

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

*УСПЕХИ
В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ
ТЕХНОЛОГИИ*

Том XXXII

№ 1

Москва
2018

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 XXXII,
У78 № 1 (197). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2018. – 72 с.

В сборнике "Успехи в химии и химической технологии» опубликованы статьи по актуальным вопросам в области химической технологии, а также теоретической и экспериментальной химии в рамках мероприятия МКХТ-2018.

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

ISSN 1506-2017

© Российский химико-технологический
университет им. Д. И. Менделеева, 2018

Памяти Евгения Александровича Дмитриева

Дмитриев Евгений Александрович, д.т.н., профессор, 1952 г. рождения, заведующий кафедрой процессов и аппаратов химической технологии с 2004 по 2017 год.



Вся жизнь Евгения Александровича неразрывно связана с Менделеевским институтом. Он окончил МХТИ им. Д.И. Менделеева в 1974 г и был распределен в Министерство Внешней Торговли, но в 1976 году вернулся в родной институт и поступил в аспирантуру на кафедру процессов аппаратов. Во время выполнения кандидатской работы под руководством Ю.И. Дытнерского он создал уникальную установку лазерного интерферометрического исследования процессов мембранного разделения смесей.

Его талант ученого проявился в полной мере после защиты кандидатской диссертации в 1981 году, когда Евгений Александрович стал заниматься явлениями переноса массы и энергии, как фундаментальными основами науки о процессах и аппаратах химической технологии. Для этого он освоил сложный математический аппарат описания и расчетов явлений переноса, и в 2003 году успешно защитил докторскую диссертацию.

Евгения Александровича высоко ценил бывший ректор Павел Джibraелович Саркисов, выдвинувший его в 1999 году на должность декана факультета Кибернетики химико-технологических процессов, который впоследствии по инициативе Евгения Александровича был переименован в факультет Высоких Ресурсосберегающих и Информационных технологий. В начале 2000 годов Евгений Александрович инициировал создание Высшего колледжа по подготовке специалистов в области энерго-и ресурсосбережения, деканом которого являлся в течение многих лет. В РХТУ им Д.И. Менделеева специалисты этого направления выпускаются по сей день.

Стаж научно-педагогической работы Евгения Александровича более 40 лет. Он преподавал на кафедре процессов и аппаратов РХТУ им. Д.И. Менделеева с 1979 г., а с 2004 г. – заведовал кафедрой ПАХТ.

Дмитриев Евгений Александрович являлся одним из ведущих ученых в области химической технологии. Его работы по массообменным и гибридным процессам разделения смесей опубликованы в ряде отечественных и зарубежных изданий, неоднократно докладывались на международных и отечественных конференциях. Неоднократно (с 2001 года по 2009 год) д.т.н. Е.А. Дмитриев получал гранты на проведение научно-исследовательских работ от Министерства образования, а также по Федеральной целевой программе государственной поддержки интеграции высшего образования и фундаментальной науки (2001-2017). Им осуществлялось непосредственное научное руководство по указанным грантам.

Разработанные под его руководством и при непосредственном участии новые процессы разделения смесей нашли применение в промышленной практике.

Профессор Дмитриев Е.А. в течение многих лет являлся почётным работником высшего профессионального образования РФ, Ветераном труда, был награждён медалью «В память 850-летия Москвы».

С 2004 по 2017 г Евгений Александрович был членом редколлегии журнала РАН РФ «Теоретические основы химической технологии», членом Секции интенсификации процессов Европейской ассоциации инженеров-химиков. Долгое время работал в Высшей аттестационной комиссии Минобрнауки РФ, был деканом Высшего инженерного колледжа по энерго- и ресурсосбережению в РХТУ им. Д.И.Менделеева.

Под его руководством и непосредственном участии были разработаны все учебные программы подготовки бакалавров и магистров кафедры ПАХТ, а также Государственный стандарт, учебные программы и планы новой инженерной специальности «Рациональное использование материальных и энергетических ресурсов», по которой в настоящее время готовят специалистов четыре Высших учебных заведения России. До 2013 г. по данной специальности кафедра процессов и аппаратов, являлась выпускающей.

Под руководством Евгения Александровича с 2005 года на кафедре появился ряд специальных дисциплин, читаемых для направления "Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии".

Евгений Александрович был автором многих из реализуемых сегодня программ кафедры для бакалавриата: «Процессы и аппараты химической технологии», «Проектирование процессов и аппаратов химической технологии», «Лабораторный практикум по процессам и аппаратам химической технологии».

С 2015 года на кафедре осуществляется подготовка магистров различных направлений по новым образовательным программам, включая магистерскую программу «Теоретические основы процессов массообмена», автором которой является Дмитриев Е.А.

Им же в 2014 г. был создан курс и разработана программа «Теоретические основы массообменных процессов» подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре.

За годы своей активной трудовой деятельности он подготовил 10 кандидатов и 1 доктора наук.

При самом непосредственном участии Евгения Александровича в 20015-2017 гг кафедра провела реконструкцию и модернизацию установок лабораторного практикума. Во многом благодаря Евгению Александровичу проведение лабораторного практикума кафедры ПАХТ является сегодня одним из образцовых в стране, отвечая требованиям современных систем обучения и формирования инженерных кадров высокой квалификации.

Профессор Дмитриев Е.А. - автор 160 научных трудов, среди которых 1 монография, 12 учебных пособий, 3 патента, многочисленные статьи в российских и зарубежных научных журналах.

Дмитриев Е.А. в течение нескольких лет (конец 80-х – начало 90-х) был председателем профкома МХТИ. Им. Д.И. Менделеева. На этой работе он отдавал много сил и времени для помощи людям в те нелегкие времена.

Уравновешенность и доброжелательность наравне с требовательностью к себе и сотрудникам снискали ему заслуженный авторитет и уважение коллектива.

Евгений Александрович был глубоко порядочным и надежным человеком, готовым всегда помочь и поддержать в трудные моменты. Это знают многие работавшие с ним.

С уважением и вечной памятью коллектив кафедры ПАХТ.

Содержание

Химическая технология.

Теоретическая и экспериментальная химия

Пономарев А.Б., Писаренко Е.В., Шостаковский М.В., Караулов Р.А. ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ ПРОПАНА НА МОДИФИЦИРОВАННЫХ Pt-СОДЕРЖАЩИХ ЦЕОЛИТАХ ТИПА MFI	7
Шанева А.С., Попова Н.А., Кольцова Э.М. ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ СХЕМА ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ КЕРАМИЧЕСКОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА SiC-УНТ	9
Маркин И.С., Дударов С.П. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ ИНТЕРПОЛИРОВАНИЯ ПОЛЕЙ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ В РЕЖИМЕ РЕАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ РАДИАЛЬНО-БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ	12
Аверина Ю.М., Белкин В.В., Ветрова М.А. СПЕЦИЗОЛ - АНТИКОРРОЗИОННЫЙ МАТЕРИАЛ, РАЗРАБОТАННЫЙ НА ООО «СПЕЦПОЛИМЕР»	15
Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Вахмистров В.Е., Домбровский А.А. КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РЕАКЦИИ НЕОКИСЛИТЕЛЬНОГО ДЕГИДРИРОВАНИЯ ПРОПАНА НА ЦЕОЛИТАХ ТИПА ZSM-5	18
Пугачёва Д.А., Глебов М.Б. ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АПРОТОННЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ	20
Митричев И.И., Варданян А.Э., Женса А.В., Кольцова Э.М. ИТЕРАЦИОННЫЕ ПРОЦЕДУРЫ РАСЧЕТА УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА ДЛЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ	23
Миннибаева А.Р., Аверина Ю.М., Ветрова М.А., Калякина Г.Е. ОФИЦИАЛЬНЫЙ СПОСОБ СБОРА ПЕРВИЧНЫХ ДАННЫХ О ПРЕДПРИЯТИИ	26
Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Левчук Н.А. РАЗРАБОТКА КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РЕАКЦИИ ГИДРОИЗОМЕРИЗАЦИИ Н-ПЕНТАНА В 2-МЕТИЛБУТАН НА Pd –СОДЕРЖАЩИХ ЦЕОЛИТАХ ТИПА MOR	29
Ремизов М.Ю., Егоров А.Ф. ВЫБОР SCADA-СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА АНАЛИЗА ИЕРАРХИЙ	31
Захаренкова Н.Ю., Семенов Г.Н. РАЗРАБОТКА БАЗЫ ДАННЫХ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ БИБЛИОТЕКИ ПРЕДПРИЯТИЯ НА ОСНОВЕ СВОБОДНОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ	34

Климашева Е.И., Кладовщикова О.И., Тихонов Н.Н., Мусина А.Р.	
КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ТРУБ НА ОСНОВЕ СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА	37
Дмитриев Е.А., Тарасова Т. А., Кузнецова И. К., Кабанов О.В.	
ИЗУЧЕНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ КОЛОННЫХ АППАРАТОВ С ПОМОЩЬЮ МОДЕРНИЗИРОВАННОГО МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНОГО ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА С АВТОМАТИЗИРОВАННЫМ СБОРОМ ИНФОРМАЦИИ	40
Аверина Ю.М., Курбатов А.Ю., Джессу Лубо Ивон Седрик, Ветрова М.А.	
ГИДРОДИНАМИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ПРИРОДНОЙ ВОДЫ	43
Смыслова В.Г., Макаров В.В.	
ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ ОПТИЧЕСКИ ОТБЕЛИВАЮЩИХ ВЕЩЕСТВ	46
Чернухин А.В., Сверчков А.М.	
КОМПЛЕКС ПРОГРАММНЫХ СРЕДСТВ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ ПО ЭВАКУАЦИИ ПЕРСОНАЛА ПРЕДПРИЯТИЯ	48
Сорокина А.А. , Егоров А.Ф.	
РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ТЕХНИКО–ЭКОНОМИЧЕСКОГО ПЛАНИРОВАНИЯ МНОГОАССОРТИМЕНТНОГО ПРОИЗВОДСТВА НЕТКАНЫХ ТЕКСТИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ИЗ ПОЛИПРОПИЛЕНОВОГО ВОЛОКНА	51
Аверина Ю.М., Курбатов А.Ю., Ветрова М.А., Калякина Г.Е.	
БЕЗОПАСНЫЙ И ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД ОБРАБОТКИ ПРИРОДНОЙ ВОДЫ	54
Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Черемисин В.А.	
ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ РЕАКЦИИ ГИДРОИЗОМЕРИЗАЦИИ Н-ГЕКСАНА НА ЦЕОЛИТАХ	57
Семенов Г.Н., Кольцова Э.М.	
ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К ПРОЕКТИРОВАНИЮ БАЗЫ ДАННЫХ ПО КЕРАМИЧЕСКИМ КОМПОЗИТАМ	59
Москвичев С.С., Хабибова Н.З.	
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЁТА ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ПЛОТНОСТИ ВСЕЛЕННОЙ	62
Жуков Д.Ю., Аверина Ю.М., Ветрова М.А.	
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ РЕЦИКЛИНГ ОТХОДОВ ПЕРЕРАБОТКИ ОБЕДНЕННЫХ МАРГАНЦЕВЫХ РУД	64
Дягилева Ю.Ю., Егоров А.Ф.	
РЕШЕНИЕ ТРАНСПОРТНОЙ ЗАДАЧИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАКЕТОВ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ ДЛЯ ПРЕДПРИЯТИЙ ПО ПРОИЗВОДСТВУ АЗОТНЫХ УДОБРЕНИЙ В РОССИИ	68

УДК 66.094.187

Пономарев А.Б., Писаренко Е.В., Шостаковский М.В., Караулов Р.А.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ ПРОПАНА НА МОДИФИЦИРОВАННЫХ Pt-СОДЕРЖАЩИХ ЦЕОЛИТАХ ТИПА MFI**Пономарев Андрей Борисович** к.х.н., старший научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, Россия, Москва.**Писаренко Елена Витальевна**, д.т.н., профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва, e-mail: evpisarenko@mail.ru**Шостаковский Михаил Вячеславович**, научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, Россия, Москва.**Караулов Роман Андреевич** студент 4 курса бакалавриата РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва.

