describes the micronization process of favipiravir using the rapid expansion of a supercritical solution. The results of analytical studies of scanning electron microscopy, particle size distribution, X-ray phase analysis of the original particles and those obtained using this process at 338 K and 20 MPa are presented. Comparative studies of the membrane permeability of original favipiravir particles and micronized ones were carried out. The average size of the initial particles was 12.5 μm ; as a result of micronization, particles with an average size of 0.4 μm were obtained, predominantly with an amorphous structure.

Key words: supercritical micronization, rapid expansion of supercritical solution, favipiravir, nano-, microparticles.

Введение

При разработке лекарственных средств одной из наиболее серьезных проблем является их ограниченная терапевтическая активность. В свою очередь ограниченная терапевтическая активность вызвана низкой биодоступностью в следствии плохой растворимости и низкой скорости растворения активных фармацевтических субстанций (АФС). Если АФС имеет плохую растворимость в воде и низкую скорость растворения в месте введения, для диффузии становятся доступными только небольшие количества АФС. Это приводит к недостаточной концентрации препарата в органе-мишени и неэффективности лечения. Поскольку биодоступность препаратов зависит от скорости растворения и всасывания, для достижения заданной концентрации препарата в крови необходимы современные и эффективные методы увеличения скорости растворения. Перспективным решением проблемы низкой растворимости является уменьшение размера частиц АФС до микро- и нанометров [1].

Удельная поверхность частиц увеличивается за счет уменьшения размера частиц, что улучшает скорость их растворения. Среди известных методов получения нано- и микрочастиц можно выделить процессы, основанные на использовании

сверхкритических флюидов (СКФ). Преимущества таких технологий основаны на свойствах, которые способны проявлять вещества в сверхкритическом состоянии: высокая диффузионная способность, регулируемая плотность, которая влияет на растворяющую способность [2]. Технологии с использованием сверхкритических флюидов, в частности сверхкритического диоксида углерода (СК- CO_2), являются перспективными благодаря низкой температуры ($T_{\text{кр}} = 31,1^\circ\text{C}$) перехода диоксида углерода в сверхкритическое состояние, что обуславливает возможность работы с термолабильными соединениями [3-5].

Среди процессов сверхкритической микронизации технология быстрого расширения сверхкритических растворов (RESS, англ. – rapid expansion of supercritical solutions, сокращенно) основана на использовании растворяющей способности сверхкритического флюида в зависимости от его плотности. Реализация процесса не включает использование токсичных органических растворителей, изменяя свойства СКФ варьированием давления и температуры возможно получать частицы АФС заданного размера, что является важным для фармацевтической промышленности [6].

В данной работе в качестве микронизируемого вещества был выбран фавипиравир, который оказывает противовирусное действие. В России фавипиравир включён в рекомендации по лечению COVID-19 и в список жизненно необходимых и важнейших лекарственных препаратов Минздрава России. Микронизация фавипиравира является актуальной в связи с его плохой растворимостью в воде в соответствии с Фармакопейной статьей [7].

Экспериментальная часть

На рис. 1 представлен общий внешний вид лабораторной установки для проведения процесса RESS.

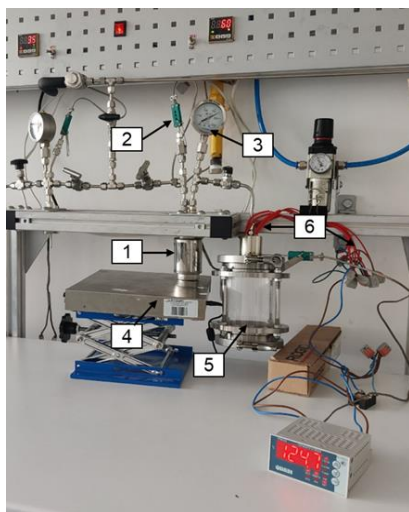


Рис.1. Внешний вид лабораторной установки для проведения процесса быстрого расширения сверхкритических растворов:

1 – ёмкость высокого давления (с нагревательной рубашкой); 2 – термопара; 3 – манометр; 4 – магнитная мешалка на регулируемой стойке; 5 – камера расширения; 6 – нагревательная система.

Представленная установка состоит из двух основных частей: камеры растворения (1) и камеры расширения (5), в которых последовательно протекают соответствующие процессы. Камера растворения, объем которой 60 мл оснащена нагревательной рубашкой. В камере происходит растворение вещества в СК-СО₂. Для интенсификации процесса растворения установлена магнитная мешалка. Давление в камере растворения регистрируется манометром PI2. Температура регулируется за счёт нагревательной системы, состоящей из термопары, встроенной в аппарат высокого давления и подключённой к регулятору. Из камеры растворения при открытии игольчатого вентиля через форсунку сверхкритический диоксид углерода с растворённым веществом поступает в камеру расширения (5). При резком уменьшении давления снижается плотность и вместе с ней растворяющая способность диоксида углерода. Уменьшение плотности приводит к перенасыщению раствора и формированию микро- и наночастиц растворенного вещества. При этом диоксид углерода переходит в газообразное состояние.

Микронизированные частицы вещества собираются на фильтре, а диоксид углерода выводится через нижнюю перфорированную крышку камеры расширения.

На основании приведенных данных по растворимости фавипиравира в СК-СО₂ (рис.2) были выбраны температура и давление на стадии растворения, равные 338 К и 20 МПа [8].

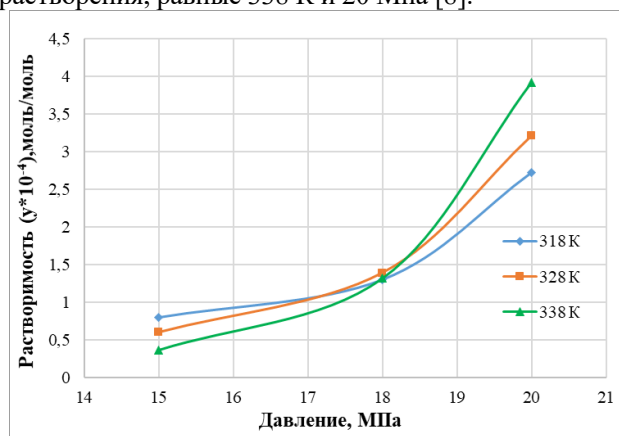


Рис.2. График зависимости растворимости фавипиравира в сверхкритическом диоксиде углерода от давления при температурах 318, 328 и 338 К.

Первым этапом микронизации фавипиравира методом быстрого расширения сверхкритического раствора является загрузка в аппарат высокого давления, объемом 60 мл.

Далее в аппарат высокого давления подается диоксид углерода, достигаются параметры: давление 15-20 МПа и температура 318-338 К. Давление в аппарате измеряется манометром. Для поддержания постоянной температуры аппарат оборудован нагревательной рубашкой, которая управляется терморегулятором.

Следующий этап процесса – растворение фавипиравира в СК-СО₂ в течение 40 минут. Магнитная мешалка используется для интенсификации процесса растворения.

Последний этап – распыление раствора фавипиравира и СК-СО₂ через распылительную форсунку в камеру расширения. Температура на форсунке – 348 К.

Распыление раствора диоксида углерода и фавипиравира проводилось в импульсном режиме, что связано с конструктивными особенностями установки. Всего было произведено 10 импульсов с интервалом 10 минут, продолжительность каждого импульса составляла 5 секунд. Полученные частицы осаждались на фильтре в нижней части камеры расширения.

Фавипиравир до микронизации представлен в виде крупных частиц неоднородной формы. Частицы фавипиравира, микронизированные с помощью RESS, представлены в виде агломератов, однако размер отдельных частиц составляет менее 1 мкм.

С помощью программы ImageJ были обработаны СЭМ-изображения и построены дифференциальные графики распределения частиц микронизированного фавипиравира по размерам (рис.3).

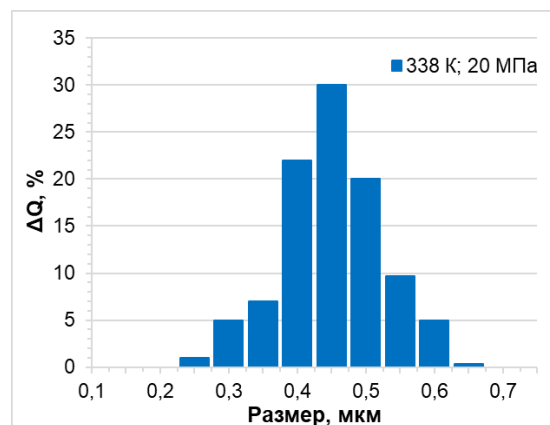
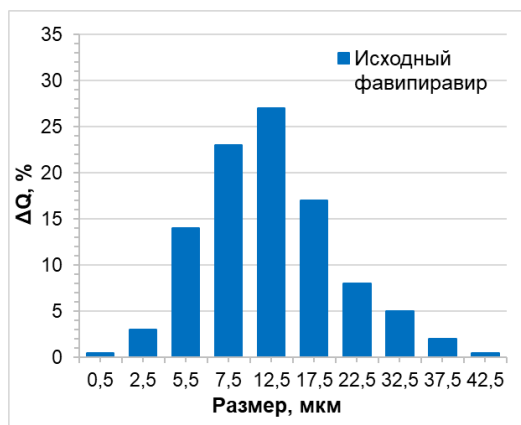


Рис.3. Графики распределения частиц по размерам: а – исходного фавипиравира; б – микронизированного при 338 К и 20 МПа.

Средний размер частиц до микронизации составил 12,5 мкм, после процесса RESS средний размер частиц уменьшился 0,45 мкм.

Были проведены сравнительные исследования проницаемости через мембрану исходных частиц фавипиравира и частиц, полученных после быстрого расширения сверхкритического раствора. Для исследования проницаемости были выбраны частицы, микронизированные при 338 К 20 МПа, средний размер которых оказался наименьшим – 0,45 мкм.

Исследование проводилось на ручном трансдермальном диффузионном тестере DHC-6T (рис. 4).



Рис.4. Трансдермальный диффузионный тестер DHC-6T.

Вначале прозрачный диск поддержки и кольцо вставляются в пружинный зажим, далее кладутся на рабочее место в перевернутом состоянии. Далее включается нагрев до 37 °С и проводится заполнение ячейки фосфатным буфером с pH 7,4. Ячейку необходимо доверху наполнить, чтобы гарантировать контакт мембраны со средой растворения. Проводится заполнение пяти камер тестируемыми сухими частица массой по 3 мг. Частицы помещаются поверх искусственной мембраны таким образом, чтобы мембрана контактировала с тестируемой

средой при надетом сверху пружинном зажиме, подготовленном ранее. Как только была достигнута необходимая температура, начинается эксперимент путем закрепления подготовленного держателя на ячейке и активирования мешалки. Должны быть проведены все подготовительные мероприятия для предотвращения попадания пузырьков воздуха внутрь ячейки. Отбор проб производился в следующих временных точках по 5 мл: 2,5, 5, 10, 15 и 30 минут. Ячейка вертикальной диффузии снабжена двумя портами для отбора/замены тестовой среды и тестируемого образца соответственно.

Был проведен УФ-анализ полученных проб на спектрофотометре UNICO 2800. По полученной калибровочной кривой были определены концентрации частиц фавипиравира до и после микронизации, прошедшие через мембраны за установленное время.

По полученной кривой была рассчитана концентрация фавипиравира по уравнению (1) исходя из оптической плотности, соответствующей длине волны 362 нм на УФ-спектрах по результатам спектрофотометрии.

$$C_i = \frac{C_t \cdot 100}{0,45} \quad (1)$$

где C_i – доля частиц, прошедших через мембрану, %;

C_t – концентрация раствора при определенной временной точке;

0,45 мг/мл – максимальная концентрация частиц, которая может раствориться в 7 мл ячейки.

На рис. 5 изображены графики проницаемости частиц через мембраны за определенные промежутки времени для исходного фавипиравира и полученного после RESS.

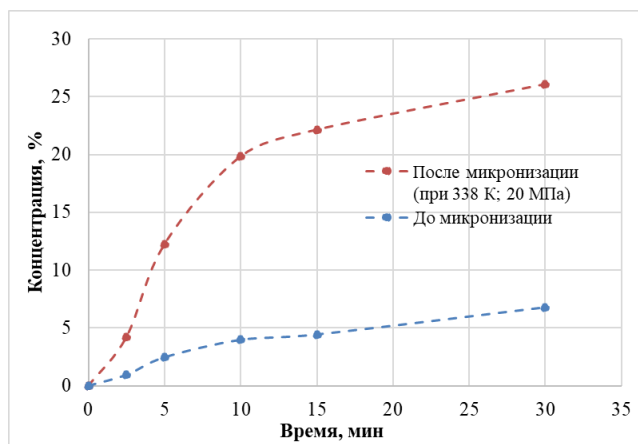


Рис. 5. Кривые проницаемости частиц до и после микронизации с использованием RESS

Концентрация частиц фавипиравира после RESS, прошедших через мембрану через 30 минут увеличилась до 23% по сравнению с частицами до RESS (через 4,8 %).

Заключение

Был проведен процесс быстрого расширения сверхкритических растворов для микронизации фавипиравира при температуре 338 К и давлении 20 МПа. Получены частицы фавипиравира с наименьшим размером 0,45 мкм. По результатам проницаемости фавипиравира через мембрану с помощью трансдермального диффузионного тестера было выявлено, что концентрация частиц фавипиравира после RESS, прошедших через мембрану через 30 минут увеличилась до 23% по сравнению с частицами до RESS (через 4,8 %). Таким образом микронизация частиц с помощью процесса быстрого расширения сверхкритического раствора является перспективным методом увеличения скорости растворения и проницаемости АФС, что в перспективе будет способствовать увеличению биодоступности плохо растворимых в воде субстанций.

Выполнено в рамках государственного задания (проект FSSM-2022-0004).

Список литературы

1. Kumar R. et al. A critical review on the particle generation and other applications of rapid expansion of supercritical solution //International Journal of Pharmaceutics. – 2021. – V. 608. – P. 121089.
2. Гильмутдинов И. И. и др. Получение композиционных материалов быстрым расширением сверхкритических флюидов //Вестник Казанского технологического университета. – 2012. – Т. 15, №. 9. – С. 59-61.
3. Залепугин Д. Ю., Тилькунова Н. А., Чернышова И. В. Использование сверхкритических флюидов для получения нано-и микроформ фармацевтических субстанций //Сверхкритические флюиды: теория и практика. – 2008. – Т. 3, №. 1. – С. 5-23.
4. Sunder S., Nair R. Methods of nanonization of drugs for enhancing their dissolution //Eur. J. Adv. Eng. Tech. – 2016. – V. 3, №. 8. – P. 101-110.
5. S. Karthika, T. Radhakrishnan, P. Kalaichelvi, A review of classical and nonclassical nucleation theories, Cryst. Growth Des. 16 (2016) 6663–6681
6. Türk M. Particle synthesis by rapid expansion of supercritical solutions (RESS): Current state, further perspectives and needs //Journal of Aerosol Science. – 2022. – V. 161. – P. 105950.
7. Институт фармакопеи и стандартизации в сфере обращения лекарственных средств. – Москва. – URL: <https://pharmacopoeia.regmed.ru/pharmacopoeia-projects/izdanie-15/2/2-1/favipiravir/?vers=3819&projects=Y&comments=y> (дата обращения 29.05.2024 г.)
8. Sajadian S. A. et al. Solubility of favipiravir (as an anti-COVID-19) in supercritical carbon dioxide: An experimental analysis and thermodynamic modeling //The Journal of Supercritical Fluids. – 2022. – V. 183. – P. 105539.

УДК 66.02

Курлаева Т.И., Аверина Ю.М., Мозгунов В.А., Зверева О.В.

Анализ нормативно-правовых документов с целью выявления признаков опасных производственных объектов на складах нефтеперерабатывающих предприятий

Курлаева Татьяна Игоревна – студент; t.kurlaeva@inbox.ru.

Аверина Юлия Михайловна – к.т.н., доцент;

Мозгунов Владимир Александрович – к.т.н., старший преподаватель;

Зверева Ольга Владимировна – ассистент;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрена установка производства битума, хранилища битума, а также опасные производственные объекты и их признаки опасности. Определены признаки опасности складов битума, благодаря которым, они не могут классифицироваться как опасные производственные объекты в соответствии с Федеральным законом от 21.07.1997 № 116-ФЗ «О промышленной безопасности опасных производственных объектов»

Ключевые слова: битум, установка производства битума, опасный производственных объект

Analysis of regulatory documents in order to identify signs of hazardous production facilities in warehouses of oil refineries

Kurlaeva T. I., Averina U.M., Mozgunov V.A., Zvereva O.V.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the installation of bitumen production, bitumen storage, as well as hazardous production facilities and their signs of danger. The danger signs of bitumen warehouses have been identified due to which. They cannot be classified as hazardous production facilities in accordance with Federal Law № 116-FL 21.07.1997 «On Industrial Safety of Hazardous Production Facilities»

Keywords: bitumen, bitumen production plant, hazardous production facility

Битум является одним из наиболее важных и многотоннажных нефтепродуктов, так как его используют во многих сферах строительства и ремонта объектов гражданского и промышленного назначения. Установка производства битума (УПБ) является комплексной установкой получения битумов из сырья (гудрона), представляет собой набор оборудования и приборов, позволяющие получать битумы и битумные эмульсии из гудрона путём их предварительной обработки и последующего окисления.

Состав установки получения битумов – это насосные, печи дожига, блок окислительных колонн, емкости, резервуары, компрессорная, операторная, узел слива-налива битума. Сырьё поступает в УПБ с установки ЭЛОУ-АВТ (установка предварительного обезвоживания и обессоливания нефти). Гудрон находится в резервуарах сырья, которые соединяются с ранее описанной установкой и установкой производства битума с помощью трубопроводов. Путь, который проходит сырьё до готового продукта состоит из следующих шагов:

- 1) Прием гудрона на установку, вывод в мазутопровод.
- 2) Поступление в узел окисления.
- 3) Обезвреживание газов окисления в печи.
- 4) Поступление битума в резервуары.

Путь по установке от сырья до готового продукта, не считая паспортизации, проходит примерно за 10-12 ч. Далее из резервуаров с готовым битумом берется проба, происходит его исследование на определение

соответствия ГОСТу, получения характеристик готового продукта, а также заполнение паспорта.

После производства битум хранится в хранилищах битума, которые размещаются в непосредственной близости к установке, а также создается развязка авто- и железнодорожного транспорта, которая обеспечивает безаварийное движение цистерн с битумом и без.

Так как установка производства битума обладает признаками опасности, то встает вопрос обладает ли склад с уже готовым продуктом признаками взрывоопасности, а также относится ли он к опасным производственным объектам. В соответствии со ст. 2 Федерального закона от 21.07.1997 г. № 116-ФЗ «О промышленной безопасности опасных производственных объектов» опасные производственные объекты – предприятия или их цехи, участки, площадки, а также иные производственные объекты, на которых получаются, используются, перерабатываются, образуются, хранятся, транспортируются, уничтожаются горючие вещества – жидкости, газы, способные самовозгораться, а также возгораться от источника зажигания и самостоятельно гореть после его удаления. Битум нефтяной окисленный является твердым (аморфными) горючим веществом и не относится к горючим жидкостям (газам), указанным в подпункте «в» пункта 1 приложения № 1 к Федеральному закону № 116-ФЗ. В соответствии со справочными материалами битум нефтяной окисленный при нагреве от 40 до 100 градусов размягчается и становится пластичной массой с низкой текучестью, но при остывании набирает

первоначальную вязкость без потери свойств и характеристик. [1]

Вместе с тем согласно ГОСТ 12.1.044-89 (ИСО 4589-84) «Система стандартов безопасности труда. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения» (далее - ГОСТ 12.1.044-89) к жидкостям относят также твердые плавящиеся вещества, температура плавления или каплепадения которых меньше 50 °С; к твердым веществам и материалам относятся индивидуальные вещества и их смесевые композиции с температурой плавления или каплепадения больше 50 °С. [2]

На основании вышеизложенного битум нефтяной окисленный относится к твердым веществам, так как имеет температуру размягчения выше температуры плавления или каплепадения (больше 50 °С).

В соответствии с техническим регламентом Таможенного союза, взрывоопасной средой является смесь с воздухом при атмосферных условиях горючих веществ в виде пара, тумана, газа, пыли, волокон или летучих частиц, в которой после воспламенения происходит самоподдерживающееся распространение пламени.

Пожаровзрывоопасность веществ и материалов определяется показателями, выбор которых зависит от агрегатного состояния вещества (материала) и условий его применения, в соответствии с ГОСТ 12.1.044-89.

В соответствии с ГОСТ 6617-76 «Битумы нефтяные строительные. Технические условия» строительные нефтяные битумы являются горючим веществом с температурой вспышки 220 - 300 градусов. Минимальная температура самовоспламенения 368 градусов. [3]

В соответствии с ГОСТ 9548-74 «Битумы нефтяные кровельные. Технические условия» нефтяные кровельные битумы являются горючими веществами с температурой вспышки не ниже 240 °С. Минимальная температура самовоспламенения 300 °С. [4]

В соответствии с ГОСТ 22245-90 «Битумы нефтяные дорожные вязкие. Технические условия» и ГОСТ Р 58400.1-2019 «Дороги автомобильные общего пользования. Материалы вяжущие нефтяные битумные. Технические условия с учетом температурного диапазона эксплуатации» вязкие дорожные нефтяные битумы являются горючими веществами с температурой вспышки выше 220 °С и минимальной температурой самовоспламенения 368 °С по ГОСТ 12.1.044-89 (ИСО 4589-84). [2, 5]

Согласно ГОСТ 22245-90 «Битумы нефтяные дорожные вязкие. Технические условия» и ГОСТ Р 58400.1-2019 «Дороги автомобильные общего пользования. Материалы вяжущие нефтяные битумные. Технические условия с учетом температурного диапазона эксплуатации» битумные вяжущие являются малоопасными

веществами и по степени воздействия на организм человека относятся к 4-му классу опасности по ГОСТ 12.1.007-76 «Система стандартов безопасности труда. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности». [6, 7]

Процессы хранения и транспортирования вязких нефтяных битумов и гудронов не обладают признаками взрывоопасности, установленными Техническим регламентом и ГОСТ 12.1.010-76 «Взрывобезопасность», а является пожароопасными. [8]

Таким образом, производственные объекты, на которых осуществляется хранение и транспортирование высоковязких и высокозастывающих нефтепродуктов (нефтяной битум и гудрон), исходя из физико-химических свойств указанных веществ, не обладают признаками опасности, определенными приложением № 1 к Федеральному закону № 116-ФЗ, и, соответственно, не могут быть отнесены к категории опасных производственных объектов.

Установка производства битума – это масштабная конструкция из множества технических устройств, связанных трубопроводами. Благодаря данной установке предприятие нефтепереработки получает большое количество продукта, тем самым обеспечивает некоторые отрасли промышленности и строительства высококачественным материалом.

Несмотря на многоотонность производства битума анализ нормативно-правовых документов показал, что битумные хранилища не обладают признаками взрывоопасности, а только признаками пожароопасности и, соответственно, склады битума нельзя отнести к опасным производственным объектам.

Список литературы

1. Федеральный закон от 21.07.1997 № 116-ФЗ «О промышленной безопасности опасных производственных объектов»
2. ГОСТ 12.1.044-89 (ИСО 4589-84) «Система стандартов безопасности труда. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения»
3. ГОСТ 6617-76 «Битумы нефтяные строительные. Технические условия»
4. ГОСТ 9548-74 «Битумы нефтяные кровельные. Технические условия»
5. ГОСТ 22245-90 «Битумы нефтяные дорожные вязкие. Технические условия»
6. ГОСТ Р 58400.1-2019 «Дороги автомобильные общего пользования. Материалы вяжущие нефтяные битумные. Технические условия с учетом температурного диапазона эксплуатации»
7. ГОСТ 12.1.007-76 «Система стандартов безопасности труда. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности»
8. ГОСТ 12.1.010-76 «Взрывобезопасность»

УДК 60.011

Мишачев А.Ю., Лебедев И.В.

Моделирование процесса растворения с использованием трехмерного клеточного автомата

Мишачев Алексей Юрьевич, студент 3 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; alexklimpit@gmail.com.

Лебедев Игорь Витальевич, к.т.н., доцент кафедры химического и фармацевтического инжиниринга; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, 125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20.

В данной статье описывается модель на основе трехмерного клеточного автомата для симуляции процесса растворения, которая используется для получения данных о степени растворения в каждый момент времени процесса. Представлено упрощенное визуальное представление процесса растворения.

Ключевые слова: клеточный автомат, моделирование процесса, растворение, диффузия.

Mishachev A.Y., Lebedev I.B.

Modelling of dissolution process using three-dimensional cellular automaton

Mishachev A.Y., Lebedev I.V.

D. Mendelev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

This article describes a model based on a three-dimensional cellular automaton, to simulate the dissolution process, which is used to obtain data on the degree of dissolution at each time point of the process. A simplified visual representation of the dissolution process is presented.

Keywords: cellular automaton, process modelling, diffusion, dissolution.

Растворение — один из самых распространенных физико-химических процессов. Процесс растворения играет существенную роль в действии лекарств, прежде всего предназначенных для перорального приема. Растворение представляет собой совокупность процессов и явлений, таких как смачивание поверхности частицы, разрушение кристаллических связей, сольватация молекул и диффузия растворенного вещества через пограничный слой, окружающий частицу [1]. Сольватация — взаимодействие частиц растворенного вещества с молекулами растворителя. Молекулярная диффузия — самопроизвольный перенос частиц из области с более высокой концентрацией в область с более низкой концентрацией, обусловленный градиентом химического потенциала. Если при постоянной температуре раствор неоднороден по составу, то в нем самопроизвольно происходят процессы переноса, которые не прекращаются до тех пор, пока раствор не станет однородным. Каждый, из перечисленных процессов, может быть рассмотрен при помощи различных математических методов.

В данной работе для моделирования процесса растворения был разработан трехмерный клеточный автомат и предложен вариант визуализации его работы. Данный клеточный автомат позволяет сэкономить человеческие ресурсы, а также представить процесс в понятном и простом формате.

Клеточные автоматы используются для моделирования многих процессов и явлений. Например, кристаллизация, вторичная кристаллизация, коррозия, адсорбция и гидратация. Модели клеточных автоматов часто включают сложные процессы, визуализация этих процессов позволяет мгновенно увидеть, как изменяются состояния клеток во времени, что значительно ускоряет восприятие и понимание модели.

Разработанный клеточный автомат позволяет не только получить кривые высвобождения вещества от времени, но и наглядно показать, как процесс протекает во времени. Визуальные элементы делают процесс растворения и диффузии более наглядным, что упрощает понимание модели. Визуализация делает модели клеточных автоматов доступными для широкой аудитории, включая специалистов из разных областей. Простые и наглядные графические представления способствуют лучшему пониманию и взаимодействию между учеными, инженерами и другими заинтересованными сторонами.

Разработанная модель имеет ряд допущений:

- система представляется в виде поля, состоящего из кубических клеток;
- окрестность включает в себя двадцать шесть соседних клеток в трехмерном режиме или восемь в двумерном;
- поле является замкнутым;
- клеточный автомат является синхронным;
- каждая клетка характеризуется четырьмя параметрами: расположение в пространстве, тип вещества, агрегатное состояние, концентрация вещества;
- клетки имеют два состояния: «жидкость» и «твердое вещество»;
- процесс растворения может происходить между клетками, имеющими разные состояния;
- процесс диффузии может происходить между клетками, имеющими состояние «жидкость»;
- при снижении количества вещества в клетке до уровня, соответствующего концентрации насыщенного раствора этого вещества, состояние клетки переходит в «жидкость»;

Визуализацию процесса растворения условно можно разделить на шесть этапов (рис. 1).

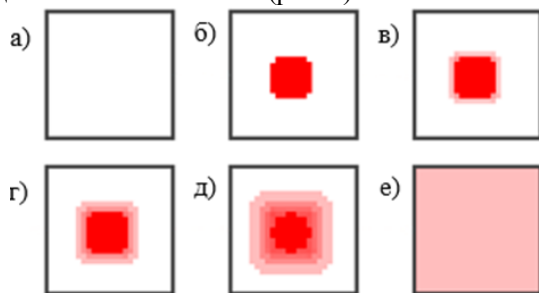


Рис. 1. Схематичное представление процесса растворения; а) создание границ системы; б) создание области, содержащей твердые клетки; в) растворение твердого вещества; г) растворение твердого вещества с последующей диффузией; д) разрушение твердых клеток; е) равномерное распределение вещества по всему объему системы

Первым этапом в расчете является вычисление количества вещества, которое переходит из клеток «твердого» состояния в «жидкое». Изменение массы твердого вещества в процессе перехода в растворенное состояние описывается следующим уравнением [1]:

$$dM/d\tau = -k \cdot F \cdot (C' - C), \quad (1)$$

где, M – масса твердого вещества,

k – коэффициент растворения,

F – поверхность растворения,

C' – концентрация насыщенного раствора,

C – текущая концентрация вещества в растворе.

На следующем этапе рассчитывается процесс диффузии растворенного вещества. Процесс диффузии растворенного вещества описывается уравнением модели [1]:

$$dc/dt = D \cdot F \cdot (C_i - C_j), \quad (2)$$

где, D – коэффициент диффузии,

F – площадь поверхности контакта взаимодействующих клеток,

C_i, C_j – концентрации в i -й и j -й клетках.

Расчет данной модели заканчивается при равенстве концентраций во всех клетках.

Графический интерфейс позволяет задать размеры двухфазной системы жидкость-твердое вещество, а также размеры носителя активных веществ. На первом этапе расчета процесса задается система, в которой клетки с нулевой концентрацией прозрачны, а твердые клетки непрозрачны (рис. 2).



Рис. 2. Начальное состояние заданной системы

В ходе моделирования процесса в системе устанавливается равновесие, которое характеризуется равенством концентраций во всех клетках (рис. 3).

Клетки, в которых содержится какое-либо количество растворенного вещества, становятся полупрозрачными. Прозрачность зависит от концентрации.

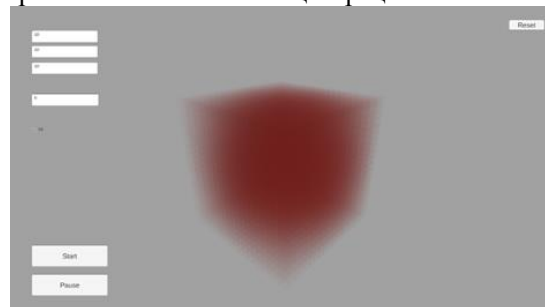


Рис. 3. Конечное состояние системы

Далее приведена кривая высвобождения веществ, которая характерна для данного процесса (рис. 4).

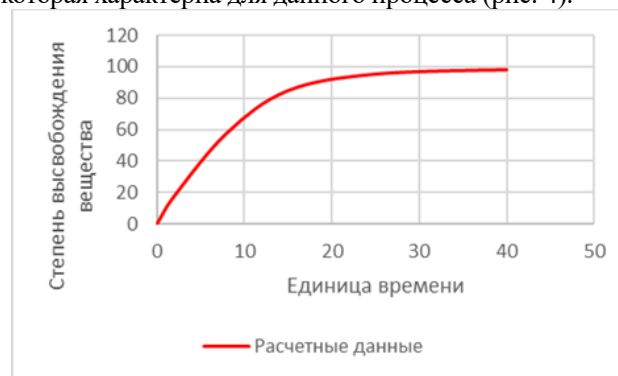


Рис. 4. Кривая высвобождения вещества

Предложенная модель была реализована с использованием языка программирования C# при помощи кроссплатформенной среды разработки Unity. Данная среда используется для создания программ, которые используются в различных областях человеческой деятельности. Одним из главных преимуществ Unity является возможность создавать из трехмерных моделей структуры. Разработанная программа имеет интерфейс, который дает возможность пользователю задавать размеры клеточного автомата, позволяет создавать клеточные автоматы размером до 64000 клеток при расчете на компьютере с объемом оперативной памяти 32 Gb. Такой размер позволяет моделировать процесс растворения для твердых тел различных размеров и форм.

Разработанная модель и ее реализация в виде компьютерной программы позволяет изучить динамику процесса растворения твердых лекарственных форм во времени, а также увидеть ход протекания процесса в локальных областях пространства. Предложенная модель позволит ускорить разработку новых лекарственных форм с заданными требованиями, а также установить зависимость между характеристиками лекарственной формы такими, как ее геометрия и состав и процессом растворения.

Выполнено в рамках государственного задания
(проект FSSM-2022-0004).

Список литературы

1. Цифровые двойники новых материалов: клеточно-автоматное моделирование структуры и свойств: учеб. пособие / Н. В. Меньшутина, И. В. Лебедев, Е. В. Гусева, А. В. Колнооченко. Москва : РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2020. С. 84—88.

УДК 66-9

Мохова Е.К., Гордиенко М.Г.

Исследование кинетики вакуумной сублимационной сушки суспензии, как перспективного средства доставки лекарственных препаратов при лечении социально значимых заболеваний

Мохова Елизавета Константиновна – ассистент кафедры химического и фармацевтического инжиниринга; mokhova.e.k@mustr.ru.

Гордиенко Мария Геннадьевна – д.т.н., доцент, профессор кафедры химического и фармацевтического инжиниринга;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье представлены экспериментальные исследования кинетики вакуумной сублимационной сушки суспензий при различных режимах сушки. Представлена схема установки для проведения процесса сушки с одновременным инфракрасным и ультразвуковым воздействием. Проведены аналитические исследования полученных образцов.

Ключевые слова: кинетика сушки, интенсификация, суспензии, социально значимые заболевания.

Study of the kinetics of vacuum freeze-drying of a suspension as a promising means of drug delivery for the treatment of socially significant diseases

Mokhova E.K., Gordienko M.G.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article presents experimental studies of the kinetics of vacuum sublimation drying of suspensions under various drying modes. A diagram of the installation for carrying out the drying process with simultaneous infrared and ultrasonic exposure is presented. Analytical studies of the obtained samples were carried out.

Key words: drying kinetics, intensification, suspensions, socially significant diseases.

Введение

Суспензии – дисперсные системы, в которых твердые частицы диспергированы в непрерывной жидкой фазе [1]. Суспензионные дисперсные системы разделяют на грубодисперсные с размером частиц более 100 нм, и мелкодисперсные, также называемые коллоидными суспензиями, с размером частиц от 1 до 100 нм [2, 3]. Примерами коллоидных дисперсий являются взвеси микроорганизмов, изолированные клетки в культурах, лекарственные формы в виде нано- или микрочастиц. После проведения процесса сушки высушенные суспензии представляют собой твердые частицы (микропорошки), которые могут служить средством доставки лекарственных препаратов при лечении социально значимых заболеваний.

Основным признаком социальнозначимых заболеваний является способность к широкому, массовому распространению среди населения [4]. Заболевания, относящиеся к данной группе, представляют огромную угрозу для общества, что проявляется в потере трудоспособности, инвалидности и смертности населения. Социально значимые заболевания представляют целую группу заболеваний, к которым относятся как неинфекционные (НСЗ), так и инфекционные заболевания (ИСЗ). К НСЗ относятся: сердечно-сосудистые заболевания, онкологические заболевания, хроническая обструктивная болезнь легких и астма, а также серьезные психические расстройства и расстройства поведения. Ко второй группе, ИСЗ, относятся инфекционные болезни

легких, такие как туберкулез, бронхит и туберкулез со множественной лекарственной устойчивостью [5]. Во всем мире туберкулез занимает тринадцатое место среди основных причин смерти. За 2021 год, туберкулезом заболело около 10,6 миллиона человек, из них 1,6 миллиона человек с летальным исходом [6, 7].

Микропорошки, полученные с использованием технологии вакуумной сублимационной сушки, можно использовать для интраназальной доставки лекарственных препаратов при лечении болезней верхних дыхательных путей [8–10]. В отличие от других способов сушки, метод вакуумной сублимационной сушки протекает при низких температурах в условиях вакуума, что позволяет сохранить биологическую активность лекарственного препарата и обеспечивает максимальный выход продукта. Однако, технология вакуумной сублимационной сушки обладает рядом недостатков, к которым относятся длительность цикла сушки (от 24 до 48 и более часов) и высокие энергетические затраты. Поэтому исследование и интенсификация процесса вакуумной сублимационной сушки является актуальным и важным направлением развития данной технологии с целью повышению энергоэффективности и увеличения производительности в сфере получения материалов для лечения социально значимых заболеваний.

Экспериментальная часть

В работе использовались следующие материалы и химические реагенты: карбонат аммония,

полимолочная кислота (ПМК), поликапролактон (ПКЛ), поливиниловый спирт (ПВС), хлористый метилен, дистиллированная вода.

Получение суспензии твердых частиц проводится путем приготовления двойной эмульсии. Для этого готовятся растворы гидрофобной и гидрофильной фаз. Для водной фазы первичной эмульсии готовится раствор порошена – карбоната аммония. Карбонат аммония неустойчив уже при комнатной температуре, поэтому растворение проводят на ледяной бане. Готовят 4 мас.% раствор смеси полимеров ПМК и ПКЛ (1:1) в хлористом метиле (гидрофобная фаза). В объем гидрофобной фазы тонкой струйкой вливается гидрофильная фаза, при этом отношение гидрофильной фазы к гидрофобной равняется 1/10. Далее раствор обрабатывается

ультразвуковым гомогенизатором на ледяной бане в течение 60 секунд. Для получения вторичной эмульсии в 100 мл 1% водного раствора ПВС погружают рабочий элемент гомогенизатора типа «ротор-статор». Включают гомогенизатор при заданных параметрах и одновременно тонкой струйкой вливают первичную эмульсию (масса первичной эмульсии 24 г). По окончании заданного времени гомогенизации емкость с вторичной эмульсией переставляют на магнитную мешалку и оставляют при постоянном перемешивании на не менее чем на 2 часа для удаления легколетучего растворителя и отвердевания гидрофобных включений. Основные стадии получения суспензии представлены на Рис. 1.

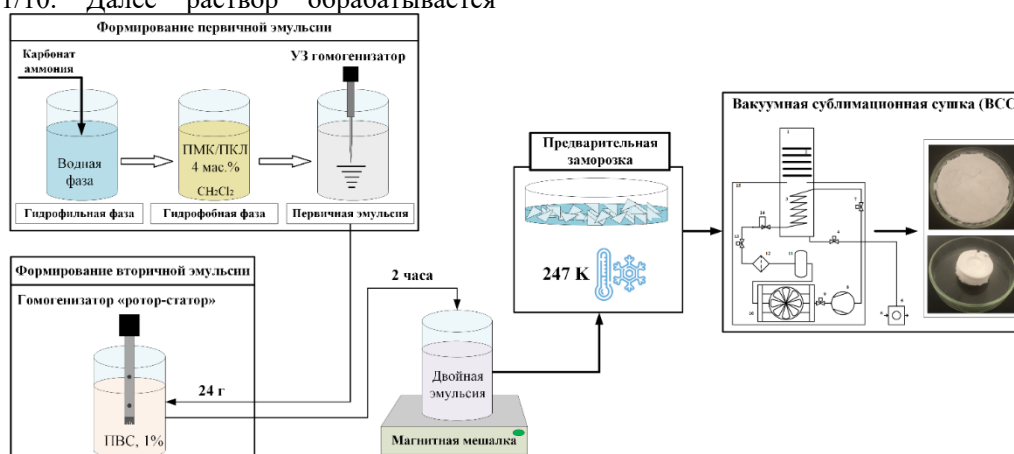


Рис.1. Основные стадии получения суспензии.

Спецификация полученных образцов приведена в Таблице 1.

Таблица 1. Спецификация образцов суспензии

Наименование образца	Условия обработки образцов	
	Гомогенизация, об/мин	Время гомогенизации, мин
C1	3000	1
C2	3000	0,5
C3	4500	0,75
C4	6000	1
C5	6000	0,5

Для исследования кинетики сушки образцов суспензии и интенсификации процесса производилась модернизация вакуумной сублимационной сушилки на базе уже существующей

установки – Coolsafe 100-9. Использовались базовые элементы установки такие, как корпус и система охлаждения, однако рабочее пространство цилиндрической камеры было дополнено конструктивными элементами, позволяющими проводить процесс сушки с одновременным инфракрасным (ИК) и ультразвуковым (УЗ) воздействием. Принципиальная схема модернизированной установки приведена на Рис.2 а.

В Таблице 2 представлено описание используемых режимов сушки.

Исследуемые суспензии имеют одинаковый состав, и отличаются параметрами гомогенизации (Таблица 1) и условием заморозки. Кинетика вакуумной сублимационной сушки снималась для образцов C2 и C3. Полученные кинетические кривые температуры и влагосодержания для образцов C2 и C3 при трех режимах сушки приведены на Рис.2 б, в.

Таблица 2. Описание режимов обработки исследуемых образцов

Режим	Образец	Условия заморозки	Описание режима сушки
Режим 1	C1	Обычная заморозка	Передача тепла от нагревательной полки
	C2		
	C3		
Режим 3	C4	УЗ и ИК	
	C5		
Режим 2	C1	Заморозка с УЗ	Передача тепла от нагревательной полки
	C2		

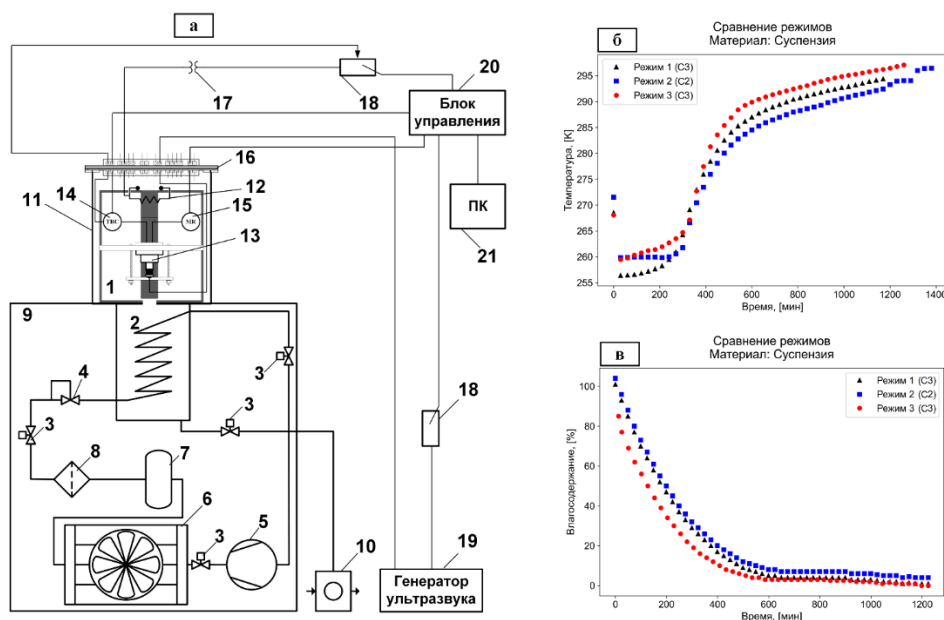


Рис.2. Схема установки (а): 1 – рабочая камера, 2 – конденсатор, 3, 4 – клапаны, 5 – компрессор, 6 – конденсатор с воздушным охлаждением, 7 – сборник, 8 – фильтр осушитель, 9 – корпус, 10 – вакуумный насос, 12 – источник ИК, 13 – источник УЗ, 14 – датчик температуры, 15 – датчик влагосодержания, 16 – крышка установки, 17 – понижающий трансформатор, 18 – реле переключения, 19 – УЗ генератор, 20 – блок управления, 21 – персональный компьютер; изменение температуры образцов в процессе сушки (б); изменение влагосодержания в процессе сушки (в).

Для оценки сопоставимости кинетических кривых сушки использовались факторы различия и подобия. Фактор различия (f_1) показывает процент ошибки между двумя кривыми сушки, полученными при разных режимах, по всем временным точкам. Фактор различия рассчитывается по уравнению (1):

$$f_1 = \frac{\sum_{t=1}^k |T_{\text{эксп}t} - T_{\text{расчет}t}|}{\sum_{t=1}^k T_{\text{эксп}t}} \cdot 100\% \quad (1)$$

где, k – количество временных точек,

$T_{\text{эксп}t}$ – экспериментальная средняя температура материала в момент времени t , К,

$T_{\text{расчет}t}$ – расчетная средняя температура материала в момент времени t , К.

Кинетические кривые сушки считаются сопоставимыми, если значение фактора различия f_1 находится в интервале от 0 до 15.

Фактор подобия (f_2) – это величина, представляющая собой логарифмическое преобразование значения суммы квадратов ошибок, рассчитанных по разности между значениями двух кривых сушки во всех точках времени. Фактор подобия рассчитывается по уравнению (2):

$$f_2 = 50 \cdot \log \left(\frac{100}{\sqrt{1 + \frac{\sum_{t=1}^k |T_{\text{эксп}t} - T_{\text{расчет}t}|^2}{k}}} \right) \quad (2)$$

Кинетические кривые сушки считаются сопоставимыми, если значение фактора подобия f_2 находится в интервале от 50 до 100.

Если хотя бы один из факторов не попадает в диапазон значений, при которых кинетические

кривые считаются сопоставимыми, то принимают, что такие кривые значимо различаются.

В Таблице 3 приведены результаты расчета факторов f_1 и f_2 для образцов суспензии, полученных при трех режимах сублимационной сушки.

Таблица 3. Значения факторов различия и подобия для образцов суспензии

№ Режим	f_1	f_2	Подобие
По сравнению с кинетической кривой, полученной для режима 1			
2	14.6	75	да
3	16	66.5	нет
По сравнению с кинетической кривой, полученной для режима 2			
3	27.62	57.18	нет

Из полученных данных (Таблица 3) видно, что подобие наблюдается для кривых, полученных в режиме 1 и 2, следовательно, ультразвук, примененный на стадии заморозки, не влияет на кинетику сушки суспензии. Температурная кривая (Рис.2 б), полученная при работе в режиме 3, достигает температуры равной 294.53 К на 283 минуты (4.7 часа) быстрее, чем при работе в режиме 1. Однако, существенных отличий между двумя кривыми не наблюдается, что можно связать с природой самого материала, и низким содержанием полимера.

Для установления влияния режимов вакуумной сублимационной сушки и параметров гомогенизации (время и количество оборотов при диспергировании) на характеристики образцов, полученные суспензии

твердых частиц после сушки исследовали с помощью светового микроскопа (Рис.3 б). Полученные микрофотографии обрабатывались в программе ImageJ. На микрофотографиях каждого образца были определены размеры 120 частиц. На основании измерений были построены распределения частиц по размерам (Рис.3 а).

При сравнении микрофотографий, видно, что частицы, полученные при сушке в режимах 2 и 3 (Рис.3 б), являются более ровными и легко

отделяются друг от друга, тогда как частицы, полученные при режиме 1 (Рис.3 б), представлены агрегатами. Кроме того, количество оборотов при гомогенизации исходной суспензии также повлияло на структуру образцов. Увеличение количества оборотов выше 3000 об/мин привело к агрегации частиц суспензии. На микрофотографиях для образцов С3, С4 и С5 (Рис. 4) наблюдается плотная полимерная структура без образования частиц во всех трех режимах сушки.

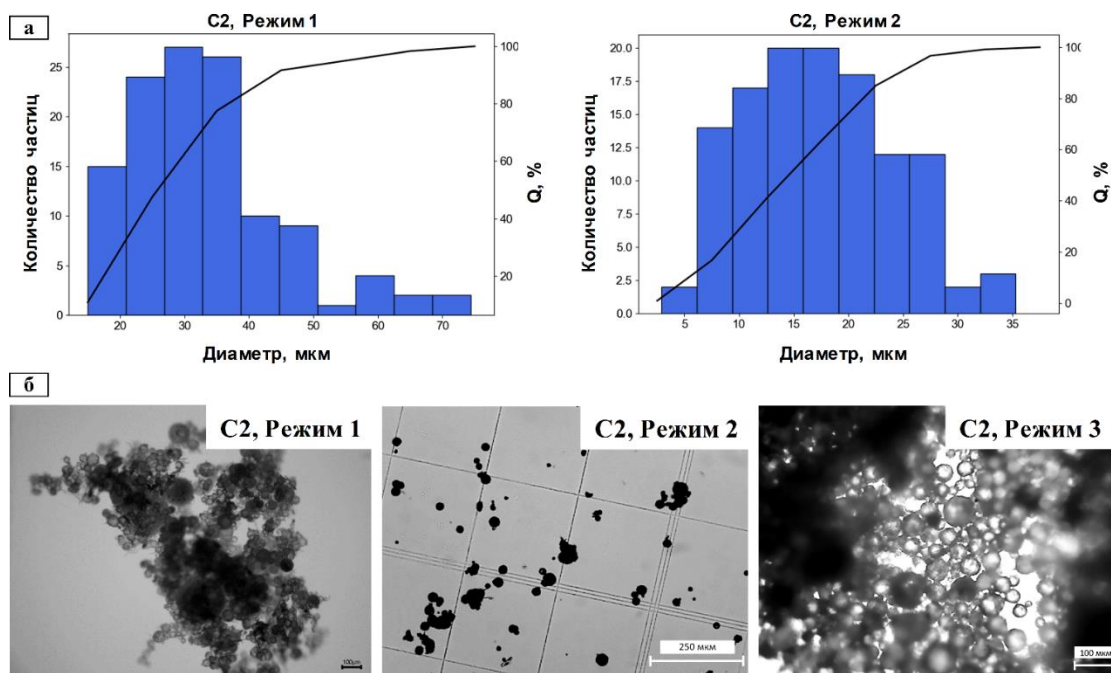


Рис.3. Распределение частиц по размерам (а); микрофотографии высушенных частиц С2 (б).

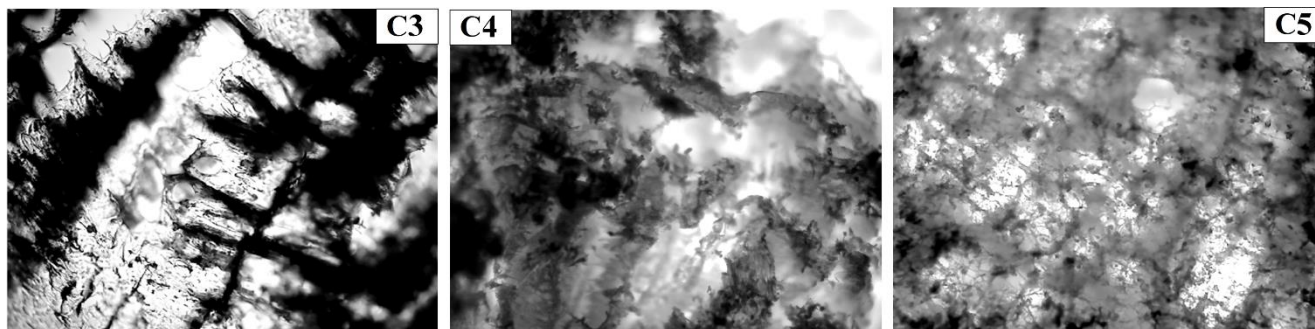


Рис.4. Микрофотографии высушенных образцов С3, С4 и С5 с образованием плотной полимерной структуры.

При сравнении образцов С1 и С2, полученных при сушке в обоих режимах, видно, что увеличение времени гомогенизации исходной суспензии до 1 минуты, привело к уменьшению характеристического размера частиц. Следовательно, определяющим фактором, приводящем к агрегации частиц, является количество оборотов при гомогенизации. При сравнении образцов С1, полученных в режиме 1 и режиме 3, воздействие ультразвука, оказанного непосредственно на этапе сушки при работе в режиме 3, не привело к существенному уменьшению количества частиц с диаметром меньше 20 мкм. Аналогичный результат наблюдается при сравнении режимов 1 и 2. Данный результат объясняется тем,

что размер частиц закладывается на этапе гомогенизации исходной суспензии, а не на этапе сушки или предварительной заморозки.

Заключение

В работе установлено влияние параметров гомогенизации и режимов вакуумной сублимационной сушки на размер частиц исследуемых образцов суспензии. Количество оборотов при гомогенизации выше 3000 об/мин приводит к агрегации частиц. Суспензии твердых частиц со средним размером 20 мкм могут быть использованы как системы доставки

лекарственных препаратов в верхние дыхательные пути при лечении социально значимых заболеваний.

*Выполнено при финансовой поддержке
Министерства науки и высшего образования
Российской Федерации в рамках научной тематики
FSSM-2022-0004*

Список литературы

1. Schramm L.L. Emulsions, Foams, and Suspensions: Fundamentals and Applications. 1st ed. Wiley, 2005.
2. Schaffazick S.R. et al. Freeze-drying polymeric colloidal suspensions: nanocapsules, nanospheres and nanodispersion. A comparative study // European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics. – 2003. – Vol. 56. – № 3. – P. 501–505.
3. Vicent M. Comparison of freeze drying and spray drying to obtain porous nanostructured granules from nanosized suspensions // Journal of the European Ceramic Society. – 2012. – Vol. 32. – № 5. – P. 1019–1028.
4. World Health Organization. Noncommunicable Diseases Country Profiles 2018. WHO Press; Geneva, Switzerland: 2018. [Электронный ресурс]. <https://apps.who.int/iris/handle/10665/274512>. (дата обращения: 25.05.2024).
5. Hargreaves, J. R.; Boccia, D.; Evans, C. A.; Adato, M.; Petticrew, M.; Porter, J. D. The social determinants of tuberculosis: from evidence to action. Am J Public Health. – 2011. – Vol. 101. – №4. – P. 654-62.
6. World Health Organization. Global tuberculosis report 2021. WHO Press; Geneva, Switzerland: 2021. [Электронный ресурс]. Available online: <https://www.who.int/publications/i/item/9789240037021>. (дата обращения: 25.05.2024).
7. World Health Organization. Global tuberculosis report 2022. WHO Press; Geneva, Switzerland: 2022. [Электронный ресурс]. Available online: <https://www.who.int/publications/i/item/9789240061729>. (дата обращения: 25.05.2024).
8. Grassin-Delyle, S.; Buenestado, A.; Naline, E.; Faisy, C.; Blouquit-Laye, S.; Couderc, L.J.; Le Guen, M.; Fischler, M.; Devillier, P. Intranasal drug delivery: an efficient and non-invasive route for systemic administration: focus on opioids. Pharmacol Ther. – 2012. – Vol. 134. – №3. – P. 366-79.
9. Sorino, C.; Negri, S.; Spanevello, A.; Visca, D.; Scichilone, N. Inhalation therapy devices for the treatment of obstructive lung diseases: the history of inhalers towards the ideal inhaler. Eur J Intern Med. – 2020. – Vol. 75. – P. 15-8.
10. Alipour, S.; Mahmoudi, L.; Ahmadi, F. Pulmonary drug delivery: an effective and convenient delivery route to combat COVID-19. Drug Deliv Transl Res. – 2023. – Vol. 13. – №3. – P. 705-715.

УДК 66.048.3.069.835, 004.942

Новиков Н.А., Скичко Е.А.

Моделирование ректификации многокомпонентных углеводородных смесей как бинарной ректификации двух псевдокомпонентов

Новиков Николай Александрович – студент группы КС-46; ogkolya@mail.ru.

Скичко Евгения Абдулмуталиповна – старший преподаватель кафедры Информационных компьютерных технологий;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрено разделение многокомпонентных углеводородных смесей методом сведения расчета к решению математической модели бинарной ректификации. Близкие по составу углеводороды объединяются в псевдокомпоненты, происходит расчет разделения двух псевдокомпонентов. Уравнения математической модели включают уравнения общего материального, теплового баланса, уравнения покомпонентного материального баланса, дополненные уравнениями паро-жидкостного равновесия и стехиометрическими соотношениями.

Ключевые слова: ректификация, псевдокомпоненты, углеводороды, математическое моделирование.

Modeling the Rectification of Multicomponent Hydrocarbon Mixtures as Binary Distillation of Two Pseudocomponents

Novikov N.A., Skichko E.A.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the separation of multicomponent hydrocarbon mixtures by reducing the calculation to solving a mathematical model of binary rectification. Hydrocarbons with similar compositions are combined into pseudocomponents, and the separation of the two pseudocomponents is calculated. The equations of the mathematical model include equations of general material and heat balance, equations of component-by-component material balance, supplemented by equations of vapor-liquid equilibrium and stoichiometric relationships.

Key words: rectification, pseudocomponents, hydrocarbons, mathematical modeling.

Ректификация, являясь одним из наиболее распространенных методов разделения жидких смесей, находит широкое применение в нефтехимической и газовой промышленности. Процесс основан на многократном испарении и конденсации компонентов смеси, что позволяет достичь высокой степени чистоты отдельных фракций. Одной из ключевых задач, стоящих перед инженерами и учеными, является моделирование ректификационных процессов, особенно в случае многокомпонентных углеводородных смесей, которые характерны для нефти и природного газа [1].

Моделирование ректификации многокомпонентных систем представляет собой сложную задачу из-за разнообразия компонентов, различий в их физических и химических свойствах, а также взаимодействий между ними. Однако, для упрощения этой задачи и повышения эффективности расчетов, часто применяется методика представления многокомпонентной смеси в виде двух псевдокомпонентов. Этот подход позволяет свести сложную многокомпонентную систему к более простой бинарной системе, что существенно облегчает процесс моделирования и анализа.

Основная идея данного метода заключается в том, что компоненты смеси группируются в два псевдокомпонента на основе их температур кипения или других характеристик. Это позволяет использовать бинарные уравнения и модели, разработанные для двухкомпонентных систем, для

анализа и оптимизации процесса ректификации. Таким образом, упрощенная модель не только сохраняет основную физическую сущность процесса, но и позволяет проводить более точные и быстрые расчеты.

Экспериментальные данные для расчетов были взяты из публикации [2]. Рассматривается тарельчатая ректификационная колонна, которая содержит 14 тарелок, ребойлер и полный конденсатор. Питание подается на седьмую тарелку, поток питания содержит жидкую (58%) и паровую фазы (42%). Расход питания - 15,4762 т/ч, температура питания - 118°C и давление - 4 атм, температура в ребойлере - 144°C, молярный расход кубовой жидкости - 111 кмоль/ч, доля псевдокомпонента в кубовой жидкости 0,0375.

Состав потока питания данного эксперимента: бутан – 19%, изобутан - 26,65%, изопентан – 20,95%, пентан – 10,05%, гексан - 7,26%, гептан – 3,23%, октан – 1,21%, ундекан 1,94%, додекан – 2,02%, циклопентан 1,61%, метилциклопентан – 2,02%, бензол – 1,61%.

Схема установки эксперимента, рассматриваемого мною, приведена на рис. 1. Поток пара, получаемый в ребойлере, поднимается вверх по колонне. На каждой тарелке происходит массообмен между потоком флегмы, орошающей колонну, и встречным потоком пара. Потоки флегмы и пара приняты постоянными по высоте колонны. Ниже тарелки питания расход жидкого потока представляет

собой сумму потока флегмы и жидкой фазы потока питания. Выше тарелки питания поток пара суммируется с потоком пара питания.

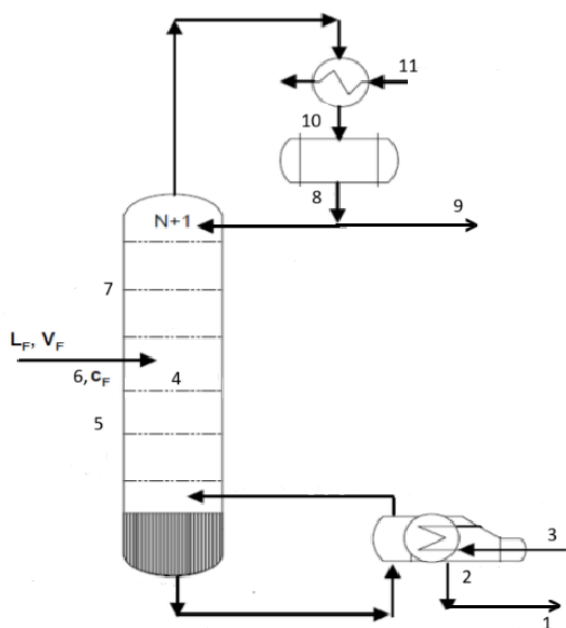


Рис.1. Схема установки: 1 — поток кубового остатка; 2 — ребойлер; 3 — поток тепла; 4 — тарелка питания; 5 — исчерпывающая секция; 6 — концентрат питания; 7 — укрепляющая секция; 8 — распределитель флегмы; 9 — поток дистиллята; 10 — конденсатор; 11 — поток охлаждающей жидкости.

Состав питания был поделен на два псевдокомпонента Ligas и Naphthas со свойствами, приведенными в таблице 1. Ligas состоит из изобутана и н-бутана. Naphthas состоит из изопентана, н-пентана и более тяжелых углеводородов.

Таблица 1. Свойства псевдокомпонентов

Свойство	Ligas	Naphthas
Молярная масса, кг/кмоль	54,4-55,6	84.1-86.3
Плотность жидкости (кг/м ³)	570-575	725-735
Состав потока питания (об. %)	38-42	58-62

Уравнения, которые использовались для составления математической модели ректификационной колонны, приведены ниже [3, 4]. Математическая модель включает уравнения общего материального и теплового баланса, а также уравнения покомпонентного баланса на каждой тарелке колонны. В случае моделирования бинарной ректификации уравнения записываются только для легколетучего компонента, которым в данной работе является Ligas. Мольные доли в жидкости и паре второго компонента находят из стехиометрических соотношений. Нумерация тарелок идет снизу вверх.

Общее уравнение покомпонентного баланса на тарелке:

$$L_{n+1}x_{n+1} - L_nx_n + V_{n-1}y_{n-1} - V_ny_n = 0, (1)$$

где L_n — молярный расход флегмы, кмоль/ч,
 V_n — молярный расход встречного потока пара, поднимающегося вверх по колонне, кмоль/ч,
 x_n — мольная доля легколетучего компонента в жидкости,

y_n — мольная доля легколетучего компонента в паре.

Индексация n соответствует потокам, приходящим на тарелку, $n+1$ — потокам, покидающим тарелку.

Уравнение покомпонентного баланса для тарелки питания:

$$Fc_f + L_{f+1}x_{f+1} + V_{f-1}x_{f-1} - L_fx_f - V_fy_f = 0, (2)$$

где F — расход потока питания, м³/ч,

c_f — доля Ligas в потоке питания.

Уравнение покомпонентного баланса для верхней тарелки колонны:

$$Lx_D + V_Ny_N - L_{N+1}x_{N+1} - V_{N+1}y_{N+1}, (3)$$

где x_D — мольная доля легколетучего компонента в дистилляте.

Уравнение покомпонентного баланса для конденсатора:

$$V_{N+1}y_{N+1} - (L + D)x_D = 0, (4)$$

где D — молярный расход дистиллята, кмоль/ч.

Уравнение покомпонентного баланса для нижней тарелки ($n = 2$):

$$L_3x_3 - L_2x_2 + V_By_B - V_2y_2 = 0, (5)$$

где V_B — расход потока пара, покидающего ребойлер, кмоль/ч,

y_B — мольная доля легколетучего компонента в потоке пара из ребойлера.

Уравнение покомпонентного баланса для ребойлера:

$$L_2x_2 - V_By_B - Bx_B = 0, (6)$$

где B — молярный расход кубовой жидкости, кмоль/ч,

x_B — мольная доля легколетучего компонента в кубовой жидкости.

Уравнения общего баланса:

$$L_F = C_FF, (7)$$

$$V_F = F - L_F, (8)$$

Уравнения для расчета молярного расхода дистиллята и кубовой жидкости:

$$D = V + V_F - L, (9)$$

$$B = L + L_F - V, (10)$$

Уравнения для расчета мольной доли Ligas в жидкости и паре в потоке питания:

$$\begin{cases} Fc_F = L_Fx_F + V_Fy_F \\ y_F = \frac{\alpha x_F}{1 + (\alpha - 1)x_F} \end{cases}, (11, 12).$$

где α — относительная летучесть.

Относительная летучесть компонентов в смеси формально равна отношению давлений насыщенных паров чистых компонентов при одинаковом внешнем давлении. В данной работе она рассчитана, как отношение отношений мольной доли в паре к мольной доле в жидкой фазе двух псевдокомпонентов. Относительная летучесть принята постоянной по колонне и равна 5,68.

Общее уравнение теплового баланса:

$$h_{n+1}L_{n+1} + h_nL_n + H_{n-1}V_{n-1} - H_nV_n = 0, (13)$$

где h_n – энтальпия жидкого потока, кДж/кг,

H_n – энтальпия для пара, кДж/кг.

Для решения математической модели (1 – 13) был написан код на языке программирования Python, подключены библиотеки Scipy и Numpy. Изначально решается система уравнений общего материального баланса колонны для определения расходов и составов обоих продуктовых потоков. Расход дистиллята составил 91,766 кмоль/ч (экспериментально 92,7597 кмоль/ч), доля Ligas в дистилляте 0,9737 (экспериментально 0,9654). Далее

была составлена система из 32 нелинейных уравнений с 32 неизвестными, которыми являлись мольные доли легколетучего компонента в жидкости и в паре. Решение данной системы позволит определить составы потоков на каждой тарелке колонны. Нелинейность системы обусловлена зависимостью равновесной доли в паре, рассчитываемой через относительную летучесть по уравнению (12). Система уравнений была решена методом Ньютона-Рафсона. Результаты расчета представлены в таблице 2.

Таблица 2. Полученные значения концентрации Ligas на каждой тарелке.

Тарелка	1	2	3	4	5	6	7	8
x_n	0,0289	0,0712	0,1297	0,1869	0,2266	0,2482	0,2583	0,2628
y_n	0,1446	0,3033	0,4585	0,5663	0,6247	0,6522	0,6643	0,6694
Тарелка	9	10	11	12	13	14	15	16
x_n	0,2723	0,301	0,3656	0,4882	0,6587	0,8160	0,915	0,9631
y_n	0,6801	0,7098	0,7661	0,8442	0,9164	0,9618	0,9839	0,9933

Мольная доля легколетучего компонента в дистилляте – это x_n на тарелке 16 (конденсатор). Относительная ошибка расчета составляет 0,24%. Мольная доля легколетучего компонента в кубовой жидкости – это x_n на тарелке 1 (ребойлер). Относительная ошибка расчета составляет 22,86%.

