

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

УСПЕХИ
В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ
ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXV

№ 3

Москва
2021

УДК 66.01-52
ББК 24. 35
У78

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

Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXXV,
У78 № 3 (238). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2021. – 66 с.

В сборнике «Успехи в химии и химической технологии» опубликованы статьи по актуальным вопросам в области цифровой технологии и химического инжиниринга. Представлены работы по направлениям: информационные технологии и компьютерное моделирование; анализ энергоресурсоэффективности и управление качеством; процессы, аппараты и инновационные материалы.

Материалы сборника были представлены для широкого обсуждения на второй конференции обучающихся факультета цифровых технологий и химического инжиниринга (ЦиТХИн), на которой студенты бакалавриата и магистратуры выступили с докладами о своей научной работе.

Сборник находится в открытом доступе, научные статьи включены в систему Российского индекса научного цитирования (РИНЦ) на платформе Elibrary.ru.

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

УДК 66.01-52
ББК 24. 35



Сборник научных трудов молодых учёных, представивших свои работы на Конференции обучающихся факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, приурочен к юбилеям наших выдающихся ученых, творящих новую историю Менделеевского университета.

В 2021 году 80 лет исполняется академику РАН, профессору, доктору технических наук Валерию Павловичу Мешалкину. 75-летие со дня рождения отмечает профессор, доктор технических наук Тигран Ашотович Ваграмян. Администрация университета, факультета и все коллеги желают нашим юбилярам крепкого здоровья, умных, активных и благодарных студентов и конечно же достижения новых, самых высоких научных вершин во славу Менделеевского дома и факультета ЦиТХИн!

Сергей Павлович Дударов
Декан факультета ЦиТХИн

Содержание

Леметюйнен Ю.А., Дударов С.П.

**СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВОЗМОЖНОСТИ НЕЙРОСЕТЕВОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ НА ЯЗЫКЕ ПРОГРАММИРОВАНИЯ PYTHON И В СРЕДЕ
MATLAB6**

Макляев И.В., Дударов С.П.

**СРАВНЕНИЕ РАБОТЫ АЛГОРИТМА ОБУЧЕНИЯ МНОГОСЛОЙНОГО
ПЕРЦЕПТРОНА ПРИ РЕАЛИЗАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗНЫХ
ИНСТРУМЕНТОВ ПРОГРАММИРОВАНИЯ9**

Абаева Е.А., Аверина Ю.М.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СКОРОСТИ ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ
ИОНОВ ЖЕЛЕЗА В ВОДЕ.....12**

Егоров М.С., Дударов С.П.

**ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ
ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ЛЫЖНЫХ СМАЗОК ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ПОГОДНЫХ
УСЛОВИЯХ15**

Жарков В.В., Савицкая Т.В.

**РАЗРАБОТКА И АПРОБАЦИЯ ПРОГРАММНОГО ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ЗАДАЧ
ОЦЕНКИ ФАКТОРОВ ВЛИЯНИЯ СОСТОЯНИЯ МАГИСТРАЛЬНЫХ
НЕФТЕПРОВОДОВ И МАГИСТРАЛЬНЫХ НЕФТЕПРОДУКТОПРОВОДОВ НА
СТЕПЕНЬ РИСКА АВАРИЙ.....18**

Казакова В.Н., Михайлова П.Г.

**РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ С НЕЧЕТКИМИ
РЕГУЛЯТОРАМИ ДЛЯ УСТАНОВКИ ПЕРВИЧНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ НЕФТИ22**

Казанова М.А., Савицкая Т.В.

**СИНТЕЗ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ И ИССЛЕДОВАНИЕ
ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО И ЦИКЛИЧЕСКОГО СПОСОБОВ ОРГАНИЗАЦИИ
ВЫПУСКА МНОГОАССОРТИМЕНТНОЙ ПРОДУКЦИИ.....27**

Киселева Е.А., Савицкая Т.В.

**РАЗРАБОТКА БАЗЫ ЗНАНИЙ АНАЛИЗА ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ОПАСНОСТЕЙ И
УПРАВЛЕНИЯ БЕЗОПАСНОСТЬЮ УСТАНОВКИ СТАБИЛИЗАЦИИ
ДЕЭТАНИЗИРОВАННОГО КОНДЕНСАТА.....32**

Кожухарь О.Ю., Скичко А.С.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СЛУЧАЙНОГО ФАКТОРА ПОГРЕШНОСТИ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ НА РЕЗУЛЬТАТ МОДЕЛИРОВАНИЯ
ПРОЦЕССА БИОДЕГРАДАЦИИ НИКОТИНА36**

Комарова Д.С., Мочалова М.С., Ловская Д.Д.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ БИОПОЛИМЕРНЫХ АЭРОГЕЛЕЙ С
РАЗЛИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ ХИТОЗАНА41**

Кузьмин М.И., Зубов Д.В.

**СИСТЕМА ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ МАТЕМАТИЧЕСКИХ
МОДЕЛЕЙ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ44**

Ластовецкий М.Л., Михайлова П.Г.

**РАЗРАБОТКА ЭКСПЕРТНОЙ СИСТЕМЫ «РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ЛОКАЛИЗАЦИИ
И ЛИКВИДАЦИИ АВАРИЙНЫХ СИТУАЦИЙ НА КОМБИНИРОВАННОЙ
УСТАНОВКЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА»48**

Оралов И.С., Дударов С.П.

**ИНСТРУМЕНТЫ РАЗРАБОТКИ, МЕТОДЫ И ПРИМЕРЫ ПРОГРАММНЫХ
СРЕДСТВ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ И РАСПОЗНАВАНИЯ ЛИЦ ЛЮДЕЙ ПРИ
ВИДЕОФИКСАЦИИ В РЕЖИМЕ РЕАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ.....51**

Сергеева М.П., Михайлова П.Г.

**РАЗРАБОТКА НЕЙРОСЕТЕВЫХ МОДЕЛЕЙ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ
НЕЙРОТОКСИЧНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ54**

Тихоненко К.А., Савицкая Т.В.

**ПРАКТИЧЕСКАЯ АПРОБАЦИЯ ПРОГРАММНОГО ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ПОДБОРА
АРМАТУРЫ НА МАГИСТРАЛЬНЫХ ТРУБОПРОВОДАХ57**

Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Шостаковский М.В., Шевченко А.А.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ ПРОПАНА В ПРОПИЛЕН В
ЗЕРНЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО ЦЕОЛИТСОДЕРЖАЩЕГО КАТАЛИЗАТОРА.....62**

УДК 004.8

Леметюйнен Ю.А., Дударов С.П.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВОЗМОЖНОСТИ НЕЙРОСЕТЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НА ЯЗЫКЕ ПРОГРАММИРОВАНИЯ PYTHON И В СРЕДЕ MATLAB

Леметюйнен Юрий Александрович – студент 2 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Дударов Сергей Павлович – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий, e-mail: dudarov@muctr.ru,

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия 125047, Москва, Миусская пл., д. 9

Актуальность выбранной темы обусловлена высоким интересом к нейронным сетям и их применению для решения различных задач. По этой причине имеет место проблема выбора используемых инструментов для разработки и применения искусственных нейронных сетей. К тому же данная тема помогает подробно изучить нейронные сети и их архитектуры.

Ключевые слова: нейронная сеть, нейросетевое моделирование, python, MATLAB, машинное обучение, программирование.

COMPARATIVE ANALYSIS OF THE POSSIBILITY OF NEURAL NETWORK MODELING IN THE PYTHON PROGRAMMING LANGUAGE AND IN THE MATLAB ENVIRONMENT

Lemetyuynen Y.A., Dudarov S.P.

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

The relevance of the chosen topic is due to the high interest in neural networks and their application for solving various problems. For this reason, there is a problem of choosing the tools used for the development and application of artificial neural networks. In addition, this topic helps to study neural networks and their architectures in detail.

Keywords: neural networks, neural network modeling, python, MATLAB, machine learning, programming.

Правильный выбор инструмента разработки программного обеспечения был и будет всегда оставаться одним из наиболее важных этапов программной инженерии. С развитием технологий появляются новые языки программирования, такие, как Go, Swift, Rust и другие. Каждый из них, несомненно, является лидером для решения конкретных задач. Также существуют библиотеки, позволяющие ускорить процесс разработки с помощью уже готовых функций. Помимо языков появляются и новые математические модели, позволяющие оптимизировать вычисления и решать задачи, которые ранее требовали больших вычислительных и временных затрат. Одной из таких моделей является искусственная нейронная сеть.

Прежде всего, искусственная нейронная сеть – это математическая модель (или ее программно-аппаратное воплощение), имитирующая биологические нейронные сети [1]. Они активно применяются не только в научных исследованиях, но и в бытовых приборах и даже в сфере развлечений. Примером может служить искусственный интеллект для имитации действий реального человека в компьютерных играх. В научных целях нейронные сети являются одним из лидирующих инструментов моделирования при решении различных задач, таких, как классификация, распознавание образов и звуков, аппроксимация, кластеризация [2]. Нейронные сети позволяют решать задачу, в которой существует множественная связь между входными и выходными данными.

Широко используемыми в настоящее время представителями всего имеющегося многообразия инструментов разработки искусственных нейронных сетей являются язык программирования python и пакет прикладных программ MATLAB. Также часто используется язык программирования C++, но без специальных знаний работы данного языка с памятью реализовать нейронную сеть довольно проблематично. Также существует много фреймворков, которые были написаны специально для реализации нейронных сетей. Они дают значительное преимущество перед использованием языка без применения библиотек. Кроме того, есть крупные программные инструменты нейросетевого моделирования и работы с большими данными, такие, как KNIME, позволяющие использовать искусственные нейронные сети без знания языков программирования. В то же время они не всегда учитывают специфику поставленной задачи, в которой может потребоваться определенное преобразование как данных, так и самой математической модели.

Остановимся подробнее на языке python, а конкретнее на сочетании его библиотек NumPy и Keras. В качестве вспомогательных библиотек применяются pandas и matplotlib. Pandas – библиотека, предназначенная для работы с данными, matplotlib – для вывода графиков. Библиотека Keras – надстройка над фреймворками DeepLearning4j, TensorFlow и Theano, позволяющая оперативно работать с нейронными сетями. NumPy – библиотека для работы с математическими объектами, например массивы и матрицы. В качестве

альтернативного инструмента разработки рассмотрим MATLAB. Эта среда удобна тем, что не требует установки дополнительных пакетов, так как все необходимые для нейросетевого моделирования функции уже в ней есть.

Для обучения нейронных сетей в библиотеке Keras по умолчанию используется градиентный алгоритм (метод стохастического градиентного спуска), но при желании его можно заменить на альтернативный. В MATLAB алгоритм обучения задается вручную, что позволяет выбрать от линейных методов до градиентного спуска, например, алгоритм Левенберга–Марквардта, который является одним из самых быстрых.

Для решения задач нейросетевого моделирования в MATLAB существуют стандартные функции, позволяющие задавать класс нейронной сети из числа представленных в стандартной библиотеке, выбирать количество слоёв и нейронов в них, настраивать структуру связей между нейронами [3]. В то же время возможности библиотеки Keras не предусматривают выбора структуры из уже готовых. Здесь требуется самостоятельно моделировать нейронную сеть, что, несомненно, ограничивает её доступность. Выбор функции активации довольно обширный и примерно одинаков для обоих инструментов.

Важно сказать об особенностях и недостатках реализации нейронных сетей в python с использованием Keras и в среде MATLAB. Keras – библиотека, требующая довольно обширных знаний архитектур нейронных сетей. Также она может работать только с определённым форматом данных, что требует их предварительного преобразования, имеется ограничение по выводимым графикам, а скорость работы намного меньше, чем в MATLAB. При этом она позволяет настраивать множество параметров, такие, как количество образцов данных на обновление градиента для каждой эпохи, начальные значения весовых коэффициентов, отслеживаемые метрики. В свою очередь, в MATLAB выводится зачастую избыточная информация, с которой неподготовленному человеку достаточно тяжело справиться. Но это не является критичным, так как состав выдаваемых средой результатов моделирования можно настраивать. Также в качестве недостатка стоит отметить, что для полноценного и регулярного использования MATLAB необходима платная лицензия.

Несомненным плюсом использования среды MATLAB являются встроенные графические интерфейсы, например Neural Network Toolbox, а так же стандартная функция guide, которая позволяет быстро и просто визуализировать все необходимые данные и даже динамический процесс их обработки. Однако у неподготовленного человека могут возникнуть проблемы, связанные с отображением данных, но это не является большим минусом, так как у MATLAB существует объёмная документация, в которой можно найти практически все ответы на интересующие пользователя вопросы. В дальнейших

наших исследованиях планируется рассмотреть реализацию графического интерфейса для нейронной сети при решении конкретной практической задачи и оценить удобство и простоту использования.

Рассматривая и сравнивая скорость работы, необходимо сказать, что в MATLAB предусмотрена возможность распараллеливания расчётов, что позволяет выполнять вычисления как на различных ядрах процессора локального устройства, так и разделять их между различными устройствами, для которых необходимо только стабильное подключение к интернету и заранее установленный и настроенный пакет MATLAB. В то же время Keras также допускает использование параллельных вычислений, но только на локальном устройстве.

Приведём пример решения конкретной задачи нейросетевого моделирования с использованием анализируемых инструментов. Основываясь на экспериментальных данных химических показателей вина и экспертной оценке его качества, разработаем нейронную сеть для предсказания последней характеристики. Для данной задачи мы выбрали классический перцептрон, включающий в себя один скрытый слой с 11 нейронами. Сеть имеет одиннадцать входных переменных и одну выходную. В качестве активационной была выбрана сигмоидная логистическая функция. Ниже приведены схемы моделей перцептрона в python (рис. 1) и в среде MATLAB (рис. 2).

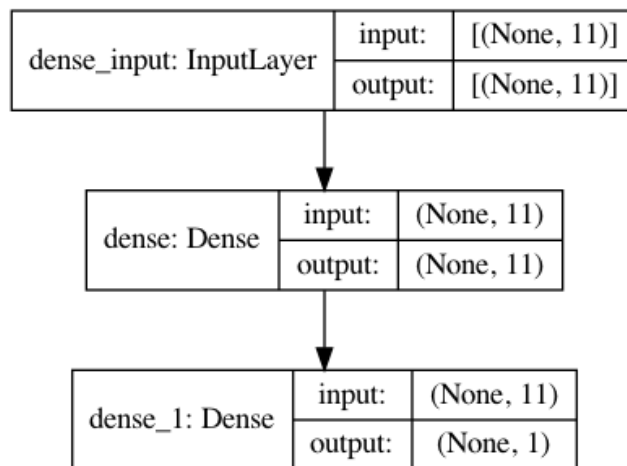


Рис. 1. Схема модели нейронной сети в python для реализации с помощью библиотеки Keras

Объём обучающей выборки составил 500 примеров, тестовой – 17 примеров. Соотношение между объёмом обучающей выборки и количеством настраиваемых весовых коэффициентов составляет около 3,5, что предполагает хороший баланс между запоминанием и обобщением данных [2]. Процесс обучения был достаточно быстрым, что говорит о хорошей корреляции выхода и входов. На рис. 3 показано изменение среднеквадратичной ошибки в процессе обучения. Для обоих инструментов наблюдалась схожая картина обучения. Можно отметить, что скорость обучения в программе,

написанной на языке python, была несколько ниже, чем в среде MATLAB, что может объясняться использованием различных алгоритмов обучения. Ошибка обучения в программе на python составила около 0,06, а в среде MATLAB – около 0,05.

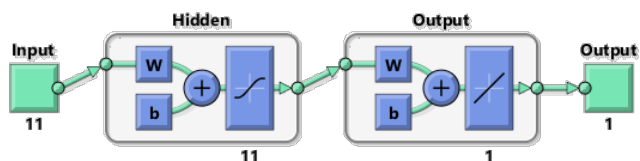


Рис. 2. Схема модели нейронной сети в среде MATLAB

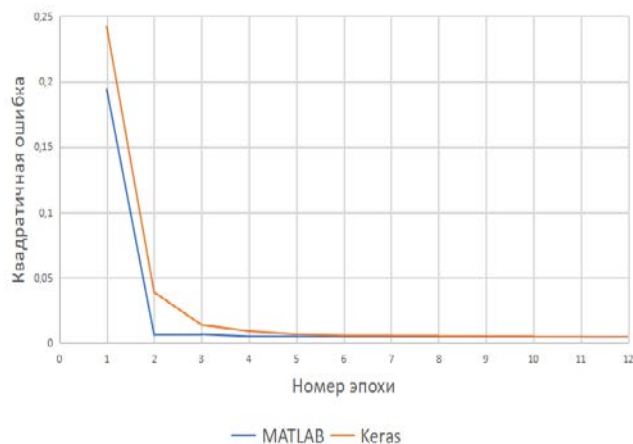


Рис. 3. График зависимости квадратичной ошибки от эпохи обучения

Анализ обучающей выборки показал, что примерно 50% оценок качества вина (выходных переменных) были численно равны 5. Тем не менее, это не повлияло на качество полученных нейросетевых моделей, что доказывает уровень среднеквадратичной ошибки. Таким образом, можно сделать вывод, что наряду с особенностями предметной области решаемой задачи важное значение для качества получаемых моделей имеет набор обучающих данных.

По результатам выполненной работы можно заключить, что использование готового инструментария эффективно, если не требуется специально учитывать особенности предметной области решаемой задачи, реализовывать нестандартные возможности или архитектуры нейронных сетей. В то же время для особых случаев,

когда структура сети, алгоритм обучения или предметная область требуют внесения нестандартных корректировок, целесообразно использовать библиотеки, позволяющие ускорить разработку.

Если говорить о выборе между MATLAB и python, то среда MATLAB больше подходит для исследований и практического применения специалистами, не связанными непосредственно с разработкой интеллектуальных информационных систем, то есть не обладающими специальными знаниями в этой области. Однако функциональные возможности языка python значительно больше подходят для проектирования сложных структур искусственных нейронных сетей и их комплексов, но это требует достаточно высокого уровня подготовки специалистов, занимающихся таким моделированием.

В заключение следует отметить, что дальнейшие исследования будут нацелены на изучение возможностей визуальной реализации различных архитектур искусственных нейронных сетей как в среде MATLAB, так и с помощью библиотеки Keras при использовании Google Cloud ML [4] для решения практических задач различного уровня сложности и объема обрабатываемых данных.

Список литературы

1. Леметюйнен Ю.А. Основные проблемы применения нейронных сетей в биотехнологических процессах// Актуальные научные исследования в современном мире. – Вып. 12(68), часть 2, 2020. – 68 с.
2. Дударов С.П., Папаев П.Л. Теоретические основы и практическое применение искусственных нейронных сетей: учеб. пособие. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2014. – 104 с.
3. Дьяконов В.П., Круглов В.В. MATLAB 6.5 SP1/7/7 SP1/7 SP2 + Simu-link 5/6. Инструменты искусственного интеллекта и биоинформатики. – М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2006. – 453 с.
4. Джулли А., Пал С. Библиотека Keras – инструмент глубокого обучения. Реализация нейронных сетей с помощью библиотек Theano и TensorFlow. – М.: ДМК Пресс. – 294 с.

УДК 004.8

Макляев И.В., Дударов С.П.

СРАВНЕНИЕ РАБОТЫ АЛГОРИТМА ОБУЧЕНИЯ МНОГОСЛОЙНОГО ПЕРЦЕПТРОНА ПРИ РЕАЛИЗАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗНЫХ ИНСТРУМЕНТОВ ПРОГРАММИРОВАНИЯ

Макляев Илья Васильевич, студент 3 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Дударов Сергей Павлович, к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий,
e-mail: dudarov@muctr.ru,

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия
125047, Москва, Миусская пл., д. 9

С помощью различных инструментов разработки созданы multifunctional программные приложения для математического моделирования явлений и процессов с помощью нейронных сетей. Рассмотрены достоинства и недостатки выбранных инструментов разработки. Выполнен анализ производительности программ, реализованных различными средствами. Даны рекомендации по выбору инструментов разработки для различных прикладных целей.

Ключевые слова: программное обеспечение, математическая модель, нейросетевое моделирование, искусственная нейронная сеть, перцептрон, инструмент разработки.

COMPARISON OF DIFFERENT PROGRAMMING TOOLS FOR IMPLEMENTING A MULTI-LAYER PERCEPTRON LEARNING ALGORITHM

Maklyayev I.V., Dudarov S.P.

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

With the help of various development tools, multifunctional software applications were created for mathematical modeling of phenomena and processes using neural networks. The advantages and disadvantages of the selected development tools are considered. The analysis of the effectiveness of programs implemented by various means is carried out. Recommendations on the choice of development tools for various application purposes are given.

Key words: software, mathematical model, neural network modeling, artificial neural network, perceptron, development tool.

Искусственные нейронные сети являются эффективным решением различных классов задач математического моделирования практически в любой области, требующей объёмных и/или сложных математических вычислений. Применение методов нейроинформатики позволяет быстро получить результат с требуемым уровнем ошибки в случаях работы с большими объёмами исходной информации, а также в условиях неполноты и изменчивости исходной информации. При этом в ряде случаев нейросетевой подход помогает сэкономить значительный объём вычислительных и временных ресурсов в сравнении с методами многомасштабного компьютерного моделирования.

Для создания нейросетевых моделей необходимо использовать специальное программное обеспечение. Именно поэтому разработка новых программных инструментов нейросетевого моделирования, которые будут удовлетворять запросы пользователей и учитывать специфику предметной области, остаётся актуальной задачей.

Данная статья посвящена описанию опыта создания программных средств нейросетевого моделирования, характеризующихся гибкой настройкой архитектуры нейронной сети, нацеленных на решение ряда задач: аппроксимации данных, классификации, прогнозирования

временных рядов и других, с помощью двух разных языков программирования.

В настоящее время в обеих программах реализована наиболее востребованная архитектура – перцептрон, с помощью которой можно решать все перечисленные выше классы задач математического моделирования, благодаря возможности гибкой настройки как отдельных элементов сети (тип и параметры активационных функций отдельных нейронов, количество скрытых слоёв, количество нейронов в каждом слое, границы нормализации), так и алгоритма его обучения (вид алгоритма, скорость обучения, критерии окончания обучения, сценарий обучения).

В качестве инструмента разработки первой программы использована интегрированная среда Delphi от американской компании Embarcadero Technologies, которая обеспечивает возможность реализации всех намеченных функциональных возможностей средствами своего языка программирования, быстрое проектирование графического интерфейса, дружелюбного пользователю, интуитивно понятного и соответствующего принятым стандартам разработки программных приложений. Принципы разработки и организации информационно-моделирующего нейросетевого программного обеспечения

базируются на полученном ранее собственном опыте и опыте создателей аналогичного программного обеспечения [1].

Вторым инструментом разработки была выбрана интегрированная среда программирования Microsoft .NET с использованием языка C++/CLI. Данная платформа имеет широкий круг программных инструментов, которые позволяют реализовать все поставленные нами задачи нейросетевого моделирования, а также создать удобный и современный графический интерфейс для взаимодействия с пользователем.

Рассмотрим функции, реализованные с использованием обоих инструментов разработки.

В структуру любого перцептрона входят один (или большее количество) слоя нейронов. Выходной слой – это слой результатов. Его выходы соответствуют выходам нейросетевой математической модели. Все слои, кроме выходного, называются скрытыми. Обучение перцептрона заключается в многократной итерационной

коррекции весовых коэффициентов до значений, обеспечивающих минимальное (в пределах требуемого уровня) рассогласование выходных значений примеров обучающей выборки и выходов, рассчитанных по нейронной сети с текущими значениями весов, при одинаковых наборах значений входных переменных обучающей выборки [2]. В обеих созданных программах весовые коэффициенты многослойного перцептрона корректируются синхронно по методу обратного распространения ошибки, а весовые коэффициенты однослойного перцептрона корректируются по методу Уидроу–Хоффа.

На рис. 1 изображена общая структура многослойного перцептрона с m входами и n выходами. Он имеет один или большее количество скрытых слоёв нейронов, в каждом из которых может быть разное количество нейронов. В однослойном перцептроне есть только выходной слой, а скрытые слои отсутствуют.

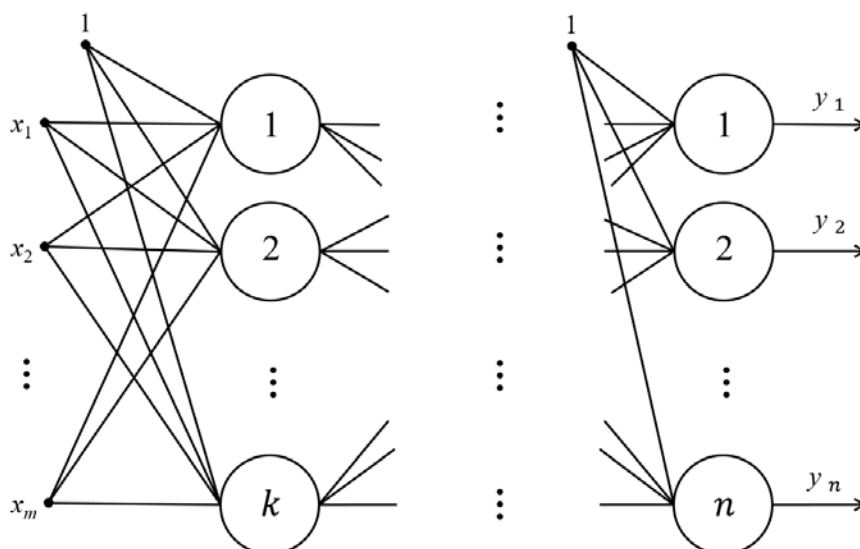


Рис. 1. Общая структура многослойного перцептрона

Для работы с новой нейросетевой моделью пользователю необходимо иметь файл с данными (выборку), по которой будет обучаться нейросеть. Ему требуется указать путь к файлу с выборкой и установить количество входных и выходных векторов. Если сеть обучалась ранее, пользователь может загрузить данные обучения, чтобы сразу перейти к тестированию сети или практическому использованию модели.

На следующем этапе подготовки к моделированию необходимо настроить структуру нейронной сети, указать параметры нейронов и алгоритма обучения: количество слоёв и нейронов в каждом из них, параметр насыщения сигмоидной логистической активационной функции, начальную скорость обучения, количество эпох. Также можно изменить границы нормализации.

При запуске процесса обучения пользователь в режиме реального времени имеет возможность отслеживать ход обучения по графику зависимости

ошибки от количества эпох. В любой момент он может остановить обучение и поменять скорость обучения или предельное количество эпох, а также сохранить обученную нейронную сеть. В случае неудачной нейросетевой модели пользователь может быстро сбросить результат обучения нейронной сети и запустить процесс заново при других случайных начальных весах.

На этапе тестирования сети можно увидеть найденные коэффициенты нейросетевой модели и подать на вход новую выборку данных, загрузив их из файла, и получить отклик нейронной сети на неё. Результат тестирования можно сохранить в текстовый файл для дальнейшего использования.

На основе опыта разработки нейросетевого моделирующего программного обеспечения можно отметить следующее:

– Delphi проще в освоении, в этой среде легче создать графический, дружелюбный пользователю интерфейс;

– Delphi на данный момент не является популярным инструментом разработки, вследствие чего данная среда имеет меньшее количество библиотек и обновлений для современных технологических решений;

– в Delphi-парадигме форм вся информация о них, включая свойства, параметры настройки компонентов, значения по умолчанию, хранится в исполняемом файле, причём не самым оптимальным образом, из-за чего такие файлы получаются значительно большего размера в сравнении с аналогами, создаваемыми C++/CLI;

– преимуществом C++/CLI является возможность использования специальной библиотеки стандартных алгоритмов, реализованных на языке C++.

Проведено сравнение скорости работы алгоритма обучения многослойного перцептрона, реализованного в C++/CLI и Delphi в двух режимах: режиме фоновой работы и режиме графического отображения результатов обучения в реальном времени.

В качестве тестовой структуры нейронной сети был выбран двухслойный перцептрон с 2 нейронами в скрытом слое. Обучающая выборка, полученная из открытого хранилища данных, включала 1593 примера с 12 переменными: 11 входными и 1 выходной.

По диаграмме на рис. 2 видно, что время обучения нейронной сети в режиме графического отображения с помощью программы, разработанной в интегрированной среде Delphi, занимает больше времени в сравнении с программой, реализованной на языке C++/CLI.

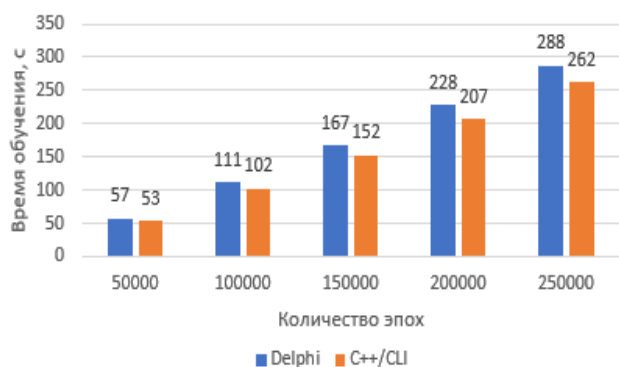


Рис. 2. Зависимость времени обучения от количества эпох в режиме графического отображения

Режим фоновой работы – режим, когда программное обеспечение не тратит вычислительные ресурсы и время на отображение результатов обучения в реальном времени. В данном режиме Delphi значительно ускоряется, как видно на диаграмме (рис. 3).

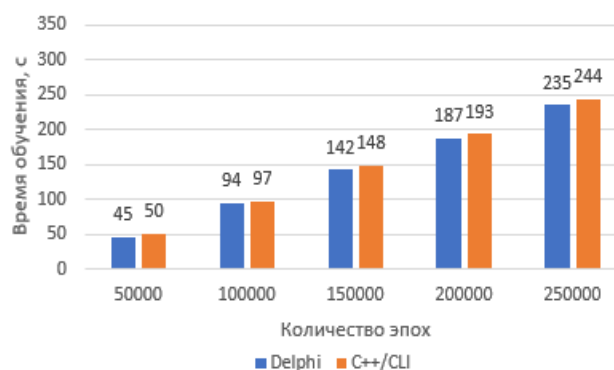


Рис. 3. Зависимость времени обучения от количества эпох в фоновом режиме работы

Таким образом, с помощью различных сред разработки были созданы программные инструменты для нейросетевого моделирования. На основании полученных результатов обучения и тестирования нейросетевых моделей можно сделать вывод о возможности их реализации с использованием любых средств разработки, ни одно из которых не показывает принципиальных преимуществ перед другими. Как и предполагалось, работа приложений в фоновом режиме является наименее ресурсозатратной. В целом можно отметить, что выбор инструмента разработки может быть оставлен на усмотрение разработчика, если для конечного продукта не требуются какие-то уникальные особенности или специальные технологии.

Список литературы

1. Макляев И. В., Дударов С. П. Разработка программного инструмента нейросетевого моделирования с гибкой настройкой структуры сети, алгоритма и сценария обучения/ И. В. Макляев, С. П. Дударов. – Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXXIV, №3. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2020. – с. 55–58.
2. Дударов С. П., Папаев П. Л. Теоретические основы и практическое применение искусственных нейронных сетей. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2014. – 104 с.

УДК 628.1

Абаева Е.А., Аверина Ю.М.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СКОРОСТИ ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА В ВОДЕ

Абаева Екатерина Андреевна – магистрант 1-го года обучения кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; abaeva.kate@yandex.ru

Аверина Юлия Михайловна – кандидат технических наук, доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; averinajm@mail.ru

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

В статье рассмотрены и описаны возможные варианты уравнений кинетики процессов окисления ионов Fe^{2+} в воде. На основании результатов приведенных в работе реакций было осуществлено математическое моделирование процесса окисления железа в воде.

Ключевые слова: водоочистка, железо, скорость процесса окисления железа, математическое моделирование, обезжелезивание

MATHEMATICAL MODELING OF THE RATE OF OXIDATION OF IRON IONS IN WATER

Abaeva E. A., Averina J. M.

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

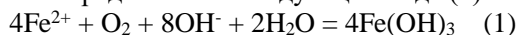
The article discusses and describes possible variants of the equations of the kinetics of the processes of oxidation of Fe^{2+} ions in water. Based on the results of the reactions presented in the paper, a mathematical simulation of the process of iron oxidation in water was carried out.

Key words: water treatment, iron, iron oxidation rate, mathematical modeling, de-ironizing

Введение

Проблема качества воды остается актуальна уже многие годы. Содержание железа в воде для большинства источников водоснабжения во много раз превышает предельно допустимую концентрацию. Избыточное количество железа в воде при ее употреблении является предпосылкой многих заболеваний и представляет прямую угрозу здоровью человека, а также негативно сказывается на качестве жизни. Так, удаление железа из воды, понижение его концентрации до допустимых норм является одной из самых востребованных задач водоподготовки.

Суммарное уравнение кинетики процессов окисления ионов Fe^{2+} , содержащихся в природной воде можно представить в следующем виде (1):



При этом скорость данной реакции в основном зависит от:

- значения pH воды;
- количества железа в воде;
- концентрации растворенного кислорода [1]

Штаммом и Лее представляли кинетику данной реакции (2):

$$-d(Fe^{2+}) / dt = K [Fe^{2+}][O_2][OH^-]^2 \quad (2)$$

где K - константа и функция скорости реакции температуры.

Стоит отметить, что в приведенном выше уравнении реакция протекает более быстро при высоких значениях pH и в условиях близких к насыщению воды кислородом, а при pH 6,5 окисление ионов Fe^{2+} протекает очень медленно [2].