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

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

ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН

Изучены различные каталитические системы в реакции селективного дегидрирования пропана в пропилен. Установлено, что модифицированные Pt-содержащие катализаторы типа MFI являются высокоэффективными катализаторами реакции дегидрирования пропана. Для модифицирования цеолитов использовался метод многостадийного кластерного синтеза. Исследовано влияние доминирующих факторов на способ получения высокоэффективного катализатора. Показано, что разработанный катализатор по активности и селективности превосходит показатели традиционных промышленных катализаторов дегидрирования пропана.

Ключевые слова: математическое моделирование, кинетика, цеолиты, изомеризация, циклогексан, катализ**INVESTIGATION OF PROPANE DEHYDROGENATION PROCESS OVER MODIFIED Pt-CONTAINING MFI ZEOLITES**Ponomaryev A. B.², Pisarenko E.V.¹, Shostakovsky M. V.², Karaulov R.A.¹¹D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia²Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia

Various catalytic systems have been studied in the reaction of selective dehydrogenation of propane to propylene. It has been found that modified Pt-containing catalysts of the MFI type are highly effective catalysts for the propane dehydrogenation reaction. To modify zeolites, a multistage cluster synthesis method was used. The influence of dominating factors on the method of obtaining a highly efficient catalyst was studied. It is shown that the developed catalyst by activity and selectivity exceeds the values of traditional industrial catalysts for propane dehydrogenation.

Keywords: mathematical modeling, kinetics, zeolites, isomerization, cyclohexane, catalysis

В РФ одной из ключевых проблем в развитии нефтехимической промышленности является проблема конверсии сжиженного природного газа в ценные углеводороды и конверсия пропана в пропилен и ароматические углеводороды, ибо транспортировка сжиженного природного газа дорога и порой связана с потерями. Конверсия пропана, являющегося отходом производств риформинга и крекинга жидких углеводородов, позволяет повысить рентабельность многих производств.

Среди известных промышленных катализаторов конверсии пропана являются цеолитсодержащие катализаторы. Зарубежными фирмами синтезируются с начала 70-х годов прошлого века высококремнистые цеолиты типа ZSM-5, ZSM-11 и т.п. В РФ получены их аналоги ЦВК, ЦВМ, ЦВН, ультрасил. Каждый из них имеет свои преимущества и недостатки.

В каталитических реакциях цеолиты используются с промоторами. Их условно можно разделить на две категории. К первой относятся

благородные металлы (Pt, Rh, Pd), ко второй – элементы впервой, второй и третьей групп Периодической таблицы Д.И. Менделеева (Cu, Zn, Cd, Ga,...). Наибольшей промотирующей активностью обладают Ga³⁺, Zn²⁺. Они чаще всего используются зарубежными фирмами при синтезе промышленных катализаторов.

Процесс получения пропилена на основе пропана является крупнотоннажным промышленным процессом. Основные проблемы при проведении данной реакции на различных катализаторах заключаются в быстром закоксовывании катализаторов, их крайне низкой активности и селективности, а также необходимости проведения частых регенераций катализатора [1-3]. Поэтому разработка новых высокоэффективных катализаторов производства пропилена из пропана представляет большую практическую значимость и являлось целью настоящей работы.

Первая серия кинетических исследований проводилась на катализаторе типа ЦВМ при температуре газового сырья (пропана) 450 °С,

объемной скорости потока 550 ч^{-1} , давлении в реакторе 1 атм. При температуре $450 \text{ }^\circ\text{C}$ и конверсии пропана 50 %, выход жидких углеводородов - 18 % (объем используемого катализатора 200 см^3). Пробег катализатора составил 40 часов. При снижении температуры в реакционной зоне до $400 \text{ }^\circ\text{C}$ длительность работы катализатора составила 70 часов. Катализатор типа ЦВМ также был испытан в реакции конверсии сжиженного газа при давлении 3 атм, температуре $550 \text{ }^\circ\text{C}$, объемной скорости 370 ч^{-1} и составе сырья (C_2H_6 - 2 % масс., C_3H_8 - 77.9 % масс., $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ - 7.8 % масс., $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ - 12.3 % масс.). При этом состав конвертированного газа был следующим: H_2 - 3 % масс., CH_4 - 7.8 % масс., C_2H_6 - 7.9 % масс., C_2H_4 - 1.6 % масс., C_3H_8 - 43 % масс., C_3H_6 - 2 % масс., $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ - 2.0 % масс., $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ - 3.9 % масс., бензол - 5.2 % масс., толуол 11.6 % масс., ксилол - 6.6 % масс.). Конверсия $\text{C}_3\text{-C}_4$ составила 49.5 %, селективность - 60 %.

Вторая серия кинетических исследований проводилась на катализаторе типа MFI. Основная задача заключалась в достижении высокой селективности работы катализатора по целевому продукту пропилену. Для приготовления образцов катализатора использовался метод многостадийного кластерного синтеза. Суть метода состоит в последовательном осуществлении операции ионного обмена для равномерного введения металла-модификатора и фиксации этого металла на поверхности цеолита подходящим водорастворимым реагентом. При последующем повторении этих операций происходит ступенчатое увеличение количества того же металла-модификатора или введение дополнительного металла. Важно, что в результате такой последовательности обработок у катионнообменных позиций цеолита образуются оксидные или металлические кластеры одного и того же состава, а металлы-модификаторы равномерно (в соответствии с катионными центрами) распределены по поверхности носителя [4].

Детально исследованы условия приготовления катализатора и выявлено влияние доминирующих факторов на способ получения высокоактивного катализатора. При синтезе новых каталитических систем варьировали структурным типом цеолита, силикатным модулем цеолита (отношением Si/Al), активным металлом и его количеством, металлами-модификаторами и их количеством, условиями проведения ионного обмена, последовательностью введения металлов, количеством стадий МКС, реагентом для подавления кислотности и условиями его обработки, типом связующего, температурой прокаливания, скоростью нагрева, температурой обработки водородом и скоростью нагрева.

Установлено, что высокую селективность показывают катализаторы на основе цеолитов типа MFI, с модулем цеолита 80-130. Введение модификаторов Zn и Cu благоприятствует катализу и способствует повышению селективности катализатора. Введение меди до введения цинка и платины повышает селективность работы катализатора. При введении Zn и Cu в платиносодержащих катализаторах предпочтительными концентрациями этих металлов являются 0,5-1,0 % масс., причем установлено, что медь необходимо вводить первой методом многостадийного кластерного синтеза.

Для подавления кислотных центров цеолитов в образцы вводили Na или K в количестве 1,5-2-кратного избытка по отношению к Al. При этом введение Na или K предпочтительно разбить на два этапа: на первом этапе его необходимо ввести либо ионным обменом, образуя натриевую форму цеолита, или в виде противокатиона при фиксации дополнительного металла; на втором этапе натрия предпочтительно вводить в небольшом количестве вместе с платиной.

При проведении реакции дегидрирования пропана в пропилен ($550 \text{ }^\circ\text{C}$, $3,5 \text{ ч}^{-1}$, $0,1 \text{ МПа}$) на образце CuZnPt/MFI-80, (1 % масс. Cu, 0,5 % масс. Zn и 0,5 % масс. Pt), достигнута конверсия пропана 29% при селективности по пропилену 96%. Показано, что разработанный катализатор по активности и селективности, превосходит показатели традиционных промышленных катализаторов дегидрирования пропана.

Список литературы

1. Tan S. Catalytic propane dehydrogenation over $\text{In}_2\text{O}_3\text{-Ga}_2\text{O}_3$ mixed catalysts / S. Tan, L.B. Gil, N. Subramanian, D.S. Sholl, S. Nair, C.W. Jones, J.S. Moore, Y. Liu, R.S. Dixit, J.G. Pendergast // *Applied catalysis A: General*. – 2015. – V.498 – P. 167-175.
2. Chen, M. Dehydrogenation of propane over $\text{In}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ mixed oxide in the presence of carbon dioxide / M. Chen, J. Xu, Y. Cao, H.Y. He, K.N. Fan J.H. Zhuang // *Journal of Catalysis*. 2010. V. 272. №1. P. 101-108.
3. Nawaz Z. Influence of operating conditions, Si/Al ratio and doping of zinc on Pt-Sn-ZSM-5 catalyst for propane dehydrogenation to propene / Z. Nawaz, T. Xiaoping, F. Wei // *Korean J. Chem. Eng.* 2009. V.26. I.6. P 1528-1532.
4. Пономарев А. Б. Многостадийный синтез сульфидных кластеров металлов как пример нового способа модифицирования цеолитов / А. Б. Пономарев, В. Е. Вахмистров, М. В. Шостаковский В. Н. Калинин, Е. С. Мортиков. // *Неорганические материалы*. — 2010. — Т. 46. — С. 978–985.

УДК 004.946

Шанева А.С., Попова Н.А., Кольцова Э.М.

ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ СХЕМА ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ КЕРАМИЧЕСКОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА SiC-УНТ

Шанева Анна Сергеевна, аспирантка 1 года обучения кафедры информационных компьютерных технологий;
Кольцова Элеонора Моисеевна, д.т.н., профессор, заведующая кафедрой информационных компьютерных технологий, e-mail: kolts@muctr.ru;

Попова Нелля Александровна, старший преподаватель кафедры химической технологии керамики и огнеупоров. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия 125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20

По результатам экспериментальных исследований процесса получения керамического композиционного материала на основе SiC, армированного углеродными нанотрубками (УНТ) с содержанием УНТ 1-3 % масс. были определены основные стадии процесса. Предложена технологическая схема промышленного производства керамоматричного композита SiC-УНТ с содержанием УНТ 1-3% мас., выполненная в программном пакете Honeywell UniSim Design (v.3.9).

Ключевые слова: карбид кремния, композит, углеродные нанотрубки, искровое плазменное спекание, технологическая схема.

TECHNOLOGICAL SCHEME OF THE PROCESS OF OBTAINING CERAMIC COMPOSITE MATERIAL SiC-CNT

Shaneva A.S., Koltsova E.M., Popova N.A.

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

According to the results of experimental research of the process of obtaining a ceramic composite material based on SiC reinforced with carbon nanotubes (CNTs) with a content of CNTs of 1-3 % weight there were separate main stages of the process. A technological scheme for the industrial production of a SiC-CNT ceramic composite with a content of 1 to 3 % weight CNT is presented in the Honeywell UniSim Design software package (v.3.9).

Key words: silicon carbide, composite, carbon nanotubes, spark plasma sintering, technology system.

Введение

Композиционные материалы превосходят традиционные известные материалы по свойствам, обладая более низкой плотностью. Для расширения диапазона регулирования свойств композиционных материалов применяют несколько матриц или несколько видов наполнителей. Композиты с керамической матрицей применяются в качестве жаропрочных и износостойких материалов, что обусловлено ее высокой твердостью, модулем упругости, низкой плотностью и высокой температурой плавления.

Керамика на основе карбида кремния применяется для создания атомных реакторов, реактивных сопел высокого давления и создания коррозионно- и эрозийноустойчивых высокотемпературных материалов. Существуют области применения керамики, для которых увеличение трещиностойкости и твердости особенно актуально, так как они связаны с большими ударными нагрузками. К таким областям относится изготовление керамических режущих инструментов, покрытия для высокотемпературных двигателей и бронекерамических пластин. Обладая высокой термической, химической, радиационной стойкостью и механической прочностью, устойчивостью к окислению среди многих сплавов и химических соединений, хорошо противостоит эрозии, коррозии, износу - карбид кремния стоит считать наиболее перспективным материалом для

изготовления керамической матрицы на его основе. Хрупкость карбида кремния является следствием кристаллической структуры и типа химической связи и сочетается в нем с высокой твердостью.