Заключение

В данной работе рассмотрен метод расчета ректификации многокомпонентной углеводородной смеси методом сведения к расчету бинарной ректификации двух псевдокомпонентов. Исходная углеводородная смесь разбита на псевдокомпонент, содержащий бутаны, и псевдокомпонент, содержащий пентаны и более тяжелые углеводороды. Свойства псевдокомпонентов рассчитываются исходя из свойств индивидуальных веществ и мольных долей внутри псевдокомпонента. Решены уравнения общего и покомпонентного баланса колонны, определены расходы и доли легколетучего псевдокомпонента в дистилляте и кубовой жидкости, средняя относительная ошибка расчетов составила 11,55%.

Список литературы

1. Калашникова А.А., Лобанов А.А. Математическое моделирование процесса ректификации бинарных смесей// Международный журнал экспериментального образования. – 2010. – №8. – С. 148-149.
2. Minh V., Pumwa J. Modeling and Control Simulation for a Condensate Distillation Column// Advances from Modeling to Applications. – 2012. – IntechOpen. – P. 3-34.
3. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие. М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с.
4. Глебов М.Б., Дудоров А.А. Моделирование массообменных процессов химической технологии: учеб. пособие. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2015. – 111 с.

УДК 544.77.022.822

Пашкин Е.А., Головкина А.М., Абрамов А.А., Цыганков П.Ю.

Аналитические исследования аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса альгинат натрия – хитозан

Пашкин Евгений Алексеевич – студент группы МК-13; pashkin.ea2001@mail.ru ;
 Головкина Анастасия Максимовна – студент группы К-27; nastya.golovkina.00@list.ru
 Абрамов Андрей Александрович – к.т.н., младший научный сотрудник кафедры ХФИ, abramovandrey516@gmail.com ;
 Цыганков Павел Юрьевич – к.т.н., доцент кафедры ХФИ; pavel.yur.tsygankov@gmail.com ;
 ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
 Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Аэрогели на основе биополимеров в настоящий момент актуальными и перспективными материалами для применения в качестве высокоэффективных систем доставки лекарств и матриц для роста клеток тканей и органов. Эффективным способом улучшения механических, термических и химических свойств отдельных биополимеров без использования токсичных для клеток сшивающих агентов является получение полиэлектролитного комплекса альгинат натрия – хитозан. В данной работе представлены результаты аналитических исследований структуры и свойств аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса альгинат натрия – хитозан: ИК-спектроскопии, гелиевой пикнометрии и азотной порометрии.

Ключевые слова: альгинат натрия, хитозан, аэрогель, полиэлектролитный комплекс

Analytical studies of aerogels based on the polyelectrolyte complex sodium alginate – chitosan

Pashkin E.A., Abramov A.A., Golovkina A.M., Tsygankov P.Y.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

Aerogels based on biopolymers are currently relevant and promising materials for use as highly efficient drug delivery systems and matrices for the growth of tissue and organ cells. An effective way to improve the mechanical, thermal and chemical properties of individual biopolymers without using crosslinking agents toxic to cells is to obtain a polyelectrolyte complex of sodium alginate – chitosan. This paper presents the results of analytical studies of the structure and properties of aerogels based on the polyelectrolyte complex sodium alginate – chitosan: IR spectroscopy, helium pycnometry and nitrogen porometry.

Key words: sodium alginate, chitosan, aerogel, polyelectrolyte complex

Введение

В настоящий момент актуальным и перспективным является разработка материалов, которые обладают специфичными строго заданными свойствами. Одним из распространенных материалов является аэрогель- мезопористый материал, который обладает развитой пористой структурой и высокой удельной площадью поверхности. Аэрогели на основе биополимеров привлекают внимание в области медицины и фармацевтической промышленности в качестве высокоэффективных систем доставки лекарств и матриц для роста клеток тканей и органов. Среди всех биоматериалов особый интерес вызывают аэрогели на основе альгината натрия и хитозана [1]. Данные материалы нетоксичны, биосовместимы и биодegradуемы.

Несмотря на описанные преимущества аэрогели на основе рассматриваемых биополимеров имеют ряд недостатков. Например, с целью формирования аэрогелей на основе альгината натрия необходимо гелеобразование с использованием катионов кальция. Наличие катионов кальция в конечном изделие может способствовать повышению осмотического давления в клетке и как следствие вызвать ее разрушение [2]. С целью получения материалов на основе хитозана могут быть использованы токсичные соединения, например глутаровый альдегид, щелочи [3], которые

так же могут оказывать негативное влияние на клетки.

С целью решения данной проблемы актуальным и перспективным является использование аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса альгинат натрия – хитозан. Полиэлектролитный комплекс образуется при взаимодействии между анионами -COO⁻ альгината и катионами -NH₃⁺ хитозана, которое приводит к образованию стабильной ионной связи.

Формирование полиэлектролитного комплекса позволяет не только предотвратить использование токсичных сшивающих агентов, но и способствуют улучшению механических и физико-химических свойств аэрогелей на основе композиции альгинат натрия – хитозан [4].

В рамках данной работы представлены аналитические исследования аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса альгинат натрия-хитозан.

Экспериментальная часть

В рамках проведения экспериментальных исследований процесса получения аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса исследовалось влияние массового соотношения альгината натрия и хитозана на пористость, удельный объем пор и удельную площадь поверхности.

С целью получения аэрогелей была разработана методика, которая представлена на рис. 1.



Рис.1. Методика получения аэрогелей на основе полиэлектrolитного комплекса альгинат натрия – хитозан

В соответствии с представленной методикой проводится диспергирование порошка хитозана в растворе альгината натрия с заданной концентрацией (0,5; 1; 1,5; 2 масс.%) с использованием ротор-статорного гомогенизатора со вращения ротора 12000 об/мин на протяжении 5 минут.

После равномерного распределения хитозана в объеме геля альгината натрия проводится формирования требуемой геометрии изделий с последующей заморозкой при температуре -24°C на протяжении 24 ч. На следующем шаге проводится растворение порошка хитозана в растворе кислоты с целью образования полиэлектrolитного комплекса в соответствии с механизмом протекания реакции (рис. 2).

На следующем этапе проводится ступенчатая замена растворителя на изопропиловый спирт по схеме 20-40-60-80-100-100-100 масс.%. Завершающим этапом является процесс сверхкритической сушки на протяжении 5 ч. при давлении 120 бар, температуре 40°C , расходе диоксида углерода 1000 г/ч на установку, представленной в работе [5]. В рамках проведения экспериментальных исследований процессов получения аэрогелей на основе полиэлектrolитного комплекса и аналитических исследований материалов проведено варьирование массовых соотношений альгинат натрия: хитозан (1:1, 1:0,75, 1:0,5, 1:0,25).

С целью подтверждения образования полиэлектrolитного комплекса при растворении хитозана в растворе альгината натрия с использованием метода НПВО (нарушенного полного внутреннего отражения) получены графики ИК-спектроскопии для чистого альгината натрия и хитозана, а также аэрогелей на основе полиэлектrolитного комплекса альгинат – хитозан с различным массовым соотношением компонентов (рис. 3).

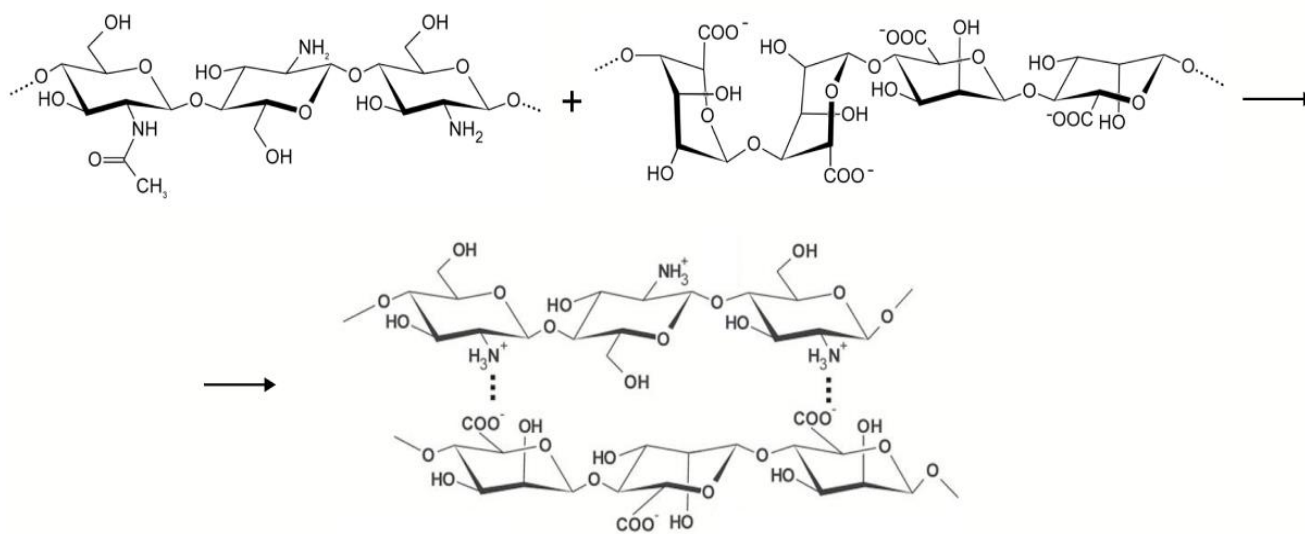


Рис.2. Механизм образования полиэлектrolитного комплекса альгинат натрия – хитозан

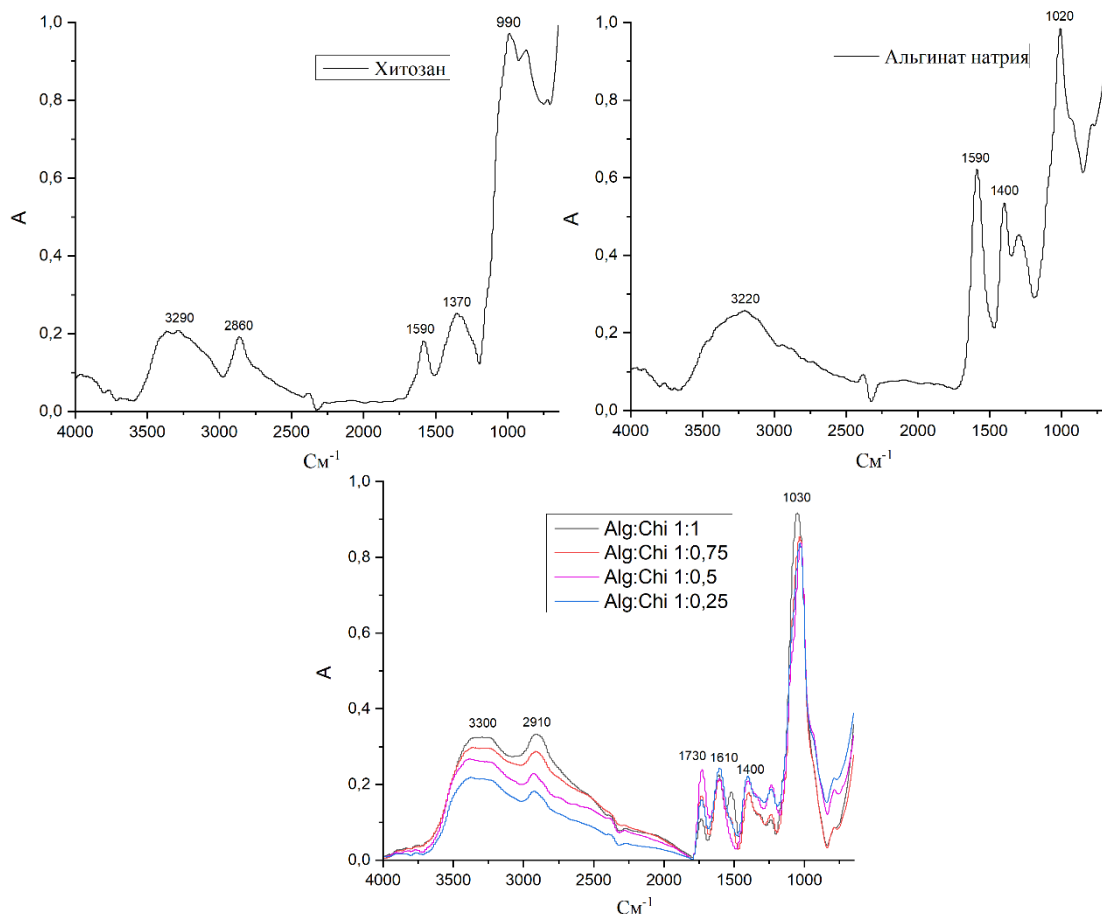


Рис.3. Графики ИК-спектроскопии аэрогелей на основе альгината, хитозана и полиэлектролитного комплекса альгинат – хитозан.

В ИК-спектрах аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса альгинат – хитозан наблюдаются изменения расположения некоторых полос и исчезновение или появление новых пиков по сравнению с чистыми альгинатом или хитозаном. Полиэлектролитный комплекс имеет более узкую и интенсивную полосу длиной около 3300 см^{-1} , что связано с образованием новых водородных связей между группами $-\text{OH}$ и $-\text{NH}_2$ в хитозане и группами $-\text{C}=\text{O}$ и $-\text{OH}$ альгината натрия. Новые пики около 1610 см^{-1} и 1730 см^{-1} наблюдались для всех четырех соотношений альгинат:хитозан. Пик при 1610 см^{-1} имеет примерно одинаковую интенсивность во всех четырех образцах. Пик при 1730 см^{-1} , соответствует асимметричному растяжению групп $-\text{COO}^-$, что подтверждает образование полиэлектролитного комплекса [6]. Интенсивность данного пика снижается с увеличением количества хитозана в соотношении альгинат:хитозан.

Кроме того, с целью определения влияния соотношения компонентов при получении аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса с использованием метода азотной порометрии были построены кривые адсорбции-десорбции азота при 77 К (рис. 4). На основании полученных результатов было установлено, что изотермы адсорбции-десорбции относятся к IV типу по классификации IUPAC, что характерно для мезопористых материалов. Наличие петли гистерезиса указывает на возникновение капиллярной конденсации. Стоит

отметить, что при увеличении концентрации хитозана в структуре наблюдается уменьшение количества адсорбированного азота.

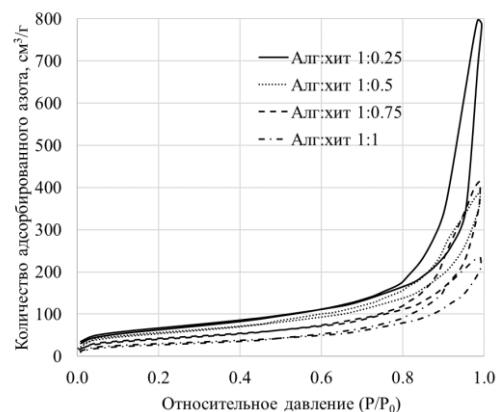


Рис.4. Изотермы адсорбции-десорбции для аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса альгинат натрия – хитозан.

Кроме того, с использованием результатов азотной порометрии определена удельная площадь поверхности и объем пор. С использованием результатов гелиевой пикнометрии определены значения истинной плотности и вычислены значения кажущейся плотности. Полученные данные были использованы с целью определения пористости аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса с различным соотношением альгинат:хитозан. Результаты проведенных аналитических исследований представлены в таблице 1.

Таблица 1. Характеристика аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса альгинат – хитозан

Соотношение Alg:Chi	Удельная площадь поверхности, м ² /г	Объем пор, см ³ /г	Истинная плотность, г/см ³	Кажущаяся плотность, г/см ³	Пористость, %
1:1	238	1.23	1.684	0.090	95
1:0,75	199	0.59	1.853	0.099	95
1:0,5	153	0.64	1.884	0.076	96
1:0,25	108	0.37	1.982	0.062	97

Увеличение концентрации хитозана приводит к увеличению истинной плотности, что в свою очередь обеспечивает армирующий эффект и уменьшение кажущейся плотности образцов. При увеличении концентрации хитозана наблюдается уменьшение удельной площади поверхности и объема мезопор, что связано с формированием неоднородной структуры и неполным растворением хитозана.

На основании результатов азотной порометрии построено распределение пор по размерам для аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса альгинат натрия – хитозан (рис. 5).

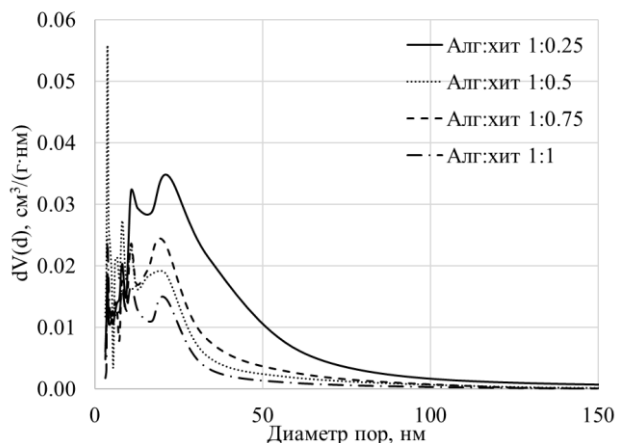


Рис.5. Распределение пор по размерам для аэрогелей на основе полиэлектролитного комплекса альгинат натрия – хитозан

Для всех рассматриваемых образцов преобладают поры размером 3-50 нм. На основании полученных результатов установлено, что с повышением концентрации хитозана объем мезопор уменьшается.

Заключение

В данной работе были получены аэрогели на основе полиэлектролитного комплекса альгинат натрия – хитозан. Было проведено варьирование концентрации хитозана (0,5; 1; 1,5; 2 масс. %). Для определения влияния соотношения компонентов (альгинат:хитозан) на свойства конечного материала и проведены аналитические исследования полученных аэрогелей: ИК-спектроскопия, гелиевая пикнометрия и азотная порометрия.

На графиках ИК-спектров для каждого из соотношений альгинат:хитозан обнаружен пик при

1730 см⁻¹, который соответствует асимметричному растяжению групп –COO⁻, что подтверждает образование полиэлектролитного комплекса альгинат – хитозан.

На основании результатов азотной порометрии определено, что все полученные аэрогели обладают мезопористой структурой, во всех материалах преобладают поры размером 3-50 нм. С увеличением концентрации хитозана повышается удельная площадь поверхности (108 – 238 м²/г) и удельный объем пор, уменьшается истинная плотность (1,853 – 1,684 г/см³) и пористость (96,86 – 94,66 %) полученных аэрогелей.

Работа выполнена при финансовой поддержке
Российским научным фондом № №23-73-01216

Список литературы

- Okutucu B. The medical applications of biobased aerogels: 'Natural aerogels for medical usage' //Medical Devices & Sensors. – 2021. – Т. 4. – №. 1. – С. e10168.
- Cao N., Chen X. B., Schreyer D. J. Influence of calcium ions on cell survival and proliferation in the context of an alginate hydrogel //International Scholarly Research Notices. – 2012. – Т. 2012. – №. 1. – С. 516461.
- Christen V. et al. Cytotoxicity and molecular effects of biocidal disinfectants (quaternary ammonia, glutaraldehyde, poly (hexamethylene biguanide) hydrochloride PHMB) and their mixtures in vitro and in zebrafish eleuthero-embryos //Science of the Total Environment. – 2017. – Т. 586. – С. 1204-1218.
- Singh A. K., Pramanik K. Fabrication and investigation of physicochemical and biological properties of 3D printed sodium alginate-chitosan blend polyelectrolyte complex scaffold for bone tissue engineering application //Journal of Applied Polymer Science. – 2023. – Т. 140. – №. 12. – С. e53642.
- Menshutina N. V., Lebedev A. E., Khudeev I. I. The Effect of the water-precursor ratio on the structural characteristics of alumina aerogels //Russian Journal of Physical Chemistry B. – 2020. – Т. 14. – С. 1229-1235.
- Sankalia M. G. et al. Reversed chitosan–alginate polyelectrolyte complex for stability improvement of alpha-amylase: Optimization and physicochemical characterization //European journal of pharmaceutics and biopharmaceutics. – 2007. – Т. 65. – №. 2. – С. 215-232.

УДК 519.233

Петрикова Е.А., Щербакова Л.А., М.Г. Гордиенко, Р.Р. Сафаров

Планирование оптимального эксперимента для определения состава композиции и условий его производства

Петрикова Е.А. – магистр кафедры химического и фармацевтического инжиниринга ФГБОУ ВО Российского химико-технологического университета Д.И. Менделеева (125047, Россия, Москва, Миусская пл., д. 9) E-mail: 190917@muctr.ru

Щербакова Л.А. – аспирант кафедры химического и фармацевтического инжиниринга ФГБОУ ВО Российского химико-технологического университета Д.И. Менделеева (125047, Россия, Москва, Миусская пл., д. 9) E-mail: shcherbakova.l.a@muctr.ru

Сафаров Р.Р. – Директор департамента (Департамент научно-технической политики) ФГБОУ ВО Российского химико-технологического университета имени Д.И.Менделеева (125047, Россия, Москва, Миусская пл., д. 9) E-mail: safarov.r.r@muctr.ru

Гордиенко М.Г. – д.т.н., профессор кафедры химического и фармацевтического инжиниринга ФГБОУ ВО Российского химико-технологического университета Д.И. Менделеева (125047, Россия, Москва, Миусская пл., д. 9) E-mail: gordienko.m.g@muctr.ru

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье описаны результаты оптимизации состава порошка для ингаляций с пролонгированным высвобождением антибиотика и условий его получения. В основе лежит двухстадийная технология, где на первом этапе формируют двойную эмульсию и добиваются отвердевания капель, а на втором этапе – сушат распылением полученную суспензию. Был проведен эксперимент в соответствии с дробной репликой, совмещенной с двумя латинскими квадратами. Проведенный регрессионный и дисперсионный анализ позволил определить оптимальные параметры процесса.

Ключевые слова: дробный факторный эксперимент, регрессионный анализ, факторный анализ

Design of optimal experiment to determine the drug composition and the condition of its production

Petrikova E.A., Shcherbakova L.A., Safarov R.R., Gordienko M.G.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article describes the optimization of the composition of the powder for inhalation with prolonged release of the antibiotic and the conditions for its preparation. It is based on a two-stage technology, where at the first stage a double emulsion is formed and the droplets harden, and at the second stage the resulting suspension is spray-dried. An experiment was conducted in accordance with a fractional factorial plan combined with two Latin squares. The regression and variance analysis carried out allowed us to determine the optimal process parameters.

Keywords: drug powder for inhalation, fractional factorial plan, ANOVA

Введение

В настоящее время наблюдается увеличение числа пациентов, у которых развивается резистентность к основным антибиотикам, применяем при терапии туберкулеза. Таблетированные формы могут вызывать побочные эффекты, влияющие на пищеварительную систему и печень, и вызывают затруднения у пациентов с проблемами глотания не могут использовать пероральные препараты. Лечение инъекционной формой требует посещения стационара. Разработка порошковой ингаляционной формы пролонгированного действия является актуальной задачей. Такая форма более удобна для пациента, позволяет доставлять лекарство к очагу инфекции, минуя ЖКТ, что в комплексе будет способствовать снижению риска несвоевременного завершения курса терапии и развитию устойчивости штаммов к антибиотикам [1].

Экспериментальная часть

В данных исследованиях использована двухстадийная технология, где на первом этапе

формируют двойную эмульсию и добиваются отвердевания капель, а на втором этапе – сушат распылением полученную суспензию. Введение в состав композиции гидрофобных полимеров обеспечивает пролонгированное высвобождение, а обезвоживание суспензии распылением позволяет стабилизировать композицию в виде сухого порошка, пригодного для использования в индивидуальных дозированных порошковых ингаляторах (ДПИ). С целью выбора оптимальных состава и параметров формирования двойной эмульсии и распылительной сушки было предложено использовать методы планирования оптимального эксперимента. В качестве интересующих факторов были выбраны 7 количественных и 1 качественный (см. таблицу 1).

Совмещение качественных и количественных факторов возможно путем наложения одного или двух латинских квадратов на полный факторный эксперимент (ПФЭ) или дробную реплику от него (ДР).

Факторы X1-X6 варьируются на 2-х уровнях, факторы X7-X8 варьируются на 4-х уровнях. В

качестве варьируемых составов выбраны такие полимеры как полимолочная кислота (ПМК), полимолочная-со-гликолевая кислота (ПМГК) и поликапролактон (ПКЛ).

В рамках исследования было проведено 16

экспериментов. Для определения качества порошковой композиции оценивались: выход продукта, остаточная влажность, угол откоса и медианный размер частиц. Результаты представлены в таблице 2.

Таблица 1. Исследуемые факторы и уровни их варьирования

Фактор	Обозначение	Уровни варьирования			
		+1		-1	
Отношение w1/o (масс/масс)	X1	1/5		1/10	
Время обработки первичной эмульсии УЗ (с)	X2	60		30	
Интенсивность гомогенизации вторичной эмульсии (об/мин)	X3	6000		3000	
Длительность вторичной гомогенизации (с)	X4	60		30	
Температура сушильного агента на входе в камеру (С°)	X5	180		150	
Расход сжатого воздуха на форсунку (мм.возд.ст.)	X6	50		40	
Концентрация порообразователя (%)	X7	1	2	3	4
		0,5	1	1,5	2
Тип полимера	X8	A	B	C	D
		ПМК	ПМГК	ПКЛ	ПКЛ:ПМК

Таблица 2. Результаты исследований

	Полилактид	Поликапролактон
Выход, %	от 18,56 до 38,57	от 22,5 до 42
Медианный размер частиц, мкм	от 0,36 до 4	от 0,2 до 8,5
Угол откоса, °	от 31 до 40	от 36 до 45
Остаточная влажность, %	от 2,61 до 4,67	от 1,8 до 3,76
	Полимолочная-со-гликолевая к-та	ПЛ:ПКЛ (50:50)
Выход, %	от 15,7 до 47	от 26,4 до 70,81
Медианный размер частиц, мкм	от 0,94 до 8,65	от 4,4 до 7,1
Угол откоса, °	от 44 до 50	от 39 до 45
Остаточная влажность, %	от 1,36 до 3,46	от 1,54 до 4,6

Эффекты факторов, введенных в план на двух уровнях, вычисляются следующим образом. Пусть проделано $N = 2^{2k}$ опытов по схеме сложного плана. В план введены n факторов, из них m установлено на $l = 2^k$ уровнях, а $(n - m)$ – на двух уровнях. Тогда главный эффект фактора x_i ($i = 1, 2, \dots, n-m$) получается как разность между суммой откликов во всех опытах, в которых x_i установлен на верхнем уровне x_i^1 , и суммой откликов во всех опытах, в которых x_i установлен на нижнем уровне x_i^0 , деленная на число опытов в плане (1).

$$m_i = \frac{1}{N} [\sum y(x_1, \dots, x_i^1, \dots, x_{n-m}) - \sum y(x_1, \dots, x_i^0, \dots, x_{n-m})] \quad (1)$$

Эффекты факторов, введенных в план на $l = 2^k$ уровнях, вычисляются отдельно для каждого уровня. Эффект фактора x_j ($j = n - m + 1, \dots, n$) на q -м уровне ($q = 0, 1, 2, \dots, l-1$) равен сумме откликов во всех опытах, в которых фактор x_j установлен на q -м уровне, деленной на число вхождений ($l = 2^k$) в план фактора x_j установлен на q -м уровне (2):

$$x_j(q) = \frac{\sum y(x_1, \dots, x_j^q, \dots, x_n)}{l}, \quad (2)$$

Значимость эффектов факторов X1-X6 проверялась по критерию Стьюдента по следующему соотношению (3):

$$t_j = \frac{|b_j|}{S_{b_j}}, \quad (3)$$

где b_j – эффект фактора (j от 1 до 6), S_{b_j} – ошибка j -го эффекта.

Если t_j меньше табличного значения $t_p(f)$ для выбранного уровня значимости p и числа степеней свободы $f = f_{воспр}$, то коэффициент b_j незначим.

Для оценки значимости различий между эффектами уровней факторов, введенных в план на числе уровней $l > 2$, используют множественный ранговый критерий Дункана [2].

При применении критерия Дункана следует проранжировать k средних значений, расположив их в порядке возрастания. Затем определить ошибку воспроизводимости результатов $S_{воспр}$ с соответствующим числом степеней свободы $f_{воспр}$.

Далее определить ошибку для каждого среднего (4):

$$s_{jcp} = \sqrt{\frac{s_j^2}{n_j}}, j = 1, 2, \dots, k \quad (4)$$

После необходимо определить (k-1) значение рангов с выбранным уровнем значимости, числом $n_D = f_{\text{воспр}}$ и $p = 2, 3, \dots, k$ согласно таблице Дункана и умножить эти значения рангов на S_{jcp} и таким образом определить (k-1) наименьших значимых рангов. В конце проверить значимость различия между

средними, начиная с крайних в ранжированном ряду [3].

Согласно описанной выше методике, значимость факторов, введенных на 2-х уровнях, оценивали с помощью критерия Стьюдента, а значимость различия между эффектами факторов X7 и X8 (концентрация порообразователя и тип полимера соответственно), введенных в план на четырех уровнях, проверялась с использованием множественного критерия Дункана. Результаты расчетов представлены в таблице 3.

Таблица 3. Значимые эффекты факторов

Факторы	Выход продукта	Остаточная влажность	Угол откоса	Медианный размер (D ₅₀)
Отношение w1/o (масс/масс)	+1,24	+0,04	+0,87	-0,30
Время обработки первичной эмульсии УЗ (с)	+1,10	+0,08	-0,37	+0,21
Интенсивность гомогенизации вторичной эмульсии (об/мин)	+0,98	-0,50	-0,12	+0,88
Длительность гомогенизации вторичной эмульсии (с)	-1,35	+0,52	-0,62	+0,24
Температура сушильного агента на входе в камеру (°C)	-0,55	-0,15	-0,62	-0,66
Расход сжатого воздуха на форсунку (мм.возд.ст.)	+10,17	+0,34	0	-1,33
Факторы	Выход продукта	Остаточная влажность	Угол откоса	Медианный размер
Концентрация порообразователя	28,20	3,26	38,0	4,78
	33,15	2,24	41,5	2,32
	34,05	3,14	40,0	3,37
	37,84	3,57	41,5	4,38
Тип полимера	28,34	3,55	36,0	2,18
	29,67	2,38	44,5	3,72
	29,18	3,03	39,25	4,14
	46,05	3,26	41,25	4,83

Значимые эффекты факторов выделены серым цветом. Основываясь на результатах были определены оптимальные значения факторов, которые соответствуют опыту №4: 1/10 (масс/масс) отношение w1/o, время обработки первичной эмульсии ультразвуковым гомогенизатором 60 с, интенсивность гомогенизации вторичной эмульсии 3000 об/мин, длительность гомогенизации вторичной эмульсии 30 с, температура сушильного агента на входе в камеру 150 °C, расход сжатого воздуха на форсунку 50 мм.возд.ст, концентрация порообразователя 2%, тип полимера ПКЛ:ПЛ (50:50).

Благодарности

Анализ выполнен при финансовой поддержке
Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации в рамках научной тематики
FSSM-2022-0004.

Библиографический список

1. Margarida S. Miranda, Márcia T. Rodrigues, Rui M.A. Domingues, Egídio Torrado, Rui L. Reis, Jorge Pedrosa, Manuela E. Gomes, Exploring inhalable polymeric dry powders for anti-tuberculosis drug delivery, Materials Science and Engineering: C, Volume 93, 2018, Pages 1090-1103
2. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. – М.: Высшая школа, 1985
3. Использование функции желательности Харрингтона при решении оптимизационных задач химической технологии: учеб. пособие / С.Л. Ахназарова, Л.С. Гордеев – М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2003. – 76с.

УДК 004.942:577.151.45

Покотиленко Е.А., Скичко А.С.

Разработка расчётного модуля для демонстрации бифуркаций в ферментативном процессе с субстратным ингибированием

Покотиленко Евгения Александровна – студент 2 курса магистратуры кафедры кибернетики химико-технологических процессов; epokotilenko@mail.ru.

Скичко Алексей Сергеевич – кандидат технических наук, доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов; olf_1@list.ru.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье описаны особенности реализации расчётного модуля, предназначенного для наглядной демонстрации качественных переходов в модели ферментативного процесса с субстратным ингибированием, происходящих при изменении управляющих параметров. В модуле были выделены блоки определения координат неподвижных точек, построения траекторий, параметрического и фазового портрета. С помощью задания регулируемых смещений относительно координат неподвижных точек была учтена возможность автоматической подстройки графиков под разные наборы исходных параметров. Разработанный модуль был введён в учебный процесс для облегчения выполнения студентами лабораторной работы по изучению бифуркаций седло–узел, наблюдаемых в данной модели.

Ключевые слова: бифуркация, ферментативный процесс, неподвижная точка, демонстрационный модуль.

Development of a computational module for demonstrating bifurcations in an enzymatic process with substrate inhibition

Pokotilenko E.A., Skichko A.S.

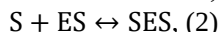
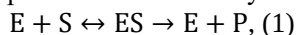
D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article describes the features of the implementation of a computational module designed to visually demonstrate qualitative transitions in the model of an enzymatic process with substrate inhibition that occur when control parameters change. In the module, blocks for determining the coordinates of fixed points, building trajectories, parametric and phase portraits were allocated. By setting adjustable offsets relative to the coordinates of fixed points, the possibility of automatically adjusting graphs to different sets of initial parameters was taken into account. The developed module was introduced into the educational process to facilitate the students' laboratory work on the study of saddle–node bifurcations observed in this model.

Key words: bifurcation, enzymatic process, fixed point, demonstration module.

Введение

В настоящей работе рассматривается процесс, протекающий в проточном ферментёре (1) и (2) с учетом ингибирования избытком субстрата [1]:



где E – фермент (прикрепляется неподвижно по сетке матрикса), S – субстрат (подаётся протоком), ES и SES – промежуточные комплексы, P – продукт ферментативного синтеза.

Реакция (1) описывает преобразование субстрата в продукт через образование промежуточного фермент-субстратного комплекса; реакция (2) – пассивацию фермент-субстратного комплекса при избытке субстрата (т.е. субстратное ингибирование ферментативного процесса).

Математическая модель (3) и (4) процесса при условии постоянства суммарной концентрации всех форм фермента имеет вид:

$$\frac{dS}{dt} = S_0 D - SD - W, (3)$$

$$\frac{dP}{dt} = -PD + W, (4)$$

$$W = \frac{kE_0 S}{K_s + S + K_i S^2}, (5)$$

где S_0 – концентрация субстрата в питающем потоке, D – скорость разбавления, W – суммарная скорость процесса, E_0 – начальная концентрация фермента, K_i – константа субстратного ингибирования, K_s – константа насыщения.

Для данной системы константы K_i , K_s , k характеризуют свойства выбранного фермента в конкретных условиях и поэтому как управляющие параметры не рассматриваются. Параметры D и S_0 , напротив, можно изменять по ходу протекания процесса, что определило их выбор в качестве управляющих для бифуркационного анализа [2].

Экспериментальная часть

Целью настоящей работы была разработка расчётного модуля, наглядно демонстрирующего возможные качественные переходы в системе с учётом адаптивности графиков для возможности задания разных вариантов констант K_i , K_s , k. Для разработки модуля использовался EXCEL [3], дифференциальные уравнения (3) и (4) рассчитывались с помощью явного метода Эйлера. Отдельной задачей была группировка основного массива расчётов на скрытых рабочих листах и вынесение графической составляющей на основной лист вместе с возможностью варьирования исходных данных.

Таким образом, разрабатываемый модуль должен был состоять из трёх рабочих листов:

- 1) основной (демонстрационный) лист с исходными данными и графиками,
- 2) скрытый лист для расчёта координат неподвижных точек системы (3)–(5),
- 3) скрытый лист для расчёта траекторий, предназначенных для построения фазового портрета.

Для определения неподвижных точек требуется подставить (5) в (3) и приравнять производную нулю. При этом получается кубическое уравнение. Как известно, общей методологии аналитического решения таких уравнений не существует, поэтому в данном случае использовались численные методы, а именно метод итерационного масштабирования интервала, отличающийся максимально простым алгоритмом и при этом позволяющий найти корни уравнения за гарантированное число однотипных итераций.

Описываемый рабочий лист был назван «корни» (рис. 1). Вначале на нём была задана сетка значений S с шагом 0,01 (столбец А). Начальной точкой сетки был задан не 0 согласно физическому смыслу задачи, а незначительное смещение величиной 10^{-10} , поскольку иначе метод может «не заметить» целочисленные корни. На основе традиционного критерия смены знака производной $\frac{dS}{dt}$ (столбец В) при переходе на следующую итерацию определялись

все три возможных корня уравнения (3) с исключением из дальнейшего рассмотрения всех прочих интервалов путём задания им текстового формата (столбец D). Сложность ситуации заключается в том, что в полученном столбце легко выделить наибольший и наименьший из корней с помощью функций МАКС() и МИН(), а для среднего корня аналогичной функции в арсенале EXCEL не существует. Поэтому пришлось сделать дублирующий расчёт с исключением первого (наименьшего) корня (столбцы Е–Н) с помощью функции:

$$=ЕСЛИ(И(F4*F5<0;E4<>\$I\$4);E4;"-"), (6)$$

где условие $F4*F5<0$ является условием проверки смены знака $\frac{dS}{dt}$ на интервале, заданном в ячейках Е4 и Е5, условие $E4<>\$I\4 проверяет исключение первого (наименьшего) корня, вынесенного по итогам первичного расчёта в ячейку I4.

Таким образом, средний корень теперь может быть определён с помощью функции МИН() из столбца Н.

Далее, для каждого корня был предусмотрен блок масштабирования (рис. 2) искомого интервала для достижения точности 10^{-7} (данное значение было выбрано как достаточное для визуализации, поскольку погрешности такого порядка на графиках в абсолютных единицах не видны). Итерационная единица каждого блока по структуре практически идентична описанной выше.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	dS				dS			
2	0,01				0,01			
3	S	dS/dt	W		S	dS/dt	W	
4	1E-10	4	4,2E-10	A4;"-")	1E-10	4	4,2E-10	-
5	0,01	3,95614	0,04186	-	0,01	3,95614	0,04186	-
6	0,02	3,91256	0,08344	-	0,02	3,91256	0,08344	-
7	0,03	3,86927	0,12473	-	0,03	3,86927	0,12473	-
8	0,04	3,82625	0,16575	-	0,04	3,82625	0,16575	-
9	0,05	3,78353	0,20647	-	0,05	3,78353	0,20647	-

Рис. 1. Скриншот листа «корни»

	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V	W	X
1	dS				dS				dS				dS			
2	0,0001				0,00001				1E-06				1E-07			
3	S	dS/dt	W		S	dS/dt	W		S	dS/dt	W		S	dS/dt	W	
4	0,499	0,00018	2,25032	-	0,4999	1,8E-05	2,25003	-	0,49999	1,8E-06	2,25	-	0,5	1,8E-07	2,25	-
5	0,4991	0,00016	2,25029	-	0,49991	1,6E-05	2,25003	-	0,49999	1,6E-06	2,25	-	0,5	1,6E-07	2,25	-
6	0,4992	0,00014	2,25026	-	0,49992	1,4E-05	2,25003	-	0,49999	1,4E-06	2,25	-	0,5	1,4E-07	2,25	-
7	0,4993	0,00013	2,25022	-	0,49993	1,3E-05	2,25002	-	0,49999	1,3E-06	2,25	-	0,5	1,2E-07	2,25	-
8	0,4994	0,00011	2,25019	-	0,49994	1,1E-05	2,25002	-	0,49999	1,1E-06	2,25	-	0,5	1,1E-07	2,25	-
9	0,4995	9E-05	2,25016	-	0,49995	8,9E-06	2,25002	-	0,5	8,9E-07	2,25	-	0,5	8,9E-08	2,25	-
10	0,4996	7,2E-05	2,25013	-	0,49996	7,1E-06	2,25001	-	0,5	7,1E-07	2,25	-	0,5	7,1E-08	2,25	-
11	0,4997	5,4E-05	2,2501	-	0,49997	5,4E-06	2,25001	-	0,5	5,4E-07	2,25	-	0,5	5,4E-08	2,25	-
12	0,4998	3,6E-05	2,25006	-	0,49998	3,6E-06	2,25001	-	0,5	3,6E-07	2,25	-	0,5	3,6E-08	2,25	-
13	0,4999	1,8E-05	2,25003	0,4999	0,49999	1,8E-06	2,25	0,49999	0,5	1,8E-07	2,25	0,5	0,5	1,8E-08	2,25	0,5
14	0,5	-2E-11	2,25	-	0,5	-2E-11	2,25	-	0,5	-2E-11	2,25	-	0,5	-2E-11	2,25	-

Рис. 2. Скриншот блока масштабирования

Найденные координаты S неподвижных точек передавались на основной лист, названный «фазовый портрет». Координаты P рассчитывались по формуле:

$$P = S_0 - S. (7)$$

В случае, когда искомая неподвижная точка была единственной, дублирующий расчёт с исключением наименьшего (т.е. единственного) корня (столбцы Е–Н) переводил все интервалы в текстовый формат и

поэтому блок уточнения среднего корня работал вхолостую, что необходимо было учесть при передаче информации на лист «фазовый портрет» во избежание получения некорректных результатов путём дублирования первого корня (выведенного в ячейку B14 согласно (8)) с помощью функции:

=ЕСЛИ(МИН(Корни!X19:X29)=0;B14;МИН(Корни!X19:X29)). (8)

Таким образом, если неподвижная точка только одна, то в диапазоне (Корни!X19:X29) все ячейки будут текстовыми и значение МИН(Корни!X19:X29) будет равно 0, – именно в этом случае в ячейки для 2-й и 3-й неподвижных точек продублируется первая.

Основной лист (рис. 3) разделен на несколько смысловых блоков. Левый верхний угол отведён для

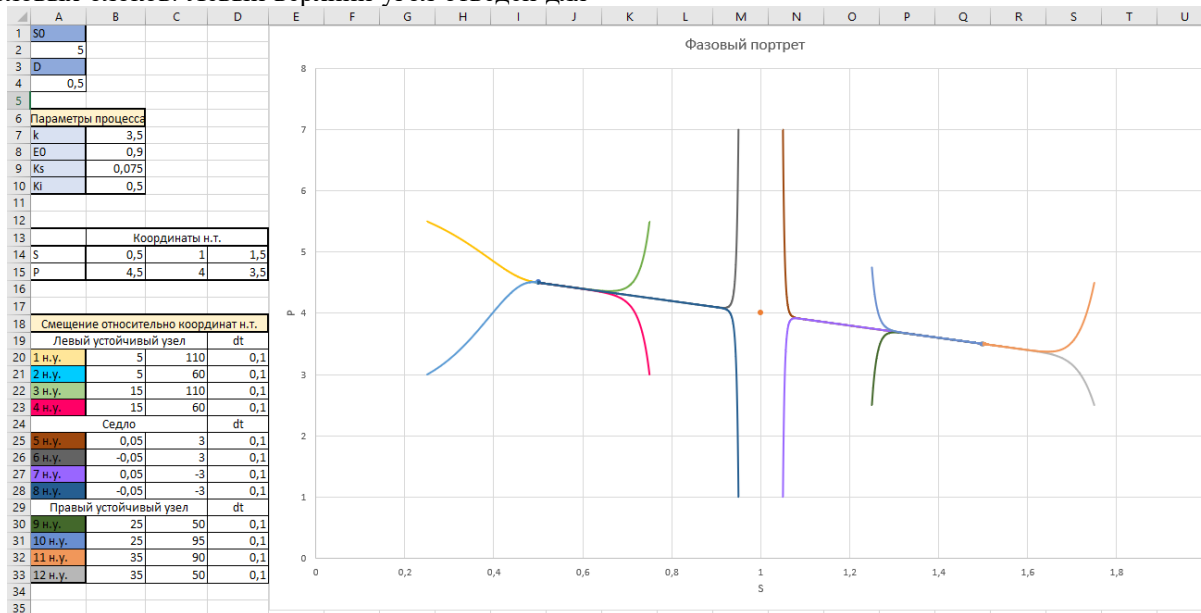


Рис. 3. Скриншот листа «Фазовый портрет»

Предлагаемая в модуле система адаптивного смещения начальных условий относительно неподвижных точек позволяет не только визуально грамотно расположить траектории, но и наблюдать развитие системы в рамках бифуркационного анализа путём демонстрации бифуркационной памяти. Так, для 1-й и 3-й неподвижных точек, являющихся устойчивыми узлами, требовалось показать протяжённость траекторий при стремлении их к точкам, поэтому начальные условия для них задавались в виде доли (в примере (9) ячейка B19) от S_0 (ячейка A2) как максимально возможной концентрации в аппарате:

=«Фазовый портрет!»\$A\$2*«Фазовый портрет!»B19/100. (9)

А для траекторий, относящихся к седлу, необходимо задавать начальные условия вблизи координаты S неподвижной точки, поэтому смещение задавалось в абсолютных единицах:

=«Фазовый портрет!»B25+«Фазовый портрет!»C13, (10) где ячейка C13 соответствует координате S неподвижной точки седло, а ячейка B25 – задаваемому смещению.

Сам фазовый портрет в виде диаграммы также представлен на листе «Фазовый портрет» справа (рис.

задания исходных данных процесса, причём, управляющие параметры вынесены отдельно. Ниже выводятся координаты неподвижных точек, рассчитанные на листе «корни». Внизу расположен блок корректировки начальных условий для траекторий фазового портрета путём задания смещения относительно координат неподвижных точек. Построенные таким образом траектории в большинстве случаев будут адаптивно меняться при изменении исходных данных, однако, в редких случаях, ручная корректировка начальных условий также может быть востребована (с этой целью траектории окрашены в такие же цвета, как и соответствующие ячейки данного блока).

3). Расчет траекторий производился на скрытом листе «Траектории».

Отдельной задачей стояло создание «сигнальных» ячеек для определения бифуркационных состояний. Изменение управляющих параметров (D и/или S_0) будет вызывать перемещение неподвижных точек по фазовому портрету, при этом должно наблюдаться сближение седла с одним из узлов, которое происходит до момента их слияния в рамках седло-узловой бифуркации [4]. Однако поскольку координаты неподвижных точек в общем случае являются бесконечными дробями, то требуется задать точность определения момента бифуркации, который был выбран равным 0,002 с учётом того, что данная погрешность на фазовом портрете заметна не будет.

Чтобы пользователям не требовалось визуально сравнивать значения координат, и были предусмотрены указанные «сигнальных» ячейки, которые при достижении заданной точности определения бифуркации окрашивались в яркий цвет (с помощью комплекса правил условного форматирования) и в них появлялась надпись "УРА" (рис. 4). Однако, чтобы избежать некорректной работы «сигнальных» ячеек при наличии в системе только одной неподвижной точки, в

соответствующую команду потребовалось введение проверки на отсутствие идеального равенства координат:
 =ЕСЛИ(И(ABS(D13-C13)<0,002;C13<>D13);"УРА";"")

	Координаты н.т.		
S	0,472858	1,257237	1,258766
P	4,516003	3,731624	3,730095
			УРА
			УРА

Рис. 4. Скриншот регистрации бифуркационного состояния системы

Для визуализации перехода системы через бифуркационное состояние для ячеек с координатами неподвижных точек также были предусмотрены правила условного форматирования, изменяющие их цвет (рис. 5).

	Координаты н.т.		
S	0,361751	0,361751	0,361751
P	4,538249	4,538249	4,538249

Рис. 5. Скриншот регистрации постбифуркационного состояния системы

Разработанный расчётный модуль был успешно внедрён в образовательный процесс в рамках дисциплины «Методы нелинейной динамики» для проведения лабораторных работ по тематике бифуркации седло–узел.

Список литературы

1. Автоколебания, структуры и волны в химических системах. Методы математического моделирования: монография // Е. С. Куркина. - М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2012. - 219 с.
2. Элементы теории бифуркаций и динамических систем. Часть 1: учебно-методическое пособие по курсу Аналитическая механика / сост. А.В. Фомичев. – М.: МФТИ, 2019. – 42 с.
3. Функции EXCEL // Служба поддержки Майкрософт. Системные требования: EXCEL. URL: <https://support.microsoft.com/ru-ru/office/функции-excel-по-категориям-5f91f4e9-7b42-46d2-9bd1-63f26a86c0eb> (дата обращения: 15.04.2024).
4. Кольцова Э.М., Гордеев Л.С. Синергетика в химии и химической технологии: учебное пособие для вузов. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Издательство Юрайт, 2020. 295 с.

УДК 615.4

Саитгареева А.И., Абрамов А.А., Щербакова Л.А., Гордиенко М.Г.

Разработка конструкции дозирующего порошкового ингалятора

Саитгареева А.И. – магистр кафедры химического и фармацевтического инжиниринга ФГБОУ ВО Российского химико-технологического университета Д.И. Менделеева (125047, Россия, Москва, Миусская пл., д. 9) E-mail: 190910@muctr.ru

Абрамов А.А. – ассистент кафедры химического и фармацевтического инжиниринга ФГБОУ ВО Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева (125047, Россия, Москва, Миусская пл., д. 9) E-mail: abramov.a.a@muctr.ru

Щербакова Л.А. – аспирант кафедры химического и фармацевтического инжиниринга ФГБОУ ВО Российского химико-технологического университета Д.И. Менделеева (125047, Россия, Москва, Миусская пл., д. 9) E-mail: shcherbakova.l.a@muctr.ru

Гордиенко М.Г. – д.т.н., профессор кафедры химического и фармацевтического инжиниринга ФГБОУ ВО Российского химико-технологического университета Д.И. Менделеева (125047, Россия, Москва, Миусская пл., д. 9) E-mail: gordienko.m.g@muctr.ru

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Разработка инновационных систем доставки лекарственных препаратов для лечения респираторных заболеваний является крайне актуальной задачей. Порошки для ингаляций являются относительно новой лекарственной формой, требующей не только разработку состава композиции, но и дозирующего устройства для их доставки. В работе предложена конструкция дозирующего порошкового ингалятора. Для определения формы дозирующего устройства была разработана математическая модель, основанная на принципах механики сплошной среды.

Ключевые слова: дозированный порошковый ингалятор, модель устройства для ингаляторной доставки

DEVELOPMENT OF THE DESIGN OF A MEDIZED POWDER INHALER

A.I. Saïtgareeva¹, A.A. Abramov, L.A. Shcherbakova, M.G. Gordienko²

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia,
Russia, Moscow ¹saïtgareeva01@bk.ru, ²gordienko.m.g@muctr.ru

The development of innovative drug delivery systems for the treatment of respiratory diseases is an extremely urgent task. Powders for inhalation are a relatively new dosage form that requires not only the development of the composition, but also a dosing device for their delivery. The work proposes the design of a metered-dose powder inhaler. To determine the shape of the dosing device, a mathematical model was developed based on the principles of continuum mechanics.

Keywords: metered dose powder inhaler, model of device for inhalation delivery

Введение

Пациенты, страдающие специфическими респираторными заболеваниями, такими как муковисцидоз, туберкулез, астма, бронхит, ХОБЛ (хроническая обструктивная болезнь легких), рак легких, респираторные инфекции и т.д., нуждаются в местной доставке терапевтических средств для уменьшения системного побочного эффекта, снижения дозы, предотвращения метаболизма первого прохождения и улучшения биодоступности доставляемых лекарств [1]. Ингаляционная лекарственная форма является одной из самых сложных в разработке. Ее эффективность зависит не только от действующего вещества, но и от входящих в состав композиции ингредиентов, способа доставки. Основные подходы к ингаляционной доставке лекарств включают небулайзеры, дозированные ингаляторы (ДИ), дозированные порошковые ингаляторы (ДПИ) [2].

Дозированные порошковые ингаляторы (ДПИ) представляют собой устройства, способные доставлять лекарственный порошок прямо в дыхательную систему пациента. Они являются компактными и портативными, обычно применяемыми для лечения заболеваний дыхательной системы, таких как туберкулез, астма, хроническая обструктивная болезнь легких (ХОБЛ) и другие. Основным преимуществом таких ингаляторов является их способность обеспечивать быструю и эффективную доставку лекарственного вещества в легкие.

Их компактность и простота использования делают их удобными для пациентов всех возрастов. Ингаляторы могут быть наполнены дозированными кассетами заранее или использовать одноразовые капсулы с лекарством.

При использовании ингалятора пациентом, поток воздуха активирует механизм распыления порошка. Таким образом частицы легко проникают в

дыхательные пути и достигают нижних участков легких. Дозированные порошковые ингаляторы обладают следующими преимуществами: они не требуют пропеллентов или газов и не зависят от синхронизации между нажатием на дозатор и вдохом, что может быть сложным для некоторых групп пациентов.

Для эффективного развития ингаляционной терапии с использованием ДПИ необходимо оптимизировать всю совокупность факторов: состав композиции как с точки зрения фармакологических характеристик и безопасности, так и с точки зрения аэродинамических параметров, а также конструкцию порошкового ингалятора для обеспечения стабильного дозирования.

Анализ статей и патентов, связанных с дозированными порошковыми ингаляторами (ДПИ), позволил обобщить информацию о существующих технологиях, новейших разработках и тенденциях в данной области, понять основные принципы работы ДПИ, выявить преимущества и недостатки существующих конструкций, а также определить потенциальные направления для улучшения и инноваций.

Экспериментальная часть

В данном исследовании представлены результаты разработки и апробации дозированного порошкового ингалятора (ДПИ), функционирующего по принципу, заложенному в представленный на рынке ДПИ Twincer®, предложенный для доставки больших доз [3]. В данном ДПИ, при вдохе пациента за счет создаваемого разрежения возникает поток воздуха, который проходит через отсек с порошковой композицией, аэрирует и уносит ее. Далее поток разделяется между двумя параллельными

классификаторами, представляющими собой круговые каналы, в которых по мере движения воздуха с частицами происходит деагломерация частиц. Поток далее объединяется и через выходной канал поступает в верхние дыхательные пути пациента. Имеются опубликованные результаты клинических исследований, которые показали, что ингаляция порошковой композиции с использованием Twincer® удобна для пациентов, при этом не было обнаружено существенных различий в клинических результатах в отношении снижения функции легких и частоты обострений по сравнению с применением небулайзеров [4].

Необходимо отметить, что в литературе отсутствуют точные геометрические размеры ДПИ, соблюдение которых позволит добиться полноты извлечения дозы и разбиение агломератов. Данное исследование было посвящено созданию точной трехмерной модели дозирующего порошкового ингалятора, ее последующая печать и апробация.

Простота предложенной конструкции ингалятора, включающая в себя минимальное количество деталей (две вместо 3-х, используемых в ДПИ аналога) и интуитивно понятные элементы управления, была одним из важных аспектов при его разработке (см. рис. 1). Это позволяет обеспечить удобство использования устройства для широкого круга пользователей, а также уменьшить вероятность возникновения ошибок при его использовании.

Порошковая композиция размещается в специальной камере. При вдохе пациента через отверстие "А" в камере создается разрежение и через отверстие "Б", образуется поток воздуха, который аэрирует частицы из камеры и доставляет их в легкие.

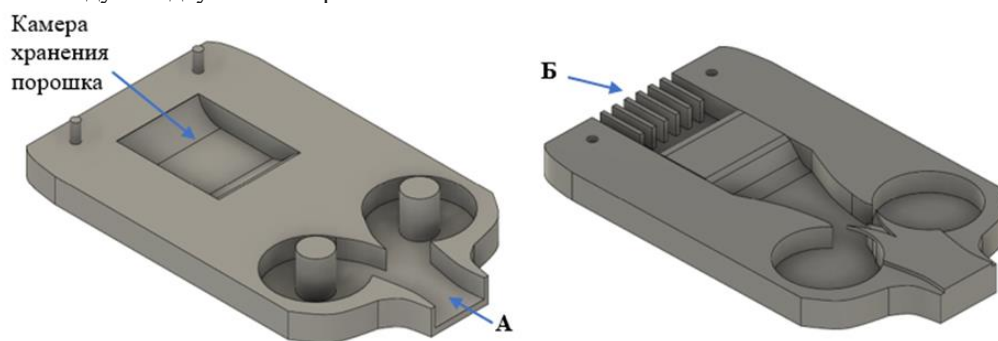


Рис. 1. Модель ДПИ (слева- нижняя часть ингалятора, справа- верхняя часть)

Две части ингалятора скрепляются между собой при помощи простого механизма соединения, который обеспечивает надежное и безопасное крепление, а также легкость сборки и разборки устройства для обслуживания или замены компонентов.

Работоспособность предложенной конструкции была подтверждена методами вычислительной гидродинамики. С целью осуществления математического моделирования был использован программный продукт Ansys Fluent 17.0. В рамках решения поставленной задачи была рассмотрена

однофазная модель без учета частиц ингаляционного порошка в стационарном виде.

Разработанная математическая модель представлена уравнениями законов сохранения массы и импульса, теплоперенос не учитывается (уравнение 1-4):

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla P + \nabla(\bar{\tau}) + \rho \vec{g} \quad (2)$$

$$\bar{\tau} = \mu \left((\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \vec{v} \cdot \nabla \right) \quad (3)$$

$$P = \rho RT \quad (4)$$

где ρ – плотность сплошной среды, кг/м³; $\vec{v}$ – вектор скорости сплошной среды, м/с; p – статическое давление, Па; $\vec{\tau}$ – тензор вязких напряжений; $\rho \vec{g}$ – сила тяжести, кг/м²•с²; μ – динамическая вязкость, Па•с; I – единичный тензор; P – давление газа, Па; T – температура газа, К; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль•К).

Приведенная система уравнений решается при следующих начальных и граничных условиях (уравнение 5,6):

$$\vec{v}(x, y, z)_{\text{вх}} = \vec{v}_{\text{нач}} \quad (5)$$

$$\vec{v}(x_{\text{ст}}, y_{\text{ст}}, z_{\text{ст}}) = 0 \quad (6)$$

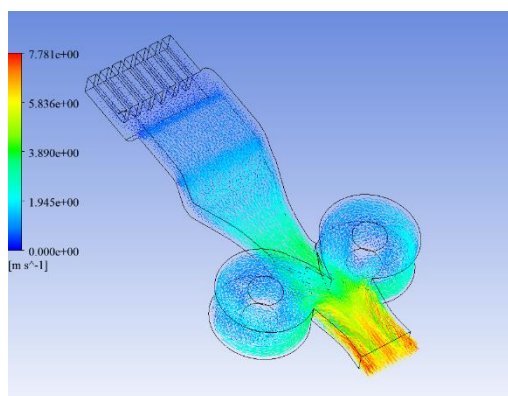
где x, y, z – пространственные координаты, м.

На основании результатов расчета построены распределения векторов скорости и направления потоков (см. рис. 2).

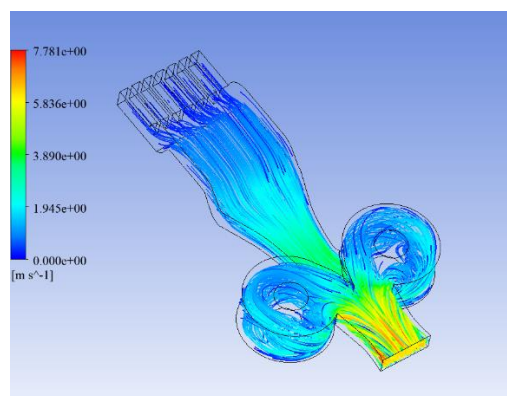
На основании результатов расчета было осуществлено уточнение всех геометрических размеров. Предложенная модель ДПИ была разработана с использованием системы автоматизированного проектирования Autodesk Fusion 360.

С целью получения физической модели был реализован процесс трехмерной печати с использованием 3D-принта Phrozen Shuffle XL Lite, с выполнением всех необходимых подготовительных этапов.

Полученный прототип ДПИ был исследован на полноту извлечения дозы. Масса порошка в ингаляторе изменилась с 0,259 г до 0,021 г (см. рис. 3). Эксперимент показал, что предложенная конструкция требует доработки, так как 8.1% дозы не извлеклось (остатки порошка были обнаружены в углах камеры).



а



б

Рис. 2. Результат расчета: а – векторы скорости; б – направления потоков



а



б

Рис. 3. Извлечение дозы порошка: а – до вдоха; б – после вдоха

Кроме того, было отмечено не полное смыкание верхней и нижней частей ДПИ. Дальнейшие исследования позволят ликвидировать выявленные недостатки конструкции.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерство науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (проект FSSM-2022-0004).

Библиографический список

1. Okuda T., Okamoto H. Present situation and future progress of inhaled lung cancer therapy: necessity of inhaled formulations with drug delivery functions //Chemical and Pharmaceutical Bulletin. – 2020. – Т. 68. – №. 7. – С. 589-602.

2. Саитгареева, А. И. Преимущества сухих порошков для ингаляций и методы их получения / А. И. Саитгареева, М. Г. Гордиенко // Успехи в химии и химической технологии. – 2022. – Т. 36, № 13(262). – С. 28-30. – EDN FPHXUX.

3. de Boer A. H. et al. Design and in vitro performance testing of multiple air classifier technology in a new disposable inhaler concept (Twincer®) for high powder doses //European journal of pharmaceutical sciences. – 2006. – Т. 28. – №. 3. – С. 171-178.

4. Akkerman-Nijland A. M. et al. Colistin dry powder inhalation with the Twincer™: An effective and more patient friendly alternative to nebulization //PLoS One. – 2020. – Т. 15. – №. 9. – С. e0239658.

УДК 543.42

Беляев Ю.И., Саксонов М.И.

Цветовая идентификация состава воздуха

Саксонов Михаил Игоревич – студент 1 курса магистратуры кафедры химическая технология;

Беляев Юрий Иванович – д.т.н., профессор кафедры, teplofon@bk.ru;

ФГБОУ ВО «Новомосковский институт РХТУ им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Новомосковск, 301665, ул. Дружбы, дом 8

В статье рассматривается метод цветовой идентификации состава воздуха, который позволяет сделать анализ получаемого изображения спектра и получить количественный и качественный состав воздуха. Приведены и обоснованы формулы, реализующие метод. Приведён интерфейс программы, реализующей метод, и результаты экспериментов по определению состава воздуха.

Ключевые слова: пламенно-колориметрический, хроматография, состав воздуха, метод

Color identification of air composition

Belyaev Yu.I., Saksonov M.I.

Novomoskovsk university of MUCTR, Novomoskovsk, Russian Federation

The article discusses the method of color identification of air composition, which allows you to analyze the resulting spectrum image and obtain the quantitative and qualitative composition of the air. Formulas that implement the method are given and justified. The interface of the program that implements the method and the results of experiments to determine the composition of air are presented.

Key words: flame-colonometric, chromatography, air composition, method

Введение

Существующие подходы к анализу состава воздуха: хроматография и различные газоанализаторы достаточно громоздкие [1, 2].

Известен эффект окрашивания вещества при его сгорании в воздухе [3]. В данной статье на его основе предлагается оперативно определять многокомпонентный состав воздуха. Экспресс метод позволяет быстро установить природу вещества, определяя количественный состав воздуха после соответствующей калибровки [5].

Разрабатываемый метод предполагает формирование цветового спектра веществ, сгораемых в воздухе, по изображению, получаемого с видеокamеры. Принципиальная схема установки, реализующей данный метод, представлена на рис. 8.

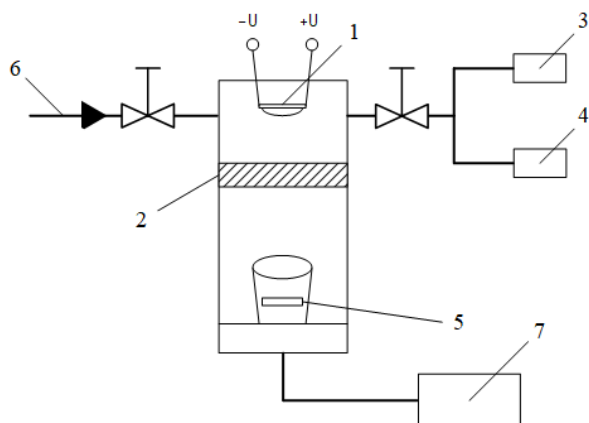


Рис. 8. Установка для получения цветового спектра воздуха: 1 — электронагреватель; 2 — стекло; 3 — насос; 4 — компрессор; 5 — КМОП-матрица; 6 — подаваемый воздух; 7 — ЭВМ

Установка работает следующим образом: в прибор насосом 3 подается атмосферный воздух, а компрессором 4 осуществляется продувка. Она

работает циклически и имитирует вдох выдох дыхания человека. Сенсор нагревает поступившую порцию воздуха, содержащиеся в ней вещества сгорают на сенсоре и изображение фиксируется КМОП-матрицей 5 ТВ камеры, после чего данные из КМОП-матрицы 5 подаются в ЭВМ 6. Затем, ЭВМ рассчитывает долю красного и синего в каждой точке изображения.

$$R / (R + G + B) \quad (1)$$

$$B / (R + G + B) \quad (2)$$

где R – значение амплитуды красного цвета;

G – значение амплитуды зеленого цвета;

B – значение амплитуды синего цвета.

Далее подсчитываются количества попаданий красного и синих цветов в соответствующие соты цветового треугольника, на котором откладываются на оси Y (ординат) – это доля красного цвета, относительно остальных цветов, а на оси X (абсцисс) – доля синего цвета, относительно других цветов. По этому цветовому треугольнику можно определить как состав сгораемого вещества, так и его концентрацию. Каждая ячейка цветового треугольника соответствует определённому цвету. Причём, каждая сотовая ячейка также содержит информацию о количестве попавших точек изображения, согласно формулам (1) и (2). Разрешение цветового спектрометра определяется количеством идентифицируемых цветов, т. е. размером грани сотовой ячейки в виде квадрата. Общее количество цветов согласно формуле (3) равно:

$$N = (1 + n) \cdot \frac{n}{2} \quad (3)$$

Все цвета, идентифицируемые прибором, показаны на рис 2.

$$H = \frac{1}{n} \quad (4)$$

где H – размер грани цветового ij -ого квадрата для подсчёта попаданий из изображения;

n – число разбиений долей красного и синего цвета.

Все координаты центров сот цветового треугольника рассчитываются независимо.

$$X_i = \frac{x}{n} - \frac{H}{2} \quad (5)$$

$$Y_j = \frac{y}{n} - \frac{H}{2} \quad (6)$$

где X_{ij} – это координаты центра сотового квадрата красного;

Y_{ij} – координаты центра синего квадрата.

Затем, находим зелёный цвет по формуле (7).

$$Z_{ij} = H(1 - X_{ij} - Y_{ij}) \quad (7)$$

После чего рассчитываем яркость в сотовом квадрате по формуле (8).

$$C = A(X_{ij} + Y_{ij} + Z_{ij}) \quad (8)$$

где A – яркость отображаемых цветов спектра.