В работах [3,4], приведены следующие особенности этого процесса:

- сульфат и хлорид железа (II), окисляются кислородом, растворенным в воде очень медленно, даже при повышенной температуре;
- скорость реакций можно значительно замедлить путем уменьшения исходной концентрации соли железа (II) в растворе;
- снижение температуры резко снижает скорость реакций;
- процесс окисления сопровождается изменением pH обрабатываемой воды;

По концентрации растворенного кислорода реакции имеют первый порядок при данной температуре и давлении, а по аналитической концентрации ионов Fe^{2+} второй порядок [6]. Их скорость выражается в следующем виде (3):

$$-d(Fe^{2+}) / dt = K[O_2][Fe^{2+}]^2 \quad (3)$$

На основании полученных экспериментальных результатов, в работе [3] указано, что кинетика реакции окисления не строго подчиняется уравнению первого или второго порядка относительно железа (II).

В работе [2] приведено кинетическое уравнение окисления железа (II) кислородом как (4):

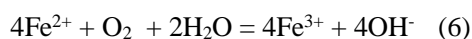
$$-d(Fe^{2+}) / dt = K_1[Fe^{2+}][O_2] \quad (4)$$

Концентрация кислорода может быть принята в качестве постоянной, тогда (5):

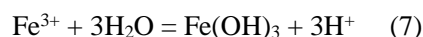
$$-d(\text{Fe}^{2+}) / dt = K'[\text{Fe}^{2+}], \text{ где } K' = K_1[\text{O}_2] \quad (5)$$

Также следует отметить, что окисление ионов Fe^{2+} кислородом воздуха в воде имеет первый порядок и по железу, и по кислороду.

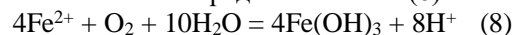
Исходя из исследований, полученных в работах [3,4] можно сделать вывод о том, что в реакции с кислородом участвуют все молекулы Fe^{2+} , при этом находящиеся в разных состояниях. В реакции с кислородом состояние молекул Fe^{2+} в растворе определяется их реакционной способностью, которая является суммой независимых и одновременно протекающих реакций ионов железа (II) и кислорода. Из этих исследований можно сделать вывод о том, что по сравнению с аквакомплексами железа (II), гидроксо- и ацидокомплексы железа (II) (сульфатные и хлоридные) в реакции с кислородом значительно более реакционноспособны. Процесс окисления ионов Fe^{2+} в работе [2] рассматривается как реакция, протекающая в две стадии, и описывается уравнениями (6):



Затем происходит гидролиз Fe^{3+} (7):



Суммарное уравнение реакции окисления и гидролиза может быть представлено так (8):



Из уравнения следует, что происходит увеличение концентрации ионов водорода во время реакции, которые в свою очередь, увеличивают скорость обратной реакции. В результате общая скорость окисления ионов Fe^{2+} кислородом и гидролиза трехвалентного железа должна уменьшаться с уменьшением значения pH.

На основании этого было осуществлено математическое моделирование зависимости скорости процесса окисления ионов железа в воде (рис.1).

Модель [5] была написана с помощью методов регрессионного анализа, в частности, множественной регрессии. Параметры уравнения регрессии определяли с помощью метода наименьших квадратов.



Рис.1. Алгоритм проектного расчета

Программа имеет вид:

```

library(rgl)
setwd("D:/Research/FerrumStats")
Vdata = read.csv("Vdata.csv", sep=";", dec=",")
V = Vdata$V
S = Vdata$S
C = Vdata$Co
# Посмотрим на точки
# plot3d(S,C,V)
# Задаём формулу
# f = formula(V ~ a2*C^a3*S^a4)
# st = list(a2=0.007, a3=1.29, a4=0.83)
# ft = nls(f,start=st)
f = formula(V ~ a2*C^a3*S^a4)
st = list(a2=0.007, a3=1.29, a4=0.83)
ft = nls(f,start=st,control=nls.control(maxiter = 1000,tol=1e-07))
summary(ft)
# Теперь пересчитаем невязку
Vest = list()
resid = list()
for (i in 1:length(S)){
  #b1 = coef(ft)['b1']

```

```

#b2 = coef(ft)['b2']
a2 = coef(ft)['a2']
a3 = coef(ft)['a3']
a4 = coef(ft)['a4']
Vest[i] = a2*C[i]^a3*S[i]^a4
resid[i] = V[i] - Vest[[i]]
}

```

Заключение

Согласно теории адсорбционных катализаторов предполагается, что кислород является энергичным окислителем и активизирует процесс, как следствие того, что поверхность осадка гидроксида железа (III) адсорбирует кислород в виде атомов - отрицательно заряженных ионов.

Анализ приведенных в статье данных показывает, что ни одна из формул, описывающих скорость процесса окисления растворенных в воде ионов двухвалентного железа, не коррелируется с экспериментально установленным фактом увеличения скорости данного процесса при интенсификации аэрации, поскольку в уравнение скорости реакции входит концентрация растворенного в воде кислорода, а она постоянна при различной интенсивности процесса аэрирования. Так как было выдвинуто предположение, что окисление ионов двухвалентного железа протекает не только в объеме жидкой фазы за счет растворенного в ней кислорода, но и на границе раздела фаз вода-воздух, то, следовательно, скорость процесса зависит, в том числе и от величины этой поверхности.

Как итог всего вышесказанного, можно сделать вывод, что окисление растворенного железа в воде является очень сложным процессом и требует дальнейшего изучения.

Работа выполнена при поддержке РХТУ им. Д.И. Менделеева ВИГ регистрационный номер X-2020-011

Список литературы

1. Самойлов И.В. Как очистить воду. Изд. «Феникс», Ростов-на-Дону, 2000.
2. УДК 551.49 Ничипор В.В. Рациональные методы и режимы обезжелезивания подземных вод – Мн.: БелНИИНТИ, 1991 – 20 с.
3. Михаилик Л.Г., Гольбург Я.Н., Рапопорт Л.С. Очистка и использование природных и сточных вод – Минск, Наука и техника, 1973 – 23-27с.
4. Асс Г.Ю., Трубецкой Б.Е. Очистка подземной воды от железа и марганца – Водоснабж. и сан.техн., 1979, №10, 13-14с.
5. Аверина Ю.М. Интенсификация процесса аэрации при удалении ионов железа из воды-автореферат диссертации / Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Москва, 2016.
6. Курбатов А.Ю., Аверина Ю.М., Меньшиков В.В., Аснис Н.А., Ваграмян Т.А., Юрьева Г.А., Мамателашвили М.Т. Окисление двухвалентного железа в различных водных средах. Химическая промышленность сегодня. Москва, 2013. № 10. С. 36-41.

УДК 004.8

Егоров М.С., Дударов С.П.

ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ЛЫЖНЫХ СМАЗОК ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ПОГОДНЫХ УСЛОВИЯХ

Егоров Матвей Сергеевич, студент 2 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Дударов Сергей Павлович, к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий,
e-mail: dudarov@muctr.ru,

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия
125047, Москва, Миусская пл., д. 9

В статье рассмотрен план сбора экспериментальных данных для обучения искусственной нейронной сети в виде многослойного перцептрона для решения задачи улучшения скоростных качеств лыж путём нахождения наилучшего варианта смазочного материала. Определён состав входных и выходных переменных нейросетевой модели, прогнозирующей состав смазки для определённой комбинации погодных условий и состояния трассы.

Ключевые слова: искусственная нейронная сеть, многослойный перцептрон, лыжный спорт, лыжная смазка.

APPLICATION OF ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS TO OPTIMIZE THE CHEMICAL COMPOSITION OF SKI WAXES UNDER DIFFERENT WEATHER CONDITIONS

Egorov M. S., Dudarov S.P.

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

The paper describes the plan of experimental data collection for training an artificial neural network in the form of a multilayer perceptron to solve the problem of improving the speed performance of skis by finding the best wax composition. The composition of input and output variables of the neural network model that predicts the lubricant composition for a certain combination of weather conditions and piste condition is determined.

Keywords: artificial neural network, multilayer perceptron, skiing, ski wax.

Спорт высоких достижений давно уже немислим без достижений современной науки и технологий, будь то химические науки, информационные технологии или что-то иное. Не без генетической предрасположенности, конечно, сейчас побеждает, как правило, тот, кто умнее, хитрее, эффективнее тренировался, постоянно следил за здоровьем и, в конечном итоге, подготовился к соревнованиям так, что вышел на старт, находясь на пике своих физических и психологических возможностей. Однако зачастую даже этого может не хватить для высокого результата.

С развитием химии, открытием или синтезом новых материалов спорт серьёзно преобразился. Так, в феврале 2020 года новую модель кроссовок, в которых были установлены несколько рекордов в беге, были готовы признать допингом. Разбирательства начались после того, как заметили, что на большинстве крупных стартов из 36 подиумов 31 был занят спортсменами, которые бежали в определённой модели кроссовок. По результатам исследований Мировая ассоциация легкоатлетических федераций ввела ограничения, под которые попала только более совершенная модель этих кроссовок.

В лыжных гонках насколько сильно бы не был готов спортсмен, он не сможет победить, если у его лыж будет плохое скольжение. Если сравнить современный уровень развития данного вида спорта с тем, что было 20–30 лет назад, можно заметить

большие отличия в экипировке и в скоростях. Основные факторы, влияющие на получение высоких результатов в лыжных гонках: индивидуальные способности спортсмена, технологические особенности инвентаря (лыж, палок, креплений, спортивного костюма), применяемые при создании технологии, совместимость со спортсменом по физическим параметрам, структура пластика, а также, конечно, смазка. Из всего перечисленного способности спортсменов остались примерно на том же уровне, а вот экипировка и смазка претерпели большие изменения.

В настоящее время основу состава большинства гоночных смазок составляет фтор. Обычно его содержание в пределах 50%. Это связано с гидрофобностью фтора. Но при этом зависимость скорости скольжения от содержания фтора и других веществ не прямо пропорциональная [1]. При этом из-за того что структура и свойства снега зависят от погоды и происхождения, не существует универсальных смазок, которые при любых условиях будут выдавать хорошее скольжение. Поэтому производители не прекращают исследования и тесты для поиска новых составов, которые хорошо бы показали себя на лыжне. Одновременно с этим Международная федерация лыжного спорта и Международный союз биатлонистов с сезона 2021/2022 спортивного года хотят ввести запрет на использование фтора в лыжных смазках из-за вреда

окружающей среде и здоровью людей.

Смазка для лыж обычно состоит из 2–4 химических веществ или материалов, смешанных в разных пропорциях. Для использования спортсменом в гонке он должен пройти непростой путь. Конечно, важен сам первоначальный состав смазки, подбираемый на основе предыдущего опыта. Например, тугоплавкий парафин подходит больше для холодной погоды и, наоборот, в оттепель работают лучше легкоплавкие парафины. Выбранные варианты состава сравнивают между собой при одних и тех же погодных условиях. В целом этот процесс очень долгий и трудоёмкий, требует наличия большой экспериментальной базы, наличия высококвалифицированных экспертов и, несмотря на всё, чреват ошибками из-за огромной роли неопределённости и неполноты исходной информации, требующейся для принятия окончательного решения.

Как показали исследования [2], учёт влияния погодных условий включает сразу несколько факторов, из-за которых меняется взаимодействие снега со смазкой: температуры снега, температуры воздуха, влажности, возраста снежного покрова, происхождения снега (искусственный или натуральный).

Узнать наверняка с помощью традиционных подходов к моделированию, какой состав окажется наилучшим, из-за многочисленности влияющих факторов практически невозможно. На практике для решения подобных задач в последние годы применяют искусственные нейронные сети. Опыт их применения показал, что они справляются с решением поставленной задачи значительно быстрее и эффективнее, чем обычные математические модели [3–4]. Эффективность прогнозирования физических и химических свойств веществ и материалов с помощью нейронных сетей уже получила подтверждение. Так, в 2019 году группа учёных из США реализовала модель, предсказывающую набор некоторых молекулярных и/или атомных свойств по атомарным координатам и числам [3]. Незадолго до этого, в 2018 году другая группа реализовала нейросетевую модель, которая предсказывает энергию образования лишь на основе элементного состава [4].

Для решения задачи нахождения лучшего состава смазки при заданных погодных условиях до настоящего времени не использовались какие-либо другие методы, кроме вышеупомянутого слепого тестирования. В данной работе мы предлагаем на основе современного опыта применения искусственных нейронных сетей при прогнозировании свойств веществ и состава материалов использовать многослойные перцептроны в качестве основного инструмента математического моделирования.

Многослойные перцептроны – это класс искусственных нейронных сетей прямого распространения, имеющих, в общем случае, произвольное количество входных и выходных переменных [5]. В их структуре должно быть несколько слоёв нейронов (не менее двух). Количество входов такой сети соответствует количеству независимых входных переменных математической модели, а количество нейронов выходного слоя и,

соответственно, выходов нейронной сети – количеству выходных переменных математической модели. Количество скрытых нейронов может варьироваться разработчиком модели в зависимости от сложности связи входов и выходов, разнообразия и количественного состава примеров обучающей выборки.

Данная архитектура сети идеально подходит под наши задачи – прогнозирование состава и пропорций компонентного состава, благодаря которому скольжение лыж будет наилучшим при заданных характеристиках снега.

Для настройки весовых коэффициентов, определяющих силу влияния межнейронных связей в структуре сети, используется метод обратного распространения ошибки. Это наиболее распространённый метод для данного класса нейронных сетей. Его суть заключается в том, что сигнал ошибки каждого выходного значения, рассчитанный на текущем такте обучения, распространяется по слоям в обратном направлении (от выходного к первому) с учётом тех же весовых коэффициентов, которые использовались при прямом прохождении входных сигналов по нейронной сети и вызывали данную ошибку [5].

Для решения задачи предлагаются следующие входные переменные прогнозирующей модели:

- температура воздуха – от –30 до +10 градусов Цельсия (во время забега, в промежутке времени 12–24 ч назад, в промежутке времени 1–12 ч назад);
- температура снега – от –32 до +2 градусов Цельсия;
- количество дней, прошедших с выпадения снега (например, 0 – сегодня, 1 – вчера и т. д.);
- абсолютная влажность воздуха;
- идёт ли снег во время гонки – да/нет;
- оценка показателя скольжения – от 0 до 1.

Выходные переменные – это пропорции вещества, новой смазки. Каждая выходная переменная должна соответствовать определённому компоненту смазки. Значение выхода – доля соответствующего вещества в результирующем составе. Поскольку на выходные значения должно накладываться нормирующее ограничение (сумма значений выходов равна единице), сеть должна включать соответствующий нормирующий слой (рис. 1). Очевидно, что может быть несколько нейросетевых моделей подобного типа, имеющих разный набор выходов (компонентов смазки).

Для формирования обучающей выборки предлагается организовать сбор данных с помощью точно откалиброванных тестирующих приборов, так называемых мышек, каждая из которых представляет собой брус в форме продолговатого прямоугольного параллелепипеда с определёнными характеристиками массы и поверхности. На каждую большую грань мышки может быть нанесена смазка определённого состава.

Экспериментальная часть должна включать следующие этапы:

1. На разные поверхности одной или нескольких мышек наносятся различные тестовые образцы смазки и фиксируются все входные переменные, кроме оценки показателя скольжения.

2. Выбирается участок трассы, где будут проходить тесты скорости. Этот участок должен удовлетворять определённым требованиям: спуск с небольшим уклоном, чтобы мышка могла скатываться без дополнительного воздействия, снег должен быть однородным достаточно чистым.

3. С помощью секундомера фиксируется время

прохождения выбранного участка каждым образцом.

4. После тестирования образцов по полученным значениям времени прохождения стандартного участка рассчитывается оценка показателя скольжения. Значение показателя, равное 0, соответствует наибольшему времени прохождения дистанции, а значение 1 – наименьшему времени, затраченному на прохождение дистанции. Общий характер зависимости между показателем и затраченным временем, в общем случае, принимается линейным.

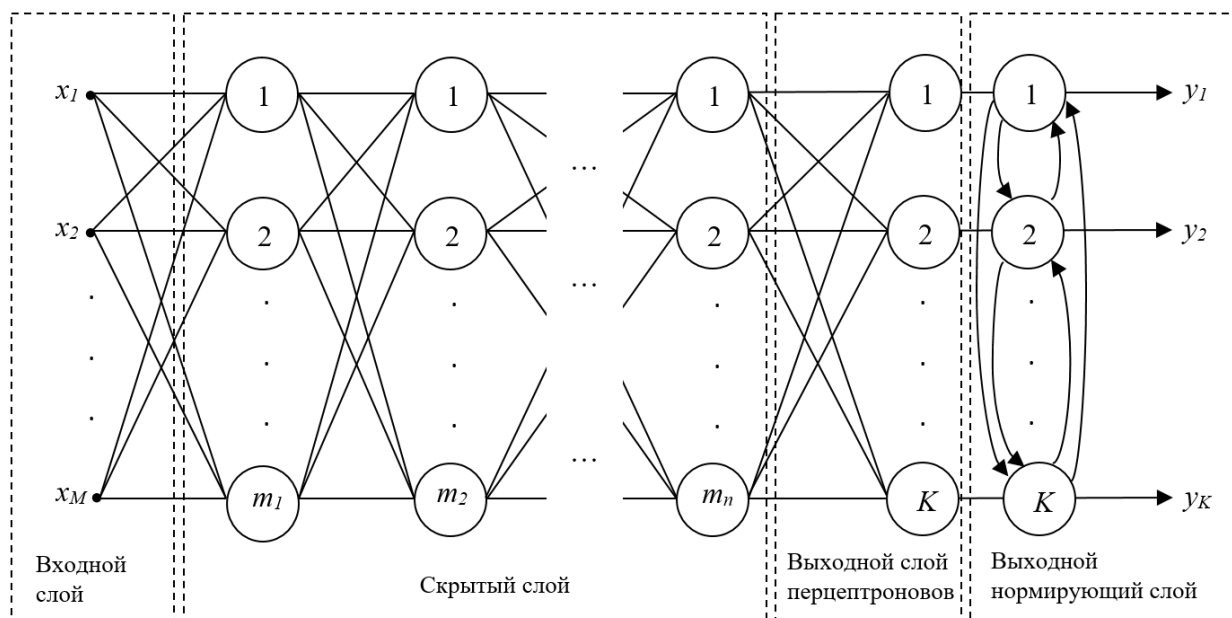


Рис. 1. Схема многослойного перцептрона для прогнозирования состава лыжной смазки

Важно получить при заданных погодных условиях как можно больше обучающих примеров от образцов с различным составом смазочного материала. Эксперименты должны повторяться на других участках при разных погодных условиях. Для достижения максимальной точности нейросетевых моделей важно иметь максимальный объём обучающей выборки, поэтому, чем больше будет проведено тестов, тем более качественным окажется результат практического использования многослойных перцептронов.

Перед обучением нейронных сетей полученные данные должны быть предварительно обработаны: исключены повторы, решены противоречия, выполнена нормализация значений в пределах каждой переменной.

На этапе практического использования обученного перцептрона в качестве значения последней входной переменной задаётся максимальная оценка показателя скольжения, равная 1, для которой и будет ожидать наиболее оптимальный в данных погодных условиях состав смазки.

В перспективе предложенный подход к нахождению идеального состава смазочного материала для обработки лыж может значительно улучшить спортивные результаты и повысить экономическую эффективность занимающихся этим производством. Если же составы, полученные таким образом, действительно

докажут свою эффективность, можно будет отказаться от высоких затрат на сервисные бригады, сопровождающие спортсменов на каждом соревновании.

Список литературы

1. Rogowski I. Influence of fluorine-based additive content on the physical and physicochemical properties of ski gliding wax. – Cold Regions Science and Technology. – 42(5), 2007. – PP. 145-150.
2. S. C. Colbeck, G. C. The thermal response of downhill skis. – Warren. Journal of Glaciology, Volume 37, Issue 126. – 1991. – PP. 228-235.
3. Roman Zubatyuk, Justin S. Smith, Jerzy Leszczynski, Olexandr Isayev. Accurate and transferable multitask prediction of chemical properties with an atoms-in-molecules neural network. – Science Advances, vol. 5, no. 8. – 2019. – PP. 9.
4. Dipendra Jha, Logan Ward, Arindam Paul, Weikeng Liao, Alok Choudhary, Chris Wolverton, Ankit Agrawal. ElemNet: Deep Learning the Chemistry of Materials From Only Elemental Composition. – Scientific Reports. – 8(1) 2018. – PP. 13.
5. Дударов С. П., Папаев П. Л. Теоретические основы и практическое применение искусственных нейронных сетей. – М.: ПХТУ им. Д. И. Менделеева, 2014. – 104 с.

УДК 004.021:621.643.8:620.193

Жарков В.В., Савицкая Т.В.

РАЗРАБОТКА И АПРОБАЦИЯ ПРОГРАММНОГО ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ЗАДАЧ ОЦЕНКИ ФАКТОРОВ ВЛИЯНИЯ СОСТОЯНИЯ МАГИСТРАЛЬНЫХ НЕФТЕПРОВОДОВ И МАГИСТРАЛЬНЫХ НЕФТЕПРОДУКТОПРОВОДОВ НА СТЕПЕНЬ РИСКА АВАРИЙ

Жарков Владислав Владимирович – магистрант 2-го года обучения кафедры кибернетики химико-технологических процессов; vladislav.zharkov@internet.ru.

Савицкая Татьяна Вадимовна – доктор технических наук, профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов;

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

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

Предложен алгоритм оценки риска аварий на магистральных нефтепроводах и нефтепродуктопроводах. На языке программирования Delphi разработано программное приложение, предназначенное оценки факторов влияния состояния опасных производственных объектов магистральных нефтепроводов и магистральных нефтепродуктопроводов на степень риска аварий.

Ключевые слова: оценка риска аварий, балльная оценка, опасный производственный объект, магистральный нефтепровод, магистральный нефтепродуктопровод, программное приложение.

DEVELOPMENT AND TESTING OF A SOFTWARE APPLICATION FOR THE TASKS OF ASSESSING THE FACTORS OF INFLUENCE OF THE STATE OF MAIN OIL PIPELINES AND MAIN OIL PRODUCT PIPELINES ON THE DEGREE OF RISK OF ACCIDENTS

Zharkov V.V., Savitskaya T. V.

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

An algorithm for assessing the risk of accidents on oil trunk pipelines and oil product pipelines is proposed. A software application has been developed in the Delphi programming language, designed to assess the factors of influence of the state of hazardous production facilities of main oil pipelines and main oil product pipelines on the degree of risk of accidents.

Key words: accident risk assessment, score assessment, hazardous production facility, main oil pipeline, main oil product pipeline, software application.

Введение

Имеется два зарубежных программных комплекса (ПК) PHAST [1] и ALOHA [2]. Они используются для количественной оценки риска в нефтегазовой и химической промышленности, но в них не реализованы функциональные возможности для магистральных трубопроводов. Так же есть отечественные продукты ТОХИ+Гидроудар [3] и ПК «Русь» [4], но обе программы являются платными, поэтому разработка программы для исследования факторов влияния состояния магистральных нефтепроводов на степень риска аварий актуальна.

За основу разработанного программного приложения была взята методика «Балльная оценка факторов влияния состояния опасных производственных объектов магистральных нефтепроводов и магистральных нефтепродуктопроводов (ОПО МН и МНПП) на степень риска аварий» [5]. Методика состоит из 5 групп факторов: антропогенные воздействия, коррозия, природные воздействия и дефекты тела труб (или сложность строительно-монтажных работ для проектируемого участка) (рис. 1). Предложен алгоритм расчета (рис.1), предназначенный для эксплуатируемых и проектируемых трубопроводов:

1) Пользователь вводит параметры трубопровода: коэффициент прочности, способ

прокладки, внешние антропогенные воздействия, информацию о коррозии, природные воздействия, конструктивно-технологические факторы и дефекты тела трубы;

2) Расчет балльной оценки внешних антропогенных воздействий (глубина заложения трубопровода, уровень антропогенной активности и опасность диверсий);

3) Расчет балльной оценки коррозии (коррозионная активность грунта, наличие подземных металлических сооружений и энергосистем, наличие электро-химической защиты);

4) Расчет балльной оценки природных воздействий (вероятность перемещений грунта и проведение превентивных мероприятий);

5) Расчет балльной оценки конструктивно-технологических факторов (отношение фактической толщины стенки трубы к требуемой, усталость металла, возможность возникновения гидравлических ударов, системы телемеханики);

6) Расчет балльной оценки дефектов тела трубы для эксплуатируемого участка МН и МНПП (количество дефектов и диагностика) или расчет балльной оценки сложности строительно-монтажных работ для проектируемого участка (категория участка по сложности производства работ);

7) Расчет балльной оценки нефтепровода;

8) Расчет удельной частоты аварий на нефтепроводе.

На рисунке 1 представлен алгоритм, реализованный в программном приложении в среде программирования Delphi.

Экспериментальная часть

В свободном доступе находится характеристика участка «Терновка-Красноармейская» нефтепровода «Куйбышев-Лисичанск» [6, 7].

Так как это охраняемый объект некоторые данные были предположены из-за их отсутствия в свободном доступе (таблица 1). Введем исходные данные в программу и проведем расчет (рис. 2)

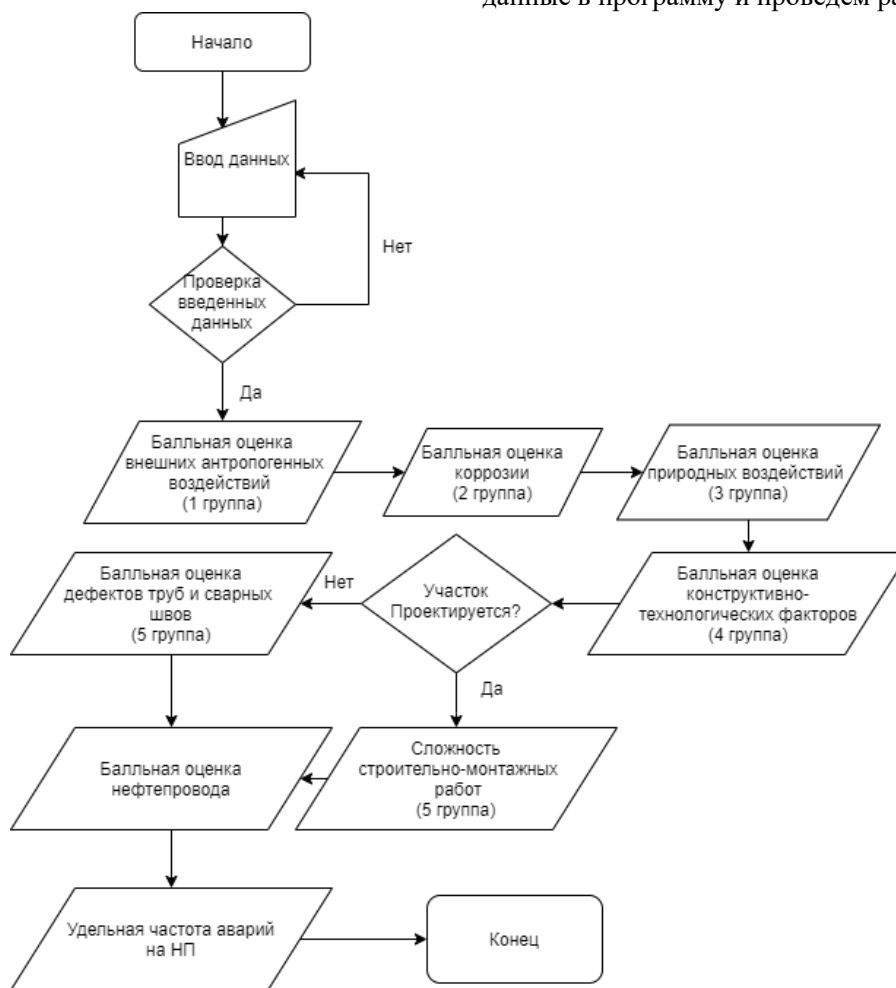


Рис. 1. Блок-схема расчета балльной оценки

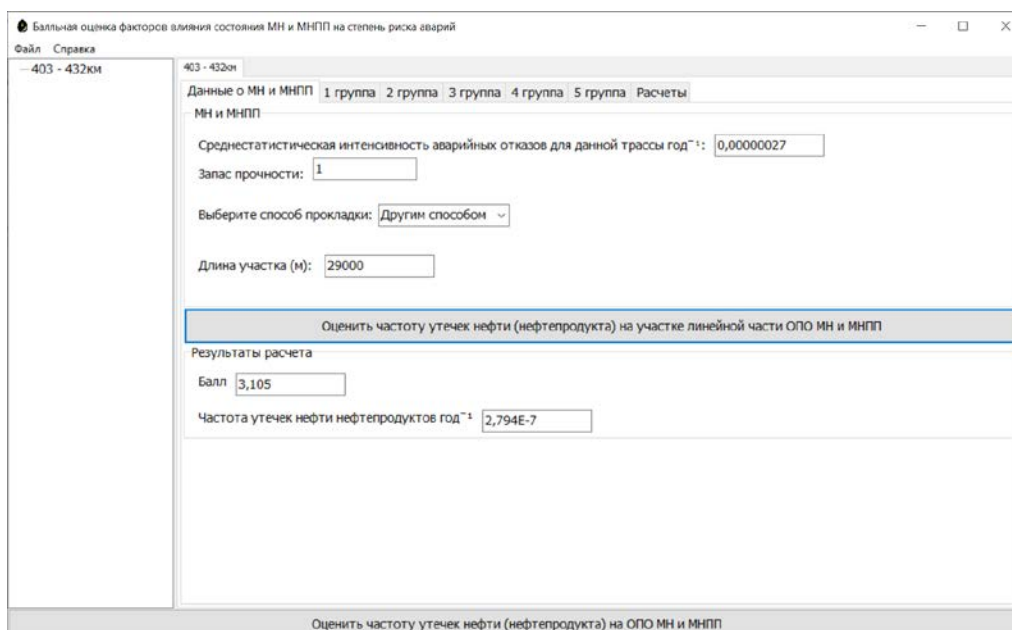


Рис. 2. Результаты расчета программного модуля

Таблица 1. Таблица исходных данных

1 Группа					
Глубина заложения, м	Плотность населения, чел/км ²	Наличие дорог	Наличие нефтепроводов и др.	Проведения строительных работ	Опасность диверсий и врезок
1	24	Есть	Большое кол-во	Отсутствуют	Попытки не фиксировали
2 Группа					
Удельное сопротивление грунта, Ом·м	Кислотность грунта, pH	Кол-во металлических сооружений	Наличие энергосистем	Ввода электро – химической защиты	Измерения с помощью выносного электрода
54	6,8	От 1 до 10	Присутствует, но есть защита	Одновременно с нефтепроводом	Проводилось 5 лет назад
3 Группа					
Вероятность перемещения грунта	Несущая способность грунта	Наличие линейной арматуры	Меры по ослаблению напряжений	Мероприятия по изменению свойств грунта	Мониторинг деформаций грунта и перемещений
Отсутствует	Низкая	Линейная арматура на фундаменте	Не имели места	Проводятся или не требуются	Проводятся 2 раза в год
4 Группа					
Отношение толщины стенки к расчетной	Зависимость амплитуды нагрузки от числа циклов нагружения		Вероятность гидравлических ударов	Системы телемеханики и автоматики	
0,7336	Перепад давления достоверно оценить невозможно			Системы обеспечивают телеизмерение давления	
5 Группа					
Количество дефектов (не более 1 года)	Количество дефектов (от 1 до 6 лет)	Количества лет, прошедших со дня последнего пропуска ВИП	Вид дефекта	Тип внутритрубный инспекционный прибора (ВИП)	
Более 10	Более 50	3	Дефекты с предельным сроком эксплуатации от 1 до 6 лет	«Ультраскан-WM»	

По результатам программы бальная оценка данного участка нефтепровода равна 3,105 балла, а частота утечек нефти 2,794E-7.

Данный нефтепровод работает с 1977 года. Так как у нас нет точных данных по удельной статистической вероятности возникновения аварий и были взяты средние данные, поэтому вероятность возникновения аварий выше на реальном нефтепроводе. Поэтому возьмем исходные данные от эксплуатируемого нефтепровода и спроектируем новый.

По результатам программы бальная оценка данного участка нефтепровода равна 2,221 балла, а частота утечек нефти 1,999E-7.

В таблице 2 представлено сравнения полученных данных. Видно, что для 1 и 3 группы факторов балл не отличается. Это происходит, потому что по методике практически нет отличий расчета для эксплуатируемого и проектируемого участка нефтепровода. Основные отличия в методике для группы 5. Так как для эксплуатируемого участка учитываются множество статистических данных, которых нет для проектируемых нефтепроводов.

Таблица 2. Полученные результаты

	Эксплуатируемый участок	Проектируемый участок
1 группа факторов		1,354
2 группа факторов	3,888	3,775
3 группа факторов		4,45
4 группа факторов	6,8	5,865
5 группа факторов	5,978	0
Общий балл	3,105	2,221
Частота утечек нефти год ⁻¹	2,794E-7	1,999E-7

На основе рассчитанных данных программой можно сделать вывод, что эксплуатируемый нефтепровод имеет балльную оценку выше средней балльной оценке равной 3. Поэтому целесообразно спроектировать новый участок нефтепровода, чтобы избежать аварий и утечек нефти.