Основная задача, решаемая посредством формирования композитных структур на ее основе является придание конечному материалу повышенной трещиностойкости [1]. Для увеличения и стабилизации механических показателей композитов на основе карбида кремния, как прочность, трещиностойкость и модуль упругости применяют методы армирования керамических композитов с помощью нанотрубок. Существенная особенность углеродных нанотрубок (УНТ) – это их отношение длины к диаметру, оно влияет на передачу нагрузки от матрицы и на эффективность укрепления. Они относятся к наиболее жестким и прочным волокнам, с модулями Юнга, достигающими 1 ТПа, и прочностью на разрыв до 63 ГПа [2]. Устойчивость углеродного волокна к разломам намного выше, чем у чистой керамической матрицы [3]. Таким образом, сочетание карбидной матрицы с углеродными нанотрубками способно увеличить прочностные показатели композита SiC-УНТ.

Так как синтез керамики на основе карбида кремния проводится при температурах >2000°C, существует потребность в создании нового композиционного материала который сохранит свойства керамики и снизит температуру спекания.

Для этого в матрицу на основе карбида кремния добавляют алюмомагнезиальную шпинель, получая композиционный материал составом $MgAl_2O_4$ – 45% масс. SiC – 55% масс. Совместное использование порошков оксидных и бескислородных соединений позволяет повысить окислительную устойчивость композиционного материала за счет блокировки частиц бескислородных соединений от окисления.

Спекание ковалентного карбида кремния, являющегося одним из наиболее перспективных бескислородных тугоплавких соединений для получения конструкционных материалов высокотемпературного применения, проводят при высоких температурах (2000 – 2400 К) с небольшим количеством добавок и/или с применением высоких давлений. При горячем прессовании порошков карбида кремния без добавок получают изделия с высокой пористостью. Использование технологии искрового плазменного спекания позволяет снизить максимальную температуру и сократить общее время компактирования порошковых прессовок и снизить конечную пористость материала. При низком атмосферном давлении под действием импульсного электрического тока в материале возникают области искровой плазмы, имеющие высокую температуру (до 10000 °С) [4]. Такие высокие локальные температуры позволяют достигать высоких скоростей удаления межкристаллической пористости.

Экспериментальные исследования

Задача эксперимента состояла в синтезе композиционного материала на основе SiC и углеродных нанотрубок (1-3 % мас.). При получении композитного материала использовался промышленный порошок карбида кремния (марка F1200) со средним размером зерен 2,5 мкм. Для получения алюмомагнезиальной шпинели ($MgAl_2O_4$), которая используется в качестве

активирующей добавки в керамическую матрицу карбида кремния были использованы порошки $MgCO_3$ и $\alpha-Al(OH)_3$. Исходные характеристики компонентов: плотность углеродных нанотрубок – 1,4 г/см³; плотность карбида кремния – 3,4 г/см³; плотность алюмомагнезиальной шпинели ($MgAl_2O_4$) – 3,5 г/см³. Диспергирование ультразвуком УНТ (использовались многослойные углеродные нанотрубки, полученные газофазным пиролизом метан-водородной смеси) проводилось в водном растворе поливинилового спирта (1%). Равномерное распределение УНТ в объеме матрицы карбида кремния и шпинели и получение однородной смеси обеспечивалось перемешиванием диспергированной суспензии УНТ и порошка карбида кремния и шпинели в планетарной мельнице в течение 40 мин со скоростью 600 об/с. Полученную смесь сушили при температуре 70 °С. Гранулирование порошка достигалось путем перетирания через сито с размером ячеек 100 и 200 мкм. Спекания композита составом SiC- $MgAl_2O_4$ -УНТ (1-3% масс. УНТ) производилось методом искрового плазменного спекания с приложением давления 15 кН нагрев до 1550 °С за 3 мин, затем нагрев до 1700 °С за 3 мин и выдержка 5 и 10 мин. Параметры температурных режимов полученных образцов для метода искрового плазменного спекания представлены в таблице 1.

В таблице 2 представлены результаты расчетов водопоглощения, пористости, плотности, прочности и микротвердости образцов на основании результатов экспериментальных исследований образцов композита SiC-УНТ.

В результате получен композит с равнокристаллитной структурой и равномерным распределением нанотрубок в матрице, демонстрирующий прочность на изгиб до 358 МПа и пористость < 20 % при температуре спекания 1700 °С.

Таблица 1. Температурные режимы искрового плазменного спекания образцов композита SiC -УНТ

Номер режима	Содержание УНТ, % масс.	Температура нагрева, °С	Температура выдержки, °С	Время нагрева до 1550°С, мин	Время нагрева до 1700°С, мин	Время выдержки, мин
1	1	1550	1700	3	3	5
2	1	1550	1700	3	3	10
3	2	1550	1700	3	3	5
4	2	1550	1700	3	3	10
5	3	1550	1700	3	3	5
6	3	1550	1700	3	3	10

Таблица 2. Результаты расчетов свойств образцов композита SiC-УНТ

Номер режима	Водопоглощение, %	Пористость, %	Плотность, г/см ³	Прочность при изгибе, МПа	Средняя микротвердость, ГПа
1	3,8	15,3	3,18	223	16,8
2	3,0	12,4	3,09	347	20,9
3	4,9	19,5	2,66	232	11,6
4	5,4	17,2	2,69	358	25,3
5	3,4	19,5	3,12	218	13,1
6	5,1	16,4	2,86	356	24,4

По результатам проведенных исследований свойств образцов керамического композита SiC-УНТ можно отметить, что пористость зависит от количества УНТ и времени выдержки.

Математического моделирования описания процесса искрового плазменного спекания проводилось для режимов, представленных в таблице 1. Данная модель позволяет производить численные эксперименты по спеканию с целью выявления температурного режима.

Технологическая схема

Для построения технологических схем промышленного производства керамоматричного композита SiC-УНТ был использован программный пакет Honeywell UniSim Design (v.3.9) [5], который предусматривает возможность проектирования промышленных технологических схем, подбора аппаратов, проведения расчетов материальных балансов для каждого из используемых аппаратов и всей схемы в целом.

Выбранные аппараты были размещены в рабочей среде программного пакета и соединены между собой в порядке производственных стадий (рисунок 1).

Затем были созданы потоки компонентов технологической схемы: $\text{Al}(\text{OH})_3$, MgCO_3 , SiC (поток карбида кремния), УНТ (поток углеродных нанотрубок), PVA (поток поливинилового спирта), H_2O (поток воды). Для учета свойств компонентов был подключен встроенный пакет свойств веществ, используемых в качестве компонентов. При закреплении потока к аппарату для аппарата задавались входные параметры: входные потоки компонентов, соотношения компонентов, температура и давление в аппарате. Потоки PVA, УНТ и H_2O входят в диспергатор, на выходе из диспергатора получаем смесь входных потоков (поток 1). Потоки $\text{Al}(\text{OH})_3$ и MgCO_3 , смешивают, образуя поток MgAl_2O_4 . Затем поток 1, поток MgAl_2O_4 и поток SiC подают на вход в гомогенизатор, где смешивают жидкий и основной компоненты. После гомогенизации полученную суспензию (поток 2) измельчают в мельнице и поток 3 рециркулируют. На выходе мы получаем композитный порошок (поток 3), который подается в сушилку, где вода испаряется и выходит с потоком. Пары и остаточная смесь (поток порошка) подаются в печь для спекания.

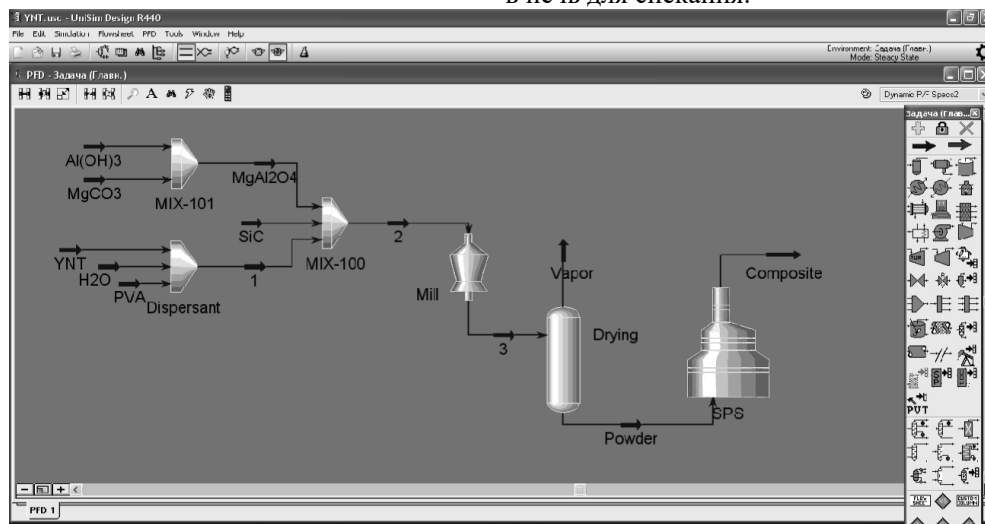


Рис. 1. Технологическая схема производства керамоматричного композита SiC-УНТ, спроектированная в программном пакете Unisim Design

Полученные технологические схемы могут применяться на реальном промышленном производстве.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Соглашения о предоставлении субсидии № 14.574.21.0158, уникальный идентификатор работ (проекта) RFMEFI57417X0158.

Список литературы

1. Федосова Н.А., Файков П.П., Попова Н.А., Кольцова Э.М., Жариков Е.В., Керамический композиционный материал с углеродными нанотрубками, полученный по технологии искрового плазменного спекания // Стекло и керамика. 2015. № 1. С. 14-17.
2. Федосова Н.А., Кольцова Э.М., Попова Н.А., Жариков Е.В. Керамоматричные композиты, модифицированные углеродными нанотрубками:

искровое плазменное спекание, моделирование, оптимизация // Новые огнеупоры, 2015, № 12, С. 13-17.

3. Федосова Н.А., Файков П.П., Попова Н.А., Зыонг Ч.Т.Т., Зараменских К.С., Совык Д.Н., Кольцова Э.М., Жариков Е.В. Влияние природы углеродных нанотрубок на структуру и прочность керамического композита // Стекло и керамика. 2014. № 4. С. 22-26.

4. Fedosova N.A., Koltsova E.M., Zharikov E.V., Mitrichev I.I., Shaneva A.S. Spark plasma sintering simulation of alumina composite modified with carbon nanotubes // Chemical Engineering Transactions. 2016. V. 52. P. 979-984.

5. Кольцова Э.М., Шанева А.С., Проектирование технологической схемы вакуумного спекания керамоматричного композита модифицированного углеродными нанотрубками // Молодежь в науке: Новые аргументы / Сборник научных работ V-го Международного конкурса Часть I. – Липецк. - 2016. – С. 78-81.

УДК 681.3.06:004.8

Маркин И.С., Дударов С.П.

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ ИНТЕРПОЛИРОВАНИЯ ПОЛЕЙ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ В РЕЖИМЕ РЕАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ РАДИАЛЬНО-БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ

Маркин Иван Сергеевич, студент 2 курса магистратуры факультета информационных технологий и управления;
Дударов Сергей Павлович, к.т.н., доцент, декан факультета информационных технологий и управления, e-mail: dudarov@muctr.ru;

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

Разработано программно-алгоритмическое обеспечение для интерполирования данных о загрязнении атмосферы, получаемых в режиме реального времени со стационарных и мобильных станций контроля. Интерполирующая модель строится на основе искусственной нейронной сети радиально-базисных функций (РБФ). Представлена структура использованной нейронной сети. Описан порядок настройки и обучения сети с целью получения результатов, содержащих наименьшую ошибку расчёта. Результаты интерполирования представляются конечному пользователю в виде полей распределения индекса качества воздуха на карте местности. Сформулированы ограничения и преимущества описанного программного обеспечения и направления дальнейших исследований и разработок.

Ключевые слова: программное обеспечение, искусственная нейронная сеть, радиально-базисная функция, РБФ-сеть, обучение нейронной сети, интерполирование, индекс качества воздуха, загрязнение атмосферы, станция контроля.