Далее, вычисляются координаты, по условию (9) – координаты учёта попаданий красного цвета по оси абсцисс, а по условию (10) – координаты учёта попаданий синего цвета по оси ординат, учёта попаданий пикселей изображения в сотовый квадрат и рассчитываются независимо друг от друга.

$$X_i - 0.5H < X_i \leq X_i + 0.5H \quad (9)$$

$$Y_j - 0.5H < Y_j \leq Y_j + 0.5H \quad (10)$$

Цветовой спектрометр состава воздуха на рис.1 состоит из электрического нагревательного элемента, (сенсора) под него порциями поступает газ, который сгорает на сенсоре. Каждое вещество (газ), попадая на элемент, в результате сгорания, испускает свой определённый цвет излучения [4]. Одновременно могут сгорать несколько веществ.

Фиксирование изображения сенсора сгорающего вещества происходит при помощи светочувствительной КМОП-матрицы в оптическом диапазоне излучения (740 — 400 нм), которая фиксирует за некоторый промежуток времени горения вещества снимок этого горения.

Изображение горения вещества в пламени раскладывается на три цвета: красный, зелёный и синий. Затем фиксируется и сохраняется последовательно, кадр за кадром, для последующей обработки.

Анализ сохранённых изображений осуществляется путём суммирования попавших в каждую сотовую ячейку по неравенству (9-10).

От цвета сотовой ячейки зависит то, какое вещество, при его сгорании попало на сенсор. Сумма попавших за время экспозиции точек зависит от концентрации компонента состава. Таким образом мы можем определить и количество этого вещества.

Последний этап анализа формирование результатов:

- таблица попаданий;
- цветовой спектр попаданий;
- цветовой треугольник попаданий соответствующих цветов изображения в его сотах;
- график временных трендов попаданий.

Таблица попаданий содержит:

- название объекта;
- номер линии спектра;
- долю красного цвета в процентном соотношении;
- долю синего цвета в процентном соотношении;

- значение красного цвета в определённом участке спектра;
- значение синего цвета в определённом участке спектра;
- количество попаданий (амплитуда) точек изображения в данный номер линии спектра.

Цветовой спектр попаданий в сотовые точки спектра представляет собой транспонированный график полученного спектра и показывает амплитуду каждого номера цвета. Каждая интенсивность (амплитуда) этих цветов показывает количество попаданий в сотовую точку спектра одинаковых цветов. По этому графику можно определить концентрацию сгоревшего вещества после.

Цветовой треугольник попаданий соответствующих цветов изображения в его сотах представляет собой график, в котором по оси ординат откладывается график значения синего цвета, по оси абсцисс красного. В зависимости от цвета, ячейки занимают определённое положение на этом графике. Далее, эти ячейки закрашиваются определённым цветом согласно выбранной палитре, в зависимости от количества попавших в них данных.

Основными параметрами, влияющими на измерения спектра являются:

- экспозиция;
- светочувствительность ISO;
- выдержка.

Настраивая эти параметры в настройках камеры нужно добиться того результата, чтобы значения пикселей на снимке из камеры не превышали свой определённый порог. Для стандартного режима динамического диапазона камеры это значения 0 — 255 дискретных уровней яркости для красного, зелёного и синего субпикселей. Для расширенного динамического диапазона (например HDR10) эти значения не должны превышать числа 1024.

Была проведена серия экспериментов, один из результатов которой приведён на рис. 9.

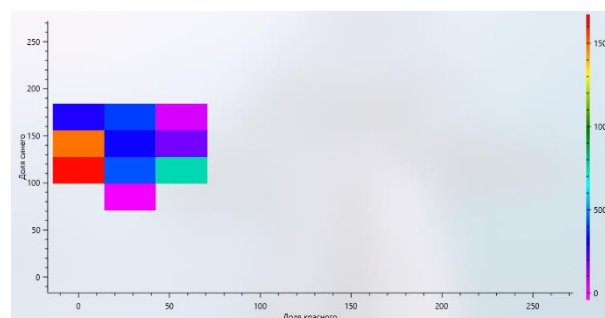


Рис. 9 Результаты эксперимента для воздуха в виде цветowego треугольника попаданий

Результаты эксперимента, приведённого на рис. 9 могут быть представлены в табличном виде в таблице

таблица 3.

Другой результат, для дыхания, приведён на рис. 11.

Таблица 3. Результат эксперимента для воздуха

Красный %	Синий %	Кол-во красного	Кол-во синего	Кол-во
50	0	128	0	1483
40	0	102	0	1617
40	10	102	26	435
30	10	76	26	16
50	10	128	26	311
60	0	153	0	288
60	10	153	26	407
60	20	153	51	51
50	20	128	51	177
40	20	102	51	753

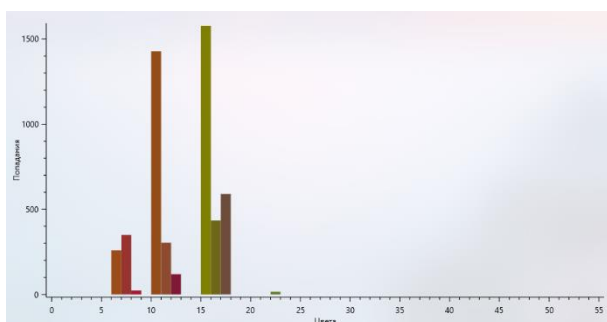


Рис. 10 Результаты эксперимента для воздуха в виде графика цветового спектра попаданий

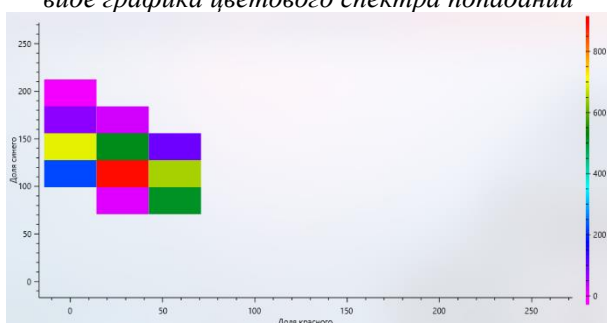


Рис. 11 Результаты эксперимента для дыхания в виде цветового треугольника попаданий

Результаты эксперимента, приведённого на рис. 11 представлены в табличном виде в таблице 4.

Таблица 4. Результат эксперимента для дыхания

Красный %	Синий %	Кол-во красного	Кол-во синего	Кол-во
40	20	102	51	650
50	20	128	51	97
50	10	128	26	516
40	10	102	26	885
30	10	76	26	16
30	20	76	51	508
50	0	128	0	695
60	0	153	0	75
60	10	153	26	26
40	0	102	0	225

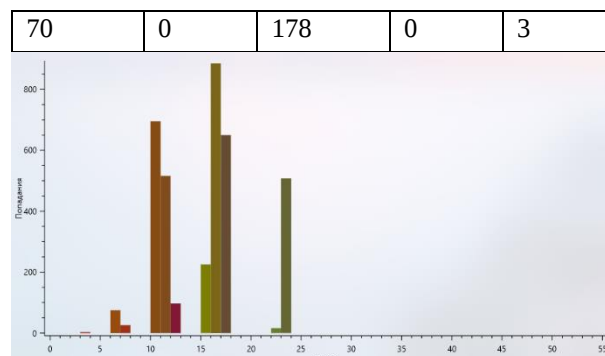


Рис. 12 Результаты эксперимента для дыхания в виде графика цветового спектра попаданий

Теперь мы можем сравнить по таблицам, спектрам и цветовым треугольникам результаты эксперимента с воздухом и определить природу вещества, путём подсчёта количество попавших в участок спектра точек в определённые доли красного и синего цвета.

Закключение

Сравнивая результаты экспериментов данный метод показал свою работоспособность, так как помимо природы вещества позволит определить концентрацию вещества.

Этот метод позволяет:

- удешевить конструкцию прибора;
- повысить оперативность идентификации состава воздуха;
- опробовать несколько методов анализа изображения спектра излучения.

Список литературы.

1. НПО Прибор ГАНК [Электронный ресурс] // ГАНК-4 (А), (Р), (АР) газоанализатор переносной: сайт. — URL: <https://www.gank4.ru/product/gazoanalizatory/gank-4fex-gazoanalizator-statsionarnyy/>
2. Платонов, И. А. Хроматографические методы анализа: учебное пособие / И. А. Платонов, Е. А. Новикова, В. И. Платонов. — Самара: Самарский университет, 2021. — 96 с. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/257048> (дата обращения: 29.05.2024)
3. Тидеман, Б. Г. Химия горения: Учебник для пожарных техникумов / Проф. Б. Г. Тидеман и Д. Б. Сциборский. - Изд. 3-е. - Ленинград: ОГИЗ. Гострансиздат, Ленингр. отд., 1935. - 356 с.
4. Матерова, С. И. Химия процессов горения: учебное пособие / С. И. Матерова. — Железногорск: СПСА, 2017. — 63 с. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/170752> (дата обращения: 29.05.2024)
5. Абдурагимов, И. М. Сборник статей по физике и химии горения и взрыва: сборник научных трудов / И. М. Абдурагимов. — Москва: МГТУ им. Баумана, 2011. — 159 с. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL:

<https://e.lanbook.com/book/106460> (дата обращения: 29.05.2024)

УДК 004.45: 004.415

Сидоренко Н.В., Лобанов А.В., Архипов А.М.

Разработка программного модуля для автоматизированной визуализации схем химико-технологических производств в 3D представлении

Сидоренко Никита Викторович – студент группы КС-48; sidorenko.n.v@muctr.ru.

Лобанов Алексей Владимирович – ассистент кафедры информационных компьютерных технологий; lobanov.a.v@muctr.ru.

Архипов Алексей Максимович – студент группы КС-43; 200081@muctr.ru.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

С ростом потребности в цифровизации во многих отраслях промышленности повышается необходимость в инструментах по автоматизированному проектированию. Данная работа является частью проекта по созданию программного модуля для конструирования схем химико-технологических производств и их дальнейшей визуализации в 3D представлении. Рассматриваются 3D модели и объекты, созданные с помощью программного модуля и визуализированные в виртуальной среде.

Ключевые слова: САПР, проектирование, цифровой двойник, виртуальное пространство.

Development of a software module for automated visualization of chemical-technological production schemes in 3D representation

Sidorenko N.V., Lobanov A.V., Arkhipov A.M.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

With the rise of digitalization in many industries, there is a need for computer-aided design tools. This work is part of a project to create a software module for creating diagrams of chemical technological production and their further visualization in 3D representation. We consider 3D models and objects created using software modules and visualized in environmental conditions.

Keywords: CAD, design, digital twin, virtual reality.

В современном мире проектирование химико-технологических производств является важной частью индустриального развития. Значение этих процессов трудно переоценить, поскольку оно полностью определяет успешность будущего предприятия. Кроме того, правильное проектирование производственных процессов позволяет снизить негативное воздействие на окружающую среду, благодаря внедрению более эффективных и экологически чистых технологий.

Основные принципы проектирования химико-технологических производств включают в себя несколько ключевых этапов, которые определяют успешность всего процесса.

Первым этапом является анализ требований и спецификаций производства. Он включает в себя изучение рыночных потребностей, особенностей производимой продукции, а также экологических и технологических ограничений.

Следующим этапом является разработка эффективных схем и структур производства. Это важная стадия, на которой определяется оптимальная организация производственных процессов, включая выбор линий производства, расположение оборудования и оптимизацию потоков материалов.

Заключительным этапом проектирования является определение ключевых параметров эффективности производства. Это позволяет установить показатели, по которым будет оцениваться успешность производственного

процесса, такие как производительность, качество продукции, энергоэффективность и другие. Стоит также отметить, что по завершению данного этапа возможно возвращение к разработке схем в случае, если эффективность получившегося производственного процесса окажется недостаточной. Данный процесс может неоднократно повторяться, пока не будут получены необходимые показатели ключевых параметров, в том числе и на этапе реализации производства, если реальные показатели будут сильно отличаться от теоретических [1].

Методы и технологии реализации производственных процессов также играют ключевую роль в обеспечении эффективного функционирования химико-технологических производств. Одним из важных аспектов этого этапа является выбор оптимального оборудования для обеспечения потребностей предполагаемого производства. Помимо реализации непосредственно производственного процесса оборудование также должно быть заменяемым. Это означает, что в случае выхода из строя какого-либо оборудования, его можно было бы быстро заменить или отремонтировать. Это позволит как минимизировать потери времени и ресурсов, связанные с неплановыми остановками производства, так и сохранить непрерывность производственного процесса и избежать задержек в поставках продукции заказчикам. Для этого необходимо предварительно обеспечить наличие

складских помещений с необходимыми запчастями и оборудованием и квалифицированных специалистов, способных быстро провести замену или ремонт.

Кроме того, важно провести оптимизацию производственных процессов с целью улучшения их эффективности и снижения издержек. Это может включать в себя оптимизацию технологических процессов, улучшение методов управления запасами и сокращение времени цикла производства. Данные действия фактически являются продолжением процесса проектирования, однако обычно затрагивают лишь расположение уже готовых цехов или целых производственных цепей, не затрагивая при этом структурную схему технологического процесса [2].

В современном мире проектирование и реализация химико-технологических производств играют решающую роль в обеспечении успешного функционирования промышленных предприятий. Они не только определяют эффективность и качество производства, но и являются основой для инноваций и развития в отрасли. Значение проектирования и реализации производственных процессов трудно переоценить, поскольку они определяют конкурентоспособность предприятий и их способность к адаптации к изменяющимся рыночным условиям [3].

Цифровизация химико-технологических производств является неотъемлемой частью современного индустриального прогресса. Внедрение цифровых технологий в процессы проектирования и реализации производства открывает новые горизонты для оптимизации и повышения эффективности химико-технологических предприятий.

Использование компьютерного моделирования для создания виртуальных прототипов производственных систем является одним из важнейших инструментов в современной промышленности. Этот подход позволяет создавать цифровые модели производственных процессов и систем, которые могут быть анализированы и оптимизированы еще на ранних стадиях проектирования. Одним из главных преимуществ компьютерного моделирования является возможность проведения более точного и детального анализа производственных систем. С его помощью можно изучать различные аспекты производства, такие как потоки материалов, энергопотребление, производственные емкости и многое другое. Это позволяет выявить потенциальные проблемы и улучшить эффективность производственных процессов еще до того, как они будут реализованы на предприятии [4].

В силу активного роста спроса в данной отрасли на современные решения, создание собственного инструмента, связанного с химической промышленностью и способного создавать 3D модели аппаратов и целых технологических линий на основе полученных данных является актуальной задачей. Созданный 3D модуль является частью проекта «Автоматизированное создание 3D моделей»

(далее «АСМ-3D»), целью которого является создание 3D моделей химико-технологических производств, основываясь на разработанных 2D схемах.

Данный проект разрабатывается на языке C# с использованием программного обеспечения Unity. Unity – это интегрированная среда разработки (IDE) для создания интерактивных 2D и 3D приложений, включая игры, симуляции и виртуальную реальность. Одним из ключевых преимуществ Unity является его обширный инструментальный интерфейс, который предоставляет разработчикам множество возможностей для разработки программного обеспечения, связанного с визуализацией химико-технологических предприятий.

В рамках данной работы было 4 основных этапа моделирования различных объектов:

- Первый этап – создание простых моделей (параллелепипед, шар, цилиндр, конус, клин, тор, пирамида и политело).
- Второй этап – создание аппаратов с использованием уже готовых примитивов. В рамках данного этапа были созданы модели 10 основных типов химико-технологических аппаратов (Воздушный холодильник, компрессор, насос, печь риформинга, реактор, резервуар, ректификационная колонна, сепаратор, смеситель, теплообменник).
- Третий этап – создание вспомогательных конструкций. На данном этапе моделировались элементы трубопровода, запорной арматуры, площадки, лестницы и т.д.
- Четвертый этап – построение целых химико-технологических схем с использованием уже готовых шаблонов аппаратов и вспомогательных конструкций.

Для функционирования разработанной программы, необходимо, чтобы помимо расположения объектов в пространстве была расположена камера, задано место для источника света и разработано с помощью программных модулей возможность перемещения и взаимодействия пользователя с объектами.

Назначением данной программы является 3D визуализация предварительно составленной пользователем 2D схемы предприятия. Программа позволяет перемещаться по виртуальному пространству визуализации, а также динамически изменять расположение некоторых конструкций или аппаратов, не требуя возврата к модулю составления 2D схемы.

В разработанной программе для вывода данных используются предоставленные скрипты VisualisationRenderer и AdjusmentController. Скрипт VisualisationRenderer – программа которая непосредственно преобразует данные из 2D схемы в 3D представление и отображает их пользователю, а AdjusmentController позволяет вносить изменения в сгенерированную предыдущей программой визуализацию.

Программа может быть запущена на любой машине с операционной системой Windows и имеющей программы Unity и UnityHub.

Для вызова программы необходимо зайти в программу UnityHub и оттуда, выбрав проект «2d_to_3d_visualisation», запустить его.

Пример смоделированного с помощью программного кода сепаратора без использования материалов и задачи дополнительных свойств, представлен на рисунке 1, а смоделированная на основе части совмещённого химико-технологического производства метанола и аммиака схема представлена на рисунке 2.

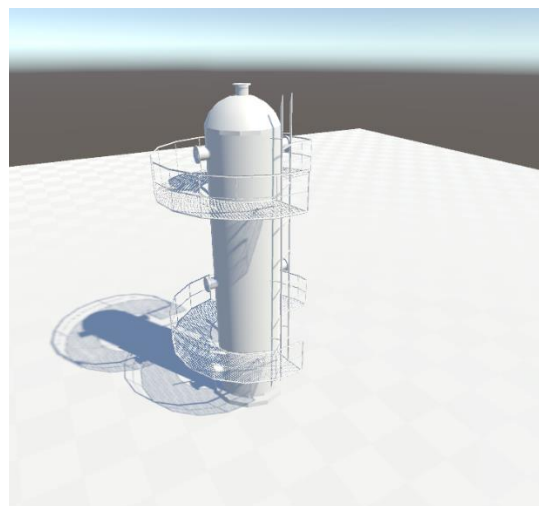


Рис. 1. Смоделированный с помощью программного кода сепаратор

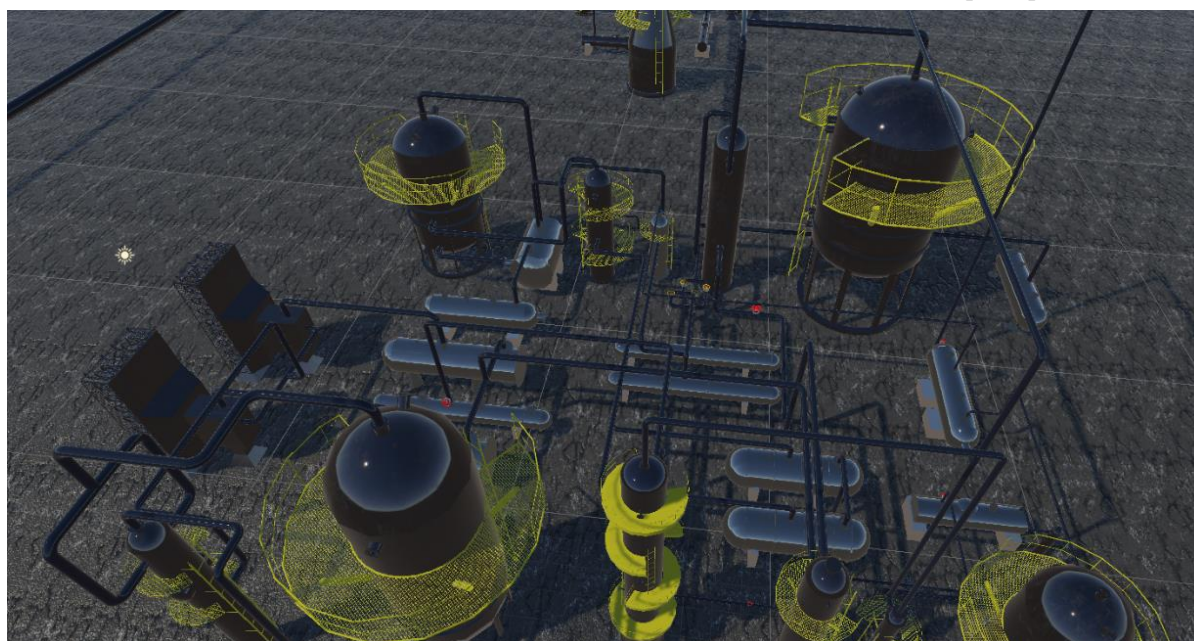


Рис. 2. Смоделированная химико-технологическая схема

В рамках данной работы был решён целый ряд задач, который способствовал продвижению к основной цели – созданию модуля проектирования химико-технологических схем в 3D представлении, а именно:

- Разработаны шаблоны для последующего их использования при создании 3D моделей
- Разработан программный модуль для создания 3D моделей аппаратов и вспомогательных конструкций;
- Реализовано моделирование химико-технологических схем в виртуальном пространстве;

Таким образом, было разработано программное обеспечение, в котором можно создавать химико-технологические схемы на основе десяти готовых шаблонов аппаратов, а также шаблонов, отвечающих за вспомогательные конструкции. В результате использования программного модуля, удалось воссоздать реалистичную модель производства в виртуальной среде.

Список литературы

1. Косинцев В. И., Михайличенко А. И., Крашенинникова Н. С., Миронов В. М., Сутягин В. М. Основы проектирования химических производств: Учебное пособие для вузов. – М.: ИКЦ Академкнига, 2010. – 371 с.
2. Курамшина, К. С. Предложения по разработке экономически выгодного проекта для расширения производства удобрений на основе утилизации отходов химической промышленности // Нугаевские чтения. – 2015. – С. 82-84.
3. Игнатов, Д. С., Скиба К. Г., Ножников В. Д. Разработка производственного участка изготовления электродных материалов // Гагаринские чтения - 2020. – С. 660-661
4. Пономарев К.С., Феофанов А. Н. Цифровой двойник производства как инструмент цифровизации технологических процессов предприятия // Актуальные тренды и перспективы развития науки, техники, технологий. – 2019. – С. 141-145

УДК 51-74, 546.26-162

Скичко Е.А., Миронова Е.А., Кольцова Э.М.

Математическое моделирование шнекового реактора синтеза углеродных нанотрубок

Скичко Евгения Абдулмуталиповна – старший преподаватель кафедры Информационных компьютерных технологий; skichko.e.a@muctr.ru

Миронова Екатерина Александровна – ассистент кафедры Информационных компьютерных технологий;

Кольцова Элеонора Моисеевна – д.т.н., профессор, заведующий кафедрой Информационных компьютерных технологий,

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрена математическая модель синтеза углеродных нанотрубок в полупромышленном шнековом реакторе непрерывного действия. Математическая модель включает уравнения изменения концентрации компонентов сплошной и дисперсной фазы, дополненные начальными и граничными условиями, а также уравнение баланса массы катализатора. Разработанная модель позволяет рассчитывать выход и производительность реактора по углеродным нанотрубкам, концентрацию каждого компонента кинетической схемы на выходе реактора, а также распределение концентрации по длине реактора.

Ключевые слова: математическое моделирование, шнековый реактор, углеродные нанотрубки, каталитический пиролиз.

Mathematic modeling of screw reactor for carbon nanotube synthesisSkichko E.A.¹, Mironova E.A.¹, Koltsova E.M.¹.¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses a mathematical model for the synthesis of carbon nanotubes in a semi-industrial continuous screw reactor. The mathematical model includes equations for changes in the concentration of components of the continuous and dispersed phases, supplemented by initial and boundary conditions, as well as an equation for the mass balance of the catalyst. The developed model makes it possible to calculate the yield and productivity of the reactor per carbon nanotubes, the concentration of each component of the kinetic scheme at the reactor output, as well as the concentration distribution along the length of the reactor.

Key words: mathematical modeling, screw reactor, carbon nanotubes, catalytic pyrolysis.

Углеродные нанотрубки и нановолокна являются уникальным материалом, который со временем находит всё новые и новые области применения, что обусловлено их уникальной механической прочностью, теплопроводностью, электропроводностью. Углеродные нанотрубки имеют большую площадь поверхности, они обладают высокой химической стабильностью и практически не подвергаются химическому воздействию, вместе с тем есть возможность функционализации поверхности нанотрубок, в результате которой на поверхности формируются различные функциональные группы, наделяющие нанотрубки новыми свойствами. На сегодняшний день углеродные нанотрубки используются в составе электронных устройств, химических датчиков, как средства доставки лекарственных средств и диагностики различных заболеваний, биосенсоры, аккумуляторы водорода. Наибольшее применение они получили как добавки в композиционные материалы. Разрабатываются составы полимерных, керамических, металлических композитов, содержащих углеродные нанотрубки или нановолокна. Такие материалы отличаются повышенной электро- и теплопроводностью, трещиностойкостью.

Ключевой задачей в настоящее время является промышленный синтез углеродных нанотрубок заданной структуры, для чего рассматриваются

различные конструкции реакторов. Наибольшее внимание ученых привлекают горизонтальные реактора, где катализатор перемещается с помощью виброустройств [1], а также вертикальные реактора с псевдоожиженным слоем катализатора [2]. В РХТУ им. Д.И. Менделеева был разработан и протестирован полупромышленный реактор синтеза углеродных нанотрубок непрерывного действия, в котором перемещение катализатора организовано с помощью шнека (рис. 1). Исходный углеводородный газ подается в рабочий канал 3. Образующаяся в результате реакции метановодородная смесь подается в блок отделения углеводородных газов. После отделения углеводороды возвращаются в реактор, а обогащенный водородом газ направляется на склад. Катализатор пиролиза непрерывно подается из загрузочного бункера 1 через дозатор 2 в рабочий канал реактора 3 и внутри реактора перемещается с помощью шнека. Рабочий канал нагревают с помощью печи, температуру в реакторе поддерживают в пределах 600-1000°C. В рабочем канале происходит пиролиз углеводородного газа с получением водородсодержащего газа и УНТ. Движение катализатора и сплошной фазы организовано противоточно.

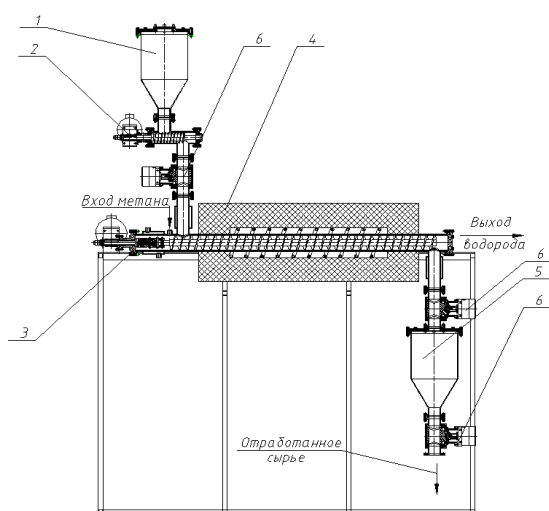


Рис.1. Полупромышленный шнековый реактор непрерывного действия: 1 - загрузочный бункер; 2 - дозатор; 3 - рабочий канал; 4 - печь; 5 - приемный бункер; 6 - поворотные клапаны.

Математическое описание процесса каталитического пиролиза строится на основе методов механики гетерогенных сред. Уравнения математической модели можно разделить на две группы: 1) уравнения изменения концентрации компонентов сплошной фазы, представляющие собой дифференциальные уравнения в частных производных II порядка параболического типа; 2) уравнение баланса массы катализатора и уравнения изменения концентрации компонентов дисперсной фазы, представляющие собой дифференциальные уравнения в частных производных I порядка. Свободный член дифференциальных уравнений учитывает скорости образования и расходования всех основных и промежуточных соединений согласно кинетической схеме процесса.

Изменение концентрации компонентов сплошной фазы определяется соотношением:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + v_1 \frac{\partial C_i}{\partial x} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \hat{J}_i \quad (1)$$

где v_1 – линейная скорость газовой смеси, м/с,

C_i – концентрация i -го компонента газовой фазы, моль/м³,

D_i – коэффициент диффузии i -го компонента газовой фазы, м²/с,

$\hat{J}_i$ – скорость образования или расходования i -го компонента по реакциям, протекающим на поверхности катализатора, моль/(м³•с),

t – время, с,

x – продольная координата реактора, м.

Концентрация каждого компонента сплошной фазы известна в начальный момент времени и задана начальным условием:

$$C_i(t = 0, x) = C_i^0(x) \quad (2)$$

Граничные условия для уравнения (1)

определяют концентрации компонентов на входе и выходе из реактора:

$$\begin{cases} C_i(x=0) = C_i^{0x} \\ \left. \frac{\partial C_i}{\partial x} \right|_{x=l_{\text{app}}} = 0 \end{cases} \quad (3)$$

где l_{app} – длина реактора, м,

C_i^{0x} – исходная концентрация компонента сплошной фазы на входе в реактор, моль/м³.

Изменение концентрации компонентов твердой фазы описано с помощью модели идеального вытеснения:

$$\frac{\partial \tilde{C}_i}{\partial t} - v_2 \frac{\partial \tilde{C}_i}{\partial x} = \tilde{J}_i \quad (4)$$

где v_2 – линейная скорость движения дисперсной фазы, м/с.

Скорость движения дисперсной фазы связана со скоростью вращения шнека соотношением:

$$v_2 = h \cdot V_{\text{вр}} \quad (5)$$

где h – шаг шнека, м,

$V_{\text{вр}}$ – скорость вращения шнека, об/мин.

Уравнение баланса массы катализатора:

$$\frac{\partial m_{Kt}}{\partial t} - v_2 \frac{\partial m_{Kt}}{\partial x} = 0 \quad (6)$$

где m_{Kt} – масса катализатора, кг.

Начальные и граничные условия для решения уравнений (4) и (6) аналогичны начальным и граничным условиям для решения уравнения (1), с учетом противоточности движения. Точка входа в реактор для компонентов сплошной фазы – $x = 0$, для компонентов твердой фазы – $x = l$.

Кинетическими константами модели являются предэкспоненциальный множитель уравнения Аррениуса и энергия активации каждой стадии кинетической схемы. Данные константы найдены при моделировании кинетических закономерностей синтеза углеродных нанотрубок с использованием того же катализатора ([Fe_{0,45}Co_{0,15}Al_{0,40}]₂O₃) и в том же температурном интервале [3]. Кинетическая схема включает 8 уравнений элементарных стадий: стадии последовательной дегидрогенизации метана, образования углеродных нанотрубок и аморфного углерода, блокирующего активные центры катализатора, а также стадии адсорбции-десорбции водорода на активных центрах катализатора.

В качестве исходных данных для расчета принимали условия, при которых проводили эксперимент на шнековом реакторе: диаметр реактора – 1000 мм, длина обогреваемой части – 1000 мм, расход метана – 0,07 нм³/ч, расход катализатора

0,25 г/мин. Температура процесса не менялась и была равна 800°C. На рис. 2 представлено расчетное распределение массы углеродных нанотрубок по длине реактора.

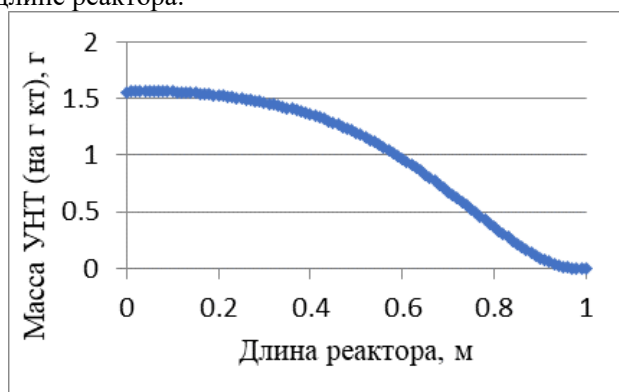


Рис.2. Распределение массы углеродных нанотрубок (на 1 г катализатора) по длине реактора.

Экспериментальный выход углеродных нанотрубок составил 1,7 г/гКт, расчетный — 1,55 г/гКт. Относительная ошибка расчета — 8,82%.

Заключение

Разработана математическая модель синтеза углеродных нанотрубок каталитическим пиролизом

метана в полупромышленном шнековом реакторе непрерывного действия, позволяющая рассчитать выход и производительность реактора по углеродным нанотрубкам. Модель может быть использована далее для нахождения оптимальных условий синтеза.

Список литературы

1. Pirard S.L. et al. Modeling of a continuous rotary reactor for carbon nanotube synthesis by catalytic chemical vapor deposition: Influence of heat exchanges and temperature profile // Chemical Engineering Journal. – 2013. – V. 232. – P. 488-494.
2. Кузнецов В.Л., Моисеенков С.И., Рабинович О.С. Основы технологии синтеза многостенных углеродных нанотрубок в реакторах с псевдоожиженным слоем // Графен: молекула и 2D-кристалл: Программа и тезисы докладов Четвертой российской конференции, Новосибирск, 14–18 августа 2023 года. – Новосибирск: Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, 2023. – С. 26.
3. Скичко Е.А., Кольцова Э.М. Математическое моделирование синтеза углеродных нанотрубок каталитическим пиролизом метановодородных газовых смесей // Успехи в химии и химической технологии. – 2022. – Т. 36, №11. – С. 106-107.

УДК 665.6

Федоров А.В., Глебов М.Б.

Обзор альтернативных методов окисления нефтяных сульфидов

Федоров Артём Вадимович – аспиранта 2-го года обучения кафедры кибернетики химико-технологических процессов; artem.fedorov7799@mail.ru.

Глебов Михаил Борисович – д.т.н., профессор;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрены альтернативные методы окисления нефтяных сульфидов. Обоснованы перспективы исследований в области окисления нефтяных сульфидов до сульфоксидов с их последующей экстракцией. В работе приведены сравнительные степени окисления сульфидов для каждого метода.

Ключевые слова: нефть, сульфиды, сульфоксиды, окисление, озон, перекись водорода.

Review of alternative methods for oxidation of petroleum sulfides

Fedorov A.V.¹, Glebov M.B.¹

¹D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article considers alternative methods of oxidation of petroleum sulfides. Prospects of research in the field of oxidation of oil sulfides to sulfoxides with their subsequent extraction are substantiated. Comparative degrees of sulfide oxidation for each method are given in the paper.

Keywords: oil, sulfides, sulfoxides, oxidation, ozone, hydrogen peroxide.

Введение

Объемы добываемой нефти ежегодно увеличиваются, при этом можно обнаружить формирующуюся тенденции по добыче высокосернистой нефти. Так, общее содержание нефтяных серосодержащих соединений колеблется от 0,5 до 4 % масс. Необходимость очистки нефти и нефтяных фракций от сероорганических компонентов обусловлено их негативным воздействием для катализаторов, широко используемых в процессах нефтепереработки [1].

Для удаления сульфидов из нефтепродуктов широко используются традиционный метод сероочистки - гидроdesульфуризацию (HDS). Однако, такой метод довольно энергоемкий, требуют высоких температур и давления и оказывается неэффективными при удалении некоторых неподатливых сернистых соединений [2].

В данной обзорной статье подробно рассматриваются наиболее перспективные, как с научной, так и с коммерческой точек зрения технологии.

Теоретическая часть

В последнее десятилетие было выдвинуто ряд гипотез о практической возможности окислении нефтяных сульфидов до сульфоксидов с их последующим выделением и применением в различных отраслях промышленности. Такие технологии могут служить как последовательным дополнением крупнотоннажной технологии гидроочистки, так и самостоятельными методами окисления серосодержащих органический соединений. В основе методов лежит возможность протекания окислительных реакций с двухвалентной серой. При обобщении рассмотренных ниже методов можно выделить две основополагающих технологии. Первая заключается в экстракции из нефтяной фракции концентрата сульфидов и с их последующим

окислением до сульфоксидов. Второй способ характеризует первичное окисление сульфидов в нефтяной фракции с последующим извлечением путем жидкостной экстракции. Стоит отметить, что второй способ является наиболее актуальным [3].

Для рассмотрения синтеза сульфоксидов путем окисления нефтяных сульфидов проводятся обширные исследования по анализу и математическому моделированию кинетических процессов, происходящих при взаимодействии сероорганических соединений с различными окислителями, а также воздействие внешних факторов на эффективность протекающих окислительно-восстановительных реакций [4].

Практическая значимость

Благодаря наличию в сульфоксидах углеводородной цепи с функциональной группой S=O их можно рассматривать в качестве сырья для производства эффективных ингибиторов асфальто-смолистых и парафиновых отложений. Рассмотренные механизмы окисления нефтяных сульфидов до сульфоксидов можно использовать при рассмотрении процессов производства ингибиторов парафиновых отложений в трубопроводах, что является одной из перспективных задач нефтеперерабатывающего сектора. Так, согласно прогнозам, применение сульфоксидов может позволить увеличить интервалы очистки нефтяных трубопроводов в 2,5 раза. Также, себестоимость производства ингибиторов парафиновых отложений при производстве их на базе полученных нефтяных сульфоксидов может быть снижена на 30-40% по отношению к текущим импортным аналогам. В данной работе рассмотрены одни из наиболее популярных альтернативных метода окисления нефтяных сульфидов, а именно, с использованием озона, пероксида водорода и неорганических окислителей [5].

Обессеривание с использованием озона

Озонирование широко применяется в промышленности для окисления нефтяных сульфидов. Озон является одним из сильнейших окислителей, что обусловлено его высоким окислительным потенциалом, равным 2,07В, благодаря которому процесс озонирования обладает широким профилем применения.

Однако, реакционную способность озона можно ещё повысить при создании подходящих условий для образования из озона гидроксильных радикалов, путем применения различных соединений. Так, в статье [61] процесс окисления проводился путем окисления нефтяных сульфидов озоном с последующей жидкостной экстракцией с применением ионной жидкости гексафторфосфат 1-бутил-3-метилимидазолия. В качестве исходной смеси была приготовлена модельная смесь с содержанием серы 779 ppm. В результате эксперимента, длительность 120 минут, удалось достичь степени окисления, равной 64,3%. Итоговая концентрация сульфида составила 278 ppm. Кинетическая модель окисления представлена на (рис. 1).

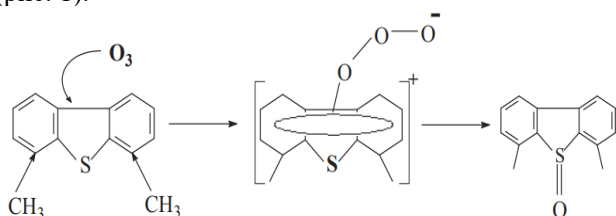


Рис. 1. Кинетическая модель окисления сульфоксида озоном

Использование различных солей металлов позволяет увеличить окислительную способность

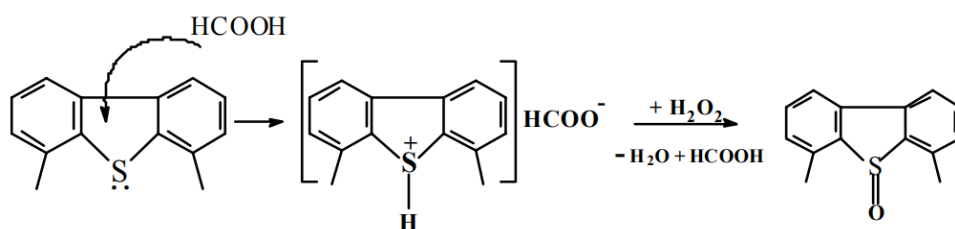


Рис. 2. Кинетическая модель окисления сульфоксида перекисью водорода в присутствии муравьиной кислоты

Обессеривание неорганическими окислителями

В качестве окислителей могут различные смеси нитратов и бромидов переходных металлов. В статье [8] в качестве исходных компонентов окисления нефтяных сульфидов использовались бромиды и нитраты железа. По результатам проведенного окисления удалось достичь конверсии, равной 80%. Длительность окисления составила 2 часа. Селективное окисление осуществляется на двух окислительно-восстановительных центрах, а именно, нитрат/нитрит и бромид/бром [8]. Процессы, протекающие в данных системах отображены на схеме (рис. 3).

озона за счет образования свободных гидроксильных радикалов при участии ионов металлов. Однако реакции с участием радикалов не являются селективными и способствуют протеканию побочных реакций. В качестве катализаторов, как правило, используются соли различных переходных металлов, таких как Fe(II), Mn(II), Ni(II), Co(II), Cd(II), Cu(II), Ag(I), Cr(III), Zn(II) [6].

Обессеривание с использованием пероксида водорода

Одним из наиболее распространенных окислителей сернистых нефтяных фракция является пероксид водорода. В первую очередь это связано с общей распространенностью и невысокой стоимостью. В статье [5] 30%-ый раствор пероксид водорода, катализируемый муравьиной кислотой, окисляли нефтяную фракцию, содержащую 320 ppm серы. В качестве экстрагента применяли пропанол. Длительность эксперимента составила 2 часа. Результатом процесса окисления модельной нефтяной фракции стало снижение концентрации серы с 320 ppm до 45 ppm. Степень окисления составила 85,9%. Кинетическая модель окисления представлена на (рис. 2).

В процессе проведения реакции были сформулированы следующие закономерности: 1) степень удаления серы возрастает при увеличении температуры, что обусловлено ростом скорости реакции; 2) степень удаления серы возрастает при увеличении концентрации уксусной кислоты, что приводит к увеличению скорости образования промежуточного компонента – пермуравьиной кислоты, окисляющей сульфиды [7].

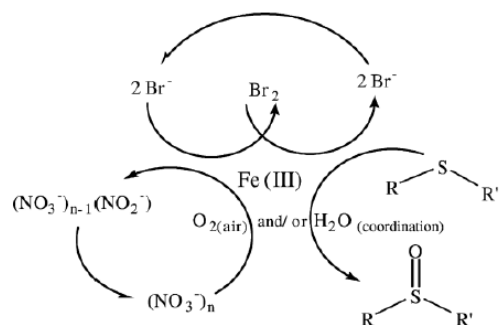


Рис. 3. Схема окислительного обессеривания с помощью системы $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 / \text{FeBr}_3$

Неорганические окислители не стали востребованными в промышленности из-за высокой закупочной цены и сложностью последующей утилизации продуктов их восстановления [9].

Области дальнейшего применения сульфоксидов

Нефтяные сульфоксиды могут применяться в различных областях промышленности. Так, на основе сульфоксидов созданы ингибиторы кислотной коррозии, асфальтосмолопарафиновых отложений марки ИНПАР-1 для нефтедобычи. Диметилсульфоксид (ДМСО), например, относится к ключевым биполярным растворителям. Основываясь на сильной растворяющей способности, ДМСО часто применяется в качестве растворителя неорганических солей. Диметилсульфоксид как является более эффективным и безопасным средством для устранения пятен краски, в отличие от бензина или дихлорметана [10].

Заключение

Несмотря на устоявшийся крупнотоннажный процесс гидроочистки, альтернативные методы окисления нефтяных сульфидов представляют интерес для нефтяной промышленности. Некоторые из приведенных технологий стали основополагающими и были применены при создании промышленных технологий получения нефтяных сульфоксидов. Синтезированные сульфоксиды применяются в качестве сырья в различных областях промышленности. Однако, на сегодняшний день, данные продукты не производятся в крупных масштабах, несмотря на их уникальные свойства и потенциальные перспективы к коммерциализации.

Рассмотренные в данной работе методы окисления показывают, что одним из наиболее перспективных окислителей является пероксид водорода, и при изменении ряда факторов, степень извлечения может быть увеличена, что подтверждает актуальность дальнейшего исследования данного метода.

Список литературы

1. Петрухина Н.Н., Вострикова Ю.В., Некоторые аспекты превращений высокомолекулярных соединений нефтей в процессе

окислительного обессеривания. -Москва: РГУ нефти и газа им. И.М.Губкина, 2013. - 3 с.

2. Смидович Е.В. Технология переработки нефти и газа. Часть 2. Деструктивная переработка нефти и газа. –М.: Химия, 1985. – 376 с.

3. Bosmann A., Datsevich L., Jess A. Deep desulfurization of diesel fuel by extraction with ionic liquids // Chem. Commun. 2001. V. 24. № 24. P. 2494 – 2495.

4. Капустин В.М., Рудин М.Г. Химия и технология переработки нефти. –М.: Химия, 2013. – 496 с.

5. Wan Mokhtar W., Abu Bakar W., Rusmidah A. Deep desulfurization of model diesel by extraction with N,N-dimethylformamide: Optimization by Box–Behnken design // Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers. 2014. V. 35. P. 314 – 319.

6. Кривцова К.Б., Кривцов Е.Б., Головкин А.К. Удаление сернистых соединений из дизельной фракции комбинацией окисления и экстракции // Известия Томского политехнического университета. – 2011. – Т. 319. – № 3. – С. 116–120.

7. Kianpour E., Azizian S. Polyethylene glycol as a green solvent for effective extractive desulfurization of liquid fuel at ambient conditions // Fuel. 2014. V. 137. P. 55 – 58.

8. Анисимов А.В., Тараканова А.В. Окислительное обессеривание углеводородного сырья // Рос. хим. ж. (ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева). 2008. – Т. LII. № 4. С. 30 – 37.

9. Zhou A., Ma X., Song Ch. Liquid-phase adsorption of multi-ring thiophenic sulfur compounds on carbon materials with different surface properties // J.Phys.Chem. B. 2006. V.110. P. 4699 – 4707.

10. Kim H. J., Ma X., et al. Ultra-deep desulfurization and denitrogenation of diesel fuel by selective adsorption over three different adsorbents: a study on adsorptive selectivity and mechanism // Catalysis Today. 2006. V. 111. P. 74 – 83.

11. Кривцова К.Б., Кривцов Е.Б., Головкин А.К. Удаление сернистых соединений из дизельной фракции комбинацией окисления и экстракции // Известия Томского политехнического университета. – 2011. – Т. 319. – № 3. – С. 116–120.

УДК 004.9: 519.876.5: 543.61: 615.01: 66.011: 661.11

Кириллова И.Ю., Аверина Ю.М., Бессарабов А.М.

Цифровизация аналитического мониторинга и производства фармакопейного ассортимента реактивной продукции

Кириллова Ирина Юрьевна – бакалавр 4 курса кафедры логистики и экономической информатики
 Аверина Юлия Михайловна – к.т.н., доцент, заведующая кафедры логистики и экономической информатики
 ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
 Россия, Москва, 125047, Миусская пл., д. 9.

Бессарабов Аркадий Маркович – д.т.н., профессор, заместитель директора по науке, bessarabov@nc-mtc.ru
 АО Научный центр «Малотоннажная химия»,
 Россия, Москва, 107564, ул. Краснобогатырская, д. 42.

В Научном центре «Малотоннажная химия» на основе CALS-технологий проведен аналитический мониторинг фармакопейного ассортимента химических реактивов, выпускаемых одним из основных отечественных производителей АО «ЭКОС-1». Для визуализации аналитического мониторинга в приложениях Blender и Unreal Engine разработаны 3D-модели используемых приборов и оборудования. По результатам аналитического мониторинга разработан CALS-проект технологического регламента гибкого модульного производства ассортимента органических растворителей, применяемых в фармацевтической промышленности.

Ключевые слова: аналитический мониторинг, гибкое производство, импортозамещение, химические реактивы, особо чистые вещества, фармацевтика, CALS-технология, 3D-моделирование

Digitalization of analytical monitoring and production of pharmacopoeial assortment of reactive productsKirillova I.Yu.¹, Averina Yu.M.¹, Bessarabov A.M.²¹ D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow² R&D Centre "Fine Chemicals", Moscow, Russia

At the R&D Centre "Fine Chemicals", based on CALS technologies, analytical monitoring of the pharmacopoeial range of chemical reagents produced by one of the main domestic manufacturers, JSC "EKOS-1", was carried out. To visualize analytical monitoring in the Blender and Unreal Engine applications, 3D models of instruments and equipment with which analytical monitoring is carried out have been developed. Based on the results of analytical monitoring, a CALS draft of technological regulations for flexible modular production of a range of organic solvents used in the pharmaceutical industry was developed.

Keywords: analytical monitoring, flexible production, import substitution, chemical reagents, highly pure substances, pharmaceuticals, CALS technology, 3D modeling

Введение

В фармацевтической промышленности нашли широкое применение вещества реактивной квалификации [1]. Одним из основных разработчиков и производителей этой продукции является Научно-промышленный комплекс, включающий АО «ЭКОС-1» (Старая Купавна, Московская область) и созданный на его основе Научный центр «Малотоннажная химия» [2]. Аналитические службы комплекса осуществляют разработку общих подходов к аналитическому мониторингу, выявление методов анализа основных групп примесей, разработку оптимальных алгоритмов анализа реактивов, сырья и полупродуктов.

В последнее время, производство химических реактивов характеризуется существенным ростом требований фармацевтики к такому понятию как качество. Для решения этой задачи разработана система компьютерного менеджмента качества (КМК-система) [3]. Системой компьютерной поддержки аналитического мониторинга выбрана CALS-технология (Continuous Acquisition and Life cycle Support – непрерывная информационная поддержка жизненного цикла продукта) [4].

В разработанной КМК-системе [3] рассмотрены, выпускаемые АО «ЭКОС-1», органические растворители (297 марок). В приведенном примере фармакопейного ацетона [3] анализируются 10 основных показателей качества: массовая доля (м.д.) основного вещества; плотность при 20°C; м.д. веществ, восстанавливающих перманганат калия; м.д. кислот; м.д. метанола; м.д. альдегидов; м.д. нелетучего остатка; показатель преломления n_{D20} ; м.д. щелочей. Для визуализации этих и многих других исследований фармацевтического направления проведены работы по созданию цифровых двойников аналитических лабораторий Научного центра «Малотоннажная химия», наиболее перспективных для рассматриваемого комплекса исследований.

Разработка цифровых двойников аналитических лабораторий фармацевтического направления

По рассматриваемым выше основным характеристикам качества фармакопейного ассортимента органических растворителей [3] основную роль играют методы хроматографии. В работе [5] приведены исследования по созданию

цифрового двойника аналитической лаборатории хроматографического анализа Научного центра «Малотоннажная химия». С помощью приложения Blender создана виртуальная модель аналитической лаборатории, включающая проектную 3D-модель и базы данных по элементам модели. Все разработанные элементы модели рассматриваются по четырем категориям: приборы, электроника, оборудование и мебель. По категории «Приборы» созданы виртуальные модели двух газовых хроматографов «Хроматэк-Кристалл 5000.2» и жидкостного хроматографа «LC-20 Prominence», а также модели следующих вспомогательных аналитических приборов: титратора Фишера «Эксперт-007»; концентратомера «КН-2м»; весов «Quintix 215D-1ORU».

В настоящее время созданную в 3D-редакторе Blender 3.0 лабораторию хроматографического анализа мы импортировали в Unreal Engine 4 [6] в целях создания более детализированных анимационных роликов и многоцелевой интерактивной визуализации (рис. 1).

В настоящее время проведена разработка цифрового двойника лаборатории инструментального анализа. Оборудование лаборатории очень перспективно для специалистов кафедры химического и фармацевтического инжиниринга РХТУ им. Д.И. Менделеева. Особенно перспективен метод термического анализа (дериватография) для исследования процессов термообработки фармацевтической продукции. Для этого в лаборатории инструментального анализа (рис. 2-а)

установлен синхронный термический анализатор «STA 449 F5 Jupiter» (рис. 2-б). Разработана виртуальная 3D-модель прибора (рис. 2-в).

Проведенные исследования являются составной частью аналитического мониторинга фармакопейного ассортимента АО «ЭКОС-1». Они позволяют существенно улучшить работу химиков-аналитиков, использующих систему компьютерного менеджмента качества [3].

Разработка CALS-технологии гибкого производства органических растворителей для фармацевтики

В разработанной КМК-системе [3] алгоритм автоматизированного поиска основан на том, что по каждому импортному реактиву для фармакологии осуществляется поиск такого же продукта из имеющейся в нашей КМК-системе базы данных ассортимента АО «ЭКОС-1». Критерием поиска является максимальное совпадение показателей качества по наименованиям и численным характеристикам. В случае совпадения или превышения наших показателей качества отмечается возможность (рекомендация) импортозамещения продукта без коррекции технологического процесса. В случае различия в показателях качества между импортным реактивом и его отечественным аналогом - отмечаются направления доработки технологии, методов анализа (разрабатываются проекты ТУ, изменения к действующим ТУ, соответствующие методы анализа и др.), а также определяется порядок согласования научно-технической документации.

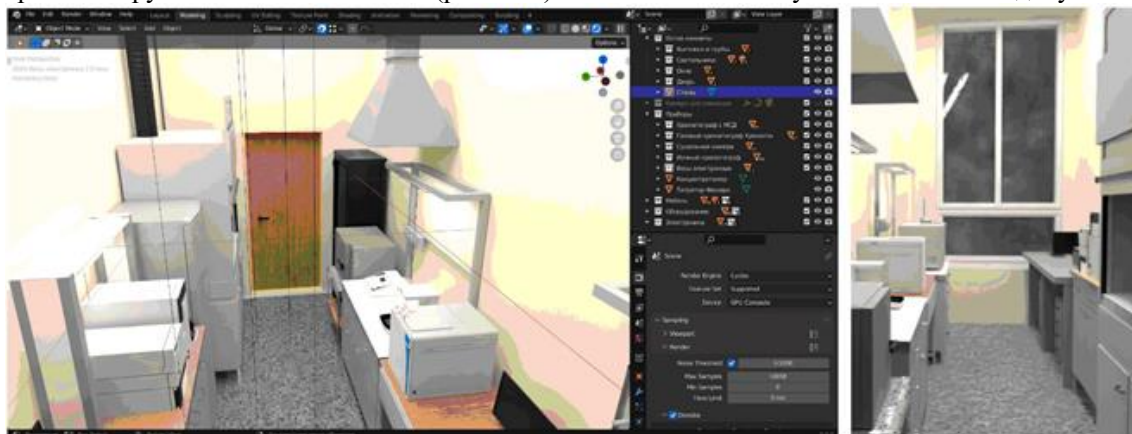


Рис. 1. Виртуальная 3D-модель лаборатории хроматографического анализа в системе Unreal Engine 4



Рис. 2. Виртуальная модель термического анализатора «STA 449 F5 Jupiter»

(а – фото лаборатории инструментального анализа, б, в – фото и 3D-модель термического анализатора)

В основу CALS-проект технологического регламента гибкого производства фармакопейного ассортимента органических растворителей положена созданная нами технология получения ассортимента алифатических углеводородов и петролейных эфиров [7]. Она базируется на 5 типовых аппаратных модулях: адсорбции, химической очистки, предварительной, точной и финишной ректификации (рис. 3).

В типовой модульной технологической схеме (рис. 3), на примере переработки н-гептана и изеооктана, показаны связи между отдельными

модулями, пересечения и объединения технологических потоков (основных, побочных и возвратных). Основным технологическим потоком является процесс очистки технологического сырья (н-гептана «технического»; изеооктана «технического») до химического реактива низких квалификаций (н-гептан «чистый», изеооктан «чистый»), более высоких квалификаций (н-гептан «эталонный» по ГОСТ 25828-83, изеооктан «эталонный» по ГОСТ 12433-83) и до реактивов специальной очистки (н-гептан «химически чистый» и изеооктан «химически чистый» для УФ-спектроскопии).

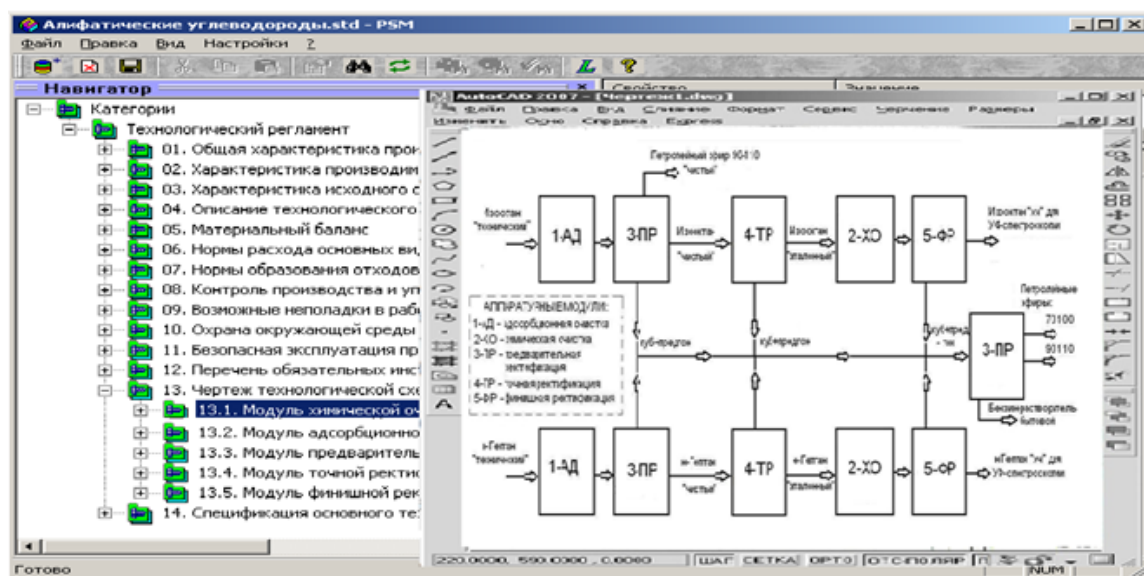


Рис. 3. CALS-проект гибкого производства алифатических углеводородов и петролейных эфиров

Заключение

Разработанная на основе CALS-технологии КМК-система оптимизирует управление и обработку информации о работе аналитической лаборатории в специализированном ассортименте продуктов – химические реактивы для фармацевтики. Для визуализации аналитического мониторинга с помощью приложений Blender и Unreal Engine разработаны цифровые двойники лабораторий хроматографического и инструментального анализа. По результатам аналитического мониторинга разработан CALS-проект технологического регламента гибкого производства фармакопейного ассортимента реактивной продукции.

Список литературы

1. Лукша Е.А., Корнеева И.Н., Савченко И.А., Подгурская В.В., Гушина Е.С. Графическое структурирование фармакопейных статей: пример разработки и внедрения в практику фармацевтического анализа // Медико-фармацевтический журнал Пульс. – 2019. – Т. 21. – № 11. – С. 6-12.
2. Родченкова В.В. Научный центр «Малотоннажная химия»: Мы занимаемся серьезной наукой и развиваем успешный бизнес // Аналитика. – 2019. – Т. 9. – № 2. – С. 116-120.

3. Кириллова И.Ю., Трохин В.Е., Челноков В.В., Бессарабов А.М. Системные исследования импортозамещения фармакопейного ассортимента химических реактивов, выпускаемых АО «ЭКОС-1» // Успехи в химии и химической технологии. – 2023. – Т. 37. – № 11. – С. 129-131.
4. Акимов С.В., Верховая Г.В., Меткин Н.П. Теоретические основы CALS. СПб: Издательство СПбГУ. – 2018. – 263 с.
5. Трохин В.Е., Гришаева Д.А., Бессарабов А.М., Вишникина Е.Р. Виртуальное моделирование аналитической лаборатории научно-производственного комплекса малотоннажной химии // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. – 2023. – № 12. – С. 8-14.
6. Козловских М.Е., Неверова И.В., Устинова Н.Н. Создание 3D-модели и перенос в виртуальную реальность в приложениях Blender и Unreal Engine // Научное обозрение. Педагогические науки. – 2023. – № 6. – С. 19-24.
7. Trokhin V.E., Vendilo A.G., Bessarabov A.M., Kazakov A.A., Stepanova T.I. Use of the CALS concept for development of equipment modules producing reagent-quality aliphatic hydrocarbons // Chemical and Petroleum Engineering. – 2012. – V. 48, № 5-6. – P. 271-277.

УДК 004.94: 303.732.4: 661.11: 681.518

Лобанов В.Ю., Василенко В.А., Бессарабов А.М.

Виртуальное моделирование аналитического оборудования для инфракрасной спектроскопии

Лобанов Виталий Юрьевич – бакалавр 3 курса кафедры информационных компьютерных технологий
 Василенко Виолетта Анатольевна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий
 ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
 Россия, Москва, 125047, Миусская пл., д. 9.

Бессарабов Аркадий Маркович – д.т.н., профессор, заместитель директора по науке, bessarabov@nc-mtc.ru
 АО Научный центр «Малотоннажная химия»,
 Россия, Москва, 107564, ул. Краснобогатырская, д. 42.

Проведены работы по исследованию метода инфракрасной спектроскопии, применяемого в аналитической лаборатории одного из ведущих научно-производственных кластеров малотоннажной химии, включающего в себя промышленный комплекс АО «ЭККОС-1» и Научный центр «Малотоннажная химия». С помощью системы автоматизированного проектирования Blender создана виртуальная 3D-модель ИК-спектрометра «Thermo Scientific» (США) модели «Nicolet iS5».

Ключевые слова: цифровой двойник, 3D-модель, аналитическая лаборатория, специализированное оборудование, аналитические приборы, ИК-спектроскопия

Virtual modeling of analytical equipment for infrared spectrometryLobanov V.Y.¹, Vasilenko V.A.¹, Bessarabov A.M.²¹ D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow² R&D Centre "Fine Chemicals", Moscow, Russia

Work has been carried out on the study of the infrared spectrometry method used in the analytical laboratory of one of the leading research and production clusters of low-tonnage chemistry, which includes the industrial complex of JSC «EKOS-1» and the R&D Scientific Center «Fine Chemicals». Using the Blender computer-aided design system, a virtual 3D model of the «Thermo Scientific» (USA) IR-spectrometer of the «Nicolet iS5» model has been created.

Keywords: digital twin, 3D model, analytical laboratory, specialized equipment, analytical instruments, IR-spectrometry

В настоящее время проводятся работы по созданию цифрового двойника Научного центра «Малотоннажная химия», созданного в 2012 году на базе группы производственных компаний «ЭККОС-1» (основана в 1989 году) [1]. Получившийся научно-производственный кластер является одним из лидеров российского рынка малотоннажной химии. В ассортимент выпускаемой продукции входит более четырехсот химических продуктов: органические растворители, кислоты и химические реактивы всех квалификаций, реагенты для промышленной водоподготовки, текстильно-вспомогательные вещества и др.

Научный центр «Малотоннажная химия» специализируется на разработках полного цикла: от идеи до внедрения технологических решений на производстве. Специалисты центра занимаются научными разработками для микроэлектроники, фармацевтики, авиационно-космической отрасли и военно-промышленного комплекса. Исследовательские лаборатории оснащены современными приборами и оборудованием. Научный центр разрабатывает новые реактивы и особо чистые материалы, проводит сложнейшие аналитические исследования, контролируя качество продукции [2].

Среди разнообразных методов изучения строения органических и неорганических соединений, используемых в Научном центре, важное место

занимает метод инфракрасной спектроскопии (ИКС), основанный на поглощении, отражении и рассеивании энергии инфракрасного излучения при прохождении через вещество. Характеристические полосы поглощения в ИК-спектрах дают все колебания связей, в которых принимает участие атом водорода (группы CH; CH₂; CH₃; OH; NH₂; SH и др.), а также группы, содержащие кратные связи (C=O; SO₂; NO₂; N=N и др.) По своим возможностям метод ИК-спектроскопии почти универсален. Исследуемые образцы могут быть жидкими, твердыми или газообразными. Они могут быть органическими и неорганическими, однако неорганические вещества иногда не дают хорошо выраженных спектров. ИК спектры успешно применяют для исследования фазовых переходов и структуры твердых нефтяных углеводородов [3, 4]. Так же ИК-спектроскопия применяется как один из способов идентификации фармацевтических субстанций в лекарственных препаратах, т. е. оценивание на неподдельность [5]. Помимо этого, она применяется в экспресс методах анализа пищевых продуктов [6].

В аналитическое оборудование Научного центра включает в себя ИК-спектрометр («Thermo Scientific», США) модели «Nicolet iS5». Принцип действия прибора основан на том, что при движении одного из зеркал интерферометра происходит изменение разности хода между интерферирующими лучами; контроль положения и скорости движения

зеркала интерферометра осуществляется с использованием встроенного вспомогательного малоомощного лазера. Регистрируемый световой поток на выходе интерферометра (интерферограмма) представляет собой фурье-образ регистрируемого оптического спектра. Сам спектр (в шкале волновых чисел) получается после выполнения специальных математических расчетов над интерферограммой (обратное преобразование Фурье).

Фурье-спектрометр представляет собой стационарный автоматизированный настольный прибор, состоящий из двухлучевого интерферометра, источника и приемника излучения, оптической системы и блока электроники. Спектрометры моделей Nicolet iS5, Nicolet iS10, Nicolet iN10 – семейство унифицированных по основным блокам (источник излучения, интерферометр, детектор) приборов. Все модели имеют быстросменный беспроводной источник излучения на основе карбида кремния и предусматривают замену изнашивающихся деталей (источника излучения,

лазера) непосредственно оператором, без привлечения сервисной службы фирмы-изготовителя; заменяемые детали и зеркала не требуют и не имеют возможности юстировки. Все модели имеют регенерируемый осушитель внутреннего объема прибора в металлических патронах и индикатор влажности, доступный без открывания корпуса. Все модели также имеют развитую встроенную систему самодиагностики и информирования оператора о техническом состоянии прибора как через управляющую программу, так и с помощью индикаторов на корпусе.

В фурье-спектрометрах используется программное обеспечение OMNIC, предназначенное для управления работой фурье-спектрометра и процессом измерений, а также для хранения и обработки полученных данных (рис. 1). Структура ПО включает в себя блоки, отвечающие за управление прибором, получение и хранение данных и блоки, отвечающие за интерфейс пользователя и вывод информации.