Заключение

Разработанное программное приложение может использоваться для изучения факторов влияния состояния ОПО МН и МНПП на степень риска аварий. Программа позволяет получить не только конечный результат, но и исследовать влияние факторов на риски возникновения аварий.

Список литературы

1. Det Norske Veritas (DNV). [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.dnv.com/> (Дата обращения: 29.04.2021).
2. ALOHA Software. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.epa.gov/cameo/aloha-software> (Дата обращения: 29.04.2021).
3. ТОХИ+Гидроудар. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://toxi.ru/produkty/programmnoe-sredstvo-toxidroudardar> (Дата обращения: 29.04.2021).

4. Программный комплекс Русь. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.aieco.ru/index.html> (Дата обращения: 29.04.2021).

5. Приказ Федеральной службы по экологическому, технологическому и атомному надзору от 17 июня 2016 г. N 228 "Об утверждении Руководства по безопасности "Методические рекомендации по проведению количественного анализа риска аварий на опасных производственных объектах магистральных нефтепроводов и нефтепродуктопроводов" [Электрон. ресурс]: Доступ из справ.-правовой системы «КонсультантПлюс». Режим доступа: <http://www.consultant.ru/cons/cgi/online.cgi?req=doc&base=EXP&n=660703#06008688047856834> (дата обращения: 15.05.2021).

6. Электроэнергетика. Нефть и Газ. Сайт для поставщиков: сайт. – URL: <https://energybase.ru/pipeline/kuzybyshev-lisichansk> (дата обращения: 15.05.2021).

7. Архив электронных ресурсов СФУ: сайт. – URL: http://elib.sfu-kras.ru/bitstream/handle/2311/35137/meshkov_e.v._znb1304v1.pdf?sequence=1 (дата обращения: 15.05.2021).

УДК 510.644.4:665.63

Казакова В.Н., Михайлова П.Г.

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ С НЕЧЕТКИМИ РЕГУЛЯТОРАМИ ДЛЯ УСТАНОВКИ ПЕРВИЧНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ НЕФТИ

Казакова Валентина Николаевна – магистрант 2-го года обучения кафедры кибернетики химико-технологических процессов.

Михайлова Павла Геннадьевна – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов, e-mail: mikhaylova_pavla@muctr.ru,

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

Россия, Москва, 125480, Героев Панфиловцев, дом 20.

В статье представлены результаты разработки одноконтурной и каскадной систем автоматического регулирования с адаптивным нечетким регулятором для барометрического конденсатора вакуумного блока установки ЭЛОУ-АВТ-6 в Simulink. Были реализованы одноконтурные системы автоматического регулирования уровня дизельного топлива в барометрическом конденсаторе с цифровым ПИД-регулятором, нечетким ПИД-регулятором, нечетким ПИД-регулятором с использованием 2-D интерполяционной таблицы в Simulink.

Ключевые слова: система управления, первичная переработка нефти, нечеткий регулятор, Simulink, переходный процесс.

DEVELOPMENT AND RESEARCH OF CONTROL SYSTEMS WITH FUZZY REGULATORS FOR INSTALLATION OF PRIMARY PETROLEUM REFINING

Kazakova V.N., Mikhaylova P.G.

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

The article presents the results of the development of a single-loop and cascade automatic control systems with an adaptive fuzzy controller for the barometric condenser of the vacuum unit of the ELOU-AVT-6 installation in Simulink. Single-loop systems for automatic control of the level of diesel fuel in a barometric condenser with a digital PID controller, fuzzy PID controller, fuzzy PID controller were implemented using a 2-D lookup table in Simulink.

Key words: control system, primary oil refining, fuzzy controller, Simulink, transient process.

Введение

К одному из основных процессов в нефтепереработке относится первичная переработка нефти. От нее зависит качество продукции, получаемой в процессе всего производства. Именно поэтому возникает проблема, связанная с обеспечением основных показателей качества процессов, которые протекают при первичной переработке нефти. Одно из основных направлений, связанных с решением этой проблемы, состоит в использовании аппарата нечетких систем: нечетких множеств, нечеткой логики, нечеткого моделирования.

Экспериментальная часть

Объектом исследования является барометрический конденсатор в вакуумном блоке установки ЭЛОУ-АВТ-6. Установка ЭЛОУ-АВТ-6 осуществляет процессы обезвоживания и обессоливания нефти, ее атмосферно-вакуумную перегонку и вторичную перегонку бензина. В барометрический конденсатор по двум трубам входят газы разложения из колонны и конденсируются за счет контакта с охлаждающей жидкостью дизельным топливом. Абсорбент поступает на прием насосов и выводится с установки. Неконденсирующиеся газы и пары отсасываются трехступенчатым парожеторным насосом. Основным показателем технологического процесса является уровень дизельного топлива (ДТ) прямогонного в конденсаторе. Коррекция ведется по

косвенному показателю – расходу дизельного топлива на выходе из конденсатора.

Передаточная функция объекта по каналу процент открытия клапана – уровень ДТ в барометрическом конденсаторе [1]:

$$W_1 = \frac{6,0528}{1 + 1075,1s} e^{-19,8s} \text{М} \quad (1)$$

Передаточная функция объекта по каналу процент открытия клапанам – расход дизельного топлива [1]:

$$W_2 = \frac{8,3 \cdot 10^{-4}}{1 + 16,796s} e^{-6,06s} \text{М}^3/\text{с} \quad (2)$$

Для данного объекта управления (ОУ) было произведено моделирование в Simulink следующих систем автоматического регулирования (САР): одноконтурной и каскадной с ПИ- и ПИД-регуляторами. В качестве вспомогательного регулятора в каскадной системе используется ПИ-регулятор. В блоке Step (рис. 1) задается ступенчатое воздействие в виде закрытия клапана с 58% до 55%.

Графики переходных процессов для данных систем представлены на рис. 1. Каскадная САР обеспечивает меньшее значение динамической ошибки. В одноконтурной САР динамическая ошибка составляет 14%, а в каскадной – 5%. Время регулирования в одноконтурной системе – 15000 с, в каскадной – 8000 с.

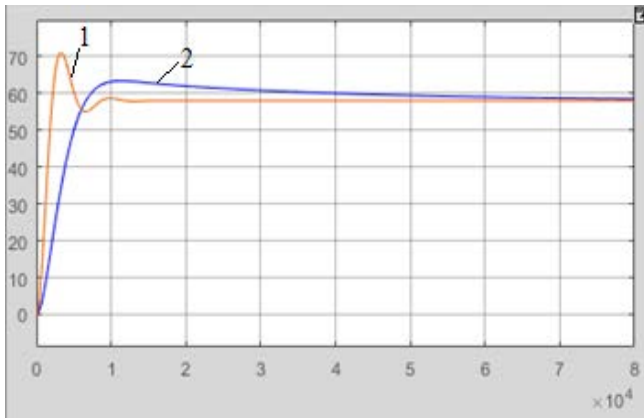


Рис. 1. График переходного процесса одноконтурной (1) и каскадной (2) САР с ПИ- и ПИД-регуляторами.

Значения P, I, D в ПИД-регуляторе для одноконтурной САР: $P=5 \cdot 10^{-4}; I=2 \cdot 10^{-4}; D=2 \cdot 10^{-3}$.

Значения P, I, D в основном регуляторе для каскадной САР: $P=4 \cdot 10^{-3}; I=52,15 \cdot 10^{-6}; D=4 \cdot 10^{-3}$.

Значения P, I в вспомогательном регуляторе для каскадной САР: $P=9,8 \cdot 10^{-3}; I=3 \cdot 10^{-6}$.

В настоящей работе проведено исследование различных вариантов использования подхода нечеткой логики в системах управления:

одноконтурной и каскадной САР с адаптивными нечеткими регуляторами.

Нечеткий регулятор осуществляет процесс выработки управляющих воздействий на базе нечеткой логики. Нечеткая логика базируется на понятии нечетких множеств, на основе которой можно строить нечеткие аналоги всех математических понятий. В нечетком регуляторе на основе сформулированных правил (базы правил) типа ЕСЛИ-ТО осуществляется формирование логического решения – получение нечеткого множества в форме результирующей функции принадлежности [2].

Для рассматриваемого ОУ на основе статьи [3] были разработаны одноконтурная и каскадная САР с адаптивными нечеткими ПИ- и ПИД-регуляторами, которые учитывают нелинейные свойства объекта и обеспечивает требуемое качество регулирования.

В адаптивном нечетком регуляторе одноконтурной САР входами являются ошибка регулирования e и скорость ее изменения de , а выходами – пропорциональный коэффициент K_p , интегральный коэффициент K_i и дифференциальный коэффициент K_d ПИД-регулятора (рис. 2).

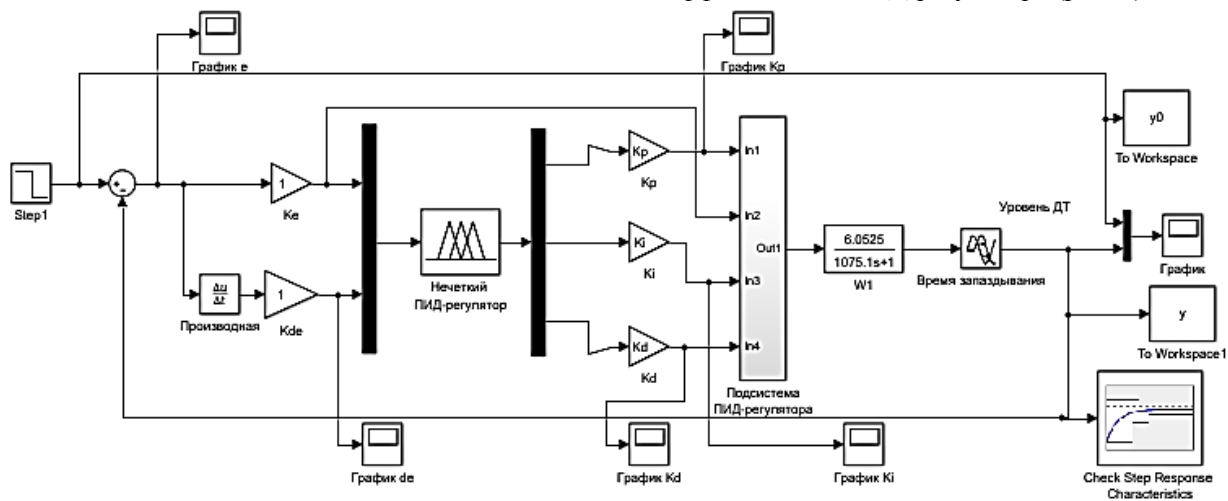


Рис. 2. Схема одноконтурной САР с адаптивным нечетким регулятором

Лингвистические переменные ошибка регулирования, скорость ее изменения, пропорциональный коэффициент K_p , интегральный K_i и дифференциальный коэффициент K_d принимают 7 значений: NB (negative big – отрицательное большое), NM (negative medium – отрицательное среднее), NS (negative small – отрицательное малое), Z (zero – нулевое), PS (positive small – положительное малое), PM (positive medium – положительное среднее), PB (positive big – положительное большое). Лингвистическая переменная NB описывается z-функцией, NM, NS, Z, PS, PM – треугольными функциями принадлежности, а PB – s-функцией.

В блоке нечеткого регулятора, изображенного на рис. 2. под названием «Нечеткий ПИД-регулятор», значения функций принадлежности (ФП) для ошибки и ее скорости изменяются в интервале $[-1.02, 1.02]$. Значения ФП для коэффициентов K_p, K_i и K_d изменяются в интервале $[-0.5 \cdot 10^{-3}, 20.02 \cdot 10^{-3}]$.

В блоке «Нечеткий ПИД-регулятор» реализованы продукционные правила, связывающие ошибку e и ее производную de с тремя коэффициентами K_p, K_i, K_d . База правил включает в себя 49 правил. Пример продукционного правила и продукционная модель представления знаний приведены ниже:

ЕСЛИ «ошибка e » = <отрицательно большое>
И «скорость ошибки e » = <отрицательно большое>, ТО «пропорциональный коэффициент K_p » = <положительно большое> И «интегральный коэффициент K_i » = <положительно малое> И «дифференциальный коэффициент K_d » = <отрицательно большое>.

$$M_1 \equiv [(X_1 = NB) \wedge (X_2 = NB) \rightarrow (X_3 = PB) \wedge (X_4 = PS) \wedge (X_5 = NB)]$$

Для моделирования нестационарности объекта управления производилось варьирование коэффициентов усиления K_p и постоянных времени объекта T в передаточной функции по каналу

управления. Менялись значения $K_{п}$ и T передаточной функции $W_1(s)$ в сторону увеличения и уменьшения ($K_{п}$ менялся на ± 1 , а T на -100 и на $+1000$), для того чтобы проверить адаптивные свойства нечеткого регулятора.

После проверки был сделан вывод, что система обладает адаптивными свойствами и подстраивается под изменяющиеся параметры объекта управления.

В каскадной САР, в отличие от одноконтурной, действуют два регулятора: основной ПИД-регулятор и вспомогательный ПИ-регулятор (рис. 3).

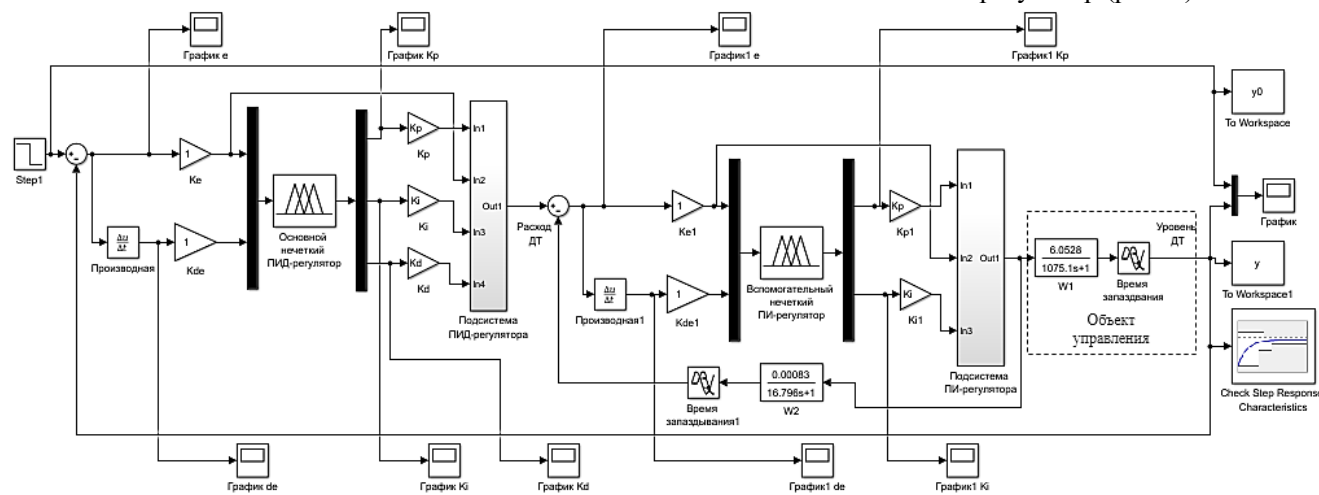


Рис. 3. Схема каскадной САР с адаптивным нечетким регулятором

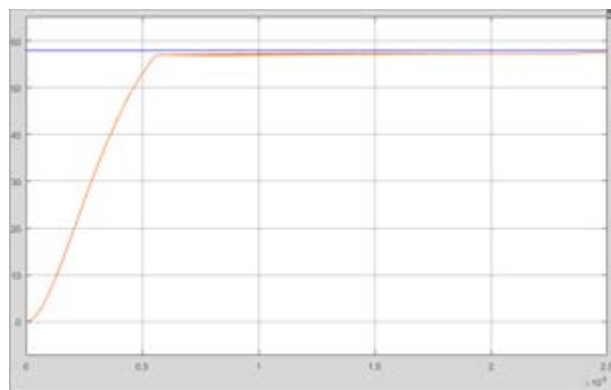
В блоке основного нечеткого ПИД-регулятора, значения ФП для коэффициентов K_p , K_i , K_d , при которых получается наилучший результат, изменяются в интервале $[-9 \cdot 10^{-5}, 9 \cdot 10^{-5}]$.

Во вспомогательном ПИ-регуляторе выходных переменных всего 2: пропорциональный коэффициент K_p и интегральный коэффициент K_i . Диапазон изменения значений ФП для этих коэффициентов – $[-3 \cdot 10^{-7}, 3 \cdot 10^{-7}]$.

В обоих регуляторах ФП для e и de так же изменяются в интервале $[-1.02, 1.02]$. Виды ФП, продукционные правила и их количество остаются такими же, как для одноконтурной САР.

В командной строке MATLAB для одноконтурной системы с адаптивным нечетким регулятором заданы значения коэффициентов $K_p=5 \cdot 10^{-4}$, $K_i=2 \cdot 10^{-4}$, $K_d=2 \cdot 10^{-3}$, которые получены при моделировании одноконтурной САР. Значения коэффициентов для каскадной САР с адаптивным нечетким ПИД-регулятором: $K_p=5 \cdot 10^{-4}$, $K_i=2 \cdot 10^{-4}$, $K_d=2 \cdot 10^{-3}$; с ПИ-регулятором: $K_p=9,8 \cdot 10^{-2}$, $K_i=3 \cdot 10^{-6}$.

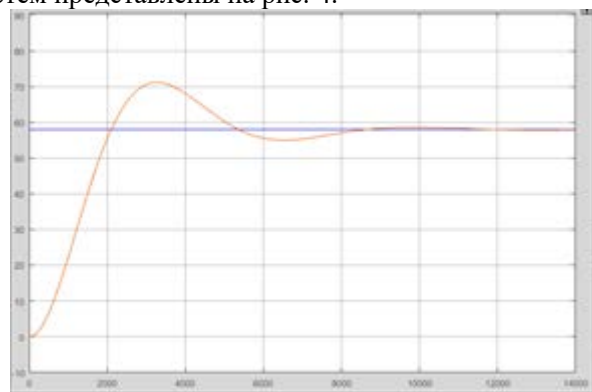
Графики переходных процессов для данных систем представлены на рис. 4.



б)

Рис. 4. Графики переходных процессов: а) – для одноконтурной САР с адаптивным нечетким ПИД-регулятором; б) – для каскадной САР с адаптивными нечеткими ПИД- и ПИ-регуляторами.

Так как реализованные схемы одноконтурной и каскадной САР имеют слишком большие времена регулирования и процесс моделирования в Simulink занимает много времени, на основе [4] были реализованы регуляторы уровня дизельного топлива в барометрическом конденсаторе для установки первичной переработки нефти с: цифровым ПИД-регулятором, нечетким ПИД-регулятором, нечетким ПИД-регулятором с использованием 2-D интерполяционной таблицы. В данном примере разрабатывается нелинейный нечеткий ПИД-регулятор для объекта в Simulink. Объект является системой с одним входом и одним дискретным выходом. Цель проекта состоит в том, регулятор обеспечивал заданное значение регулируемой величины. В блок Transfer Fcn введены значения передаточной функции для одноконтурной системы (1). Общий вид одноконтурной системы с цифровым, нечетким регулятором и интерполяционной таблицей изображен на рис. 5.



а)

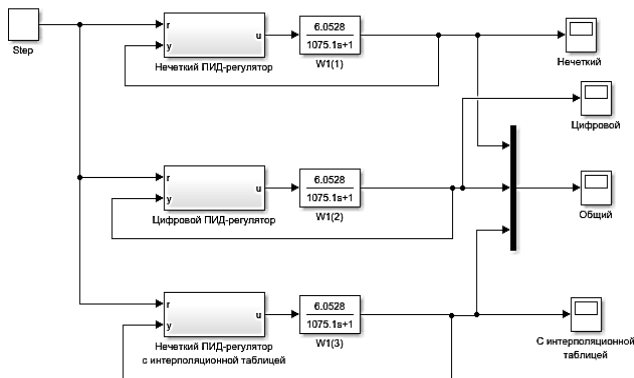


Рис. 5. Одноконтурная система с цифровым, нечетким регулятором и интерполяционной таблицей

В системах, изображенных на рис. 6–8, на вход подаются ошибка ($e(k)$) и изменение ошибки ($e(k) - e(k-1)$), а на выходе формируется значение регулируемой величины. В схемах ошибка $e(k)$ обозначается E , а изменение ошибки – CE , GE , GCE , GCU и GU – масштабные коэффициенты.

Цифровой ПИД-регулятор является ПИД-регулятором дискретного времени. Настройками регулятора являются K_p , K_i и K_d (рис. 6).

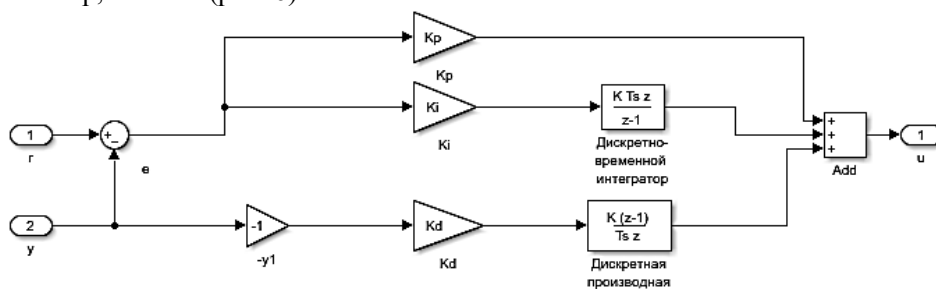


Рис. 6. Подсистема одноконтурной системы с цифровым ПИД-регулятором

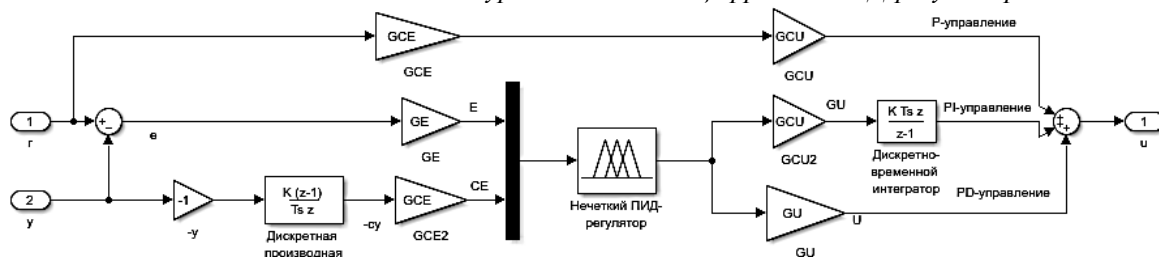


Рис. 7. Подсистема одноконтурной системы с нечетким ПИД-регулятором

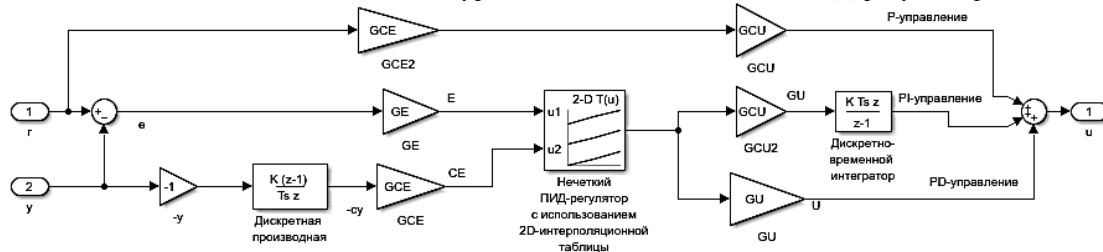


Рис. 8. Подсистема одноконтурной системы с нечетким ПИД-регулятором с использованием интерполяционной таблицы

Так как данный регулятор является цифровым ПИД-регулятором, а регулятор, используемый в одноконтурной системе (рис. 1) – непрерывным, то этот регулятор требует перерасчета коэффициентов K_p , K_i , K_d . По формулам из учебного пособия [5] был произведен перерасчет коэффициентов K_p , K_i и K_d и были получены следующие значения: $K_p=3$; $C_i=0.004$; $C_d=40$.

Нечеткий регулятор в этом примере находится в обратной связи и вычисляет пропорциональный, интегральный и дифференциальный коэффициенты с помощью нечеткого вывода (рис. 7) [4].

В системе с интерполяционной таблицей блок Fuzzy Logic Controller, который используется в нечетком ПИД-регуляторе, заменяется 2-D блоком Lookup Table (рис. 8).

Блоки Lookup Table используют для моделирования нелинейности. Блоки интерполяционной таблицы используют массивы данных для сопоставления входных значений с выходными значениями, аппроксимируя математические функции [6].

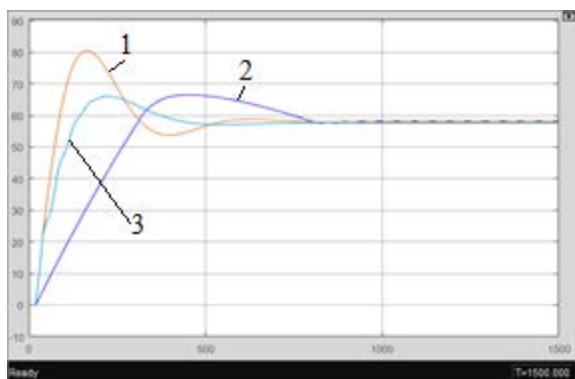


Рис. 9. Графики переходных процессов: 1 – схема с цифровым регулятором; 2 – схема с нечетким

регулятором; 3 – схема с нечетким регулятором с использованием интерполяционной таблицы

Графики переходных процессов для данных систем представлены на рис. 9.

По рис. 1, 4, 9 определены показатели качества переходных процессов для рассмотренных САР: динамическая ошибка и время регулирования (табл. 1).

Таблица 1. Показатели качества переходных процессов

№	Система	Динамическая ошибка (%)	Время регулирования (с)
1	Одноконтурная САР с ПИД-регулятором	14	15000
2	Каскадная САР с ПИД- и ПИ-регуляторами	5	80000
3	Одноконтурная САР с нечетким ПИД-регулятором	13	14000
4	Каскадная САР с нечеткими ПИД- и ПИ-регуляторами	0	25000
5	Одноконтурная система с цифровым ПИД- регулятором	22	800
6	Одноконтурная система с нечетким ПИД-регулятором	9	800
7	Одноконтурная система с интерполяционной таблицей	8	500

По табл. видно, что каскадная система с адаптивным нечетким ПИД- и ПИ-регуляторами имеет наименьшие значения динамической ошибки, но имеет большое время регулирования. Использование нечеткого регулятора дает лучший результат, по сравнению с цифровым регулятором. Наилучший результат достигается при использовании нечеткого регулятора с интерполяционной таблицей, так как этот график раньше выходит на постоянное заданное значение и имеет наименьшую динамическую ошибку (8%).

Заключение

На основе проведенного исследования использования подхода нечеткой логики в САР можно сделать следующие выводы: все рассмотренные системы с нечеткими регуляторами позволяют в процессе функционирования объекта управления адаптировать коэффициенты регулятора при изменении параметров ОУ. Наиболее простая в реализации схема – это схема с нечетким ПИД-регулятором с интерполяционной таблицей. Ее применение наиболее целесообразно для одноконтурной системы регулирования уровня ДТ в барометрическом конденсаторе, так как этот метод обеспечивает наилучшие значения показателей качества переходного процесса: значение динамической ошибки равно 8%, время регулирования – 500 с.

Список литературы

- Власов С.А., Шамшиева Я.С. Автоматизация барометрического конденсатора вакуумсоздающей системы установки АВТ // Химическая технология и биотехнология. – Пермь. – 2019. – №3. – С. 64-75.
- Гостев В. И. Нечеткие регуляторы в системах автоматического управления. – К.: «Радиоаматор», 2008.– 972 с.
- Кудинов Ю.И., Колесников В.А., Дургарян И.С., Пашенко А.Ф., Белова О.Н. Построение и настройка нечеткого адаптивного ПИД-регулятора// Информатика и системы управления. – Благовещенск. – 2016. – №3(49). – С. 86-96.
- Реализуйте нечеткий ПИД-регулятор в Simulink, используя интерполяционную таблицу // Документация MATLAB [Электронный ресурс]. – Режим доступа – <https://docs.exponenta.ru/R2019a/fuzzy/implement-fuzzy-pid-controller-in-simulink-using-lookup-table.html> (дата обращения: 25.04.2021).
- Кафаров В. В., Перов В. Л., Егоров А. Ф. Цифровые системы автоматического управления химико-технологическими процессами и системами: учебное пособие. – МХТИ им. Д.И. Менделеева. - М. : МХТИ, 1987. – 49 с.
- Черных И. В. Simulink: Инструмент моделирования динамических систем // Консультационный центр MATLAB – 2003. [Электронный ресурс]. – Режим доступа – <http://lokan.narod.ru/> (дата обращения: 25.04.2021).

УДК 005

Казанова М.А., Савицкая Т.В.

СИНТЕЗ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО И ЦИКЛИЧЕСКОГО СПОСОБОВ ОРГАНИЗАЦИИ ВЫПУСКА МНОГОАССОРТИМЕНТНОЙ ПРОДУКЦИИ

Казанова Мария Анатольевна – магистрант 1-го года обучения кафедры кибернетики химико-технологических процессов; mashka-romashka2806@mail.ru.

Савицкая Татьяна Вадимовна – доктор технических наук, профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

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

В статье рассмотрена актуальность проблемы синтеза как основного этапа создания химико-технологической системы. Разработан алгоритм синтеза химико-технологической системы и на его основе произведен синтез системы для 3 продуктов: эмоксипин, арбидол, тиоиндол в программном модуле «SoF CES». Определена наилучшая последовательность выпуска ассортимента этих продуктов в программном модуле «I2S».

Ключевые слова: химико-технологическая система, синтез химико-технологической системы, организация выпуска продукции, многоассортиментное производство.

SYNTHESIS OF A CHEMICAL-TECHNOLOGICAL SYSTEM AND RESEARCH OF A CONSISTENT AND CYCLIC METHODS OF ORGANIZING THE PRODUCTION OF MULTI-ASSORTMENT PRODUCTS

M.A. Kazanova, T.V. Savitskaya

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

The article considers the relevance of the problem of synthesis as the main stage of creating a chemical-technological system. An algorithm for the synthesis of the chemical-technological system was developed and based on it, the system for 3 products: emoxipine, arbidol, thioindol was synthesized in the «SoF CES» software module. The best sequence of the release of the range of these products in the «I2S» software module is determined.

Key words: chemical-technological system, synthesis of a chemical-technological system, organization of production, multiassortment production.

Введение

Высокий спрос на изделия из пластических масс, реактивы, лекарственные препараты, строительные материалы и другие виды продукции ставит задачу увеличения выпуска продукции. Повышение эффективности реконструирующихся действующих заводов, проектирующихся новых связано, в основном, с организацией выпуска большого ассортимента продуктов на едином оборудовании, работа которого перестраивается на нужную программу в зависимости от вида вырабатываемой в данный период времени продукции. Такие производства называются многоассортиментными или многопродуктовыми химическими производствами [1]. Управление выпуском продукции во многом определяет успешное и эффективное функционирование многостадийных производств. Поэтому вопрос организации способа наработки продукции на проектируемом или действующем производстве является довольно сложной проблемой. Успешное ее разрешение позволяет существенно упростить задачу проектирования, а для действующих производств – повысить их эффективность, организуя оптимальное управление выпуском продукции в зависимости от производственной ситуации [2].

Важнейшим этапом создания химико-технологической системы (ХТС) является синтез, в процессе которого определяется так называемый базовый набор технологического оборудования, формируется оптимальная технологическая и организационная структура системы и оптимизируется ее аппаратное оформление [1]. Синтез ХТС – это этап технологического проектирования, осуществляемый на основе предварительно разработанных математических моделей, конкретный вид которых зависит от количества производимых продуктов, числа и типов стадий, а также способа соединения аппаратных стадий между собой [2]. Целью синтеза химико-технологических систем является определение наилучшей структуры и оптимальных размеров оборудования, обеспечивающих достижение желаемой цели на основе исходной информации о технологических процессах [1]. В результате синтеза ХТС определяют оптимальный вариант технологической структуры и аппаратного оформления ХТС. При фиксированной структуре синтез ХТС состоит в определении оптимальных типов и размеров технологических аппаратов [2].

Исходными данными для синтеза многоассортиментных многостадийных ХТС являются: 1) данные технологических регламентов

процессов получения выпускаемого ассортимента продукции, содержащие расходные нормы сырья и энергии, длительность технологических операций в аппаратах, плотность технологических потоков, рекомендуемые коэффициенты заполнения объемов аппаратов; 2) типоряды размеров аппаратов, содержащиеся в каталогах стандартного

нормализованного оборудования и цены аппаратов [3].

Экспериментальная часть

Разработан алгоритм синтеза ХТС, представленный на рисунке 1, на основании которого была синтезирована ХТС производства трех лекарственных препаратов (эмоксипин, арбидол, тиюиндол).