SOFTWARE FOR ATMOSPHERE POLLUTION FIELD INTERPOLATION IN REAL-TIME MODE USING NEURAL NETWORKS OF RADIAL-BASIS FUNCTIONS

Markin I. S., Dudarov S. P.

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

Software for interpolation of data about atmosphere pollution, which received in real-time mode from stationary and mobile monitoring station, has been developed. Interpolation model is built basing on artificial neural network of radial-basis functions (RBF). Structure of used neural network has been presented. Plan of neural network's setting and training with aim of receiving of results containing minimal evaluation error has been described. Interpolation results are presented to user as fields of air quality index distribution on the location map. Limitations and advantages of described software and directions of further investigations and developments are formulated.

Keywords: software, artificial neural network, radial-basis function, RBF neural network, neural network training, interpolation, air quality index, atmosphere pollution, monitoring station.

Задача оценки экологической обстановки стоит достаточно остро для крупных городов с высоким уровнем интенсивности потоков автомобильного транспорта и городов – промышленных центров. Загрязнение окружающей среды источниками техногенного происхождения происходит повсеместно и постоянно. Для контроля экологической обстановки создаются стационарные и мобильные станции, которые собирают данные в режиме реального времени. Тем не менее, информация, получаемая ими, лишь локально, не на всей территории характеризует качество воздуха. Для оценки и анализа уровней загрязнения на большой площади необходимо решать задачу интерполирования показателей загрязнения по данным, собираемым на всех доступных станциях контроля.

Решение поставленной задачи требует разработки специального математического, программно-алгоритмического и информационного обеспечения. Как один из наиболее эффективных математических аппаратов, используемых для оценки уровня загрязнения атмосферы,

зарекомендовали себя искусственные нейронные сети [1] и модели, построенные на их основе [2]. Данная работа посвящена разработке перечисленных выше видов обеспечения. В качестве математического обеспечения выбраны искусственные нейронные сети многомерных радиально-базисных функций (РБФ-сети), которые при правильной настройке позволяют интерполировать зависимости с очень низким уровнем ошибки [3].

В структуру РБФ-сетей входят два слоя нейронов. Первый (скрытый) слой – это слой одномерных или многомерных радиально-базисных функций – функций, монотонно и симметрично убывающих относительно некоторой вертикальной оси. В настоящей работе в качестве активационных функций скрытого слоя используются двумерные гауссианы: $h(\mathbf{x}) = \exp(-\alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|^2)$.

Выходы нейронной сети рассчитываются как линейные комбинации значений радиальных элементов, скорректированные весовыми коэффициентами нейронов второго слоя \mathbf{w} .

Количественный и качественный составы входов и выходов сети определяются особенностями решаемой задачи [4]. Для интерполирования показателей загрязнения атмосферы в данной работе используются два входа – координаты точки, в которой рассчитывается загрязнение (широта и долгота – x_1, x_2), и одно выходное значение – индекс качества воздуха (y), линейно связанный с концентрацией загрязняющего вещества. Выбор данного показателя в качестве целевой переменной решаемой задачи обусловлен тем, что доступные международные онлайн-сервисы представляют данные о загрязнении именно в такой форме. Количество нейронов скрытого слоя (n) может варьироваться с целью улучшения качества получаемых результатов (минимизации ошибки расчёта), но не может быть больше объёма обучающей выборки. Структура используемой нейронной сети приведена на рис. 1.

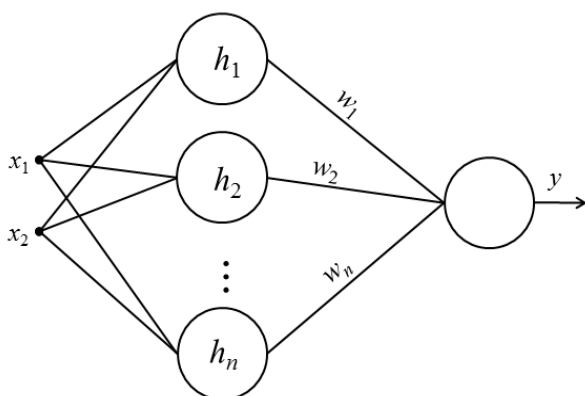


Рис. 1. Структура РБФ-сети для интерполирования загрязнения

Обучение РБФ-сети заключается в подборе параметров радиальных элементов (параметров насыщения α и векторов-центров \vec{b}) с последующим расчётом весовых коэффициентов \vec{w} по соотношению: $\vec{w} = (\overline{H}^T \cdot \overline{H})^{-1} \cdot \overline{H}^T \cdot \vec{y}$, где \overline{H} – матрица выходов радиальных элементов, полученных для всех обучающих примеров. Параметры насыщения подбираются с учётом среднего расстояния до нескольких ближайших станций контроля. Центры радиальных элементов совпадают с центрами станций контроля.

РБФ-сеть для поставленной практической задачи реализована в среде разработки Qt 5.10 на языке программирования C++. Программа имеет графический, дружелюбный пользователю интерфейс со стандартными элементами управления и возможностью гибкой настройки формата представления результатов моделирования. Она предназначена для работы в операционных системах семейства Windows, требует около 60 Мб

оперативной памяти, около 80 Мб памяти на жёстком диске, доступ в сеть Интернет и наличие видеокарты со 128 Мб памяти и поддержкой DirectX 9.

Для работы с программой вводится список ссылок на датчики состояния загрязнения атмосферы территории одним из возможных способов: ручным вводом в таблицу или загрузкой из файла. Также необходимо выбрать загрязняющее вещество, по которому будет производиться расчёт: твёрдые взвеси PM_{10} и $PM_{2.5}$, а также газы O_3 , NO_2 , SO_2 , CO . Оперативные данные о текущем состоянии атмосферы загружаются через сеть Интернет.

Для оценки правильности обучения нейронной сети данные с части датчиков могут быть не использованы в процессе обучения, а задействованы для расчёта ошибки в процессе тестирования уже обученной нейросетевой модели. По величине тестовой ошибки (с целью её минимизации) подбирается оптимальное значение параметра насыщения α .

Визуализация датчиков, с которых получены данные, и результатов интерполирования индекса качества воздуха производится на карте местности, также загружаемой из сети Интернет с сервиса Google Static Maps по данным координат местности, соответствующих задействованным станциям контроля. Для любой точки местности по обученной РБФ-сети может быть рассчитано значение индекса качества воздуха. Оно визуализируется в соответствующей цветовой гамме: от зелёной (для отличного качества атмосферы) до тёмно-красной (для опасного, угрожающего здоровью уровня загрязнения) (рис. 2).

Результаты моделирования, отображаемые на карте местности, могут быть сохранены в различных растровых графических форматах для дальнейшего использования. С их помощью могут решаться задачи оперативного управления качеством воздушной среды территории, поддержки принятия решений в условиях неблагоприятной экологической обстановки и другие.

Корректность получаемых результатов кроме правильной настройки нейронной сети будет также зависеть от степени покрытия исследуемой территории датчиками состояния воздушной среды. При низкой плотности станций контроля правильно обучить искусственную нейронную сеть невозможно, а значит невозможно добиться правильной интерпретации её результатов расчёта. Также важно отметить, что результаты интерполирования актуальны только для областей внутри сети станций контроля и в непосредственной близости от её границ.

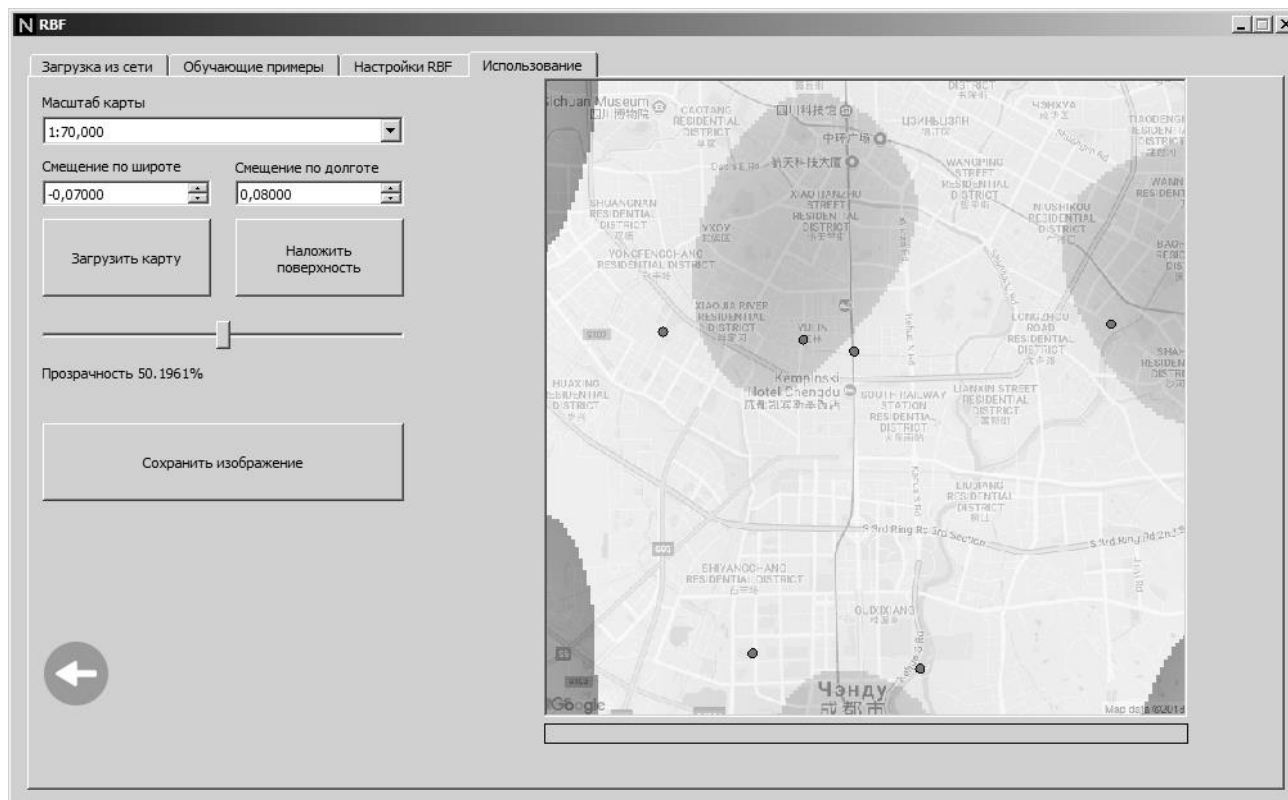


Рис. 2. Визуализация результатов интерполирования индекса качества воздуха

Обновление данных с датчиков требует нового обучения нейронной сети, однако особенности РБФ-сетей таковы, что процесс этот очень быстрый, и новые результаты могут быть фактически получены в режиме реального времени. С другой стороны, благодаря этим особенностям выбранной нейросетевой архитектуры для обучения могут загружаться данные не только стационарных, но и передвижных станций контроля.

К ограничениям текущей версии разработанной программы следует отнести необходимость ручного подбора параметров обучения оператором, невозможность определения параметра насыщения индивидуально для каждого радиального элемента, соответствующего конкретной станции контроля, невозможность изменения масштаба и перемещения по карте с нанесёнными на неё результатами интерполирования индекса качества воздуха.

Преимуществами программного обеспечения являются высокая скорость работы, наличие актуальной информации о загрязнении воздуха, гибкость настройки модели с целью минимизации ошибки расчёта, возможность представления результатов обучения в предварительно выбранном масштабе карты (от размеров нескольких кварталов до большого района или области), изменение прозрачности слоя загрязнения, возможность офлайн-работы с ранее полученными со станций контроля данными.

Дальнейшие исследования в рамках данного направления планируется связать:

- с расширением функциональных возможностей программного обеспечения и ликвидацией перечисленных выше ограничений;

- с разработкой базы данных для хранения загружаемой из сети Интернет информации о загрязнении и интерполирующих нейросетевых моделей;

- с исследованием влияния настроек РБФ-сети на качество получаемых результатов.