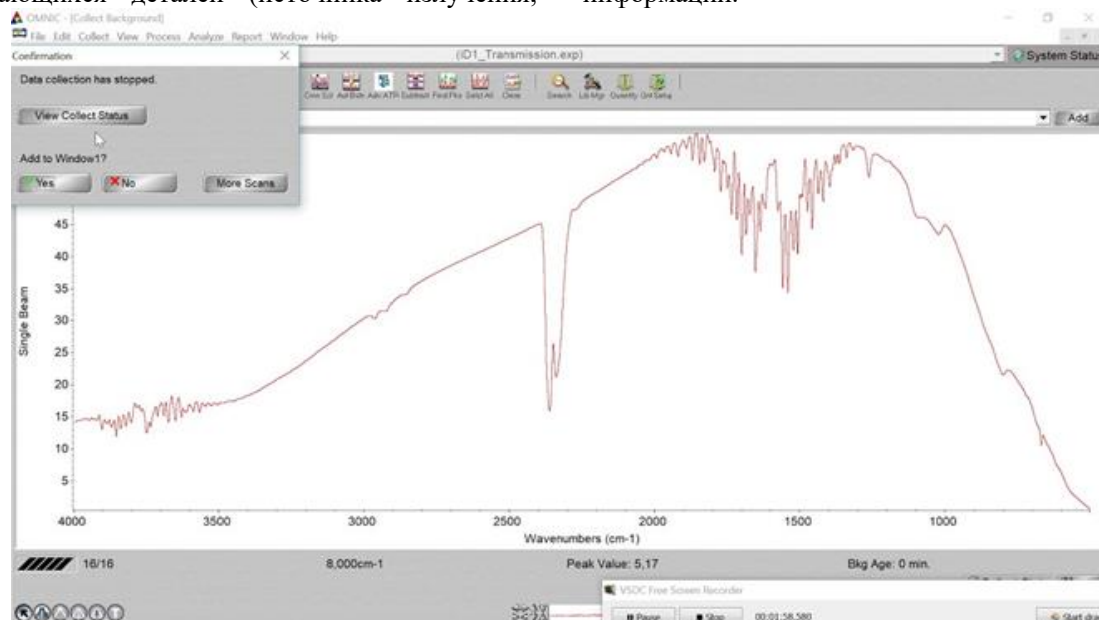


Рис. 1. Интерфейс программного обеспечения OMNIC

Защита программного обеспечения от несанкционированных изменений обеспечивается расчетом цифрового идентификатора метрологически значимой части ПО и сравнением его с исходным. В комплект поставки входит утилита для проверки соответствия установленного ПО и поставляемого дистрибутива, а также соответствия операционной системы и требований OMNIC.

Защита программного обеспечения от непреднамеренных действий обеспечивается функциями резервного копирования. Погрешность программного обеспечения входит в суммарную погрешность спектрометра. Уровень защиты ПО относится к категории С по МИ 3286-2010. Идентификатор метрологически значимой части ПО указан в первой цифре номера версии.

В настоящее время разрабатывается виртуальная 3D-модель ИК-спектрометра «Thermo Scientific»

(США) модели «Nicolet iS5». Для компьютерной поддержки при разработке цифрового двойника используется система Blender (Blender Foundation, Нидерланды) [7]. Это мощный профессиональный инструмент, для комплексного 3D моделирования, осуществления анимации сцен и рендеринга визуальных эффектов. С помощью данного пакета создан цифровой двойник аналитического прибора, который используется для имитации и анализа внутренних рабочих процессов. Трехмерная графика развивается во многих передовых странах, используется в перспективных секторах экономики и развитие этого направление с каждым годом только растет [8] На сегодняшний день, Blender является одной из самых популярных программ для 3D моделирования. Популярность данной программы основывается на универсальности, привлекательном интерфейсе, широком спектре доступных инструментов и скорости выполнения операций, а

также бесплатном и открытом распространение [9].

В лаборатории были сделаны фотографии различных проекций ИК-спектрометра. Затем фото были подвергнуты обработке в Photoshop и помещены в рабочую среду Blender (рис. 2).

На следующем этапе работы была проведена визуализация материалов и сделаны наклейки (с учетом фотографии: рис. 3-а). Затем с помощью рендера была получена виртуальная 3D-модель (рис. 3-б).

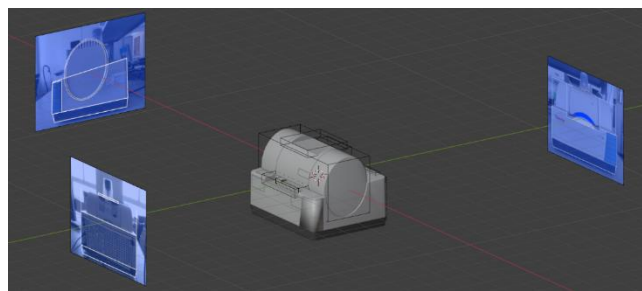


Рис. 2. Промежуточный вид модели

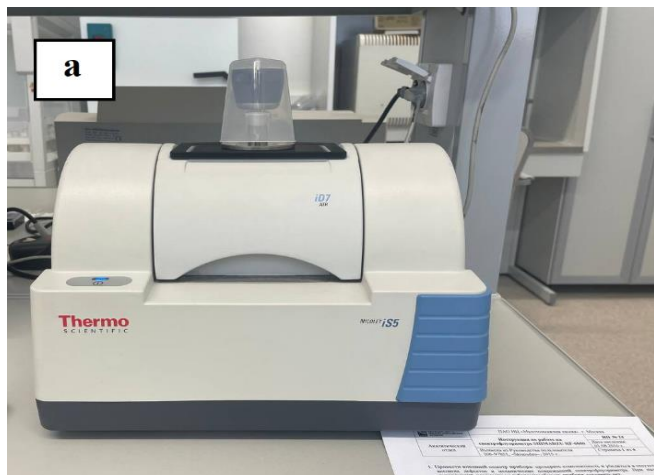


Рис.3. Виртуальная модель ИК-спектрометра «Nicolet iS5» (а – фото, б - 3D-модель)

С помощью системы компьютерной поддержки Blender разработан цифровой двойник ИК-спектрометра «Nicolet iS5». В настоящее время в Научном центре «Малотоннажная химия» по требованиям заказчиков прибор широко применяется для исследования подлинности реактивной фармацевтической продукции. Создание 3D-модели прибора является важным элементом цифровизации научно-производственного кластера в рамках Индустрии 4.0, открывая широкие перспективы для инноваций в науке и производстве.

Список литературы

1. Bessarabov A., Trokhin V., Mindlin G., Vasilenko V. Virtual model of the production of chemical reagents and highly pure substances // Chemical Engineering Transactions. — 2022. — V. 94. — P. 529-534.
2. Родченкова В.В. Научный центр «Малотоннажная химия»: Мы занимаемся серьезной наукой и развиваем успешный бизнес // Аналитика. — 2019. — Т. 9. — № 2. — С. 116-120.
3. Сафиева Р.З., Кошелев В.Н., Иванова Л.В. ИК-спектрометрия в анализе нефти и нефтепродуктов // Вестник Башкирского университета. — 2008. — Т. 13. — № 4. — С. 869-874.
4. Иванова Л.В., Кошелев В.Н., Буров Е.А., Стоколос О.А. Применение ИК-спектрометрии в исследовании нефтей // Труды Российского государственного университета нефти и газа имени И.М. Губкина. — 2010. — № 2 (259). — С. 76-80.
5. Саушкина А.С., Зинчук Л.Н., Денисов М.А., Шокуров В.А., Гончаров Д.В. Идентификация некоторых лекарственных препаратов сложного состава, содержащих парацетамол, методом ИК-спектрометрии // Фармация и фармакология. 2017. — Т. 5. — № 1. — С. 12-22.
6. Юшина Ю.К., Вострикова Н.Л., Становова И.А. Экспресс-методы анализа пищевых продуктов // Пищевая промышленность. 2011. — № 4. — С. 32-33.
7. Хесс Ф. Практическое пособие Blender 3.0 для любителей и профессионалов. Моделинг, анимация, VFX, видеомонтаж. М.: СОЛОН-Пресс. — 2022. — 300 с.
8. Rohe D.P., Jones E.M.C. Generation of synthetic digital image correlation images using the open-source Blender software // Experimental Techniques. — 2022. — V. 46. — No. 4. — P. 615-631.
9. Бесхлебный В.А., Фешина Е.В. Анализ возможностей современного программного обеспечения Blender по 3D моделированию // Тенденции развития науки и образования. — 2023. — № 94-5. — С. 91-93.

УДК 004.94: 661.124: 681.518

Москаленко Д.А., Василенко В.А., Бессарабов А.М.

Разработка 3d-моделей плотномера для виртуальной лаборатории

Москаленко Дара Александровна – бакалавр 4 курса кафедры информационных компьютерных технологий;
Василенко Виолетта Анатольевна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий;
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Москва, 125047, Миусская пл., д. 9.

Бессарабов Аркадий Маркович – д.т.н., профессор, заместитель директора по науке, bessarabov@nc-mtc.ru;
АО Научный центр «Малотоннажная химия»,
Россия, Москва, 107564, ул. Краснобогатырская, д. 42.

В данной работе рассмотрена разработка трехмерных моделей аналитического оборудования на примере плотномеров в программном обеспечении Blender. В среде Unreal Engine 5 проведено размещение моделей в виртуальном пространстве лаборатории, реализован сценарий взаимодействия пользователя с объектами. Разработанные подходы применены в Научном центре «Малотоннажная химия» при работе с плотномером модели «Excellence D5» («Mettler Toledo», Швейцария).

Ключевые слова: цифровой двойник, виртуальное пространство, аналитическая лаборатория, плотномер, 3D-модель

Development of 3d models of density meter for a virtual laboratoryMoskalenko D.A.¹, Vasilenko V.A.¹, Bessarabov A.M.²¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation² R&D Centre «Fine Chemicals», Moscow, Russian Federation

The article discusses the development of three-dimensional models of analytical equipment using the example of density meters in Blender software. In the Unreal Engine 5 environment, models were placed in the virtual space of the laboratory, and a scenario for user interaction with the objects was implemented. The developed approaches were applied at the R&D Scientific Center «Fine Chemicals» during the work with a density meter model "Excellence D5" (Mettler Toledo, Switzerland).

Key words: digital twin, virtual space, analytical laboratory, density meter, 3D model

Введение

В настоящее время цифровые технологии стали неотъемлемой частью образовательного процесса. Различные прототипы, выполненные в виртуальной реальности (VR) используются во многих областях: начиная с промышленных предприятий и заканчивая учебными заведениями. Актуален подход, позволяющий объединить различные технологии автоматизации и описывающий процесс взаимодействия между информацией, представленной в машиночитаемом виде для виртуального представления, и физическим ее выполнением. В литературе данный подход получил название «Цифровой двойник» [1]. Технология виртуальной и дополненной реальности позволяет интегрировать объекты и разрабатывать трехмерные модели, предоставляя пользователям уникальную возможность взаимодействия с химическими процессами и веществами в виртуальной среде.

Одним из основных приборов аналитической лаборатории являются плотномеры. Приборы для измерения плотности широко применяются в ходе различных исследований, экспериментов, контроля качества на производстве или в естественной среде. Плотномеры используют в пищевой, нефтеперерабатывающей, химической, фармацевтической промышленности, а также в строительстве. Ими измеряют плотность: нефтепродуктов: бензина, дизельного топлива, сырой нефти; сжиженных газов; грунта, почвы, глины;

вязких, очень вязких, агрессивных жидкостей. Измерение этого физического параметра необходимо для контроля качества [2].

Экспериментальная часть

Первым этапом создания цифрового двойника плотномера является создание его трехмерной модели при помощи программного обеспечения Blender. Blender пользуется большой популярностью среди бесплатных программных средства компьютерной графики в связи с его быстрым стабильным развитием и технической поддержкой; включает в себя в себя достаточно большое множество разнообразных методов для моделирования, анимации, симуляции, рендеринга и т.д. [3].

Созданы трехмерные модели двух приборов: плотномера DDM 2910 («Rudolph Research») и «Excellence D5» («Mettler Toledo»). Кроме 3D моделей приборов, созданы модели вспомогательного оборудования (тумба, контейнеры, колбы, трубки). Все трехмерные модели созданы на основе реальных размеров моделируемых объектов.

Прежде чем экспортировать готовые трехмерные модели из Blender в Unreal Engine (среду для разработки виртуального пространства) необходимо осуществить проверку на наличие вывернутых граней и поверхностей, которые могут вызвать искажения и некорректное отображение модели в Unreal Engine. Нанесение текстур и материалов следует проводить непосредственно в виртуальной среде. Для

корректного импорта необходимо добавлять модели группами и отдельно импортировать текстуры/материалы.

На рис. 1 приведена 3D-модель плотномера DDM 2910 в виртуальном пространстве.



Рис.1. 3D-модель плотномера DDM 2910 («Rudolph Research»).

Взаимодействие пользователя с объектами реализовано с помощью визуального программирования. Разработаны блюпринты (англ. blueprint) для реализации анимации открытия и закрытия дверей шкафа при нажатии кнопки [E] на клавиатуре (рис. 2.а). Для симуляции работы пользователя с дисплеем прибора (нажатие кнопок на дисплее) создано событие, которое открывает дисплей прибора на весь экран при нажатии кнопки [E] на клавиатуре, а при нажатии на [Esc] осуществляется выход из экранного режима (рис. 2.б).



Рис.2. 3D-модели на сцене: а – шкафа; б – плотномера DDM 2910.

Для того, чтобы различные события на одну и ту же кнопку, например кнопка [E], не перекрывали друг друга, было принято решение добавить метод для обнаружения пересечений *Line Trace*, который считывает направление взгляда пользователя и выполняет событие, того или иного объекта, на который устремлен взгляд. Реализовано взаимодействие пользователя со вспомогательным оборудованием (захват колбы, перестановка колбы с полочки шкафа на столешницу).

На рис. 3 приведены фото (рис. 3.а) и 3D-модель (рис. 3.б) плотномера «Density meter Excellence D5» в среде Blender.



Рис. 3. Фото (а) и 3D-модель (б) плотномера «Excellence D5» в среде Blender.

Очень большое значение имеет внедрение в промышленность разработанного для плотномера виртуального комплекса [4]. Практическая реализация этих работ проведена в аналитической лаборатории одного из ведущих научно-производственных кластеров малотоннажной химии, включающего в себя производственный комплекс АО «ЭКОС-1» и Научный центр «Малотоннажная химия» [5]. Установленный там плотномер модели «Excellence D5» («Mettler Toledo», Швейцария) обеспечивает очень высокую точность измерений плотности практически в любом образце. Данный прибор отличается достоверностью и воспроизводимостью результатов. Плотномер обладает модульной конструкцией, благодаря которой можно адаптировать приборы под новые требования и задачи.

Плотномер представляет собой стационарный модульный настольный прибор, который состоит из блока, монитора и дополнительного оборудования для отбора проб, промывки и сушки после проведенного измерения. Особенности плотномера модели «Excellence D5»:

1. Автоматический контроль температуры. Встроенный термостат с элементом Пельтье быстро нагревает или охлаждает измерительную ячейку для поддержания требуемой температуры образца.

2. User Management. Каждый пользователь может настроить прибор по своим предпочтениям, выбрав команды быстрого доступа и язык интерфейса. Чтобы защитить критически важные данные, в системе управления пользователями устанавливаются различные уровни доступа.

3. Удобная модульная конструкция. Ячейка для измерения показателя преломления комбинируется с плотномером «Excellence D5», что позволит сэкономить место при решении задач, требующих проведения двух видов измерений.

4. Индикатор текущего состояния. По световому индикатору прибора можно определить его текущее состояние: «Готов к измерению» (зеленый), «Занят (мигающий)» или «Ожидание команды оператора» (оранжевый).

5. Автоматизация отбора проб, промывки и сушки. Автоматизация рабочих процессов экономит время, сокращает затраты и повышает безопасность. Плотномеры серии Excellence совместимы с различными автоподатчиками, рассчитанными на один или несколько образцов. Они могут работать с

веществами, которые при комнатной температуре становятся вязкими или твердыми.

6. Обновляемая система. Плотномеры серии Excellence можно модернизировать до комплексной многопараметрической аналитической системы для определения плотности, показателя преломления, pH, цвета и других параметров. Это позволит сэкономить время, повысить качество данных и обойтись без смены образцов при проведении отдельных анализов.

Оборудование компании «Mettler Toledo» использует программное обеспечение LabX, которое может повысить эффективность работы лаборатории благодаря автоматическому сбору данных, руководству действиями пользователя на приборе и централизованному управлению всем подключенным оборудованием, правами пользователей и данными. Данное программное обеспечение для плотномеров и рефрактометров обеспечивает полное соответствие нормативным стандартам благодаря надежному автоматическому управлению данными, а также контролю действий пользователя в соответствии с СОП. LabX упрощает управление не только профилями пользователей плотномеров и рефрактометров Excellence, но и полными наборами данных (включая метаданные). LabX организует задания и выводит их непосредственно на сенсорный дисплей прибора, где с ними может работать лаборант. Результаты выполненных анализов видны сразу: информация о соответствии и несоответствии выделяется разными цветами, а процессы измерения плотности записываются на видео.

Заключение

Разработаны трехмерные модели объектов виртуальной аналитической лаборатории – плотномеров DDM 2910 и «Excellence D5».

Интеграция моделей в виртуальное пространство способствует разработке цифрового двойника лаборатории и применения в качестве тренажера для обучения персонала работы с дорогостоящим оборудованием. Полученные результаты использованы в Научном центре «Малотоннажная химия» для обучения персонала и работе на плотномере «Excellence D5».

Список литературы

1. Царев, М. В. Андреев Ю. С. Цифровые двойники в промышленности: история развития, классификация, технологии, сценарии использования // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. – 2021. – Т. 64, № 7. – С. 517-531.
2. Пахомов А.Н., Линькова Я.А. Опыт применения плотмера для определения плотности нефтепродуктов // Научный электронный журнал «Матрица научного познания». – 2023. – №5. – С. 19-21.
3. Шишов, Н. О. Василенко В. А. Разработка 3D-моделей вспомогательного оборудования для виртуальной лаборатории // Успехи в химии и химической технологии. – 2023. – Т. 37, № 4(266). – С. 83-85
4. Федоринов А.Ю., Епринцев М.А. Исследование аппаратных способов и методов измерения плотности жидкости, применяемых в промышленности // Системный анализ и логистика. – 2023. – № 2 (36). – С. 33-38.
5. Трохин В.Е., Гришаева Д.А., Бессарабов А.М., Вишникина Е.Р. Виртуальное моделирование аналитической лаборатории научно-производственного комплекса малотоннажной химии // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. – 2023. – № 12. – С. 8-14.

УДК 661.728.7

Ларреа Лапшина Л.Р., Федотова О.В., Цыганков П.Ю.

Исследование процесса получения нанокристаллов целлюлозы методом гидролиза в субкритической воде

Ларреа Лапшина Лорена Рикарда – студентка 4-го курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; e-mail: lorenas2002@mail.ru

Федотова Ольга Вячеславовна – аспирант 2-го года обучения по направлению 2.6 Химические технологии, науки о материалах, металлургия, м.н.с. кафедры химического и фармацевтического инжиниринга; e-mail: fedotova.olga.basic@gmail.com

Цыганков Павел Юрьевич – к.т.н., доцент кафедры химического и фармацевтического инжиниринга РХТУ им. Д. И. Менделеева

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Данная работа посвящена исследованию процесса получения нанокристаллической целлюлозы гидролизом в субкритической воде. Изучено влияние параметров ведения процесса на выход и характеристики получаемого материала.

Ключевые слова: нанокристаллическая целлюлоза, гидролиз, субкритическая вода.

Research of the production technology of cellulose nanocrystals by hydrolysis in subcritical water

Larrea Lapshina L.R., Fedotova O.V., Tsygankov P.Y.

D. Mendelev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

This work is dedicated to the investigation of the process of obtaining nanocrystalline cellulose by hydrolysis in subcritical water. The influence of the process parameters on the yield and characteristics of the resulting material has been studied.

Key words: cellulose nanocrystals, hydrolysis, subcritical water.

Введение

Нанокристаллическая целлюлоза (НКЦ) – вещество, состоящее из нанокристаллов со стержнеобразной структурой. Диаметр нанокристаллов целлюлозы составляет 3-50 нм, а длина находится в интервале от 100 до 500 нм [1, 2]. НКЦ обладает высокой кристалличностью, составляющей 54-88% [3]. Также нанокристаллическая целлюлоза обладает такими свойствами как низкое значение плотности ($\approx 1,6$ г/см³), высокая прочность на разрыв и высокий модуль упругости (модуль Юнга > 100 ГПа) [3]. Благодаря своим уникальным характеристикам, нанокристаллы целлюлозы могут использоваться в качестве армирующего наполнителя в различных областях, таких как: медицина [4], строительство [5], пищевая промышленность [6], фармацевтика [7], катализ [8].

Наиболее распространенным методом получения НКЦ является кислотный гидролиз, в результате которого катионы кислоты разрушают менее структурированные (аморфные) участки целлюлозного волокна, оставляя при этом более структурированные (кристаллические) области. Для проведения кислотного гидролиза используют 64% раствор серной кислоты. Реакцию проводят при постоянном перемешивании и температуре 45-50°C в течение часа. [9]. Затем гидролиз останавливают добавлением к суспензии объема воды, который в 10-20 раз превышает ее исходный объем [10]. Далее следуют этапы промывки вещества от избытка кислоты до нейтрального значения pH, обработка ультразвуком и сушка. Данным способом получают

нанокристаллы целлюлозы с кристалличностью 70-93% и выходом 20-75% [11]. Несмотря на это, данный метод обладает такими недостатками, как высокая стоимость, длительность процесса и загрязнение сточных вод. Таким образом, требуется разработка новых методов, позволяющих устранить эти недостатки.

Альтернативным способом получения НКЦ является переработка целлюлозы в субкритической воде. Субкритическим считается состояние воды при давлении 1-220 бар и температуре 100-374°C [12]. Константа ионизации K_w воды увеличивается с повышением температуры, в результате чего образуется кислая среда для проведения гидролиза. При этих же условиях уменьшается диэлектрическая проницаемость, что позволяет растворять в субкритической воде органические вещества [13]. Таким образом, катионы воды разрушают гликозидные связи в аморфных участках целлюлозного вещества, не затрагивая при этом кристаллические области.

Авторы статьи [14] исследовали получение НКЦ гидролизом целлюлозы в субкритической воде. Было изучено влияние температуры $T=120-200^\circ\text{C}$ и давления $p=8,1-20,3$ МПа на длину, ширину, выход, кристалличность и белизну конечного продукта. Полученные нанокристаллы целлюлозы обладали диаметром 40-62 нм, длиной 189-258 нм и степенью кристалличности 79-81,9%. Максимальный выход конечного продукта $y=21,9\%$ был получен при параметрах $T=120^\circ\text{C}$ и $p=20,3$ МПа.

Экспериментальная часть

В данной работе исследовался процесс получения нанокристаллической целлюлозы гидролизом в субкритической воде. Изучалось влияние температуры, давления и времени на выход и характеристики конечного материала. Испытания проводились в соответствии с планом, составленным по методу полного факторного эксперимента. Основная серия опытов включала в себя 8 экспериментов при следующих параметрах: температура 160-200°C, давление 100-200 бар, время реакции 1-3 ч. Для определения дисперсии воспроизводимости, необходимой для получения уравнения регрессии, была проведена дополнительная серия опытов из трех испытаний в центре плана при 180°C, 150 бар и 2 ч. В качестве исходного сырья использовалась микрокристаллическая целлюлоза (МКЦ). Процесс гидролиза проводился на установке с аппаратом высокого давления объемом 300 мл, представленной на Рисунок 13.



Рисунок 13. Установка для проведения гидролиза в субкритической воде

Общая схема получения НКЦ включает в себя следующие этапы: гидролиз в субкритической воде, очистка от побочных продуктов реакции, обработка суспензии ультразвуком, сублимационная сушка. Реактор с МКЦ заполняется дистиллированной водой, далее установка герметизируется и осуществляется нагрев до заданной температуры при перемешивании лопастью мешалки 300 об/мин. Давление в системе растет при температуре ~140°C. Сброс давления до необходимого значения осуществляется с помощью выходного вентиля. Процесс проводится в течение необходимого времени с момента установления заданных температуры и давления.

На втором этапе полученную смесь фильтруют для отделения осадка от жидкой фазы, содержащей побочные продукты реакции. Фильтрация осуществляется с использованием воронки Бюхнера, колбы Бунзена и стекловолоконного фильтра с размером пор 1 мкм. Далее осадок отмывают от побочных продуктов в диализных мешках в течение четырех дней. После диализа суспензию обрабатывают ультразвуком в течение пяти минут

для отделения нанокристаллов от непрореагировавшей микрокристаллической целлюлозы. Далее суспензию повторно фильтруют для отделения осадка, содержащего непрореагировавшую НКЦ.

На последнем этапе раствор с нанокристаллами целлюлозы готовят к сушке. Полученную суспензию замораживают в морозильной камере при температуре -26°C в течение суток. Замороженные образцы помещают в лиофилизатор CoolSafe 100-9 и проводится процесс сублимационной сушки в течение 48 часов. Результаты проведенных экспериментов представлены в Таблице 1, где у – выход полученного продукта, %.

Таблица 1. Зависимость выхода конечного продукта от параметров процесса

№ опыта	T, °C	p, бар	t, ч	y, %
1	200	200	3	13,3
2	160	200	3	3,0
3	200	100	3	5,8
4	160	100	3	1,4
5	200	200	1	3,5
6	160	200	1	1,7
7	200	100	1	2,8
8	160	100	1	0,7
9	180	150	2	4,1
10	180	150	2	3,9
11	180	150	2	5,1

Анализируя полученные данные, можно сделать следующие выводы. При увеличении температуры, давления и длительности процесса повышается выход материала. Самый высокий выход нанокристаллов целлюлозы был получен при максимальных параметрах ведения процесса (200°C, 200 бар, 3 ч) и составил 13,3%.

Размер частиц полученного и исходного материала определялся с использованием анализатора размеров частиц Zetasizer Nano ZS (Malvern Instruments Ltd, Великобритания). Дифференциальные кривые распределения частиц по размерам представлены на Рисунок 14.

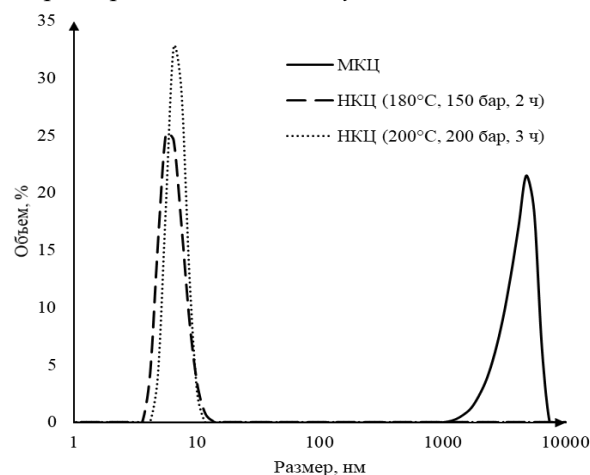


Рисунок 14 Дифференциальные кривые распределения частиц МКЦ и НКЦ по размерам

В результате гидролиза частицы исходной микрокристаллической целлюлозы уменьшились. Размер нанокристаллов целлюлозы составил 4-12 нм. Частицы МКЦ значительно больше, их размер находится в интервале 1-10 мкм.

ИК-спектры поглощения были получены с использованием ИК-Фурье спектрометра Nicolet380 (Thermo Fisher Scientific Inc., США) в Центре коллективного пользования РХТУ им. Д.И. Менделеева. На Рисунок 15 представлены ИК-спектры для исходной микрокристаллической целлюлозы и для материала, полученного при 180°C, 150 бар, 2 ч и при 200°C, 200 бар, 3 ч.

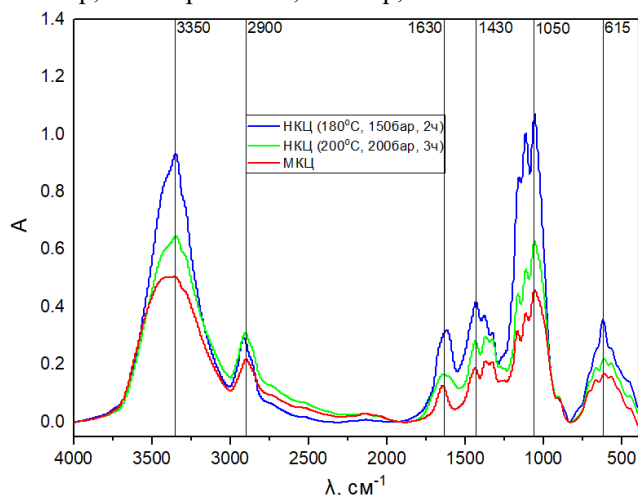


Рисунок 15. ИК-спектры исходной МКЦ и полученного материала

Пики при 3650-3000 cm^{-1} соответствуют валентным колебаниям гидроксильных групп О-Н, которые участвуют в межмолекулярных и внутримолекулярных водородных связях [15]. С-Н связям соответствует пик в интервале 2840-3000 cm^{-1} . К деформационным колебаниям ОН-групп относится пик при 1610-1640 cm^{-1} [16]. Деформационные колебания метильных CH_2 -групп наблюдаются при 1370-1430 cm^{-1} [15]. В области волновых чисел 1310-1000 cm^{-1} наблюдаются валентные колебания связей С-О-С. Пики при 615-571 cm^{-1} соответствуют деформационным внеплоскостным колебаниям групп О-Н. По полученным ИК-спектрам состав полученных нанокристаллов целлюлозы схож с составом исходной микрокристаллической целлюлозы. Пики на графике совпадают. Однако образцы НКЦ обладают большей интенсивностью. Предположительно это связано с тем, что полученные вещества более аморфные и обладают меньшей степенью кристалличности по сравнению с МКЦ.

Кристалличность образцов изучалась методом рентгенофазового анализа (РФА) с использованием рентгеновского дифрактометра ВТХ III (Olympus Scientific Solutions, США). На Рисунке 4 представлены диффрактограммы исходной микрокристаллической целлюлозы и полученного материала.

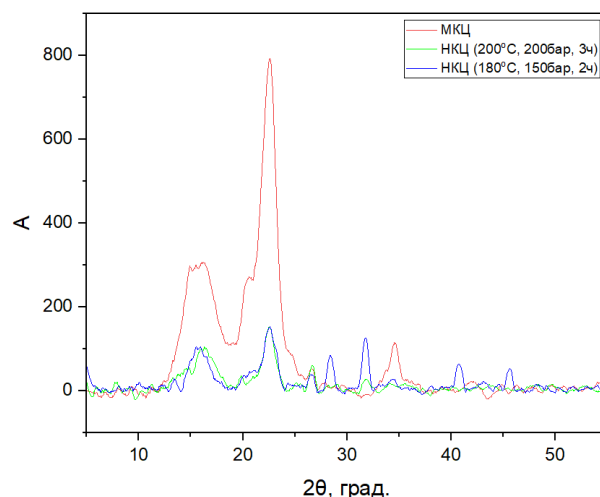


Рисунок 16. Диффрактограммы полученного материала и исходной МКЦ

Полученные в результате гидролиза нанокристаллы целлюлозы являются более аморфными и обладают меньшей степенью кристалличности по сравнению с исходной МКЦ. Более низкая интенсивность пиков полученной НКЦ может быть связана с уменьшением кристаллических областей в результате гидролиза [17].

В результате регрессионного анализа полученных экспериментальных данных было получено уравнение, описывающее зависимость выхода нанокристаллов целлюлозы от параметров процесса в рассмотренном диапазоне значений.

$$\hat{y} = 4,03 + 2,33 \cdot x_1 + 1,35 \cdot x_2 + 1,85 \cdot x_3 + 1,35 \cdot x_1 \cdot x_3, \quad (1)$$

где $\hat{y}$ – выход НКЦ, %; x_1 , x_2 , x_3 – кодируемые величины, характеризующие температуру, давление и время соответственно.

Полученное регрессионное уравнение адекватно оценивает эксперимент, так как табличное значение критерия Фишера больше расчетного ($F_{\text{табл}}(3;2) = 19,2 > F_{\text{расч}} = 12,6$). По уравнению регрессии был сделан вывод о том, что наибольшее влияние на выход нанокристаллов целлюлозы оказывает температура гидролиза.

Заключение

Исследование процесса получения нанокристаллов целлюлозы гидролизом в субкритической воде проводилось в соответствии с планом, составленным по методу полного факторного эксперимента. Изучалось влияние параметров процесса (температуры, давления, времени) на выход НКЦ. Выход материала увеличивался с повышением температуры, давления и длительности гидролиза. Наибольший процент выхода был получен при максимальных параметрах процесса и составил 13,3%. Для изучения характеристик полученных веществ производились комплексные аналитические исследования. В результате гидролиза частицы исходной МКЦ уменьшились. Размер полученных нанокристаллов целлюлозы составил 4-12 нм (распределение частиц по размерам). Состав полученной НКЦ схож с составом исходной микрокристаллической целлюлозы (ИК-

спектроскопия). Исходное вещество является менее аморфным и обладает большей степенью кристалличности по сравнению с полученными образцами (РФА). Уравнение, полученное в результате регрессионного анализа экспериментальных данных, адекватно описывает зависимость выхода нанокристаллов целлюлозы от параметров процесса в рассмотренном диапазоне значений. По полученному уравнению наибольшее влияние на выход НКЦ оказывает температура гидролиза.

Список литературы

1. Farooq A. et al. Cellulose from sources to nanocellulose and an overview of synthesis and properties of nanocellulose/zinc oxide nanocomposite materials //International journal of biological macromolecules. – 2020. – V. 154. – P. 1050-1073.
2. Rana A. K., Frollini E., Thakur V. K. Cellulose nanocrystals: Pretreatments, preparation strategies, and surface functionalization //International Journal of Biological Macromolecules. – 2021. – V. 182. – P. 1554-1581.
3. Tang Y., Yang H., Vignolini S. Recent progress in production methods for cellulose nanocrystals: leading to more sustainable processes //Advanced Sustainable Systems. – 2022. – V. 6. – №. 3. – P. 2100100.
4. Ortega A. et al. Reinforcement of acrylamide hydrogels with cellulose nanocrystals using gamma radiation for antibiotic drug delivery //Gels. – 2023. – V. 9. – №. 8. – P. 602
5. Ghahari S. A. et al. Fracture properties evaluation of cellulose nanocrystals cement paste //Materials. – 2020. – V. 13. – №. 11. – P. 2507.
6. Andrade M. S. et al. Development of sustainable food packaging material based on biodegradable polymer reinforced with cellulose nanocrystals //Food Packaging and Shelf Life. – 2022. – V. 31. – P. 100807
7. Yusefi M. et al. Fabrication of cellulose nanocrystals as potential anticancer drug delivery systems for colorectal cancer treatment //International Journal of Biological Macromolecules. – 2022. – V. 199. – P. 372-385.
8. Karim Z. et al. High-flux affinity membranes based on cellulose nanocomposites for removal of heavy metal ions from industrial effluents //RSC advances. – 2016. – V. 6. – №. 25. – P. 20644-20653.
9. Börjesson M., Westman G. Crystalline nanocellulose—preparation, modification, and properties //Cellulose-fundamental aspects and current trends. – 2015. – V. 7.
10. Gao M. et al. Sustainable preparation of cellulose nanocrystals: state of the art and perspectives //Green Chemistry. – 2022. – V. 24. – №. 24. – P. 9346-9372
11. Vanderfleet O. M., Cranston E. D. Production routes to tailor the performance of cellulose nanocrystals //Nature Reviews Materials. – 2021. – V. 6. – №. 2. – P. 124-144.
12. Sarker T. R. et al. Hydrothermal pretreatment technologies for lignocellulosic biomass: A review of steam explosion and subcritical water hydrolysis //Chemosphere. – 2021. – T. 284. – C. 131372.
13. Machmudah S. et al. Hydrolysis of biopolymers in near-critical and subcritical water //Water extraction of bioactive compounds. – Elsevier, 2017. – P. 69-107.
14. Novo L. P. et al. A study of the production of cellulose nanocrystals through subcritical water hydrolysis //Industrial Crops and Products. – 2016. – V. 93. – P. 88-95.
15. Гисматулина Ю. А., Будаева В. В. Сравнение целлюлоз, выделенных из мискантуса, с хлопковой целлюлозой методом ИК-Фурье спектроскопии //Ползуновский вестник. – 2014. – №. 3. – С. 177-181.
16. Шипина О. Т., Гараева М. Р., Александров А. А. ИК-спектроскопические исследования целлюлозы из травянистых растений //Вестник Казанского технологического университета. – 2009. – №. 6. – С. 148-152.
17. Kuznetsov B. N., Sudakova, I. G., Garyntseva, N. V., Skripnikov, A. M., Pestunov, A. V., Gnidan, E. V. Birch wood biorefinery into microcrystalline, microfibrillated, and nanocrystalline celluloses, xylose, and adsorbents //Wood Science and Technology. – 2023. – V. 57. – №. 1. – P. 173-196.

УДК 004.94: 519.876.5: 543.07: 661.11

Петрова К.Д., Филиппова Е.Б., Бессарабов А.М.

Виртуальное моделирование аналитического оборудования для масс-спектрометрии

Петрова Ксения Дмитриевна – бакалавр 3 курса кафедры информационных компьютерных технологий
Филиппова Елена Борисовна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Москва, 125047, Миусская пл., д. 9.

Бессарабов Аркадий Маркович – д.т.н., профессор, заместитель директора по науке, bessarabov@nc-mtc.ru
АО Научный центр «Малотоннажная химия»,
Россия, Москва, 107564, ул. Краснобогатырская, д. 42.

Проведены работы по исследованию метода масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой, применяемого в аналитических лабораториях научно-промышленного комплекса, включающего предприятие АО «ЭКОС-1» и Научный центр «Малотоннажная химия». С помощью приложения Blender создана виртуальная 3D-модель масс-спектрометра «SUPEC 7000» (FPI, Китай).

Ключевые слова: цифровой двойник, 3D-модель, аналитическая лаборатория, специализированное оборудование, аналитические приборы, масс-спектрометрия

Virtual simulation of analytical equipment for mass-spectrometryPetrova K.D.¹, Phillipova E.B.¹, Bessarabov A.M.²¹ D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow² R&D Centre "Fine Chemicals", Moscow, Russia

Work has been carried out to study the method of mass spectrometry with inductively coupled plasma, used in the analytical laboratories of the scientific-industrial complex, which includes the enterprise JSC "EKOS-1" and the R&D Centre "Fine Chemicals". Using the Blender application, the virtual 3D model of the «SUPEC 7000» mass spectrometer (FPI, China) was created.

Keywords: digital twin, 3D model, analytical laboratory, specialized equipment, analytical instruments, mass-spectrometry

Среди различных методов исследования состава и свойств веществ значительное место занимает масс-спектрометрия с ионизацией в индуктивно связанной плазме МС-ИСП. Этот метод, основанный на измерении масс ионов, образующихся при ионизации образца в высокотемпературной плазме, позволяет точно определять содержание различных элементов в образцах [1].

Масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой является незаменимым инструментом для анализа химического состава вод и других жидкостей. Например, в исследовании состава вод родников Московской области использовался масс-спектрометр «SUPEC 7000», адаптированный для работы с системой лазерного пробоотбора. Калибровка прибора проводилась с использованием мультиэлементных стандартов, а для контроля точности использовались внутренние стандарты, что обеспечивало высокую надежность получаемых данных [2]. Этот прибор является одним из новейших масс-спектрометров от компании Focused Photonics. Он воплощает передовые инженерные и технические решения, которые включают в себя компактный узел ввода образца с полностью разборной горелкой и открытую архитектуру отклоняющей системы, предотвращающую попадание нейтральных частиц в реакционную ячейку. Кроме того, в «SUPEC 7000» предусмотрена возможность аэрозольного разбавления для анализа проб с высоким содержанием растворенного вещества [3].

Как сказано выше [1] основой работы масс-

спектрометра является использование индуктивно связанной плазмы для ионизации образцов. При этом процесс начинается с введения образца в плазму, где под воздействием высоких температур происходит ионизация. Затем ионы направляются в масс-анализатор, где разделяются по массе и регистрируются детектором. Для получения точных и надежных данных необходимы калибровка и контроль качества измерений, которые обеспечиваются использованием стандартных растворов и внутренних стандартов [4].

Обширный анализ методов спектрометрии, применяемых в технологии химических реактивов и особо чистых веществ связан с определением группы примесей – катионы металлов [5]. Для этого применяются такие методы, как масс-спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой (МС-ИСП), атомно-абсорбционная спектрометрия (ААС) и атомно-эмиссионная спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой (АЭС-ИСП). Разработчики из разных стран предлагают различные приборы для этих методов. Например, PerkinElmer, Varian, Agilent Technologies и Thermo Electron Corporation производят приборы для МС-ИСП; Thermo Electron Corporation и Teledyne Leeman Labs — для АЭС-ИСП; российские компании «Квант» и «Люмекс», а также зарубежные производители GBS, Varian, Shimadzu, PerkinElmer и Analitik Jena - для ААС [5].

В последнее время особое внимание уделяется виртуальному моделированию аналитического оборудования для масс-спектрометрии, что

способствует улучшению точности и эффективности анализа. Виртуальное моделирование масс-спектрометров позволяет создавать цифровые двойники оборудования, что упрощает процесс их эксплуатации и обслуживания. Примером таких разработок является проводимое нами создание виртуальной 3D-модели масс-спектрометра «SUPEC 7000». Это позволяет операторам и техническому персоналу изучать устройство и работу прибора в виртуальной среде, что сокращает время на обучение и снижает вероятность ошибок при реальной эксплуатации.

Компьютерное моделирование и создание цифровых двойников аналитического оборудования открывает новые возможности для развития и совершенствования методов масс-спектрометрии. Это позволяет не только улучшить точность и надежность анализа, но и ускорить процесс разработки новых приборов и технологий, что, в свою очередь, способствует прогрессу в различных областях науки и промышленности.

В настоящее время проводятся работы по созданию цифрового двойника Научного центра «Малотоннажная химия», специалисты которого занимаются научными разработками для микроэлектроники, фармацевтики, авиационно-космической отрасли и военно-промышленного комплекса [6]. Аналитическое оборудование Научного центра включает в себя масс-спектрометр с индуктивно связанной плазмой модели «SUPEC 7000» (FPI, Китай) (рис. 1). В состав масс-спектрометра входят: система ввода пробы, состоящая из перистальтического насоса и распылительной камеры; блок плазменной горелки; система для отбора ионов из плазмы и их транспорта

в высоковакуумную часть масс-спектрометра; система ионной оптики; квадрупольный масс-фильтр; детектор ионов. Используемое программное обеспечение Element V предназначено для настройки параметров измерений и проверки рабочего состояния прибора, сбора, обработки и хранения информации.



Рис. 17- Общий вид масс-спектрометра с индуктивно связанной плазмой «SUPEC 7000»

Для создания виртуальной 3D-модели масс-спектрометра с индуктивно связанной плазмой модели «SUPEC 7000» (рис. 2) используется программное обеспечение Blender, которое является мощным инструментом для 3D моделирования, анимации и рендеринга [7,8]. Внедрение виртуальных моделей в аналитическую практику позволяет проводить имитацию и анализ внутренних рабочих процессов приборов.

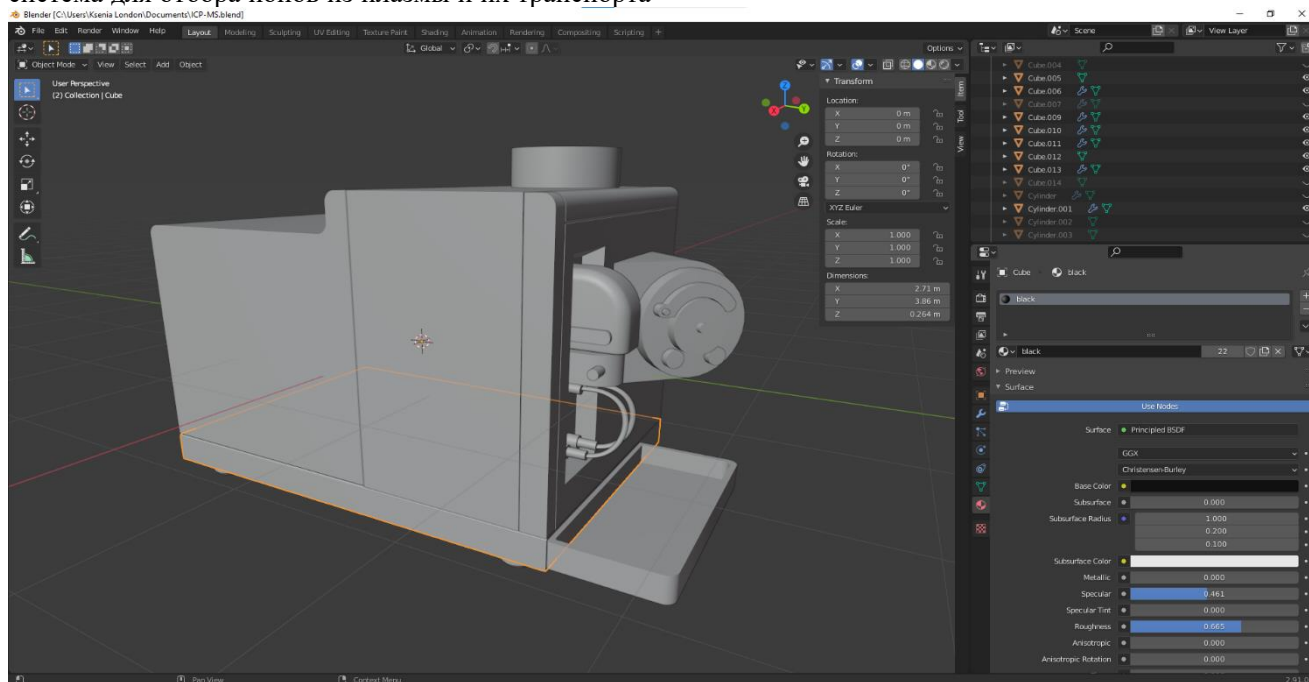


Рис. 2. Этап 3D-моделирования в приложении Blender

Blender, как профессиональное свободное и открытое программное обеспечение, пользуется большой популярностью среди пользователей благодаря своему быстрому развитию и технической поддержке [7]. Использование процедурных шейдеров в Blender позволяет создавать сложные и реалистичные материалы без использования реальных фотографий или текстур, что делает процесс моделирования более гибким и эффективным [8]. Таким образом, использование Blender для создания 3D-модели «SUPEC 7000» обеспечивает возможность комплексного моделирования и визуализации этого аналитического прибора.

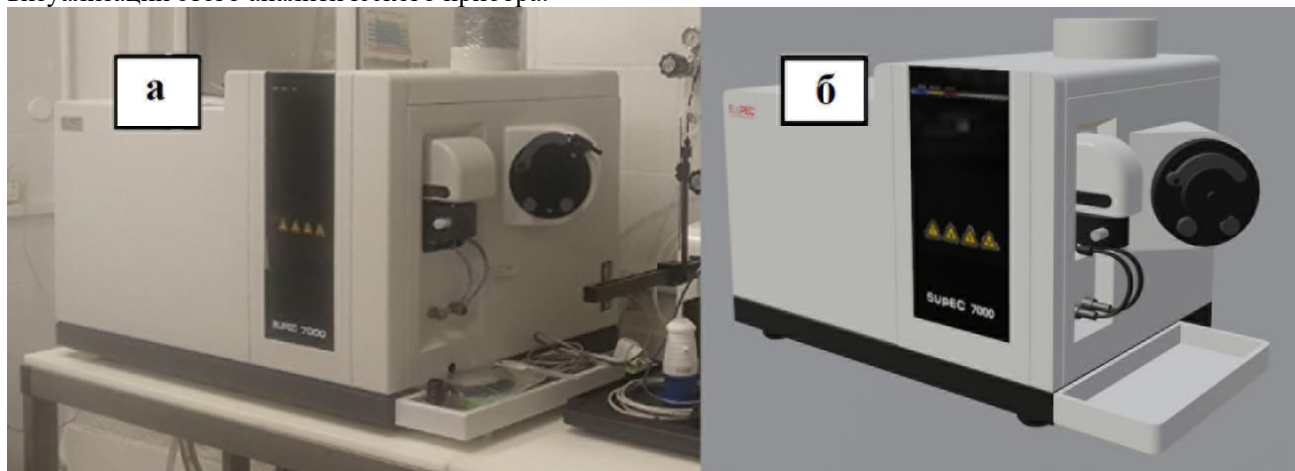


Рис.3. Масс-спектрометр с ИСП «SUPEC 7000» (а – фото, б - виртуальная 3D-модель)

В процессе текстуринга основная работа проводилась во вкладке настройки материалов, где можно было изменить цвет, отражение, матовость и другие параметры, используя также специальное окно для сложных материалов (ноды шейдеров). Добавление наклеек осуществлялось с помощью аддона, который позволяет сделать изображение мешем. Рендеринг включал подготовку сцены с добавлением источников света и завершался переходом во вкладку окна рендера.

Заключение

С использованием программного обеспечения Blender для Научного центра "Малотоннажная химия" была создана виртуальной 3D-модели масс-спектрометра модели "SUPEC 7000". Это позволяет имитировать рабочие процессы прибора, обучать персонал и улучшать точность анализа. Использование Blender значительно облегчает создание реалистичных моделей, подчеркивая важность интеграции современных цифровых технологий визуализации в научные и промышленные процессы.

Список литературы

1. Поваров И.Г., Новиков Р.И., Родионова Д.А. Определение мышьяка в пробах органических жидкостей методом ИСП-МС // Химия и технология органических веществ. — 2022. — № 3 (23). — С. 63-70.

Создание 3D модели масс-спектрометра в Blender делилось на три этапа: моделирование, наложение материалов и рендер. На этапе моделинга итоговая форма создавалась из соединения простых мешей (Mesh), которые видоизменялись и объединялись с использованием различных модификаторов, таких как булевы операции (Boolean) и зеркало (Mirror); модели сглаживались инструментом сглаживание формы (Shade Smooth) там, где это было необходимо (рис. 2). В результате для используемого в аналитической лаборатории масс-спектрометра (рис. 3-а) была получена виртуальная 3D-модель (рис. 3-б).

2. Матвеев В.И. Обзор «Analitika EXPO-2022» // Научное приборостроение — 2022. — Т. 32. — № 3. — С. 32.

3. Описание типа средства измерения: Масс-спектрометры с индуктивно связанной плазмой «SUPEC 7000» // [Электронный ресурс]: Единый Центр Метрологических Услуг // URL: <https://www.ktopoverit.ru/prof/opisanie/87667-22.pdf> (дата обращения: 29.05.2024)

4. Хатымов Р.В., Терентьев А.Г. Современное состояние и возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов для решения аналитических задач // Известия Академии наук. Серия химическая. — 2021. — № 4. — С. 605-646.

5. Бессарабов А.М., Трынкина Л.В., Трохин В.Е., Вендило А.Г., Бельков В.П. Разработка базы данных аналитических приборов для CALS-системы компьютерного менеджмента качества химических реактивов и особо чистых веществ // Промышленные АСУ и контроллеры. — 2011. — №11 — С. 45-56.

6. Родченкова В.В. Научный центр «Малотоннажная химия»: Мы занимаемся серьезной наукой и развиваем успешный бизнес // Аналитика. — 2019. — Т. 9. — № 2. — С. 116-120.

7. Хесс Ф. Практическое пособие Blender 3.0 для любителей и профессионалов. Моделинг, анимация, VFX, видеомонтаж. М.: СОЛОН-Пресс. — 2022. — 300 с.

8. Rohe D.P., Jones E.M.C. Generation of synthetic digital image correlation images using the open-source Blender software // Experimental Techniques. — 2022. — V. 46. — No. 4. — P. 615-631.

УДК 615.012

Деркач В.С., Гордиенко М.Г.

Разработка и исследование прототипа назальной формы в виде полимерных наночастиц с фавипиравиром

Деркач Владислав Сергеевич – аспирант 1-го года обучения кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, derkach.v.s@muctr.ru

Гордиенко Мария Геннадьевна – доктор технических наук, доцент, профессор кафедры химического и фармацевтического инжиниринга;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье описана методика получения полимерных наночастиц с включенным фавипиравиром. Представлены результаты исследования влияния концентраций PLGA и полоксамера 407 на размер наночастиц. Средний диаметр полученных полимерных наночастиц составил 153,7 нм. Представлены результаты влияния ультразвука на размер полимерных наночастиц с включенным фавипиравиром. Проведены исследования проницаемости через мембрану полимерных наночастиц с включенным фавипиравиром.

Ключевые слова: полимерные наночастицы, фавипиравир, проницаемость, нанопреципитация.

Development and analysis of a prototype nasal form of polymeric nanoparticles with favipiravir

Derkach V. S, Gordienko M. G.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article describes a method for obtaining polymer nanoparticles with included favipiravir. The results of the study of the influence of PLGA and poloxamer 407 concentration on the size of nanoparticles are presented. The average diameter of the obtained polymer nanoparticles was 153.7 nm. The results of the influence of ultrasound on the size of polymer nanoparticles with included favipiravir are presented. Studies of the permeability of polymer nanoparticles through the membrane with included favipiravir have been carried out.

Key words: polymer nanoparticles, favipiravir, permeability, nanoprecipitation method.

Введение

Одной из главных проблем при создании лекарств является их низкая растворимость в воде. Для улучшения растворимости гидрофобных лекарств используются различные вспомогательные вещества, такие как сорастворители, поверхностно-активные вещества (ПАВ), комплексообразователи, мицеллярные и липидные формы [1]. Однако, использование большого количества таких ингредиентов может увеличить риск возникновения побочных эффектов у пациентов. Пероральные лекарственные формы часто имеют пониженную биодоступность, распределяются по всему организму, создают дополнительную нагрузку на печень и почки [2]. В результате, лишь небольшой процент введенной дозы достигает клеток-мишеней, что требует применения высоких доз для достижения терапевтической концентрации в целевом органе. Более эффективным способом является доставка лекарственных препаратов непосредственно в зону патологического очага, что позволяет снизить нежелательные реакции организма, уменьшить дозу препарата и частоту его введения. Разработка альтернативных назальных форм лекарственных препаратов является важной задачей. Доставка лекарств через слизистую носа представляет собой перспективный метод, который обеспечивает быстрое начало действия и абсорбцию различных лекарственных препаратов. Этот подход особенно эффективен для гидрофобных лекарств, которые могут подвергаться разрушению в желудочно-кишечном тракте. Для улучшения абсорбции лекарств через

слизистую оболочку носа были изучены различные методы, включая модификацию пролекарств, микроэмульсии, наносuspensions, полимерные наночастицы, липидные составы и другие [3]. Среди этих методов полимерные наночастицы (НЧ) считаются эффективными системами доставки для терапевтических агентов через слизистую носа [4].

Наночастицы – это частицы размером от 1 до 100 нм, которые могут использоваться для доставки лекарств, таких как нуклеиновые кислоты, пептиды и небольшие гидрофобные и гидрофильные молекулы. Они обладают потенциальными преимуществами, такими как улучшенная растворимость и стабильность лекарств, повышенная биодоступность в целевой области и более длительная продолжительность действия за счет контроля скорости высвобождения [5]. Это может привести к минимальным побочным эффектам и более удобному способу введения, что способствует улучшению соблюдения пациентом режима лечения и улучшению терапевтического эффекта. Одним из наиболее популярных материалов-носителей является сополимер полимолочной и полигликолевой кислот (PLGA), который обладает исключительной биосовместимостью и биоразлагаемостью. Его свойства молекулярной массы и скорости биоразложения можно контролировать в широком диапазоне значений. Гидролизированные мономеры легко метаболизируются в организме и выводятся в виде углекислого газа и воды [6]. PLGA является одобренным полимером для использования в системах доставки лекарств благодаря своим свойствам контролируемого и пролонгированного

высвобождения и биосовместимости с биологическими тканями и клетками [7].

В данной работе в качестве гидрофобной активной фармацевтической субстанции был выбран фавипиравир, который оказывает противовирусное действие. Фавипиравир включён в список жизненно необходимых и важнейших лекарственных препаратов Минздрава России. Кроме того, он входит в рекомендации по лечению COVID-19. Фавипиравир плохо растворяется в воде, согласно Фармакопейной статье, поэтому для повышения растворимости фавипиравира необходимо использовать различные подходы [8]. Одним из таких подходов является включение гидрофобной молекулы в полимерные наночастицы.

Экспериментальная часть

Наночастицы, с включенным фавипиравиром, были получены при помощи метода нанопреципитации (осаждение полимера). Органическую фазу, состоящую из фавипиравира и сополимера полимолочной и полигликолевой кислот растворяли в ацетоне. Затем органическую фазу добавляли к водной фазе, содержащей полоксамер 407.

Полученную суспензию перемешивали при 550 об/мин в течение 24 ч, чтобы обеспечить полное испарение органического растворителя (рис. 1). Полное испарение подтверждали путем взвешивания флакона перед добавлением органической фазы и после процесса испарения.

На первом этапе производился подбор концентраций PLGA и полоксамера 407. Для этого было получено образцы (не содержащие фавипиравир) с различными концентрациями веществ. Размер полученных частиц анализировали на лазерном дифракционном анализаторе Mastersizer 3000 (Malvern Instruments Ltd, Германия). Полученные результаты приведены в таблице (Таблица 1).

В образце №1 с концентрациями PLGA 10 мг и полоксамера 10 мг получились частицы размером 163,3 нм. Увеличение концентрации полоксамера 407 до 20 мг (образец №2) не сильно влияет на размер образующихся частиц PLGA. Наименьший размер частиц получился в образце №3 при концентрациях PLGA 20 мг и полоксамера 407 20 мг, который составил 153,7 нм (рис. 2).

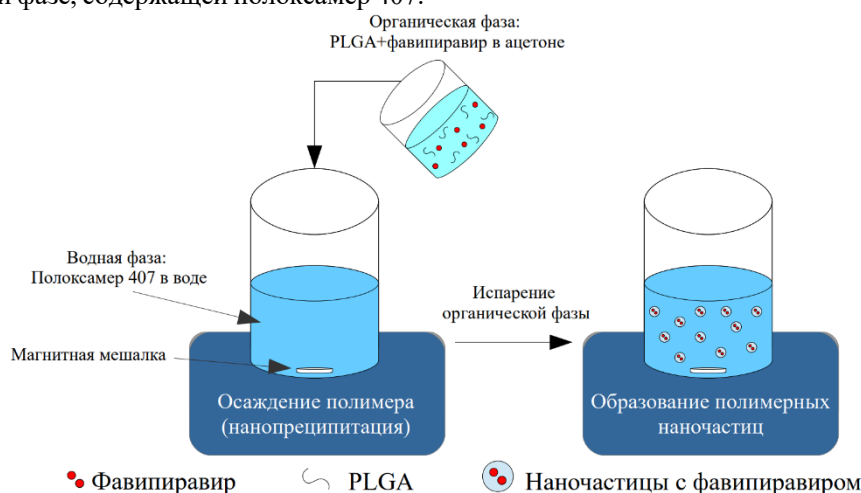


Рис. 1. Схематическая иллюстрация получения полимерных наночастиц методом нанопреципитации

Таблица 1. Составы образцов и их средний диаметр частиц

Номер образца	Органическая фаза		Водная фаза		Средний диаметр частиц, нм
	Ацетон, мл	PLGA, мг	Вода, мл	Полоксамер 407, мг	
1	10	10	20	10	163,3
2		10		20	168,2
3		20		10	153,7
4		20		20	197,7

Образец № 4 показал наибольший размер частиц (197,7 нм). Для получения частиц с солюбилизированным фавипиравиром были выбран образец №3 с концентрацией PLGA 20 мг и полоксамера 407 10 мг, так как при данных концентрациях образовывались частицы с наименьшим размером.

На втором этапе были получены частицы PLGA с включенным фавипиравиром (Таблица 2). Масса фавипиравира составила 30 мг. При включении фавипиравира в полимерные наночастицы, их средний диаметр составил 1252 нм (рис. 3). Увеличение размера частиц может быть связано с повышенной агрегацией частиц, ввиду инкапсуляции

фавипиравира. Для предотвращения агрегации частиц методика получения полимерных наночастиц была модифицирована. На стадии добавления органической фазы к водной использовался ультразвук (УЗ), который способствует разрушению агрегатов частиц. Средний диаметр полимерных наночастиц, обработанных УЗ, составил 207,0 нм (рис. 3).

На третьем этапе были проведены сравнительные исследования проницаемости через мембрану полимерных частиц с различной концентрацией фавипиравиром. Исследования проводилось на ручном трансдермальном диффузионном тестере DHC-6T (рис. 4).

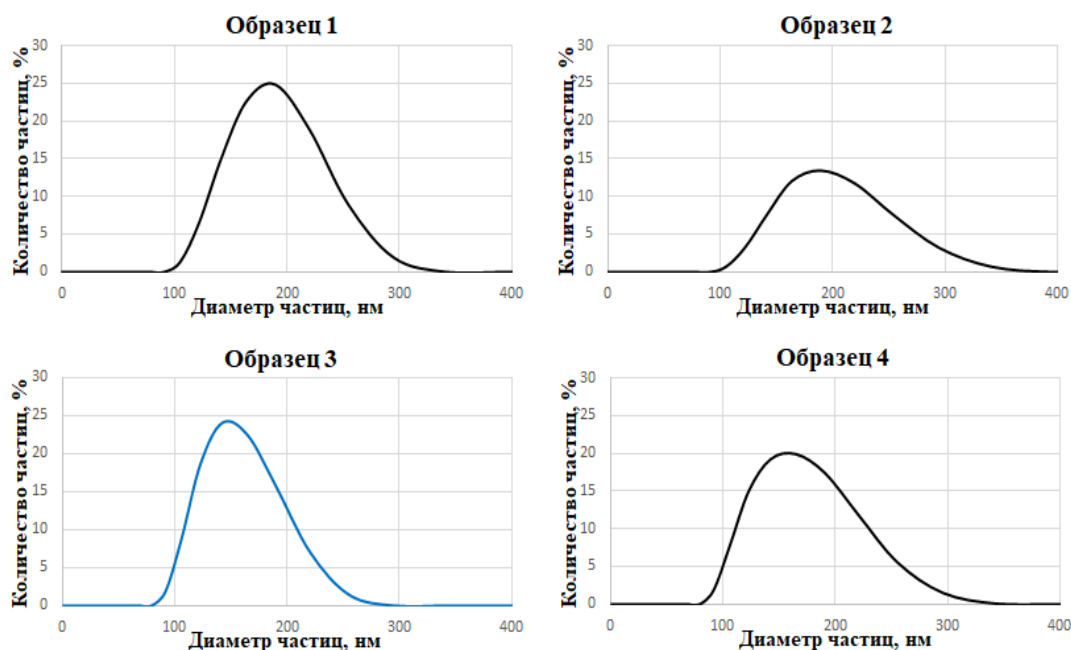


Рис.2. Распределение частиц по размеру для образцов 1-4.

Таблица 2. Составы образцов с фавипиравиром и их средний диаметр частиц

Номер образца	Органическая фаза			Водная фаза		УЗ	Средний диаметр частиц, нм
	Ацетон, мл	PLGA, мг	Фавипиравир, мг	Вода, мл	Полоксамер 407, мг		
З-Ф	10	20	30	20	10	-	1252,2
З-Ф-УЗ						+	207,0

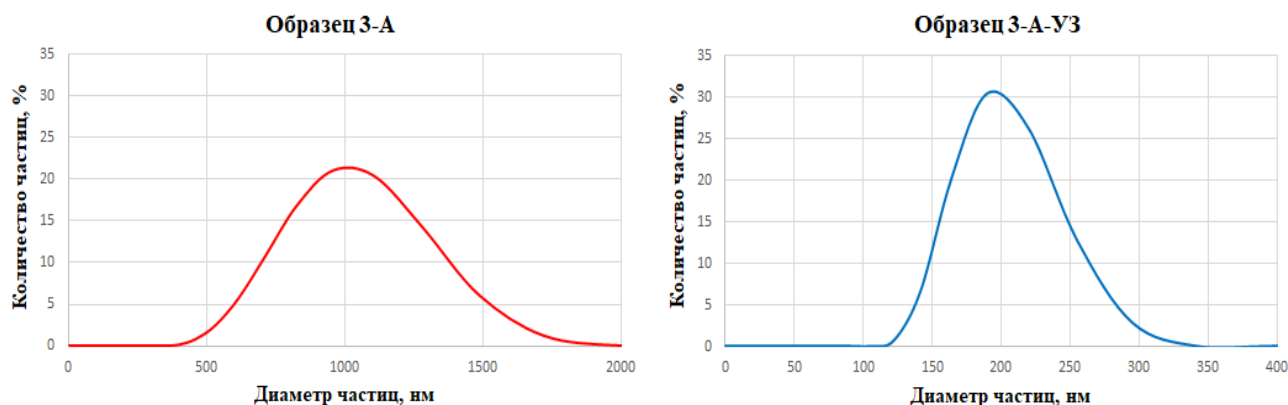


Рис.3. Распределение частиц по размеру для образцов 3-А и 3-А-УЗ.



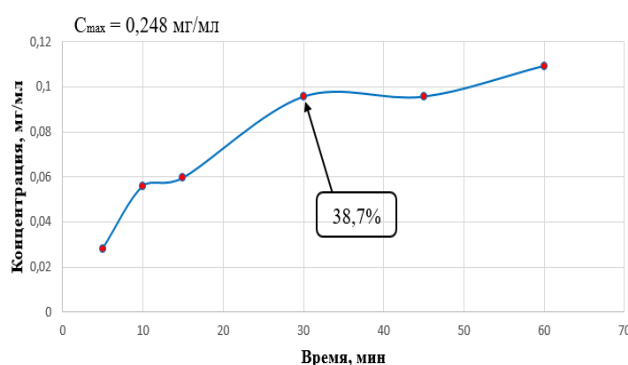
Рис.4. Трансдермальный диффузионный тестер DHC-6T.

Каждая из шести ячеек, объем которых равен по 7 мл, полностью заполняется фосфатным буфером с pH 7,4, так чтобы мембрана полностью соприкасалась с раствором. Далее включается магнитная мешалка и нагрев ячеек до 37 °С, после того, как фосфатный раствор в ячейках прогрелся до 37 °С, на каждую мембрану наносили по 0,2 мл раствора с полимерными НЧ. После заданных временных интервалов (5; 10; 15; 30; 45 и 60 минут) производился отбор пробы. Первые 2 мл отобранной пробы сливались, во избежание разбавления, в виду того, что в трубках трансдермального диффузионного тестера скапливается фосфатный буфер, который не контактирует с реакционной средой.

Последующие 5 мл отбирались для проведения аналитических исследований.

Для определения концентрации фавипиравира был проведен УФ-анализ полученных проб на спектрофотометре UNICO 2800. По полученной калибровочной кривой была рассчитана концентрация фавипиравира по уравнению (1) исходя из оптической плотности, соответствующей длине волны 362 нм на УФ-спектрах по результатам спектрофотометрии.

$$C_i = \frac{C_t \cdot 100}{C_{\max}} \quad (1)$$



где C_i – концентрация фавипиравира, прошедшего через мембрану, %;

C_t – концентрация раствора при определенной времен

ной точке;

$C_{\max}$ – максимальная концентрация фавипиравира, которая может пройти через мембрану, в случае 100% проницаемости, мг/мл.

На рис. 5 изображены графики проницаемости полимерных наночастиц с включенным фавипиравиром через мембрану за определенные временные промежутки.