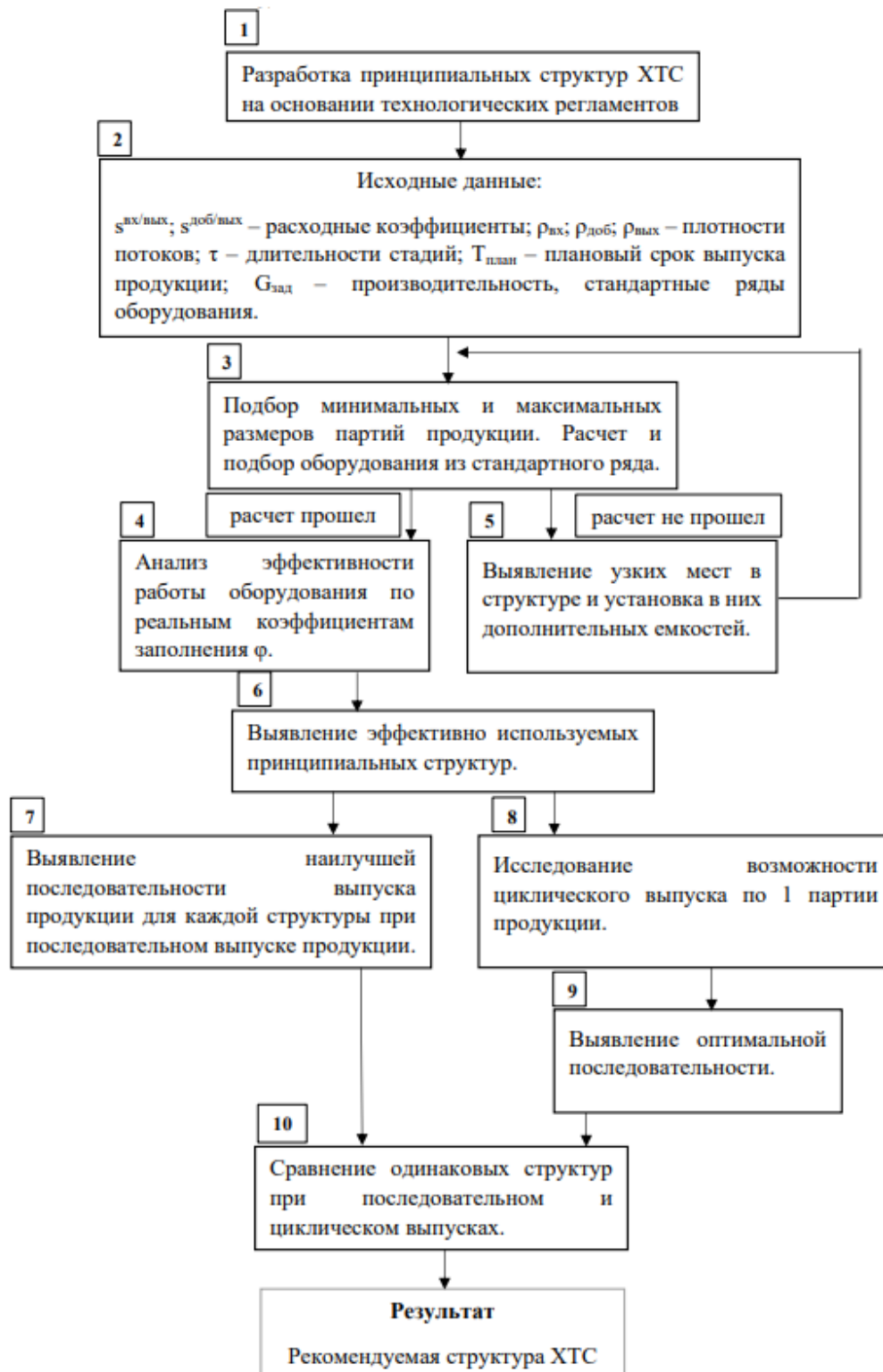


Рис.1. Алгоритм синтеза и организации выпуска многоассортиментной продукции

На рисунке 2 представлена совмещенная принципиальная технологическая схема производства трех продуктов, составленная на основании технологических регламентов процесса получения эмоксипина, арбидола и тиоиндола. На

рисунке: Р – реактор; Ф – фильтр; М – мерник; СШ – сушилка; Б – баллон.

На основании таблиц материальных потоков, технологических регламентов составлена таблица с исходными данными (таблица 1) для дальнейшего синтеза ХТС.

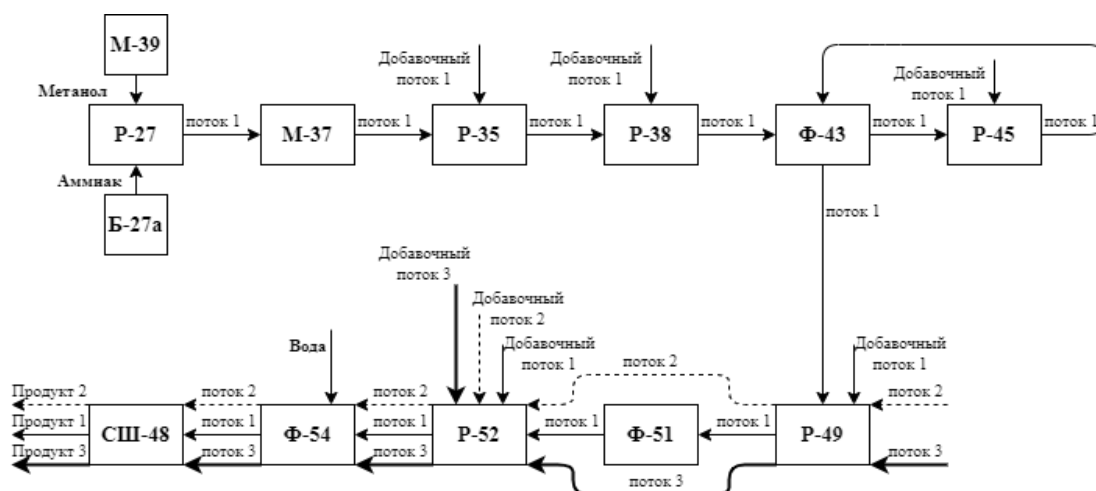


Рис.2. Совмещенная схема производства эмоксипина, арбидола и тиоиндола

Таблица 1. Исходные данные

№ стадии	Продукт	Длительность стадии, τ (ч)	Расходные коэффициенты, (кг/кг)		Плотности потоков, (кг/м ³)		
			входной поток, S _{вх/вых}	добав. поток, S _{доб}	входной поток, ρ _{вх}	добав. поток, ρ _{доб}	выходной поток, ρ _{вых}
1	Эмоксипин	3	0,864	0,205	790	792	854
	Арбидол	-	-	-	-	-	-
	Тиоиндол	-	-	-	-	-	-
2	Эмоксипин	5	0,678	0,334	594	862	785
	Арбидол	-	-	-	-	-	-
	Тиоиндол	-	-	-	-	-	-
3	Эмоксипин	1,5	2,341	0,32	785	790	748
	Арбидол	-	-	-	-	-	-
	Тиоиндол	-	-	-	-	-	-
4	Эмоксипин	0,5	2,241	0	748	0	615
	Арбидол	-	-	-	-	-	-
	Тиоиндол	-	-	-	-	-	-
5	Эмоксипин	0,5	1,318	1,418	615	789	527
	Арбидол	-	-	-	-	-	-
	Тиоиндол	-	-	-	-	-	-
6	Эмоксипин	1,5	0,152	0,848	527	935	838
	Арбидол	1,5	0,581	0,419	163	1068	253
	Тиоиндол	0,5	0,097	0,903	3150	969	893
7	Эмоксипин	0,5	1,068	0	838	0	1068
	Арбидол	-	-	-	-	-	-
	Тиоиндол	-	-	-	-	-	-
8	Эмоксипин	1,5	0,888	0,112	1068	200	1079
	Арбидол	1	0,447	0,553	253	1000	432
	Тиоиндол	3	0,5	0,5	893	893	893
9	Эмоксипин	0,5	5,57	2,922	1079	1000	907
	Арбидол	1,5	2,724	2,056	432	1000	213
	Тиоиндол	1,5	17,226	7,176	893	962	1288
10	Эмоксипин	24	1,973	0	907	0	829
	Арбидол	1	1,301	0	213	0	172
	Тиоиндол	9	1,686	0	1288	0	1603

Плановый срок выпуска продукции составляет 7320ч., производительность схемы для каждого из продуктов составляет 8000кг., таблицы размеров стандартного оборудования берутся из каталогов оборудования. Верхние коэффициенты заполнения для реакторов принимаются 0,85; для фильтров 0,7; для сушилок 0,7. Нижние коэффициенты заполнения для всего оборудования принимаются 0,5.

Синтез ХТС проводился с помощью программного модуля «SoF CES», предназначенного для синтеза гибких и индивидуальных химико-технологических систем [4].

В программу заносились все исходные данные, представленные выше, на основании которых производился синтез ХТС. Результаты синтеза схемы представлены в таблице 2.

Минимальные размеры партий удалось разместить без использования дополнительных

емкостей. При максимальных размерах партий пришлось учесть дополнительную емкость 4м³. Наиболее существенная разница между максимальным и минимальным размером партии оказалась у арбидола. Изменение размеров аппаратов произошло только на совмещенных стадиях. Капитальные затраты на схему выросли, но незначительно. Это связано с увеличением размеров аппаратов на совмещенных стадиях и установкой емкости.

Также был рассмотрен циклический выпуск технологической схемы производства эмоксипина, арбидола, тиюиндола и определена наилучшая последовательность (с минимальным сроком выпуска), представленная на рисунке 3, в программном модуле «I2S» [5].

Таблица 2. Результаты расчетов

Размеры партий, кг	Количество партий	№ стадии	Размеры аппаратов по стадиям, м ³	Коэффициенты заполнения по стадиям	Емкость, м ³	Капитальные затраты, у.е.	Срок выпуска, ч.
Min размер партии 103(1пр.) 60 (2пр.) 173(3пр.)	78(1пр.) 133(2пр.) 46(3пр.)	1	0,2	0,695; -; -.	-	2080	2480
		2	0,2	0,788; -; -.	-		
		3	0,5	0,698; -; -.	-		
		4	0,53	0,583; -; -.	-		
		5	0,5	0,812; -; -.	-		
		6	0,3	0,412; 0,792; 0,554.	-		
		7	0,197	0,664; -; -.	-		
		8	0,3	0,477; 0,464; 0,646.	-		
		9	10	0,083; 0,05; 0,463.	-		
		10	4,5	0,05; 0,081; 0,05.	-		
max размер партии 107(1пр.) 837(2пр.) 261(3пр.)	75(1пр.) 10(2пр.) 31(3пр.)	1	0,2	0,722; -; -.	-	2805	2085
		2	0,2	0,819; -; -.	-		
		3	0,5	0,725; -; -.	-		
		4	0,53	0,606; -; -.	-		
		5	0,5	0,843; -; -.	-		
		6	4	0,032; 0,829; 0,063.	-		
		7	0,197	0,69; -; -.	-		
		8	2,5	0,059; 0,777; 0,117.	-		
		9	10	0,086; 0,7; 0,698.	4		
		10	16,1	0,695; 0,318; -.	-		

Результаты выполнены для минимального и максимального размеров партий при последовательной организации выпуска продукции. Обозначения: пр. – продукт.

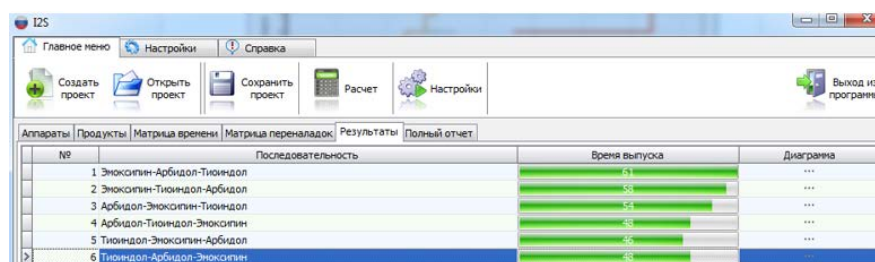


Рис.3. Результаты расчета в программе «I2S»

С помощью «I2S» также была построена диаграмма Ганта для наилучшей последовательности (рисунок 4). Кроме длительностей выпуска продукции на диаграмме показаны длительности переналадок оборудования с продукта на продукт.

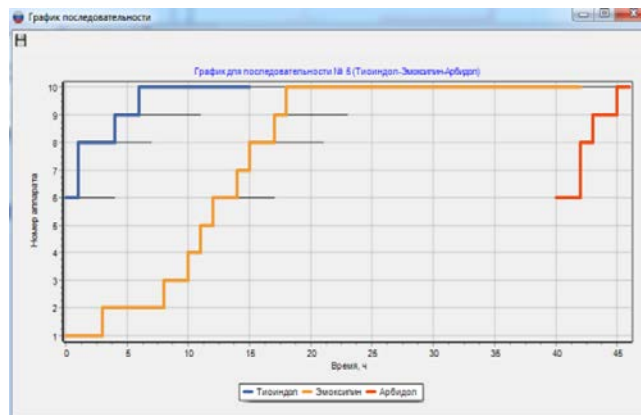


Рис.4. Диаграмма Ганта для наилучшей последовательности

Таблица 3. Сравнение результатов

Общее число партий	1 продукт – 78 партий; 2 продукт – 133 партии; 3 продукт – 46 партий	
	T, ч (последовательный выпуск)	T, ч (циклический выпуск)
1 партия	63,4	46
2 партии	97,8	95
3 партии	132,2	144

При расчете времени выпуска ассортимента циклически и последовательно по несколько партий также учитывалось время на переналадку и промывку оборудования с одного продукта на другой.

По результатам расчетов (таблица 3) при выпуске по одной партии продуктов при последовательном выпуске общее время выпуска 1 партии составляет 63,4 ч., а при циклическом выпуске 46 ч. Из этого можно сделать вывод, что большое количество партий выгоднее выпускать последовательно, а 1-2 партии циклически.

Заключение

Таким образом, с помощью программных модулей «SoF CES» и «I2S» проведен синтез совмещенной технологической схемы производства 3 продуктов; определена наилучшая последовательность выпуска данного ассортимента и сделан вывод, что для данной совмещенной структуры выгодно выпускать продукцию последовательно.

Список литературы

1. Савицкая Т.В., Бельков В.П. Математические модели типовых операций одностадийных периодических процессов: учебное пособие. М.: Издат. центр РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2005. 196с.

2. Савицкая Т.В., Бельков В.П. Синтез гибких химико-технологических систем (детерминированный и стохастический варианты): учебное пособие. М.: Издат. Центр РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2005. 119с.

3. Егоров А.Ф., Савицкая Т.В., Бельков В.П., Горанский А.В. Математическое моделирование и методы синтеза гибких химических производств: автоматизированный лабораторный комплекс. М.: Издат. Центр РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2008. 201с.

4. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017662858 «Программное обеспечение для синтеза химико-технологических систем «SoF CES». Дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ 17 ноября 2017 г., авторы: Сальников Е.Д., Савицкая Т.В.

5. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ N 2019665460 «Программное приложение для задач моделирования многоассортиментных химико-технологических систем», Дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ 22 ноября 2019 г., авторы Чернухин А.В., Сверчков А.М., Савицкая Т.В.

УДК 004.822

Киселева Е.А., Савицкая Т.В.

РАЗРАБОТКА БАЗЫ ЗНАНИЙ АНАЛИЗА ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ОПАСНОСТЕЙ И УПРАВЛЕНИЯ БЕЗОПАСНОСТЬЮ УСТАНОВКИ СТАБИЛИЗАЦИИ ДЕЭТАНИЗИРОВАННОГО КОНДЕНСАТА

Киселева Елена Алексеевна – магистрант 2-го года обучения факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; e-mail: lenochka_7110@mail.ru

Савицкая Татьяна Вадимовна – д.т.н., профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов.

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

В данной статье рассматривается современное состояние анализа риска возникновения аварийных ситуаций на опасных производственных объектах. Приведены разработанные производственные правила, которые были реализованы на основе технологического регламента установки стабилизации деэтанализованного конденсата. Представлена реализация разработанных правил в программном обеспечении "Эксперт".

Ключевые слова: деэтанализованный конденсат, база знаний, опасный производственный объект.

DEVELOPMENT OF KNOWLEDGE BASE FOR ANALYSIS OF OPERATIONAL HAZARDS AND SAFETY MANAGEMENT OF INSTALLATION OF STABILIZATION OF DETHANIZED CONDENSATE

Kiseleva E.A., Savitskaya T.V.

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

This article discusses the current state of the analysis of the risk of emergencies at hazardous production facilities. The developed production rules are given, which were implemented on the basis of the technological regulations of the deethanized condensate stabilization plant. The implementation of the developed rules in the «Expert» software is presented.

Keywords: deethanized condensate, knowledge base, hazardous production facility.

Анализ производственных опасностей является важной задачей для предотвращения возникновения аварийных ситуаций на опасных производственных объектах (ОПО). Авария на ОПО может привести не только к экономическим последствиям, но и к экологическим, нанося вред окружающей среде и человеку. Сургутский завод по стабилизации конденсата является опасным производственным объектом, его технологические процессы характеризуются повышенной взрывопожароопасностью и вредностью для окружающей среды и здоровья человека. На заводе используются опасные вещества такие, как: смесь нефтегазоконденсатная деэтанализованная, конденсат газовый стабильный, широкая фракция легких углеводородов (ШФЛУ). Эти вещества являются взрыво- и пожароопасными, а также токсическими.

На основе таблицы технологического регламента установки стабилизации деэтанализованного конденсата по неполадкам на типовом оборудовании (колонна К-801-1,2 и печь П-801-1,2) были разработаны модели представления знаний в виде производственных правил.

Производственные правила (PR) – это структурно-лингвистические модели представления знаний предметной области в виде рекомендаций, указаний, стратегий или эвристических правил, которые формально записываются в виде следующих пар [1]:

PR₁::=ЕСЛИ (ситуация), ТО (действие)

PR₂::=ЕСЛИ (условие применимости), ТО (действие)

PR₃::=ЕСЛИ (причина), ТО (следствие)

PR₄::=ЕСЛИ (посылка), ТО (заключение)

Для формализованного представления знаний необходимо формировать производственные модели с использованием лингвистических переменных и операций алгебры логики. Лингвистические переменные – переменные, значениями которых являются термины (слова, фразы, предложения), выраженные на естественном языке [1].

Ниже представлен пример двух правил и моделей представления знаний: второе правило вытекает из первого.

PR1: Если «Давление ШФЛУ на выходе колонны К-801-1» = <меньше 1,08 МПа> или «Давление ШФЛУ на выходе колонны К-801-1» = <больше 1,32 МПа>, то «Неисправность прибора поз PIRCAHL 8350» = <да> или «Неисправность клапана регулирующего поз. PV 8327» = <да>.

$$M1 \equiv [(X1 = M) \vee (X1 = B)] \rightarrow \\ \rightarrow [(X30 = Y) \vee (X32 = Y)]$$

PR2: Если «Неисправность прибора поз PIRCAHL 8350» = <да> или «Неисправность клапана регулирующего поз. PV 8327» = <да>, то «Перейти на ручное управление» = <да> и «Вызвать дежурного прибориста КИП и А» = <да> и «Наладить работу прибора поз. PIRCAHL 8350» = <да> или «Произвести ремонт клапана регулирующего поз. PV-8327» = <да> и «Сообщить начальнику УСК-2, начальнику смены завода, начальнику смены КИП и А» = <да>.

$$M2 \equiv [(X30 = Y) \vee (X32 = Y)] \rightarrow [(X57 = Y) \wedge \\ \wedge (X58 = Y) \wedge (X59 = Y) \vee (X61 = Y) \wedge (X63 = Y)]$$

Значения лингвистических переменных: М – меньше, В – больше, Y – да.

Всего в работе было разработано 33 правила по 93 лингвистическим переменным. Правила были

разработаны для анализа действий лиц, принимающих решения при аварийной ситуации по таблице технологического регламента установки стабилизации дестанизованного конденсата.

Для того, чтобы программное обеспечение «Эксперт» [2] по разработанной базе знаний могло выдавать не только причины возникновения неполадок, а также возможные отказы по этим причинам, были разработаны «обратные правила» - от следствия к причине. Таким образом, добавилось еще 23 правила.

PR1: Если «Неисправность прибора поз PIRCANL 8350» = <да> или «Неисправность клапана регулирующего поз. PV 8327» = <да>, то «Давление ШФЛУ на выходе колонны К-801-1» = <меньше 1,08 Мпа> или «Давление ШФЛУ на выходе колонны К-801-1» = <больше 1,32 МПа>.

$$M1 \equiv [(X30 = Y) \vee (X32 = Y)] \rightarrow \\ \rightarrow ((X1 = M) \vee (X1 = B))$$

Разработанные правила были реализованы в программном обеспечении «Эксперт» [2]. В

программном обеспечении «Эксперт» можно задавать либо простые правила, либо сложные, но только через союз «и». Таким образом, при реализации правил с союзом «или», они были разбиты на простые правила. Правило 1 на рисунке 1 соответствует первой части условия правила 1 модели M1 (Если «Давление ШФЛУ на выходе колонны К-801-1» = <меньше 1,08 МПа>), а правило 3 соответствует второй части условия правила 1 модели M1 (Если «Давление ШФЛУ на выходе колонны К-801-1» = <больше 1,32 МПа>). Правило 2 (рис. 1) соответствует первой части условия правила 2 модели M2 (Если «Неисправность прибора поз PIRCANL 8350» = <да>), а правило 4 – второй части (Если «Неисправность клапана, регулирующего поз. PV 8327» = <да>). Таким образом, были разбиты все правила с союзом «или» на простые правила. Было реализовано 55 правил в «Эксперте» из 33 и 36 правил при разбиении 23 «обратных правил».

правило1: если

Давление_на_выходе_колонны_К-801-1_меньше_1.08_Мпа=да

то

Неисправность_прибора_поз_PIRCANL_8350=да.

правило2: если

Неисправность_прибора_поз_PIRCANL_8350=да

то

Перейти_на_ручное_управление=да и

Вызвать_дежурного_прибориста_КИП_и_А=да и

Сообщить_нач_УСК-2_нач_смены_завода_нач_смены_КИП_и_А=да и

Наладить_работу_прибора_поз._PIRCANL_8350=да.

правило3: если

Давление_на_выходе_колонны_К-801-1_больше_1.32_Мпа=да

то

Неисправность_клапана_регулирующего_поз._PV_8327=да.

правило4: если

Неисправность_клапана_регулирующего_поз._PV_8327=да

то

Перейти_на_ручное_управление=да и

Вызвать_дежурного_прибориста_КИП_и_А=да и

Сообщить_нач_УСК-2_нач_смены_завода_нач_смены_КИП_и_А=да и

Произвести_ремонт_кл_регулирующего_поз._PV-8327=да.

Рис. 1. Разбиение сложных правил на простые

На рисунке 2 показано окно редактора базы знаний, в котором прописываются разрешенные значения лингвистических переменных, вопросы, а также сами правила.

На рисунке 3 представлено окно хода консультации. Выбирается цель консультации «наладить работу прибора поз_PIRCAHL_8350», после этого появляется вопрос подсистемы вывода о значении давления.

При положительном ответе на этот вопрос, консультация выдаст советы необходимости выполнения той или иной цели по заложенным ранее правилам в базе знаний. При отрицательном ответе на вопрос о значении давления выводится следующий вопрос подсистемы вывода о неисправности прибора (рис. 4). Далее также выбирается ответ и выводятся действия персонала по заложенным правилам.

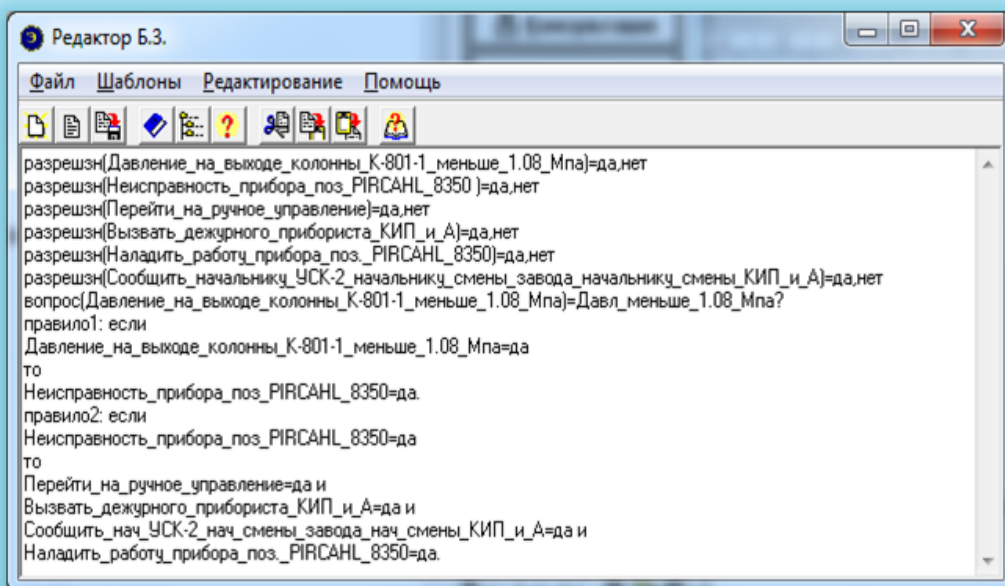


Рис 2. Редактор базы знаний

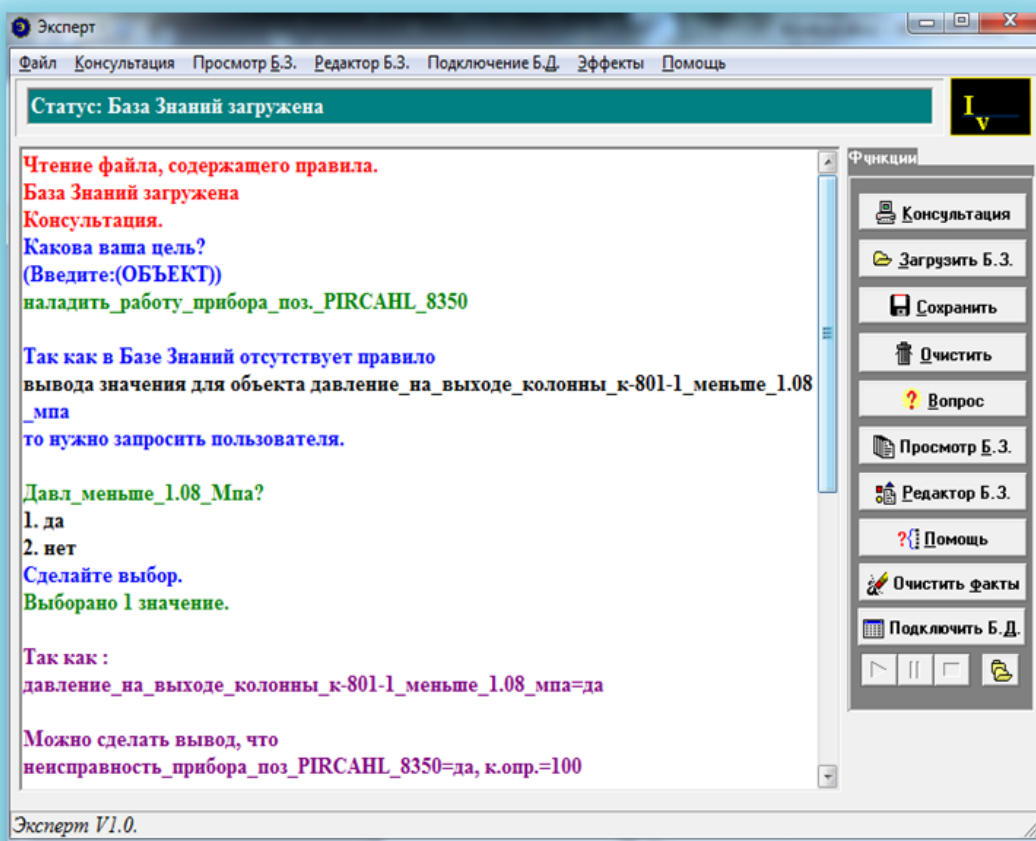


Рис. 3. Ход консультации

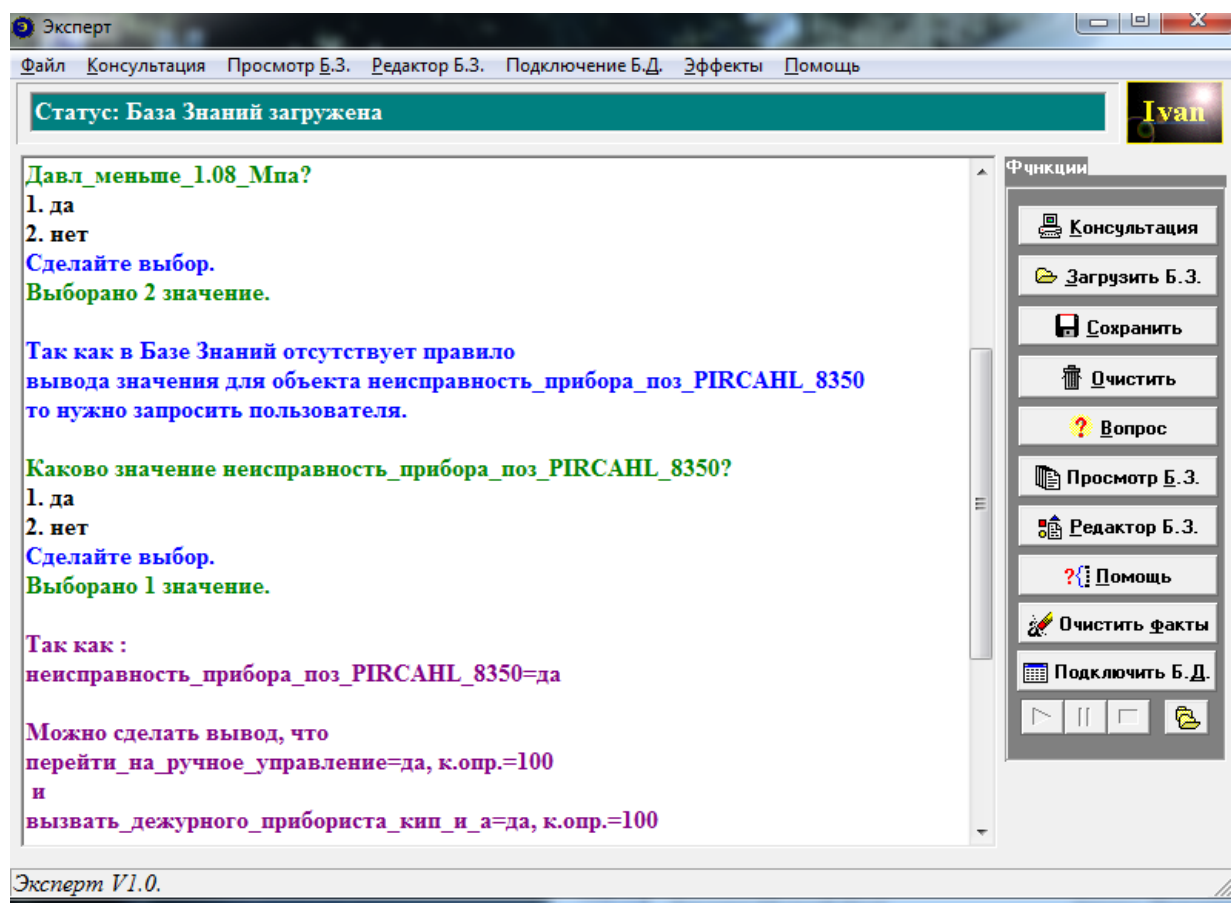


Рис. 4. Ход консультации (продолжение)

Разработанная база знаний позволяет выбирать пользователем цели консультации, куда входят практически все действия персонала и ответственных, после того как выбрана цель - выводятся вопросы, ответив на которые пользователь получает результат консультации, в котором содержится, чаще всего, совет необходимости выполнения той или иной цели исходя из заданной базы знаний.

Разработанная база знаний имеет практическое значение для предотвращения возникновения и ликвидации аварийной ситуации на опасном

производственном объекте – установке стабилизации деэтанализованного конденсата.

Список литературы

1. Егоров А.Ф., Савицкая Т.В., Михайлова П.Г., Лёвушкина С.А. Химическая и биологическая безопасность: модели, методы и интеллектуальные системы управления безопасностью. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2012. 220 с.

2. Эксперт v1.0//Freeware & Shareware [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.softholm.com/download-software-free4137.htm> (дата обращения: 24.11.2020).

УДК 004.942:579.695

Кожухарь О.Ю., Скичко А.С.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СЛУЧАЙНОГО ФАКТОРА ПОГРЕШНОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ НА РЕЗУЛЬТАТ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА БИОДЕГРАДАЦИИ НИКОТИНА

Кожухарь Олеся Юрьевна – магистрант 2-го года обучения кафедры кибернетики химико-технологических процессов; olesyakozhukhar@yandex.ru.

Скичко Алексей Сергеевич – кандидат химических наук, доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов;

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

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

*В статье рассмотрено влияние случайного фактора погрешности эксперимента на вид поверхностей отклика при решении задачи оптимизации на примере процесса биодеградация никотина штаммом бактерий *Ochrobactrum sp. SJY1*. Изучена взаимосвязь случайного искажения экспериментальных данных и поиска оптимального набора констант. Проводится анализ работы оптимизационных алгоритмов на полученных поверхностях отклика при внесении погрешностей эксперимента из области доверительного интервала.*

Ключевые слова: математическая модель, оптимизация, биоразложение никотина, ингибирование, поверхность отклика, погрешность эксперимента.