Список литературы

1. Егоров А. Ф., Савицкая Т. В., Дударов С. П. Использование искусственных нейронных сетей для прогнозирования загрязнения атмосферного воздуха промышленными источниками выбросов опасных химических веществ/ Химическая технология, 2004, № 1. – с. 35–42.
2. Дударов С. П., Папаев П. Л., Колосов А. В. Оценка последствий химических аварий на опасных производственных объектах с использованием ячеечно-нейросетевых моделей. – Безопасность труда в промышленности, 2012, № 3. – с. 64–70.
3. Маркин И. С. Программно-алгоритмическое обеспечение для аппроксимации нелинейных зависимостей нейронной сетью на основе радиально-базисных функций/ И. С. Маркин, М. Д. Пысин, Д. О. Краснов, С. П. Дударов. – Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXXI, № 8. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2017. – с. 57–59.
4. 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.

УДК 66.01.09

Аверина Ю.М., Белкин В.В., Ветрова М.А.

СПЕЦИЗОЛ - АНТИКОРРОЗИОННЫЙ МАТЕРИАЛ, РАЗРАБОТАННЫЙ НА ООО «СПЕЦПОЛИМЕР»

Белкин Валентин, обучающийся 2 курса магистратуры РХТУ им. Д.И. Менделеева,

Аверина Юлия Михайловна – к.т.н., доцент каф. ИМиЗК, председатель ОСМУСС РХТУ имени Д.И. Менделеева, e-mail: averinajm@mail.ru

Ветрова Маргарита Александровна – студентка каф. ИМиЗК РХТУ имени Д.И. Менделеева; Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия 125190, Москва, Миусская пл., 9

Статья посвящена современному технологичному антикоррозионному материалу СпецИзол, разработанному и выпускаемому на ООО «СпецПолимер». Представлены данные лабораторных испытаний данного материала, подтверждают его высокие характеристики.

Ключевые слова: полиуретановое покрытие, противокоррозионная защита, полиуретанмочевинные системы.

SPETSIZOL IS AN ANTICORROSIVE MATERIAL DEVELOPED AT ООО SPETS POLYMER

Belkin V., Averina Yu.M., Vetrova M.A.

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

The article is devoted to the modern technological anticorrosive material SpecIzol, developed and manufactured by SpetzPolymer LLC. The data of laboratory tests of this material are presented, confirming its high characteristics.

Key words: polyurethane coating, anticorrosive protection, polyurethane urea systems.

В последние годы в индустрии антикоррозионной защиты наблюдается некоторая смена приоритетов, которая происходит под влиянием потребителей, которые хотят не только повышенных антикоррозионных свойств используемых материалов, но и долгосрочную защиту и высокие декоративные свойства на всем сроке службы. И кроме того, антикоррозионные системы должны быть технологичными при нанесении и не содержать растворителей и вредных примесей.

С повышением требований к антикоррозионным покрытиям, традиционные покрытия уже не могут соответствовать современным требованиям. Поэтому для удовлетворения новых требований были созданы покрытия нового поколения – полиуретановые и поликарбомидные, которые отвечают этим требованиям с большим запасом и будут актуальны еще многие годы. Их область применения достаточно обширна: нефтегазовая сфера, морская инфраструктура, строительство.

НПО «СпецПолимер» уделяет этому очень большое внимание и сотрудничает в этой сфере со многими предприятиями.

В ходе научно-исследовательских работ специалисты НПО «СпецПолимер» разработали новую линию продуктов «СпецИзол», которая предназначена для защиты наземных объектов от воздействий окружающей среды.

«СпецИзол» в корне отличается от алкидных, эпоксидных защитных покрытий, которые предлагаются на Российском рынке и обладает особыми преимуществами по сравнению с другими антикоррозионными материалами, такими как Биурс, ПолиБилд, Урезол.

Серия продуктов «СпецИзол» представляет собой двухкомпонентные композиции полиуретанмочевины, которые не содержат растворителей. Основные реакции, протекающие при образовании полимерного покрытия «СпецИзол» - это реакции с участием изоцианата. Каждый из компонентов полиуретанмочевинной системы может быть ароматическим, алифатическим и представлять собой смесь ароматических и алифатических соединений. Физико-механические свойства материалов серии «СпецИзол» представлены в таблице 1.

Таблица 1. Физико-механические свойства

№ п/п	Наименование показателя	Фактические данные
1	Внешний вид	Покрытие должно иметь гладкую поверхность, однородный цвет, без пузырей, раковин, трещин, отслоений, вздутий, пропусков и других дефектов, ухудшающих качество покрытия
2	Время отверждения до отлипа, сек.	15 – 45
3	Толщина покрытия, мм.	1 – 2
4	Прочность при разрыве, МПа, не менее, (при 20±5°C)	8,0 - 18,0
5	Прочность при ударе, Дж/мм толщины покрытия, не менее, при температурах: - минус 40±3°C - плюс 20±5°C - плюс 40±3°C	8 - 10 8 - 10 6 – 10
6	Относительное удлинение при разрыве, %, не менее, (при 20±5°C)	120 – 350
7	Гибкость при минус 30°C	отсутствие трещин
8	Адгезия по стали, МПа	4,0 – 7,0
9	Адгезия к бетону, МПа	1,2
10	Твердость по Шору А, единицы твердости, в пределах	80-98

Ускоренные методы испытаний в комплексе с климатическими факторами имеют большое значение для оценки применения покрытий в качестве противокоррозионной защиты [2].

Комплекс таких испытаний позволяет сделать вывод о применении материала в качестве антикоррозионной защиты. Целесообразность применения покрытий серии «СпецИзол» проходило по результатам лабораторных испытаний, проведенных в лаборатории ООО «ВНИИГАЗ» вместе с ООО «Газпромдобыча Оренбург».

Цель этих испытаний сводилась к тому, что бы выявить, как влияют: отрицательные температуры, перепады температур, УФ-излучения на защитные свойства, а так же внешний вид покрытий серии «СпецИзол».

Испытания проходили в два этапа.

1. Были проведены лабораторные испытания по оценке стойкости к воздействию:

- метод А – оценка стойкости покрытия к воздействию низких температур – адгезия не менее 4 МПа;
- метод Б – величина распространения коррозии от надреза – не более 2 мм; [6]
- метод В – декоративные свойства не более балла 3, что соответствует обобщенной оценке

декоративных свойств – АДЗ. Оценка декоративных свойств обозначается сокращенной записью АД и числовым значением оценочного балла, который берется из ГОСТа. В нашем случае АД№ означает, что площадь коррозионного поражения соответствует 10-25%. [3], [6]

2. Что бы оценить сохранность свойств полимочевинного покрытия в течение 1 года на открытой атмосферной площадке в условиях УХЛ1, были проведены ускоренные климатические испытания. УХЛ (категория климатического испытания, указание на макроклимат обозначается буквами, а категория цифрой) – это объединение умеренного и холодного макроклиматического районов. Цифра 1 означает эксплуатацию на открытом воздухе с воздействием любых атмосферных факторов, таких как дождь, снег, пыль при сильном ветре. [4]

Для испытаний изготовили металлические пластины размером 50x100 мм и нанесли на них «СпецИзол» различной серии (табл. 2).

После проведенных испытаний получили следующий результат (табл. 3).

Таблица 2

Исходное состояние ЛКП перед испытаниями			
Материал	Толщина, мм	Адгезия, МПа	Блеск, %
СпецИзол эконом	1,5±0,5	6	56
СпецИзол стандарт	0,9±0,3	9	59
СпецИзол премиум	0,6±0,3	8	55

Таблица 3

Метод испытаний	Материал		
	СпецИзол эконом	СпецИзол стандарт	СпецИзол премиум
Метод А	Трещины и отслаивание отсутствуют, адгезия-8 МПа	Трещины и отслаивание отсутствуют, адгезия-7 МПа	Трещины и отслаивание отсутствуют, адгезия-7 МПа
Метод Б	≤ 0,75 мм	≤ 1,75 мм	≤ 1,25 мм
Метод В	Блеск 54 %	Блеск- 58%	Блеск 56%

Проведенный анализ результатов по первому этапу испытаний показал, что покрытия марки «СпецИзол» различных серий соответствуют требованиям по стойкости к воздействию отрицательных температур и УФ-излучения. [5], [6]

Изменение цвета соответствует 2, т.е. обобщенная оценка АД2 означает, что площадь коррозионного поражения соответствует 25-50 %. Блеск сохраняется, распространение коррозии от надреза на металлических пластинах не более 2 мм. При воздействии отрицательных температур не наблюдается растрескивания и отслаивания покрытий.

Проведенный анализ испытаний по второму этапу на комплексное действие климатических факторов показывает, что полиуретанмочевина серии «СпецИзол» так же как и в первом случае имеет стойкость к воздействию низких температур, соляного тумана, сохраняет свои декоративные, адгезионные и защитные свойства в условиях УХЛ1 на открытой климатической площадке.

По заключению ООО «ВНИИГАЗ» покрытия серии СпецИзол фирмы производителя ООО «НПО «СпецПолимер» соответствуют техническим требованиям к наружным атмосферостойким покрытиям металлоконструкций ОАО «ГАЗПРОМ» и рекомендуются в качестве долговременной противокоррозионной защиты наземных металлоконструкций и строительных сооружений ОАО «ГАЗПРОМ» в условиях УХЛ1, ХЛ1.

Мне хотелось показать в данной статье перспективность современных полимерных материалов в качестве защитного покрытия для металлических и бетонных конструкций. Данный материал сочетает в себе отличные функции антикоррозионного влагонепроницаемого и декоративного покрытия. За счет долговечности свойств материала достигается высокая эффективность при эксплуатации за счет уменьшения вспомогательных работ. Большой экономический эффект от применения полимочевинных покрытий достигается за счет уменьшения трудовых и ресурсных затрат на переизоляцию конструкций. Снижается удельный расход материала на единицу поверхности.

Применение высокорепреактивных полимочевинных систем приобретает все большее значение в наши дни. Их преимущество – это способность удовлетворять поставленным

требованиям. Учитывая, большой срок службы полиуретанмочевинных покрытий без потери антикоррозионных свойств они являются наиболее актуальными для применения в промышленном масштабе. За счет длительного срока службы они также способствуют экономии материальных, энергетических, трудовых ресурсов.

На основании выше изложенного можно сделать вывод, что разработка полимочевинных покрытий является очень востребованной и актуальной и химия полиуретанов, к чему относятся данные покрытия, является одним перспективных направлений в развитии химии 21 века.

Список литературы

1. А.Ю.Бойцов. Новые системы защиты полиуретановых покрытий //Территория Нефтегаз.2008. №10 с.52-53
2. В.Г.Антонов, С.А.Соловьев, Ю.С. Рябец. Принципы оценки применимости противокоррозионных защитных покрытий технологического оборудования и наземных конструкций ОАО «Газпром» // Коррозия Территории Нефтегаз. 2008 № 3
3. ГОСТ 9.407.84 Единая система защиты от коррозии и старения. Покрытия лакокрасочные. Метод оценки внешнего вида.
4. ГОСТ 15150-64 Машины, приборы и другие технические изделия. Исполнения для различных климатических районов. Категории, условия эксплуатации, хранения и транспортирования в части воздействия климатических факторов внешней среды.
5. ГОСТ 9.401-91 Единая система защиты от коррозии и старения. Покрытия лакокрасочные. Общие требования и методы ускоренных испытаний на стойкость к воздействию климатических факторов.
6. Заключение № 31323949-158-2008 по результатам испытаний систем лакокрасочных покрытий (ЛКП) - фирмы производителя ООО «НПО «СпецПолимер» на комплексное воздействие атмосферных климатических факторов и соответствие их показателей «Техническим требованиям к наружным атмосферостойким покрытиям металлоконструкций ОАО «Газпром». Выдано 02 октября 2008 г. ООО «Научно-исследовательский институт природных газов и газовых технологий – ВНИИГАЗ»

УДК 66.094.187

Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Вахмистров В.Е., Домбровский А.А.