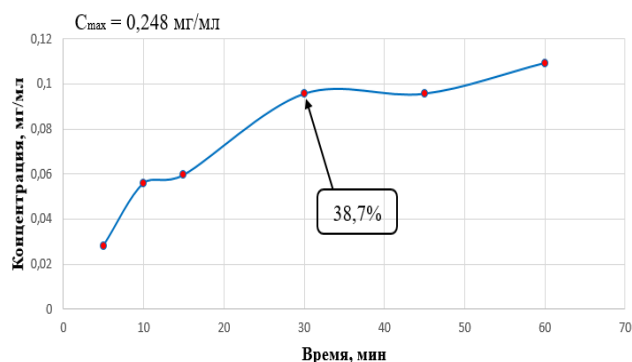


Рис. 5. Кривые проницаемости полимерных наночастиц с включенным фавипиравиром.

При концентрации фавипиравира 0,045 мг/мл через 30 минут сквозь мембрану прошло 64,4% от заложенной концентрации фавипиравира в полимерные наночастицы, а при концентрации 0,248 мг/мл – 38,7%.

Заключение

Проведены исследования для выявления влияния концентраций PLGA и полоксамера 407 на размер частиц. Наименьший средний диаметр частиц был получен при концентрациях PLGA 20 мг и полоксамера 407 10 мг (образец №3), который составил 153,7 нм. Для получения частиц с солюбилизированным фавипиравиром был выбран образец под номером 3. При загрузке 30 мг фавипиравира были получены наночастицы, средний диаметр которых составил 1252,2 нм. Использование ультразвука на стадии добавления органической фазы к водной позволило уменьшить размер частиц до 207,0 нм. Проведены исследования по проницаемости полученной композиции через мембрану. При концентрации фавипиравира 0,045 мг/мл через 30 минут сквозь мембрану прошло 64,4% АФС, а при концентрации 0,248 мг/мл – 38,7%.

Выполнено в рамках государственного задания (проект FSSM-2022-0004).

Список литературы

1. Bhakay A. et al. Bioavailability enhancement of poorly water-soluble drugs via nanocomposites: Formulation–Processing aspects and challenges //Pharmaceutics. – 2018. – V. 10. – №. 3. – P. 86.

2. Chavan S. S., Ingle S. G., Vavia P. R. Preparation and characterization of solid lipid nanoparticle-based nasal spray of budesonide //Drug delivery and translational research. – 2013. – V. 3. – P. 402-408.
3. Patra J. K. et al. Nano based drug delivery systems: recent developments and future prospects //Journal of nanobiotechnology. – 2018. – V. 16. – P. 1-33.
4. Calzoni E. et al. Biocompatible polymer nanoparticles for drug delivery applications in cancer and neurodegenerative disorder therapies //Journal of functional biomaterials. – 2019. – V. 10. – №. 1. – P. 4.
5. Скоринова К. Д., Кузьменко В. В., Василенко А. И. Перспектива создания лекарственных препаратов на основе наночастиц селена (обзор) //Разработка и регистрация лекарственных средств. – 2020. – Т. 9. – №. 2. – С. 33-44.
6. Sun X. et al. Poly (lactic-co-glycolic acid): Applications and future prospects for periodontal tissue regeneration //Polymers. – 2017. – V. 9. – №. 6. – P. 189.
7. Swider E. et al. Customizing poly (lactic-co-glycolic acid) particles for biomedical applications //Acta biomaterialia. – 2018. – V. 73. – P. 38-51.
8. Институт фармакопеи и стандартизации в сфере обращения лекарственных средств. – Москва. – URL: <https://pharmacopoeia.regmed.ru/pharmacopoeia-projects/izdanie-15/2/2-1/favipiravir/?vers=3819&projects=Y&comments=y> (дата обращения 30.05.2024 г.)

УДК 677.074

Чекурова С.С., Аверина Ю.М., Богомолов Б.Б., Рублева С.А.

Моделирование бизнес-процесса разработки рецептуры шихты для производства керамической мембраны

Чекурова Светлана Сергеевна – студент; sveta-chk2019@mail.ru

Аверина Юлия Михайловна – к.т.н., доцент кафедры;

Богомолов Борис Борисович – к.т.н., доцент кафедры;

Рублева Софья Алексеевна – инженер-исследователь.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Данная статья посвящена моделированию процессов для разработки рецептур наполнителей для производства керамических мембран. В работе обсуждается важность использования современных методов моделирования в мембранной промышленности для оптимизации производственных процессов. В статье также обсуждаются преимущества использования моделирования для анализа влияния различных факторов в процессе разработки синтеза и прогнозирования развития производства керамических мембран.

Ключевые слова: мембраны, карбид кремния, моделирование, IDEF-3 диаграмма.

Business process modeling of charge formulation development for ceramic membrane production

Chekurova S.S.¹, Averina Y.M.¹, Bogomolov B. B.¹, Rubleva S. A.¹

¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article is devoted to process modeling for the development of filler formulations to produce ceramic membranes. The article discusses the importance of using modern modeling techniques in the membrane industry to optimize production processes. The article also discusses the advantages of using simulation to analyze the influence of various factors in the synthesis development process and to predict the development of ceramic membrane production.

Key words: membranes, membrane technology, silicon carbide, modeling, IDEF-3 diagram.

Введение

Мембранные технологии на сегодняшний день являются одними из самых востребованных. Доказательством тому служит их разнообразие и широкое применение мембран в самых важных областях человеческой деятельности, таких как опреснение и очистка воды, энергетика, медицина, химия, нефтегазовая промышленность и т. д. Все это порождает интерес к изучению свойств мембран и способам создания мембран нового поколения. В мембранном рынке России главенствующее положение заняли полимерные мембраны и керамическими мембранами с подложкой из корунда [1,2].

Однако, все больший интерес начал проявляться с керамическими мембранами с подложкой из карбида кремния. Эти мембраны отличаются по своей природе высокой устойчивостью к твердым частицам и абразивным материалам, что гарантирует их устойчивость при промывке сточных вод любого состава. Главной задачей при создании мембраны является технология разработки состава шихты, именно от нее будут в дальнейшем зависеть физико-химические свойства готового продукта, его производительность и непосредственно экономическая эффективность [3].

Цель данной статьи заключается в создании IDEF-3 диаграммы, которая даст возможность понять, какие процессы и в каком порядке они

должны проводиться при разработке рецептуры шихты для керамических мембран с подложкой из карбида кремния.

Для решения данной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Определить важность создания мембран нового поколения.
2. Определить важность уделению внимания разработке новой шихты для керамических мембран.
3. Создать IDEF-3 диаграмму, наглядно показывающую основные операции, которые происходят при разработке рецептуры, и управляющие воздействия, которые являются ограничением в процессе.

Основная часть

Разработка новой шихты для керамических мембран на основе карбида кремния важна по многим причинам:

1. Улучшение свойств мембран: новый состав шихты поможет улучшить механические, термические и химические свойства мембран, делая их более эффективными в различных областях применения, таких как фильтрация воды, очистка газов и других промышленных процессах разделения.
2. Энергоэффективность: усовершенствованные мембраны помогают

повысить энергоэффективность процессов разделения, что приводит к экономии энергии и снижению производственных затрат.

3. Научные открытия: создание новых составов шихт может также привести к научным открытиям в области материалов и инженерии, которые могут способствовать развитию мембранной технологии в России.

В основе процедуры разработки мембран лежит типовой процесс проектирования, поэтому для анализа основных проектных операций используется организационно-экономическая модель в виде IDEF3 - диаграмм. IDEF3 – это метод, основная цель которого – описание последовательности выполнения работ и объектов, участвующих в бизнес-процессе. Следует отметить, что выпуск продукции, оказание услуг и другие работы отображаются на диаграмме в виде информации об этих процессах.

Каждая работа в IDEF3 требует подробного описания, в которое кроме имени и назначения включается текстовое описание объекта, факты –

механизмы и инструменты работы, ограничения работы. Для IDEF3 возможен стоимостной анализ (ABC). Кроме работ на схеме отображаются ссылки, то есть объекты, напрямую не связанные с работой, но необходимые для осуществления бизнес-процесса (информационные и организационные ресурсы).

IDEF-3 помогает визуализировать различные этапы и функции, необходимые для создания мембранной рецептуры. Это включает в себя описание взаимодействия между различными материалами, процедуры смешивания и обработки, а также контроль качества [4].

IDEF-3 позволяет анализировать процессы, связанные с разработкой рецептуры шихты, чтобы выявить узкие места, оптимизировать процессы и повысить качество продукции [5].

Благодаря моделированию и анализу процессов IDEF-3 можно использовать для разработки новых систем или улучшения существующих процессов производства мембранных рецептур.

В данной статье представлен следующий вид IDEF-3 «Разработка рецептуры шихты для производства керамической мембраны» (Рис.1).

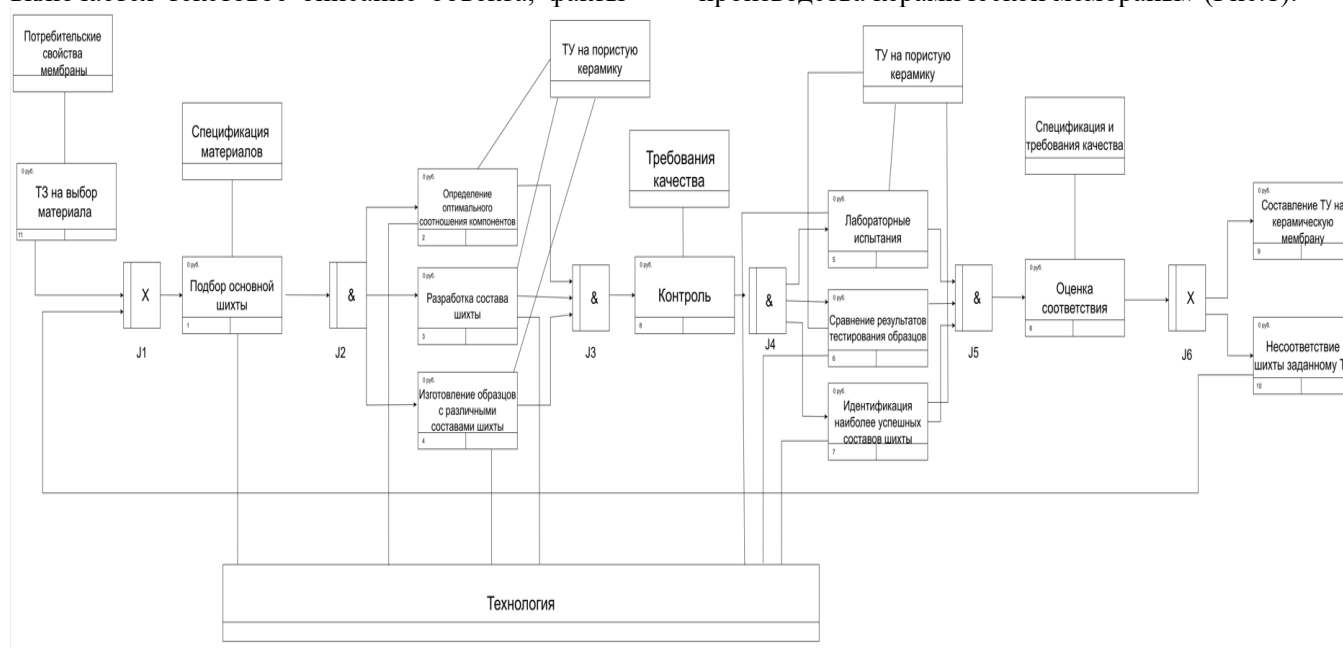


Рис. 1. IDEF-3 «Разработка рецептуры шихты для производства керамической мембраны»

Проведем анализ данной диаграммы.

При описании диаграммы можно выделить три основных блока, содержащих несколько операций (работ). Это подбор шихты (1), Контроль (2), Оценка соответствия (3). Каждый блок состоит из нескольких работ, но имеет общие информационные и организационные ресурсы.

В качестве начальной информации выступают потребительские свойства мембраны, в которых отражаются основные запросы по физико-химическим свойствам мембраны, так же здесь могут быть использованы данные по анализу

рынка. От этих потребительских свойств дальше будем отталкиваться при подборе состава шихты. Данные, которые мы получили, являются входной информацией для разработки ТЗ на выбор материала [6,7].

Проводим выбор состава шихты, управляющим ресурсам на данном этапе выступает спецификация материалов.

Дальше переходим в другой блок, где параллельно выполняются три работы: определение технических требований к шихте, определение оптимального состава шихты и анализ

сырья и добавок. Дадим описание каждому этапу работы:

1. Определение оптимального соотношения компонентов: на этом этапе определяют оптимальное соотношение между ключевыми компонентами, которые необходимы для получения конечного продукта. Цель состоит в том, чтобы найти такое соотношение, которое позволит придать конечному продукту желаемые свойства и характеристики.

2. Разработка состава шихты: на основе оптимального соотношения компонентов создается и разработка ТУ на состав шихты". При несоответствии при необходимости дорабатывается конкретная рецептура шихты. При этом учитываются технологические особенности производства, требования к качеству продукции и экономические факторы.

3. Изготовление образцов с различными составами шихты: после определения состава шихты, можно изготовить образцы с различным соотношением компонентов. Это позволит в дальнейшем провести испытания для определения оптимального состава.

Для всех работ управляющим воздействием является ТУ на пористую мембрану, которое определяет основные технические требования к мембране: физические и химические свойства, параметры прочности, коррозионную стойкость, а также ТУ может содержать информацию о методах испытаний и контроля качества [8].

Прежде чем перейти к следующему перечню параллельных работ, необходимо провести контроль ранее проведенных работ. Управляющее воздействие- требования качества.

После проведения контроля приступаем к следующему перечню работ: проведение лабораторных испытаний, сравнение результатов тестирования и идентификация наиболее успешных составов шихты.

1. Проведение лабораторных испытаний: затем образцы подвергаются различным испытаниям, таким как физический и химический анализ, механические испытания, термическая обработка и другие необходимые исследования. Цель - определить свойства и характеристики каждого образца.

2. Сравнение результатов тестирования образцов и идентификация наиболее успешных составов шихты: сопоставив результаты испытаний и проанализировав данные, можно выбрать наиболее подходящий состав шихты с необходимыми свойствами и характеристиками. Для этого необходимо определить составы, отвечающие требованиям качества, стабильности производства и экономической целесообразности.

Переменным ресурсом для каждого вида работы является технология, так как меняя технологию, у нас меняется выбор материальных

ресурсов, перечень необходимого оборудования, необходимый персонал, меняются требования качества, методы анализа качества и экономическая эффективность проекта [6].

Проводим оценку соответствия, то есть сравнение с требованиями ТЗ. Управляющим воздействием здесь является спецификация и требования качества. Полученные в результате всего процесса данные сравниваются с изначально заданным ТЗ, при соответствии результатов заданным требованиям, можем переходить на этап "разработка ТУ на состав шихты". При несоответствии хотя бы одного из требований, весь процесс возвращается назад [6].

В ходе анализа видно, что один процесс, который называется- разработка рецептуры шихты, включает в себя большое количество операций, включающих, создание ТЗ, подбор состава, анализ и контроль каждого этапа, соответствие нормативной документации. Все это делается для того, что впоследствии получить продукт, отличающийся качеством и конкурентоспособностью.

Заключение

Моделирование бизнес-процессов при разработке рецептуры шихты для производства керамических мембран - важный инструмент для оптимизации производственных процессов. Тщательное моделирование этого процесса может повысить качество продукции, оптимизировать использование ресурсов и снизить затраты. Использование передовых методов моделирования открывает новые возможности для инноваций в производстве керамических мембран, способствуя повышению конкурентоспособности продукции.

Моделирование также позволяет анализировать влияние различных факторов на процесс разработки рецептуры и делать прогнозы относительно будущего производства. Однако следует помнить, что моделирование — это лишь один из инструментов совершенствования процесса, который требует постоянного обновления и адаптации к изменениям в производственной среде и технологическому развитию.

В данной статье подтверждена важность:

1. Важность развития мембранной технологии: мембранные технологии играют ключевую роль в опреснении и очистке воды, энергетике, фармацевтике, химической промышленности, нефтегазовой отрасли. Это указывает на необходимость постоянных исследований и разработки новых мембранных материалов для удовлетворения потребностей этих секторов.

2. Важность разработки составов новых шихт: новая рецептура способствует развитию

мембранных технологий и расширению мембранного рынка в России.

3. Важность использование методов моделирования, таких как диаграммы IDEF-3, для визуализации процесса проектирования, выявления узких мест, оптимизации процесса и повышения качества продукции.

Список литературы

1. Семененко С.В., Серебрякова Н.А., Романова О.Н., Волкова М.Н., Чушкин Д.Ю., Кретова Н.Н., Вандышева С.В., Лесникова Э.П., Чудакова Е.А., Полянский К.К., Ключников А.И., Ключникова Д.В., Гребенчиков А.В., Данилов В.Н., Чусова А.Е., Новикова И.В., Брындина Л.В., Шамарина А. И. Тактические и стратегические направления инновационного развития инструментов товарного менеджмента и коммерции. - инновации в развитии мембранной техники на основе керамических мембран изд. - Воронеж: Коллективная монография, 2016. - 75–85 с.
2. Аверина Ю.М., Терпугов Г.В., Кацерева О.В., Труберг А.А., Скопин А.Л., Кабанов О.В., Ляпин И.Ф. Новые технологические процессы с применением мембран. - Москва: Издательство РХТУ им. Д.И. Менделеев, 2009. - 72 с.
3. Агеев О. А. Карбид кремния: технология, свойства, применение / О. А. Агеев, А.Е. Беляев, Н.С. Болтовец, В. С. Киселев, Р. В. Конакова, А.А. Лебедев, В.В. Миленин, О.Б. Охримченко, В.В. Поляков, А.М. Светличный, Д.И. Чередниченко. – Харьков: ИСМА, 2010. – 532 с.
4. Сорокин М. А. Использование IDEF-моделей при анализе процессов контроля и испытаний продукции массового производства // Известия вузов. Машиностроение. – 2011. – №7. – С. 12–17.
5. Шифрин Б. М., Попова Д. А. Использование IDEF-моделей для анализа процессов контроля качества // Мехатроника, автоматика и робототехника. - 2023. - №11. - С. 165–168.
6. Богомолов Б. Б., Быков Е. Д., Меньшиков В. В., Зубарев А. М. Организационно-технологическое моделирование химико-технологических систем // Теоретические основы химической технологии. - 2017. - №2. - С. 221–229.
7. Долганова О. И., Виноградова Е. В., Лобанова А. М. Моделирование бизнес-процессов: учебник и практикум для вузов. – М.: Изд-во Юрайт, 2023. – 289 с
8. ТУ 3697-002-02066492-01 "Аппараты серии "АКВАКОН" ("AQUACON") с керамическими мембранными фильтрующими элементами // URL: <https://ecolog.ru/crc/77.01.06.369.%D0%A2.030775.10.01?ysclid=lwkmbh9n49542446867> (дата обращения: 24.05.2024).

УДК 004.925.84

Хайруллин Д.О., Лопатин А.Г.

Практическое применение теории о моменте инерции. Улучшение качества 3D печати

Хайруллин Дмитрий Олегович – студент 2 курса кафедры систем автоматического управления;
False_Dmitry213@mail.ru

ФГБОУ ВО «Тульский государственный университет»,
Россия, Тульская область, Тула, 300012, проспект Ленина, д. 92.

Лопатин Александр Геннадиевич – кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой автоматизации
производственных процессов;

ФГБОУ ВО «Новомосковский институт РХТУ им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Тульская область, Новомосковск, 301665, ул. Дружбы, д.8.

В статье рассматриваются различные способы улучшения качества 3D-печати. Один из способов – доработка механической части, посредством замены шкивов на менее инертные.

Ключевые слова: момент инерции, момент инерции диска, 3D-принтер, качество 3D-печати.

Practical application of the theory of the moment of inertia. Improvement the quality of 3d-printing

Khairullin D.O.¹, Lopatin A.G.²

¹ Tula State University, 92 Lenin Avenue, Tula, 300012, Tula Region, Russia

² D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Russia, Tula region, 301665, Novomoskovsk, Druzhby str., 8

The article discusses various ways to improve the quality of 3D printing. One of the ways is to refine the mechanical part by replacing the pulleys with less inert ones.

Key words: moment of inertia, the moment of inertia of the disk, 3D printer, quality of 3D-printing.

Введение

Метод послойного наплавления пластика (3D-печать) – технология аддитивного производства, широко используемая при создании трехмерных моделей. Основной принцип работы заключается в нарезке цифрового двойника на слои в специальных программах, которые возвращают файл особого разрешения – gcode. Этот файл принтер обрабатывает и получается изделие. 3D-печать имеет широкую популярность в прототипировании, создании макетов различных устройств, промышленном производстве (3D-печать порошковыми металлами).[1]

Способы улучшения качества 3D-печати

Хорошего качества изделий, изготавливаемых аддитивными технологиями, можно добиться двумя способами.

Первый способ заключается в постобработке изделий механически или различными химическими растворителями и кислотами.

Второй способ требует правильной настройки аппаратуры. Аппаратуру для изготовления (3D-принтер) можно разделить на две части – механическая и программная.

Программная часть 3D-принтера представляет собой плату контроллера, которая анализирует специальные файлы типа gcode. После анализа этого файла плата подает управляющие сигналы на шаговые двигатели, которые передают вращательное движение через шкивы и ремни столу или печатающей голове (в зависимости от устройства 3D-принтера).

Второй способ является более приоритетным. Ему не требуется дополнительных вложений, в виде различных обрабатывающих устройств, химикатов.

Необходимо грамотно отрегулировать механическую и программную части 3D-принтера и на выходе получать качественные изделия не затрачивая ресурсы и время на дополнительную обработку.[2]

Оба способа имеют свои преимущества и недостатки. Поэтому, чтобы добиться наивысшего качества изделий, следует комбинировать два данных способа. Качественно напечатанные изделия все равно могут иметь такие дефекты, как слоновья нога, ретракты. Они устраняются химической и механической обработкой. Таким образом, высшее качество печатных изделий достигается путем правильной настройки программной и механической части, а также постобработкой различными препаратами и устройствами.

Устройство механики 3D-принтера

Будем рассматривать устройство 3D принтера на примере Creality K1. Этот принтер позиционируется производителем как быстропечатающий, максимальная скорость перемещения печатающей головки составляет 600 мм/с. Принтер оснащен закрытой камерой для поддержания стабильной температуры при печати. На нем установлены специальные моторы с датчиками препятствий. Печать происходит посредством опускания стола после каждого напечатанного слоя.

Однако, несмотря на все преимущества этого устройства, первые печати на нем оказались неудовлетворительными, изделия имели волнистую структуру на стенках, отверстия получились не цилиндричными. Рассмотрим подробнее механическую часть 3D-принтера и постараемся выявить ее конструктивные особенности, которые могли бы повлиять на качество печати:



Рис.1 Устройство 3D принтера Creality K1

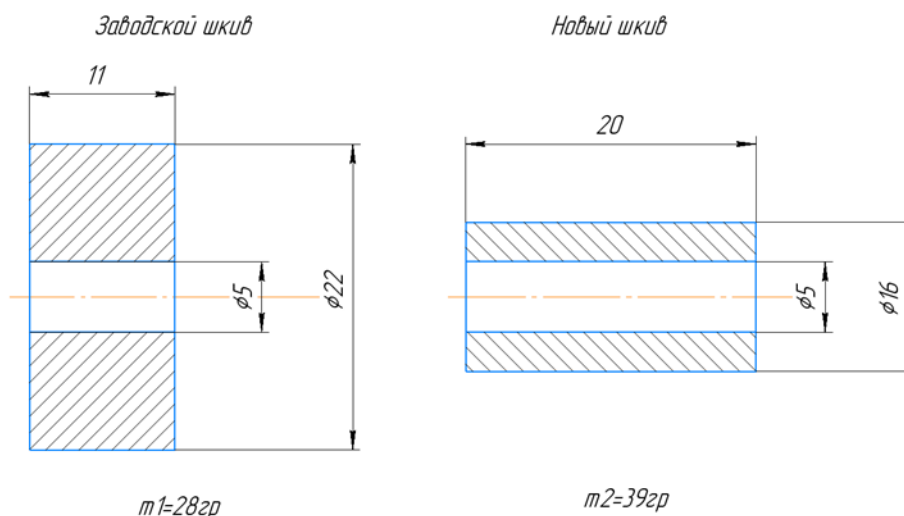


Рис.2 упрощенные чертежи старого и нового шкивов

Теорема о моменте инерции

Момент инерции тела относительно данной оси при непрерывном распределении массы в общем случае вычисляется через интеграл, т. е. мысленно разбиваем тело на дифференциально малые элементы, применяем для них формулу момента инерции как для материальной точки, а затем «непрерывно суммируем».[4]

$$J = \int r^2 dm \quad (1)$$

Физический смысл момента инерции сравним с массой. Чем больше масса, тем сложнее изменить траекторию движения тела. То же самое с моментом инерции, чем он больше, тем сложнее раскрутить или остановить вращающееся тело. Тогда, рассмотрим наши шкивы как идеальные однородные цилиндры и, согласно формуле (1), запишем известное уравнение для момента инерции диска:

$$J = \frac{1}{2} m R^2 \quad (2)$$

Из уравнения (2) видно, что момент инерции прямо пропорционален массе и квадрату радиуса. Рассчитаем момент инерции заводского шкива:

$$J_1 = \frac{1}{2} \cdot 0,028 \cdot 0,022^2 = 6,776 \cdot 10^{-6} \text{ кг} \cdot \text{м}^2$$

Момент инерций большой, заменим его новым шкивом с характеристиками, представленными на

Согласно рис.1: шаговые двигатели, которые расположены на задних алюминиевых стойках, по команде контроллера начинают вращать шкивы, которые приводят в движение систему ремней. Она связана непосредственно с печатающей головой, ремни перемещают голову в нужное место согласно файлу gcode.[3].

Уделим особое внимание шкивам, которые располагаются на валах шаговых двигателей. Шкивы имеют следующие характеристики:

рис.2. Согласно формуле (1), момент инерции должен получиться меньше:

$$J_2 = \frac{1}{2} \cdot 0,039 \cdot 0,016^2 = 5,053 \cdot 10^{-6} \text{ кг} \cdot \text{м}^2$$

Оценим, на сколько момент инерции стал меньше:

$$\left(1 - \frac{5,053 \cdot 10^{-6}}{6,776 \cdot 10^{-6}}\right) \cdot 100\% \approx 25\%$$

Новый шкив весит больше, чем заводской, но зато сделан из более качественного сплава алюминия. Момент инерции стал меньше, шкивы крутить стало проще, следовательно, ремни будут натягиваться быстрее, датчики печатающей головы будут быстрее определять местоположение экструдера. Это значит, что точность системы повысилась, печать должна стать более качественной.

Проверка теории на практике

Заменим шкивы на новые и убедимся в том, что это дало положительный эффект. Распечатаем внешнюю рамку гироскопа из черного пластика PETG (полиэтилентерефталат-гликоль) и сравним ее с рамкой, распечатанной на принтере со старыми шкивами. Печать будем проводить при тех же настройках, что и в прошлый раз:



Рис.3 Слева печать со старыми шкивами, справа с новыми

Из рис.3 видно, что результат стал значительно лучше, пропала волнистость, поверхность гладкая и ровная. Более того, старая рамка гироскопа печаталась пластиком PLA (полилактид, матовая поверхность), этот пластик менее “капризный”, чем PETG (глянцевая поверхность). Замена шкивов на менее инертные и более качественные дало

ощутимый результат даже с более сложным видом пластика, чем PLA.

Выводы

В данной статье рассмотрена теория о моменте инерции, аддитивных технологиях. Представлены различные методы улучшения качества 3D-печати. Проведен анализ механической системы 3D-принтера, выявлены недостатки этой системы. Предложено решение проблемы на основе знаний теории о моменте инерции.

Список литературы

1. ICTP—The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics 2013 ICTP Science Dissemination Unit, May 2013, First Edition, ISBN 92-95003-48-9
2. Creality CR-K1 [Электронный ресурс] -URL: https://3dtool.ru/product/3d_printer_creality_cr_k1_max/?yclid=10540934993772806143 (Дата обращения: 03.05.2024)
3. Моделирование методом послойного наплавления [Электронный ресурс] -URL: <https://mplast.by/encyklopedia/fdm-fff-posloynoe-naplavlenie> (Дата обращения: 05.05.2024)
4. Трофимова Т. И. Т761 Курс физики: учеб. пособие для вузов / Таисия Ивановна Трофимова. — 11-е изд., стер. — М.: Издательский центр «Академия», 2006. — 560 с. ISBN 5-7695-2629-7

Инжиниринг энергоресурсосберегающих химических технологий и инновационных материалов. Логистика ресурсосбережения, технологическая инноватика, стандартизация и сертификация в химической промышленности.

УДК 681.121

Харитонов А.О., Бусыгина Е.Б., Масленников И.М.

Оптимизация классификации сыпучих материалов методами математического планирования экспериментов

Харитонов Александр Олегович – д.т.н., профессор кафедры инженерного проектирования технологического оборудования, alharitonov@yandex.ru.

Бусыгина Елена Борисовна – к.т.н., доцент кафедры инженерного проектирования технологического оборудования, bus-elena3@yandex.ru.

Масленников Игорь Марселевич – старший преподаватель кафедры инженерного проектирования технологического оборудования, maslennikov.i.m@muctr.ru.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В данной работе предложена методика экспериментального определения рациональных параметров процесса классификации с использованием математического планирования экспериментов. Выполнен анализ полученного уравнения регрессии. Получена количественная оценка влияния на процесс классификации скорости частиц на входе и мощности работы гравитационных сил.

Ключевые слова: сыпучие материалы, математическое планирование экспериментов, регрессионный анализ.

Optimization classification of bulks by methods of mathematical planning experiments

Kharitonov A.O.,¹ Busygina E.B.,¹ Maslennikov I.M.¹

¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

In this work the technique of experimental determination of rational parameters process of classification with use mathematical planning of experiments is offered. The analysis of the received regression equation is made. Quantitative assessment of influence on process of classification speed of particles on an entrance and power work of gravitational forces is received.

Keywords: bulks, mathematical planning of experiments, regression analysis.

Введение

Значительное удорожание энергоресурсов, произошедшее за последнее время повысило актуальность задачи сокращения энергозатрат на осуществление производственных технологических процессов. Для классификации сыпучих материалов изыскание возможностей сокращения энергозатрат связано с определением рациональных параметров протекания процесса. Подверженность рассматриваемого процесса большому числу факторов, а также сложность установления строгой зависимости от них конечного результата производства, делают одним из немногих возможных путей решения поставленной задачи использование методов математического планирования экспериментов. В данной работе предложена методика экспериментального определения рациональных параметров процесса классификации.

Вне зависимости от конструктивного исполнения оборудования главными производственными показателями эффективности работы грохотов являются полнота деления потока материала и производительность. Эти показатели, одновременно находясь в сложной корреляционной связи между собой, зависят и от иных факторов, воздействующих на протекание процесса. Из всего множества таких факторов можно выделить чаще один, реже два фактора с помощью которых можно активно управлять данным технологическим процессом. Для оборудования с неподвижными рабочими элементами, такими факторами могут быть скорость частиц на входе в рабочее пространство и мощность работы, совершаемая гравитационными силами.

Первый из указанных факторов характеризует энергонасыщенность подводимого потока материала. Второй фактор, как и производительность, определяется объемом материала, проходящего через рабочее пространство машины в единицу времени. Таким образом, рассматриваемый технологический процесс можно оптимизировать по двум параметрам: полноте деления потока и производительности машины, изменением также двух факторов: скорости частиц материала на входе и мощности работы гравитационных сил.

Экспериментальная часть

Для проведения экспериментов в лабораторных условиях была сконструирована и изготовлена модель дугового грохота (рис.1) с использованием в качестве классифицируемого материала щебня. Был спланирован и поставлен эксперимент, целью которого являлось определение такого соотношения величин варьируемых факторов, при котором параметры, характеризующие рассматриваемый процесс, соответствовали бы его рациональному режиму. В объеме классифицируемого материала – отсевов дробления при производстве щебня содержалось в равных пропорциях мелкие и крупные фракции.

В качестве варьируемых факторов эксперимента были приняты скорость частиц на входе v и мощности N работы гравитационных сил, с соответствующими им косвенными показателями: расстоянием h отшибера бункера до просеивающей поверхности грохота и временем t протекания процесса. Время протекания процесса достигалось подбором

величины щели шибера бункера. Изменением косвенных показателей в ходе эксперимента обеспечивалось соответствие указанным уровням варьируемых факторов. Эксперимент был спланирован как полный факторный и для того, чтобы была возможность перехода к плану второго порядка, его дополнили четырьмя опытами в звездных точках. В таблице представлены уровни варьируемых факторов эксперимента (Таблица 1).

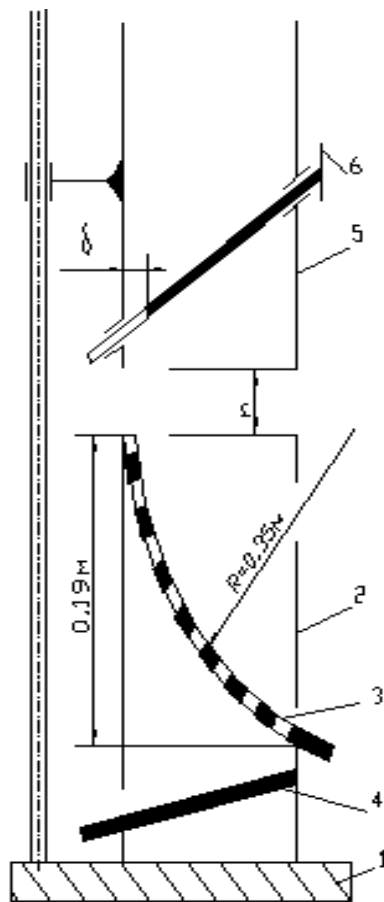


Рис.1. Схема лабораторной установки:
1 – штатив, 2 – корпус грохота, 3 – просеивающая поверхность, 4 – лоток подрешетного продукта, 5 – бункер; 6 – шибер.

Таблица 1. Уровни варьирования факторов

Факторы	V , м/с	h , 10^{-2} м/с	N , Вт	t , с
Код	X_1	-	x_2	-
Основной уровень (x_{i0})	1,29	8,16	0,192	28
Интервал варьирования (Δx_i)	0,17	-	0,192	-
Верхний уровень ($x_i = +1$)	1,46	10,46	0,255	23
Нижний уровень ($x_i = -1$)	1,12	6,15	0,129	39
Звездная точка $+\alpha$ ($x_i = +1,414$)	1,53	12,0	0,281	22
Звездная точка $-\alpha$ ($x_i = -1,414$)	1,04	5,5	0,102	48

Дисперсию эксперимента оценивали по результатам четырех опытов в центре плана. Таким образом, весь эксперимент включал в себя двенадцать опытов. В каждом из опытов определяли величины параметров процесса: эффективность классификации y_1 и производительности y_2 по соотношениям вида:

$$y_1 = \frac{V_n}{V_n}, \quad y_2 = \frac{V}{t},$$

где V_n и V_n – объемы подрешетного, надрешетного продукта и общий $V = V_n + V_n$ объем экспериментального материала, соответственно. Для каждого опыта рассчитывалось значение обобщенной функции желательности D по формуле [1]:

$$D = \sqrt{d_1 \cdot d_2}$$

где, d_1 и d_2 – функции желательности соответствующих параметров.

Введение в эксперимент обобщенной функции желательности D , вызвано необходимостью сведения к одному показателю двух параметров процесса. В результате функция оказывается единственным параметром оптимизации. В ходе эксперимента определялись значения параметров y_1 и y_2 , а также функции желательности D для каждого опыта. Полученные данные свидетельствуют о том, что в опытах с наибольшими и наименьшими значениями параметров обобщенная функция желательности принимает минимальные значения, что подтверждает правильность ее определения.

Теоретическая часть

По результатам эксперимента была построена квадратичная модель обобщенной функции желательности:

$$D = 0,848 - 0,0489x_1 - 0,0539x_2 - 0,0571x_1^2 - 0,230x_2^2 \quad (1)$$

Анализ полученного уравнения регрессии (1) позволяет сделать вывод о том, что влияние второго из варьируемых факторов (производительности) на величину обобщенной функции желательности, а следовательно и на сам процесс классификации, является решающим. Мощность работы гравитационных сил, как и производительность грохота, находятся в обратно пропорциональной зависимости от времени протекания процесса, а отрицательное значение весового коэффициента перед этим фактором не противоречит утверждению о том, что необоснованное повышение производительности приводит к снижению его эффективности.

Сочетание арифметических знаков в уравнении (1) свидетельствуют о том, что графическим отображением обобщенной функции желательности является эллиптический параболоид (рис.2) с глобальным максимумом вблизи центра эксперимента [2].

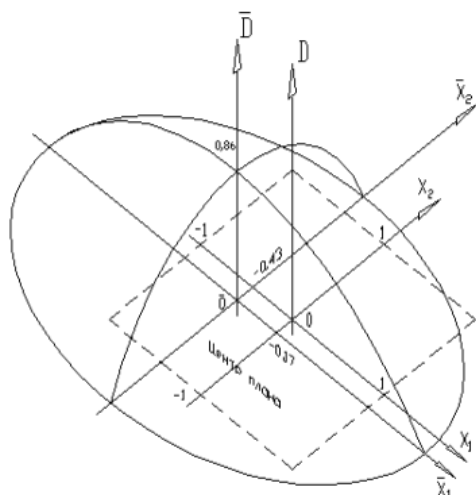


Рис. 2. Поверхность обобщенной функции желательности.

Заключение

Таким образом, предложенная методика определения рациональных параметров процесса классификации может быть использована в промышленных условиях. Проведению таких работ должна предшествовать экспертная оценка примерного процентного содержания в сырье фракций с размерами более и менее размера ячейки просеивающей поверхности грохота.

Список литературы

1. Новик Ф.С., Арсов Я.Б. Оптимизация процессов технологии металлов методами планирования экспериментов. – М.: Машиностроение; София: Техника, 1980. – 304 с.
2. Кудрявцев Л.Д. Математический анализ. – М.: Высшая школа. 1973. – 614 с.

УДК 66.06

Маслова В.В., Курбатов А.Ю.

Подбор оптимальных технологических решений процесса озонирования природных вод

Маслова Василиса Владимировна – студент кафедры логистики и экономической информатики, vasilisamaslova@mail.ru;

Курбатов Андрей Юрьевич – к.т.н., доцент кафедры промышленной экологии;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В ходе выполнения работы было проведено практическое исследование, направленное на выбор оптимального режима озонирования воды при различной степени диспергирования озono-воздушной смеси в схеме со стационарным и проточным режимами.

Ключевые слова: Озон, озono-воздушная смесь, ионы железа (II), гидродинамическая обработка, артезианская вода.

Selection of optimal technological solutions of the process of ozonization of natural waters

Maslova V.V.¹, Kurbatov A.Y.¹

¹D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

In the course of the work a practical study aimed at selecting the optimal mode of water ozonation at different degrees of dispersion of ozone-air mixture in the scheme with stationary and flowing modes has been carried out.

Keywords: Ozone, ozone-air mixture, iron (II) ions, hydrodynamic treatment, artesian water.

Введение

Невозможно представить жизнь живых организмов без воды. Она важной является частью не только человека, но и животных и других существ. Чистая вода уже давно стала неотъемлемым спутником нашей жизни, мы ежедневно пьем ее, употребляем в быту и производственных процессах. Однако мир вокруг нас постоянно меняется, население растет растут и нужды, а планета с каждым годом истощает свои запасы. Человечество сталкивается с глобальным водным кризисом. Около четверти населения нашей планеты не имеет доступа к безопасной питьевой воде и канализации. Плохое состояние водных ресурсов вызвало более 1,4 миллиона смертей по всему миру [1]. С развитием промышленности загрязнение водных ресурсов достигает новых высот, и природная вода все чаще становится непригодной для употребления. Все это говорит о необходимости развития существующих методов водоподготовки и поиска новых решений в этой сфере.

Теоретическая часть

Природные воды представляют собой сложную многокомпонентную динамическую систему, в состав которой входят различные вещества и микроорганизмы от растворенных солей до бактерий и гидробионтов. Так же в природных водных потоках во взвешенном состоянии находятся частицы песчаной, глинистой и известковой природы[2]. Некоторые из них оказывают положительное влияние на организм человека, когда другие должны быть удалены перед употреблением во избежание возникновения различных заболеваний. Предельно допустимые концентрации веществ, находящихся в питьевой и бытовой воде, регулируются стандартами СанПиН и ГОСТ.

Таблица 1 – Нормы ПДК некоторых ионов в питьевой воде по СанПиН 2.1.4.1074-01

Показатели	Единицы измерения	Нормативы, не более
Обобщенные показатели		
Водородный показатель	Единицы pH	6 – 9
Общая минерализация	мг/л	1000
Жесткость общая	мг*экв/л	7,0
Окисляемость перманганатная	мг/л	5,0
Нефтепродукты, суммарно	мг/л	0,1
Фенольный индекс	мг/л	0,25
Неорганические вещества		
Алюминий (Al ³⁺)	мг/л	0,5
Барий (Ba ²⁺)	мг/л	0,1
Бериллий (Be ²⁺)	мг/л	0,0002
Бор (В, суммарно)	мг/л	0,5
Железо (Fe, суммарно)	мг/л	0,3

Подземные воды меньше подвержены сезонным колебаниям, лучше защищены от риска загрязнения и заражения, более равномерно распространены по территории, в отличие от поверхностных вод. Подземные воды – это сложные системы, включающие большой спектр неорганических и органических веществ. От условий их формирования зависит концентрация минеральных солей в этих водах. Несмотря на то, что качество подземных вод лучше, чем поверхностных, они могут не соответствовать нормативным требованиям по содержанию отдельных элементов. Железо является важным элементом в организме человека и животных. Однако накопление его в организме может привести к серьезным последствиям: увеличение риска

инфарктов, ухудшение работы печени и репродуктивной системы. Согласно СанПиН 2.1.4.1074-01, содержание общего железа в питьевой воде должно быть не более 0,3 мг/л (таблица 1). Несмотря на это по данным Государственной геологической службы, примерно 50% подземных вод России содержат железо в концентрациях, во много раз превышающих ПДК. Применение таких вод для питьевых целей без предварительной очистки невозможно [3].

Загрязненные воды, содержащие значительные количества соединений железа, вредны не только для человека, но и для других живых организмов, а также для техники: железобактерии питаются железом, разъедая его, что приводит к снижению эффективности работы систем теплоснабжения и водоснабжения. Сами по себе эти бактерии для человека не представляют опасности, однако, продукты их жизнедеятельности канцерогенны. Проблема наличия в подземной воде растворенного железа в последнее время обостряется. Все это подтверждает важность дальнейшего развития и большего применения технологий удаления железа из подземных вод в нашей стране.

В основном методы водоподготовки делят на две большие группы: с применением реагентов и безреагентные методы. Самым распространённым представителем реагентных методов является хлорирование. Хлор и его производные, он не только осаждает ионы различных металлов, таких как железо и марганец, но и работает с бактериальными культурами. Несмотря на ряд достоинств реагентные методы теряют свою актуальность с развитием сферы водоподготовки ввиду дороговизны реактивов и побочных эффектов, нейтрализация которых требует дополнительных стадий очистки. Так, например, некоторые хлорсодержащие реактивы при взаимодействии с органическими соединениями, растворенными в воде, могут образовывать токсичные формы недопустимые для содержания в очищенной воде. В целом вопрос о токсичности хлорированной воды уже давно подвергается тщательному изучению, так как соединения хлора оказывают влияние не только на кожные покровы, но и на внутренние системы организма [4].

Озонирование как процесс водоподготовки стал получать распространение как раз после глобального осознания вредного воздействия хлорированной воды на человека. Озонирование позволяет эффективно очищать и обеззараживать воду, а также улучшать ее органолептические свойства, устраняя неприятные запахи, вкусы и цветность. Одним из достоинств озона является его неспособность к реакциям замещения, что отличает его от хлорирования, а также, зачастую, способствует увеличению содержания растворенного кислорода в воде, что частично возвращает воде ее первичные органолептические свойства. В случае необходимости устранения неприятных ароматов и цветности воды из загрязненных источников, озонирование приходит на помощь. Наблюдается

непосредственная связь между содержанием в воде ионов Fe и Mn. Процесс озонирования воды зависит от дозы озона, времени контакта с водой и скорости потока озонированной воздушной смеси.

Несмотря на описанные преимущества озона имеет существенные недостатки, на которые стоит обратить внимание. Например, для озонирования воды необходимо тщательно подобрать режим подачи озона, так как от величины площади поверхности контакта воды с пузырьком озона, количества проходящих пузырьков и скорости их всплытия зависит эффективность процесса. Давно известно, что чем меньше рабочая площадь поверхности, тем быстрее идут химические и физические процессы. В случае озонирования этот факт играет особую роль, в виду того, что газ токсичен и его содержание в воздухе не должно превышать ПДК в 0,1 мг/м³. Если пузырек озона будет слишком большим, количество остаточного газа, выделяющегося в атмосферу, будет быстро достигать избыточного значения и, возможно, наносить вред человеку. По этой же причине немаловажно правильно подобрать скорость процесса, чтобы пузырек газа не всплывал слишком быстро. От количества и размера пузырьков будет зависеть интенсивность и степень окисления, достигающаяся в процессе озонирования.

Практическая часть

Нами был проведен ряд экспериментов по определению оптимального расхода озон-воздушной смеси при установленных параметрах насоса в статическом режиме работы установки. Нашей задачей было подобрать оптимальный режим озонирования заданного объема 10 литров модельного раствора с начальной концентрацией ионов железа (II) 3 мг/л. Важно отметить, что насос и озонатор в данном случае работают в паре и параметры потока обрабатываемой воды мы принимаем постоянными, подбирая под них объемную подачу озона, чтобы при работе системы вне рамок лаборатории, при сохранении подобранных оптимальных режимов, использование озона как ресурса было наиболее оптимальным.

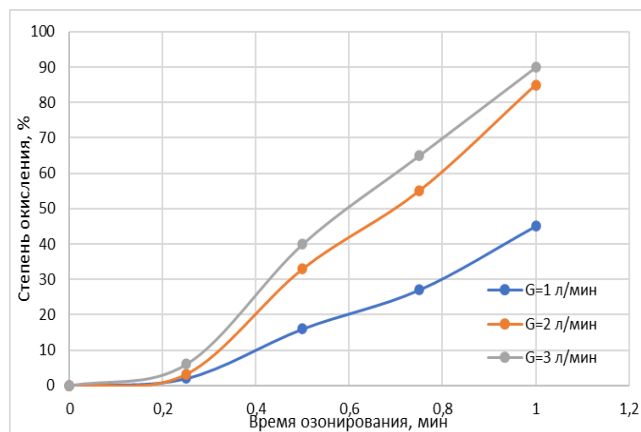


рис. 1 – Зависимость степени окисления ионов железа (II) в модельном растворе от времени озонирования эжектором.

На рисунке 2 видно, что наибольшая степень окисления равная 90% достигается при расходе озono-воздушной смеси равном 3 л/мин и времени озонирования 1 минута. При больших расходах подаваемого озона степень окисления не повышается, поэтому исследование этой области расхода озона в статье не приведено.

Оптимальное значение расхода озono-воздушной смеси для гидродинамического устройства (ГУ) равно 1 л/мин (рис.3). Можно отметить, что кинетическая кривая полученная при этом расходе показывает наилучший результат окисления ионов железа (II) равный 97% при времени озонирования 1 мин. Данный результат превосходит значения, полученные при работе с эжектором даже при его оптимальном расходе, большем чем у ГУ. Это показывает эффективность гидродинамической обработки как способа увеличения площади контакта озono-воздушной смеси при эжектировании в поток, в сравнении с другими используемыми способами. Однако при повышении расхода озono-воздушной смеси можно заметить резкое снижение эффективности. Выявленный гистерезис объясняется резким снижением эффекта диспергирования, вызванного гидродинамической обработкой, при увеличении объема подаваемой озono-воздушной смеси. Значения, полученные при расходах 2 и 3 л/мин, оказались меньше значений, полученных при тех же расходах при работе с эжектором.

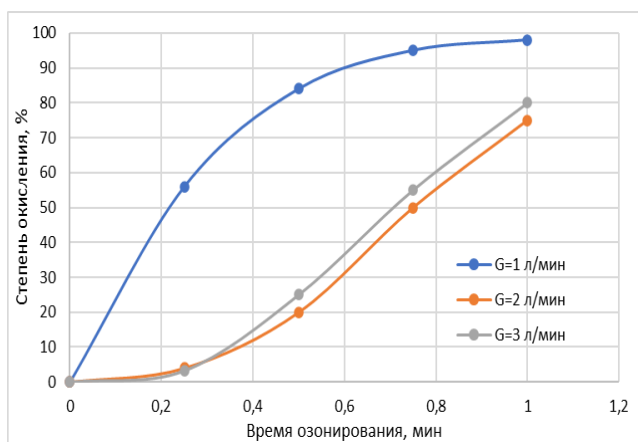


рис. 2 – Зависимость степени окисления ионов железа (II) в модельном растворе от времени озонирования для гидродинамического устройства.

Опираясь на полученные данные, была проведена серия экспериментов для динамического режима работы установки, с выбранными оптимальными расходами озono-воздушной смеси. Исходя из полученных графических зависимостей (рис.4), можно сделать вывод, что при использовании гидродинамического устройства достигается большая степень окисления в сравнении с использованием эжектора в качестве устройства диспергирования. При установлении в системе большего расхода озono-воздушной смеси необходимо учитывать нормы безопасности и дополнительно устанавливать фильтр в качестве деструктора остаточного озона, так как со снижением эффективности ГУ снижается и степень

растворенного в воде кислорода. Это ведет к дополнительным затратам при использовании системы. Поэтому наиболее оптимальным решением будет использовать гидродинамическое устройство в системе, работающей в динамическом режиме.

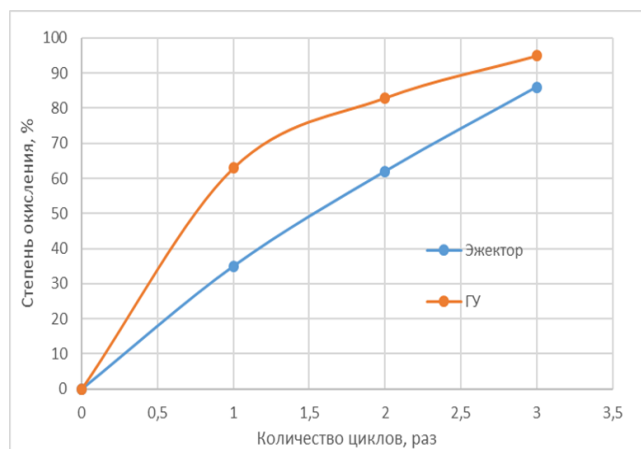


рис. 3 – Зависимость степени окисления ионов железа (II) в модельном растворе от времени озонирования для эжектора и ГУ

Заключение

Таким образом, применение озонирования как метода водоподготовки считается эффективным, только в случае грамотного подбора технологического решения вместе с оптимальными параметрами обработки. Важно получить оптимальное соотношение параметров подаваемой озono-воздушной смеси и параметров обрабатываемого потока жидкости. Гидродинамическое устройство, при правильно установленном режиме, показывает лучшие результаты в сравнении с более распространенным на данный момент эжектором. Эффект гидродинамической обработки позволяет достичь не только большей степени окисления ионов железа (II), но и уменьшить расход озono-воздушной смеси, что приводит к экономии ресурсов.

Список литературы

1. Национальная водная компания: [сайт] / 2023 – URL: <https://stancii-ochistki.ru/vodopodgotovka> (дата обращения: 07.04.2024).
2. Фрог Б. Н. Водоподготовка. Учеб. Для вузов / Б. Н. Фрог, А. Г. Первов. — Москва : АСВ, 2014. — 512 с.
3. «Проблема пресной воды. Глобальный контекст политики России». Ежегодник, институт международных исследований, 2013, Москва, под редакцией Ректора МГИМО Торкунова А.В., выпуск 1 (3) – 9с.
4. Кузубова Л.И., Кобрина В.Н. Химические методы подготовки воды (хлорирование, озонирование, фторирование): Аналит. обзор // СО РАН, ГННТБ, НИОХ. — Новосибирск, 1996. — 132 с.

УДК 006.86

Сереброва А.С., Чуднова Т.А., Желудкова Е.А., Аснис Н.А.

Нормативное обеспечение контроля качества конверсионных самозалечивающихся покрытий

Сереброва Анастасия Сергеевна – студентка 1 курса магистратуры кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; serebro-_a@mail.ru;

Чуднова Татьяна Анатольевна – к.т.н., доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; Желудкова Екатерина Александровна – к.т.н., ассистент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии;

Аснис Наум Аронович – к.т.н., ведущий научный сотрудник УНЦ химической и электрохимической обработки материалов (на правах отдела);

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрены российские и международные нормативные документы, содержащие сведения о методах контроля качества конверсионных защитных покрытий, изложены способы определения коррозионной стойкости покрытий. В работе указано на отсутствие стандартизации методов испытания конверсионных защитных покрытий на способность к самозалечиванию и подготовительных операций к испытаниям (нанесения на покрытия дефектов определённой геометрии), приведено описание установки для получения надрезов заданной глубины, ширины и угла наклона.

Ключевые слова: нормативные документы, методы испытаний, конверсионные защитные самозалечивающиеся покрытия, надрезы.

Regulatory support of quality control of conversion self-healing coatings

Serebrova A.S., Chudnova T.A., Zheludkova E.A., Asnis N.A.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses Russian and international regulatory documents containing information on quality control methods for conversion protective coatings, describes methods for determining the corrosion resistance of coatings. The paper indicates the lack of standardization of methods for testing conversion protective coatings for the ability to self-heal and preparatory operations for testing (applying defects of a certain geometry to coatings), a description of the installation for obtaining incisions of a given depth, width and angle of inclination is given.

Key words: regulatory documents, test methods, conversion protective self-healing coatings, incisions.

Введение

Разработка новых отечественных нормативных документов по получению конверсионных самозалечивающихся покрытий и оценке их качества является актуальной задачей, поскольку с развитием новых технологий повышается потребность в обеспечении эффективной защиты различных объектов от коррозии, увеличении гарантийных сроков эксплуатации покрытий, ужесточаются требования к их качеству. Новые нормативные документы помогут обеспечить высокое качество покрытий, их долговечность и безопасность для конечного потребителя, внедрить методы оценки их коррозионной стойкости и защитной способности. Эти факторы определяют долговечность и защиту изделий от разрушающего влияния внешних факторов, агрессивных и других сред. Нормативные документы могут установить стандартные методы тестирования и контроля качества, что позволит сравнивать различные продукты и выбирать наиболее подходящие для конкретных целей.

Таким образом, разработка новых отечественных нормативных документов по получению конверсионных покрытий и оценке их качества необходима для развития отрасли и улучшения условий конкуренции на рынке. Важно, чтобы данные

стандарты отражали последние достижения технологий и науки, а также соответствовали международным требованиям и стандартам.

Основная часть

Конверсионные покрытия на металлах могут выполнять различные функции, их наносят, прежде всего, в целях предотвращения коррозии металлов. Известно, что конверсионные покрытия обладают внутренними напряжениями и подвержены внешним воздействиям, которые нарушают их целостность и барьерные защитные свойства. Эти факторы могут привести к образованию дефектов покрытия на микроуровне, которые ухудшают защиту подложки от коррозии [1]. Некоторые конверсионные покрытия обладают свойством самозалечивания, т. е. восстановления покрытия после нанесения ему механических повреждений и, тем самым, сохранением защитных свойств покрытия. Общеизвестным классическим примером таких покрытий является хроматное покрытие на поверхности оцинкованной стали, которое способно ко вторичной пассивации. [2].

Система технического регулирования в России состоит из большого числа нормативных документов, в которых содержится противоречивая и устаревшая информация [3], существуют различные документы,

указывающие на способы контроля покрытий. Основным ГОСТом, согласно которому проводят испытания качества металлических и неметаллических неорганических покрытий, является ГОСТ 9.302-88 [4]. В данном документе содержатся общие требования к металлическим и неметаллическим покрытиям, наносимым на изделия из металла, а также требования к методам контроля качества этих покрытий. Для проверки защитной способности и коррозионной стойкости неорганических покрытий в ГОСТ 9.302-88 рекомендуется использовать методы капли и погружения.

Аналогичными способами рекомендуется контролировать защитную способность хроматных конверсионных покрытий в зарубежном стандарте SAE AMS 03-18A «Свойства хроматных конверсионных плёнок на алюминии и его сплавах» [5]. В документе SAE AMS 03-18A описаны характеристики и свойства хроматных конверсионных плёнок, используемых для обработки алюминиевых поверхностей и сплавов. Данный документ также устанавливает требования к качеству, обработке и контролю хроматных покрытий и к испытаниям данных покрытий на соответствие установленным параметрам. Известно, что хроматные конверсионные плёнки обладают способностью к самозалечиванию [1], однако в данном стандарте не содержится указаний на способ контроля этого свойства покрытий.

Другим зарубежным стандартом, описывающим процедуру оценки эффективности конверсионных покрытий для защиты цинка и кадмия от коррозии, является стандарт ASTM B940-05. Согласно данному документу защитная способность таких покрытий может определяться при помощи испытания солевым раствором (NaCl) методом погружения. В настоящее время этот стандарт применяется в различных отраслях промышленности, которые используют цинковые и кадмиевые покрытия.

Испытания защитных свойств покрытий на воздействие соляного тумана можно проводить в специальной камере, описанной в международном стандарте ASTM B117 [6]. В камере нейтрального соляного тумана исследуют воздействие на образец раствора соли, имитирующего условия окружающей среды. С помощью сжатого воздуха соляной раствор с pH в пределах 6,5–7,2, концентрация которого составляет 5 масс. % NaCl, распыляется внутри камеры с образцами в виде тумана или мелкой водяной пыли. Перед размещением в камере соляного тумана на покрытия испытываемых образцов наносят надрезы в соответствии с ГОСТ 9.401 [7].

Международным стандартом, который используют для определения способности самовосстановления лакокрасочных покрытий, является стандарт ISO 17872. В нём указан метод, который позволяет определить свойства самозалечивания. Суть метода состоит в том, что на изделие с лакокрасочным покрытием наносят надрезы или другие повреждения, после чего

выдерживают образец в условиях, которые имитируют условия его эксплуатации. По истечению определенного времени данный образец осматривается на предмет восстановления целостности покрытия. Наличие способности самовосстановления у покрытия определяется по степени восстановления покрытия и скорости этого процесса.

Самозалечивание механических повреждений лакокрасочных (полимерных) покрытий может происходить двумя способами: 1) за счёт взаимодействия молекул полимеров под воздействием внешних факторов: нагревание, УФ-излучение, растворитель, магнитное поле; 2) благодаря действию полимерных «заживляющих» веществ, встроенных в полимерную матрицу в капсулах до востребования [8]. Критерием наличия способности к самозалечиванию является полное исчезновение следов царапины с поверхности.

В настоящее время в российском и зарубежном законодательстве отсутствуют документы, согласно которым проводились бы испытания конверсионных покрытий на самозалечивание.

В работе [2] описан способ испытаний конверсионных церий-лантаносодержащих защитных покрытий на гальванически оцинкованной стали на самозалечивание погружением в раствор 0,003 М хлорида натрия (NaCl). Процесс осуществляли следующим образом: сначала на поверхность полированных образцов с покрытиями наносили царапины на специальной установке лазерным наконечником, а затем образец с нанесёнными рисками погружали в раствор NaCl и выдерживали сначала в течение 24 часов. Авторы [2] показали, что, если покрытие способно к процессу самовосстановления, уже через 24 часа царапины начнут зарастать новообразованием металла в небольших количествах. При выдержке в течение 72 часов и дальнейшем сравнении результатов определяли скорость процесса самовосстановления.

Механизм самозалечивания конверсионных неорганических покрытий состоит в способности ионов металлов, составляющих защитное покрытие и находящихся в высшей степени окисления ($\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ для хроматных или Ce^{4+} для церийсодержащих), мигрировать во влажной среде к царапинам или дефектам из областей вблизи них и восстанавливаться на участках микрокатодов с образованием нерастворимых соединений (трехвалентного хрома или церия соответственно), образуя новый защитный слой на поверхности дефекта (царапины) [1]. При этом восстановление защитного слоя до полного исчезновения дефекта очевидно возможно, если глубина дефекта не превышает толщину конверсионного самозалечивающегося слоя, который для разного вида покрытий составляет от 150 нм до 1000 нм. Если глубина дефекта больше толщины конверсионного покрытия, вероятно, процесс самозалечивания будет протекать таким образом, что оголённая (открытая) поверхность покроется тончайшим слоем вновь образовавшегося защитного

покрытия с сохранением геометрических размеров дефекта.

Таким образом, при разработке методик испытания на защитную и самозалечивающую способность конверсионных покрытий требуется указание на глубину нанесения дефектов (надрезов) при оценке конкретных видов покрытий.

С целью получения царапин определённой геометрии (глубина, ширина и угол наклона царапины) на кафедре инновационных материалов и защиты от коррозии разработана установка для их нанесения, описанная ниже.

Установка (рис. 1) состоит из алмазного индентора (угол атаки которого составляет 60°), рычага, предметного столика и стержня.

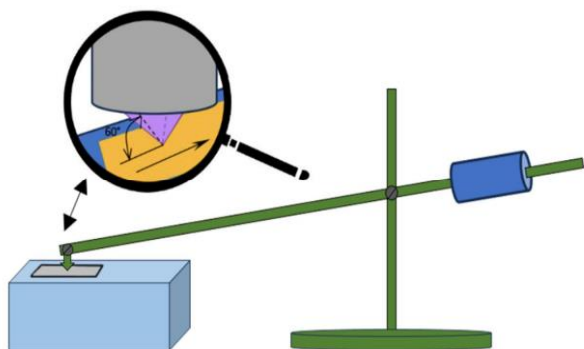


Рис.1. Схема установки для нанесения царапин.

Конструкция установки позволяет наносить надрезы постоянной ширины и глубины, регулировать угол между гранью алмазного индентора и поверхностью образца, а также силу давления индентора. Для нанесения надрезов на покрытие можно использовать резцы с режущей частью из стали с углом заточки 36° – 38° и шириной режущей кромки 0,5 мм, минимальное расстояние между соседними надрезами и от кромок образцов до надрезов должно составлять 25 мм. Для нанесения царапины образец равномерно перемещается вдоль оси рычага.

Для определения геометрии нанесённых царапин возможно использовать конфокальный микроскоп марки Lext – OSL 4100. Благодаря оптическим и лазерным конфокальным технологиям данный прибор можно применять в изучении топографии поверхности в различных областях, в том числе определять глубину, ширину и угол наклона царапин, наносимых на конверсионные покрытия перед испытанием на защитную и самозалечивающую способность.

Заключение

Самовосстанавливающиеся покрытия могут быть использованы в различных отраслях промышленности, начиная от авиации и автомобилестроения и заканчивая медицинским оборудованием и строительством, такие покрытия могут значительно сократить расходы на техническое обслуживание и ремонт оборудования, что позволит

предприятиям снизить издержки, а также повысить конкурентоспособность на рынке.

Разработка и внедрение методики определения самозалечивающей способности конверсионных покрытий позволит определить эффективность процесса самовосстановления конверсионных покрытий, даст оценку их надежности и долговечности.

Методика испытаний поможет определить оптимальные условия нанесения и эксплуатации покрытий, что повысит их эффективность и обеспечит длительный срок службы. Внедрение данной методики будет способствовать оптимизации процессов производства и повышению качества продукции.

Список литературы

1. Желудкова Е.А. Разработка процессов бесхроматной пассивации гальванически оцинкованной стали: специальность 2.6.9 «Технология электрохимических процессов и защита от коррозии»: диссертация на соискание степени канд. тех. наук/Желудкова Екатерина Александровна; РХТУ им. Д.И. Менделеева. – М., 2023, – 184 с.
2. Желудкова Е.А., Феденева Е.М., Абрашов А.А., Григорян Н.С., Аснис Н.А. Самозалечивание церий-лантансодержащих защитных покрытий на гальванически оцинкованной стали // Успехи в химии и химической технологии – Том 37, № 2. – 2023. – с. 41-42.
3. Проблемы технического регулирования в век информационных технологий / Сереброва А., Игонина И. // Роль технического регулирования и стандартизации в эпоху цифровой экономики: материалы V международной научно-практической конференции, Екатеринбург, 2 ноября 2023 г. – Екатеринбург: Уральский федеральный университет, 2024. – С.40–45.
4. ГОСТ 9.302-88 Единая система защиты от коррозии и старения. Покрытия металлические и неметаллические неорганические. Методы контроля. – М.: ИПК Издательство стандартов, 1988. – 40с.
5. SAE AMS0318A – Chromate Conversion Coatings, 2018.
6. ASTM B117-11 – Standard Practice for operating salt spray (fog) apparatus, 2011.
7. ГОСТ 9.401-2018. Единая система защиты от коррозии и старения. Покрытия лакокрасочные. Общие требования и методы ускоренных испытаний на стойкость к воздействию климатических факторов. – М.: Стандартинформ, 2019. – 122 с.
8. Феденева Е.М. Исследование самозалечивающей способности защитных церийсодержащих пленок на поверхности гальванического цинкового покрытия: направление: 18.03.01 «Химическая технология»: выпускная квалификационная работа/Феденева Татьяна Михайловна; РХТУ им. Д.И. Менделеева. – М., 2023, – 80 с.

УДК 006.1

Мухина А.А., Титов И.А., Невмятуллина Х.А., Графушин Р.В.

Разработка проекта национального стандарта на базе международного для полиграфии

Мухина Анна Александровна - бакалавр 4-го года обучения кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии.

Титов Иван Александрович - бакалавр 4-го года обучения кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии.

Невмятуллина Хадия Абдрахмановна - доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии. к.т.н.; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9; knevnm@mail.ru.

Графушин Роман Владимирович - старший преподаватель кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9; r-std@yandex.ru.

В статье рассмотрены вопросы приоритетных направлений развития национальной системы стандартизации. Описаны проблемы обеспечения полиграфической отрасли нормативной документацией. Рассмотрены этапы проведения гармонизации и основные трудности, которые возникают при переводе стандартов на русский язык. Представлен пример проведения гармонизации с международным стандартом на печатные краски.

Ключевые слова: стандартизация, гармонизация, проблемы перевода, полиграфия, печатные краски.