RESEARCH OF THE INFLUENCE OF THE RANDOM FACTOR OF EXPERIMENTAL MEASUREMENT ERROR ON THE MODELING RESULT OF NICOTINE BIODEGRADATION PROCESS

Kozhukhar O.Yu.¹, Skichko A.S.¹

¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

*The article discusses the influence of the random factor of experimental error on the appearance of response surfaces when solving the optimization problem using the process of nicotine biodegradation by the bacterial strain *Ochrobactrum sp. SJY1* as an example. The relationship between random distortion of experimental data and the search for the optimal set of constants is studied. We analyze the performance of optimization algorithms on the obtained response surfaces when experimental errors are introduced from the confidence interval region.*

Keywords: mathematical model, optimization, nicotine biodegradation, inhibition, response surface, experimental error.

Введение

Современная биотехнологии основывается на последних достижениях науки разных отраслей, в том числе микробиологии и биоочистки, объектом исследования которых является живая система. Воспроизводимость таких процессов зачастую ниже, чем в химической технологии, вследствие невозможности задания тех же условий. Так, в научной периодике встречаются экспериментальные работы, представляющие единичный эксперимент без проведения повторяющихся опытов. В этом случае оценить степень достоверности экспериментальных данных без учета влияния случайного фактора затруднительно. Поэтому становится актуальной задача исследования возможных различий оптимальных констант математической модели процесса, получаемых при внесении случайного фактора в экспериментальные данные.

С целью выявления общих закономерностей и взаимосвязей в цепочке «Случайный экспериментальный фактор → поверхность отклика → значение оптимальных констант → прогноз по модели», а также наглядной их демонстрации, предлагается проведение вычислительных экспериментов на примере достаточно простой

модели процесса биоразложения никотина штаммом *Ochrobactrum sp. SJY1* из [1].

Одной из важных составляющих поставленной задачи является исследование влияния случайного фактора при проведении экспериментальных исследований на вид поверхности отклика при поиске неизвестных констант модели, поскольку непосредственно от вида поверхности отклика может зависеть работа оптимизационных алгоритмов и конечный результат, то есть значения констант, которые, в свою очередь, могут влиять на качественные и количественные характеристики при использовании модели для прогнозирования протекания процесса.

Научная новизна данного исследования заключается в том, что ранее подобных вычислительных экспериментов не проводилось. Поскольку возможны различные прогнозы моделирования в случае воздействия случайного фактора, цепочка «Случайный экспериментальный фактор → поверхность отклика → значение констант → прогноз по модели» исследовалась множество раз с целью выявления возможных сложностей на разных ее этапах.

Математическая модель процесса биодegradации никотиновой пыли в водной среде

В качестве объекта исследования рассматривается процесс разложения никотиновой пыли в водной среде за счёт бактерий рода *Ochrobactrum* [1]. Анализ экспериментальных данных из [1] показывает, что наличие никотина практически ингибирует рост клеток, хотя, в конечном счёте, продукты разложения никотина используются самими клетками в качестве субстрата. Так процесс биодegradации никотиновой пыли проходит через образование большого количества промежуточных веществ (условно обозначенные за Z), которые накапливаются в среде до момента, когда ингибирующее действие никотина на клетки достаточно ослабнет в связи с уменьшением его концентрации. Процессы можно разделить во времени и представить в виде отдельных подсистем [2]. Интерес для дальнейшего исследования представляет первая подсистема, математическая модель которой состоит из следующих уравнений:

– уравнение изменения концентрации никотина в среде:

$$\frac{ds}{dt} = -\mu x, \quad (1)$$

– уравнение изменения концентрации Z-метаболитов:

$$\frac{dz}{dt} = \mu x, \quad (2)$$

– уравнение для расчёта удельной скорости разложения никотина:

$$\mu = \frac{\mu_0 s}{K_S + s + K_I s^2}, \quad (3)$$

где s – концентрация субстрата (никотина), мг/мл;

μ – удельная скорость разложения никотина, 1/ч;

x – концентрация биомассы, мг/мл;

z – концентрация Z-метаболитов, мг/мл;

μ_0 – максимальная удельная скорость данной стадии, 1/ч;

K_S – константа насыщения, мг/мл;

K_I – константа субстратного ингибирования, мл/мг.

Таким образом математическая модель содержит три изменяемые величины и три неизвестные константы μ_0 , K_S , K_I , значение которых требуется оценить по имеющимся экспериментальным данным.

Постановка оптимизационной задачи поиска констант модели

Данная оптимизационная задача является трёхпараметрической. С целью подробного анализа среза поверхностей отклика для двух различных констант, задача была сведена к двумерной на основании предварительных оценок константы μ_0 . Сравниваются два критерия оптимизации – линейный R_1 и квадратичный R_2 критерии рассогласования экспериментальных и расчетных данных:

$$R_1 = \sum_i |x_i^3 - x_i^p|, \quad (4)$$

$$R_2 = \sum_i (x_i^3 - x_i^p)^2, \quad (5)$$

где индекс «э» соответствует экспериментальным данным из [1],

индекс «р» – результатам вычислительного эксперимента.

Постановка оптимизационной задачи поиска констант модели записывается традиционно для обоих критериев: $R \rightarrow \min$.

Исследование поверхности отклика

Исследование влияния случайного фактора погрешности экспериментальных измерений на вид поверхности отклика заключается в проведении множества вычислительных экспериментов, в ходе которых в экспериментальные данные субстрата случайным образом вносились различные отклонения из области доверительного интервала. Экспериментальные данные из [1] после статистической обработки принимались за некий усредненный базовый эксперимент. И доверительный интервал определялся как среднеквадратичное отклонение от него. Сравнивались три вида отклонений: систематические отклонения в разные стороны и случайный разброс грубых ошибок из области доверительного интервала. Проводимые вычислительные эксперименты соответствуют оптимизации процесса биодegradации никотина в условиях случайного искажения экспериментальных данных от имеющихся усреднённых значений.

Искажение экспериментальных данных влияет на вид поверхности отклика, от которого зависит работа оптимизационных алгоритмов и конечный результат поиска констант. Пример работы метода поочередного изменения переменных [3] представлен на рис. 1. Под пунктом (а) представлен срез поверхности отклика, полученный при использовании линейного критерия рассогласования (4), под пунктом (б) – результат использования квадратичного критерия (5). На графиках маркеры оранжевого цвета описывают сетку решений однопараметрической оптимизации по K_S при постоянных значениях K_I , маркеры синего цвета – обратную ситуацию. Светлым оттенком отмечены точки локальных экстремумов, в которых алгоритм может «застрять». Единичному красному маркеру «●» соответствует глобальный экстремум для данного эксперимента. На графиках представлены четыре маршрута движения алгоритма, отмеченные штрихом и мелкими круглыми точками, из разных начальных значений. Штрих – линия движения изменения одной переменной (K_S) при стабилизации другой (K_I) во время работы алгоритма метода поочередного изменения переменных; мелкие круглые точки – изменение переменной K_I при стабилизации константы K_S на первой итерации алгоритма.

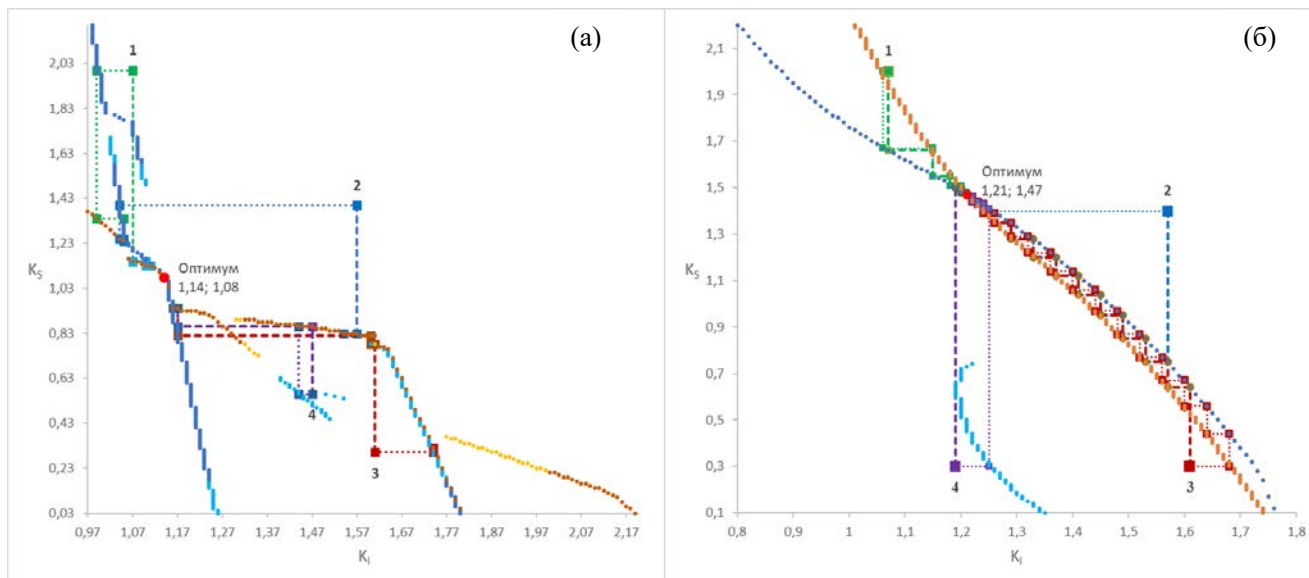


Рис.1 Демонстрация алгоритма работы метода поочередного изменения переменных на разных поверхностях отклика: а – результат использования линейного критерия рассогласования, б – результат использования квадратичного критерия

На рис. 2 и 3 представлены срезы поверхностей отклика для вычислительных экспериментов с экспериментальными данными, соответствующими граничным значениям доверительного интервала. На рис. 2 – по нижней границе доверительного интервала; на рис. 3 – по верхней границе. Данные графики демонстрируют поверхности отклика для максимального расхождения экспериментальных данных от усредненного базового значения.

Случайный разброс отклонений экспериментальных измерений разных знаков из области доверительного интервала оказало наименьшее влияние на вид поверхности отклика. В таком случае разброс оптимальных значений гораздо меньше, чем для систематических отклонений. Однако для процессов биотехнологии более характерно наличие именно систематических отклонений, которые в случае наличия грубых ошибок могут давать непредсказуемые результаты моделирования.

На представленных поверхностях отклика (рис. 1 – 3) видно, что использование линейного критерия рассогласования приводит к более сложной поверхности отклика с «зоной нечувствительности» в виде оврага, резкими скачками изменения параметров и локальными экстремумами. А квадратичный критерий дает простую поверхность отклика с ярко выраженным глобальным экстремумом.

На основании более 100 проведенных вычислительных экспериментов, процент сложных поверхностей отклика для варианта использования линейного критерия рассогласования составляет 91.43%, а для квадратичного критерия – 2.86%. Следовательно, для данной модели эффективнее будет использование квадратичного критерия рассогласования, так как он оказался более устойчив к случайным разбросам экспериментальных данных относительно средних значений.

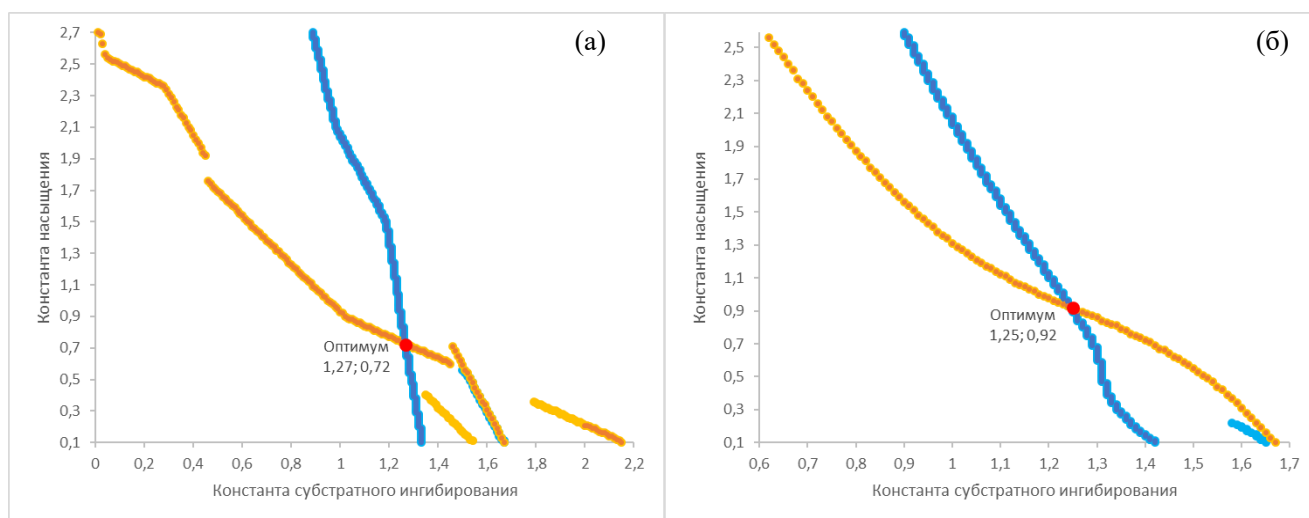


Рис. 2 Срезы поверхностей отклика для вычислительного эксперимента с погрешностью измерений по нижней границе доверительного интервала: а – результат использования линейного критерия рассогласования, б – результат использования квадратичного критерия

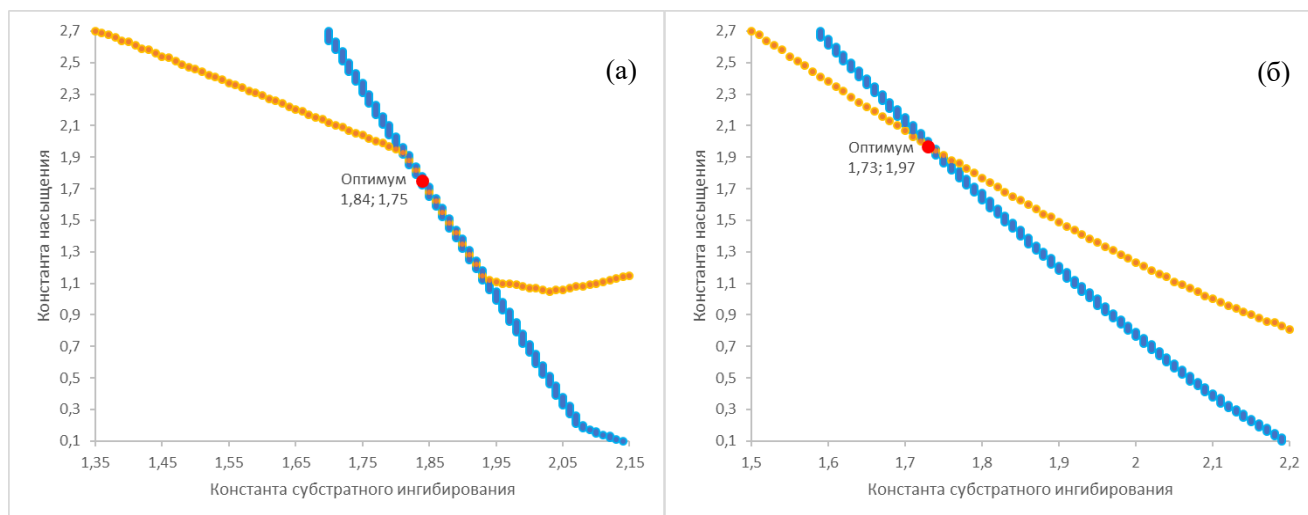


Рис. 3 Срезы поверхностей отклика для вычислительного эксперимента с погрешностью измерений по верхней границе доверительного интервала: а – результат использования линейного критерия рассогласования, б – результат использования квадратичного критерия

Таким образом, можно сделать вывод, что использование линейного критерия рассогласования в любом случае приводит к усложнению поверхности отклика и работе оптимизационного алгоритма; использование квадратичного критерия устраняет эту проблему практически во всех случаях. Следовательно, при внимательной предварительной обработке экспериментальных данных и правильном подборе критерия оптимизации можно минимизировать влияние случайного фактора погрешности экспериментальных измерений.

Анализ кинетических кривых процесса

Для оценки возможных результатов моделирования процесса в зависимости от точности

экспериментальных измерений проводилось сравнение кинетических кривых, полученных в ходе вычислительных экспериментов.

На рис. 4 представлены графики изменения концентрации никотина (субстрата) во времени, соответственно. Кривые штрихом соответствуют граничным значениям экспериментальных данных из доверительного интервала, следовательно, данные кривые будут создавать «коридор» значений, в который могут попадать другие кривые, соответствующие вычислительным экспериментам со случайным разбросом погрешности измерений из доверительного интервала. Также данные кривые наглядно демонстрируют, насколько может различаться результат моделирования для процессов с неточными экспериментальными данными.

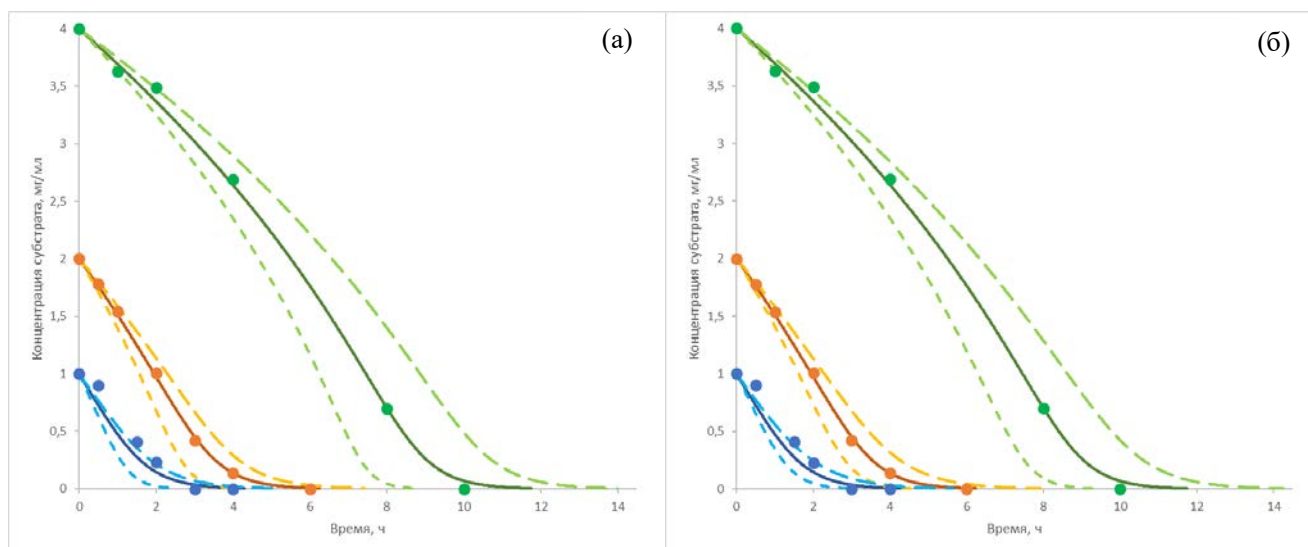


Рис. 4 Кинетические кривые разложения субстрата для различных вычислительных экспериментов: единичные точки соответствуют экспериментальным данным из [1], сплошная линия – базовому эксперименту, штрих – нижняя граница доверительного интервала, длинный штрих – верхняя граница доверительного интервала; а – результат оптимизации линейного критерия, б – квадратичного критерия

Расхождение кинетических кривых разложения никотина во времени для вычислительного эксперимента с погрешностью экспериментальных измерений на границах доверительного интервала из [1] составляет: для субстрата, начальная концентрация в среде которого равна 1 мг/мл – от 68 до 90%; для субстрата, начальная концентрация которого 2 мг/мл – 77-94%; и для субстрата с начальной концентрацией в среде 4 мг/мл – 90-98%. Данный результат выше среднего, следовательно, случайный фактор погрешности экспериментальных измерений оказывает значительное влияние на вид

кинетических кривых, которые сохраняют свою тенденцию, но отходят от среднего результата, и на важный технический параметр – время доведения концентрации никотина до ПДК, расхождение которого может варьироваться от 1 до 3 часов.

Кинетические кривые деградации никотина для других вычислительных экспериментов соответствуют сделанным ранее выводам. И при минимальном начальном значении субстрата случайный фактор в меньшей степени влияет на моделирование.

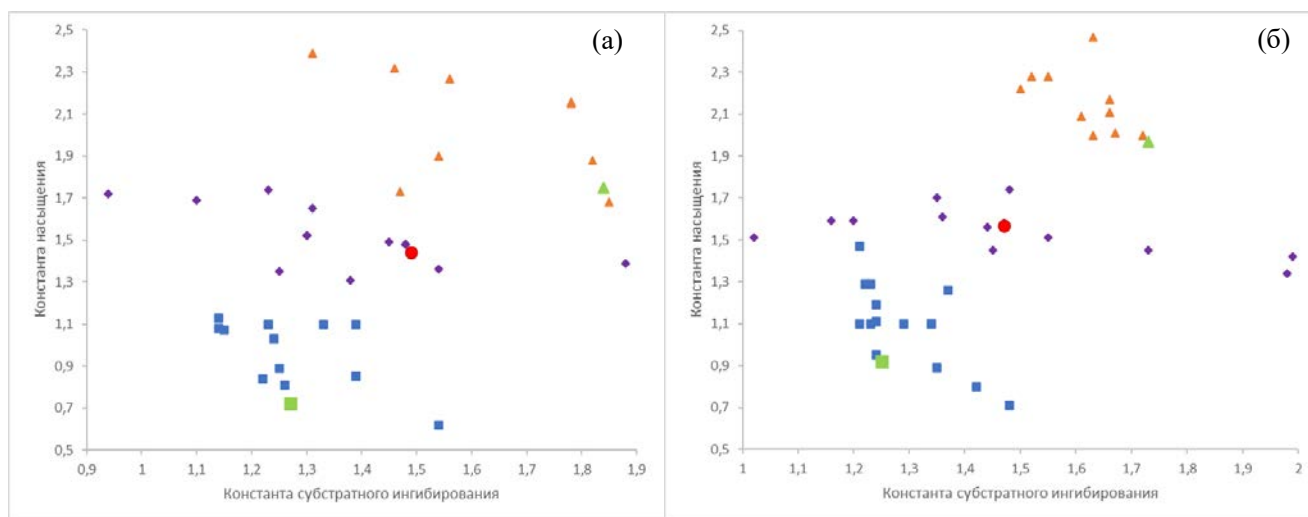


Рис. 5 График разброса оптимального набора значений констант для различных вычислительных экспериментов: а – результат оптимизации линейного критерия, б – квадратичного критерия

График разброса оптимального набора констант для разных вычислительных экспериментов представлен на рис. 5. На графиках маркерами «■» обозначены оптимумы для вычислительных экспериментов с отклонениями экспериментальных измерений в меньшую сторону, маркеры «▲» соответствуют отклонениям в большую сторону, маркеры «◆» характеризуют случайные отклонения из доверительного интервала. Маркеры «■» и «▲» большего размера соответствуют значениям границы доверительного интервала. Символ «●» – оптимум для базового эксперимента, принятого за эталон.

На полученных графиках видно, что наличие грубых ошибок приводит к разбросу значений в области оптимума, а вычислительные эксперименты с отклонениями только в одну сторону расположены дальше от оптимумов и только в верхней (отклонения в большую сторону) либо в нижней (отклонения в меньшую сторону) области.

Список литературы

1. Yu H., Tang H., Zhu X., Li Y., Xu P. Molecular mechanism of nicotine degradation by a newly isolated strain, *Ochrobactrum* sp. strain SJY1 // *Applied and environmental microbiology*. – 2015. – V. 81, №1. – P. 272-281.
2. Скичко А.С., Кожухарь О.Ю. Анализ погрешности результатов поиска констант модели процесса биоразложения никотина // *Вестник Международной академии системных исследований. Информатика, экология, экономика*. – 2020. – Т. 22. – С. 26-33.
3. Дударов С. П. Использование численных методов в табличном процессоре Microsoft Excel. *Лабораторный практикум: учеб. пособие*. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. – 116 с.

УДК 544.774.2

Комарова Д.С., Мочалова М.С., Ловская Д.Д.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ БИОПОЛИМЕРНЫХ АЭРОГЕЛЕЙ С РАЗЛИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ ХИТОЗАНА

Комарова Дарья Сергеевна – бакалавр 3-го года обучения кафедры кибернетики химико-технологических процессов; darya.komarowa2000@yandex.ru.

Мочалова Мария Сергеевна – магистрант 2-го года обучения кафедры кибернетики химико-технологических процессов; mochalova_mariya_sergeevna@muctr.ru.

Ловская Дарья Дмитриевна – к. т. н., старший научный сотрудник международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий.

«Международный учебно-научный центр трансфера фармацевтических и биотехнологий»,
123514, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20

В работе были проведены исследования процесса получения частиц аэрогеля на основе хитозана. Проведен анализ плотности и пористости частиц аэрогелей. Был сделан вывод о предпочтительности использования частиц аэрогеля с меньшей концентрацией хитозана. Данные частицы обладают большей пористостью, что является важным критерием для использования частиц как гемостатического средства.

Ключевые слова: аэрогель, хитозан, гемостатические средства, сверхкритическая сушка.

INVESTIGATION OF THE PROCESS OF OBTAINING BIOPOLYMER AEROGELS WITH DIFFERENT CONCENTRATIONS OF CHITOSAN

Komarova D.S.¹, Mochalova M.S.¹, Lovskaya D.D.¹

¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

In this work, research was carried out on the process of obtaining aerogel particles based on chitosan. The analysis of the density and porosity of aerogel particles has been carried out. It was concluded that it is preferable to use aerogel particles with a lower concentration of chitosan. These particles have greater porosity, which is an important criterion for the use of particles as a hemostatic agent.

Key words: aerogel, chitosan, hemostatic agents, supercritical drying.

Введение

В настоящее время значительно возрос интерес медицинской промышленности к биополимерам, получаемым из возобновляемых источников сырья природного происхождения. Хитин представляет собой аминополисахарид, по химической структуре близкий к целлюлозе, является нерастворимым в воде полимером. Хитозан – продукт деацетилирования хитина. Низкомолекулярный хитозан растворяется в разбавленных кислотах, проявляет антибактериальные, антиоксидантные, регенеративные, гемостатические свойства, совместим с тканями человека [1, 2]. Аэрогель представляет собой материал, полученный путем извлечения жидкой фазы геля с помощью сверхкритической сушки (СКС), иными словами, сушки при таких температуре и давлении, которые превышают критические для данной жидкой фазы. Характерными чертами аэрогеля являются низкая плотность, высокая удельная поверхность и большая пористость [3]. Совмещение свойств биополимера хитозана и структуры аэрогеля позволяет получить материал со свойствами присущими и полимеру, и структуре. Т.е. аэрогель на основе хитозана совместим с тканями животных и человека, обладает регенеративными, антибактериальными, антиоксидантными и гемостатическими свойствами, а также характеризуется большой пористостью. Учитывая данные характеристики, можно говорить о использовании аэрогеля на основе хитозана в качестве гемостатического препарата. Т.к. хитозан

является нетоксичным коагулянтом, способствует регенерации поврежденных тканей, проявляет антибактериальные свойства, а высокая пористость структуры аэрогеля позволяет впитать массу крови, значительно превышающую массу аэрогеля. Полученные частицы способны останавливать массивные наружные венозные и артериальные кровотечения, что говорит о их перспективном использовании в медицине [4]. Целью данной работы было определение влияния концентрации хитозана в частицах аэрогеля на их плотность и пористость.

Экспериментальная часть

Получение аэрогеля из биополимера можно разбить на несколько стадий: растворение полимера, гелеобразование, замена растворителя и извлечение жидкой фазы из геля [5]. СКС осуществляется в аппаратах высокого давления. Сам процесс сушки представляет собой вытеснение флюидом растворителя из каркаса аэрогеля в сверхкритических условиях. Данный процесс осуществим, т.к. в сверхкритических условиях флюид обладает текучестью сравнимой с текучестью газов, а плотностью сравнимой с плотностью жидкости. Таким образом флюид заменяет собой растворитель в геле. По окончании СКС и возвращении материала в нормальные условия, флюид приобретает свои первоначальные свойства газа. Таким образом получается аэрогель, где присутствуют только твердая и газообразная фазы.

Частицы аэрогеля на основе хитозана получали следующим способом. Хитозан растворяли в 0.1M уксусной кислоте. Растворы хитозана с различными концентрациями (1.2%, 1.4%, 1.6%, 1.8%) готовились при постоянном перемешивании. Растворенный хитозан прокапывали в 1M щелочь (NaOH) и оставляли на 24 часа для полноты проведения реакции. После отстаивания полученных частиц в NaOH следует их отмывка. Для отмывки частицы многократно выдерживают в дистиллированной воде. Чтобы довести pH раствора частиц до 7 необходимо заменить воду 5-7 раз. Далее следует стадия пошаговой замены растворителя на изопропиловый спирт (ИПС) и упаковки частиц в конверт для СКС. Выбор ИПС обусловлен требованием к используемому сушильному агенту для проведения сверхкритической сушки - образование гомогенной смеси агента с растворителем, который содержится внутри высушиваемого геля. Во избежание деформации структуры частиц необходимо, чтобы растворитель постепенно вытеснял воду из пор частиц, для этого используется ступенчатая замена растворителя на ИПС (10%-30%-50%-70%-90%-100%-100%-100%), также необходимо, чтобы каждая следующая замена проводилась не менее чем через 2 часа. Заключительным шагом являлась сушка, её подробное описание содержится в данной статье [6].

В данной работе были проведены исследования плотности частиц, истинной плотности и оценка пористости полученных аэрогелей. Пористость является одной из ключевых характеристик частиц

для использования в качестве гемостатического препарата. Измерение плотностей частиц с различным содержанием хитозана проводилось следующим методом. Для этого бралась навеска, изначально содержащая в себе 20 частиц, и взвешивалась. Далее измерялись диаметры частиц, входящих в навеску, и с помощью этих данных вычислялись плотности частиц по формуле (1):

$$\rho_{\text{частицы}} = \frac{m_{\text{частиц}}}{\sum_{i=1}^n \pi \left(\frac{d_{\text{частицы}}}{2} \right)^3} \quad (1)$$

где, $\rho_{\text{частицы}}$ - плотность частицы, $\text{кг}/\text{м}^3$; $m_{\text{частиц}}$ - масса частиц, кг; $d_{\text{частицы}}$ - диаметр частицы, м.

Измерение истинной плотности проводилось пикнометрическим методом в Центре коллективного пользования РХТУ им. Д.И. Менделеева на гелиевом пикнометре "АссуРус П 1340" (Micromeritics).

Используя данные о плотностях частиц и истинных плотностях была вычислена пористость по следующей формуле (2):

$$P = \left(1 - \frac{\rho_{\text{частицы}}}{\rho_{\text{истинная}}} \right) * 100\% \quad (2)$$

где, $\rho_{\text{истинная}}$ - истинная плотность частицы, $\text{кг}/\text{м}^3$.

Результаты аналитических исследований сведены в таблицу (Таблица 1).

Таблица 1. Результаты аналитических исследований

$C_{\text{хитозана}}$, масс%	$\rho_{\text{частицы}}$, $\text{кг}/\text{м}^3$	$\rho_{\text{истинная}}$, $\text{кг}/\text{м}^3$	P, %
1.20	37.95	2045.70	98.14
1.40	42.73	2239.50	98.09
1.60	48.38	1727.60	97.20
1.80	66.44	1600.00	95.85

Исходя из полученных данных можно сделать вывод, что все образцы обладают высокой истинной плотностью и пористостью.

Плотность частиц аэрогеля на основе хитозана находится в интервале от 37 до 67 $\text{кг}/\text{м}^3$. Стоит отметить, что наибольшей плотностью обладал образец с концентрацией хитозана 1.8M. Был получен график зависимости плотности частиц от концентрации (рис. 1). Анализируя полученные данные, можно сделать вывод об уменьшении плотности частиц с ростом концентрации хитозана.

В ходе исследовательской работы также был получен график зависимости пористости от концентрации хитозана (рис. 2).

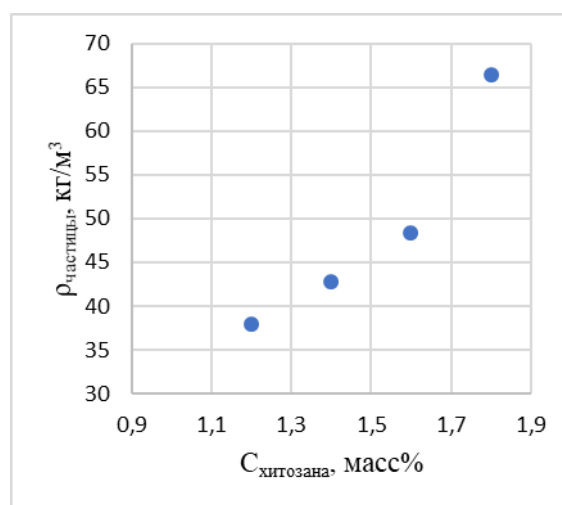


Рис. 1 Зависимость плотности частицы от концентрации хитозана

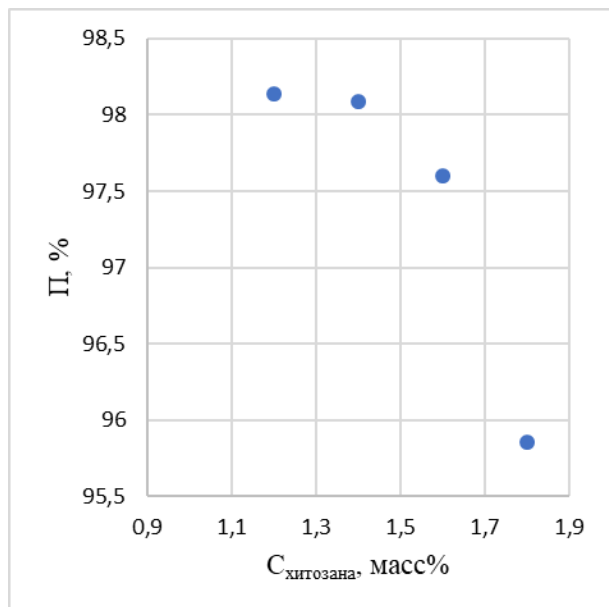


Рис. 2 Зависимость пористости от концентрации хитозана

При рассмотрении графика можно сделать вывод, что повышение концентрации хитозана сопровождается процентным уменьшением пористости. Это может быть вызвано тем, что из-за увеличения концентрации полисахарида каркас аэрогеля занимает большую часть объема аэрогеля, чем образцы с более низкой концентрацией хитозана. Следствием этого является утолщение стенок пор, что напрямую влияет на пористость. Данный показатель коррелирует с полученной плотностью частиц, т.к. рост плотности частицы при увеличении концентрации хитозана вероятнее всего связан с утолщением стенок в структуре аэрогеля.