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РЕАКЦИИ НЕОКИСЛИТЕЛЬНОГО ДЕГИДРИРОВАНИЯ ПРОПАНА НА ЦЕОЛИТАХ ТИПА ZSM-5**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,**Вахмистров Вячеслав Евгеньевич**, к.х.н., научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН,**Домбровский Александр Андреевич**, студент 4 курса бакалавриата РХТУ им. Д. И. Менделеева,

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

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

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

Изучена кинетика реакции неокислительного дегидрирования пропана на цеолитах типа ZSM-5. При проведении экспериментов в проточном реакторе варьировали массовой скоростью подачи сырья (пропана) в диапазоне 0.5-5 ч⁻¹, составом сырья (отношением пропан/водород), температурой в реакторе от 520 до 580 °С. Реакцию неокислительного дегидрирования пропана проводили при атмосферном давлении. Всего поставлено 27 экспериментов. Продукты реакции анализировались газохроматографически. Предложена кинетическая модель реакции неокислительного дегидрирования пропана в пропилен с учетом протекания побочной реакции крекинга пропана. Методом наименьших квадратов по экспериментальным данным определены численные значения кинетических констант модели. Показана адекватность разработанной модели экспериментальным данным.

Ключевые слова: моделирование, кинетическая модель, оценка параметров, цеолиты, дегидрирование, пропан

KINETIC MODEL OF NON-OXIDATIVE PROPANE DEHYDROGENATION REACTION OVER ZEOLITES ZSM-5Pisarenko E.V.¹, Ponomarev A.B.², Vahmistrov V.E.², Dombrovsky A.A.¹¹D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia²Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia

The kinetics of the reaction of the non-oxidative dehydrogenation of propane on ZSM-5 zeolites was studied. During the experiments in the plug flow reactor, the mass feed rate (propane) in the range of 0.5-5 h⁻¹, the composition of the feedstock (propane / hydrogen ratio), the reactor temperature from 520 to 580 °C were varied. The reaction of the non-oxidative dehydrogenation of propane was carried out at atmospheric pressure. A total of 27 experiments were carried out. The reaction products were analyzed by gas chromatography. A kinetic model of the reaction of the non-oxidative dehydrogenation of propane to propylene has been proposed taking into account the side reaction of cracking of propane. The numerical values of the kinetic constants of the model were determined from the experimental data by the least squares method. The adequacy of the developed model to the experimental data was proved.

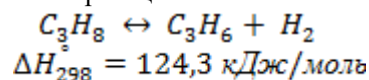
Keywords: modeling, kinetic model, parameter estimation, zeolites, dehydrogenation reaction, propane

Процессы получения этилена и пропилена являются крупнотоннажными процессами нефтехимической промышленности. Низшие олефины C₂-C₃ используются для последующих химических синтезов полиэтилена, полипропилена, оксида пропилена, кумола, акрилонитрила, пропиональдегида, этилбензола и потребность в них неуклонно возрастает [1-2].

Традиционными способами производства этилена и пропилена являются процессы пиролиза, а также каталитического крекинга различного углеводородного сырья, в которых пропилен является побочным продуктом производства этилена. Крупнейшими предприятиями-производителями этилена в России являются ОАО «Нижекамскнефтехим» (ЭП-600), ООО «Ставролен» (ЭП-350), ООО «Газпром нефтехим Салават» (ЭП-300), ООО «Томскнефтехим» (ЭП-300), «Ангарский ЗП» (ЭП-300), ОАО «Сибурнефтехим» (ЭП-300), ОАО «Уфаоргсинтез» (ЭП-60,

ЭП-30) и др. В связи с опережающими темпами роста спроса на пропилен по сравнению с этиленом, мощностей традиционных пиролизных установок не хватает для удовлетворения спроса на пропилен. Кроме того, использование вместо нефти других типов сырья приводит к резкому снижению отношения пропилен/этилен в продуктах реакции. Поэтому все большее внимание привлекают альтернативные способы получения пропилена, среди которых следует отметить окислительное и неокислительное дегидрирование пропана [3].

Реакция дегидрирования пропана является эндотермической реакцией.



Основные проблемы при проведении данной реакции на различных катализаторах как оксидных (оксиды хрома, ванадия, молибдена, галлия, индия), так и металлических (содержащих платину и различные промоторы) заключаются в образовании

кокса на поверхности катализатора и протекании реакций крекинга алканов. Продуктами реакции дегидрирования являются пропилен и водород, однако из-за протекания побочных реакций образуются также метан, этилен, этан, небольшие количества ароматических и др. углеводородов. Конверсия пропана уменьшается с течением времени, что связано с дезактивацией катализатора из-за закоксовывания. Поэтому все промышленные технологии основаны на циклической регенерации используемых катализаторов.

Кинетические эксперименты проводились в проточном трубчатом реакторе, помещенном в электрическую печь для поддержания необходимого температурного режима проведения реакции. Температура измерялась термопарой, расположенной по центру каталитического слоя. В реактор был загружен 1 г катализатора. В течение 1 часа осуществлялось его нагревание в потоке N_2 до температуры 550 °С. Скорость подачи азота составляла 15 мл/мин. Затем в течение 45 минут осуществлялся процесс восстановления катализатора водородом при температуре 550 °С, со скоростью подачи 15 мл/мин.

При проведении экспериментов в проточном реакторе варьировали массовой скоростью подачи сырья (пропана) в диапазоне 0.5-5 ч⁻¹, составом сырья (отношением пропан/водород), температурой в реакторе от 520 до 580 °С. Для анализа состава продуктов реакции использовался газовый хроматограф Кристалл 5000.2.

На основании литературных данных и проведенных лабораторных экспериментов предложена кинетическая модель реакции дегидрирования пропана с учетом протекания побочной реакции крекинга пропана.

$$\frac{dP_{C_3H_8}}{d\tau} = -\frac{k_1 \left(P_{C_3H_8} - \frac{P_{C_3H_6} \cdot P_{H_2}}{K_p} \right)}{1 + K_2 \cdot P_{C_3H_6}} - k_3 \cdot P_{C_3H_8}, \quad (1)$$

$$\frac{dP_{C_3H_6}}{d\tau} = \frac{k_1 \left(P_{C_3H_8} - \frac{P_{C_3H_6} \cdot P_{H_2}}{K_p} \right)}{1 + K_2 \cdot P_{C_3H_6}}, \quad (2)$$

$$\frac{dP_{H_2}}{d\tau} = \frac{k_1 \left(P_{C_3H_8} - \frac{P_{C_3H_6} \cdot P_{H_2}}{K_p} \right)}{1 + K_2 \cdot P_{C_3H_6}}, \quad (3)$$

$$\frac{dP_{C_2H_4}}{d\tau} = k_3 \cdot P_{C_3H_8}, \quad (4)$$

$$\frac{dP_{CH_4}}{d\tau} = k_3 \cdot P_{C_3H_8}, \quad (5)$$

Начальные условия:

$$\tau = 0 \quad P_{C_3H_8}(0) = P_{C_3H_8}^0 \quad P_{C_3H_6}(0) = 0 \quad P_{H_2}(0) = 0 \\ P_{C_2H_4}(0) = 0 \quad P_{CH_4}(0) = 0, \quad (6)$$

где k_1, k_3 – константы скоростей реакций дегидрирования и крекинга пропана; K_p – константа равновесия реакции дегидрирования пропана; K_2 –

константа адсорбции пропилена; $P_{C_3H_8}, P_{C_3H_6}, P_{H_2}$ – парциальные давления пропана, пропилена и водорода, атм.

Так как ранг матрицы стехиометрических коэффициентов равен двум, то в данной реакционной системе имеются два ключевых и три неключевых вещества. В качестве ключевых веществ были выбраны пропан и пропилен.

$$B = \begin{pmatrix} C_3H_8 & C_3H_6 & H_2 & CH_4 & C_2H_4 \\ -1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

Уравнения химических инвариантов в интегральной форме для расчета парциальных давлений неключевых веществ, представимы в виде:

$$P_{H_2} = P_{H_2}^0 - (P_{C_3H_6} - P_{C_3H_6}^0), \quad (8)$$

$$P_{CH_4} = P_{CH_4}^0 - (P_{C_3H_8} - P_{C_3H_8}^0) - (P_{C_3H_6} - P_{C_3H_6}^0), \quad (9)$$

$$P_{C_2H_4} = P_{C_2H_4}^0 - (P_{C_3H_8} - P_{C_3H_8}^0) - (P_{C_3H_6} - P_{C_3H_6}^0), \quad (10)$$

Кинетические константы модели были оценены методом нелинейных наименьших квадратов для двух цеолитсодержащих катализаторов (с содержанием Pt 0.5 % масс.), полученных с использованием различных методик (пропитки и многостадийного кластерного синтеза). Минимизация функции многих переменных, характеризующей степень согласия результатов расчета и эксперимента, проводилась с использованием метода случайного поиска по наилучшей пробе. Получены численные значения кинетических констант модели, оцененные при $T=550$ °С для двух цеолитсодержащих катализаторов, полученных с использованием метода пропитки и многостадийного кластерного синтеза (МКС). Образец №1 (метод пропитки): $k_1=1.92, 1/c$; $K_2=0,4 \text{ атм}^{-1}$; $k_3=0,0076, 1/c$; $K_p=0,09669 \text{ атм}$. Образец №2 (метод МКС): $k_1=1.242 \text{ 1/c}$; $K_2=0,6 \text{ атм}^{-1}$; $k_3=0,0146, 1/c$; $K_p=0,09669 \text{ атм}$.

Показана адекватность разработанной модели экспериментальным данным.

Список литературы

1. Лавренов А.В. Технологии получения пропилена: сегодня и завтра / А.В. Лавренов А.В., Л.Ф. Сайфуллина, Е.А. Булчевский, Е.Н. Богданец // Катализ в химической и нефтехимической промышленности. –2015. –Т.15. –№3. –С.6-19.
2. Vora B.V. Development of dehydrogenation catalysts and processes// Top. Catal. –2012. –V.55. –P.1297-1308.
3. Макарян, И.А. Промышленные процессы целевого каталитического дегидрирования пропана в пропилен./ И.А. Макарян, М.И. Рудакова, В.И.Савченко // Альтернативная энергетика и экология. –2010. –Т. 86. –№ 6. –С. 67-81.

УДК 544.272:544.032.4

Пугачёва Д.А., Глебов М.Б.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АПРОТОННЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Пугачёва Дарья Андреевна, студент 4 курса факультета информационных технологий и управления;
Глебов Михаил Борисович, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой кибернетики химико-технологических процессов, e-mail: glebov@muctr.ru;
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20

Изучение ионных жидкостей – «зелёных» растворителей – одно из перспективных направлений в современной химической науке, ориентированной на создание условий для устойчивого развития общества. В данной статье исследованы некоторые физические и структурные свойства апротонной ионной жидкости 1-бутил-3-метилимидазолия тетрафторбората [Bmim][BF₄], используемого в различных технологических приложениях. Для этой цели используется метод молекулярной динамики – один из доминирующих на сегодняшний день методов компьютерного моделирования молекулярных и ионных систем. Представлены и обсуждены полученные температурные зависимости плотности и коэффициентов самодиффузии в ионном растворе. Рассчитаны значения радиальной функции распределения для присутствующих ионов.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, ионные жидкости, тетрафторборат 1-бутил-3-метилимидазолия

STUDY PROPERTIES OF APROTIC IONIC LIQUID USING MOLECULAR DYNAMICS

Pugacheva D.A., Glebov M.B.

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

Investigation of ionic liquids which are called “green” solvents, is a perspective area of modern science focused on sustainable development. Some physical and structural properties of aprotic ionic liquid 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate are investigated [Bmim][BF₄] in this work. For these purpose, we used the method of molecular dynamics which is one of the dominant methods of computer simulation of physical processes. Some obtained temperature dependences are also presented and discussed.