DEVELOPMENT OF A DRAFT NATIONAL STANDARD BASED ON THE INTERNATIONAL STANDARD FOR PRINTING INKS

Mukhina A.A., Titov I.A., Nevmyatullina Kh.A., Grafushin R.V.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses issues of priority areas for the development of the national standardization system. The problems of providing the printing industry with regulatory documentation are described. The stages of harmonization and the main difficulties that arise when translating standards into Russian are considered. An example of harmonization with the international standard for printing inks is presented.

Key words: standardization, harmonization, printing, printing inks.

Нормативная база и участники национальной стандартизации

Стандартизация - деятельность по разработке (ведению), утверждению, изменению (актуализации), отмене, опубликованию и применению документов по стандартизации и иная деятельность, направленная на достижение упорядоченности в отношении объектов стандартизации [1]. Определение термина стандартизация включает в себя два ключевых понятия - документ по стандартизации и объект стандартизации. Документ по стандартизации - документ, в котором для добровольного и многократного применения устанавливаются общие характеристики объекта стандартизации, а также правила и общие принципы в отношении объекта стандартизации [1]. Документы по стандартизации, применяемые на национальном уровне, установлены в ФЗ 162 «О стандартизации в Российской Федерации». К ним относятся: национальные стандарты; предварительные национальные стандарты; правила стандартизации; рекомендации по стандартизации; информационно-технические справочники. Разработка национальных стандартов относится к компетенции технических комитетов (ТК) по стандартизации - зарегистрированных в форме объединения юридических лиц для проведения работ по национальной стандартизации. Объект стандартизации - продукция, работы, услуги, процессы, системы менеджмента, терминология,

условные обозначения, исследования (испытания) и измерения (включая отбор образцов) и методы испытаний, маркировка, процедуры оценки соответствия и иные объекты [1].

В РФ зарегистрировано около 300 ТК по стандартизации. За каждым из них закреплена определенная область деятельности. Такое разделение по объектам необходимо для профессионального подхода к написанию стандарта. Поскольку каждая область деятельности по-своему уникальна, необходимо создавать технические комитеты, в которые будут входить специалисты по конкретному объекту стандартизации.

Деятельность ТК 195

Область производства лакокрасочных материалов (ЛКМ) находится в ведении ТК 195 «Материалы и покрытия лакокрасочные». Его деятельность направлена на развитие национальной лакокрасочной отрасли. Одной из основных задач ТК 195 является достижение и сохранение высокого уровня качества и конкурентоспособности отечественных ЛКМ. Также ТК 195 поддерживает производителей ЛКМ, предоставляя возможность решения некоторых отраслевых вопросов на уровне правительства и законодательства Российской Федерации (РФ) [2].

В настоящий момент за ТК 195 закреплены не только ЛКМ, но и печатные краски.

За период своего существования ТК 195 разработано около 200 стандартов различных видов:

- на продукцию;
- на методы контроля;
- на термины и определения.

ЛКМ делятся на основные (лаки, краски, эмали, грунтовки, шпатлевки); промежуточные (растворители, смолы, разбавители, олифы, сиккативы); прочие (смывки, пасты, мастики, отвердители и другие вспомогательные материалы). Все стандарты ТК 195 на продукцию можно разбить по видам ЛКМ:

- на основные ЛКМ (лаки, краски, эмали, грунтовки, шпатлевки);
- на промежуточные ЛКМ (растворители, разбавители, сиккативы).

Среди стандартов на продукцию, разработанных ТК 195, нет ни одного стандарта на печатные краски. Ранее данный объект стандартизации был закреплен за другим техническим комитетом - ТК 268 «Полиграфические технологии, материалы и оборудование». Но и среди стандартов этого ТК нет тех, которые относятся к печатным краскам.

Полиграфия

Печатные краски используются в полиграфии - производстве печатных видов продукции. Эта отрасль промышленности очень значима. Благодаря полиграфии налажено производство такой продукции

как: газетно-журнальные, книжные издания. Печатные краски используются не только для бумаги. Они могут переноситься и на другие материалы. К печатным видам продукции также относятся: упаковки для продуктов, пластиковые, металлические изделия, на которые необходимо нанести изображение или текст [3].

Продукция данной отрасли производства широко распространена в современном мире. Поэтому необходимо обеспечить ее высокое качество. Это можно достичь путем установления необходимых требований к материалам для производства данной продукции, и в первую очередь к печатным краскам. Для этого нужно разрабатывать национальные стандарты, которые будут распространяться на печатную краску.

Так как в национальной стандартизации не было практики разработки стандартов на печатную краску, можно провести гармонизацию и разработать национальный стандарт на базе международного. В международной организации ИСО функционирует отдельный комитет по графической технологии, в сферу деятельности которого входит разработка стандартов на печатную краску, которых в организации ИСО действует достаточно большое количество (рис. 1) [4].

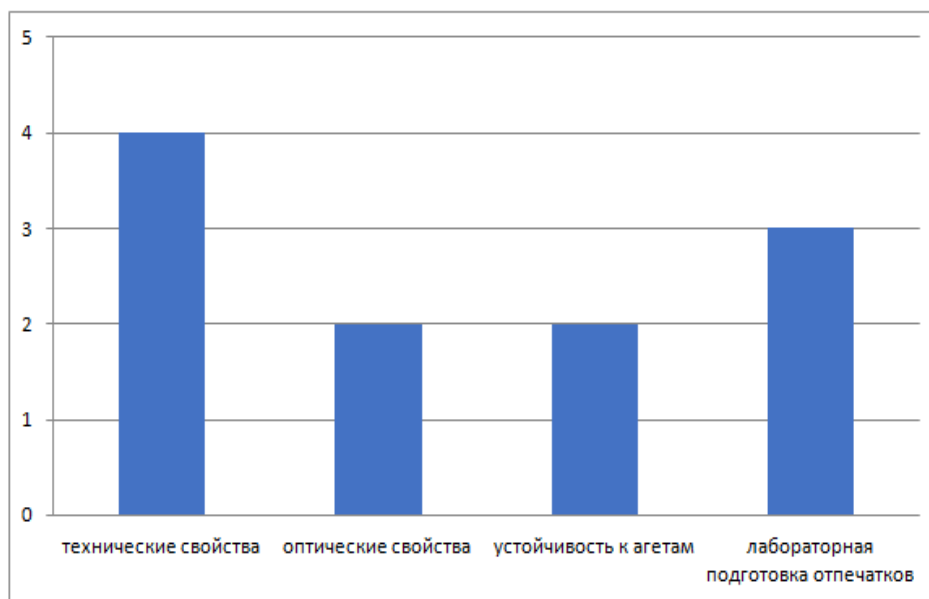


Рисунок 1. Количество стандартов ИСО на печатную краску.

Гармонизация национального стандарта с международным

При разработке национального стандарта на базе международного необходимо соблюдать правила, установленные в ГОСТ Р 1.7-2014 [5]. Исходя из требований данного стандарта для проведения гармонизации национального стандарта с международным необходимо:

1. перевести международный стандарт на русский язык;
2. выбрать степень соответствия национального стандарта международному.

Для разработки национального стандарта может быть использован как официальный перевод международного стандарта на русский язык, так и переводы, которые прошли экспертизу в ТК, за которым закреплен соответствующий объект стандартизации.

При переводе международного стандарта на русский язык могут возникнуть определенные трудности. Сложности возникают по таким причинам как: различия в терминологии (некоторые технические термины не имеют прямого перевода на русский язык, и для них приходится применять описательные конструкции); структурные различия

языков (перевод длинных предложений может быть осложнен структурными особенностями языков); специфика отраслевых понятий (стандарты могут содержать специфические термины и сокращения, не характерные для русского языка); многозначность слов (многие слова могут переводиться на русский язык по-разному в зависимости от контекста); понимание специализированных технологических процессов (для перевода некоторых слов и фраз необходимы глубокие знания специфики конкретных технологических процессов).

Для решения проблемы трудностей перевода необходимо проводить следующие мероприятия: обеспечение доступа к справочным материалам и консультациям экспертов; привлечение к работе по гармонизации переводчиков с опытом в соответствующей отрасли; проведение тщательных проверок переведенных стандартов для обеспечения максимального соответствия оригиналу.

Стандарт [5] устанавливает три степени соответствия национального стандарта международному: неэквивалентная, идентичная, модифицированная. Выбор степени соответствия зависит от необходимости учета потребностей национальной экономики и особенностей объекта стандартизации, характерных для Российской Федерации.

Проект национального стандарта на базе ISO 2834-1:2020

ISO 2834-1:2020 - это международный стандарт для полиграфии на лабораторную подготовку тестовых отпечатков пастообразных чернил. Он взят за основу для разработки проекта национального стандарта. Стандарт описывает методику подготовки отпечатков пастообразных чернил на бумаге, картоне и других материалах. В нем установлены требования к оборудованию и материалам, необходимым для проведения испытаний. В стандарте также описана процедура определения толщины красочной пленки и ее оптической плотности, которые являются основными физико-техническими и оптическими показателями печатных красок.

Стандарт содержит разделы: предисловие; введение; область применения; нормативные ссылки; термины и определения; оборудование (описание требований к аппаратуре для проведения испытаний и к печатным краскам); сущность метода; подготовка к испытаниям; процедура; оценка результатов; отчет; приложения.

Построение международного стандарта немного отличается от правил, установленных в ГОСТ 1.5-2001 [6]. Чтобы национальный стандарт соответствовал требованиям [6], необходимо выбрать для проведения гармонизации модифицированную степень соответствия.

Наименование, введение, область применения остаются неизменными. Нормативные ссылки на международные стандарты также переносятся в

соответствующий раздел проекта национального стандарта. Все документы раздела «нормативные ссылки» не приняты в качестве национальных. Поэтому необходимо проводить дальнейшие работы по их гармонизации. Раздел «термины и определения» необходимо переоформить с учетом требований [6]. Содержание раздела основные положения необходимо полностью сохранить. Раздел международного стандарта «сущность метода» не целесообразно устанавливать в качестве отдельного раздела в национальном стандарте, поскольку его содержание дублирует другие разделы. Международный стандарт содержит три приложения, положения которых сохраняются в национальном. Но эти разделы необходимо поменять местами, поскольку в международном стандарте они расположены не в порядке упоминания их в тексте.

Внедрение данного национального стандарта станет первым шагом на пути к установлению единых требований в полиграфии. Это позволит отечественной продукции данной отрасли производства стать конкурентоспособной на российском и международном рынке.

Список литературы

1. Федеральный закон от 29 июня 2015 года № 162-ФЗ О стандартизации в Российской Федерации.
2. Ассоциация производителей лакокрасочных материалов «Союзкраска». URL: <https://www.centrlack.ru/tk-195/struktura-tk.html?ysclid=lnlmnycip3199249314> (дата обращения: 14.05.2024).
3. Технологии полиграфии: учебное пособие для вузов / Н.М. Запекина. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Издательство Юрайт, 2024. – 178 с. URL: <https://urait.ru/book/tehnologii-poligrafii-541434> (дата обращения: 14.05.2024).
4. Стандарты полиграфии международной организации ИСО. URL: <https://www.iso.org/committee/52214/x/catalogue/p/1/u/0/w/0/d/0> (дата обращения: 14.05.2024).
5. ГОСТ Р 1.7-2014 Стандартизация в Российской Федерации. Стандарты национальные. Правила оформления и обозначения при разработке на основе применения международных стандартов. URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200116040?ysclid=luqppzpre2552246410> (дата обращения: 14.05.2024).
6. ГОСТ 1.5-2001 Межгосударственная система стандартизации. стандарты межгосударственные, правила и рекомендации по межгосударственной стандартизации. Общие требования к построению, изложению, оформлению, содержанию и обозначению. URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200029959?ysclid=1w401jqj21748676938> (дата обращения: 14.05.2024).

УДК 65.011

Шепелев Д.А., Комарова С.Г.

«Умное» производство в индустрии 4.0

Шепелев Даниил Аркадьевич – магистр 2 курса, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: shepelev-danya@mail.ru.

Комарова Светлана Григорьевна – к. т. н., доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрен переход от традиционного производства к интеллектуальному. Поднят вопрос о том, что Индустрия 4.0 была предложена для развития производства с целью реализации коротких жизненных циклов продукции. В статье определяются требования и ключевые проблемы, рассматриваются существующие исследования для «умного» производства.

Ключевые слова: Индустрия 4.0, интеллектуальное производство, умное производство.

«Smart» manufacturing in industry 4.0

Shepelev D.A., Komarova S. G.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the transition from traditional production to intellectual production. The question is raised that Industry 4.0 was proposed for the development of production in order to ensure product life cycles. The article discusses development requirements and main problems for additional research for smart manufacturing.

Keywords: Industry 4.0, intelligent manufacturing, smart manufacturing.

Введение

В современном мире информационные системы стали популярным инструментом для сокращения времени протекания процессов разработки и производства продукции. Производственный процесс должен быть гибким и способным быстро реагировать в режиме реального времени.

Кроме того, сокращенный жизненный цикл инноваций и технологий, а также спрос на нестандартные продукты требуют от производителей перестраивать свои технологические процессы и комбинировать производственные подразделения в своих линиях. Для этого производство должно быть функциональным, масштабируемым.

Однако традиционное производство не обладает достаточными возможностями мониторинга и контроля для эффективного производства. Оно не может справиться с проблемами, порождаемыми быстро развивающимися технологиями.

Для преодоления этих недостатков предлагаются передовые производственные схемы, такие как интеллектуальное производство. Оно представляет собой мультиагентную систему, включающую интеллектуальное оборудование, характеризующаяся автономностью, интегрированностью и обработкой большого объема данных. Интеллектуальное производство достигается с помощью сетевых технологий и производственных данных, позволяя взаимодействовать и координировать материалы, машины, продукты и людей через промышленную беспроводную сеть и облачные вычисления.

Переход от традиционного производства к интеллектуальному имеет глубокое и долгосрочное влияние на будущее производства во всем мире. Индустрия 4.0, предложенная правительством Германии в 2011 году, является стратегией производства, основанной на информационных

технологиях и технологиях искусственного интеллекта. Она объединяет в себе различные технологии, такие как киберфизические системы (CPS), интернет вещей (IoT), облачные вычисления, большие данные и машинное обучение, для создания интеллектуальной производственной сети, где машины и продукция взаимодействуют без контроля человека.

Умное производство

Умное производство может определяться различными научными кругами и практиками с разных точек зрения. Например, оно может быть описано как автоматизированная производственная система, которая получает всю информацию о производственных объектах в реальном времени через Интернет, автономно меняет свои условия работы и гибко адаптируется к изменениям. Также умное производство может объединять физические объекты, такие как машины и конвейеры, с информационными системами для гибкого и динамичного производства. Это интеллектуальная производственная система, которая использует коммуникационные и вычислительные процессы для улучшения услуг и удовлетворения рыночных потребностей. Умное производство может использовать непрерывный поток данных из связанных операций и производственных систем, адаптируясь к новым требованиям. Важно отметить, что умное производство может быть автономным и самонастраивающимся, где оборудование и логистические процессы автоматически обмениваются данными и управляют производством для обеспечения качества и устранения неполадок. Основная цель умного производства заключается в увеличении эффективности и улучшении производственных процессов за счет цифровой

вертикальной интеграции и использования интеллектуальных производственных процессов с минимальным воздействием на человеческий фактор.

Функции умного производства

Умное производство — это инженерная система, состоящая из трех аспектов: взаимосвязь, сотрудничество и выполнение. Архитектура умного производства включает физический ресурсный уровень, сетевой уровень, уровень приложений данных и терминальный уровень. Умное производство является самоадаптирующимся. Поэтому все элементы умного производства будут взаимосвязаны, они обмениваются информацией, распознают и оценивают ситуации, и органически соединяют физический мир с киберпространством. Иными словами, умное производство интегрирует физические и кибертехнологии, делая их более сложными и точными для улучшения производительности, качества, управляемости, управления и прозрачности производственных процессов. Машины и продукты в умном производстве общаются и договариваются друг с другом через IWN для перенастройки на гибкое производство различных типов продуктов и оптимизацию производства. Соответственно, умное производство может сделать производственные процессы гибкими, перенастраиваемыми и адаптивными, помогая производителям удовлетворять динамичные и быстро меняющиеся потребности клиентов и максимально повышать эффективность, поддерживая реальное время коммуникации между производством и рынком. Умное производство может расширить сферу взаимосвязей за пределы предприятия и укрепить отношения с поставщиками и клиентами. Более того, оно может обеспечить низкую стоимость, изменяемость, гибкость и компактность для повышения эффективности процессов, качества продукции, устойчивости и безопасности. Таким образом, умное производство может внедрить устойчивый режим производства для решения глобальных вызовов [1].

Умное производство имеет четыре интеллектуальные особенности. Во-первых, сенсоры, такие как оборудование или счетчики, могут самоорганизовываться, обучаться и поддерживать информацию об окружающей среде и о себе для анализа своих действий и возможностей. Они могут принимать решения для корректировки действий на основе изменений в окружающей среде.

Во-вторых, умное производство обладает совместимостью и управлением в реальном времени через Интернет. Благодаря взаимосвязи между устройствами можно улучшить координацию между ними, а протоколы конфигурации между производственными модулями могут стать более гибкими.

В-третьих, умное производство высокоинтегрировано с использованием систем компьютерного зрения и технологий искусственного

интеллекта (ИИ). Эксперты будут иметь лучший контроль над интеллектуальной производственной системой. ИИ позволяет предприятиям проводить анализ и принимать решения, что облегчает интеграцию ИИ и интеллектуальных способностей человека [2]. Теоретически, облачные многоуровневые системы роботов продвигают промышленные приложения, такие как умное производство, умная ферма и умная розничная торговля. Облачные робототехнические решения в умном производстве могут управлять всем процессом производства и цепочкой поставок, обеспечивая поддержку бизнес-процессов. Однако все еще существуют вопросы по поводу безопасности, здоровья и экологических норм. В то же время ресурсы являются неоднородными с точки зрения вычислительной мощности и энергопотребления. Поэтому проводятся исследования по распределению вычислительных ресурсов для минимизации задержки обслуживания, потребления ресурсов и затрат на выполнение в управлении рабочими процессами роботов в умном производстве.

В-четвертых, технологии виртуальной реальности (VR), как один из ключей к высокоуровневым умным производствам, способствуют интеграции человека и машины в умном производстве. Технология VR включает в себя компьютерные, сигнальные, анимационные технологии, интеллектуальные рассуждения, прогнозирование, моделирование и мультимедийные технологии для виртуализации производственных процессов и продуктов. С точки зрения сенсорного и визуального восприятия, это дает полностью реальное ощущение. Интеллектуальный интерфейс является отличительной чертой интеллектуального производства.

Проблемы внедрения умного производства

Умное производство ориентировано на человека, основано на стандартах и семантически развязано. Оно должно быть высокоадаптивным, переконфигурируемым, надежным и точно отслеживаемым на протяжении всей производственной цепочки и за её пределами. При внедрении умного производства следует учитывать модульность, совместимость, децентрализацию, виртуализацию, ориентацию на услуги и возможность работы в реальном времени. Проблемы, с которыми сталкиваются — это проблемы людей, проблемы затрат, технологические проблемы, структурные проблемы и проблемы безопасности при внедрении умного производства.

Во-первых, персонал завода обычно не имеет общего видения и понимания внедрения умного производства. Они чувствуют неопределенность относительно выгод от умного производства.

Во-вторых, умное производство содержит высокоавтоматизированные и зависящие от информационных технологий производственные системы. Оно должно вертикально интегрировать систему производства, индивидуальное производство и жизненный цикл продукта и горизонтально

интегрировать межкомпанийную ценовую цепочку и информационную сеть [2]. Поэтому для умного производства требуются некоторые ключевые элементы, включая модульные станки или рабочие места, многофункциональных работников, переконфигурируемые крепления и инструменты, стандартную инфраструктуру и коммуникации, настройку и возможность работы в реальном времени, онлайн-мониторинг и контроль. Эти элементы требуют огромных инвестиций. Поэтому стоимость внедрения умного производства высока.

В-третьих, нужно решить множество технических проблем, чтобы ускорить внедрение умного производства. В частности, для внедрения умного производства требуются сети высокой пропускной способности и связь. Противоречия между быстрым ростом интеллектуального оборудования и ограниченной пропускной способностью промышленных сетей становятся заметными в умном производстве [3]. Более того, в умном производстве генерируется большой объем данных в реальном времени и неструктурированных данных датчиков, журналов машин и данных о производственном процессе. Эти данные не могут быть использованы напрямую из-за высокой размерности, переменных метрик и большого уровня шума. Большое пространство хранения, эффективный сбор данных, быстрый анализ и высокоскоростные сети — это фундаментальные требования для контроля качества продукции и активного обслуживания в умном производстве. Умное производство должно интегрировать данные в цепочки поставок, данные о продукции и логистические данные в сервисную платформу. Улучшение эффективности умного производства с помощью анализа промышленных больших данных представляет собой довольно сложную задачу. Более того, традиционные производители, особенно малые и средние, лишены ресурсов для разработки программного обеспечения. Некоторые производители растут за счет приобретений, что приводит к смешанным и разнородным базам данных и программным системам.

В-четвертых, также существуют структурные проблемы. Умному производству необходимо добиться систематического повторного использования процессов и улучшить понимание сложных структур. Поэтому внедрение умного производства требует улучшения производства и маркетинга, повышения управляемости производственного процесса и сокращения ручного вмешательства на производстве. Традиционные рутины и рабочие процессы должны быть изменены в ходе цифровой трансформации. Требуется учитывать производственные характеристики для удовлетворения быстро изменяющихся потребностей рынка. Кроме того, необходимо учитывать также сложные навыки, сотрудничество в различных областях, текущее положение дел и требования производства. Кроме того, цепочку поставок нужно интегрировать с инженерным, маркетинговым и

продажным отделами. Краткосрочное планирование цепочки поставок в умном производстве сталкивается с временными структурами оборудования, различной скоростью обработки на параллельных машинах и динамическим появлением задач.

В-пятых, по сравнению с традиционными заводами, умное производство имеет более высокие риски безопасности. В связи с ограничениями архитектуры в умном производстве и уязвимостями основного оборудования, большое количество критически важных данных о безопасности и конфиденциальных данных подвержено атакам. Существует настоятельная необходимость улучшения безопасности и конфиденциальности в умном производстве.

Новые технологии умного производства

Быстрое развитие информационных технологий открыло возможности для умного производства. Существуют зрелые платформы промышленного интернета вещей, обслуживающие умное производство, такие как Siemens MindSphere, Schneider EcoStruxure и GE Predix. Эти платформы осуществляют вертикальную интеграцию, горизонтальную интеграцию и интеграцию от начала до конца, а также решают проблему изолированных информационных островов оборудования и обеспечивают интеграцию оборудования в умном производстве. Новые технологии, такие как ARSG, OLE для единой архитектуры управления процессом (OPC UA), программно-определяемые сети (SDN), коммуникация от устройства к устройству (D2D) и вычисления на краю, могут быть применены в умном производстве. ARSG становится все более популярным и был выделен как ключевая технология, поддерживающая операторов на производственном участке в умных заводах будущего. Взаимодействие на базе OPC UA может облегчить координацию между интеллектуальными агентами. Технология SDN на базе OpenFlow может предоставить более гибкое решение для конфигурации сети. Технология D2D делает коммуникацию между устройствами более эффективной и расширяет пропускную способность сети. Вычисления на краю обозначают открытую платформу со множеством функций, таких как сетевые возможности, вычисления, хранение и приложения. Она может обеспечить гибкое соединение, обработку в реальном времени, очистку данных и защиту конфиденциальности для умного производства.

Производственное оборудование может быть оснащено возможностями вычислений на краю, восприятия окружающей среды и координации между оборудованием. Таким образом, вычисления на краю могут оснастить терминальную систему способностью к принятию решений и автономией.

Другие новые технологии, такие как анализ больших данных, технологии симуляции и виртуальная реальность, также могут быть применены к операционной деятельности умных производств. Промышленность производства будет

продолжать двигаться вперед с развитием Индустрии 4.0. Согласно концепции управления без потерь, умное производство вдохновляет малые и средние предприятия на разработку или переделку завода с помощью симуляции и разработки решений в совместной среде.

Заключение

Эта статья вносит свой вклад в текущее научное сообщество, касающееся умного производства, выявляя требования и ключевые проблемы, исследуя доступные новые технологии, обзор существующих исследований, проведенных для умного производства, и предоставляя руководство для производителей по внедрению умного производства в контексте Индустрии 4.0.

Индустрия 4.0 использует новые, интегрированные и связанные технологии для решения вызовов. Она интегрирует поток данных горизонтально между партнерами, поставщиками и клиентами, а также организационные структуры вертикально от разработки до конечного продукта. Индустрия 4.0 облегчает умное производство через КИС путем создания виртуальной копии физического мира и принятия децентрализованных решений. Увеличивающаяся доступность и использование устройств и систем КИС могут радикально способствовать умному производству.

Умное производство не означает завод без человека. Вместо этого умное производство стремится максимально удовлетворить индивидуальные потребности рынка при разумных затратах. Следовательно, тенденция развития умного производства — это сотрудничество человека и машины. При этом гибкость человека и повторяемость машины могут быть успешно объединены. В таком сценарии человек по-прежнему контролирует принятие решений в ключевых аспектах.

Интернет является платформой для реализации технологии ИИ. Масштабные данные стали входными данными для ИИ. Поэтому все оборудование и инструменты будут интеллектуальными в будущем умном производстве. Каждое устройство будет иметь свой собственный центр обработки данных. Они смогут самостоятельно диагностировать себя и обладать возможностью прогнозирования. В

результате они смогут сотрудничать для интеллектуального управления и распределения оборудования без ручного вмешательства. Ни персонал, ни центральный пульт управления не требуются для этого метода. Поскольку у умного производства есть безопасная беспроводная сеть, персоналу не нужно вмешиваться в процесс производства в нормальных условиях. Хотя ручные операторы все еще необходимы для вмешательства в исключительных и чрезвычайных ситуациях. Система интеллектуального управления будет децентрализованной с распределением оборудования и инструментов рядом с контроллером для управления производственным процессом.

Большие данные будут широко использоваться в умном производстве. Технологии больших данных и ИИ изменят различные отрасли в следующем десятилетии. Умное производство должно вводить большое количество данных в машины, которые могут непрерывно учиться и оптимизировать параметры для себя. Таким образом, умное производство будет играть более значительную роль с увеличением возможностей машинного обучения и обработки больших данных.

Будущее умного производства будет интегрировать новые технологии, такие как виртуальная реальность, большие данные и искусственный интеллект. Поэтому внедрение умного производства будет сложным, потому что в него будут вовлечены не только традиционные области (механика, электроника, автоматизация), но и новые технологии (виртуальная реальность, большие данные и искусственный интеллект).

Список литературы

1. Aceto G., Persico V., Pescapé A. Industry 4.0 and health: Internet of things, big data, and cloud computing for Healthcare 4.0. // Journal of Industrial Information Integration. – 2020. - №18.
2. Afrin, M., Jin, J., Rahman, A., Tian, Y. C., & Kulkarni, A. Multi-objective resource allocation for edge cloud based robotic workflow in smart factory // Future Generation Computer Systems. – 2019. - №97.
3. Arnold, C., Kiel, D., & Voigt, K. I. Innovative business models for the industrial internet of things // BHM Berg-Und Hüttenmännische Monatshefte. – 2017. - №162.

УДК 681.128

Полякова Л.В., Моисеев Н.А., Монахов И.С., Руссо Д.Р.

Оценка влияния температуры на характеристики прототипа технического устройства с функцией измерения уровня жидкости

Полякова Л.В. – к.т.н., доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; polyakova1803@mail.ru.

Моисеев Николай Андреевич – магистрант 2-го года обучения;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Монахов Илья Сергеевич – магистрант 2-го года обучения

ФГБОУ ВО «МИРЭА - Российский технологический университет», Россия, Москва, 119454, Проспект Вернадского, дом 78.

Руссо Денис Романович – студент 6-года обучения

ФГБОУ ВО «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»,

Россия, Москва, 105005, улица 2-я Бауманская, дом 5, строение 1.

В статье рассматриваются принцип работы прототипа технического устройства с функцией измерения уровня жидкости и результаты проведения испытаний его работоспособности в температурном режиме от -20 °C до +70 °C.

Ключевые слова: уровнемер, принцип работы, температурные испытания, мера неопределенности

Assessment of the influence of temperature on the characteristics of a prototype technical device with a liquid level measurement function

Polyakova L.V.¹, Moiseev N.A.¹, Monakhov I.S.², Russo D.R.³

¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

² MIREA — Russian Technological University, Moscow, Russian Federation

³ Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

The article discusses the principle of operation of a prototype technical device with a liquid level measurement function and the results of testing its operability in a temperature range from -20 °C to +70 °C

Key words: level meter, operating principle, temperature tests, measure of uncertainty.

Введение

Важность автоматизации процесса измерения обусловлена не только необходимостью повышать эффективность производства продукции, но и стремлением к безаварийному режиму работы и обеспечением безопасности работников.

Создание прототипа технического устройства с функцией измерения уровня жидкости может способствовать удовлетворению возрастающей потребности заказчиков в области автоматизации процессов измерения и сбора информации о текущем уровне различных сред: жидких, сыпучих.

Однако перед тем, как так устройство может быть запущено в серийное производство, необходимо провести ряд испытаний, чтобы убедиться в его надёжности, безопасности и точности измерений. Тепловой режим электронных изделий - один из определяющих факторов их надёжности. Зачастую внезапные и параметрические отказы связаны с термическим разрушением или перегревом элементов, нарушением теплового режима модуля или ячейки [1]. Изменения температуры в большом диапазоне может оказывать сильное влияние на работу вторичного электронного устройства.

Описание принципа работы предлагаемого технического устройства с функцией измерения уровня жидкости

Уровнемер представляет собой систему, состоящую из первичного измерительного преобразователя-датчика и средства автоматизации, которое по совместительству является вторичным измерительным прибором. Предполагается, что такая система будет именоваться автоматический уровнемер (далее – АУ).

Принцип работы АУ основан на измерении уровня жидкости с помощью первичного преобразователя, который устанавливается в резервуар с жидкостью и генерирует электрический сигнал, пропорциональный уровню столба жидкости. Этот сигнал поступает на средство автоматизации, которое используется для обработки аналогового электрического сигнала в цифровой и последующее его измерение, хранение и передача с помощью средств телекоммуникации.

Существует широкая номенклатура средств контроля и измерения уровня. Преобразователи уровня могут быть основаны на измерении веса и гидростатического давления жидкости, на использовании электрических свойств жидкости (изменения сопротивления, емкости, индуктивности [2]). Эти средства позволяют контролировать уровень различных сред: жидких, сыпучих. При выборе уровнемера необходимо принимать во внимание рабочие условия в резервуаре или около него: давление, нагрев, охлаждение, способ заполнения или опорожнения (пневматический или механический),

наличие мешалки, огнеопасность, взрывоопасность и другие [3].

Вторичный измерительный прибор представляет собой электрическое устройство, которое осуществляет вывод данных на дисплей в виде значений физической величины уровнемера. Встроенный в АУ экран позволяет оператору контролировать уровень жидкости в скважине в режиме реального времени, либо же настроить АУ таким образом, чтобы измеренные значения уровня жидкости отправлялись с помощью средств телекоммуникации на удалённый сервер.

Рассмотрим подробнее процесс получения цифрового сигнала, который будет соответствовать измеряемой физической величине уровнемера. Аналого-цифровой преобразователь (АЦП) принимает электрические сигналы от измерительного шунта, представленного прецизионным резистором, и преобразует их в цифровой код, который обрабатывается на микроконтроллере. Для того, чтобы рассчитать физическую величину уровнемера первоначально необходимо значение квантованные отсчеты аналогового сигнала, измеренного АЦП, преобразовать в соответствующее значение постоянного тока (I_y) в соответствии с формулой (1):

$$I_y = \frac{U_{\text{АЦП}} \times Q}{1000 \times R} \quad (1)$$

где, $U_{\text{АЦП}}$ – квантованный отсчет аналогового сигнала, измеренный АЦП,

Q – шаг квантования АЦП, В,

R – номинальное сопротивление установленного резистора, Ом.

Значение физической величины уровнемера (H), измеряемое в метрах водного столба, получается посредством расчёта на микроконтроллере следующей формулы (2):

$$H = \text{ВПИ} \times \frac{I_y - 0,004 \text{ мА}}{0,020 \text{ мА} - 0,004 \text{ мА}} \quad (2)$$

где, ВПИ – верхний предел измерений уровнемера, м.вод.ст.

Ключевое значение в формуле (2) имеет цифровой сигнал с АЦП уровнемера. Именно благодаря линеаризации, которой подвергается первичный преобразователь-датчик, возможно прямо пропорциональное преобразование унифицированного выходного сигнала постоянного тока (4 мА – 20 мА) в значение физической величины, которая соответствует диапазону измерений уровнемера и может масштабироваться в зависимости от его верхнего предела измерений.

Проведение испытания и обработка результатов

Испытания проводились на базе опытного производственного цеха компании ООО «Программера». Помещение цеха оборудовано зоной для проведения испытаний таким образом, чтобы обеспечить соблюдение норм и правил безопасности, удобство доступа, и совместимость с производственными процессами в цеху, не мешая их выполнению.

В качестве средств испытания использовались следующие устройства: калибратор токовой петли;

термошоковая камера; линейный источник напряжения; бесконтактный температурный датчик.

Подготовка к испытанию началось с визуального осмотра прототипа технического устройства на наличие дефектов. В качестве исследуемой характеристики выбрано значение физической величины, т.е. высоты уровня жидкости в резервуаре.

В зоне проведения испытаний не предусмотрена установка резервуара высотой более 1 м, поэтому для достижения реальных рабочих условий к АУ вместо первичного преобразователя подключается калибратор токовой петли, предназначенный для задания унифицированных сигналов тока в диапазоне от 4 мА до 20 мА.

Непрерывное питание АУ осуществляется посредством подключения к нему линейного источника напряжения. Это исключает риски отключения технического устройства во время проведения испытаний.

Метод испытания посредством постепенного изменения температуры был выбран в соответствии с межгосударственным стандартом ГОСТ 30630.2.1-2023 Методы испытаний на стойкость к климатическим внешним воздействующим факторам машин, приборов и других технических изделий. Испытания на устойчивость к воздействию температуры. Согласно стандарту [4] прототип АУ поместили в камеру, после чего значение температуры в камере понизили до нижнего рабочего значения температуры при эксплуатации и выдержали при установившейся в камере температуре в течение одного часа, далее значение температуры в камере повысили до верхнего рабочего значения температуры при эксплуатации и также выдержали при установившейся в камере температуре в течение одного часа. Скорость охлаждения и нагрева камеры составляла 5 °С/мин. После окончания второго цикла поддержание температуры в камере выключили и после её остывания прототип АУ выдержан в нормальных климатических условиях испытаний в течение одного часа. Во время проведения испытания вторичный измерительный прибор производил запись показаний на внешний накопитель флэш-памяти, данные графически представлены на рисунке 1.

Оценку результатов после испытаний проводят на основе значений параметров до, в процессе и после выдержки. Во время нагревания термошоковой камеры до максимально рабочей температуры показания уровня жидкости начали отклоняться от заданного значения калибратором токовой петли равного 10,000 м. Как только установилась максимальная рабочая температура +70 °С было зафиксировано максимальное отклонение, которое составило 0,026 м. В свою очередь, при минимальной рабочей температуре отклонение составило 0,008 м. Такое отклонение от действительного значения может быть вызвано температурным коэффициентом сопротивления установленного измерительного шунта. При нагревании сопротивление увеличивалось вследствие чего показания уровня жидкости уменьшались в соответствии с формулой (2).



Рис.1. График влияния температуры на изменение уровня столба жидкости

На графике можно наблюдать три установившихся плато, которые отображают выдержку прототипа АУ при минимальной и максимальной рабочих температур, а также при нормальных условиях соответственно. На каждом плато есть незначительные колебания значений уровня жидкости. Было предположено, что они вызваны воздействием внешней среды на прототип устройства.

Для оценки качества проведенных измерений необходимо опираться на вероятностные характеристики, которые базируются на наблюдаемой рассеянности результата измерения. Мерой рассеянности случайной величины могут являться дисперсия и стандартное отклонение. Оценки этих параметров, характеризующие сомнение относительно достоверности результата измерения, называются неопределённостью измерения [5].

Для неопределенности по типу «А» используются многократные показания уровнемера. Его среднее арифметическое принимается за результат измерения согласно нормальному закону распределения случайных погрешностей. Мера неопределенности u_A , обусловлена рассеянием результата измерения и её рассчитывают по формуле (3) среднего квадратического отклонения среднего арифметического, приведенной ниже.

$$u_A(x_i) = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (3)$$

где $\bar{x}$ – среднее арифметическое значение отдельных показаний средства измерения,

x_i – показание средства измерения,

n – общее количество измерений.

Общее количество измерений $n = 220$. Используя данные, полученные в результате проведения испытаний, было рассчитано среднее арифметическое значение отдельных показаний по формуле (3) равное 9,991 м и был произведен расчет неопределенности измерений $u_A = 0,001$ м.

Отдельно стоит сказать, что в результате проведения температурного испытания визуальный

осмотр не выявил внешних дефектов и показал, что материал для корпуса прототипа АУ подобран верно.

Заключение

В результате проведенной работы был исследован принцип работы прототипа технического устройства с функцией измерения уровня жидкости и описан метод проведения температурных испытаний в термошоковой камере.

Оценка качества полученных в результате испытаний измерений выявила, что отклонение измеряемой физической величины составляет не более 0,17% от общего диапазона измерений. Вследствие чего можно заявить, что прототип технического устройства исправно работает в температурном диапазоне от -20 °C до +70 °C.

Выполнено при финансовой поддержке ООО «Программера»

Список литературы

- Семенцов С.Г., Гриднев В.Н., Сергеева Н.А. Исследование влияния температурных режимов на надежность электронной аппаратуры тепловизионными методами // Труды международного симпозиума "Надежность и качество". – 2016. – Т. 2. – С. 6-10.
- Шальгин М.Г., Вавилин Я.А. Автоматизация измерений, контроля и испытаний. – СПб.: Лань, 2024. – 172 с.
- Шаньгин Е.С., Мукаев Р.Ю., Пугин М.А. Уровнемер жидких сред с коррекцией температурной погрешности / // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. – 2010. – Т. 14, № 2(37). – С. 151-156.
- ГОСТ 30630.2.1-2013 Методы испытаний на стойкость к климатическим внешним воздействующим факторам машин, приборов и других технических изделий. Испытания на устойчивость к воздействию температуры (Издание с Поправкой). – М.: Стандартинформ, 2020. – 32 с.
- Полякова Л.В., Графушин Р.В., Моисеев Н.А., Федорова К.И., Рязанская Ю.М. Концепция неопределенности измерений // Мир измерений. – 2023. – № 2. – С. 46-50.

УДК 006.91

Комарова С.Г., Рязанская Ю.М., Филатова В.С.

Особенности метрологического обеспечения в области использования атомной энергии

Комарова Светлана Григорьевна – к.т.н., доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; komarova.s.g@muctr.ru;

Рязанская Ю.М. – магистрант;

Филатова В.С. – магистрант.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассматриваются особенности метрологического обеспечения в области использования атомной энергии для обеспечения экологической, здравоохранительной и техногенной безопасности, включая постоянный мониторинг работоспособности приборов, контроль реактивов и мероприятий по обеспечению безопасности на объектах использования атомной энергии.

Ключевые слова: метрологическое обеспечение, безопасность, атомная энергия.

Features of metrological support in the field of atomic energy use

Komarova S.G., Ryazanskaya Y.M., Philatova V.S.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the features of metrological support in the field of the use of atomic energy to ensure environmental, health and man-made safety, including constant monitoring of the operability of devices, control of reagents and measures to ensure safety at nuclear energy facilities..

Key words: metrological support, safety, nuclear energy.

Введение

Метрологическое обеспечение осуществляется на всех этапах жизненного цикла. Цель - получить достоверную измерительную информации о состоянии контролируемых объектов и процессов при условии соблюдения обязательных метрологических требований и норм. Это позволит исключить или свести к минимуму риски для принятия ошибочных решений при размещении, проектировании, разработке процедур и конструировании, изготовлению, монтажу и наладке систем оборудования, сооружений и управлении, эксплуатации, модернизации, ремонте систем и оборудования,

Для корректной работы метрологической службы необходима прочная документационная основа, это становится особенно актуальным для отрасли, которая связана с большим количеством рисков.

На безопасность влияет качество измерений, поэтому нужно уделять особое внимание метрологическому обеспечению.

Метрологическое обеспечение на объектах использования атомной энергии

В условиях тотальной глобализации метрология обеспечивает как доступность рынка, так и его безопасность. Общей чертой современной применения метрологии является законодательный, контролирующий, аспект. Естественным гарантом условий формирования доверия к результатам измерений является правительство. Насущная необходимость выработки единых подходов в области метрологии обуславливает соответствующее принятие правительством различных решений. Эти решения лежат как в области разработки соответствующей документации, на основе

имеющегося международного опыта, так и в поддержке на самом высоком уровне проведения научных исследований, направленных на развитие метрологии.

В Российской Федерации основным законом в области метрологии является Федеральный закон № 102-ФЗ «Об обеспечении единства измерений». К целям закона № 102-ФЗ в первую очередь необходимо отнести установление правовых основ метрологии изменений в РФ. Закон регулирует отношения, которые неизбежно возникают при выполнении измерений, устанавливает требования, собственно, к измерениям, к единицам измерений, к средствам измерений, к методикам измерений и т.д. В некоторых случаях государственное регулирование не является необходимым. Например, на этапе новых открытий в любой области науки. Однако существует целый ряд видов деятельности, где такое регулирование объективно необходимо. Прежде всего, регулирование касается области здравоохранения, охраны окружающей среды, контроля за соблюдением норм Законов РФ в области промышленной безопасности и области торговли.

Во главе структуры государственного управления метрологией стоит Правительство РФ. Правительство осуществляет общее руководство государственной системой измерений посредством Министерства промышленности и торговли, а также Агентства по техническому регулированию и метрологии, Ростехрегулирование. Поскольку именно Министерство промышленности и торговли отвечает за обсуждаемую область, абсолютно все остальные Министерства, федеральные службы, агентства, метрологические службы подчиняются Минпромторгу.

К отраслям, для которых безусловно важное значение имеет не только внутри государственное право, но и международное, относят атомную промышленность. В 1957 году было создано Международное агентство по атомной энергии (МАГАТЭ) в связи с возникшими не только теоретическими, но и практическими подтверждениями чрезвычайной опасности применения большинства ядерных технологий.

МАГАТЭ было учреждено в Организации Объединенных Наций (ООН) как международная организация, реализующая концепцию мирного атома. Это Агентство наделено серьезными полномочиями, и оно имеет возможность и право сотрудничать со своими государствами-членами ООН и многочисленными партнерами во всем мире для содействия развитию безопасных, надежных и мирных ядерных технологий. В области измерений учет требований МАГАТЭ также обязателен, как и во всем, связанным с атомной отраслью.

Атомная энергия является одним из наиболее важных и перспективных источников энергии, который не только способен обеспечить потребности человечества в электроэнергии, но и снизить зависимость от углеводородных ископаемых, что приводит к сокращению выбросов парниковых газов и защите окружающей среды.

Персонал, отвечающий за метрологическое обеспечение в области атомной энергетики, должен иметь высокую квалификацию и опыт работы в этой отрасли. Они должны быть обучены методам работы со специализированным оборудованием и интерпретации результатов измерений. Персонал также должен быть знаком с нормативными требованиями и стандартами, применяемыми в атомной энергетике.

Метрология играет важную роль в защите работников атомной промышленности, населения и окружающей среды от вредного воздействия радиации. Точные измерения доз облучения позволяют контролировать уровни радиации и обеспечивать безопасность персонала и населения. Метрологические инструменты используются для измерения уровней радиации на рабочих местах, в окружающей среде и в ядерных материалах.

Метрология предоставляет надежные методы для учета и контроля ядерных материалов, предотвращая их несанкционированное использование и распространение. Точные измерения количества и состава ядерных материалов необходимы для соблюдения международных соглашений о нераспространении. Метрологические инструменты используются для измерения массы, обогащения и изотопного состава ядерных материалов.

В силу требований к безопасности производства в атомной промышленности, доля автоматизированного производства весьма велика, а кроме того, есть необходимость в использовании довольно сложных измерительных устройств, контрольных установок, а значит и контрольных образцов. Требования безопасности эксплуатации

АЭС создают высокие планки к качеству измерительной информации. Естественно, эти требования относятся и к инструментам метрологического обеспечения.

Ядерные процессы и системы характеризуются высокой сложностью и чувствительностью к изменениям параметров. Метрологическое обеспечение должно гарантировать измерения с исключительной точностью и достоверностью, чтобы обеспечить безопасную работу атомных объектов. Точные измерения критических параметров, таких как температура, давление и уровни радиации, позволяют операторам своевременно выявлять отклонения от нормальной работы и принимать соответствующие меры безопасности.

Метрологические инструменты используются для постоянного мониторинга и контроля критических параметров реакторов и других ядерных установок. Эти параметры включают температуру, давление, поток теплоносителя, уровни радиации и состав ядерного топлива. Точные измерения этих параметров обеспечивают безопасную и эффективную работу ядерных объектов, предотвращая аварийные ситуации и обеспечивая защиту персонала и окружающей среды.

Главной сложностью в области метрологии, связанной с атомной энергетикой, является невозможность обслуживать средства измерения непосредственно человеком. Следовательно, нужны такие средства измерений и метрологического сопровождения, которые обеспечивают удаленный контроль, что существенно усложняет аппаратную и информационно-технологическую часть измерительных комплексов и требует создания сложных методик поверки средств измерений.

В области атомной энергетики используются специализированные средства измерений, разработанные для работы в суровых условиях радиационного воздействия и высоких температур. Эти средства включают детекторы радиации, термометры, манометры и расходомеры. Они проходят строгую проверку и калибровку, чтобы обеспечить их надежность и точность в условиях эксплуатации атомных объектов.

Аттестация методик требует жесткого подхода к оцениванию погрешностей. Если нет возможности точной оценки влияния какого-то фактора, принимают верхнюю границу оценки для уровня значимости не более 5 %. Алгоритм оценки метрологических характеристик в основном используют расчетно-экспериментальный или экспериментальный способы оценки погрешностей. Экспериментальные методы используют только тогда, когда есть возможность получения большого количества независимых результатов измерений. А так же при этом существует уверенность в их случайном характере.

Одной из основных проблем при разработке стандартных образцов является стабильность по свойствам и структуре материала образца. Для решения этой проблемы используется

закономерность изменения какого-то свойства материала со временем. Кроме стандартных образцов в атомной отрасли используются аттестованные объекты. Третьим важным «родственником» стандартного образца, специфичным для атомной отрасли, являются имитаторы. В частности, имитаторы коэффициента поглощения γ -излучения сходного с коэффициентом поглощения диоксида урана.

Следует отметить, что в случае аттестации методик и лабораторий, работающих в рамках атомной отрасли, поверку и оценку состояния измерений в лабораториях предприятий проводят в организациях подведомственных Госкорпорации «Росатом», то есть нельзя проводить такие мероприятия в сторонних организациях.

Как уже была отмечено выше, в силу особой радиоактивной опасности производств, связанных с производством и использованием атомной энергии, разработан серьезный свод норм и правил в этой области. Этот свод должен постоянно дорабатываться в соответствии с новыми научными данными и новыми направлениями использования атомной энергетики.

В общих положениях обеспечения безопасности объектов ядерного топливного цикла установлены общие принципы безопасности (цель, критерии и общие требования к ядерной и радиационной безопасности). Очевидной целью является защита работников, населения, окружающей среды от потенциального радиационного воздействия. Поскольку существует естественный радиационный фон, который не является опасным для человека и окружающей среды, экспериментальным путем установлены определенные пределы уровня облучения, которые являются безопасными. Эти пределы определяют допустимые уровни облучения, что в свою очередь, позволяют описать нормативы выделения радиоактивных веществ. Для обеспечения безопасности объектов ядерного топливного цикла рекомендуется использование подходов глубокоэшелонированной защиты. Другими словами, должны использоваться системы физических барьеров на возможном пути распространения опасного излучения, а также технические и организационные меры, обеспечивающие защиту физических барьеров. К защите следует отнести и меры по сохранению и отслеживанию эффективности работы таких барьеров. К таким мерам относят и разработку систем обеспечения качества. Наиболее важным документом в этой области является «Требования к программам обеспечения качества для объектов использования атомной энергии» (НП-090-11), утвержденный приказом Федеральной службы по экологическому, технологическому и атомному надзору от 20 мая 2014 г. № 216 (приказ зарегистрирован Минюстом России 14 июля 2014 г. № 33086, вступил в силу с 15 декабря 2014 г.) [11]. В этом документе приводятся требования к структуре, содержанию и порядку разработки программ обеспечения качества (ПОК) для объектов

использования атомной энергии. Все программы обеспечения качества подразделяют на общие и частные. Общие регламентируют все выполняемые работы в целом на всех этапах жизненного цикла объектов использования атомной энергии, а частные, соответственно, предназначаются для отдельных этапов жизненного цикла таких объектов. Отдельные организации, которые осуществляют деятельность с использованием атомной энергии, должны обеспечивать разработку и ввод в действие частной ПОК. Они же должны осуществлять проверку выполнения и оценку результативности выработанной программы. Пересмотр ПОК следует проводить не реже, чем раз в пять лет.

К особенностям содержания ПОК следует отнести следующие. В разделе, посвященном политике в области качества должен быть четко определен важнейший приоритет в обеспечении безопасности объектов использования атомной энергии. В разделе, связанном с организационной деятельностью необходимо отразить не только основные сведения о порядке взаимодействий с заказчиком, вышестоящими организациями, но и с федеральными органами исполнительной власти и уполномоченными организациями, осуществляющими государственное управление использованием атомной энергии и государственное регулирование безопасности при использовании атомной энергии. В разделе, который описывает управление персоналом, необходимо не только описать требования к уровню подготовки и квалификации, но и описать процедуры, которые формируют поддержание культуры безопасности в организации. В этом же разделе нужно прописать постоянную проверку знаний в области безопасности.

Разумеется, в ПОК должны быть отражены и функционалы, обеспечивающие контроль качества проекта объектов, использующих атомную энергию. Также необходим раздел обеспечения качества программных средств и расчетных методик, где необходимо предусмотреть обеспечение безопасности, возможности оценки характеристик надежности, то есть прочности, долговечности и безотказности используемых систем.

Цель обеспечения ядерной безопасности исследовательских реакторов – предотвращение появления условий возникновения радиационной угрозы здоровью и жизни населения в следствии ядерной аварии, исключение выхода реакторов без непосредственного многократного контроля ответственных лиц в критическое состояние и накопления опасной мощности выше санкционированного предела, установленного в расчетных нормативах, исключение цепных реакций деления при обращении с ядерными материалами и исключение повреждения элементов, содержащих ядерные материалы.

Заключение

Метрология играет исключительно важную роль в атомной энергетике по следующим причинам:

- Точное измерение ядерных параметров;
- Контроль реактора и безопасность;
- Защита от радиации;
- Вывод ядерных установок из эксплуатации;
- Учет и контроль ядерных материалов;
- Исследования и разработки;
- Международное сотрудничество.

В целом, метрология является неотъемлемой частью обеспечения безопасности, эффективности и надежности атомной энергетики. Без точных и надежных измерений невозможна безопасная эксплуатация атомных электростанций, защита работников и окружающей среды, а также правильное управление ядерными материалами.

Список литературы

1. Доклад ESG и зеленые финансы России 2018-2022 [Электронный ресурс] // Экспертно-аналитическая платформа «Инфраструктура и финансы устойчивого». – 2022. – URL: www.infragreen.ru (дата обращения: 06.03.2023).
2. Environmental, Social, and Governance (ESG) Factors and Green Productivity: The Impacts of Greenwashing and Competence Greenwashing on Sustainable Finance

and ESG Investing / Schumacher, Kim // APO Productivity Insights. – 2022. – V. 2-11. – 32 p.

3. ESG-повестка в Азиатско-Тихоокеанском регионе и на Ближнем Востоке [Электронный ресурс] // ESG сообщество. Информация. Решения. – 2022. – URL: https://esgworld.ru/wp-content/uploads/2022/07/issledovanie_otkryvaya_novye_gorizonty_esg_kept_alliance.pdf.

4. Круглый стол «Международное сотрудничество для достижения Целей устойчивого развития (ЦУР) в период пандемии COVID-19: текущие вызовы и перспективы» [Электронный ресурс] // Евразийская экономическая комиссия ЕАЭС. – 2022. – URL: <https://rspp.ru/upload/iblock/f43/u7ps6hyqar52x23fah49mipmkbnstso5/Проект%20программы%20на%20русском%20языке.pdf>.

5. Круглый стол «Роль системы Росстандарта в развитии стандартизации и сертификации в сфере устойчивого развития в России» [Электронный ресурс] // кафедра «Экологический менеджмент и устойчивое развитие» Академии стандартизации, метрологии и сертификации. – 2023. – URL: <https://www.asms.ru/news/v-akademii-proshel-kruglyy-stol-posvyashchenny-teme-ustoychivogo-razvitiya.html>

УДК 006.1

Федорова К.И., Зайцева А.С., Невмятуллина Х.А.

Особенности проведения метрологической экспертизы технологической и конструкторской документации

Федорова Карина Игоревна – магистр 2-го года обучения кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии.

Зайцева Анастасия Сергеевна – бакалавр 3-го года обучения кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии.

Невмятуллина Хадия Абдрахмановна – кандидат технических наук, доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии, studstandart@mail.ru;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, 125047, Москва, Миусская площадь, дом 9.

В статье представлены основные понятия метрологической экспертизы, порядок и особенности ее проведения на предприятии, нормативная документация, используемая экспертами-метрологами. Даны рекомендации по проверке конструкторской и технологической документации. Рассмотрены примеры проведения метрологической экспертизы различных видов документов.

Ключевые слова: метрологическая экспертиза, качество, документация, оценка.

FEATURES OF THE METROLOGICAL EXAMINATION OF TECHNOLOGICAL AND DESIGN DOCUMENTATION

Fedorova K.I.¹, Zaitseva A.S.¹, Nevmyatullina H.A.¹.

¹D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article presents the basic concepts of metrological examination, the procedure and features of its implementation at the facility, regulatory documentation used by metrologists. Recommendations on the verification of design and technological documentation are given. Examples of metrological examination of various types of documents are considered.

Key words: metrological examination, quality, documentation, evaluation

Метрологическая экспертиза (МЭ) является важным этапом в обеспечении качества готовой продукции. Благодаря ей на этапе разработки документации, возможно, исправить серьёзные ошибки, например, такие как, неправильный выбор средств измерений (СИ), которые не подходят по конструкции, отклонения на размеры не соответствующие документации [1,2]. МЭ занимает ключевое место в машиностроительной отрасли, особенно на стадии сборочного производства [3,4].

На сегодняшний день принято разделять метрологическую экспертизу на обязательную и добровольную. Обязательная метрологическая экспертиза проводится для проектов нормативно-правовых актов РФ, в которых установлены требования к измерениям, стандартным образцам, СИ. Также обязательная метрологическая экспертиза может проводиться для конструкторской, технологической, проектной документации, если это предусмотрено законодательством РФ. Обязательную метрологическую экспертизу нормативно-правовых

актов могут проводить только Государственные научные метрологические институты. Проверку конструкторской документации (КД), технологической документации (ТД) для которых также предусмотрена обязательная МЭ, проводят аккредитованные в национальной системе аккредитации юридические лица или индивидуальные предприниматели. При проведении добровольной метрологической экспертизы документов аккредитация не требуется. Перечень нормативной документации в соответствии, с которой проводится проверка различных видов документов, приведен в таблице 1.

Важно отметить, что при метрологической экспертизе выявляются недостаточные и ошибочные решения по метрологическому обеспечению технологических процессов, конструкторских предложений и технических приёмов, содержащихся в представленном комплекте документов.

Основной алгоритм проверки документов приведен на рисунке 1.

Таблица 1- Документы для проведения МЭ

Номер нормативного документа	Основное содержание	Применение
РМГ 29	Актуальные термины в области метрологии	Возможно исправление неправильной терминологии в документе
ФЗ №102 «Об обеспечении единства измерений»	Обязательный порядок проведения метрологической экспертизы стандартов,	Проведение метрологической экспертизы на обязательной и добровольной основе позволяет

	проектной, конструкторской, технологической документации; а также указывает на право проведения в добровольном порядке метрологической экспертизы, если законодательством РФ не предусматривается ее обязательное проведение	уменьшить количество брака на производствах, а также повысить качество и надежность выпускаемой продукции
ГОСТ 2.105	Общие требования к выполнению текстовых документов	Возможно исправление обозначения записи единиц физических величин
ГОСТ Р 58931	Порядок проведения МЭ различных видов документов для авиационной промышленности	Позволяет систематизировать подход к проведению МЭ, устанавливает критерии оценки, а также реализацию результатов МЭ
ГОСТ 8.417	Единицы физических величин, применяемые в РФ	Возможно исправление использования внесистемных единиц ФВ также правила написания обозначений
РМГ 63	Цели, задачи и порядок организации метрологической экспертизы.	Помогает придерживаться основного перечня задач МЭ, и понять их смысл
ГОСТ 8.051	Допускаемые погрешности измерения линейных размеров до 500мм	Возможно исправление выбора ошибочных СИ, не подходящих по погрешности для контроля размера
РД 50-98	Систематизированные оценки погрешности распространенных и широко применяемых на машиностроительных предприятиях средств измерений, а также условия проведения и способы измерения	Возможно исправление выбора ошибочных СИ, не подходящих по погрешности для контроля размера

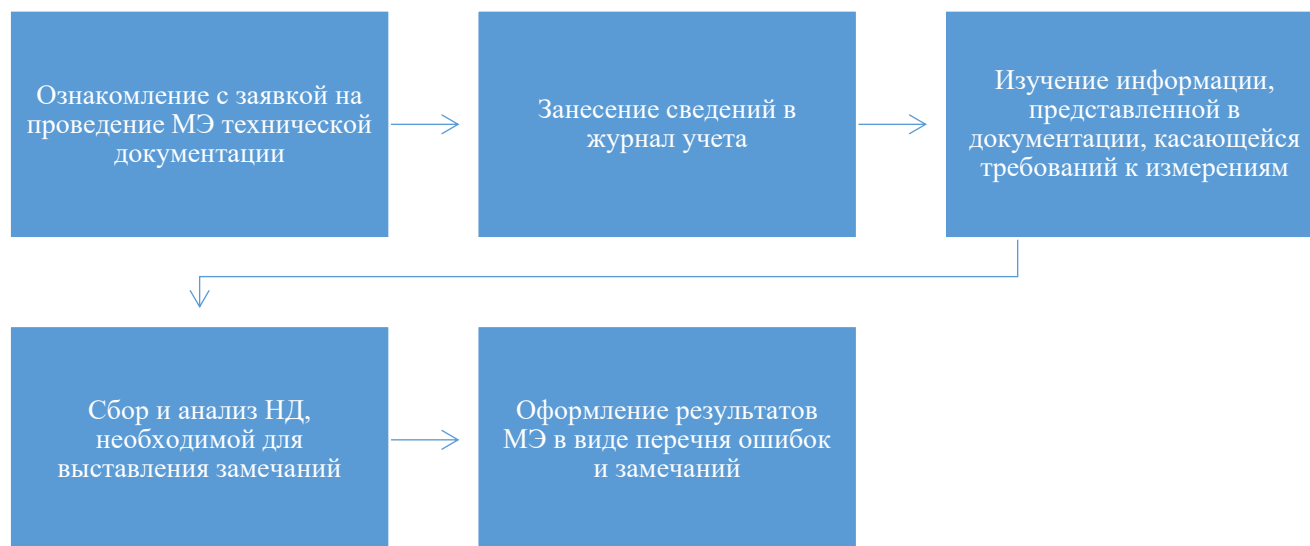


Рисунок 1 – Порядок проведения МЭ на предприятии

Сначала эксперту-метрологу на проверку предоставляется комплект технологической либо конструкторской документации. Прежде чем начать проверку, эксперт должен убедиться в том, что согласно извещению об изменении на проверку представлен полный комплект документов. Только после этого заносятся необходимые сведения в журнал. В журнале может указываться следующая информация: номер изделия, ФИО разработчика,

дата поступления и дата согласования документов и т.д. После занесения всех необходимых сведений, можно приступить к проверке, и только после проведенного полноценного анализа нормативной документации оформлять заключение с результатами, проведенной МЭ.

В таблице 2 представлены основные виды документов, подвергаемых МЭ.

Таблица 2 – Документация, проходящая МЭ

Конструкторские документы	Технологические документы
Чертеж детали	Маршрутная карта
Сборочный чертеж	Операционная карта
Габаритный чертеж	Карта эскизов
Монтажный чертеж	Техническая инструкция
Пояснительная записка	Ведомость оснастки
Технические условия	Спецификация технологических документов
Программы и методики испытаний	Карта технологического процесса
Паспорт изделия	Карта типовой операции
Ремонтные документы	Карта типового технологического процесса
Эксплуатационные документы (руководство по эксплуатации)	Технологический регламент

Метрологическая экспертиза представленных выше документов будет отлична друг от друга. Так, например, метрологическая экспертиза паспорта на изделия будет заключаться в проверке основных требований к изделию и соответствии их значений, указанных в технических условиях, правильности перевода единиц физических величин, наличия и корректной записи отклонений на параметры, а при проверке чертежей детали особое внимание уделяется контролю пригодности выставленных размеров. Если рассматривать ведомость оснастки, то в этом документе проверяется правильная запись СИ, при этом особое внимание уделяется проставленному классу точности, диапазону измерения, наименованию, которое должно соответствовать документации. При проверке карт технологического процесса оценивается погрешность выбранного разработчиком СИ, особенности его эксплуатации по документации, корректное использование терминов, и соответствие допусков на размеры нормативной документации. Таким образом, для каждого вида документа возможно выполнение только определенных задач метрологической экспертизы, представленных в РМГ 63 [5].

Рассмотрим один пример из процесса проведения экспертизы программы и методики аттестации термобарокамеры как испытательного оборудования. Так, основные характеристики воспроизводимые термобарокамерой это температура и атмосферное давление. По заявлению производителя камеры погрешность воспроизведения температуры составляет $\pm 2^\circ\text{C}$, а точность абсолютного давления в камере 5 %. Для того чтобы исключить ошибки первого и второго рода (ошибка первого рода – ложноположительное заключение, ошибка второго рода – ложноотрицательное заключение) при измерении действительного давления и температуры необходимо, чтобы коэффициент точности средств измерений относительно заявленной производителем погрешности был не менее 3. Сам коэффициент точности – это отношение допустимого отклонения контролируемого параметра к суммарной погрешности измерений этого параметра в заданных условиях измерений. Следовательно, при допуске в 4°C необходимо средство измерения температуры с погрешностью не более $1,3^\circ\text{C}$, а для давления необходим манометр с классом точности 1,5. Класс

точности выбран согласно ряду чисел из ГОСТ 2405. Допустим, что разработчик программы и методики испытаний включил для испытания следующие средства измерения (в данном примере рассматривается проверка достоверности получения результатов аттестации барокамеры, считаем, что конструктивные особенности СИ позволяют выполнить измерения параметров среды барокамеры. Также считаем, что предложенные СИ являются утвержденного типа в РФ и имеют действующее свидетельство о поверке):

- Термогигрометр (основная погрешность измерения температуры $\pm 0,5^\circ\text{C}$, диапазон измерений от минус 60°C до плюс 85°C);

- Манометр технический абсолютного давления (класса точности 2,5, диапазон измерения от 0 до 160 кПа).

Термобарокамера аттестуется на проведение испытаний в диапазоне температур от минус 40°C до плюс 50°C и давлении от 0,5 кПа до 102 кПа. Диапазон измерения указанных СИ позволяет провести аттестацию для указанных диапазонов. Рассчитаем коэффициенты точности для термогигрометра и манометра технического. Для упрощения примера будем считать, что суммарная погрешность измерений равна основной погрешности СИ.

$$K_{\text{термогигрометр}} = \frac{4}{1} = 4 \geq 3 - \text{соответствует}$$

$$K_{\text{манометр}} = \frac{5}{2,5} = 2 \geq 3 - \text{несоответствует}$$

Таким образом, термогигрометр соответствует требованиям, а манометр необходимо заменить на более точный.

Метрологическая экспертиза позволяет повысить качество изделий, что в свою очередь сокращает затраты на производство и, в дальнейшем, на эксплуатацию сложных технических систем [6]. При метрологической экспертизе чертежей деталей наиболее ответственным и трудоемким этапом будет являться анализ рациональности номенклатуры измеряемых параметров. При выборе средств измерений в первую очередь будет проверяться наличие их на производстве и трудоемкость проведения измерений, а также возможность обеспечения измерения с заданной точностью.

Список литературы

1. Епифанцев, К. В. Основные аспекты обязательной метрологической экспертизы при эксплуатации спецтехники / К. В. Епифанцев // Современные проблемы машиностроения : Труды XII Международной научно-технической конференции, Томск, 28 октября – 01 ноября 2019 года / Под редакцией А.Ю. Арляпова. – Томск: Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 2019 – С. 270-273.
2. Овадыкова, Ж. В. Необходимость проведения метрологической экспертизы нормативной документации на предприятиях / Ж. В. Овадыкова, Х. М. Овадыков // Евразийский союз ученых. – 2020 – № 7-1(76) – С. 62-66.
3. К вопросу организации контроля в производстве / О. И. Борискин, С. Н. Ларин, Г. А. Нуждин [и др.] // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. 2024. № 1. С. 294-298
4. Богомолова, С. А. Процессы метрологического обеспечения сборочного производства / С. А. Богомолова, И. В. Муравьева // Сборка в машиностроении, приборостроении – 2019 – № 5. С. 202-207.
5. РМГ 63-2003. ГСИ. Обеспечение эффективности измерений при управлении технологическими процессами. Метрологическая экспертиза технической документации.
6. Полякова О. В. Метрологическая экспертиза технической документации. Часть 2 // Главный метролог. 2010. №1. С. 35-40.

УДК 006.1

Марциохо А.И., Парцева М.Ф., Невмятуллина Х.А., Муравьева И.В.

Взаимосвязь стандартизации и метрологии при оценке качества гальванических покрытий

Невмятуллина Хадия Абдрахмановна – кандидат технических наук, доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; studstandart@mail.ru;

Муравьева Ирина Валентиновна — кандидат технических наук, доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии;

Марциохо Анна Ивановна – магистрантка 1-го года обучения кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии;

Парцева Мария Федоровна – бакалавр 3-го года обучения кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
125047, Москва, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрены стандартизация и метрология: их схожесть и различия. Авторы рассматривают данные области по отдельности и вместе, уделяя время специфики направлений, их значимости и перспективы развития. А также анализируют подготовку кадров по метрологии и стандартизации. В заключении выделяют общие и индивидуальные черты направлений.