Учитывая высокие показатели пористости частиц аэрогеля на основе хитозана, можно сделать вывод, что использование данных частиц в качестве гемостатического средства является перспективным. Для повышения эффективности аэрогеля, как гемостатического средства, рекомендуется использовать малые концентрации хитозана.

Заключение

В ходе данной работы были получены частицы аэрогеля с различной концентрацией хитозана. Проведены аналитические исследования плотности, истинной плотности частиц и пористости изготовленных аэрогелей. На основе полученных данных, можно сделать вывод о перспективном использовании частиц аэрогеля в данной отрасли. Высокая пористость определяет возможность

впитывания крови массой намного превышающую массу самого аэрогеля. Также можно сделать предположение, что в перспективе, высокая пористость аэрогелей, содержащих в себе лекарственные вещества, будет способствовать быстрой регенерации тканей и оказывать дополнительные медикаментозные воздействия. Наиболее эффективно использовать частицы с более низкой концентрацией хитозана, так как они имеют более высокий процент пористости.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России, FSSM-2020-0003.

Список литературы

1. Камская В.Е. Хитозан: структура, свойства и использование // Научное обозрение. Биологические науки. – 2016. – №6 – С. 36-42;
2. Гладкова Е.В., Бабушкина И.В., Мамонова И.А., Норкин И.А., Пучиньян Д.М., Щуковский В.В. Особенности репаративной регенерации экспериментальных ран при использовании // Фундаментальные исследования. – 2014. – № 6-7. – С. 1397-1400;
3. Мочалова М.С., Ловская Д.Д., Меньшутина Н.В. Исследование процесса получения частиц аэрогеля на основе хитозана для применения их в качестве кровоостанавливающих средств. // Успехи в химии и химической технологии. – 2020. – №8 – С. 95-97;
4. Денисов А.В., Носов А.М., Телицкий С.Ю., Демченко К.Н., Юдин А.Б., Шперлинг И.А., Миляев А.В., Гребенюк А.Н. Экспериментальная оценка эффективности нового отечественного местного гемостатического средства на основе хитозана // Вестник Российской Военно-медицинской академии. – 2018. – № 3(63). – С. 159-163;
5. Zhao S., Malfait W. J., Guerrero-Albuquerque N., Koebel M. M., Nyström G. Biopolymer aerogels and foams: Chemistry, properties, and applications // Angewandte Chemie International Edition. – 2018. – V. 57. – P. 7580-7608.
6. Меньшутина Н., Ловская Д., Лебедев А., Лебедев Е. Процессы получения частиц аэрогелей на основе альгината натрия с использованием сверхкритической сушки в аппаратах различного объема // Сверхкритические флюиды: Теория и практика. – 2017. – Т. 12, № 2. – С. 35-48.

УДК 004.942:004.457

Кузьмин М.И., Зубов Д.В.

СИСТЕМА ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Кузьмин Максим Игоревич, магистр 2-го года обучения факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: maksim.kuzmin.98@mail.ru;

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20.

Зубов Дмитрий Владимирович, кандидат технических наук, доцент кафедры информационных компьютерных технологий;

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20.

Статья посвящена разработке и апробации системы, предоставляющей возможности осуществления теоретического моделирования, формирования и редактирования математических моделей, проведения их параметрической идентификации на основе экспериментальных данных, расчёта экономических критериев, а также поиска наиболее оптимальной модели применительно к биотехнологическим процессам.

Ключевые слова: параметрическая идентификация, ферментация, *Lactococcus lactis*, математическое моделирование, глобальная оптимизация, послеспиртовая барда.

PARAMETRIC IDENTIFICATION SYSTEM FOR MATHEMATICAL MODELS OF BIOTECHNOLOGICAL PROCESSES

Kuzmin M.I.¹, Zubov D.V.¹

¹D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

This article is devoted to the development and testing of a system that provides the possibility of performing theoretical modeling, constructing and editing mathematical models, conducting their parametric identification basing on experimental data, calculating economic criteria, as well as searching for the most optimal model in relation to biotechnological processes.

Keywords: parametric identification, fermentation, *Lactococcus lactis*, mathematical modeling, global optimization, post-alcohol bard.

Введение

Этиловый спирт на сегодняшний день является ценным продуктом крупнотоннажного производства. Его применяют в самых различных отраслях современной промышленности, начиная от химической и заканчивая топливной. Среднегодовой объем выработки за 2019-2020 годы в Российской Федерации в среднем составляет порядка 900 млн. литров. При этом основная часть этанола вырабатывается с использованием растительного сырья и побочных продуктов производства сахара (мелассы). Конверсия зерно – спирт составляет приблизительно 1 кг – 350 мл. Помимо целевого продукта в ходе производства образуются достаточно большие объёмы жидких отходов в виде послеспиртовой барды. Её объёмы разнятся в зависимости от используемого сырья, условий проведения процесса, перегонки и т.д. В среднем на 1 литр этанола приходится 10-15 литров жидких отходов. Переработка послеспиртовой барды в Российской Федерации закреплена за предприятием законодательно и является одним из ключевых условий осуществления производственной деятельности. Таким образом, на предприятие дополнительно накладываются статьи расходов по утилизации образующейся барды. На сегодняшний день наиболее распространенным методом утилизации барды является её сушка с использованием получаемого гранулята как

кормовой добавки [1, 2], применение на корм скоту в естественном виде, культивирование дрожжей на твердой фазе [3], частичное включение в процесс рецикла выработки спирта, использование как удобрение на полях [4]. Использование вышеописанных методов утилизации может быть осложнено различными факторами, например, энергоёмкостью сушки или изначально не высокой питательной ценностью барды. В то же время развитие современной биотехнологии позволяет осуществлять её переработку в полезный продукт в ходе ферментационного процесса. Барда в таком случае выступает в роли питательного субстрата для культивируемых микроорганизмов. В качестве результирующего продукта могут выступать образующиеся метаболиты, ферментный комплекс или сама биомасса клеток. Оптимальное управление подобным ферментационным процессом невозможно без изучения кинетики роста культивируемого штамма микроорганизмов и построения адекватно описывающей его математической модели, поэтому существует необходимость в системе, обладающей соответствующим функционалом.

Практическая часть

В рамках настоящей работы была разработана система, обладающая следующими возможностями: осуществление теоретического моделирования на основе выбранной модели; построение модели с использованием типовых уравнений или уравнений,

созданных пользователем; параметрическая идентификация выбранной модели с использованием одного из двух реализованных алгоритмов глобальной оптимизации (генетический алгоритм, метод дифференциальной эволюции); расчёт экономических критериев; поиск наиболее адекватно описывающей экспериментальные данные процесса модели по компоновочным спискам. Система

разработана с использованием объектно-ориентированного языка C#. В качестве среды разработки была использована Microsoft Visual Studio 2019. Дополнительно были задействованы следующие сторонние пакеты: EPPlus, mXparser, DevExpress. Главный вид окна системы показан на рисунке 1.

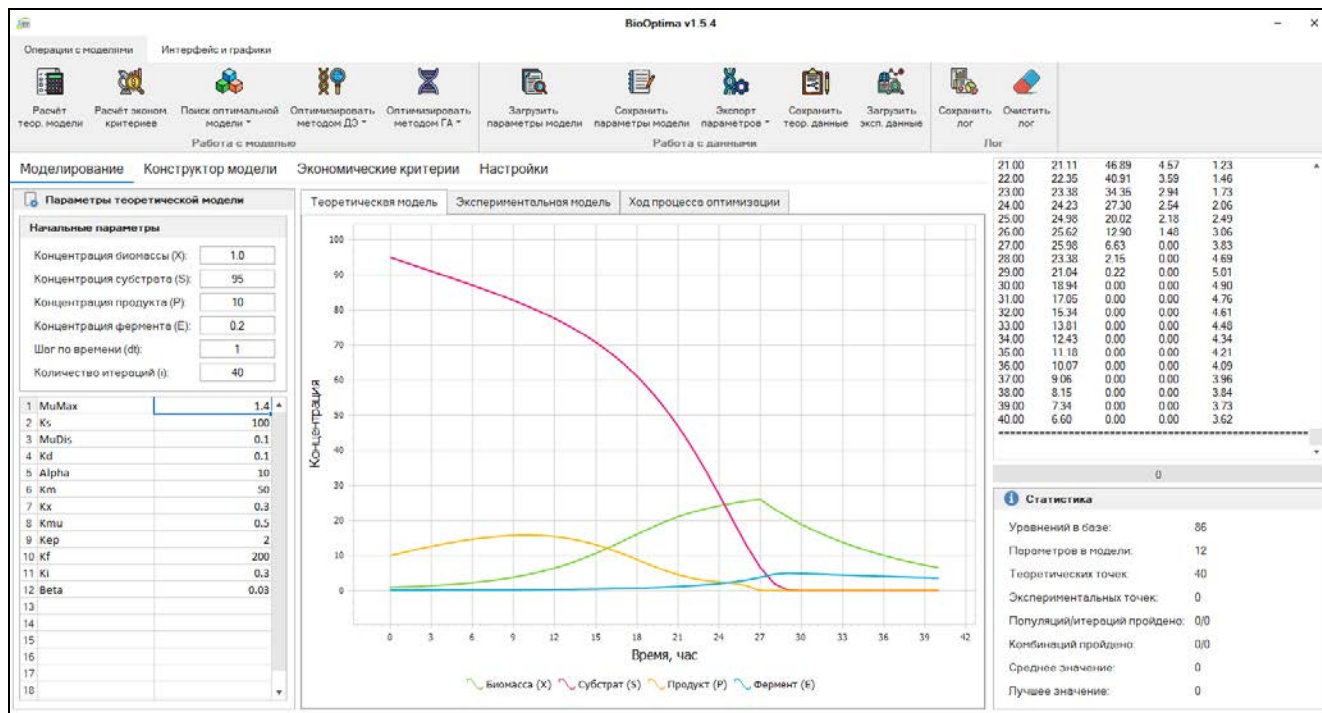


Рис. 1. Главный вид окна разработанной системы

Используемые в ходе работы системы уравнения хранятся в файле формата XML. Выбор этого формата мотивирован его иерархической структурой и возможностью легкого взаимодействия посредством API LINQ to XML. Пользователь имеет возможность использовать как уравнения, уже хранящиеся в файле, так и добавлять собственные. Из выбранных пользователем уравнений формируется математическая модель, содержащая 4 или 3 (в случае если не задействовано уравнение, описывающее изменение концентрации фермента во времени) уравнения. Она синтаксически обрабатывается и решается единым решателем, на работе которого основан почти весь имеющийся в системе функционал.

Ввиду большого числа факторов (температура, pH среды и т.д.), влияющих на микроорганизмы в процессе культивирования, описание всех их представляет собой довольно масштабную и сложную задачу, поэтому разработанная в данной работе система обрабатывает математические модели, содержащие только уравнения, описывающие изменение концентраций биомассы, субстрата, продукта и фермента во времени.

Экспериментальная часть

Работа разработанной системы была апробирована на экспериментальных данных, полученных с процесса культивирования *Lactococcus*

lactis в периодическом режиме. Целью апробации являлась проверка адекватности работы системы на данных реального процесса, а также подбор математической модели, адекватно описывающей экспериментальные значения. Вышеуказанный мезофильный штамм микроорганизмов является широко известным продуцентом молочной кислоты, а точнее её L-(+) изомера. Таким образом, процесс брожения относится к гомоферментативному типу. В качестве субстрата использовался ферментолитат крахмала в виде смеси моно и олиго сахаров содержанием 6.4%. В роли ростового фактора выступал пептон содержанием 0.5%. Дополнительно использована подпитка следующего состава: биотин 200 г/л, аммоний серноокислый 0.2%, калий фосфорнокислый однозамещенный 0.15%, магний серноокислый 0.07%. Технологические параметры процесса: pH = 6.6, t = 30°C, число оборотов перемешивающего устройства = 500 об./мин.

Первоначальная проверка по моделям, составленным из имеющихся в базе зависимостей, а также исследования, приведённые в работах [5, 6], показали необходимость формирования моделей с учетом особенностей протекания процесса. Таким образом были выделены следующие аспекты:

- На скорость роста микроорганизмов оказывает ингибирующее воздействие одновременно со стороны субстрата и выделяющегося продукта (за

счет закисления культуральной среды и понижения pH);

- Уравнение, описывающее скорость роста биомассы должно учитывать лизис клеток;
- В роли субстрата выступает смесь моно и олиго сахаров, поэтому нет необходимости в уравнении, описывающем изменение концентрации фермента в культуральной среде;
- Скорость накопления продукта в культуральной среде зависит от скорости роста и текущей концентрации микроорганизмов.

В результате проверки целого ряда моделей, учитывающих выше изложенные особенности была получена модель (1), наиболее оптимально описывающая имеющиеся экспериментальные данные, а также определены её внутренние параметры.

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = \frac{\mu_m S}{K_S + S + \frac{S^2}{K_i}} \frac{K_P}{K_P + P} - \frac{\mu_d X}{1 + S/K_d} \\ \frac{dS}{dt} = - \left(K_x X + \frac{dX}{dt} K_\mu + K_{pr} \frac{dP}{dt} \right) \\ \frac{dP}{dt} = \alpha \frac{dX}{dt} + \beta X \end{cases}, \quad (1)$$

где, $\frac{dX}{dt}$ – изменение концентрации микроорганизмов во времени, г/(л·ч);

$\frac{dS}{dt}$ – изменение концентрации субстрата во времени, г/(л·ч);

$\frac{dP}{dt}$ – изменение концентрации продукта во времени, г/(л·ч);

$X(t)$ – текущая концентрация микроорганизмов, г/л;

$S(t)$ – текущая концентрация субстрата, г/л;

$P(t)$ – текущая концентрация продукта, г/л;

t – время процесса, ч;

μ_m – максимальная удельная скорость роста, ч⁻¹;

μ_d – максимальная удельная скорость диссимилиации, ч⁻¹;

$K_S, K_i, K_P, K_d, K_x, K_\mu, K_{pr}, \alpha, \beta$ – кинетические параметры.

Графически результат оптимизации модели (1) представлен на рисунках 2-4.

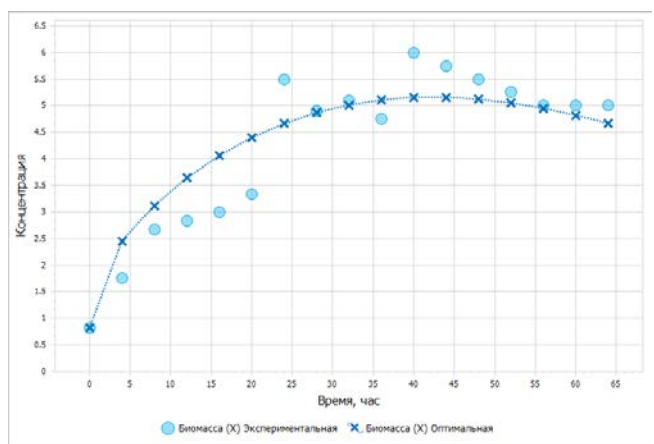


Рис. 2. Графический результат оптимизации для экспериментальных данных по биомассе

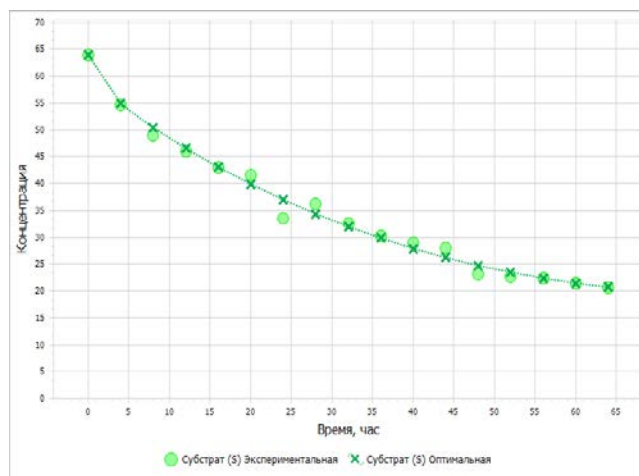


Рис. 3. Графический результат оптимизации для экспериментальных данных по субстрату

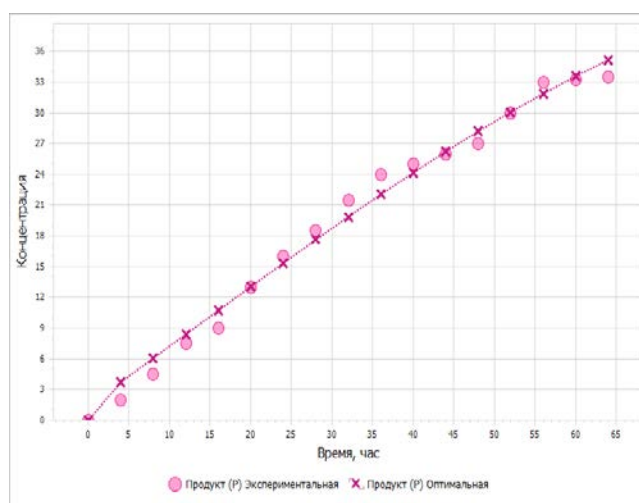


Рис. 4. Графический результат оптимизации для экспериментальных данных по продукту

Значения найденных в ходе параметрической идентификации внутренних параметров модели (1): Уравнение биомассы: $\mu_m = 0.5800$; $K_S = 0.0069$; $K_i = 363.4248$; $K_P = 0.6602$; $\mu_d = 0.3617$; $K_d = 1.1403$. Уравнение субстрата: $K_x = 0.0773$; $K_\mu = 5.3675$; $K_{pr} = 0.0430$. Уравнение продукта: $\alpha = 2.0870$; $\beta = 0.0993$.

Обсуждение результатов

Оценить адекватность полученной математической модели исходя только из графических результатов не представляется возможным, поэтому следует обратиться к некоторым критериям, широко применяющимся в статистике. Сумма квадратов регрессионных остатков RSS для полученной модели составила 57.9158. Это объясняется большой погрешностью имеющихся экспериментальных данных, что особенно заметно на рисунке 2. Классический коэффициент детерминации R^2 и скорректированный R^2_{Adj} составили соответственно 0.9831 и 0.9788, что говорит о том, что полученная математическая модель имеет достаточно высокую значимость. Критерий Фишера F составил 232.0485, что гораздо больше $F_{кр}(3, 12) = 3.49$ при уровне значимости 0.05.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что полученная математическая модель адекватно объясняет дисперсию имеющихся экспериментальных данных.

Заключение

В данной работе были рассмотрены некоторые функциональные особенности разработанной системы, а также показана её применимость к экспериментальным данным, полученным с реального процесса. Стоит отметить перспективность дальнейшего расширения и развития имеющихся возможностей системы для обработки математических моделей, учитывающих неограниченное число зависимостей.

Список литературы

1. Данильченко А., Короткова Т., Дмитренко Е. Послеспиртовая барда как ценный компонент кормовой базы // Устойчивое развитие, экологически безопасные технологии и оборудование для переработки пищевого сельскохозяйственного сырья: материалы Международной научно-практической конференции – 2016. – С. 71.
2. Кот А., Радчиков В., Цай В., Бесараб Г., Ярошевич С., Возмитель Л., Ганущенко О., Сучкова

И., Куртина В. Сушеная барда в рационах бычков // ББК 48 С 56. – 2018. – С. 161.

3. Римарева Л., Лозанская Т., Худякова Н. Кормовые дрожжи из зерновой барды в рационе птицы // Птица и птицепродукты. – 2008. № 6. – С. 33-34.

4. Ненайденко Г., Сибирякова Т. Послеспиртовая барда как удобрение // Системы использования органических удобрений и возобновляемых ресурсов в ландшафтном земледелии: Сб. докладов Всероссийский. – 2013. – С. 100.

5. Åkerberg S., Hofvendahl K., Zacchi G., Hahn-Hägerdal B. Modelling the influence of pH, temperature, glucose and lactic acid concentrations on the kinetics of lactic acid production by *Lactococcus lactis* ssp. *lactis* ATCC 19435 in whole-wheat flour // Applied microbiology and biotechnology. – 1998. – Т. 49, № 6. – С. 682-690.

6. Гордеев Л., Кознов А., Скичко А., Гордеева Ю. Неструктурированные математические модели кинетики биосинтеза молочной кислоты. Обзор // Теоретические основы химической технологии. – 2017. – Т. 51, № 2. – С. 157-173.

УДК 004.891.2

Ластовецкий М.Л., Михайлова П.Г.

РАЗРАБОТКА ЭКСПЕРТНОЙ СИСТЕМЫ «РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ЛОКАЛИЗАЦИИ И ЛИКВИДАЦИИ АВАРИЙНЫХ СИТУАЦИЙ НА КОМБИНИРОВАННОЙ УСТАНОВКЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА»

Ластовецкий Михаил Леонидович, магистрант 2-го года обучения факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Михайлова Павла Геннадьевна, к.т.н., доцент, доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов, e-mail: mikhaylova_pavla@muctr.ru;

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия, 125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20

*На основе анализа плана локализации и ликвидации аварийных ситуаций разработана экспертная система «Рекомендации по локализации и ликвидации аварийных ситуаций на комбинированной установке каталитического крекинга» для секций 100, 200 и 300. Для реализации экспертной системы использована программа **Expert Developer Pro**.*

*Ключевые слова: установка каталитического крекинга, ликвидация аварийных ситуаций, **Expert Developer Pro**, экспертная система.*

DEVELOPMENT OF AN EXPERT SYSTEM "RECOMMENDATIONS FOR THE LOCALIZATION AND ELIMINATION OF EMERGENCY SITUATIONS AT A COMBINED CATALYTIC CRACKING UNIT"

Lastovetskiy M. L., Mikhaylova P. G.

D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

Based on the analysis of the plan for the localization and elimination of emergency situations, developed an expert system "Recommendations for the localization and elimination of emergency situations at a combined catalytic cracking unit" was developed for sections 100, 200 and 300. The Expert Developer Pro program was used to implement the expert system.

Keywords: catalytic cracking unit, elimination of emergency situations, Expert Developer Pro, expert system.

Введение

Нефтеперерабатывающие предприятия являются опасными производственными объектами, так как в ходе их эксплуатации есть риск возникновения аварийных ситуаций, которые могут приводить к неблагоприятным последствиям для жизни и здоровья населения. В качестве помощи сотрудникам для более быстрого реагирования создаются системы поддержки принятия решений в аварийных ситуациях. Одним из структурных элементов таких систем являются экспертные системы.

Экспертная система (ЭС) – программа, которая использует знания специалистов (экспертов) о некоторой конкретной узкоспециализированной предметной области и в пределах этой области способна принимать решения на уровне эксперта-профессионала.

В настоящей работе представлены результаты разработки экспертной системы «Рекомендации по локализации и ликвидации аварийных ситуаций на комбинированной установке каталитического крекинга».

Анализ аварийных ситуаций

Анализ аварийных ситуаций (сценарии их развития и способы локализации и ликвидации) непрерывно действующих установок нефтеперерабатывающих производств проведен на примере секций 100, 200, 300 установки

каталитического крекинга и ректификации (Г-43-107).

Комбинированная установка каталитического крекинга Г-43-107 предназначена для переработки вакуумного дистиллята с целью получения компонента высокооктанового бензина и олефино-содержащих газов. Производительность установки 2000 тыс. т/год.

Рассмотрены три секции для реализации основных технологических процессов, которые входят в состав комбинированной установки [1]:

- секция 100 – гидроочистка сырья;
- секция 200 – каталитический крекинг и ректификация;
- секция 300 – абсорбция и газофракционирование.

Анализ установки каталитического крекинга как источника риска проведен с использованием моделей и методов, рассмотренных в [2]. Вся информация для решения этой задачи взята из технологического регламента производства и плана локализации и ликвидации аварийных ситуаций (ПЛИАС).

В ходе анализа производственных опасностей установлены причинно-следственные связи в виде взаимосвязей «признаки – аварийные ситуации» [1].

Разработаны логико-графические модели сценариев развития аварийных ситуаций в секциях 100, 200 и 300.

В итоге для секции 100 определены 139 возможных признаков, которые могут привести к возникновению 56 аварийных ситуаций. Для секции 200: 68 признаков и 35 аварийных ситуаций. Для секции 300: 97 признаков и 43 аварийные ситуации.

Создание структуры логического вывода экспертной системы

Для разработки ЭС могут использоваться различные средства: языки, среды программирования и оболочки экспертных систем. Оболочка экспертной системы представляет собой готовую программную среду, которая может быть приспособлена к решению определенной проблемы путем создания соответствующей базы знаний. При их использовании знания программирования не требуются. Для реализации экспертной системы использована свободно распространяемая программа **Expert Developer Pro** [3], представляющая собой оболочку ЭС.

На первом этапе необходимо спроектировать структуру логического вывода (рис. 1), которая в данном случае будет представлена ориентированным графом или деревом решений. Производя выбор в каждой точке разветвления, диаграмма дерева помогает принимать решения. Такой тип логической структуры (в виде дерева решений) может быть легко преобразован в компьютерную систему [4].

На рис. 1 представлен граф, отражающий знания по аварийным ситуациям и мерам их локализации и ликвидации для секции 100 установки каталитического крекинга [5]. Каждая вершина графа помечена уточняющим вопросом экспертной системы к пользователю или ее ответом на задачу.

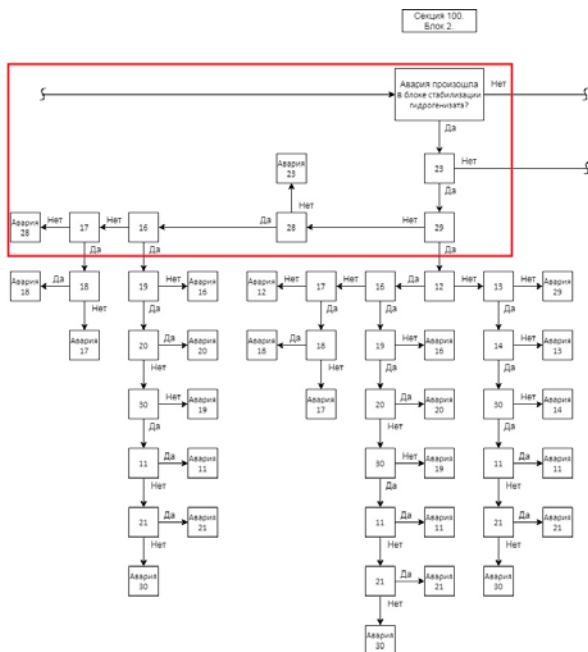


Рис. 1. Часть структуры логического вывода в экспертной системе для секции 100

Если вершина является вопросом, то из нее выходят две дуги. Одна дуга соответствует одному возможному ответу пользователя, другая – его

альтернативному ответу. Вершина, соответствующая ответу экспертной системы, не имеет выходящих дуг. Все вершины пронумерованы [4]. Номера вершин графа с исходящими дугами (вопросы) и номера вершин графа без исходящих дуг (ответы) соответствуют номерам первичных признаков и номерам аварий в базе данных для секции 100.

На рис. 1 выделен фрагмент в части структуры ЭС для секции 100, который более подробно рассмотрен на рис. 4 и 5 в виде консультации с использованием разработанной ЭС.

Разработка экспертной системы

Expert Developer Pro – программа создана по идеологии «многодокументный интерфейс пользователя» [1].

В верхнем поле ввода указывается порядковый номер вопроса (рис. 2). В следующем – вопрос или результат консультации [4].

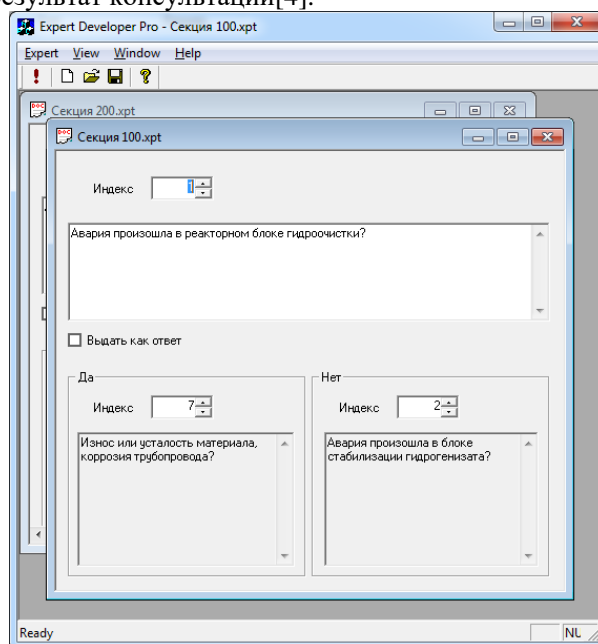


Рис. 2. Интерфейс программы Expert Developer Pro

Далее – номера вопросов и текст, которые будут заданы следующими в случае положительного ответа (слева) или отрицательного ответа (справа).

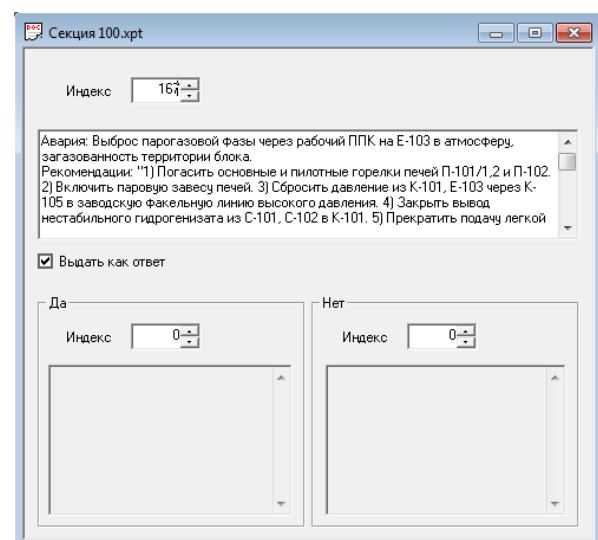


Рис. 3. Создание одного из возможных результатов консультации в ЭС

Выставление флажка «Выдать как ответ» означает конец опроса. В этом случае в поле ввода вопроса помещается результат логического вывода (рис. 3).

Консультация с использованием разработанной ЭС

Для начала консультации с разработанной экспертной системой необходимо выбрать пункт

The screenshot shows a survey interface with four questions and corresponding 'Да' (Yes) and 'Нет' (No) buttons. The questions are:

- а) Авария произошла в блоке стабилизации гидрогензата? (Buttons: Да, Нет)
- б) Превышение давления выше допустимого? (Buttons: Да, Нет)
- в) Частичная разгерметизация или полное разрушение оборудования, трубопроводов? (Buttons: Да, Нет)
- г) Выброс ПГФ через рабочие ППК в атмосферу? (Buttons: Да, Нет)

Рис. 4. Процесс опроса пользователя: а - Отвечаем "Да", б - Отвечаем "Да", в - Отвечаем "Нет", г - Отвечаем "Да"

The screenshot shows the 'Результаты' (Results) window of the expert system. The text inside reads:

Авария: Выброс паргазовой фазы через рабочий ППК на Е-103 в атмосферу, загазованность территории блока.
 Рекомендации: "1) Погасить основные и пилотные горелки печей П-101/1.2 и П-102. 2) Включить паровую завесу печей. 3) Сбросить давление из К-101, Е-103 через К-105 в заводскую факельную линию высокого давления. 4) Закрыть вывод нестабильного гидрогензата из С-101, С-102 в К-101. 5) Прекратить подачу легкой

Buttons: Да, Нет

Рис. 5. Результат консультации с использованием разработанной ЭС

Таким образом, экспертная система «Рекомендации по локализации и ликвидации аварийных ситуаций на комбинированной установке каталитического крекинга» может использоваться для поддержки принятия решений в случае возникновения аварийной ситуации. Небольшое количество вопросов не сильно обременит сотрудника и не займет много времени на ответы, но поможет быстрее сориентироваться с тем, какая аварийная ситуация произошла и как ее устранить. Ее можно также использовать для обучения операторов установки.

Разработанная экспертная система может быть использована в учебном процессе. Например, для ознакомления студентов с экспертными системами, их устройством, разработкой, а также с ПЛАС установки.