Key words: molecular dynamics, ionic liquids, 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate

Введение

Ионными жидкостями (ИЖ) называется класс солей, имеющих относительно низкую температуру плавления, то есть остающихся в жидком состоянии при температурах, близких к комнатным. В последнее время ИЖ все больше привлекают внимание исследователей из-за их уникальных свойств как химическая и термическая стойкость, высокая растворимость и подвижность, низкое парциальное давление и высокая (ионная) проводимость. Именно из-за их необычных свойств, на ИЖ возлагают особые надежды как на новый класс «зеленых» растворителей. Более того, значительное число ИЖ может быть получено рекомбинацией различных катионов и анионов, которые, как известно, определяют свойства и структуру системы. Таким образом, это, теоретически, позволяет сконструировать ИЖ почти для любой задачи, из-за чего их называют «дизайнерскими растворителями». Уже имеется возможность создать ИЖ с соответствующей структурой для растворения любого вещества или задать ИЖ любые физико-химические свойства. На данный момент ИЖ имеют определенный потенциал для применения в качестве растворителей, а также в каталитических и физико-химических процессах.

Однако большое количество ИЖ, синтезированных в последнее время, всё ещё

нуждаются в оценке их свойств и получении зависимостей этих свойств от внешних условий. Проведение экспериментов по изучению состояния систем, особенно учитывая их разнообразие, может быть дорого, сложно, и даже опасно. В связи с развитием современных информационных технологий в качестве альтернативного метода исследования систем всё чаще выступает имитационное моделирование. Создание достоверной и адекватной модели может оказаться наиболее лёгким и выгодным инструментом для науки и стать заменой более трудоёмким методам. В этом направлении наиболее часто используется метод классической молекулярной динамики (МД) из-за его относительно низкой вычислительной стоимости.

Метод МД основан на интегрировании уравнений движения атомов, либо ионов, что позволяет проследить временную эволюцию системы. Определённым образом подбирается ячейка моделирования, в нее помещается некоторое количество частиц, взаимодействие между которыми определяется потенциалом взаимодействия. На текущий момент разработано большое количество пакетов программного обеспечения, реализующих метод МД.

В данной работе исследуются свойства распространенной ионной жидкости 1-бутил-3-

метилимидазолия тетрафторбората [Bmim][BF₄]. С помощью метода МД нами получены зависимости плотности и коэффициента самодиффузии жидкости от температуры в диапазоне 15-77°C, а также исследована радиальная функция распределения, позволяющая получить представление о структуре системы. Данные свойства выбраны, так как они позволяют получить сведения о [Bmim][BF₄], как о потенциальном апротонном растворителе.

Молекулярная динамика

Для моделирования использовался программный пакет с открытым исходным кодом GROMACS (GROningen Machine of Chemical Simulations), разработанный командой Германа Берендсена. Для получения и отображения зависимостей использовалось дополнительное программное обеспечение Xmgrace. Для отображения молекул – VMD.

В качестве начальной конфигурации использовалась кубическая ячейка моделирования 2,5x2,5x2,5 нм, в которую помещены 50 молекул (ионных пар) исследуемой ИЖ [Bmim][BF₄]. Взаимодействия между молекулами ИЖ описаны OPLS-AA моделью.

Для имитации внешних условий использовались термостат и баростат Берендсена, с постоянной времени 0,2 пс и 1 пс, соответственно, которые включались после недолгого периода релаксации. Это было сделано для того, чтобы избавиться от основных артефактов после помещения молекул в ячейку. После начальной релаксации системе с NpT-ансамблем было дано 100 пс для перехода в равновесное состояние при шаге интегрирования 0,0002 пс. Радиус обрезания для ван-дер-ваальсовых и кулоновских сил составил 1,1 нм. Для учета дальнего электростатического взаимодействия использовался метод Эвальда. На рисунке 1 представлена моделируемая система.

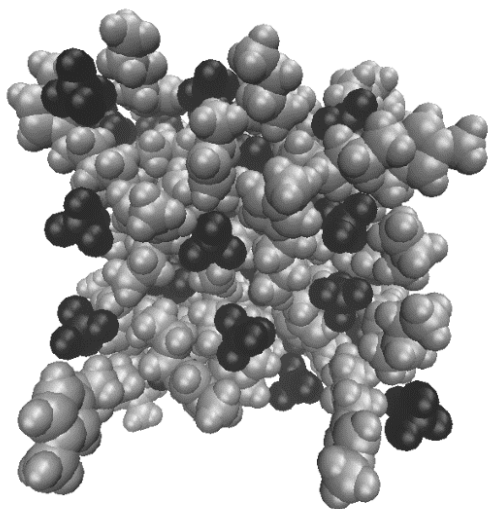


Рисунок 1. Моделируемая система, состоящая из 50 ионных пар [Bmim][BF₄]. Серым обозначены катионы [Bmim]⁺, черным -анионы [BF₄]⁻

Результаты и их обсуждение

Были получены температурные колебания плотности системы в течение всего расчета при разных температурах в диапазоне от 15 до 77 °C. Результаты представлены на рисунке 2.

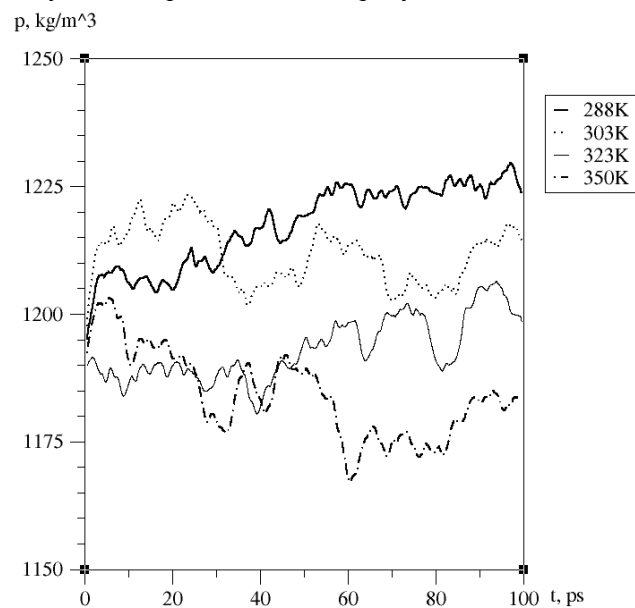


Рисунок 2. Колебания плотности ИЖ при различных температурах в течение расчета.

Далее плотности осреднялись и уже средние плотности при различных температурах сравнивались с полученными ранее экспериментальными данными [1]. В таблице 1 приведены результаты такого сравнения.

Таблица 1. Усредненные плотности [Bmim][BF₄] при различных температурах, сравнение с экспериментом

Температура, К	Плотность, полученная методом МД, кг/м ³	Плотность, полученная экспериментально, кг/м ³
288	1214,34	1207,87
303	1209,02	1197,96
323	1190,52	1184,13
350	1182,01	1165,30

Как видно из таблицы, сравнение с экспериментальными данными даёт неплохие результаты, погрешность метода МД при определении плотности ИЖ составляет не более 1,5%.

Нами исследовался среднеквадратичный свдиг катионов и анионов при разных температурах. Эти данные позволяют провести оценку коэффициентов самодиффузии ионов в растворе. Результаты показаны на рисунке 3.

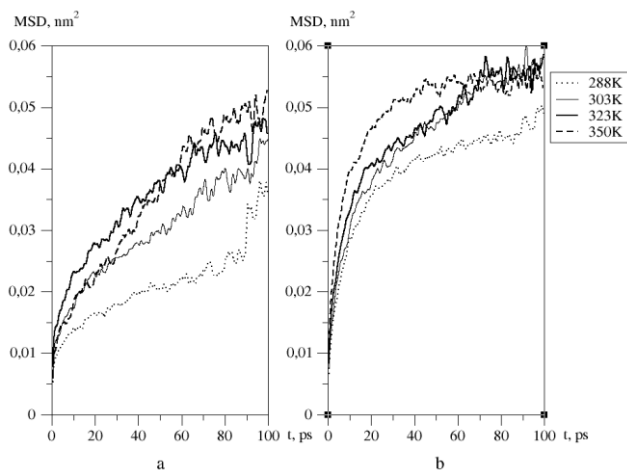


Рисунок 3. Среднеквадратичный сдвиг а) катионов; б) анионов

Как видно из графиков, среднеквадратичный сдвиг анионов всегда оказывается выше, чем у катионов. Это связано с тем, что размер анионов меньше размера катионов, и поэтому движение катионов более затруднено. При этом с повышением температуры диффузия и катионов, и анионов увеличивается. Это хорошо согласуется с результатами в [2].

Мы посчитали коэффициенты диффузии для анионов и катионов по формуле Эйнштейна (взяв для этого линеализированные части графиков) и представили их в таблице 2.

Таблица 2. Коэффициенты самодиффузии катионов и анионов при различных температурах

Температура, К	D анионов* 10^5 , $\text{см}^2/\text{с}$	D катионов* 10^5 , $\text{см}^2/\text{с}$
288	0,0235	0,0221
303	0,2801	0,0288
323	0,0433	0,0369
350	0,0605	0,0479

Эти данные отличаются от экспериментальных [3] в области высоких температур, что объясняется неточным описанием потенциала взаимодействия и погрешностями измерения коэффициента самодиффузии.

Для оценки структуры системы, мы рассчитывали радиальные функции распределения частиц при 288K. Они представлены на рисунке 4. Из-за малого размера исследуемой системы оценивались только первые пики. Однако и их было достаточно, чтобы однозначно утверждать о неравномерном распределении ионов в растворе. Как видно из рисунка 4, катионы и анионы в системе находятся существенно ближе, чем частицы с одноименными зарядами. Это указывает на значительный вклад кулоновских сил притяжения и отталкивания.

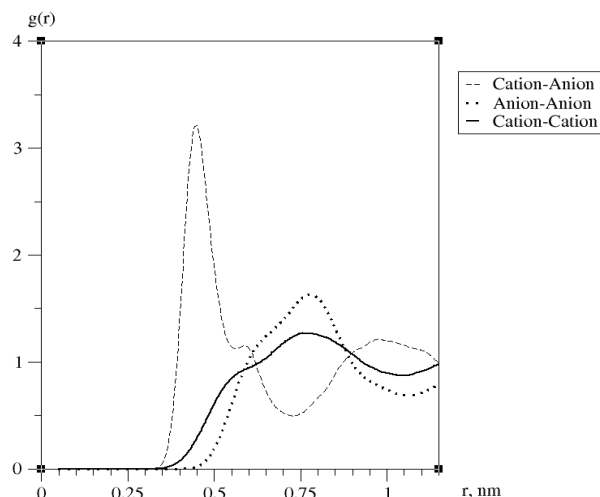


Рисунок 4. Радиальные функции распределения между различными ионами [Bmim][BF₄]

Выводы

1. Изучены некоторые свойства ИЖ [Bmim][BF₄], характеризующие ее свойства как растворителя. Результаты показали, что метод молекулярной динамики позволяет с удовлетворительной точностью рассчитывать температурную зависимость плотности ионной жидкости. В случае расчета коэффициентов диффузии требуется уточнение потенциала взаимодействия.

2. Нами рассчитаны и проанализированы радиальные функции распределения, позволившие оценить расположение молекул по отношению друг к другу. Обнаружено, что ионы с разноименными зарядами располагаются существенно ближе, чем ионы с одноименными зарядами.

Работа выполнена при финансовой поддержке исследований Министерством образования и науки Российской Федерации в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы» (проект № 14.583.21.0064, Уникальный идентификатор проекта RFMEFI58317X0064)

Список литературы

- Jaroslav Klomfar, Monika Soucková, Jaroslav Pátek. Buoyancy density measurements for 1-alkyl-3-methylimidazolium based ionic liquids with tetrafluoroborate anion // Fluid Phase Equilibria. — 2009. — VoL 282. — P. 31-37.
- Диффузия в ионных жидкостях. Исследование методом классической молекулярной динамики / Г. Ивановскис [и др.] // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. — 2013. — № 2. URL: <http://chemphys.edu.ru/media/published/12.pdf> (дата обращения: 16.03.2018).
- Y. Mao, K. Damodaran. Ionization Dynamics in Ionic liquids Probed via Self-Diffusion Coefficient Measurements // Chemical Physics. — 2014. — VoL 440. — P. 87-93.