Ключевые слова: метрология, стандартизация, нормативно-техническая документация (НТД), испытания, специалист.

The relationship of standardization and metrology in the evaluation of the quality of galvanic coatings

Marziokho A.I.¹, Partseva M.F.¹, Nevmatullina H.A.¹, Muravyeva I.V.¹

¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses standardization and metrology: their similarities and differences. The authors consider these areas separately and together, devoting time to the specifics of the directions, their significance and prospects for development. They also analyze the training of personnel in metrology and standardization. In conclusion, the general and individual features of the directions are highlighted.

Key words: metrology, standardization, regulatory and technical documentation (NTD), testing, specialist.

Вклад метрологии в стандартизацию – это, во-первых, узаконенные единицы измерений величин, в документах по стандартизации на продукцию; во-вторых, методы и средства измерений, используемые, в частности, для обеспечения взаимозаменяемости и сопрягаемости деталей в изделиях.

Обратно, вклад стандартизации в метрологию – это большая группа стандартов, имеющая общее название: Государственная система обеспечения единства измерений (принятое сокращение – ГСИ). Вклад метрологии в сертификацию – методы и средства измерений, используемые при сертификационных испытаниях, а также методы оценивания достоверности результатов этих испытаний. Поэтому в любом учебнике по сертификации обязательно имеется раздел по метрологии. Обратно, вкладом стандартизации в метрологию является сертификация средств измерений как способ документального подтверждения их качества.

Со стороны государства регламентируются нормы, требования и правила, используемые в процессе измерений для обеспечения единства измерений в стране. Метрология органически связана со стандартизацией. Эта связь выражается, прежде всего, в стандартизации понятия «единство измерений», системе государственных эталонов, системе средств измерений и методов проверок, в

создании стандартных образцов состава и свойств веществ и материалов.

Необходимость стандартизации методик выполнения измерений обусловлена тем, что погрешности результатов измерений определяются не только погрешностью применяемых средств измерений, но и применяемыми методами измерений, внешними условиями, в которых измерения выполняются, способами обработки результатов измерений и др. Часто оказывается, что погрешности средств измерений составляют весьма малую долю погрешности результата измерений. Выбор конкретной методики измерений из ряда стандартизованных также является нетривиальной задачей, для решения которой вычисляют комплексные показатели качества [1].

Стандартизация опирается на метрологию, обеспечивающую правильность и сопоставимость результатов испытаний материалов и изделий, а также заимствует из метрологии методы определения и контроля качества.

Объективность испытаний, достоверность и точность получаемых результатов во многом определяется техническим уровнем измерительной техники, ее автоматизацией.

Учитывая высокую стоимость контрольных проверок и испытаний, эффективным выходом из этого положения становится взаимное признание результатов испытаний. Это означает, что страна-

импортер, опираясь на знание действующих НТД, установленного порядка испытаний, наличия необходимых приборов и испытательного оборудования страны-экспортера признает результаты, проведенных экспортером испытаний изделия и не проводит повторных испытаний изделия у себя в стране.

Высшим уровнем такого признания является сертификация. Сертификация – это действие, проводимое с целью подтверждения, посредством сертификата соответствия или знака соответствия того, что изделие или услуга соответствуют определенным стандартам или техническим условиям.

Важное влияние на развитие системы метрологического обеспечения деятельности по стандартизации и сертификации в РФ оказывает несовершенство нормативной и методической базы.

В частности, ведутся споры касательно значения самого главного понятия – «испытание». Как в свое время отметил уже экс-генеральный директор Ростест-Москва В.С.Мигачев в своем докладе «Соблюдение требований к метрологическому обеспечению испытаний продукции – необходимое условие повышения её качества» на межрегиональной научно-практической конференции «Метрологическое обеспечение испытаний и сертификации продукции и услуг»: «Определяя понятие «испытание» надо отталкиваться не от английского термина «test» (которое, как известно многозначно), а от традиционных норм русского языка. Согласно этим нормам, испытание предполагает какое-то воздействие или нагрузку.

В англоязычных документах и технических книгах термином «test» пользуются для описания существенно различных процедур, включая такие как контроль, опробование, проверка, испытание и т.п. На это обстоятельство можно не обращать внимания, но лишь до тех пор, пока дело не доходит до важных в метрологическом отношении особенностей, перечисленных ранее процедур.

Например, ГОСТ 9.916-2023 [2] распространяется на металлические и неметаллические неорганические покрытия, получаемые электрохимическим, химическим и горячим способами, и устанавливает методы контроля показателей, характеризующих защитные и декоративные свойства покрытий, на соответствие требованиям нормативным документам и технической документации. К данным показателям относят внешний вид покрытия, толщину покрытия, плотность, пористость, коррозионную стойкость, структуру, микротвердость и др.

Толщину покрытий контролируют неразрушающими (магнитным, рентгенофлуоресцентным и др.) или разрушающими (гравиметрическим, кулонометрическим и др.) методами. Для контроля толщины покрытий применяют приборы с нормированным значением погрешности измерений толщины.

Современное состояние системы метрологического обеспечения требует высокой

квалификации специалистов. Механическое перенесение зарубежного опыта в отечественные условия невозможно, и специалистам необходимо иметь достаточно широкий кругозор, чтобы творчески подходить к выработке и принятию творческих решений на основе измерительной информации. Это касается не только работников производственной сферы. Знания в области метрологии важны и для специалистов по сбыту, менеджеров, экономистов, которые должны использовать достоверную измерительную информацию в своей деятельности.

В связи с этим уже неоднократно поднимался вопрос реформирования системы подготовки кадров. Порядка 10 лет назад эксперты активно обсуждали необходимость изменения подхода к подготовке метрологов [3, 4]. Одной из реализованных идей по популяризации метрологии и подготовки специалистов со школьной скамьи являются метрологические образовательные кластеры, где дети изучают средства измерения и погрешности [5]. Надеемся, что это поможет избежать дефицита инженеров-метрологов уже в ближайшем будущем.

Понимание основ метрологии важно для технического специалиста. Не стоит тут забывать и про стандартизацию. Человечество издавна старалось задокументировать нормы, но как профессия стандартизация весьма молода, и поэтому ее важностью часто пренебрегают при подготовке кадров. Да и самим студентам весьма нудно разбираться в тонкостях данной области. Но, как правило, на предприятии специалисты сталкиваются с огромным объемом внутренних и внешних нормативно-технических документов. И, не зная их, работать не получится. А так как специалистов по стандартизации в компаниях, как правило, либо мало, либо совсем нет, то при работе с НТД проконсультироваться не всегда предоставляется возможность. Поэтому стоит учитывать этот момент при подготовке технологов и не только.

Однако, для предприятия лучше наличие в штате специалиста по стандартизации, который будет отслеживать изменения в законодательстве, разрабатывать внутренние технические документы и контролировать их грамотное заполнение. Данный специалист снимает с технологов часть работы, позволяя каждому специалисту, в том числе и себе, лучше углубиться именно в тонкости своей профессии, тем самым повышая эффективность отдельно взятого работника и предприятия в целом.

Стоит отметить, что и для стандартизаторов необходимо знание не только нормативной базы, но и технической, иначе регламентируемые параметры в документах не будут отражены с требуемой точностью и полнотой.

Выходит, что образование метрологов и стандартизаторов имеет тесную связь, поскольку оба направления направлены на обеспечение точности измерений и соответствия продукции документам по стандартизации, поэтому в подавляющем большинстве случаев их объединяют в одну

специальность. Выпускники данного направления являются отличным стимулом и помощью в техническом и экономическом развитии страны, так как берут на себя сопроводительных функций, обеспечивающих бесперебойный рост качества продукции.

В заключении рассмотрим сходства и различия между метрологией и стандартизацией:

Сходства:

- Обе области направлены на обеспечение единства измерений и качества продукции и услуг.
- Они взаимосвязаны и дополняют друг друга в достижении этих целей.
- Метрология и стандартизация опираются на научно-технические достижения и нормативно-правовую базу.

Различия:

1. Предмет регулирования:

- Метрология занимается обеспечением единства и точности измерений.
- Стандартизация устанавливает требования, нормы, правила для продукции, процессов и услуг.

2. Методы:

- Метрология использует методы измерений, калибровки, поверки средств измерений.
- Стандартизация применяет методы разработки, утверждения, пересмотра стандартов.

3. Области применения:

- Метрология охватывает все сферы, где требуются измерения.
- Стандартизация распространяется на продукцию, процессы, услуги во всех отраслях.

В целом, метрология и стандартизация - взаимосвязанные, но различные области деятельности, направленные на обеспечение качества и единства в различных аспектах. Их совместное

применение является ключом к эффективному управлению качеством и достижению высоких стандартов.

Список литературы

1. Митрофанова С.А., Муравьева И.В. Выбор по комплексному показателю качества методики количественного химического анализа для определения хлорид-иона в бетонных и железобетонных конструкциях // Измерительная техника. 2022. № 8. С. 68–74.
2. ГОСТ 9.916-2023 Единая система защиты от коррозии и старения (ЕСЗКС). Покрытия металлические и неметаллические неорганические. Методы контроля. М.: ФГБУ "РСТ", 2024
3. Комиссия по стандартизации и техническому регулированию рассмотрела вопросы подготовки метрологов и эффективность отраслевых стандартов // Союз машиностроителей России URL: <https://soyuzmash.ru/activities/komissiya-po-standartizatsii-i-tehnicheskomu-regulirovaniyu-rassmotrela-voprosy-podgotovki-metrolog> (дата обращения: 16.05.2024).
4. Проблемы метрологического образования в России: Материалы круглого стола // Стандарты и качество URL: <https://gia-stk.ru/mi/adetail.php?ID=80754> (дата обращения: 16.05.2024).
5. Метрологические кластеры и классы // метрология pro URL: <https://kachestvo.pro/metrology/articles/kadry-i-molodezh/metrologicheskie-klastery-i-klassy/> (дата обращения: 16.05.2024).

УДК 004.942

Сёмин Н.В., Платонов И.А., Лихачёв Г.А., Захаров С.Л.

Методология проектирования теплообменной аппаратуры в программе Компас при использовании фрагментов визуализации в динамике, полученной при использовании Solidworks Flow simulation

Сёмин Никита Вячеславович – студент, кафедры химической технологии органических соединений азота; nick.syomin@mail.ru

Платонов Иван Алексеевич – студент, кафедры химической технологии органических соединений азота; ivanovplatig@gmail.com

Лихачёв Глеб Александрович – студент, кафедры химической технологии органических соединений азота; huuuurmaaaa@gmail.com

Захаров Станислав Леонидович – д.т.н., проф. кафедры Инженерного проектирования технологического оборудования; staszaharov@yandex.ru

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В работе рассмотрены: проектирование теплообменного оборудования в программе “Solidworks”. Изготовлен аппарат разделения с рабочим элементом из пористого титана с пиком распределения пор по радиусам в несколько сот ангстрем. Для проектирования использованы приёмы изучения гидродинамики и теплообмена в макетном аппарате с использованием программного обеспечения Компас и Solidworks Flow simulation, что позволило подойти к процессу проектирования с оптимальными характеристиками разделения и минимальными затратами изготовления аппарата.

Ключевые слова: мембрана, пористый титан, распределение пор, Solidworks Flow simulation.

Methodology for designing heat exchange equipment in the “Compass” program using fragments of visualization in dynamics obtained using Solidworks Flow simulation.

Semin N.V.¹, Platonov I.A.¹, Likhachev G.A.¹, Zakharov S.L.¹

¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The work covers: design of heat exchange equipment in the “Solidworks” program. A separation device with a working element made of porous titanium with a peak of pore distribution over radii of several hundred angstroms is manufactured. For the design, techniques for studying hydrodynamics and heat transfer in a mock-up device using Compass and Solidworks Flow simulation software were used, which allowed us to approach the design process with optimal separation characteristics and minimal costs of manufacturing the device.

Keywords: membrane, porous titanium, pore distribution, Solidworks Flow simulation.

Введение

процессе инженерного проектирования наиболее важным вопросом является выбор наиболее удобной, наглядной, а главное точной программы. На данный момент обучение первого курса происходит в программе “Компас”, которая позволяет создавать лишь обычные образцы деталей или механизмов. В то же время программа “Solidworks” позволяет моделировать поведение объекта исследования.

Основная часть. Наглядное применение возможностей приложения SolidWorks.

Проведённые ранее исследования в специально спроектированном и изготовленном аппарате разделения с подогревом исходной смеси, в котором в качестве разделительной перегородки использовали пористые тонкостенные мембраны из пористого титана (рис.1) с оптимальным распределением пор на пике распределения в несколько сот ангстрем [2], позволили сделать вывод о необходимости проектирования

наилучших размеров аппарата с учетом гидродинамики тепловых и гидродинамических потоков, протекающих в разработанном аппарате разделения исходной смеси.

Как известно [1,2], проектированию в программе Компас теплообменной аппаратуры предваряют расчёты температуры нагреваемой в аппарате рабочей среды и расчёты теплоносителя на входе и выходе из теплообменной аппаратуры. Визуальные исследования в динамике с помощью программы Solidworks [3] Flow simulation помогают оптимизировать процесс проектирования теплообменного оборудования.

На рис 2. показан фрагмент снижения температуры греющего агента реакционной среды и повышения температуры исходной смеси на примере модели разработанного аппарата в динамике. Так, при температуре теплоносителя (греющего агента) в 80° рабочая среда в 10° подогревается в условиях противотока до 26°. При этом греющий агент охлаждается до 54°.

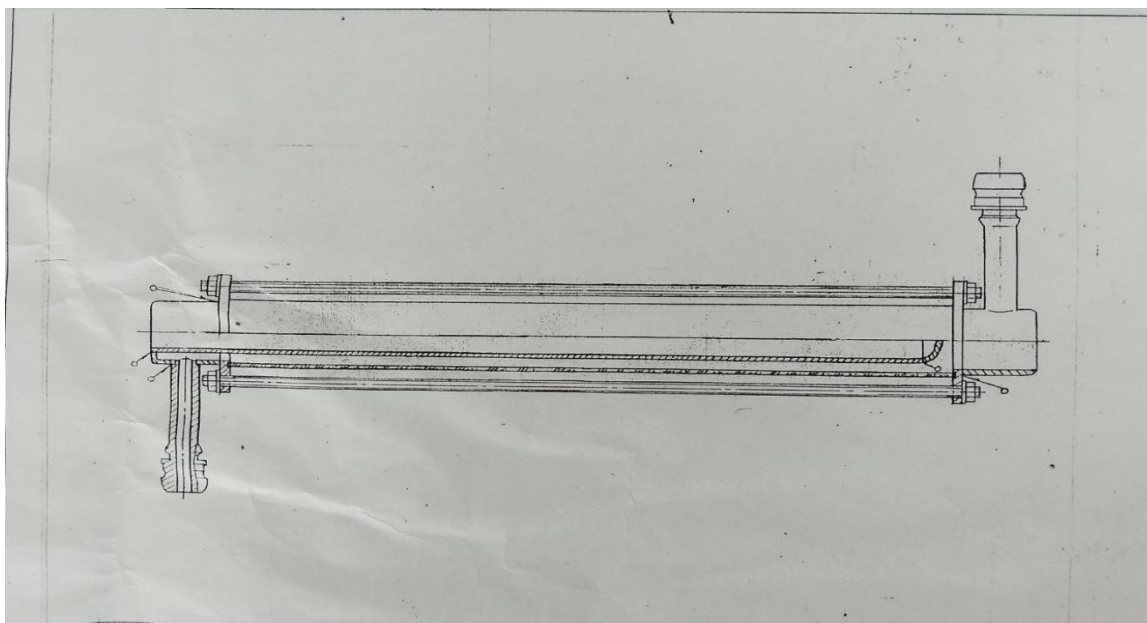


Рис.1. Аппарат для разделения смесей с мембраной из пористого титана

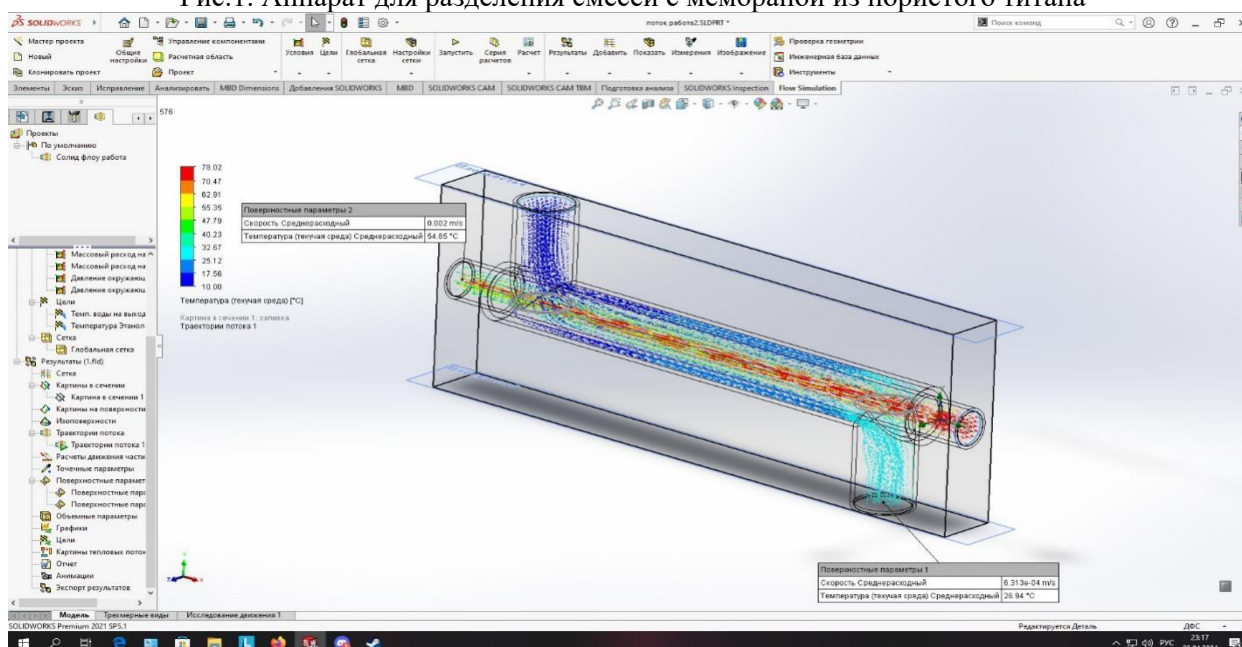


Рис.2 . Фрагмент визуализации теплопередачи в модели аппарата в динамике при использовании программы Solidworks Flow simulation

Заключение

В данной работе был разработан фрагмент аппарата для разделение смесей в программе Solidworks, были также смоделирован поток греющего агента реакционной среды в модуле Solidworks – Flow Simulation. Этот доклад раскрывает возможности использования данного модуля для существенного облегчения работы в области компьютерного моделирования технологического оборудования и химической технологии.

Список литературы

1. Свитцов А.А., Введение в мембранную технологию, М., ДеЛи принт, 2007, 208 с.
2. Захаров С.Л., Аристов В.М. Моделирование процесса разделения истинных растворов мембранными методами // Химия и химическая технология. – 2003. – Т.46. Вып. 7. -С. 120-121.
3. Solidworks Flow simulation.

УДК 004.056

Черников Д.В., Невмятуллина Х.А.

Тенденции по развитию международных стандартов по хранению и обработке конфиденциальной информации

Черников Данила Викторович, студент магистратуры 1-го курса РХТУ им. Менделеева, danila_gas987@mail.ru.
Невмятуллина Хадия Абдрахмановна - доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии.
к.т.н.; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия,
Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9; knevm@mail.ru.

В условиях роста киберугроз международные стандарты по хранению и обработке конфиденциальной информации претерпевают значительные изменения. Это оказывает существенное влияние на деятельность компании и организации, способствуя улучшению защиты данных, снижению юридических и финансовых рисков, повышению доверия клиентов и партнеров, а также обеспечивая конкурентные преимущества.

Ключевые слова: информационная безопасность, конфиденциальность данных, международные стандарты, регламент по защите данных

TRENDS IN THE DEVELOPMENT OF INTERNATIONAL STANDARDS FOR THE STORAGE AND PROCESSING OF CONFIDENTIAL INFORMATION

Chernikov D.V., Nevmyatullina Kh.A.

D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

In the context of the rise of cyber threats, international standards for the storage and processing of confidential information are undergoing significant changes. These changes have a substantial impact on companies and organizations, contributing to improved data protection, reduced legal and financial risks, increased trust from clients and partners, and providing competitive advantages.

Key words: information security, data confidentiality, international standards, data protection regulation

В условиях все большей цифровизации вопросы безопасности и конфиденциальности данных становятся краеугольными камнями для современного мира. Международные стандарты, регулирующие хранение и обработку конфиденциальных данных, играют критическую роль в обеспечении безопасности информации в сфере информационных технологий.

Изучение международных стандартов в области хранения и обработки конфиденциальной информации важно для России по нескольким ключевым причинам. Россия активно участвует в глобальной экономике, и компании, работающие на международных рынках, сталкиваются с необходимостью соответствия международным стандартам. Международные стандарты отражают передовые практики в области управления информацией и защиты данных. Знание этих стандартов помогает российским компаниям быть конкурентоспособными и успешно взаимодействовать с зарубежными партнерами и клиентами. Также международные стандарты, такие как ISO/IEC 27001[1], устанавливают высокие требования к защите данных и кибербезопасности. Следование этим стандартам помогает российским организациям улучшить свою защиту от кибератак и утечек данных, что особенно важно в условиях растущих киберугроз.

Тенденции в развитии международных стандартов по хранению и обработке конфиденциальной информации постоянно эволюционируют в ответ на быстро меняющиеся технологические, правовые и кибербезопасностные требования. К основным тенденциям по развитию

международных стандартов по хранению и обработки конфиденциальной информации относятся следующие.

1. Унификация стандартов.
2. Гармонизация с региональными законодательствами.
3. Расширение области применения стандартов.
4. Специализация стандартов для различных отраслей.
5. Фокус на технологических инновациях.
6. Рост стандартов для облачных услуг.
7. Интеграция требований по киберустойчивости.

Тренд унификации стандартов в области информационной безопасности и конфиденциальности данных - это стремление к созданию единых и согласованных требований в разных странах и регионах мира. Два ключевых примера этого тренда — ISO/IEC 27001 и GDPR[2], — являются важными стандартами, оказывающими значительное влияние на компании и организации по всему миру.

ISO/IEC 27001 является основным международным стандартом для систем управления информационной безопасностью (СУИБ). Его популярность постоянно растет благодаря его всеобъемлющему подходу к обеспечению безопасности данных. Этот стандарт адаптируется в различных странах с целью создания единых требований к защите информации, что способствует согласованному и стандартизированному подходу к обеспечению безопасности данных на международном уровне.

GDPR (General Data Protection Regulation) является европейским регламентом, который

оказывает влияние на компании по всему миру. Он устанавливает строгие нормы конфиденциальности данных и требует от организаций соблюдать высокие стандарты при обработке персональных данных граждан Европейского союза за несоблюдение которых грозит большой штраф, как, например, штраф в 60 миллионов долларов на компанию Google [3]. Этот регламент стимулирует глобальные компании к более строгому соблюдению норм конфиденциальности данных и способствует гармонизации подходов к защите персональной информации. Гармонизация с региональными законодательствами играет важную роль в контексте цифровой приватности и защиты данных [4].

Расширение области применения стандартов означает, что многие из них, такие как ISO/IEC 27001, стремятся охватить новые аспекты информационной безопасности и конфиденциальности данных [5]. В связи с увеличением киберугроз и случаев нарушения данных, требования к защите данных становятся все более строгими, а стандарты — все более детализированными и комплексными. Примером тому является дополнение к ISO/IEC 27001 - стандарт ISO/IEC 27701 [6]. Он непосредственно связан с управлением конфиденциальностью информации (PIMS — Privacy Information Management System). ISO/IEC 27701 и разработан для того, чтобы дополнить и расширить ISO/IEC 27001, включив в него конкретные требования и руководящие принципы по защите персональных данных.

С учетом уникальных требований и рисков различных отраслей, специализированные стандарты по информационной безопасности становятся все более важными. Эти стандарты учитывают специфические потребности и особенности различных секторов, обеспечивая более целенаправленный и эффективный подход к защите данных.

Так, в финансовом секторе, где обработка большого объема конфиденциальной информации является обычным делом, существуют специализированные стандарты, такие как PCI DSS (Payment Card Industry Data Security Standard)[7]. PCI DSS был разработан для защиты данных платежных карт и включает требования по шифрованию данных, контролю доступа и регулярному мониторингу сетей.

В здравоохранении конфиденциальность и безопасность медицинских данных имеют первостепенное значение. Стандарт HL7 (Health Level 7) [8], и регламент HIPAA[9] в США являются примерами специализированных нормативов. Эти стандарты требуют строгого контроля доступа к медицинской информации, шифрования данных и обеспечения их целостности и конфиденциальности.

В государственных учреждениях требования к безопасности данных могут варьироваться в зависимости от чувствительности информации. Например, в США существует стандарт NIST SP 800-53 [10], который предоставляет рекомендации по защите федеральных информационных систем. Он охватывает широкий спектр мер безопасности,

включая управление рисками, контроль доступа и мониторинг безопасности.

В энергетическом секторе, где инфраструктура часто является критически важной, существуют специализированные стандарты, такие как NERC CIP (North American Electric Reliability Corporation Critical Infrastructure Protection)[11]. NERC CIP устанавливает требования к обеспечению кибербезопасности критически важных объектов энергетической инфраструктуры, включая управление идентификацией и доступом, защиту периметра и мониторинг инцидентов.

Специализация стандартов позволяет учитывать уникальные риски и требования каждой отрасли, обеспечивая более эффективную и целенаправленную защиту данных. Это помогает организациям соответствовать специфическим нормативам и стандартам, улучшая их способность защищать конфиденциальную информацию в различных контекстах.

Вместе с тем стандарты все больше ориентируются на технологические инновации, учитывая такие аспекты, как облачные вычисления, и предлагая соответствующие рекомендации по их безопасному использованию. Этот фокус на инновациях помогает компаниям и организациям адаптироваться к быстро меняющейся кибербезопасностной среде и предотвращать новые угрозы.

Одним из ключевых аспектов технологических инноваций в сфере информационной безопасности является развитие шифрования данных. Стандарты ставят все больший акцент на использование сильного шифрования для защиты конфиденциальной информации в покое и в движении. Это включает в себя шифрование хранилищ данных, сетевой трафик и мобильных устройств.

Блокчейн технологии предлагают новые возможности для обеспечения целостности данных и защиты от несанкционированного доступа. Стандарты начинают внедрять принципы блокчейна для обеспечения более прозрачного и безопасного хранения и передачи данных.

Стандарты все чаще учитывают роль искусственного интеллекта и машинного обучения в обнаружении и предотвращении киберугроз. Алгоритмы машинного обучения могут помочь выявлять аномальное поведение пользователей и автоматически реагировать на потенциальные атаки.

С увеличением числа подключенных устройств стандарты ставят задачу обеспечения безопасности интернета вещей. Это включает в себя разработку стандартов по защите IoT устройств от атак, а также рекомендации по обеспечению безопасности передачи данных между устройствами.

Фокус на технологических инновациях помогает стандартам по хранению и обработке конфиденциальной информации оставаться актуальными и эффективными в современной цифровой среде. Эти инновации помогают компаниям и организациям лучше защищать свои данные и предотвращать новые виды киберугроз.

Рост стандартов для облачных услуг свидетельствует о необходимости адаптации стандартов по хранению и обработке конфиденциальной информации к современным технологическим тенденциям. Облачные вычисления становятся все более распространенным методом хранения и обработки данных, поэтому требуется разработка специализированных стандартов, направленных на обеспечение безопасности информации в облачных средах.

Стандарты, такие как ISO/IEC 27017[12] и ISO/IEC 27018[13], играют ключевую роль в определении требований безопасности для облачных сервисов и защиты персональных данных в облачных средах. ISO/IEC 27017 устанавливает рекомендации по обеспечению безопасности информации в облачных окружениях, включая управление доступом, шифрование данных и мониторинг безопасности. В то время как ISO/IEC 27018 предлагает дополнительные меры защиты данных, фокусируясь на конфиденциальности персональной информации, обрабатываемой в облачных средах.

Эти стандарты помогают компаниям и организациям улучшить безопасность своих облачных сервисов и повысить доверие клиентов к облачным решениям. Рост стандартов для облачных услуг отражает стремление индустрии к установлению единых требований и нормативов в этой быстроразвивающейся сфере, что способствует созданию более безопасной и надежной облачной инфраструктуры.

Интеграция требований по киберустойчивости в международные стандарты по хранению и обработке конфиденциальной информации является неотъемлемой составляющей в условиях растущей сложности киберугроз и увеличения числа кибератак. Эти требования направлены на обеспечение не только безопасности данных, но и способности организаций эффективно справляться с киберинцидентами и обеспечивать непрерывность бизнеса. При несоответствии этим требованиям компаниям грозят большие штрафы [14].

Стандарты, такие как ISO 22301[15], являются примером интеграции требований по киберустойчивости в область информационной безопасности. ISO/IEC 22301 фокусируется на управлении непрерывностью бизнеса и включает в себя рекомендации по предотвращению, обнаружению и реагированию на киберинциденты.

Международные стандарты по хранению и обработке конфиденциальной информации продолжают развиваться, становясь все более строгими и комплексными. Их влияние на компании и организации многогранно, включая повышение уровня защиты данных, снижение рисков и укрепление доверия клиентов. Однако внедрение этих стандартов требует значительных усилий и ресурсов, что также необходимо учитывать при планировании стратегии информационной безопасности.

Список литературы

1. Information security, cybersecurity and privacy protection — Information security management systems — Requirements, Технический комитет : ISO/IEC JTC 1/SC 27, ICS : 35.030 03.100.70
2. Регламент (ЕС) 2016/679 Европейского парламента и Совета Европейского Союза «О защите физических лиц при обработке персональных данных и о свободном обращении таких данных, а также об отмене Директивы 95/46/ЕС (Общий Регламент о защите персональных данных)» [рус., англ.] (Принят в г. Брюсселе 27.04.2016) // СПС «КонсультантПлюс».
3. Délibération SAN-2021-024 du 31 décembre 2021[франц.] // Постановление об ограниченном обучении № SAN-2021-024 от 31 декабря 2021 г., касающееся компании Google - Государственная служба распространения права. - [Электронный ресурс]. URL: <https://www.legifrance.gouv.fr/cnil/id/CNILTEXT000044840532> (дата обращения: 26.05.2024).
4. Терешин Марк Витальевич - “Правовое регулирование защиты персональных данных в РФ и ЕС в контексте вступления в силу Общего Регламента по защите данных (GDPR)” – статья - 2019.
5. Талапина Э.В. Защита персональных данных в цифровую эпоху // Труды Института государства и права РАН. 2018. Т. 13. № 5. С. 117-150.
6. ISO/IEC 27701 - Security techniques — Extension to ISO/IEC 27001 and ISO/IEC 27002 for privacy information management — Requirements and guidelines, Технический комитет : ISO/IEC JTC 1/SC 27, ICS : 35.030
7. Payment Card Industry Data Security Standard: v4.0, March 2022
8. Стандарт Health Level 7: version 2 - 2023 Health Level Seven International.
9. Регламент Health Insurance Portability and Accountability Act of 1996.
10. NIST Special Publication 800-53 “Security and Privacy Controls for Federal Information Systems and Organizations”, Rev. 5 (September 2020, including updates as of 12/10/20).
11. North American Electric Reliability Corporation Critical Infrastructure Protection - <https://www.nerc.com/pa/Stand/Pages/ReliabilityStandards.aspx>
12. ISO/IEC 27017:2015 - Information technology — Security techniques — Code of practice for information security controls based on ISO/IEC 27002 for cloud services
13. ISO/IEC 27018:2019 - Information technology — Security techniques — Code of practice for protection of personally identifiable information (PII) in public clouds acting as PII processors
14. BfDI verhängt Geldbußen gegen Telekommunikationsdienstleister [немец.] - Пресс-релиз 30/2019 о BfDI наложение штрафа в размере 9 550 000 евро на поставщика телекоммуникационных услуг 1&1 Telecom GmbH.
15. ISO 22301:2019 - Security and resilience — Business continuity management systems — Requirements

УДК 66-5

Ситников И.А., Ильина С.И., Равичев Л.В., Свитцов А.А.

Электрические процессы в химической технологии

Ситников Илья Алексеевич – ассистент кафедры процессов и аппаратов химической технологии, 236873@mail.ru;

Ильина Светлана Игоревна – к.т.н., доцент кафедры процессов и аппаратов химической технологии, electis@yandex.ru;

Равичев Леонид Владимирович – д.т.н., заведующий кафедрой процессов и аппаратов химической технологии;

Свитцов Алексей Александрович – к.т.н., доцент кафедры мембранной технологии, tecoas@yandex.ru.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Электрические источники и генераторы специального назначения питают разнообразные технологические аппараты, измерительные приборы. Для большинства химических процессов необходимы вторичные источники питания, генерирующие электропитание определенного вида, формы и характеристик. В статье представлены и рассмотрены принципиальные схемы микропроцессорных блоков управления оборудованием, требующих специфических синусоидальных, треугольных, прямоугольных сигналов, описаны принципы действия некоторых электрических схем. В статье представлены результаты испытания предложенных систем.

Ключевые слова: вторичные источники питания, диффузия, электрическое поле, электродализ

Electrical processes in chemical technology

Sitnikov I.A.¹, Ilina S.I.¹, Ravichev L.V.¹, Svittsov A.A.¹

¹D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

Special-purpose electrical sources and generators power a variety of technological devices and measuring devices. For most chemical processes, secondary power sources are needed, generating power of a certain type, shape and characteristics. The article presents and discusses the schematic diagrams of microprocessor control units of equipment that require specific sinusoidal, triangular, rectangular signals, describes the principles of operation of some electrical circuits. The article presents the results of testing the proposed systems.

Key words: secondary power supplies, diffusion, electric field, electrodialysis

Роль электричества в химической промышленности трудно переоценить.

Условно можно классифицировать применение электричества по двум параметрам:

Во-первых, электрические источники и генераторы, как промышленной сети, так и специального назначения, необходимы для питания разнообразных технологических аппаратов (насосов, систем перемешивания реагентов, центрифуг для сепарации многофазных смесей, мельниц), дистанционно управляемых клапанов, измерительных приборов. Во всех этих агрегатах используются различные электродвигатели, которые запитываются от специализированных источников напряжения (как переменного, так и постоянного). Здесь необходимо отметить, что требования к источникам, обеспечивающим работу электрохимического оборудования, зависят от требований предъявляемым к исполнительным элементам этого оборудования. Так, например, электродвигатели, приводящие в движение механические измельчители, должны обладать большим крутящим моментом. Это же требование предъявляется и к устройствам для перемешивания веществ большой вязкости и к системам управления вентилями и электроклапанами. В системах центробежно-вихревых или центрифужных сепараторов высокие требования предъявляются к стабильности скорости вращения ротора двигателя. Особенно это важно для систем

сепарации многофазных сред. Для таких электродвигателей важным является еще и хорошая управляемость, высокая надежность, низкие габаритно-весовые характеристики и себестоимость, а также низкое энергопотребление. Кроме того, электродвигатели должны быть устойчивы к влиянию агрессивной среды, а при некоторых условиях, не терять работоспособность в режиме погружения.

Во-вторых, ряд процессов в химической технологии протекает под действием разности электрических потенциалов. Мощные источники электропитания обеспечивают работу электролитических систем и управление химическими реакциями посредством воздействия на реагенты электрического поля, а также могут использоваться для нагрева, сушки, флотации, осаждения и в других процессах.

Как пример, можно привести воздействие управляемых электрических полей при проведении операций фильтрации. Удаление из потока жидкости включений с диаметром частиц более 3 мм производится путем их извлечения с помощью поверхностных или глубинных фильтров (решеток с определенным размером ячеек). Более мелкие фракции можно удалить, используя процессы коагуляции (слипания частиц под влиянием сил сцепления) и флокуляции (укрупнения частиц за счет взаимодействия их с неорганическими катионами). При этом, процессом укрупнения частиц можно

управлять, электризуя частицы и фильтры внешним электрическим полем. Нужно заметить, что очистку электростатических фильтров можно проводить изменением полярности электрического поля. Для таких систем используются источники постоянного напряжения большой и средней мощности.

Вообще, стоит отметить, что большую роль влияние электричества можно наблюдать при проведении процессов разделения, как гидромеханических, так и массообменных. И в этом контексте хотелось бы отметить мембранные процессы разделения.

Здесь применение электричества также решает несколько задач:

Во-первых, оно оказывает влияние на толщину и характер диффузионного слоя.

Еще одной важной областью использования генераторов переменного электрического сигнала является управление протеканием химических процессов посредством электрического поля. Ярким примером такого воздействия являются системы управления диффузионными процессами посредством электрического поля.

Как известно, диффузия – это самопроизвольный процесс, стремящийся к установлению внутри фаз химических веществ равновесного распределения концентраций. Т.е. диффузию можно отнести к массообменным процессам, которые могут проходить на молекулярном уровне. Молекулярная диффузия характерна для жидкостей, газов и твердых веществ и заключается в перемещении молекул веществ, обусловленное разностью их концентраций. Конвективная диффузия характеризуется перемещением макрообъемов веществ и имеет место лишь в движущихся жидкостях или газах. Т.к. диффузия представляет собой процесс перемещения ионов (заряженных частиц) внутри тех или иных веществ, то воздействие внешнего электрического поля может изменить условия протекания этого процесса. Так, например, при элементарном акте диффузии в металле происходит не только перемещение заряженного иона примеси, но и перераспределение электронов проводимости в структуре металла, которые экранируют ионы примеси. При формировании электрического поля внутри металла, происходит перемещение электронов проводимости от отрицательного потенциала поля к положительному (возникает электрический ток), что приводит к перераспределению и ионов примесей, т.е. процесс диффузии становится управляемым. То же самое касается неметаллов (как твердых веществ, так и жидкостей). При этом, характеристики электрического поля являются важнейшим инструментом воздействия на характер процесса. Например, если на процесс, протекающий под действием разности концентраций через мембрану (диализ), наложить электрическое поле, то преобладать будет перенос ионов в направлении, противоположном переносу за счёт диффузии. Такой процесс получил название электродиализ (однако стоит отметить, что мембраны,

используемые в диализе и электродиализе, существенно различаются).

В последнее время изучение процессов разделения растворов при использовании электродиализа стало более активным. На наш взгляд это можно обосновать тем, что электродиализ перестали воспринимать только как альтернативу процессов опреснения, а нашли более широкие области применения.

Для формирования электрических полей заданной конфигурации и характеристик используются как источники постоянного напряжения, так и электрогенераторы напряжения заданной формы (импульсные, гармонические, пилообразные, треугольные и т.д.).

В связи с изложенным выше, следует рассмотреть вопросы создания устройств, формирующих управляющие сигналы для электрохимического оборудования. Особое внимание следует уделить источникам напряжения специальной формы (треугольной, пилообразной).

Зачастую требования являются противоречивыми, а потому важно принимать правильное решение при выборе вида электродвигателя для выполнения того или иного функционала в химико-технологическом процессе. Кроме того, использование электрического оборудования должно быть обеспечено электропитанием определенного вида, форма и характеристики которого формируются при проектировании вторичных источников питания, генераторами, инверторами, в состав которых входят электронные блоки различной степени сложности.

Иллюстрацией вышесказанного могут являться исследования по электродиализному разделению растворов хлоридов натрия и кальция. На сегодняшний день такой процесс проводят при постоянном электрическом поле, создаваемом в среде реагентов с помощью источников постоянного напряжения. Однако в РХТУ им. Д.И. Менделеева проводятся исследования по использованию переменных электрических полей в процессе электродиализа. Предполагается, что такой способ позволит не только обессоливать растворы, но и проводить разделение одноименных ионов.

Для проведения исследований был собран источник напряжения специальной формы на базе микросхемы XR2206, которая представляет собой цифровой генератор специальных сигналов. Схема генератора приведена на рис. 1.

Генератор имеет регулировку частоты (переменный резистор R4) с возможностью изменения диапазона регулировки (переключатель цепей конденсаторов C4÷C7), регулировки амплитуды (переменный резистор R5). На выходе генератора формируются сигналы синусоидальной, треугольной, трапециоидальной формы и меандр (переключатель «Форма сигнала»). Напряжение питания генератора однополярное +12 В. Максимальное напряжение на выходе +12 В (амплитудное значение).

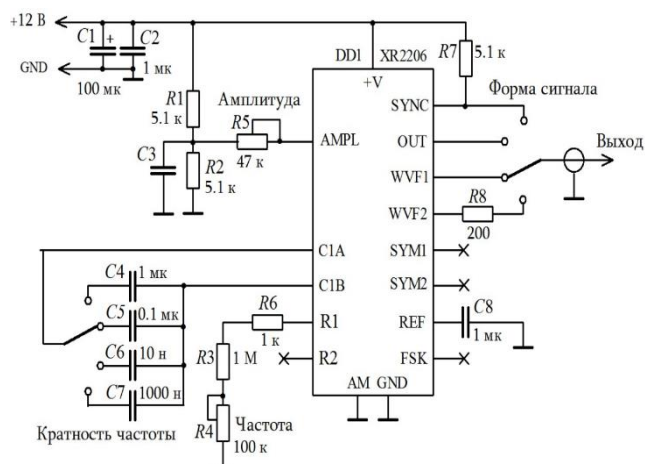


Рис. 1. Генератор специальных сигналов.

Т.к. генератор не рассчитан на низкоомную нагрузку, а при проведении исследований влияния формы электрического сигнала на электромембранные процессы требовалось получить при напряжении +40 В ток порядка 10 А, т.е. мощность генератора должна обеспечивать порядка 500 Вт, на выход генератора был установлен усилитель мощности, собранный на МДП транзисторе с индуцированным n-каналом (IRF3205) (рис. 2).

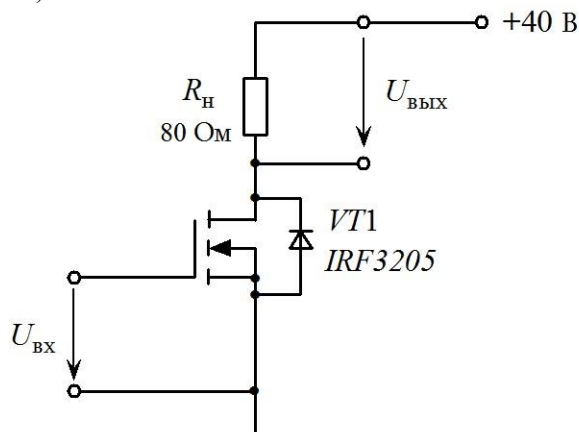


Рис. 2. Усилитель мощности на МДП транзисторе.

Усилитель мощности представляет собой стоковый повторитель, напряжение питания которого может варьироваться от 20 до 50 вольт.

Принципиальная схема установки изображена на рис. 3.

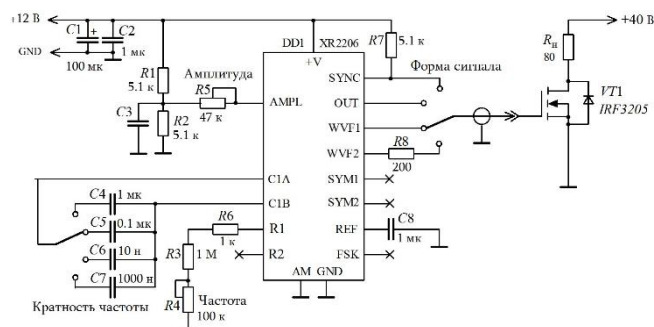


Рис. 3. Принципиальная схема установки.

Схема усилителя была смоделирована в среде Multisim. Результаты моделирования при гармоническом входном воздействии представлены на рис. 4.

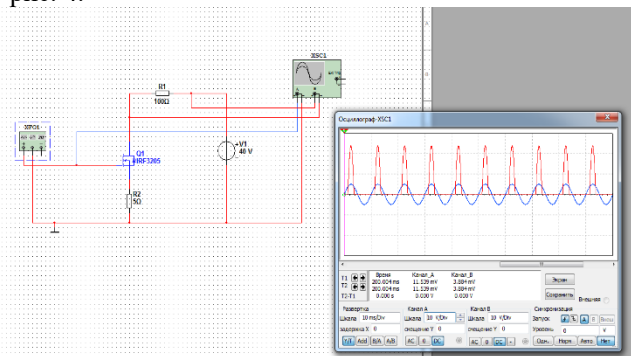


Рис. 4. Результаты моделирования в среде Multisim.

Исследования показали, что особое влияние на удельную скорость изменения концентрации оказывает именно форма сигнала (напряжения, тока): удельная скорость обратно пропорциональна площади под кривой изменения силы тока или напряжения [2]. При треугольной форме тока наблюдается интенсификация процесса до 36% относительно постоянного тока, в то время как при прямоугольной – экстенсификации до 65%. Частота подводимого к электродам напряжения влияет на коэффициент разделения катионов натрия и кальция. Наибольший коэффициент разделения наблюдался при частоте 15 кГц. Коэффициент разделения при частоте 150 Гц и при постоянном токе примерно равны.

Выводы

Проектирование вторичных источников питания для химико-технологических систем является насущной задачей для инженеров и исследователей этой отрасли промышленности. Большие перспективы видятся в использовании генераторов сигналов специальной формы для проведения операций фильтрации и разделения растворов. Кроме того, управляемые вторичные источники питания становятся неотъемлемой частью оборудования для проведения диффузионных технологических процессов, а также процессов коагуляции и флоккуляции.

Список литературы

1. Быков В.И., Щедрин П.А., Ильина С.И., Логинов В.Я., Свитцов А.А. Исследование нестационарного электролиза. «Успехи в химии и химической технологии». ТОМ XXXIV. 2020. № 3
2. Ситников А.В., Ситников И.А. Электротехнические основы источников питания: Учебник / А.В. Ситников, И.А. Ситников – М.: КУРС: ИНФРА-М, 2017. 240 с.
3. Ситников А.В., Масленникова С.И., Ситников И.А. Универсальный микропроцессорный блок с открытыми каналами ввода-вывода: Радиооптика (МГТУ им. Н.Э. Баумана) (сетевое издание), 2015. - № 2. стр. 47-68.

УДК 667.661

Зырянова Е. Д., Зубарев А. М., Меньшиков В. В.

Проектирование линии по нанесению порошковых красок

Зырянова Евгения Денисовна – студент группы ТМ-46; zevgenia0304@gmail.ru .

Зубарев Андрей Михайлович – старший преподаватель кафедры логистики и экономической информатики.

Меньшиков Владимир Викторович – д.т.н., профессор кафедры логистики и экономической информатики
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрена возможность применения программного обеспечения AutoCAD для проектирования линии порошковых красок на основе составленного алгоритма. Проведен анализ востребованности порошковых красок на рынке России, построена IDEF0-диаграмма процесса проектирования, на основе которой создан чертеж линии по нанесению порошковых красок.

Ключевые слова: порошковые краски, моделирование, алгоритм, проектирование.

Design of a powder coating line

Zyryanova E. D., Zubarev A. M., Menshikov V. V.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the possibility of using AutoCAD software to design a line of powder coatings on the basis of the compiled algorithm. The analysis of demand for powder paints in the Russian market is carried out, IDEF0-diagram of the design process is constructed, on the basis of which the drawing of the line for powder paints application is created.

Key words: powder coatings, modeling, algorithm, design.

Введение

С увеличением сложности процессов и требований к качеству продукции, становится все более важным использование специализированных программных средств для проектирования и оптимизации производственных процессов.

На начальных этапах проектирования объекта для нанесения порошковых красок был изучен их рынок в России. По итогам 2022 г. потребление ЛКМ в России составило 1,99 млн тонн, а на 2023 г. прирост составил порядка 4%, т.е. общий объем достиг 2,07 млн тонн в год. При этом доля импорта составила 17,5% порошковых красок [1]. Таким образом, актуальной остается идея увеличения количества производимых порошковых красок как путем усовершенствования существующих производств, так и путём создания новых.

Теоретическая часть

Порошковые краски были разработаны не только с целью придать изделиям привлекательный внешний вид и обеспечить надежную защиту окрашиваемым поверхностям, но и уменьшить затраты на покраску и вред, наносимый окружающей среде. Порошковые краски безопасны для окружающей среды, т.к. не содержат растворителя. Поэтому выбросы в атмосферу полностью отсутствуют. Порошковые краски обладают такими ценными свойствами, как:

- высокие защитные свойства покрытий на их основе;
- относительная простота и экономичность процесса получения покрытий;
- практически безотходная технология покрытия;

- высокая скорость формирования покрытий.

Также, использование порошковых красок позволяет расширить сырьевую базу лакокрасочной промышленности, т.к. дает возможность использования высокомолекулярных полимеров, нерастворимых и труднорастворимых в традиционных лакокрасочных растворителях.

Аналитическая часть

Процесс проектирования окрасочной линии включает следующие основные процедуры:

- анализ содержания заявки на изготовление окрасочной линии и разработка проектного задания;
- выбор стандартного проекта или разработка нового технологического решения;
- подготовка технического предложения на разработку и изготовление окрасочной линии;
- анализ и утверждение технического предложения;
- расчёт и оценка материальных и финансовых ресурсов проекта, подготовка коммерческого предложения;
- составление проекта и оформление договора (контракта) на выполнение работ.

Реализованный алгоритм и программно-информационное обеспечение на его основе позволяет учесть все указанные требования на этапе проектирования, произвести расчет параметров оптимальной работы окрасочной системы в целом, с учетом требований заказчика.

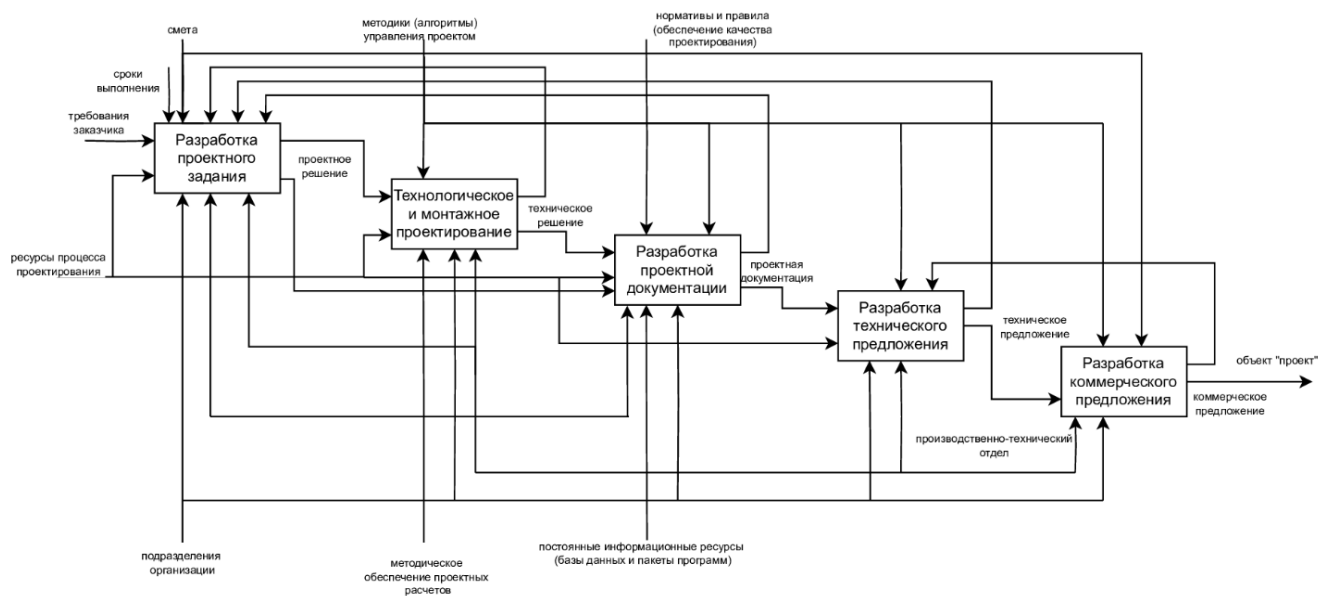


Рис.1. IDEF0-диаграмма проектирование окрасочной линии [2]

Логико-информационная модель в нотации IDEF0 предназначена для описания процесса проектирования окрасочной линии, с помощью которой можно понять, какие объекты служат входным ресурсом для процессов, какие результаты получаются в результате проведения работ, что можно рассмотреть в качестве управляющего фактора и какие ресурсы необходимы для осуществления процесса. Анализ диаграммы IDEF0 может выявить потенциальные риски и области, требующие смягчения, помогая управлять своими операциями [2, 3].

1. На первом этапе бизнес-процесса в проектно-технологическом отделе (ПТО) на основании требований заказчика происходит выбор технологии нанесения покрытия. При выборе технологии используются информационные ресурсы в виде базы данных и методика организации запросов к ее содержанию. На основе анализа ресурсов процесса проектирования, включенных в библиотеку проектов, определяется наличие подходящего стандартного проекта окрасочной линии или подтверждается его отсутствие. По результатам выполнения этапа бизнес-процесса формируется проектное задание, в которое включаются требования заказчика и описание выбранной технологии нанесения покрытия, а также график выполнения проекта в соответствии со сроками выполнения. Если существует подходящий стандартный проект, то проектное задание со ссылкой на него, передается в конструкторский отдел (КО) для формирования проектной документации. Если такого проекта нет, то проектное задание возвращается в ПТО для разработки нового технологического решения.

При отсутствии возможности реализации проектного задания по причине технологических ограничений процесса, недостаточной площади для монтажа оборудования, превышения сметы — информация об этом возвращается на этап разработки проектного

задания (обратные связи по управлению на диаграмме IDEF0), и тогда используются ресурсы проектирования для выбора альтернативной технологии или согласуются и корректируются требования заказчика.

2. При разработке нового альтернативного технологического решения полученное из ПТО проектное задание вместе с ресурсами процесса проектирования, служат основой для разработки технологической схемы новой окрасочной линии. Результаты проектирования включаются в технологическое решение, анализируемое также с точки зрения компоновки технологической установки на заданной заказчиком площади, обеспечения ресурсами и соблюдения требований экологической и технологической безопасности. При формировании технологического решения, в качестве постоянных ресурсов бизнес-процесса используются вычислительные комплексы автоматизированного проектирования (информационные ресурсы) и методики проектных расчетов. Алгоритмы управления проектом обеспечивают управление процессом проектирования, включающего получение основного и альтернативных технологических решений в соответствии с нормативами и правилами проектирования, оценку затрат на выполнение работ и приближенную стоимостную оценку альтернативных технологических решений. Полученное технологическое решение передается в КО для разработки проектной документации. Если технологическое решение найти не удалось, информация об этом с указанием возникших проблем его реализации возвращается на стадию разработки проектного решения.

3. Стадия разработки проектной документации, выполняемая в КО, включает следующие основные операции: формирование спецификации оборудования, составление технологического регламента, подготовка графической документации.

Для выполнения работы используются информационные ресурсы в виде баз данных, программных комплексов и методическое обеспечение проектирования, реализованное в виде шаблонов для стандартных проектных решений. Использование готовых модулей (ресурсы процесса проектирования), для которых выполняется адаптация решения в соответствии с требованиями разрабатываемого проекта, позволяет повысить качество решения, сократить сроки проектирования и снизить затраты на выполнение проекта.

Проектная документация является основой для составления технического предложения. В случае проблем с реализацией проектного решения информация об этом возвращается в ПТО для внесения корректив в проектное задание. Необходимо отметить, что наличие ресурсов проектирования на всех стадиях разработки проекта позволяет уменьшить вероятность возврата на предыдущие этапы, а в случае возврата быстро найти выход из проблемы за счет наличия альтернативных проектных решений.

4. Разработка технического предложения выполняется в ПТО. Использование информационных ресурсов в виде шаблонов для оформления графической документации позволяет сократить сроки проектирования и обеспечить высокое качество документации. Техническое предложение обсуждается с заказчиком и в случае положительного решения разрабатывается коммерческое предложение.

5. Коммерческое предложение составляется в производственно-техническом отделе. В документ, кроме информации, содержащейся в техническом предложении, включается расчет материальных ресурсов для выполнения работ и составляется окончательная смета на реализацию проекта. Все расчеты выполняются с учетом соблюдения нормативов и правил расчета материальных и финансовых ресурсов. Для упрощения структуры IDEF0-диаграммы в нее не включены некоторые обязательные процедуры, присутствующие на всех стадиях проектирования, к которым относятся: занесение новых проектных решений в библиотеку ресурсов процесса проектирования; контроль и управление процессом проектирования со стороны его владельца — лица, принимающего решение; приближенная оценка стоимости проектного решения на стадиях проектирования, что необходимо для упорядочивания альтернативных решений; учет подразделений организации, участвующих в разработке проекта, но не включенных в IDEF0-диаграмму; вспомогательные проектные операции. Учет этих процедур, может быть, выполнен на следующих этапах декомпозиции IDEF0-диаграммы.

Практическая часть

Техническое задание заказчика:

1. Общие сведения о технологии:

Технология автоматического нанесения порошковых красок на колесные диски; количество технологических линий (потоков) — 1, количество стадий — 5 (ванна обезжиривания, ванна

фосфатирования, промывка, покрасочная камера, печь полимеризации);

2. Перспективы производства:

Производительность 50 шт/ч, количество смен в день: 2, рабочее время смены 6 часов

3. Характеристика производимой продукции:

Размер изделия (диаметр) 250 мм — 500 мм, вес изделия 10-14 кг

4. Метод подготовки поверхности (погружные ванны, ручная протирка, агрегат струйной обработки поверхности), метод покраски (ручной, роботизированный), в том числе дополнительные необходимые установки/оборудования на линии:

Подготовка поверхности — погружные ванны, метод покраски — роботизированный

5. Описание технологического процесса и схемы:

Зона загрузки изделий — место навешивания изделий вручную, подлежащих обработке, на конвейер.

- Тоннель подготовки поверхности предназначен для обезжиривания, фосфатирования и промывки изделий перед окраской. Тоннель состоит из 2-х основных секций:

- Камеры горячего обезжиривания с нанесением фосфатного слоя, в которой горячий химический раствор, всасываемый из ванны центробежными насосами, подается в форсунки и распыляется на изделия под давлением. Таким образом, происходит постоянная циркуляция жидкости, которая обеспечивает как механическую, так и химическую обработку деталей и улучшенную адгезию краски.

- Камеры промывки, в которой изделие подвергается дождеванию чистой водой для удаления химических растворов, при прохождении через специальные рампы с форсунками. На выходе из тоннеля происходит обдув изделия.

- Сушильная печь предназначена для полного высушивания изделий, а также для предварительного их нагрева при температуре до 120°C.

- Камера порошковой окраски предназначена для нанесения порошковых покрытий укомплектована 2 роботами-манипуляторами для автоматического нанесения порошковых покрытий.

- Печь полимеризации предназначена для отвердевания порошковой краски при температуре 200°C.

- Зона охлаждения предназначена для остывания изделия естественным способом.

- Зона снятия изделий, предназначена для съема окрашенной продукции.

6. Размеры помещения, тип используемой энергии:

Высота помещения — 10 м, длина — 27 м, ширина — 17 м. Тип энергии — электроэнергия

На основе технического предложения (таблицы 1-3), обработанного алгоритмом, был построен чертеж с помощью программного обеспечения AutoCAD. (Рис. 2)

Таблица 1. Технические характеристики камеры порошкового окрашивания.

№	Наименование показателя	Величина
1	Габариты рабочего проема (ШхВ) не менее, мм	1500х1800
2	Габаритные размеры камеры (ШхВхГ) не более, мм	4000х2700х500
3	Рабочая глубина камеры не менее, мм	1200
4	Эффективность фильтрации	97-98% (частицы >10 мкм)
5	Установленная электрическая мощность не более, кВт	5,0
6	Энергопотребление	220/400 В, 50 Гц

Таблица 2. Технические характеристики камеры полимеризации.

№	Наименование показателя	Величина
1	Рабочие размеры камеры (ШхВхГ) не менее, мм	6000х2700х3500
2	Габаритные размеры транспортного проема не менее (ШхД), мм	2000х2000
3	Способ нагрева	Конвективный
4	Тип энергоносителя	Электроэнергия
5	Электрическая мощность камеры не более, кВт	42
6	Максимальная температура сушки, °С	200
7	Минимальная температура сушки, °С	180

Таблица 3. Технические характеристики установки

№	Наименование показателя	Величина
1	Входящее напряжение	220 В
2	Частота	50/60 Гц
3	Рабочий температурный диапазон, °С	0 - +40
4	Вес без порошковой краски	258 кг
5	Размер линии	24000х6000х13000

Все приведенные характеристики будут уточнены на стадии «Технический проект»

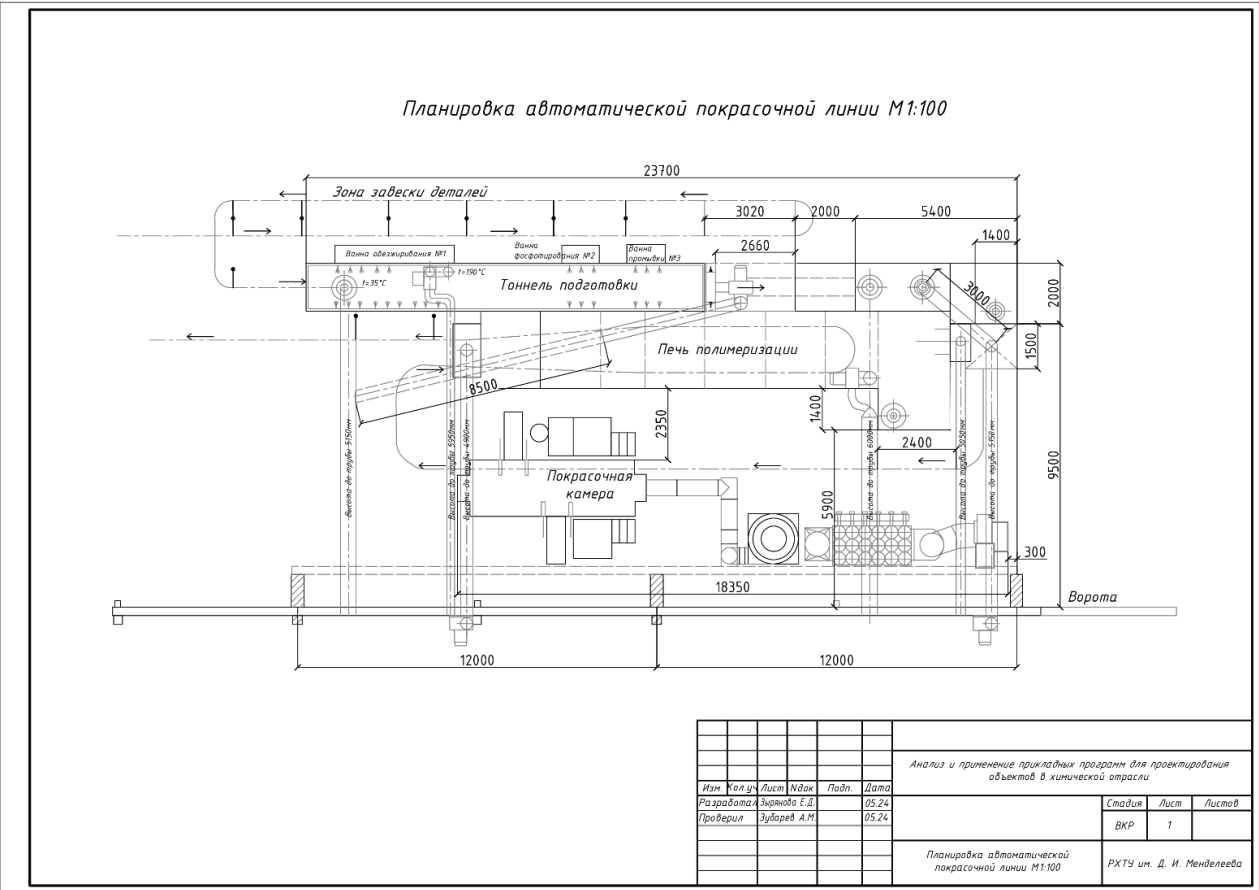


Рис.2. Чертеж покрасочной линии.

Заключение

С каждым годом потребление порошковых красок увеличивается, перспективы рынка в России остаются положительными, следует работать над его расширением.

Используя данные, полученные в результате обработки технического предложения алгоритмом, была спроектирована линия для нанесения порошковых красок. Линия окрашивания представляет собой систему, обеспечивающую автоматизированный процесс покрытия деталей краской. Построена и описана диаграмма IDEF0, при помощи которой можно учесть все недостатки и риски процесса проектирования на этапе планирования.

Список литературы

1. Нестерова, А. Г. Современное производство порошковых лакокрасочных материалов в России / А. Г. Нестерова, Ю. Г. Кирпаль // Химическая промышленность сегодня. – 2022. – № 4. – С. 44-52. – ISSN 2713-2854
2. Управление проектированием и эксплуатацией производственных линий получения и нанесения порошковых красок / В. С. Болдырев, В. В. Меньшиков, А. М. Зубарев [и др.] // Лакокрасочные материалы и их применение. – 2024. – № 3. – С. 37-44. – ISSN 0130-9013
3. Болдырев В.С., Кузнецов С.В., Меньшиков В.В. Инновационное развитие малотоннажных научно-производственных предприятий лакокрасочной промышленности : моногр. М. : Пэинт-медиа : 2021. 184 с.

УДК 676.011:667.6

Нестерова А.В., Зубарев А.М., Меньшиков В.В.

Анализ способов интенсификации производства лакокрасочных материаловНестерова Алиса Витальевна – студент группы ТМ-46; alisa2002nesterova@mail.ru

Зубарев Андрей Михайлович – старший преподаватель кафедры логистики и экономической информатики.