меню «Expert→Begin Test», либо нажать кнопку «Begin Test» на панели инструментов. Далее в качестве ответов на предложенные вопросы следует нажимать кнопки «Да» или «Нет» (рис. 4) [1]. На рис. 4 и 5 представлена консультация с использованием разработанной ЭС по выделенному фрагменту в структуре ЭС для секции 100 на рис. 1.

Список литературы

1. Оболочки для создания Экспертных систем // Экспертные системы [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://bourabai.ru/alg/expert22.htm> (дата обращения: 07.03.21).
2. Методические указания к выполнению лабораторных работ «Разработка экспертной системы с помощью программы Expert Developer Pro» по дисциплине «Интеллектуальные информационные системы» для студентов специальности 071900 «Информационные системы» очной формы обучения / Воронеж. гос. техн. ун-т; Сост. Ю.В. Литвиненко. Воронеж, 2019. – 20 с.
3. Expert Developer Pro // Экспертные системы [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://bourabai.kz/alg/expert23.htm> (дата обращения: 07.03.21).
4. Чернобровкина И.И., Пыталова В.А. Подбор банковского кредитного продукта методом экспертных систем // Роль и место информационных технологий в современной науке. – 2018. – №2. – С. 10-15.
5. Савицкая Т.В., Егоров А.Ф., Михайлова П.Г., Лёвушкина С.А. Задачи и примеры анализа риска, оценки последствий аварий и негативных воздействий химически опасных объектов: учеб. пособие. – М. : РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2011. – 312 с.

УДК 004.93

Оралов И.С., Дударов С.П.

ИНСТРУМЕНТЫ РАЗРАБОТКИ, МЕТОДЫ И ПРИМЕРЫ ПРОГРАММНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ И РАСПОЗНАВАНИЯ ЛИЦ ЛЮДЕЙ ПРИ ВИДЕОФИКСАЦИИ В РЕЖИМЕ РЕАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ

Оралов Иван Сергеевич, студент 3 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Дударов Сергей Павлович, к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий, e-mail: dudarov@muctr.ru,

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия 125047, Москва, Миусская пл., д. 9

Представлен обзор инструментов разработки, библиотек, открытого исходного кода для идентификации и распознавания лиц людей при помощи видеofиксации в режиме реального времени. Рассмотрены методы, возможные программные средства, классификация систем распознавания лиц, готовые решения, возможные области применения, решаемые задачи, правовые аспекты разработки и внедрения подобных систем.

Ключевые слова: идентификация лиц, распознавание образов, компьютерное зрение, инструменты разработки, программное обеспечение, нейронная сеть, правовые аспекты.

DEVELOPMENT TOOLS, METHODS AND EXAMPLES OF SOFTWARE TOOLS FOR IDENTIFICATION AND RECOGNITION OF HUMAN FACES DURING VIDEO FIXING IN REAL TIME

Oralov I.S., Dudarov S.P.

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

An overview of development tools, libraries, open source code for identifying and recognizing human faces using real-time video recording is presented. Methods, possible software tools, classification of face recognition systems, ready-made solutions, possible areas of application, problems to be solved, legal aspects of the development and implementation of such systems are considered.

Key words: face identification, pattern recognition, computer vision, development tools, software, neural network, legal aspects.

В настоящее время наблюдается повышенная актуальность решения задачи контроля доступа и аутентификации пользователей в различных ресурсах и системах. Для ее решения все чаще используются биометрические системы, что позволяет обеспечить надежность и удобство пользователей. Биометрическая система – это система распознавания людей по одной или более физическим или поведенческим чертам, например, по лицу человека.

Подобные решения можно встраивать в любые системы, где необходимо разграничивать права доступа или отслеживать работу пользователя в определенных целях. Одной из наиболее важных особенностей работы с биометрией является возможность, а зачастую и необходимость ее реализации в режиме реального времени.

Один из наиболее важных способов классификации систем для обработки изображений лиц людей – по способу их сравнения с образцом. Их достаточно много. Возможные способы сравнения представлены на рис. 1.

В настоящее время на рынке можно найти готовые решения систем распознавания и идентификации лиц, такие, как:

- Selectel VideoAnalytics – программное

обеспечение для облачного видеонаблюдения и видеоаналитики;

- Macroscop – программное обеспечение для IP-камер, обеспечивает управление системами видеонаблюдения;

- Amazon Rekognition – программное обеспечение от компании Amazon, позволяющее проводить анализ видео и фото;

- Oz Forensics – программное обеспечение производящее биометрическую идентификацию по фото или видео;

- Revisor VMS – программное обеспечение для построения систем видеонаблюдения на основе IP-камер;

- TRASSIR Face Recognition – встраиваемый модуль для распознавания лиц по заранее сформированной базе данных лиц людей.

Большинство перечисленных и подобных им продуктов являются серверными и встраиваемыми, применяются в крупных организациях для осуществления контроля доступа. Минусами любых подобных систем является необходимость иметь большие вычислительные мощности для быстрого анализа входных образов и представления результатов в режиме реального времени.

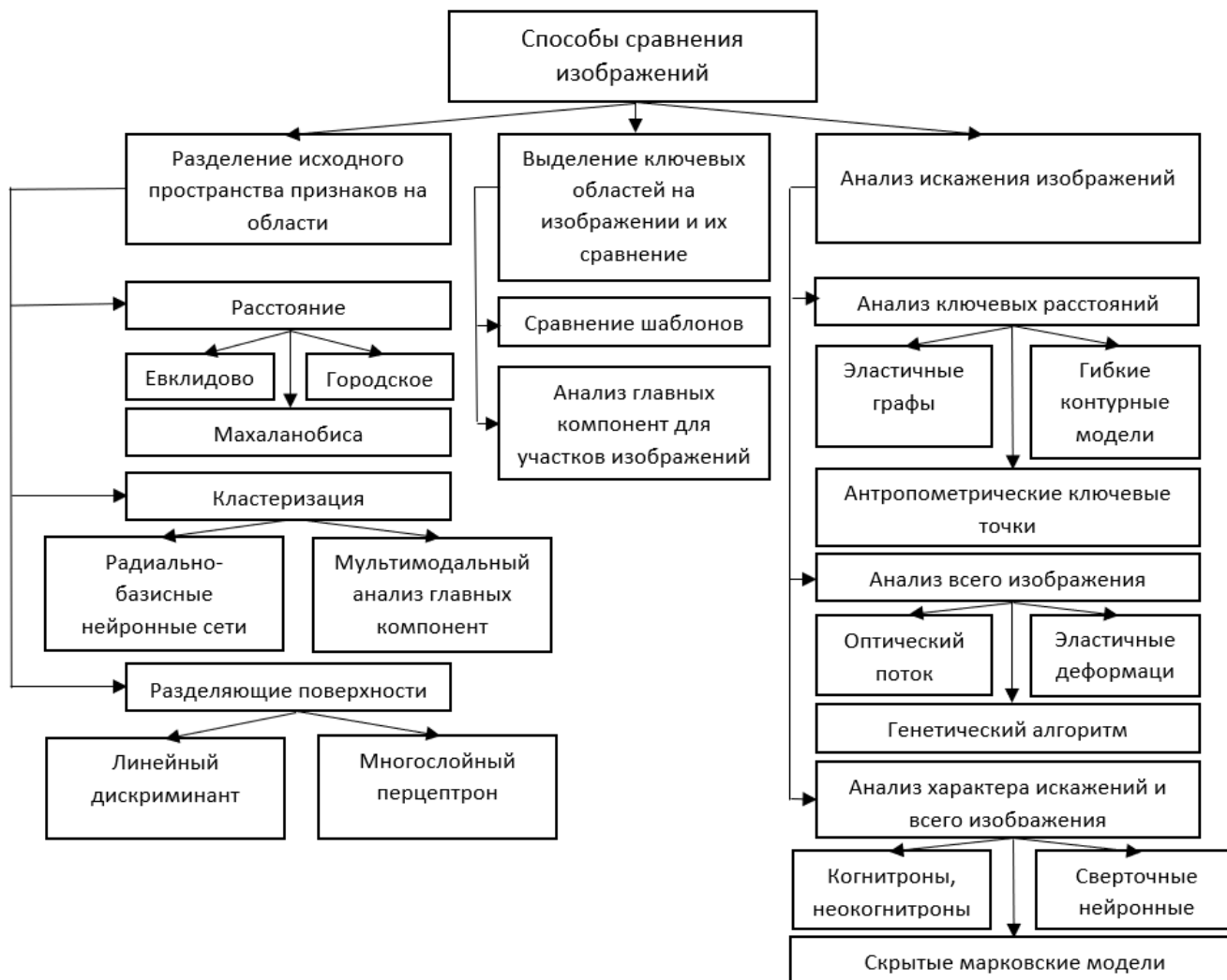


Рис. 1. Классификация по способу сравнения изображений

Аутентификация и контроль доступа с помощью систем распознавания лиц – важное, но не единственное направление компьютерного зрения. Оно также применяется для автоматизации рутинных процессов, обеспечения безопасности платежей, отслеживания правонарушений (например, для обеспечения безопасности дорожного движения), в медицине, в сфере творчества [1] и многих других сферах человеческой деятельности.

Сейчас направление компьютерного зрения активно развивается, благодаря чему появляются все новые алгоритмы, программы, библиотеки для создания собственного программного обеспечения и его интеграции в различные системы. Существуют как готовые решения с открытым исходным кодом, так и библиотеки для разработчиков. Можно перечислить следующие ресурсы:

- OpenCV (Open Source Computer Vision Library) [2] – широко используется для обработки изображений и реализации вычислительных алгоритмов общего назначения. Сама библиотека реализована на языках программирования C/C++, но также разрабатывается и для Python, Java, Matlab, Ruby, Lua и других языков;
- PCL (Point Cloud Library) – крупномасштабный открытый проект,

предназначенный для обработки облаков точек и 2D/3D-изображений. Эта платформа включает в себя множество алгоритмов, в том числе фильтрацию, реконструкцию поверхности, оценку характеристик, регистрацию, сегментацию, подбор модели;

- VoofCV – библиотека компьютерного зрения с открытым исходным кодом, написанная на чистом Java;
- Cambridge Video Dynamics – библиотека для изображений, видеозахвата, дисплея, компьютерного зрения и многого другого;
- libCVD – библиотека компьютерного зрения на языке программирования C++.

На данный момент одним из основных инструментов реализации компьютерного зрения являются искусственные нейронные сети. Существует большое количество архитектур нейронных сетей. Одной из самых широко используемых является сеть, построенная на архитектуре многослойного перцептрона. Она позволяет классифицировать поданное на вход изображение (сигнал) в соответствии с предварительным обучением сети.

Обучаются многослойные перцептроны на специально подготовленной выборке из обучающих

примеров. Обучение сводится к настройке весов межнейронных связей в процессе решения задачи минимизации отклонений выходных сигналов перцептрона от ожидаемых по соответствующим примерам выходов. В процессе обучения нейронной сети происходит автоматическое извлечение ключевых признаков, определение их важности и построение взаимосвязей между ними. Предполагается, что обученная нейронная сеть сможет применить опыт, полученный в процессе обучения, на неизвестных образах за счет своих обобщающих способностей.

При всех плюсах многослойных перцептронов они обладают и рядом недостатков. Так, добавление нового эталонного образа (лица) в базу данных требует полного переобучения сети на всем имеющемся наборе, а это является достаточно длительной процедурой. При этом можно столкнуться с проблемами математического характера, связанными с попаданием в локальный оптимум, выбором оптимального шага оптимизации, переобучением и т. д. Альтернативная архитектура для решения задачи распознавания образов лиц – нейронная сеть адаптивного резонанса. В классическом варианте она решает задачу кластеризации. Однако если предварительно обучить данную сеть на эталонных изображениях лиц так, чтобы каждому кластеру соответствовал определенный эталонный образ (лицо человека), эту архитектуру также можно использовать с целью идентификации человека. При этом новый образ потребует только добавления нового нейрона (кластера) со своими весовыми коэффициентами без необходимости дообучения или переобучения остальных нейронов.

Для внедрения и использования систем определения лиц существуют правовые ограничения. В частности, необходимо письменное согласие на предоставление и обработку персональных данных человека, регламентируемое Федеральным законом от 27.07.2006 №152-ФЗ «О персональных данных» с актуальными изменениями и дополнениями.

Обобщая, человек предоставляет свои биометрические данные, разрешает их хранение, обработку и использование, а оператор (государственный орган, муниципальный орган, юридическое или физическое лицо, осуществляющие обработку персональных данных) обязуется

обезопасить личные данные и использовать их строго по оговоренному назначению. Однако согласие лиц может быть исключено в контексте определенных целей обработки, а также защиты публичных интересов.

На данный момент плохо регламентирован с правовой точки зрения аспект безопасности хранения и распространения биометрических данных. При утечке, умышленной передаче, сторонней информационной атаке, слиянии различных баз предусмотрены наказания от административных до уголовных.

Идентификация и распознавание людей в режиме реального времени, а также проектирование, администрирование и обслуживание подобных систем – это актуальная, перспективная, но труднореализуемая на данный момент задача. Уже имеются готовые решения, которые нашли применения в различных областях жизни. Не все правовые аспекты этой темы еще проработаны и введены в эксплуатацию, что тормозит развитие данного направления и введение разработок в повседневную жизнь, однако существующий зарубежный опыт доказывает неизбежность их внедрения с систематическим расширением области использования. В настоящее время имеется большое исследовательское поле для сглаживания минусов действующих отечественных систем, улучшения алгоритмов детектирования, распознавания образов, оптимизации новых разработок систем компьютерного зрения с учётом современных технологических платформ и особенностей российского законодательства, на что будут направлены дальнейшие исследования авторов.

Список литературы

1. George Bebis, Richard Boyle, Bahram Parvin, Darko Koracin, Daniela Ushizima, Sek Chai, Shinjiro Sueda, Xin Lin, Aidong Lu, Daniel Thalmann, Chaoli Wang, Panpan Xu *Advances in Visual Computing*. – 14th International Symposium on Visual Computing, ISVC 2019 Lake Tahoe, NV, USA, October 7–9, 2019. – P. 247–257.
2. Kari Pulli, Anatoly Baksheev, Kirill Korniyakov, Victor Eruhimov. *Real-Time Computer Vision with OpenCV*. – *Communications of the ACM*, Volume 55, Issue 6, 2012.

УДК 004.032.26

Сергеева М.П., Михайлова П.Г.

РАЗРАБОТКА НЕЙРОСЕТЕВЫХ МОДЕЛЕЙ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ НЕЙРОТОКСИЧНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ

Сергеева Мария Павловна, студент 2 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Михайлова Павла Геннадьевна, к.т.н., доцент, доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов, e-mail: mikhaylova_pavla@muctr.ru;

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия, 125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20

*Представлены результаты прогнозирования острой нейротоксичности ряда органических растворителей по отношению к крысам и мышам с использованием нейронных сетей прямого распространения, а также выполнено сравнение полученных результатов прогнозирования с исходными данными.**Ключевые слова: нейротоксичность, нейронные сети, прогнозирование нейротоксичности, грызуны.***DEVELOPMENT OF NEURAL NETWORK MODELS FOR PREDICTION OF THE NEUROTOXICITY OF ORGANIC SOLVENTS**

Sergeeva M. P., Mikhaylova P. G.

D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

*The results of predicting the acute neurotoxicity of a number of organic solvents in relation to rats and mice using feedforward neural networks are presented, and the results of prediction are compared with the initial data.**Key words: neurotoxicity, neural networks, predicting neurotoxicity, rodents.***Введение**

Важным этапом при разработке новых физиологически активных веществ является оценка их токсичности и, в частности, нейротоксичности. Исследованию данного явления уделяется определенное внимание, в том числе, с использованием такого междисциплинарного подхода, как анализ количественных взаимосвязей «структура – активность» (QSAR – Quantitative Structure Activity Relationships). В опубликованных источниках практически отсутствуют данные по острой нейротоксичности, которые по своему количественному и качественному составу соответствуют требованиям QSAR. Одним из немногих примеров является массив из 47 органических растворителей, на основе которого был создан ряд регрессионных моделей [1]. В настоящей работе осуществить прогнозирование нейротоксичности органических растворителей предлагается с помощью искусственных нейронных сетей (НС).

Разработка структур нейронных сетей для расчета нейротоксичности

Объектом исследования в работе является острая сублетальная токсичность (ЕС30) 47 органических растворителей по отношению к грызунам. ЕС30 – это эффективная концентрация вещества, оказывающая нейротоксическое действие у 30% животных [1].

Задача нейросетевого прогнозирования состоит в том, чтобы подобрать такую структуру нейронной сети, которая обеспечивала бы минимальную разницу между спрогнозированными сетью и реальными значениями нейротоксичности. Для решения задачи прогнозирования нейротоксичности в данной работе предлагается использовать

нейронные сети прямого распространения, предложена соответствующая структура нейросети, представленная на рис. 1. Вектор входных переменных нейронной сети состоит из дескрипторов. Выходом является значение нейротоксичности ЕС30.

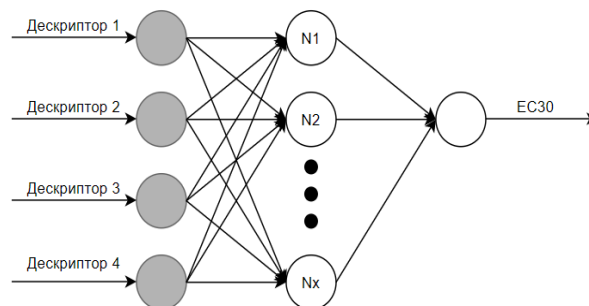


Рис. 1. Структура нейросети для прогнозирования нейротоксичности

Дескриптор – это параметр, описывающий структуру органического соединения и определяющий его особенности [2]. В качестве входных переменных задавались значения таких дескрипторов, как: Alpha – поляризуемость, Sum(Q+) – сумма положительных атомных зарядов, Sum(Ca) – сумма свободно-энергетических Н-акцепторных дескрипторов, Dipole – дипольный момент, max(Q+) – максимальный положительный атомный заряд, max(Ca) – максимальный свободноэнергетический Н-акцепторный дескриптор, Sum(Q+)/Alpha – сумма положительных атомных зарядов/поляризуемость, Sum(Cad) – сумма свободно-энергетических Н-акцепторных и Н-донорных дескрипторов.

Список веществ, значения дескрипторов и нейротоксичности были взяты из работы [1].

По исходным данным, представленным в статье [1], было разработано 6 структур нейронных сетей прямого распространения для прогнозирования нейротоксичности (табл. 1). Эти структуры соответствуют наборам различных дескрипторов, приведенных в таблицах с результатами оценки статистических характеристик регрессионных

моделей острой сублетальной нейротоксичности 47 органических растворителей по отношению к крысам и мышам [1]. При создании указанных моделей были использованы следующие статистические методы: линейная регрессия (ЛР), случайный лес (СЛ) и опорные вектора (ОВ).

Таблица 1. Исходные данные для разработки структур и формирования выборок для обучения нейронных сетей, прогнозирующих нейротоксичность органических растворителей

№ п/п	Статистический метод*	Дескрипторы	Выбросы	Количество соединений (число примеров в выборке)
Крысы				
1.	ЛР	Alpha, Sum(Q+), Sum(Ca), Dipole	-	47
2.	СЛ	max(Q+), Sum(Ca), Sum(Q+)/Alpha	-	47
3.	ОВ	Sum(Ca), Dipole, Sum(Cad)	-	47
4.	ЛРсВ	Alpha, Sum(Q+), Sum(Ca), Dipole	н-пентан, диоксан, сероуглерод	44
5.	СЛсВ	max(Q+), Sum(Ca), Sum(Q+)/Alpha	н-пентан, 1-пропанол, 1,1,2,2-тетрахлорэтан	44
6.	ОВсВ	Sum(Ca), Dipole, Sum(Cad)	н-пентан, 1-пропанол, 3-метилпиридин, 1,1,2,2-тетрахлорэтан	43
Мыши				
7.	ЛР	Alpha, Sum(Q+), Sum(Ca), Dipole	-	47
8.	СЛ	max(Q+), Sum(Ca)	-	47
9.	ОВ	max(Ca), Sum(Ca), Sum(Cad)	-	47
10.	ЛРсВ	Alpha, Sum(Q+), Sum(Ca), Dipole	сероуглерод, тетрагидрофуран	45
11.	СЛсВ	max(Q+), Sum(Ca)	ацетон, тетрагидрофуран	45
12.	ОВсВ	max(Ca), Sum(Ca), Sum(Cad)	н-пентан, тетрагидрофуран	45

*ЛРсВ – линейная регрессия с выбросом, СЛсВ – случайный лес с выбросом, ОВсВ – опорные вектора с выбросом

В [1] был проведен анализ выбросов в исходной выборке из 47 веществ. В итоге были исключены соединения, у которых абсолютная разность между экспериментальными и рассчитанными величинами превышала величину, равную удвоенному значению стандартного отклонения.

Формирование исходных выборок для прогнозирования нейротоксичности и результаты расчетов

Далее для разработанных структур нейронных сетей в соответствии с табл. 1 были составлены 12 выборок. Расчеты производились с использованием аналитической платформы Logitom Community [4], с помощью которой была смоделирована нейронная сеть с одним скрытым слоем, прогнозирующая значения нейротоксичности соединений. На первом этапе проводились расчеты путем перебора количества нейронов в скрытом слое от 1 до 7 (для крыс) и от 1 до 6 (для мышей).

Ошибка работы нейронной сети оценивалась в

отдельности по каждому ее выходу [3]:

$$\bar{E}_j = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\hat{y}_{jk}^n - \hat{y}_{jk}^p)^2}, \quad (1)$$

где N – кол-во примеров в выборке, \hat{y}_{jk}^n – значение выходного вектора обучающего примера, \hat{y}_{jk}^p – значение выходного вектора рассчитанного примера.

Порядок величины полученных ошибок сопоставим со средней абсолютной ошибкой нормализованных выходных переменных. Как следствие, с ее помощью можно оценить порядок величины относительной ошибки в процентах:

$$E_{\text{отн}} = \bar{E}_j * 100\% \quad (2)$$

Результаты расчетов представлены в табл.2. В данной таблице номер структуры нейронной сети соответствует номеру статистического метода в статье [1] и табл.1.

Таблица 2. Результаты расчётов и обучения нейронных сетей, прогнозирующих нейротоксичность

Грызуны	№ структуры НС	Метод	Структура НС [число входов – число нейронов в скрытом слое – число выходов]	Значение ошибки $\bar{E}_{отн}, \%$
Крысы	1	ЛР	[4-7-1]	3,93
	2	СЛ	[3-7-1]	5,47
	3	ОВ	[3-6-1]	5,18
	4	ЛРСВ	[4-3-1]	3,88
	5	СЛсВ	[3-7-1]	2,49
	6	ОВсВ	[3-7-1]	3,03
Мыши	7	ЛР	[4-5-1]	6,62
	8	СЛ	[2-6-1]	6,56
	9	ОВ	[3-6-1]	6,34
	10	ЛРСВ	[4-6-1]	7,00
	11	СЛсВ	[2-6-1]	5,36
	12	ОВсВ	[3-6-1]	3,73

Значение относительной ошибки при прогнозировании нейротоксичности с использованием нейронных сетей не превышает 7%. В целом, для НС, обученных на выборках с выбросами были получены значения $\bar{E}_{отн}$ в среднем в 1,5 раза меньше, чем для сетей, обученных на исходной выборке (табл.2).

В настоящей работе было проведено прогнозирование острой нейротоксичности ряда органических растворителей по отношению к грызунам с помощью нейронных сетей. По результатам исследования, представленным в табл. 2, сделан вывод, что для прогнозирования нейротоксичности для крыс рекомендуется использовать структуру №5 (табл.1, 2) нейронной сети прямого распространения, входами которой являются максимальный положительный атомный заряд, сумма свободно-энергетических H-акцепторных дескрипторов, сумма положительных атомных зарядов/ поляризуемость, с числом нейронов в скрытом слое 7, имеющей минимальную относительную ошибку обучения, равную 2,49 %. Дальнейшее исследование направлено на оценку коэффициентов частной корреляции, с целью корреляционного анализа между входами и выходами НС, предназначенной для

прогнозирования нейротоксичности органических растворителей по отношению к грызунам, а также расчёт нейротоксичности в программе QSAR Toolbox и сравнение полученных результатов.

Список литературы

1. Григорьев В.Ю., Раевская О.Е. QSAR моделирование острой нейротоксичности ряда органических растворителей по отношению к грызунам // Biomedical chemistry: research and methods. – 2018. – Т.1, №3. – С. 1-5.
2. QSAR – количественная взаимосвязь между структурой и активностью // Научный портал по биоинформатике [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://bioinformatix.ru/bioinformatika/qsar-kolichestvennaya-vzaimosvyaz-mezhdu-strukturoy-i-aktivnostyu.html> (дата обращения: 08.05.2021).
3. Дударов С.П., Папаев П.Л. Теоретические основы и практическое применение искусственных нейронных сетей: учеб.пособие – М. : РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2014. – 104 с.
4. Loginom – руководство пользователя // Loginom [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://help.loginom.ru/userguide/> (дата обращения: 10.05.2021).

УДК 004.02

Тихоненко К.А., Савицкая Т.В.

ПРАКТИЧЕСКАЯ АПРОБАЦИЯ ПРОГРАММНОГО ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ПОДБОРА АРМАТУРЫ НА МАГИСТРАЛЬНЫХ ТРУБОПРОВОДАХ

Тихоненко Ксения Александровна – магистрант 1-го года обучения кафедры кибернетики химико-технологических процессов; miss_kso@icloud.com.

Савицкая Татьяна Вадимовна – доктор технических наук, профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

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

В статье рассмотрены актуальность программы по подбору трубопроводной арматуры для нефте- и продуктопроводов, её аналоги, алгоритм работы программы, особенности реализации программы, апробация на нескольких типах нефтепроводной арматуры.

Ключевые слова: магистральный нефтепровод, трубопроводная арматура, программное приложение, база данных.

PRACTICAL APPROBATION OF THE SOFTWARE APPLICATION FOR THE SELECTION OF VALVES ON MAIN PIPELINES

K.A. Tikhonenko, T.V. Savitskaya

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

The article discusses the relevance of the program for the selection of pipeline valves for oil and product pipelines, its analogues, the algorithm of the program, features of the program, testing on several types of oil pipeline valves.

Key words: oil trunk pipeline, pipeline fittings, software application, database.

Введение

Вопрос автоматизированного проектирования равным образом, как и вопрос расчёта параметров с целью подбора арматуры магистральных трубопроводов представляется крайне важным. Это сопряжено с тем, что при проектировании, а также управлении сложными технологическими объектами, какими представляются магистральные трубопроводы, особые условия предъявляются к эксплуатационной надёжности, а также их безопасности.

Достаточно много существует программных комплексов, которые тем или иным образом помогают подбирать арматуру для магистральных трубопроводов, например, ANSYS, разработчиком которой является американская компания Ansys inc [1], использует метод конечных элементов (МКЭ), заключается он в том, что производится деление исследуемой области на совокупность подобластей. ANSYS позволяет моделировать физические процессы с использованием построенных в конструкторских программах трехмерных моделей, снимая необходимость передачи модели из одной программы в другую. Кроме ещё существует ProCAST, разработанная CSoft Москва / АО «СиСофт» [2] - профессиональная система компьютерного моделирования литейных процессов методом конечных элементов, обеспечивающая совместное решение температурной, гидродинамической и деформационной задач вместе с уникальными металлургическими возможностями для всех процессов литья и литейных сплавов. Старт-Проф [3] – программа для проектирования, расчета прочности и жесткости трубопроводов различного назначения, она же является и самой

распространённой в России и странах СНГ, используется с нормативными документами, включает в себя интерфейсы для интеграции с рядом программ для расчета и проектирования таких как Гидросистема, CAESAR II, КОМПАС, AutoCAD и многие другие, также в ней уже есть множество встроенных баз данных параметров трубопроводов. Но у всех вышеперечисленных программ есть недостатки: их нет в свободном доступе и не все из них могут производить полный расчёт для подбора трубопроводной арматуры. Именно поэтому было разработано программное приложение «Подбор трубопроводной арматуры» по методике расчёта требуемых гидравлических и кавитационных характеристик регулирующей арматуры для выбора в системы автоматического регулирования [4]. Приложение обеспечивает решение следующих основных задач:

1. Расчёт гидравлических и кавитационных характеристик;
2. Реализацию методики [4] с помощью императивного, структурированного, объектно-ориентированного, высокоуровневого языка программирования со строгой статической типизацией переменных Delphi [5];
3. Внедрение базы данных арматуры для магистральных трубопроводов с помощью языка программирования структурированных запросов SQL [6] и системы управления базами данных под управлением Windows MS Access [7].

Экспериментальная часть

Приложение апробировано на типовых магистральных трубопроводах тремя разными случаями, первый (рис. 1-3) отражает изменение во

время расчёта номинального диаметра и условной пропускной способности, второй случай (рис. 4) показывает расчёт с меньшим абсолютным давлением на входе в конфузур, а третий случай (рис. 5-6)

отражает расчёт с меньшими значениями массовых расходов.

Случай первый:

Таблица 1. Исходные данные

Наименование параметра	Значения параметров режимов эксплуатации
Наименование рабочей среды	нефть
Абсолютное давление насыщенных паров рабочей среды при температуре на входе, МПа	0,1 (при температуре отбора пробы 38°C)
Плотность среды при рабочих условиях, кг/м ³	886,7
Коэффициент кинематической вязкости при температуре среды на входе, м ² /с	3,4 · 10 ⁻⁵
Массовый расход, кг/с	1300
Максимальный массовый расход по технологическому регламенту, кг/с	2854
Абсолютное давление на входе, МПа	5,1
Абсолютное давление на выходе, МПа	5,5
Минимальный перепад давления, МПа	0,4
Абсолютное давление, МПа	0,101325
Диаметр трубопровода, на котором устанавливается, м	1,22
Шероховатость внутренней стенки трубопровода, м	6 · 10 ⁻⁴
Номинальный диаметр арматуры, м	0,4
Условная пропускная способность, м ³ /ч	2600

Необходимо выбрать тип регулирующей арматуры, в примере взят клапан регулирующий с плунжерным затвором для проверки. По каталогу для него необходимо определить значения коэффициента кавитации (Kc) и коэффициента критического перепада давления (Km) для того, чтобы использовать их как исходные данные [8] (рис. 1).

$K_c = 0,6;$
 $K_m = 0,8$

Коэффициенты запаса по пропускной способности так же определяются по каталогу:

- для линейной пропускной характеристики: N1=0,6; N2=0,92 (взят для примера);
- для равнопроцентной пропускной характеристики: N1=0,22; N2=0,75.

После ввода исходных данных необходимо нажать на кнопку «Расчёт» (рис. 2).

Подбор трубопроводной арматуры

Файл О программе Доступ к Базе данных

Исходные данные

Миним. перепад давления, МПа: 0,4

Абс. давл. на входе в конфузур, МПа: 5,1

Абс. давл. насыщенных паров, МПа: 0,1

Коэффициент кавитации: 0,6

Коэф. критич. перепада давления: 0,8

Абсолютное давление, МПа: 0,101325

Массовый расход, кг/с: 1300

Диаметр трубопровода, м: 1,22

Плотность рабочей среды, кг/м³: 886,7

Коэф. кинематич. вязкости, м²/с: 0,000034

Номинальный диаметр арматуры, м: 0,4

Макс. массовый расход среды, кг/с: 2854

Центральный угол конфузора, град: 20

Центральный угол диффузора, град: 15

Коэф. запаса по пропускной спос. (1): 0,6

Диам. сеч. патрубка на вых. из конф., м: 1,2

Диам. сеч. патрубка на вых. из диф., м: 1,2

Коэф. запаса по пропускной спос. (2): 0,92

Усл. пропускная способность, м³/ч: 2600

Абсолютная шероховатость труб., м: 0,0006

Расчёт **Далее (при прерывании)**

Расчётные данные

Требуемый коэффициент кавитации: [Green bar]

Перепад давления, МПа: [Green bar]

Пропускная способность, м³/ч: [Green bar]

Число Рейнольдса: [Green bar]

Коэф. гидравлического трения: [Green bar]

Квадратичный модуль: [Green bar]

Критическое число Рейнольдса: [Green bar]

Число Рейнольдса для цилиндра, труб: [Green bar]

Уточнённая проп. способность, м³/ч: [Green bar]

Рис.1. Исходные данные по таблице 1 (случай первый)

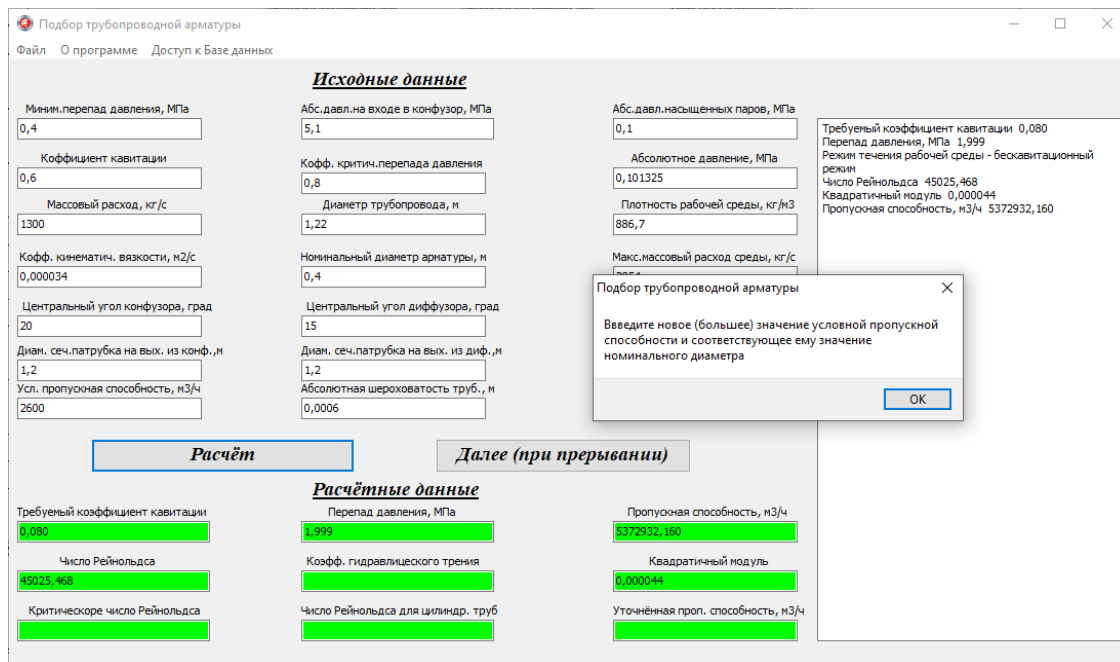


Рис.2. Запрос программы об изменении значений номинального диаметра арматуры и условной пропускной способности

После необходимо нажать на кнопку «Далее (при прерывании)», чтобы досчитались остальные значения по данной ветке расчёта (рис. 3). Но кроме этого, значения номинального диаметра в исходных данных заменяются на новые 0,8 м после ввода.

Уточнённая пропускная способность оказалась равна 5402 м³/ч, программа выдаст окно с базой данных по арматуре, где можно будет по текущему номинальному диаметру найти все подходящие устройства (рис. 3), видно, что можно взять клапан запорно-регулирующий с номинальным диаметром 0,82 м или же подыскать какую-то другую арматуру.

Случай второй:

Если взять все те же исходные данные (таблица 1), но заменить абсолютное давление на входе в конфузор с 5,1 Мпа на 0,5 Мпа, то требуемый коэффициент кавитации будет равен 1, что говорит о том, что программа выдаст выбор метода устранения кавитации, выбран метод с помощью дополнительной регулирующей арматуры, далее программа не считает, нужно выбрать новую арматуру (рис. 4).

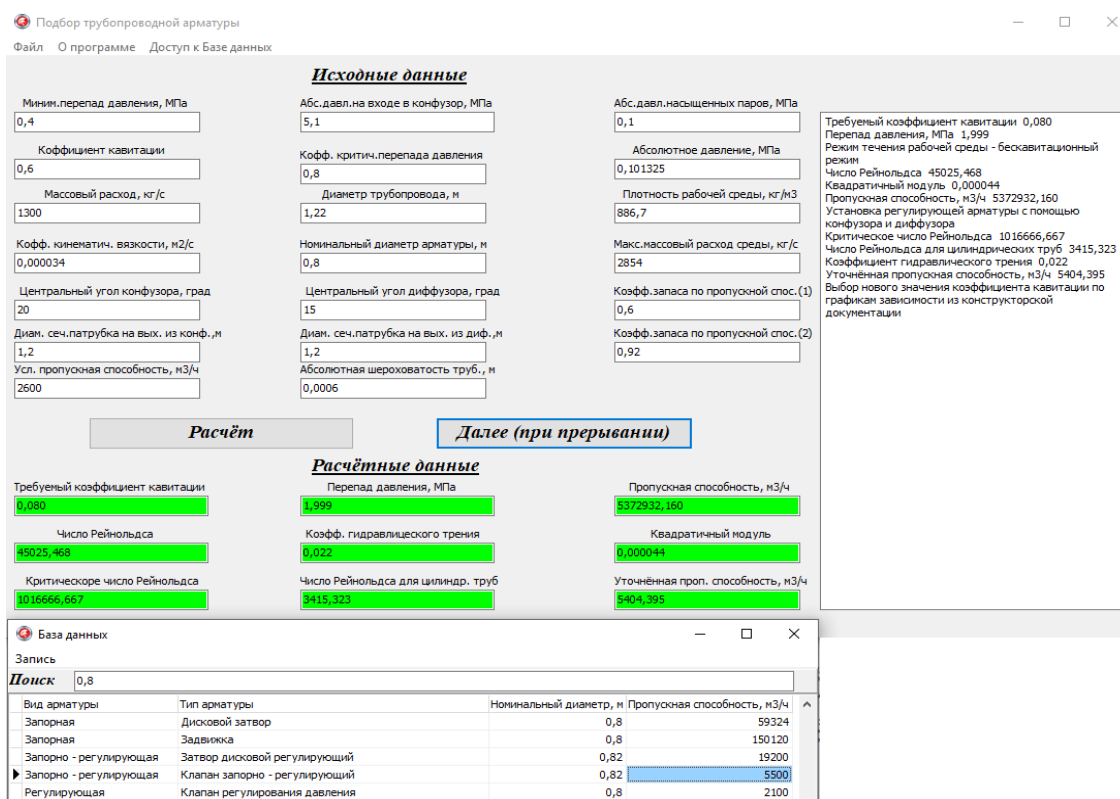


Рис.3. Рассчитанные значения с частью БД

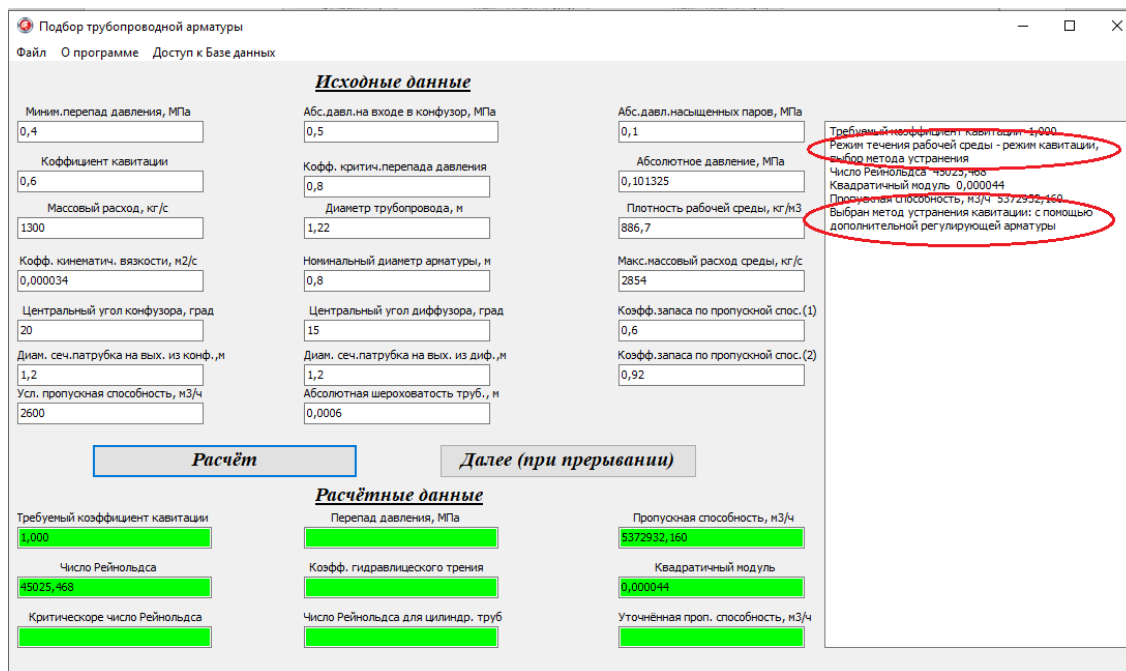


Рис.4. Расчёт второго случая

Случай третий:

Если взять все те же исходные данные (таблица 1), но заменить массовый и максимальный массовые расходы на 200 кг/с и 500 кг/с, то число Рейнольдса окажется меньше 10000, из чего следует, что

программа должна выдать окно для ввода значений для расчёта квадратичного модуля (таблица 2). Выбираем значения для регулирующей арматуры других типов (рис. 5).

Таблица 2. Значения коэффициентов для расчета квадратичного модуля

Тип регулирующей арматуры	Значение коэффициента		
	<i>a</i>	<i>B</i>	<i>c</i>
Дисковые затворы	276,0	0,07154	0,7679
Регулирующая арматура других типов	240,0	1,30600	1,0770

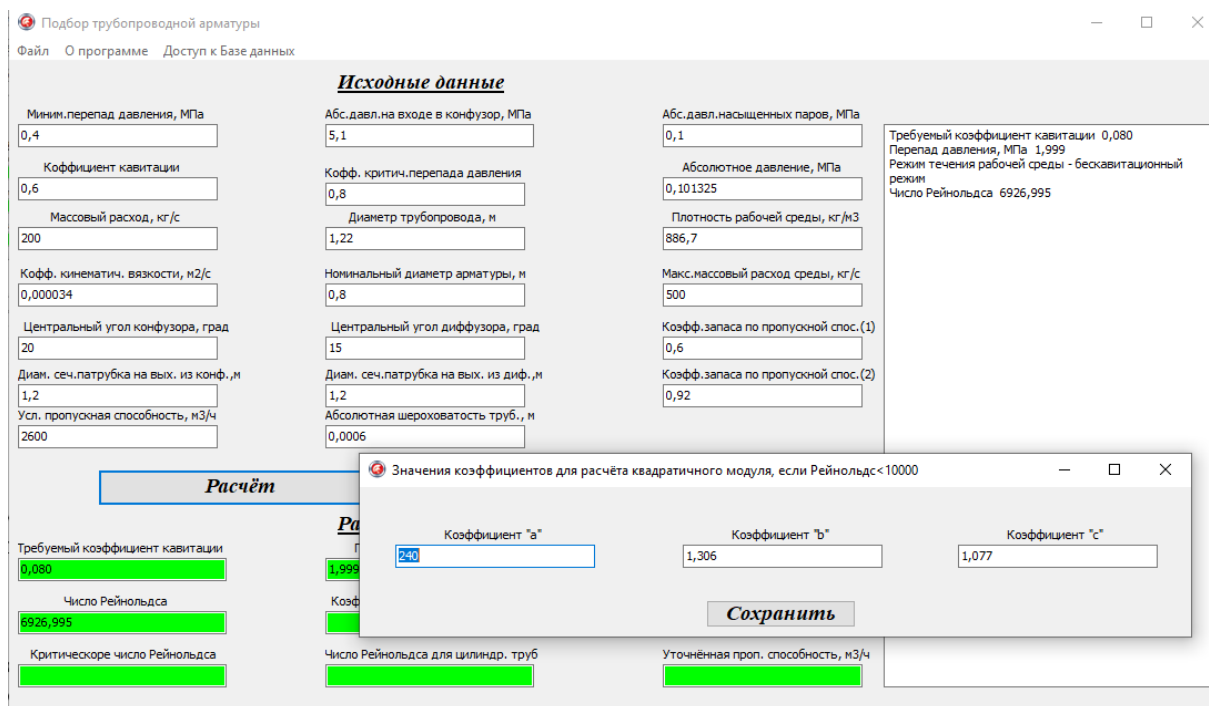


Рис.5. Выбор значений коэффициентов для расчёта квадратичного модуля

Далее программа просит ввести новые минимальные значения номинального диаметра арматуры и условной пропускной способности, выбираем по паспорту оборудования 0,35 м и 2000 м³/ч соответственно (исходные данные меняются на новые значения номинального диаметра 0,35 м и условной пропускной способности 2000 м³/ч) (рис.

6). После нажимаем на кнопку «Далее (при прерывании)». Подбираем новое значение требуемого коэффициента кавитации, вводим в окно программы, оно оказалось меньше рассчитанного, программа говорит о том, что данная арматура не подходит, необходимо подобрать другую, то есть произвести расчёт заново (рис. 6).

Исходные данные	
Миним. перепад давления, МПа	0,4
Абс. давл. на входе в конфузор, МПа	5,1
Коэффициент кавитации	0,6
Абс. давл. насыщенных паров, МПа	0,1
Массовый расход, кг/с	200
Абсолютное давление, МПа	0,101325
Коэфф. критич. перепада давления	0,8
Плотность рабочей среды, кг/м ³	886,7
Диаметр трубопровода, м	1,22
Макс. массовый расход среды, кг/с	500
Номинальный диаметр арматуры, м	0,35
Коэфф. кинематич. вязкости, м ² /с	0,00034
Центральный угол диффузора, град	20
Коэфф. запаса по пропускной спос.(1)	0,6
Дан. сеч. патрубка на вых. из конф., м	1,2
Коэфф. запаса по пропускной спос.(2)	0,92
Центральный угол диффузора, град	15
Дан. сеч. патрубка на вых. из диф., м	1,2
Усл. пропускная способность, м ³ /ч	2000
Абсолютная	0,0006

Расчёт	
Требуемый коэффициент кавитации	0,080
Число Рейнольдса	6926,995
Критическое число Рейнольдса	101666,667
Перепад давления, МПа	1,999
Коэфф. гидравлического трения	0,034
Число Рейнольдса для цилиндр. труб	3415,323
Пропускная способность, м ³ /ч	1,892
Квадратичный модуль	35468000,000
Уточнённая проп. способность, м ³ /ч	946,268

Рис.6. Расчёт третьего случая

Заключение

Программное приложение апробировано на тестовых примерах подбора регулирующей арматуры магистральных нефтепроводов. Планируется дальнейшее расширение базы данных программы и методов расчёта, а также более масштабная апробация на различных типах трубопроводной арматуры и различных средах с последующим включением данного программного приложения и результатов вычислительных экспериментов в систему поддержки принятия решений по выбору трубопроводной арматуры с учетом требований надежности и промышленной безопасности. Разработанное программное приложение, реализующее методику, может эффективно использоваться для обучения студентов решению инженерных задач и специалистами, занимающимися проектированием трубопроводной арматуры.

Список литературы

1. ANSYS: сайт. — URL: <https://www.ansys.com/> (Дата обращения: 05.05.2021).
2. Casting Simulation Software «Все о моделировании литейных процессов»: сайт. — URL: <https://castsoft.ru/> (Дата обращения: 05.05.2021).

3. Научно-техническое предприятие «Трубопровод». Программное обеспечение. Инженерные расчеты и автоматизация проектирования: сайт. — URL: <https://www.truboprovod.ru/software/> (Дата обращения: 06.05.2021).

4. ГОСТ Р 59126-2020. Методика расчета требуемых гидравлических и кавитационных характеристик арматуры регулирующей для выбора в системы автоматического регулирования: сайт. — URL: <http://docs.cntd.ru/document/560994368> (Дата обращения: 05.05.2021).

5. Delphi. Embarcadero: сайт. — URL: <https://www.embarcadero.com/ru/products/delphi> (Дата обращения: 07.05.2021).

6. MySQL: сайт. — URL: <https://www.mysql.com/> (Дата обращения: 07.05.2021).

7. MsAccess. Microsoft: сайт. — URL: <https://www.microsoft.com/ru-ru/microsoft-365/access> (Дата обращения: 07.05.2021).

8. Регулятор. Регулирующая и запорная арматура: сайт. — URL: <http://www.emk.ru/images/CatalogiReg/Katalog-Regulator-2.pdf> (Дата обращения: 08.05.2021).

УДК 66.094.258.097

Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Шостаковский М.В., Шевченко А.А.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ ПРОПАНА В ПРОПИЛЕН В ЗЕРНЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО ЦЕОЛИТСОДЕРЖАЩЕГО КАТАЛИЗАТОРА

Писаренко Елена Витальевна, д.т.н., профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва, e-mail: evpisarenko@mail.ru;

Пономарев Андрей Борисович, к.х.н., старший научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН;

Шостаковский Михаил Вячеславович, научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН;

Шевченко Анна Анатольевна, студентка 2 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева;

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

ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, Россия, Москва.

Изучен процесс неокислительного дегидрирования пропана на цеолитах типа MFI, модифицированных Pt, Zn, Cu. Построены регрессионные модели, устанавливающие зависимость активности и селективности работы нанокатализаторов от условий проведения процесса. Приведены термодинамические расчеты изменения энтальпии, энтропии, энергии Гиббса реакций, протекающих в реакционной системе. Рассчитаны равновесные составы реакционной смеси, бинарные коэффициенты диффузии, коэффициенты взаимной диффузии реагентов в многокомпонентных газовых смесях, коэффициенты диффузии Кнудсена. Построена квазигомогенная модель зерна катализатора дегидрирования пропана.

Ключевые слова: получение пропилена, катализаторы, кинетика, моделирование.

MODELING OF PROPANE DEHYDROGENATION PROCESS TO PROPYLENE IN THE GRAIN OF A MODIFIED ZEOLITE CATALYST

Pisarenko E.V., Ponomaryov A.B., Shostakovsky M.V., Shevchenko A.A.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia;

Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia.

The process of non-oxidative dehydrogenation of propane over MFI-type zeolites modified with Pt, Zn, Cu was studied. Regression models that establish the dependence of the activity and selectivity of the nanocatalyst performance on the process conditions were suggested. The thermodynamic calculations of changes in enthalpy, entropy, Gibbs energy of reactions occurring in the reaction system are presented. The equilibrium compositions of the reaction mixture, binary diffusion coefficients, interdiffusion coefficients of reagents in multicomponent gas mixtures, Knudsen diffusion coefficients have been calculated. A quasi-homogeneous model of the catalyst grain were developed.

Keywords: propylene production, catalysts, kinetics, modeling.

К основным способам производства пропилена относятся пиролиз бензина и каталитический крекинг нефти. В связи с ростом спроса на пропилен традиционные технологии его производства больше не могут удовлетворять растущие потребности промышленности. Поэтому разработка альтернативных технологий получения пропилена имеет важное практическое значение. В последние несколько лет активно развивается каталитическое дегидрирование пропана. В качестве эффективных катализаторов рассматриваются цеолиты, содержащие платину, олово, хром, ванадий, индий, галлий и ряд других металлов. Также приобретают все большее значение мезопористые углеродные материалы, которые не содержат металлов или их оксидов [1].

В ходе проведения эксперимента методом влажной пропитки были получены модифицированные медью и цинком цеолитсодержащие катализаторы (2%Cu+1%Zn+0,5%Pt)Na-MFI и (1%Cu+1%Zn+0,5%Pt)Na-MFI, которые отличились высокой активностью и большой стабильностью на

протяжении 8 часов (рисунок 1).

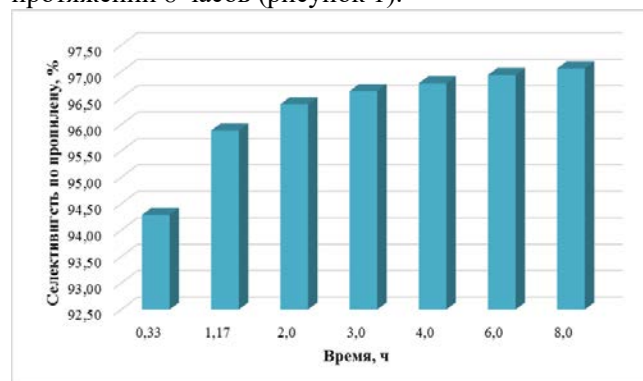


Рисунок 1. Зависимость селективности по пропилену от времени проведения реакции для модифицированного цеолитсодержащего катализатора типа MFI (1%Cu+1%Zn+0,5%Pt).

Проведен регрессионный анализ для установления зависимости активности и селективности работы катализаторов от условий проведения процесса. Уравнение регрессии для расчета селективности по пропилену имеет вид:

$$\text{Selec} = 93,87 + 1,89y_1 - 0,38y_1^2 + 0,02y_1^3. \quad (1)$$

Из таблицы 1 следует, что рассогласование между экспериментальными данными селективности по пропилену и значениями, найденными по регрессионной модели незначительно, т.е. предложенная модель отражает экспериментальные данные.

Проведены термодинамические расчеты (ΔH_T , ΔS_T , ΔG_T) для реакций, протекающих в реакторе:

1. целевой реакции дегидрирования пропана с выделением пропилена и водорода;
2. побочной реакции крекинга пропана с выделением этилена и метана;
3. побочной реакции гидрогенолиза пропана с выделением этана и метана;
4. побочной реакции гидрирования этилена с образованием этана;
5. побочной реакции коксообразования;
6. реакции парового риформинга пропана с выделением монооксида углерода и водорода;
7. реакции парового риформинга пропилена с выделением монооксида углерода и водорода;
8. реакции паровой конверсии монооксида углерода с образованием диоксида углерода и водорода.

Реакции 6-8 протекают при добавлении пара. Добавление пара способствует снижению

коксобразования и увеличению длительности межрегенерационного пробега катализатора. Реакция паровой конверсии CO является экзотермической, что обеспечивает дополнительное тепло для реакции эндотермического дегидрирования. Образующийся водород может использоваться в процессе регенерации катализаторов или потребляться в процессе, сочетающим дегидрирование пропана и селективное сжигание водорода, что сдвигает равновесие реакции в сторону пропилена [2].

С использованием справочных данных [3] получены зависимости изменения энтальпии, энтропии, энергии Гиббса и константы равновесия от температуры. В таблице 2 приведены численные значения изменения энтальпии и констант равновесия реакций при различных температурах.

Рассчитаны равновесные составы для всех реакций. Установлено, что изменение T , P и соотношения C_3H_8/H_2 существенно влияет на выход пропилена и конверсию пропана. Повышение T , уменьшение P и доли H_2 в исходной смеси способствуют увеличению конверсии пропана и выхода пропилена. Зависимость конверсии пропана от температуры при $P=0,01$ атм. представлена таблице 3.

Таблица 1. Рассогласование между экспериментальными данными селективности по пропилену и значениями, найденными по регрессионной модели

T, °C	Время, ч	Селективность по пропилену (экс.), %	Расчет по регрессионному уравнению	Абсолютная ошибка	Относительная ошибка, %
550	0,33	32,61	32,63	0,02	0,06
	1,17	95,89	95,40	0,49	0,51
	2,0	96,38	96,29	0,09	0,09
	3,0	96,63	96,66	0,03	0,03
	4,0	96,78	96,63	0,15	0,15
	6,0	96,94	95,85	1,09	1,12
	8,0	97,06	94,91	2,15	2,22

Таблица 2. Численные значения изменения энтальпии и констант равновесия реакций при $T=520-580^\circ\text{C}$

Реакция	ΔH_T , кДж/моль			K_P , атм.		
	520°C	550°C	580°C	520°C	550°C	580°C
$C_3H_8=C_3H_6+H_2$	129,06	129,12	129,17	0,05	0,11	0,21
$C_3H_8=CH_4+C_2H_4$	79,95	79,70	79,44	52,14	81,06	122,00
$C_3H_8+H_2=C_2H_6+CH_4$	-66,95	-67,85	-68,77	$1,01 \cdot 10^4$	$6,99 \cdot 10^3$	$4,92 \cdot 10^3$
$C_2H_4+H_2=C_2H_6$	-139,44	-139,06	-138,60	266,00	123,20	60,37
$C_3H_8=3C+4H_2$	103,12	101,98	100,75	$4,30 \cdot 10^6$	$7,57 \cdot 10^6$	$1,27 \cdot 10^7$
$C_3H_8+3H_2O=3CO+7H_2$	552,87	555,65	558,41	$3,05 \cdot 10^4$	$6,52 \cdot 10^5$	$1,14 \cdot 10^7$
$C_3H_6+3H_2O=3CO+6H_2$	423,81	426,53	429,24	$5,70 \cdot 10^5$	$5,97 \cdot 10^6$	$5,38 \cdot 10^7$
$CO+H_2O=CO_2+H_2$	-43,89	-44,20	-44,53	2,71	2,12	1,69

Таблица 3. Равновесный состав продуктов реакции дегидрирования пропана при $P=0,01$ атм.

T, °C	Парциальные давления реагентов на выходе из реактора, атм.			Конверсия, %	Содержание реагентов на выходе из реактора, об. %		
	C_3H_8	C_3H_6	H_2		C_3H_8	C_3H_6	H_2
400	$6,66 \cdot 10^{-3}$	$3,34 \cdot 10^{-3}$	$3,34 \cdot 10^{-3}$	33,36	49,96	25,02	25,02
450	$4,16 \cdot 10^{-3}$	$5,84 \cdot 10^{-3}$	$5,84 \cdot 10^{-3}$	58,41	26,25	36,88	36,88
500	$1,96 \cdot 10^{-3}$	$8,04 \cdot 10^{-3}$	$8,04 \cdot 10^{-3}$	80,36	10,89	44,56	44,56
550	$7,65 \cdot 10^{-4}$	$9,24 \cdot 10^{-3}$	$9,24 \cdot 10^{-3}$	92,35	3,98	48,01	48,01
600	$2,87 \cdot 10^{-4}$	$9,71 \cdot 10^{-3}$	$9,71 \cdot 10^{-3}$	97,13	1,46	49,27	49,27
650	$1,13 \cdot 10^{-4}$	$9,89 \cdot 10^{-3}$	$9,89 \cdot 10^{-3}$	98,87	0,57	49,72	49,72

С использованием справочных данных [3] и данных из литературы [4] были рассчитаны бинарные коэффициенты диффузии реагентов и

коэффициенты диффузии Кнудсена. Их численные значения представлены в таблицах 4 и 5.

Таблица 4. Значения бинарных коэффициентов диффузии реагентов при $T=550^{\circ}\text{C}$

Вещества	D_{AB} , cm^2/c	Вещества	D_{AB} , cm^2/c	Вещества	D_{AB} , cm^2/c
$\text{C}_3\text{H}_8\text{-C}_3\text{H}_6$	0,42	$\text{CH}_4\text{-C}_2\text{H}_6$	0,94	$\text{C}_2\text{H}_4\text{-H}_2$	3,34
$\text{C}_3\text{H}_8\text{-H}_2$	2,54	$\text{C}_3\text{H}_8\text{-H}_2\text{O}$	0,71	$\text{C}_2\text{H}_4\text{-C}_2\text{H}_6$	0,69
$\text{C}_3\text{H}_6\text{-H}_2$	2,79	$\text{C}_3\text{H}_8\text{-CO}$	0,64	$\text{C}_2\text{H}_6\text{-H}_2$	3,09
$\text{C}_3\text{H}_8\text{-C}_2\text{H}_4$	0,54	$\text{CO-H}_2\text{O}$	1,34	$\text{C}_3\text{H}_8\text{-C}_2\text{H}_6$	0,50
$\text{C}_3\text{H}_8\text{-CH}_4$	0,75	$\text{H}_2\text{-H}_2\text{O}$	4,69	$\text{CH}_4\text{-H}_2$	4,00
$\text{C}_2\text{H}_4\text{-CH}_4$	1,02	CO-H_2	4,00	$\text{H}_2\text{-CO}_2$	3,43
$\text{C}_3\text{H}_6\text{-CO}$	0,70	$\text{C}_3\text{H}_6\text{-H}_2\text{O}$	0,77	CO-CO_2	0,87
$\text{H}_2\text{-CO}_2$	1,02	–	–	–	–

Таблица 5. Значения коэффициентов диффузии Кнудсена при $T=550^{\circ}\text{C}$

Вещества	D_{Kn} , cm^2/c	Вещества	D_{Kn} , cm^2/c	Вещества	D_{Kn} , cm^2/c
C_3H_8	0,02978	C_2H_4	0,04939	H_2O	0,04656
C_3H_6	0,03048	CH_4	0,03733	CO	0,03733
H_2	0,13969	C_2H_6	0,03607	CO_2	0,02978

Для установления оптимальной поровой структуры зерна катализатора и оптимальных геометрических размеров гранул была выбрана квазигомогенная модель зерна катализатора дегидрирования пропана:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial p_{\text{C}_3\text{H}_8}}{\partial t} &= D_{\text{эф},\text{C}_3\text{H}_8} \left(\frac{\partial^2 p_{\text{C}_3\text{H}_8}}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial p_{\text{C}_3\text{H}_8}}{\partial r} \right) - \frac{k_1 \cdot \left(p_{\text{C}_3\text{H}_8} - \frac{p_{\text{C}_3\text{H}_8} \cdot p_{\text{H}_2}}{K_P} \right)}{(1 + K_2 \cdot p_{\text{C}_3\text{H}_8} + K_3^{0,5} \cdot p_{\text{H}_2}^{0,5})^2} \\ p_{\text{C}_3\text{H}_8}(r) &= \frac{D_{\text{эф},\text{C}_3\text{H}_8}}{D_{\text{эф},\text{C}_3\text{H}_8}} \cdot (p_{\text{C}_3\text{H}_8,s} - p_{\text{C}_3\text{H}_8}(r)) + p_{\text{C}_3\text{H}_8,s} \\ p_{\text{H}_2}(r) &= \frac{D_{\text{эф},\text{C}_3\text{H}_8}}{D_{\text{эф},\text{H}_2}} \cdot (p_{\text{C}_3\text{H}_8,s} - p_{\text{C}_3\text{H}_8}(r)) + p_{\text{H}_2,s} \\ T(r) &= \frac{\Delta H}{\lambda_{\text{эф}}} \cdot D_{\text{эф},\text{C}_3\text{H}_8} \cdot (p_{\text{C}_3\text{H}_8} - p_{\text{C}_3\text{H}_8}(r)) + T_s \end{aligned} \right. \quad (2)$$

Начальные условия:

$$t = 0; p_{\text{C}_3\text{H}_8}(0, r) = p_{\text{C}_3\text{H}_8}(r); p_{\text{C}_3\text{H}_6}(0, r) = p_{\text{C}_3\text{H}_6}(r); p_{\text{H}_2}(0, r) = p_{\text{H}_2}(r); T(0, r) = T(r)$$

Граничные условия Дирихле:

- $t > 0; r = 0; \frac{\partial p_{\text{C}_3\text{H}_8}}{\partial r} = 0; \frac{\partial p_{\text{C}_3\text{H}_6}}{\partial r} = 0; \frac{\partial p_{\text{H}_2}}{\partial r} = 0; \frac{\partial T}{\partial r} = 0;$
- $t > 0; r = R; p_{\text{C}_3\text{H}_8}(t, R) = p_{\text{C}_3\text{H}_8,s}; p_{\text{C}_3\text{H}_6}(t, R) = p_{\text{C}_3\text{H}_6,s}; p_{\text{H}_2}(t, R) = p_{\text{H}_2,s}; T(t, R) = T_s$

где r – текущий радиус; $D_{\text{эф},i}$ – эффективный коэффициент диффузии i -го компонента, m^2/c ; p_i – парциальное давление i -го компонента, бар; $\lambda_{\text{эф}}$ – эффективный коэффициент теплопроводности; ΔH – изменение энтальпии; T – температура, К. t – время, с; K_P – константа равновесия реакции, бар. K_i – константа адсорбционно-десорбционного равновесия, бар^{-1} и k_1 – константа скорости реакции, c^{-1} рассчитывались как:

$$k_1 = k_{01} \cdot \exp\left(-\frac{E_{a1}}{R} \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m}\right)\right) \quad (3)$$

$$K_i = K_{0i} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta_r H_i}{R} \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m}\right)\right) \quad (4)$$

где $k_{01}=0,1418 \text{ c}^{-1}$; $E_{a1}=44,7 \text{ кДж/моль}$; $K_{02}=8,106 \text{ бар}^{-1}$; $\Delta_r H_2=94,3 \text{ кДж/моль}$; $K_{03}=1,013 \text{ бар}^{-1}$; $\Delta_r H_3=238,9 \text{ кДж/моль}$, $T_m=838\text{K}$ – температура хладагента [4].

Для решения квазигомогенной модели зерна катализатора использован метод прогонки [5]. Установлено, что оптимальными условиями проведения процесса неокислительного дегидрирования пропана в пропилен

(нанокатализатор 0,5%Pt-1%Cu-1%Zn-MFI) являются $T=550^{\circ}\text{C}$, $P=1 \text{ атм.}$, $WHSV=3 \text{ ч}^{-1}$. Оптимальный радиус гранулы катализатора составляет 3 мм.

Список литературы

- Sai C., Xin C., Guodong S., Tingting Z. et al. Propane dehydrogenation: catalyst development, new chemistry, and emerging technologies // Chemical Society Reviews. – 2021. – V. 50. – P. 3315-3354.
- Yuling S., Zhijun S., Yian Z., De C., Xinggui Z. Effect of steam addition on the structure and activity of Pt-Sn catalysts in propane dehydrogenation // Chemical Engineering Journal. – 2015. – V. 278. – P. 240-248.
- Рид Р. Свойства газов и жидкостей: Справочное пособие / Р. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд. Пер. с англ. под ред. Б.И. Соколова. – 3-е изд., перераб. и доп. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
- Sheintuch M., Liron O., Ricca A., Palma V. Propane dehydrogenation kinetics on supported Pt catalyst // Applied Catalysis A: General. – 2016. – V. 516. – P. 17-29.
- Писаренко Е.В. Гетерогенный катализ и каталитические процессы. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2018. – 104 с.

**Российский химико-
технологический
университет
имени Д.И. Менделеева**



При поддержке

**Российского химического
общества им. Д. И. Менделеева**



ООО «БИНАКОР-ХТ»



Научное издание

УСПЕХИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXV

№ 3 (238)

Компьютерная верстка: Зверева О.В.
Текст репродуцирован с оригиналов авторов

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева
Студенческое трансферное агентство разработок и технологий (С.Т.А.Р.Т)

Адрес университета: 125047, г. Москва,

Миусская пл., д. 9