Меньшиков Владимир Викторович – профессор, д.т.н., профессор-консультант кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В статье рассмотрена концепция инновационных «пэйнт-технологий», преимущества порошковых красок, способы интенсификации производств химической промышленности. Разработан алгоритм выбора способа интенсификации и рассчитана себестоимость килограмма порошковой краски.**Ключевые слов: порошковые краски, производство, интенсификация, режимно-технологические методы, аппаратно- конструктивные методы, лакокрасочные материалы.***Analysis of ways to intensify the production of paints and varnishes**

Nesterova A.V., Zubarev A.M., Menshikov V.V.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

*The article discusses the concept of innovative "paint technologies", the advantages of powder paints, and ways to intensify the production of chemical industry. An algorithm for selecting an intensification method has been developed and the cost per kilogram of powder paint has been calculated.**Keywords: powder paints, production, intensification, regime-technological methods, hardware-constructive methods, paint and varnish materials.***Введение**

Лакокрасочная промышленность в настоящий момент является одной из наиболее востребованных, перспективных и динамично развивающихся отраслей химической промышленности. Это объясняется тем, что лакокрасочная продукция применяется во многих сферах жизни.

Самым стремительно растущим сектором в лакокрасочной промышленности является производство порошковых красок, и рост его развития в России в последние периоды составил 15-20% в год. Рост производств данного вида красок происходит за счет экологичности, высокой стойкости. Порошковые краски широко используются в автомобильной промышленности, мебельном производстве, строительстве, машиностроении и других отраслях. Они идеально подходят для окраски металлических деталей, алюминиевых конструкций, дверей, ограждений, рам окон, а также для декоративной отделки.

Технологии постоянно развиваются, что позволяет улучшить качество продукции и эффективность её производства. Существуют различные способы интенсификации производства. На примере порошковых красок рассмотрим эти способы интенсификации.

Основная часть

После падения промышленного производства в России в конце 90-х годов XX века, появилась возможность улучшить продукцию, производимую в нашей стране и увеличить её конкурентоспособность. Примерно в тоже время на заседании Международной ассоциации производителей и потребителей лакокрасочных материалов и пигментов (МААП),

Российского химического общества им. Д.И. Менделеева и представителей Миннауки была предложена концепция инновационных «пэйнт-технологий», обобщающая наукоёмкие технологии в производстве и применении лакокрасочных материалов (ЛКМ) и характеризующая научно-технический прогресс в области окраски различных поверхностей и создания защитных покрытий [1]. Были выделены основные направления «пэйнт-технологий»:

- экологически безопасные ЛКМ (водные, порошковые, с высоким сухим остатком, радиационного отверждения);
- современные технологии антикоррозионной защиты металлоизделий, газо- и нефтепроводов, хранилищ;
- гибкие блочно-модульные малоотходные схемы производства ЛКМ;
- эффективные безотходные системы нанесения ЛКМ;
- ЛКМ для покрытий со специальными свойствами (судостроение, авиационная промышленность, космос и др.).

Благодаря этим направлениям «пэйнт-технологий» есть возможность развивать лакокрасочную отрасль России на высоком уровне, находиться в русле мировых тенденций. Одним из примеров успешного применения концепции инновационных «пэйнт-технологий» - развитие производств порошковых красок.

Порошковые ЛКМ представляют собой твердые дисперсии, содержащие специальные смолы, которые

образуют пленки; пигменты, наполнители и функциональные добавки, которые придают разные свойства конечному продукту. Порошковые ЛКМ подразделяются на две основные группы: термопластичные и термореактивные.

Порошковые ЛКМ один из образцов направления экологически безопасных ЛКМ. Данные покрытия обладают рядом преимуществ [2].

Плюсы порошкового покрытия заключаются в долговечности, эффективности и минимальном негативном влиянии на окружающую среду. Эта технология не использует никаких тугоплавких и токсичных жидких растворителей, поэтому она практически безопасна. Отсутствие растворителей приводит к дополнительной экономии затрат на краску. Кроме того, выбор цветов и текстур практически неограничен.

В сложившейся геополитической ситуации производство порошковых красок и лакокрасочных материалов в России затруднено. Большое количество сырья для их создания поставлялось из-за границы. Основными поставщиками являлись Германия, США, Франция, Турция и Греция. Поставки материалов для производства существенно снизилось или прекратилось, в следствии того, что продукцию, произведенную с помощью их можно использовать в военной промышленности и других смежных сферах.

Порошковые материалы, производимые в нашей стране, не обладают высоким качеством, износостойкостью и долговечностью. Для решения этих проблем необходимо повысить эффективность производства.

Одним из способов усовершенствования производства и улучшения качества производимой продукции является интенсификация процесса [3].

Чтобы выбрать наиболее подходящий способ интенсификации производства были составлены контекстная диаграмма (рис. 1) и IDEF0 диаграмма (рис. 2). IDEF0 диаграмма включает в себя 4 функциональных блока. Задаваемым параметром является техническое задание на усовершенствование процесса производства порошковых красок, а итоговый результат – показатели продукта и способ интенсификации процесса, который характеризуется выбранным методом интенсификации, расчётом себестоимости и объёма производства порошковой краски.

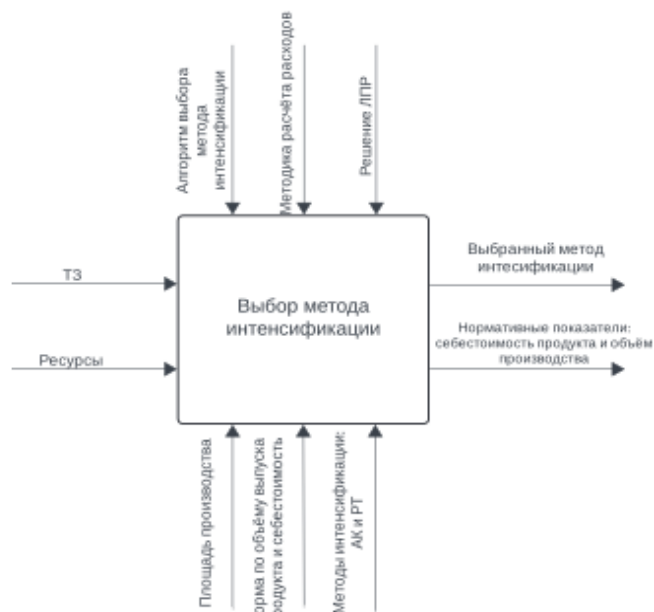


Рисунок 1 - Контекстная диаграмма.

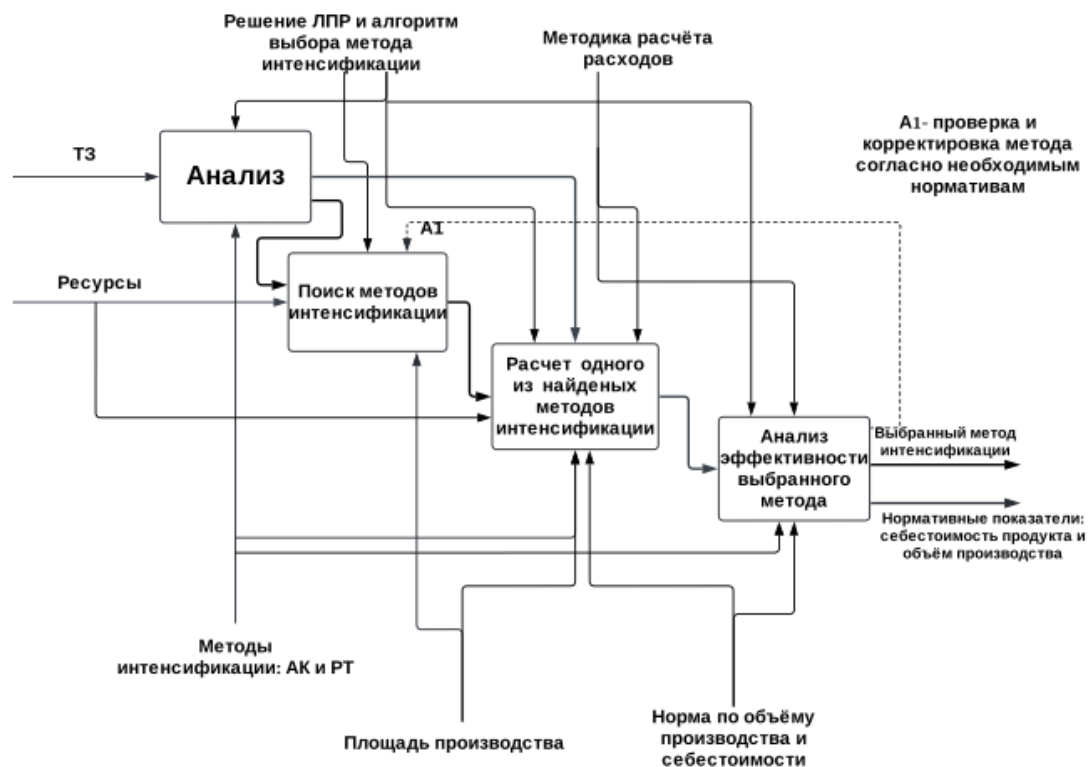


Рисунок 2- IDEF0 диаграмма алгоритма выбора способа интенсификации производства порошковых красок.

После составления IDEF0 диаграммы необходимо описать каждый функциональный блок:

- **Функция 1. Анализ технического задания на интенсификацию процесса производства порошковой краски.** Цель: опираясь на ТЗ и алгоритм выбора способа интенсификации утвердить необходимость в усовершенствовании производства. Входными ресурсами являются информация о проекте и предприятии, где будет произведена интенсификация производства. Переменные ресурсы: варианты способов интенсификации. Постоянные ресурсы: информация о способах интенсификации АК или РТ, на основе которых будет проводиться усовершенствование. Алгоритмы включают в себя экспертную систему «решение ЛПР» и последовательность действий для выбора способа интенсификации. Итоговый результат функции - обработанное ТЗ, информация о методе интенсификации.

- **Функция 2. Поиск методов интенсификации.** Цель: изучить методы интенсификации (АК или РТ) для данного производства, найти подходящий метод. Входные ресурсы: информация о методах интенсификации процессов, обработанное ТЗ, информация о производстве. Переменные ресурсы: бюджет для реализации, изменяемые информационные ресурсы. Постоянные ресурсы: площадь производства, сведения о способах интенсификации, технологическая схема. Алгоритмы управления представлены экспертной системой «Решение ЛПР» и алгоритмом выбора метода интенсификации. Выходной ресурс – планируемый для использования метод интенсификации процесса производства.

- **Функция 3. Расчёт одного из найденных способов интенсификации.** Цель: провести расчёты выбранного метода интенсификации процесса. Входные ресурсы: один из способов интенсификации, информация о производстве и оборудовании. Переменные ресурсы: затраты ээ, расход сырья,

изменяемые технологические параметры ХТС. Постоянные ресурсы: площадь производства, нормы по объёму и себестоимости продукции. Алгоритмы управления включают в себя алгоритмы выбора метода интенсификации, экспертную систему «Решение ЛПР» и методику расчётов расходов на усовершенствование. Выходной ресурс: описанный и рассчитанный метод интенсификации процесса выбранный из АК и РТ методов, посчитанные расходы на применение этого метода, рассчитаны технологические параметры.

- **Функция 4. Анализ эффективности выбранного метода интенсификации.** Цель: произвести расчёт эффективности выбранного метода усовершенствования для данного производства. Входные ресурсы: рассчитанные технологические параметры способа интенсификации, посчитанные расходы. Переменные ресурсы: технологическая схема процесса, технологические параметры ХТС, оборудование. Постоянные ресурсы: площадь производства, нормы по объёму производства и себестоимости продукции, сведения о способе интенсификации Алгоритмами, которые определяют данную функциональную модель, методика расчёта расходов, алгоритм выбора метода интенсификации и экспертная система «Решение ЛПР». Выходными ресурсами являются – показатели эффективности выбранного метода интенсификации, показатели объёма производства и себестоимости продукции и окончательно выбранный метода интенсификации. В случае, если при расчёте показатели производства не улучшатся, то необходимо будет искать новые методы для интенсификации процесса.

Данный алгоритм применим для выбора способа интенсификации производства порошковых красок. Он позволяет рассчитать какой метод эффективный, увеличиться или уменьшатся затраты на сырьё, вырастет ли объём производства и какое влияние окажет на себестоимость продукта (таб. 1 и 2)

Таблица1. Себестоимость одного килограмма порошковой краски без усовершенствования

№ п/п	Наименование статей затрат	Цена, руб./кг	Количество	Сумма, руб.
1	Сырье и основные материалы			
1.1	Плёнообразователи	403	0,55	221,65
1.2	Отвердители	258	0,05	12,9
1.3	Наполнители	87	0,33	28,71
1.4	Пигменты	100	0,063	6,3
1.5	Функциональные добавки	82	0,05	4,1
1.6	Бензоин	634	0,04	25,36
	Итого сырья для получения		1,083	299,02
2.1	Отходы и потери			
	Потери пигмента	100	0,05	5
	Пыль	-	0,01	-
	Итого		0,06	5

Продолжение таблицы 1

№ п/п	Наименование статей затрат	Цена, руб./кг	Количество	Сумма, руб.
3	Энергетические затраты			
	Электроэнергия, кВт/ч	2285,2	0,0006	1,37
4	Выбросы загрязняющих веществ	-	0,05	-
5	Итого затрат			305,4

Таблица 2. Себестоимость одного килограмма порошковой краски с использованием ABC

№ п/п	Наименование статей затрат	Цена, руб./кг	Количество	Сумма, руб.
1	Сырье и основные материалы			
1.1	Плёнкообразователи	403	0,44	177,32
1.2	Отвердители	258	0,04	10,2
1.3	Наполнители	87	0,264	23
1.4	Пигменты	100	0,0504	5,04
1.5	Функциональные добавки	82	0,04	3,3
1.6	Бензоин	634	0,032	20,3
	Итого сырья для получения		0,8664	239,16
2.1	Отходы и потери			
	Потери пигмента	100	0,05	5
	Пыль	-	0,01	-
	Итого		0,06	5
3	Энергетические затраты			
	Электроэнергия, кВт/ч	1828,1	0,0006	1,1
4	Выбросы загрязняющих веществ	-	0,05	-
5	Итого затрат			245,3

В качестве метода усовершенствования внедряем в технологию аппарат вихревого слоя (ABC). Аппарат с вихревым слоем ферромагнитных (ABC) представляет собою очень простое устройство. Это труба из немагнитного материала (в ABC разрабатываемых авторами конструкций – нержавеющая сталь). Трубу охватывают электромагнитные индукторы, преобразующие энергию переменного электрического тока, протекающего через эти индукторы, в энергию тоже переменного магнитного поля.

Применив алгоритм для выбора метода интенсификации производства порошковых красок, рассчитали себестоимость одного килограмма порошковой краски. При производстве порошковой краски без усовершенствования технологии производства себестоимость составила – 305,4 руб./кг. После применения одного из методов интенсификации, выбранного благодаря алгоритму, показанному в IDEF0 диаграмме себестоимость составила 245,3 руб./кг.

Рассчитав экономию, получили, что за год она составит 4 003 922, 7 руб. Сам аппарат стоит 5 миллионов рублей. Тогда окупаемость составит 1 год и 2 месяца.

Заключение

Внедрение аппарата вихревого слоя позволило уменьшить расход сырья и затраты на электроэнергию. Так же с помощью данного способа интенсификации можно снизить уровень шума в помещении, уменьшить площадь производственного участка.

Построенный бизнес-процесс по выбору метода интенсификации производства порошковых красок позволяет рассчитать на сколько эффективен тот или иной вид усовершенствования. Благодаря ему можно улучшить технологию, уменьшить затраты на сырьё и понизить себестоимость продукции. Так же этот алгоритм может помочь в развитии лакокрасочного производства.

Список литературы

1. Болдырев В.С., Кузнецов С.В., Меньшиков В.В. Инновационное развитие малотоннажных научно-производственных предприятий лакокрасочной отрасли. Монография. Москва.: Пэйнт-Медиа, 2021. — 184 с.
2. Яковлев А.Д. Порошковые краски. - Л.: Химия, 1987. – 216 с.
3. Структурное моделирование химико-технологических процессов: учеб. пособие / Б.Б. Богомолов. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2016. 148 с

УДК 678.8

Шарапова И.И., Меньшиков В.В., Болдырев В.С.

Перспектива создания высокотемпературных полимерных композиционных материалов

Шарапова Ирина Игоревна – аспирантка кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии, sii.96@mail.ru;

Меньшиков Владимир Викторович – д.т.н., профессор кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Болдырев Вениамин Станиславович – к.т.н., доцент кафедры химии, «МГТУ им. Н.Э. Баумана», Россия, Москва, 105005, 2-я Бауманская улиц, дом 5, стр. 4.

В статье дается описание возможности создания высокотемпературного полимерного композиционного материала на основе эпоксидного связующего и высокомодульного армирующего материала.

Ключевые слова: эпоксидные смолы, полимерные композиционные материалы, термопластичные и термореактивные матрицы, высокотемпературный полимерный композиционный материал

The prospect of creating high-temperature polymer composite materials

¹Sharapova I.I., ¹Menshikov V.V., Boldyrev V.S.

¹D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

²Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

The article describes the possibility of creating a high-temperature polymer composite material based on epoxy binder and high modulus reinforcing.

Keywords: epoxy resins, polymer composite materials, thermoplastic and thermosetting matrices, high-temperature polymer composite materials.

Введение

Разработка новых конструкционных полимерных композиционных материалов (ПКМ), обладающих повышенными эксплуатационными характеристиками (сочетание высоких термостойкости, трещиностойкости и ударной прочности), представляет собой актуальную задачу современного материаловедения. [1]

При разработке современных композиционных материалов, представляющих собой многокомпонентную систему, решающее значение отводится матрице (связующее), которая обеспечивает монолитность материала и основные эксплуатационные свойства композита. [1]

По своему химическому строению полимерные матрицы (связующие) можно разделить на два основных вида:

- термопластичные матрицы на основе линейных полимеров;

- термореактивные (реактопласты) матрицы являются полимерными реакционными системами, отверждаемые термически или путем введения в них различных отвердителей. [2]

Термореактивные (реактопласты) полимерные материалы на основе жидких или твердых, способных при нагревании переходить в вязкотекучее состояние реакционных олигомеров, отверждаемых при повышенной температуре. [2]

Практически все выпускаемые термопласты могут служить основой связующих, используемых в составе композиционных термопластичных материалов (КТМ). В составе рецептур термопластичных связующих используют как не модифицированные полимеры, так и их смеси с такими

компонентами, как стабилизаторы, растворители, пластификаторы, красители. [3]

По виду реакционноспособных компонентов реактопласты подразделяются на следующие основные виды [2]:

- Эпоксидные смолы.

- Фенопласты (на основе фенолформальдегидных смол) и т.д.

Наиболее востребованным видом реактопласта являются эпоксидные смолы. Эпоксидные смолы до настоящего времени остаются очень важными и ценными компонентами для большинства эпоксидных составов, применяемых в электротехнической и радиоэлектронной промышленности, авиа-, судо- и машиностроении; в строительстве: в качестве компонентов заливочных и пропиточных компаундов, клеев, герметиков, связующих для армирования пластиков; в качестве компонентов лакокрасочных материалов и др. Объем выпуска эпоксидных диановых смол за рубежом составляет более 85%, а в России 90% от общего объема производства эпоксидов. [3]

Экспериментальная часть

Для создания высокотемпературного полимерного композиционного материала были проведены исследования на технологические свойства эпоксидного связующего, определены физико-механические характеристики углепластиков.

Предлагалось на первом этапе исследований определить теплостойкости по Мартенсу. Теплостойкость по Мартенсу определяли в соответствии с ГОСТ 21341-2014. Значения теплостойкости представлены в таблице 2, для сравнения привели данные связующего марки ЭХД-МД (ТУ В3-734-2013).

Таблица 2 – Значения теплостойкости связующих марки ТС241, ЭХД-МД

№ п/п	Марка связующего	Значения теплостойкости по Мартенсу, °С
1	ЭХД-МД	160
2	ТС241	200

Как видно из таблицы 2 высокое значение теплостойкости имеет связующее марки ТС241, по сравнению с ЭХД-МД.

Были проведены исследования по реологии связующего марки ТС241. На рисунках 1 и 2 представлены зависимости динамической вязкости связующего марки ТС241 от температуры и от времени выдержки. Динамическую вязкость определяли на вискозиметре Брукфильда марки DV2T в соответствии с ГОСТ 25271-93.

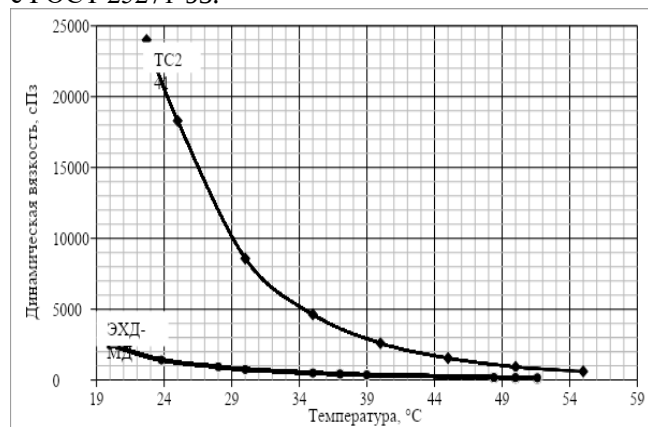


Рисунок 1 – Зависимость динамической вязкости связующих марки ЭХД-МД и марки ТС241

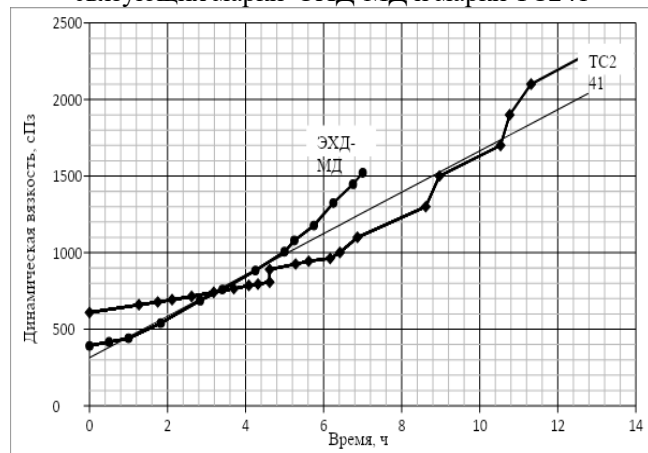


Рисунок 2 – Зависимость динамической вязкости связующих марки ТС241 и марки ЭХД-МД от времени

Оценка результатов исследований динамической вязкости (рисунков 1 и 2) связующего марки ТС241 показала, что связующее имеет высокие значения вязкостных характеристик в отличие от связующего марки ЭХД-МД. Температура переработки связующего марки ТС241 составляет 55°C.

Для оценки комплекса физико-механических характеристик углепластиков методом «мокрой» намотки были изготовлены однонаправленные

углепластики на основе нити UMT-430-12K-EP и связующих ТС241 и ЭХД-МД. Методом прессования по режиму: для ТС241 : 120°C – 1 час; 150°C – 3 часа; 180°C – 6 часов при удельном давлении 2 кгс/см²; для ЭХД-МД: 80°C – 4 часа; 130°C – 4 часа; 160°C – 5 часов при удельном давлении 2 кгс/см² были изготовлены образцы для испытаний получения физико-механических характеристик. Результаты физико-механических характеристик образцов углепластиков на основе нити UMT-430 и связующих ТС241 и ЭХД-МД представлены в таблице 3.

Таблица 3 Физико - механические характеристики углепластиков на основе нити UMT-430-12K-EP и связующих ЭХД-МД и ТС241.

№ п/п	Определяемая характеристика, размерность	Температура испытаний, °С	Результаты испытаний,	
			ЭХДМД	ТС241
1	Разрушающее напряжение при растяжении, МПа	20	1759	1805
2	Модуль упругости при растяжении, ГПа	20	254	240
3	Разрушающее напряжение при изгибе, МПа	20	1166	1096
4	Модуль упругости при изгибе, ГПа	20	282	209
5	Разрушающее напряжение при сжатии, МПа	20	639	473
6	Плотность, кг/м ³	20	1619	1540

С учетом ранее проведенных испытаний приняты следующие решения: - в рамках дальнейшей работы по созданию высокотемпературного полимерного композиционного материала необходима модификация эпоксидного связующего.

Список литературы

1. Мухаметов Р.Р., Долгова Е.В., Меркулова Ю.И., Душин М.И. Разработка бисмалеимидного термостойкого связующего для композиционных материалов авиационного назначения. Авиационные материалы и технологии, 2014, № 4, с. 53-57. DOI: 10.18577/2071-9140-2014-0-4-53-57
2. Армирующие волокна и волокнистые полимеры композиты / Перепелкин К. Е. – СПб.: Науч. Основы и технологии, 2009. – 379 с.: ил. – Библиогр. В конце глав и прил. – ISBN 978-5-91703-009-8.
3. Сорокин А.Е., Сагомонова В.А., Петрова А.П., Соловьянич Л.В. Связующие для полимерных композиционных материалов на основе термопластов (обзор литературы) Клея. Герметики. Технологии, 2022, № 1, с. 15-22. ISSN: 1813-7008.

УДК 621.793

Новиков Е.В., Шлома О.А., Абрашов А.А., Гаврилова Н.Н., Жилина О.В.

Нанесение противокоррозионных оксидно-циркониевых золь-гель покрытий методом погруженияНовиков Егор Владимирович – студент кафедры ИМиЗК; Novikov.e.v@muctr.ru

Шлома Оксана Александровна – студент кафедры ИМиЗК;

Абрашов Алексей Александрович – к.т.н., доцент кафедры ИМиЗК;

Гаврилова Наталья Николаевна – д.х.н., зав. кафедрой коллоидной химии;

Жилина Ольга Викторовна – к.х.н., доцент кафедры коллоидной химии;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрена технология нанесения цирконийсодержащих золь-гель покрытий на поверхность алюминиевого сплава АМг6 методом погружения. Исследована защитная способность и износостойкость сформированных однослойных покрытий, а также определена их толщина. Исследована возможность формирования многослойных покрытий.

Ключевые слова: золь-гель покрытия, защита от коррозии, цирконийсодержащие покрытия.

Application of anticorrosive oxide-zirconium sol-gel coatings by dip-coating method

Novikov E.V., Shloma O.A., Abrashov A.A., Gavrilova N.N., Zhilina O.V.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article considers the technology of applying zirconium-containing sol-gel coatings on the surface of aluminum alloy AMg6 by dip-coating method. The protective ability and wear resistance of the formed single-layer coatings have been investigated and their thickness has been determined. The possibility of formation of multilayer coatings has been investigated.

Keywords: sol-gel coatings, corrosion protection, zirconium-containing coatings.

Введение

До настоящего времени проблема замены токсичных противокоррозионных хроматных покрытий на основе шестивалентного хрома ещё не решена. Возможной альтернативой является золь-гель метод нанесения покрытий. Метод не требует дорогого и энергоёмкого оборудования, является экономически чистым и позволяет получать материалы сложного химического состава и структуры, а также покрытия особой чистоты с необходимыми свойствами. Метод погружения является одним из двух основных методов нанесения золь-гель покрытий. Пленки, сформированные данным методом, обладают прочностью сцепления, стойкостью к агрессивным средам и термостойкостью. [1-2]

Экспериментальная часть

Для формирования покрытий использовался 1% золь диоксида циркония со значением pH = 1,7. Определены значения ζ -потенциала и средний размер частиц исследуемого золя (таблица 1)

Таблица 1. Средний размер частиц и ζ -потенциал золя ZrO_2

	Золь ZrO_2
Средний размер частиц, нм	12,4
ζ -потенциал, мВ	31,6

Значение ζ -потенциала больше 30 мВ, что свидетельствует о стабильности данных систем. Малый размер частиц говорит о том, что покрытия будут плотными и сплошными.

Определены оптимальные параметры процесса нанесения покрытий. На основании литературных данных [3] установлена оптимальная температура (80°C) и длительность (30 мин) сушки. Исследована зависимость защитной способности покрытий, определенной по методу Акимова (ЗСА) от скорости вытягивания ($v_{\text{вытяг}}$) и температуры термообработки ($t_{\text{терм}}$) (рис. 1).

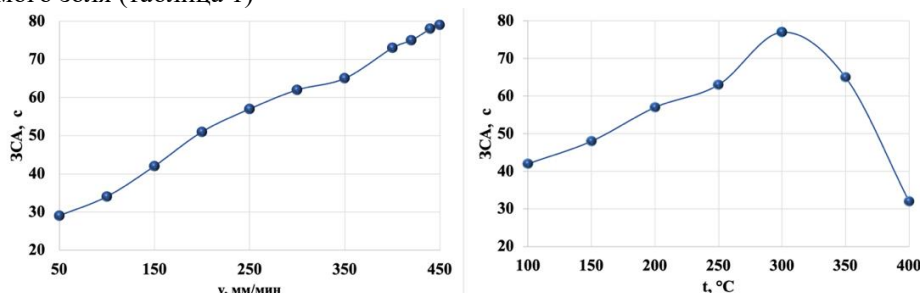


Рис. 1. ЗСА Zr-содержащих покрытий в зависимости от скорости вытягивания и температуры термообработки

На основании полученных данных определены оптимальные параметры: $v_{\text{вытяг}} = 450$ мм/мин и $t_{\text{терм}} = 300^\circ\text{C}$.

Проведены испытания износостойкости полученных покрытий в орбитальном шейкере (ASTM F735), получена зависимость тока коррозии ($i_{\text{корр}}$) от продолжительности испытаний. (рис. 2)

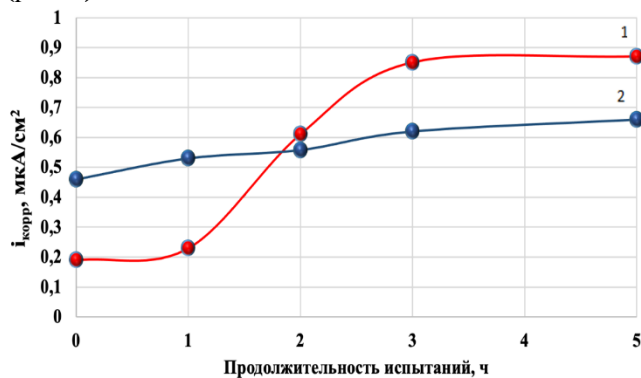


Рис. 2. Испытания однослойных Zr-содержащих золь-гель покрытий на износостойкость:

1 — Zr-содержащее покрытие; 2 — хроматное покрытие.

Показано, что золь-гель покрытия, не уступают по износостойкости хроматным покрытиям. Эллипсометрическим методом [4] определена толщина сформированных Zr-содержащих покрытий - 120 нм.

Золь-гель метод позволяет улучшить свойства сформированных однослойных покрытий путем

нанесения дополнительных слоев. Были проведены исследования многослойных покрытий. Определена ЗСА (рис. 3) и получены данные с диаграмм Эванса (таблица 2). Установлено, что скорость коррозии однослойных Zr-содержащих покрытий меньше, чем у хроматных и при нанесении последующих слоев уменьшается.

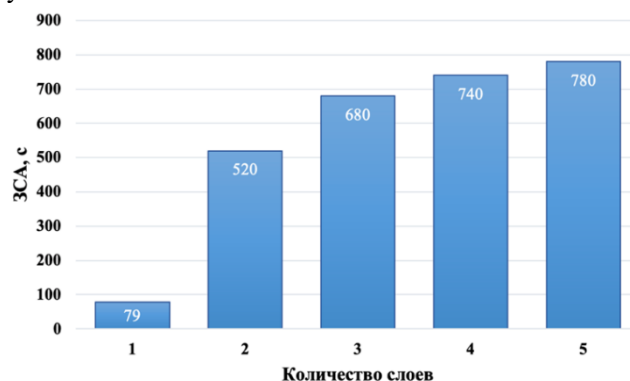


Рис. 3. ЗСА Zr-содержащих золь-гель покрытий в зависимости от количества слоев

Данные подтверждены СЭМ-фотографиями (рис. 4).

Показано, что царапин на двухслойных покрытиях становится заметно меньше, после нанесения третьего слоя поверхность становится равномерной, царапины на поверхности отсутствуют. Следует обратить внимание, что после нанесения пятого слоя покрытие начинает трескаться, что может быть связано с возросшей толщиной золь-гель покрытия.

Таблица 2. Токовые показатели коррозии хроматного и многослойных Zr-содержащих покрытий на АМг6

Кол-во слоев	АМг6	1	2	3	4	5	Cr(VI)-содер.
i , А/см ²	$1,4 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{-5}$	$1,8 \cdot 10^{-5}$	$1,7 \cdot 10^{-5}$	$1,9 \cdot 10^{-5}$	$1,5 \cdot 10^{-5}$	$4,4 \cdot 10^{-5}$

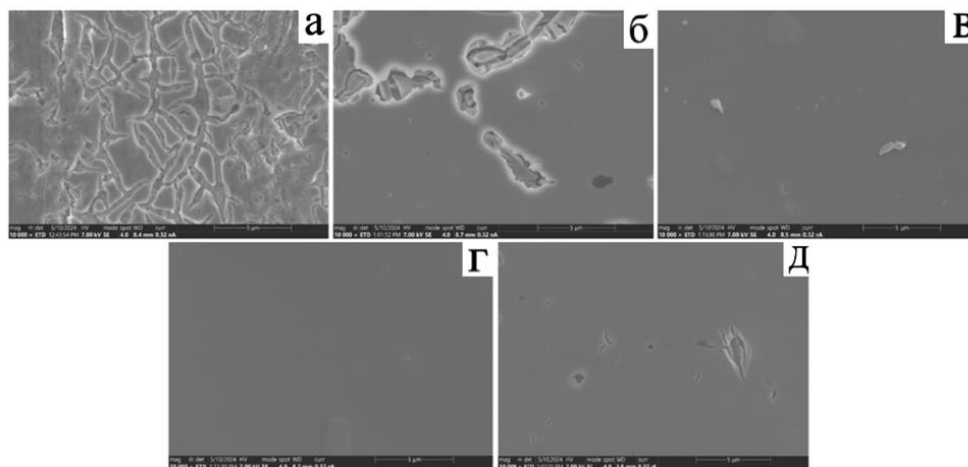


Рис. 4. СЭМ-фотографии многослойных Zr-содержащих покрытий:

а — один слой, б — два слоя, в — три слоя, г — четыре слоя, д — пять слоев.

Проведены испытания покрытий в камере соляного тумана (ISO 9227) (Рис. 5). Установлено, что время до появления первых очагов коррозии сплава АМг6 ~ 24 ч, хроматного покрытия ~ 402 ч, ZrO_2 покрытия, нанесенного в три слоя ~ 435 ч.

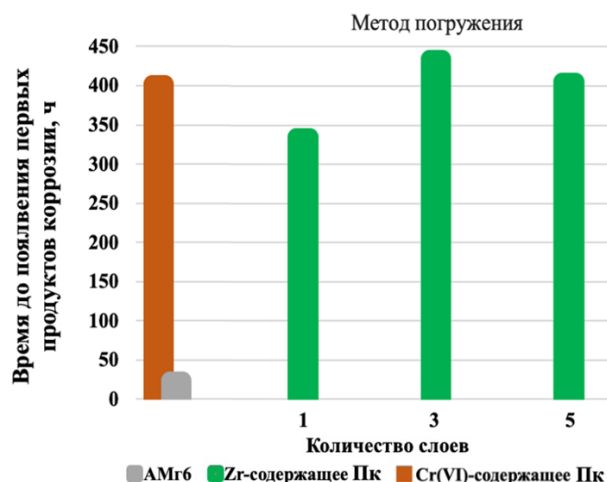


Рис. 5. Результаты коррозионных испытаний в камере соляного тумана

Заключение

Разработана технология нанесения Zr-содержащих золь-гель покрытий методом погружения. Показано, что данный метод позволяет получать равномерные и коррозионностойкие золь-гель покрытия. Zr-содержащие золь-гель покрытия не уступают хроматным по защитной способности и сопоставимы по износостойкости.

Список литературы

1. Chęćmanowski J., Szczygieł B. Effect of a ZrO_2 coating deposited by the sol-gel method on the resistance of FeCrAl alloy in high-temperature oxidation conditions // Materials Chemistry and Physics. 2013. Vol. 139. No 2–3. P. 944–952.
2. Wang D., Bierwagen G. Sol-gel coatings on metals for corrosion protection // Progress in Organic Coatings. 2009. Vol. 64. No 4. P. 327–338.
3. Евстропьев С.К., Никоноров Н.В. Жидкостные методы получения оптических наноматериалов: учеб. пособие. СПб: Университет ИТМО, 2018. 84 с.
4. Roeseler A., Korte E., Infrared Spectroscopic Ellipsometry // Handbook of Vibrational Spectroscopy. 2006. P. 1065–1090.

УДК 66.048.3:004.942

Советин Ф.С., Панкрушина А.В., Сафонова В.Д., Асеев К.М., Шумакова О.П.

Разработка компьютерной модели технологической схемы процесса улавливания фосгена и хлороводорода

Советин Филипп Сергеевич – к.т.н., доцент, зам. зав. каф. информатики и компьютерного проектирования; fsovetin@inbox.lv;

Панкрушина Алла Вадимовна – к.т.н., доцент, и.о. зав. каф. информатики и компьютерного проектирования; pankrushina.a.v@muctr.ru;

Сафонова Вера Дмитриевна – старший преподаватель, зам. зав. каф. информатики и компьютерного проектирования; safonovavd@gmail.com;

Асеев Кирилл Михайлович – ассистент каф. информатики и компьютерного проектирования; vipertree@gmail.com

Шумакова Ольга Петровна – к.т.н., доцент, заместитель декана факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; shumakova.o.p@muctr.ru

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

*В статье разработана и реализована компьютерная модель технологической схемы процесса улавливания фосгена и хлороводорода. Для создания указанной модели использован комплекс программ CHEMCAD. Выполненные расчёты конструктивных параметров теплообменников и абсорбционных колонн. Намечены пути модернизации технологической линии**Ключевые слова: модель, модуль, симулятор, колонна, алгоритм***Development of the computer model of the process flow diagram for capturing phosgene and hydrogen chloride**Sovetin F. S.¹, Pankrushina A. V.¹, Safonova V. D.¹, Aseev K. M.¹, Shumakova O. P.¹¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation*In the article was developed and realized the computer model of the process flow diagram for the capture of phosgene and hydrogen chloride. For create this model the simulator CHEMCAD was used. Calculations of the design parameters of heat exchangers and absorption columns were performed. Ways to modernize the production line have been outlined**Key words: model, module, simulator, column, algorithm.***Введение**

Газоочистка – важнейший процесс химической технологии, необходимый для очистки отходящих газов [1]. Широко применяется практически на каждом химическом предприятии [2].

Недостаток в способах, в которых амины превращаются в изоцианаты с использованием фосгена, как известно в данной области, заключается в том, что в процессе фосгенирования, как правило, используется избыток фосгена, или в том, что при фосгенировании, как правило, не расходуется весь содержащийся в реакционной смеси фосген [3]. Следовательно, в реакционной смеси, являющейся либо газообразной, либо жидкой, и возможно содержащей твердые вещества, например, когда все компоненты присутствуют в растворителе, как правило, содержится фосген [4]. Также в процессе превращения аминогруппы в изоцианатную группу получается и находится в реакционной смеси хлороводород.

Часто хлороводород выделяется из реакционной смеси и может использоваться в других процессах или использоваться в качестве исходного вещества в процессе регенерации хлора, при условии, что хлороводород очищают для удовлетворения требованиям, связанным с его дальнейшим использованием.

Для подготовки исходных данных для проектирования таких технологических схем необходимо уже на стадиях предпроектных разработок

создавать их компьютерные модели, с помощью которых решать задачи энерго- и ресурсосбережения [5]. Разрабатывать такие модели не представляется возможным без применения современных комплексов программ, позволяющих создавать «виртуальные» производства. Кроме того, использование указанных комплексов программ позволяет без значительных материальных и временных затрат осуществлять исследования указанных процессов на их моделях (осуществлять вычислительные эксперименты) [6-8].

В представленной работе с использованием комплекса проблемно-ориентированных программ CHEMCAD разработана и реализована компьютерная модель процесса очистки отходящих газов от фосгена и хлороводорода.

Описание технологической схемы процесса улавливания фосгена и хлороводорода

Исходная технологическая схема, как объект компьютерного моделирования была взята из [9] и представлена на рис. 1. Газовая смесь и абсорбент (о-дихлорбензол), в котором хорошо растворяется фосген подаются в абсорбер, представляющий собой трубчатый охлаждаемый аппарат (трубки заполнены насадкой). Коэффициент полезного действия абсорбера – 95 %. Часть о-дихлорбензола вместе с растворённым фосгеном возвращается в производственный цикл или направляется на десорбцию и последующую конденсацию фосгена. Из абсорбера смесь газов поступает в холодильник 1, где

при охлаждении до $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$ конденсируется фосген. После отделения фосгена газы направляются в каплеуловитель 2, на абсорбцию хлорводорода водой в колонну Гаспаряна. На выходе из колонны получают соляную кислоту. Последняя ступень схемы – 3 насадочные колонны (скрубберы), необходимые для санитарной очистки газов перед выбросом в атмосферу.

Описание хода моделирования технологической схемы процесса улавливания фосгена и хлороводорода

Технологическая схема процесса улавливания фосгена и хлороводорода, реализованная в среде комплекса программ CHEMCAD, изображена на рис. 2.

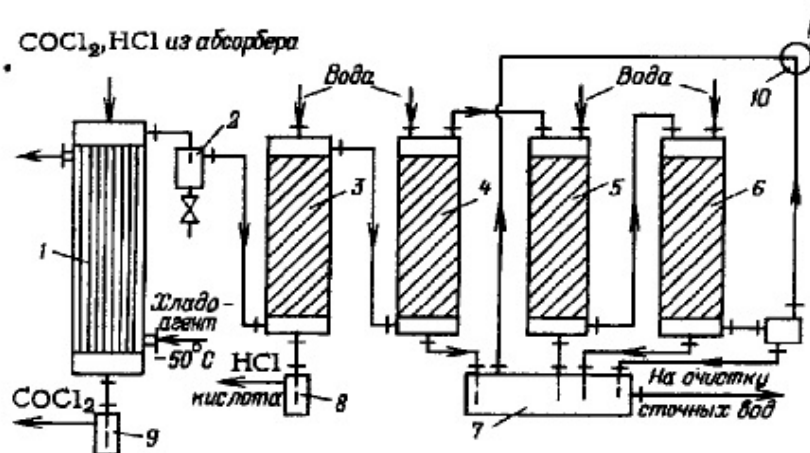


Рис. 1. Технологическая схема улавливания фосгена и хлороводорода: 1 — холодильник-конденсатор; 2 — каплеуловитель; 3 — колонна Гаспаряна; 4-6 — скрубберы; 7 — сборник разбавленной соляной кислоты; 8 — гидрозатвор для технической соляной кислоты; 9 — гидрозатвор для фосгена; 10 — вентилятор

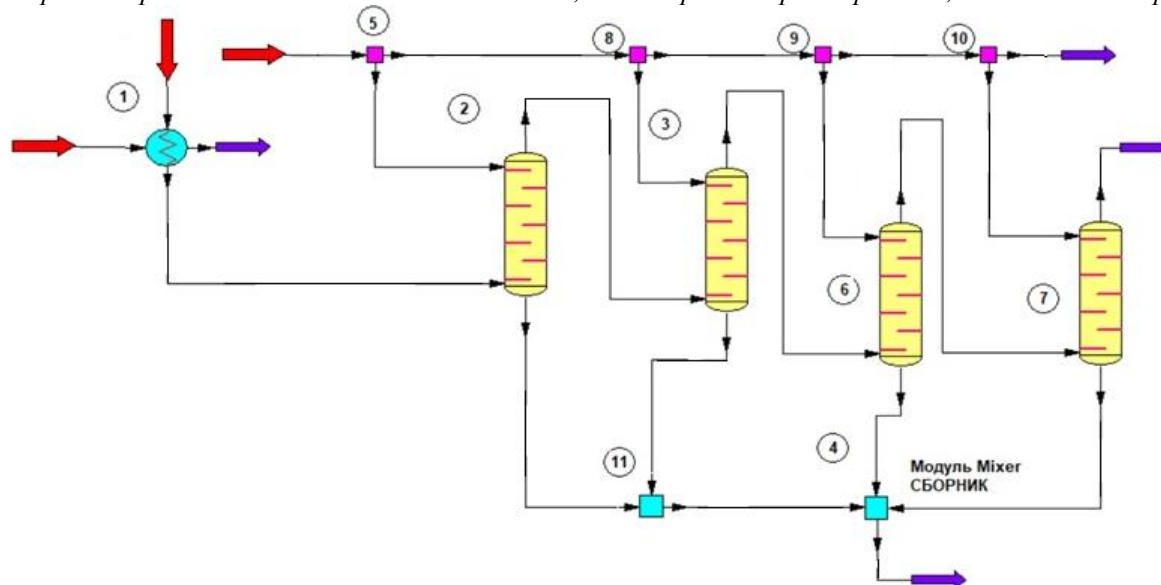


Рис. 2. Технологическая схема процесса улавливания фосгена и хлороводорода, реализованная в среде комплекса программ CHEMCAD: 1 — модуль теплообменника; 2, 3, 6, 7 — модули абсорбционных колонн; 4, 11 — модули делителей потоков; 5, 8, 9, 10 — модули делителей потоков;

Холодильник-конденсатор моделируется модулем теплообменника (рис. 2, модуль 1). Тип – кожухотрубчатый. Все параметры модуля заданы как для теплообменника-конденсатора. Результаты проектного расчёта теплообменника-конденсатора приведены в таблице 1. Колонна Гаспаряна (рис. 2, модуль 1) моделируется модулем абсорбционной колонны с использованием алгоритма метода Тиле-Геддеса [10-12]. Число тарелок – 20, № тарелки питания – 10. Скрубберы моделируются модулями абсорбционных колонн. Также используется метод Тиле-Геддеса. Число тарелок – 15, № тарелки питания

– 15. Параметры моделирования абсорбционных колонн приведены в таблице 2.

Таблица 1. Результаты проектного расчёта теплообменника-конденсатора

Характеристика	Значение
Номинальная поверхность; м^2	11.53
Требуемая поверхность; м^2	10.2
Запас поверхности; %	12.56
Коэффициент теплопередачи; $\text{Вт/К}\cdot\text{м}^2$	472
Среднегеометрическая разность температур; К	62.48
Тепловая нагрузка; МДж/ч	935

Таблица 2. Параметры моделирования абсорбционных колонн

№ колонны	Тип тарелок	Диаметр; м	Высота; м	Расход абсорбента; кг/ч
2	Колпачковые	2	10	15000
3	Ситчатые	1	7.5	10000
6	Ситчатые	1	7.5	10000
7	Ситчатые	1	7.5	10000

Для разработки компьютерной модели полной технологической схемы абсорбционной очистки использовался метод обеспечения сходимости рециклов – метод простых итераций [13]. Также использовано методическое обеспечение для компьютерного моделирования технологических линий в целом, разработанное в работе [14].

Заключение

1. Разработаны и реализованы компьютерные модели аппаратов технологической схемы абсорбционной очистки сточных вод от фосгена и хлороводорода
2. Разработана компьютерная модель полной многостадийной технологической схемы абсорбции.
3. Намечены пути модернизации данной технологической схемы.

Авторы приносят искреннюю благодарность ректору филиала «Угреша» Международного университета природы, общества и человека «Дубна», доктору технических наук, профессору Балояну Бабкену Мушеговичу за научно-методические консультации при проведении данной работы

Список литературы

1. Защита атмосферы от промышленных загрязнений. Справочное издание. ч. 1. М.: «Металлургия» 1988. 760 с.
2. Халитов Р. А., Махоткин И. А., Шарипов А. Ш., Царева О. В., Махоткина Е. А. Разработка и результаты внедрения вихревого моногидратного абсорбера триоксида серы в производство серной кислоты // Вестник Казанского технологического университета. 2010. № 10. С. 522-528.
3. Лебедев А.В., Лебедева А.Б., Шелудяков В.Д., Овчарук С.Н., Ковалева Е.А., Устинова О.Л. Кремнийорганический синтез изоцианатов. Синтез алифатических, карбоциклических и жирноароматических изоцианатов // Журнал общей химии. 2006. Т. 76. № 3. С. 493-500.
4. Толкач П.Г. Изучение механизма пульмонотоксического действия дихлорангидрида угольной кислоты // Токсикологический вестник. 2020. № 3 (162). С. 26-32.
5. Зиятдинов Н. Н. Моделирование и оптимизация химико-технологических систем // Теоретические

основы химической технологии. 2017. Т. 51. № 6. С. 613-617.

6. Гартман Т. Н., Клушин Д. В. Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики. С.-Пб.: «Лань», 2020. 404 с.

7. Пай М. О. Разработка компьютерной модели узла абсорбции для очистки технологического газа окислительной конденсации метана // Успехи в химии и химической технологии. 2017. Т. 31. № 5. С. 82-84.

8. Гартман Т. Н., Советин Ф. С. Аналитический обзор современных пакетов моделирующих программ для компьютерного моделирования химико-технологических систем // Успехи в химии и химической технологии. 2012. Т. 26. № 11 (140). С. 117-120.

9. Перевалов В.П. Колдобский Г. И. Тонкий органический синтез: проектирование и оборудование производству М.:Юрайт, 2024. — 312 с.

10. Гартман Т. Н., Клушин Д. В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов. М: «Академкнига», 2008. 415 с.

11. Николаев А.Н., Козулина О.В., Фатыхов Р.Р. Математическое моделирование процессов физической абсорбции газов в многоступенчатых вихревых аппаратах // Вестник Казанского технологического университета. 2011. № 3. С. 155-160.

12. Шияев М.И., Толстых А.В. Моделирование процессов абсорбции газов в барботажных аппаратах // Теплофизика и аэромеханика. 2013. Т. 20. № 5. С. 575-586.

13. Дворецкий С. И., Дворецкий Д. С., Кормильцин Г. С., Пахомов А. А. Основы проектирования химических производств. М.: «Спектр». 2014. 356 с.

14. Советин Ф.С., Гартман Т. Н., Шакина Э.А., Шумакова О. П., Царёва Е. В. Алгоритм разработки компьютерных моделей сложных химических производств с применением комплексов моделирующих программ // Химическая промышленность сегодня. № 2. 2018. С. 49-56.

УДК 66.048.3:004.942

Советин Ф. С., Панкрушина А. В., Сеннер С. А., Шаталов К. И., Шумакова О. П.

Моделирование процесса получения синтез-газа в реакторе с внутренним теплообменом

Советин Филипп Сергеевич – к.т.н., доцент, зам. зав. каф. информатики и компьютерного проектирования; fsovetin@inbox.lv;

Панкрушина Алла Вадимовна – к.т.н., доцент, и.о. зав. каф. информатики и компьютерного проектирования; pankrushina.a.v@muctr.ru;

Сеннер Сергей Александрович – ассистент. каф. информатики и компьютерного проектирования; senser1976@mail.ru;

Шаталов Кирилл Ильич – к.х.н., доцент каф. общей и неорганической химии; kirill_shatalov@mail.ru;

Шумакова Ольга Петровна – к.т.н., доцент, заместитель декана факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; shumakova.o.p@muctr.ru

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

*В статье рассмотрен реактор получения синтез газа с внутренним теплообменом. Предложена система уравнений математического описания процесса окислительной конверсии метана с заданием краевых условий.**Для решения системы уравнений использован метод Рунге-Кутты четвертого порядка**Ключевые слова: модель, уравнение, константа, теплообмен, реактор***Simulation the process of producing synthesis gas in a reactor with internal heat exchange**Sovetin F. S.¹, Pankrushina A. V.¹, Senner S. A.¹, Shatalov K. I.¹, Shumakova O. P.¹¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation*The article discusses a reactor for producing synthesis gas with internal heat exchange. A system of equations for the mathematical description of the process of oxidative conversion of methane with setting boundary conditions is proposed.**To solve the system of equations, the fourth order Runge-Kutta method was used**Key words: analytical chemistry, ...***Введение**

Синтез-газ, являющийся сырьём для производства синтетического жидкого топлива, метанола и др. кислородосодержащих органических соединений получается в результате конверсии углеводородного сырья: природного газа, коксового газа, жидких углеводородов (нефти, мазута, легкого каталитического крекинга), попутного нефтяного газа, сланцевого газа, а также твердого топлива (угля) [1]. В настоящее время синтез-газ, в основном, получают из природного газа парокислородной, а также углекислотной или паровой конверсией. Синтезы химических веществ из синтез-газа приобретают особое значение в последние годы ввиду ограниченности мировых запасов нефти и роста спроса на нефтепродукты [2]. Многочисленные синтезы на базе монооксида углерода и водорода представляют громадный как практический, так и теоретический интерес, так как позволяют из двух простейших веществ получать ценнейшие органические соединения. Химический реактор получения синтез-газа является одним из основных аппаратов газоперерабатывающей промышленности Gas to liquid (GTL) [3]. Поэтому компьютерное моделирование химических реакторов получения синтез-газа имеет важнейшее значение, поскольку разработанная модель должна быть включена в модель всего производства [4].

В работе [5] рассмотрены процессы получения синтез-газа в проточно-циркуляционном реакторе Карберри, в проточно-циркуляционном реакторе в внутреннем контуром циркуляции и в проточном реакторе идеального вытеснения, а также их модели. В

работе [6] предлагается моделировать комбинациями стандартных расчётных модулей комплекса программ CHEMCAD процессы предриформинга, парового риформинга и парокислородной конверсии. В работе [7] предлагается получение синтез-газа в диск-реакторе и рассмотрено применение комплекса программ CHEMCAD для создания модели данного процесса и интеграции предложенной модели в модель технологической линии. Однако требует дополнительного рассмотрения изучение возможности проведения получения синтез-газа в реакторе с внутренним теплообменом.

Математическое описание процесса получения синтез-газа в реакторе с внутренним теплообменом

Конструкция реактора получения синтез-газа с внутренним теплообменом взята из работы [8] и приведена на рис. 1. Изображённый на рис. 1 реактор представляет собой заполненную катализатором внутреннюю трубку, в которой происходит сгорание метана. Образовавшаяся во внутренней трубке смесь метана с двуокисью углерода и парами воды реагирует в кольцевом зазоре внешней трубки, заполненным катализатором. Тепло для протекания эндотермических реакций в кольцевом зазоре передаётся от внутренней трубки и через внешнюю поверхность с помощью электрообогрева, который осуществляется при необходимости, в случае нехватки тепла экзотермической реакции горения метана для проведения эндотермических реакций окислительной конверсии метана.

Схематическое изображение политропического реактора с внутренним теплообменом показано на рис. 2.

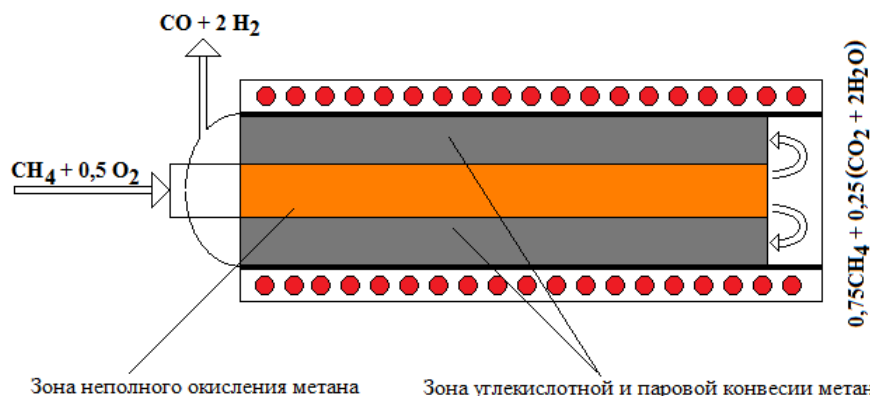


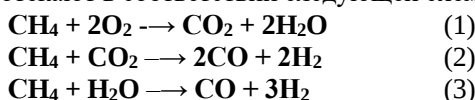
Рис.1. Реактор окислительной конверсии метана с внутренним теплообменом



Рис.2. Схематическое изображение политропического реактора с внутренним теплообменом

Основные допущения:

- Рассматривается политропический режим процесса (теплообмен между внутренней и внешней трубками, а также подаётся тепло от электропечи во внутреннюю и внешнюю трубки);
- Химические реакции при получении синтез-газа протекают в соответствии следующей схеме:



- Порядки химических реакций по исходным компонентам равны 1.

Анализ экспериментальных данных показывает, что $k_2=k_3=k$; $k_1=a_1k$, при этом константа скорости химической реакции рассчитывается по уравнению $k = e^{A-\frac{B}{T}}$, где a , A и B – кинетические константы (коэффициенты кинетических уравнений), заимствованные из работы [9], T – абсолютная температура, e^A – предэкспоненциальный множитель. $B = -\frac{E_A}{R}$, E_A – энергия активации по Аррениусу, R – универсальная газовая постоянная;

- Поскольку реакции (1)–(3) являются гетерогенно-каталитическими, то все уравнения математического описания данного реактора записаны относительно координаты массы катализатора mk ($mk'=M_k - mk$; $dmk'=-dmk$) [10].

- Парциальные давления компонентов рассчитываются по закону Дальтона;
- Решается краевая задача [11].
Во внутренней трубке метан горит, протекает реакция 1, а реакции 2 и 3 не идут

$$\frac{dn_{\text{CH}_4}}{dm_k} = -k_1 p_{\text{CH}_4} p_{\text{O}_2};$$

$$\frac{dn_{\text{CO}_2}}{dm_k} = k_1 p_{\text{CH}_4} p_{\text{O}_2};$$

$$\frac{dn_{\text{CO}}}{dm_k} = 0;$$

$$\frac{dn_{\text{H}_2}}{dm_k} = 0;$$

$$\frac{dn_{\text{O}_2}}{dm_k} = -2k_1 p_{\text{CH}_4} p_{\text{O}_2};$$

$$\frac{dn_{\text{H}_2\text{O}}}{dm_k} = 2k_1 p_{\text{CH}_4} p_{\text{O}_2};$$

$$\frac{dN}{dm_k} = 0;$$

$$\frac{dT^I}{dm_k} = \frac{1}{c_p N} \Delta q^R + \frac{F^T}{c_p M_k N} \Delta q^T + (1-\varphi) \frac{Q_v}{c_p M_k N}$$

где F^T – поверхность теплообмена, φ – доля тепла, полученного от электропечи внешней трубкой.

Локальная интенсивность источника тепла за счёт химической реакции: $\Delta q^R = -\Delta H_1^R k_1 p_{\text{CH}_4} p_{\text{O}_2}$

ΔH_1^R – энтальпия реакции, рассчитанная по следствию закона Гесса [кДж/кмоль]. Локальная интенсивность источника тепла за счёт теплопередачи (между внутренней в внешней трубкой):

$$\Delta q^T = k^T (T^{II} - T^I)$$

T^{II} – температура во внешней трубке, k^T – коэффициент теплопередачи ($k^T=56$ Вт/К*м² взят из справочника).

Q^v – тепло, подведённое от электропечи [кДж/ч].

Начальные условия для уравнений математического описания процесса во внутренней трубке (для СОДУ):

$$n_{\text{CH}_4}(0) = n_{\text{CH}_4}^{(0)}; n_{\text{CO}_2}(0) = n_{\text{CO}_2}^{(0)}; n_{\text{CO}}(0) = n_{\text{CO}}^{(0)}; n_{\text{H}_2}(0) = n_{\text{H}_2}^{(0)};$$

$$n_{\text{O}_2}(0) = n_{\text{O}_2}^{(0)}; n_{\text{H}_2\text{O}}(0) = n_{\text{H}_2\text{O}}^{(0)}; N(0) = N^{(0)}; T(0) = T^{(0)}$$

Также принимается допущение, что горение метана прекращается, когда мольная доля кислорода становится равной 0.002. Процессы конверсии метана протекают во внешней трубке.

Во внешней трубке протекают процессы углекислотной и паровой конверсии метана (реакции 2 и 3)

$$\frac{dn_{\text{CH}_4}}{dm_k} = -k(p_{\text{CH}_4} p_{\text{CO}_2} + k p_{\text{CH}_4} p_{\text{H}_2\text{O}});$$

$$\frac{dn_{\text{CO}_2}}{dm_k} = -k p_{\text{CH}_4} p_{\text{CO}_2};$$

$$\frac{dn_{\text{CO}}}{dm_k} = k(2 p_{\text{CH}_4} p_{\text{CO}_2} + p_{\text{CH}_4} p_{\text{H}_2\text{O}});$$

$$\frac{dn_{\text{H}_2}}{dm_k} = k(2 p_{\text{CH}_4} p_{\text{CO}_2} + 3 p_{\text{CH}_4} p_{\text{H}_2\text{O}});$$

$$\frac{dn_{\text{O}_2}}{dm_k} = 0;$$

$$\frac{dn_{\text{H}_2\text{O}}}{dm_k} = -k p_{\text{CH}_4} p_{\text{H}_2\text{O}};$$

$$N = n_{\text{CH}_4} + n_{\text{CO}_2} + n_{\text{CO}} + n_{\text{H}_2} + n_{\text{O}_2} + n_{\text{H}_2\text{O}};$$

$$\frac{dT}{dm_k} = \frac{1}{c_p N} \Delta q^R + \frac{F^T}{c_p N M_k} \Delta q^T - \frac{T}{N} \frac{dN}{dm_k} - \varphi \frac{Q_v}{c_p N M_k}$$

где $\Delta q^R = -\Delta H_2^R k_2 p_{\text{CH}_4} p_{\text{CO}_2} + (-\Delta H_3^R) k_3 p_{\text{CH}_4} p_{\text{H}_2\text{O}}$

Задаются начальные приближения по мольным расходам и температуре во внешней трубке/ Решается так называемая краевая задача.

Для решения системы уравнений математического описания используется метод Рунге-Кутты 4-ого порядка [11]. Система уравнений математического описания реактора (с учётом математических описаний процессов во внутренней и во внешней трубках) решается до тех пор, пока расчётные значения свойств потоков во внутренней в внешней трубках не станут равны друг другу. Условие окончания итерационного

процесса $(\bar{Y}_I - \bar{Y}_{II}) \approx \varepsilon$, где $\bar{Y}$ – свойство потока, ε – погрешность расчёта.

Результаты решения системы уравнений математического описания – значения концентраций компонентов на выходе из реактора получения синтез-газа с внутренним теплообменом приведены в таблице 1

Таблица 1. Результаты расчёта реактора получения синтез-газа с внутренним теплообменом

Свойство	Значение
Общий объёмный; нм ³ /ч	2.21
Общий мольный расход; моль/ч	98.66
Температура; °C	917
Давление; бар	1
Мольная доля компонента на выходе из реактора;	
CH ₄	0.12
CO	0.25
H ₂	0.55
CO ₂	0.08
O ₂	-

Заключение

1. Предложено проводить процесс окислительной конверсии метана в реакторе с внутренним теплообменом.

2. Разработана система уравнений математического описания процесса в представленном аппарате.

3. Реализована математическая модель процесса получения синтез-газа в реакторе с внутренним теплообменом

Авторы приносят искреннюю благодарность профессорам Гартману Томашу Николаевичу и Швецу Валерию Фёдоровичу за научно-методические консультации при выполнении данной работы

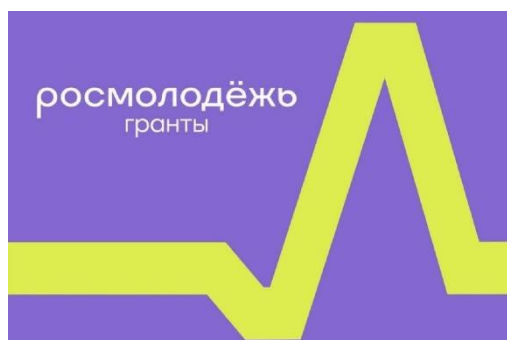
Список литературы

1. Тимофеев В. С., Серафимов Л. А., Тимошенко А. В. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза. М. «Высшая школа». 2010. 408 с.
2. Оостеркамп П.В., Вагнер Э, Росс Д, Достижения в производстве синтез-газа // Российский Химический Журнал. Том XLIV. № 1. 2000. с.34-42.
3. Дедов А.Г., Локтев А.С., Мазо Г. Н., Леонова Л.С., Комиссаренко Д. А, Мамаев Ю. А., Калужских М. С., Шляхтин О. А., Кузнецова Е. П., Карташева М. Н., Моисеев И. И. Новые селективные катализаторы окислительной конверсии метана в синтез-газ // Доклады Академии наук. 2011. - Т. 441, № 5. - С. 635-638.
4. Систер В. Г., Богданов В. А., Колбановский Ю. А. Получение синтез-газа гомогенным окислением метана // Нефтехимия. Т. 45, №6. 2005 г. с.440-445.
5. Бахтин А. А, Писаренко Е. В, Абаскулиев Д. А. Энергохимический способ получения метанола из природного газа // Химическая промышленность сегодня, 2007, №12, с 27-29
6. Гартман Т. Н., Советин Ф. С., Новикова Д. К. Опыт применения программы CHEMCAD для моделирования реакторных процессов // Теоретические основы химической технологии. 2009. Т. 43, № 6. С. 702-712
7. Басос А.Г., Проскуро Е.А., Сафонова В.Д. Разработка компьютерной модели технологической схемы получения синтез-газа окислительной конверсией метана // Успехи в химии и химической технологии. 2014. Т. 28. № 2 (151). С. 28-30.
8. Разработка процесса селективной окислительной конверсии метансодержащих газов в синтез-газ. Отчёт по НИР № 2205-1400-10-2 от 24.01.2012. Под редакцией акад. Дедова А. Г. М. РГУНГ. 2013
9. Гартман Т. Н., Советин Ф. С., Боровкова Е.А., Швеца В.Ф., Козловский Р. А., Локтев А.С., Лебедев Ю. В., Дедов А. Г., Моисеев И. И. Получение синтез-газа кислородной конверсией метана в присутствии катализатора на основе NdCaCoO₄: кинетическое моделирование автотермического процесса // Нефтехимия. 2015. Т. 55, № 4. С. 302-309
10. Лебедев Н.Н., Манаков М.Н., Швеца В.Ф. Теория химических процессов основного органического и нефтехимического синтеза. М.: Химия. 1984. 376 С.
11. Гартман Т. Н., Клушин Д. В. Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики. С.-Пб.: «Лань», 2020. 404 с.

**Российский химико-
технологический
университет
имени Д.И. Менделеева**



При поддержке



**Федерального агентства
по делам молодёжи
(Росмолодёжь)**

Научное издание

УСПЕХИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXVIII

№ 9 (288)

Компьютерная верстка: Зверева О.В.
Текст репродуцирован с оригиналов авторов

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева

Совет молодых ученых и специалистов (СМУС)

Адрес университета: 125047, г. Москва,

Миусская пл., д. 9