УДК 66.011

Митричев И.И., Варданян А.Э., Женса А.В., Кольцова Э.М.

ИТЕРАЦИОННЫЕ ПРОЦЕДУРЫ РАСЧЕТА УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА ДЛЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ

Митричев Иван Игоревич, ведущий программист кафедры информационных компьютерных технологий, e-mail: imitrichev@muctr.ru;

Варданян Андраник Эдуардович, студент 1 курса магистратуры кафедры информационных компьютерных технологий;

Женса Андрей Вячеславович, к.т.н., доцент, доцент кафедры информационных компьютерных технологий РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, г. Москва

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

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

В статье приведены результаты математического моделирования химического реактора неподвижного слоя катализатора и с катализатором на стенке. Рассмотрены два случая: без учета радиального перемешивания и с учетом этого процесса. Приведены разностные схемы, описаны итерационные процедуры, используемые для решения математических моделей. Показана важность учета радиальной диффузии при значениях коэффициента диффузии 10^{-3} и меньше в трубчатых лабораторных реакторах.

Ключевые слова: химические реакторы, математическое моделирование, реактор неподвижного слоя, стенка с катализатором

ITERATION PROCEDURES FOR CALCULATION OF TRANSPORT EQUATIONS FOR CHEMICAL REACTORS

Mitrichev I.I., Vardanyan A.E., Zhensa A.V., Koltsova E.M.

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

The paper presents the results of mathematical simulation of a chemical reactor with a fixed catalyst bed and a catalyst on a wall. Two cases are considered: without taking radial mixing into account and taking this process into account. Difference schemes are given, iterative procedures used for solving mathematical models are described. We have shown the importance of accounting for radial diffusion at values of the diffusion coefficient of 10^{-3} and less in tubular laboratory reactors.

Keywords: chemical reactors, mathematical modeling, fixed-bed reactor, catalytic wall

Математическая модель идеального вытеснения, традиционно применяемая для расчета изменения концентрации веществ в трубчатых химических реакторах, для случая неподвижного слоя катализатора записывается как:

$$\frac{dF_k}{dx} = a \cdot R_k, \quad (1)$$

где $F_k = vC_k$ – мольный расход компонента k на единицу сечения реактора, кмоль/(м²с),

v – линейная скорость среды, м/с,

C_k – концентрация компонента k , кмоль/м³,

a – отношение активной поверхности катализатора к объему реактора, м²/м³,

R_k – изменение концентрации компонента k за счет химических реакций.

Уравнение (1) удовлетворяет требованию неразрывности. Если концентрации реагирующих веществ малы, реакция протекает с незначительным изменением объема, то скорость v можно принять постоянной.

При решении задач оптимизации (например, поиск кинетических параметров) необходимо

решать уравнения типа (1) тысячи, миллионы и более раз. При этом критично важно использовать параллельные вычисления. Поэтому, широко применяют явный разностный метод решения (1), где скорость реакции R_i вычислена в предыдущем расчетном узле разностной сетки i .

Записав разностную схему для решения задачи (1), получаем:

$$F_{i+1,k} = \Delta x \cdot a \cdot R_{i,k} + F_{i,k}. \quad (2)$$

Данная модель описывает случай мгновенного радиального перемешивания, т.е., отсутствия градиентов концентрации от стенки реактора к его центру, при отсутствии осевого перемешивания.

На практике радиальным перемешиванием можно пренебречь только в узких реакторах в условиях кинетического режима протекания реакции. Иначе, необходимо дополнить модель [2]

$$\frac{\partial(C_k v)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C_k}{\partial r^2} + \frac{D}{r} \frac{\partial C_k}{\partial r} + a \cdot R_k, \quad (3)$$

где D – коэффициент молекулярной диффузии, м²/с.

Явная разностная схема для (3):

$$\frac{F_{i+1,j,k} - F_{i,j,k}}{\Delta x} = D \cdot \left(\frac{C_{i,j+1,k} - 2 \cdot C_{i,j,k} + C_{i,j-1,k}}{\Delta h^2} \right) + \frac{D}{r} \cdot \frac{C_{i,j+1,k} - C_{i,j,k}}{\Delta h} + a \cdot R_{i,j,k} \cdot (4)$$

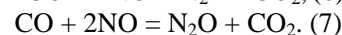
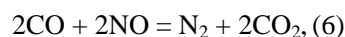
Схема (4) приводит к рекуррентному соотношению для вычисления F_k :

$$F_{i+1,j,k} = \frac{D \cdot \Delta x}{\Delta h} \cdot \left(\frac{C_{i,j-1,k} \cdot r - C_{i,j,k} \cdot (2 \cdot r + \Delta h) + C_{i,j+1,k} \cdot (r + \Delta h)}{r \cdot \Delta h} \right) + \Delta x \alpha \cdot R_{i,j,k} + F_{i,j,k} \cdot (5)$$

Расчет по формулам (2) и (5) химического реактора с неподвижным слоем катализатора был реализован в виде компьютерной программы. Мы использовали набор объектно-ориентированных программных средств на языке C++ для решения задач, связанных с химической кинетикой и термодинамикой Cantera, чтобы вычислить скорость реакции $R_{i,k}$ по микрокинетической модели (подробнее см. [3]). Для описания участка поверхности и расчета скоростей реакций, протекающих на поверхности раздела фаз, мы использовали объектно-ориентированный класс Cantera Interface. Идеальная газовая смесь описывается объектом класса IdealGasMix. Входными параметрами для описания газовой смеси являются: температура, начальная концентрация и давление. Начальное состояние газовой смеси задается при помощи метода класса IdealGasMix setStateTPX().

При использовании явной разностной схемы слагаемое R_k может быть слишком велико, в таком случае мы домножали это слагаемое на коэффициент нижней релаксации меньше единицы до достижения всеми F_k положительных значений. R_k находится в отдельной итерационной процедуре, где уравнения кинетики реакций на поверхности катализатора интегрируются с использованием Cantera до установления стационарного состояния. Если процесс интегрирования в Cantera выдал ошибку, нами предусмотрено до трех перезапусков процедуры интегрирования, что повышает стабильность работы программы.

Написанное программное обеспечение тестировалось на кинетической модели реакции NO и CO на платиновом катализаторе из работы [3]. Химическое взаимодействие этих веществ на поверхности катализатора описывается следующими уравнениями (6, 7):



Реакция изучалась при температуре 583,15 К, если не указано иное. Общая длина реактора неподвижного слоя 14 мм и радиус 2 мм. Давление в реакторе 1 атм. Состав исследуемой смеси приведен в таблице 1.

Таблица 1. Состав исследуемой газовой смеси (мольные проценты)

CO	CO ₂	NO	N ₂	N ₂ O	He
0,34	0	0,3	0	0	99,36

Коэффициент диффузии полагали не зависящим от концентрации веществ и постоянным.

В случае отсутствия или наличия учета скорости диффузии для реакции, протекающей во всем объеме реактора (катализатор неподвижного слоя), значения конверсии не отличаются. Для CO конверсия составляет 26,84%, для NO 59,15%.

В таблицах 2-6 приведены результаты расчета при различных значениях коэффициента диффузии для случая, когда реакция протекает на стенке реактора.

Таблица 2. Результаты расчета реактора и значение критерия [4] T = 543.15 К

D, м ² /с	С учетом диффузии		Без учета диффузии		X _{max}
	CO	NO	CO	NO	
10 ⁻⁷	0,13	0,29	1,54	3,49	3,05×10 ⁻⁴
10 ⁻⁶	0,28	0,63			3,05×10 ⁻³
10 ⁻⁵	0,34	0,78			3,05×10 ⁻²
10 ⁻⁴	0,92	2,08			3,05×10 ⁻¹

Таблица 3. Результаты расчета реактора и значение критерия [4] T=583.15 К

D, м ² /с	С учетом диффузии		Без учета диффузии		X _{max}
	CO	NO	CO	NO	
10 ⁻⁸	1,74	3,83	26,84	59,15	2,84×10 ⁻³
10 ⁻⁷	2,07	4,55			2,84×10 ⁻²
10 ⁻⁶	4,73	10,3			2,84×10 ⁻¹
10 ⁻⁵	5,09	11,28			2,84
10 ⁻⁴	16,1	35,6			28,4

Таблица 4. Результаты расчета реактора и значение критерия [4] T=623.15 К

D, м ² /с	С учетом диффузии		Без учета диффузии		X _{max}
	CO	NO	CO	NO	
10 ⁻⁸	4,99	10	59,87	97,69	2,66×10 ⁻³
10 ⁻⁷	5,19	10,33			2,66×10 ⁻²
10 ⁻⁶	8,18	14,86			2,66×10 ⁻¹
10 ⁻⁵	20,7	37,43			2,66
10 ⁻⁴	51,55	89,6			26,6

Таблица 5. Результаты расчета реактора и значение критерия [4] T=663.15 К

D, м ² /с	С учетом диффузии		Без учета диффузии		X _{max}
	CO	NO	CO	NO	
10 ⁻⁸	6,03	9,8	83,31	99,63	2,5×10 ⁻³
10 ⁻⁷	6,47	10,47			2,5×10 ⁻²
10 ⁻⁶	9,76	14,72			2,5×10 ⁻¹
10 ⁻⁵	32,48	44,73			2,5
10 ⁻⁴	78,7	98,57			25
10 ⁻³	81,7	99,14			250

Таблица 6. Результаты расчета реактора и значение критерия [4] T=703.15 К

D, м ² /с	С учетом диффузии		Без учета диффузии		X _{max}
	CO	NO	CO	NO	
10 ⁻⁸	7,13	9,75	87,51	99,72	2,36×10 ⁻³
10 ⁻⁷	7,51	10,22			2,36×10 ⁻²
10 ⁻⁶	11,14	14,53			2,36×10 ⁻¹
10 ⁻⁵	37,91	45,29			2,36
10 ⁻⁴	86,31	99,53			23,6

Для анализа результатов (таблица 2 – таблица 6) мы воспользовались статьей [4] в которой говорится, что радиальную диффузию можно не учитывать, если конверсия X в % не превышает величины (8). Порядок реакции n был принят равным единице. Критерий Pe рассчитывается по формуле (9):

$$X < X_{\max} = \frac{0.23}{0.16 + n \cdot Pe} \cdot 100, \quad (8)$$

$$Pe = v \cdot \frac{L}{D} \cdot \left(\frac{R}{L}\right)^2, \quad (9)$$

При температуре 543,15 К учет влияния диффузии оказывается довольно важным при любых рассмотренных значениях коэффициента диффузии, поскольку при абсолютной ошибке по конверсии в 0,5-1% относительная ошибка расчета конверсии без учета диффузии оказывается очень велика. При увеличении температуры учет влияния диффузии становится менее важным, поскольку величина конверсии составляет десятки процентов, и абсолютная ошибка приблизительно в 1% по величине конверсии является допустимой.

Результаты (таблица 2 – таблица 6) показали, что при температуре свыше 600 К при значениях коэффициента диффузии менее 10⁻³ модель без учета диффузии дает рассогласование по величине конверсии CO в 4% и выше. При этом при значениях D=10⁻³ учет радиальной диффузии можно не производить, что полностью согласуется с выводом на основе критерия (8). Коэффициент молекулярной диффузии NO и CO в выхлопном газе по нашим расчетам принимает значения от 4×10⁻⁵ до 1×10⁻⁴, что показывает возможность наличия радиальных градиентов концентрации в реакторе с

катализатором на стенке при рассмотренных значениях диаметра трубчатого реактора 4 мм. Данный порядок диаметра реактора характерен для лабораторных испытательных стендов катализаторов. В то же время, при высоких значениях температуры и конверсии CO и NO результаты расчета без учета радиального диффузионного перемешивания и с его учетом близки при значениях коэффициента диффузии 10⁻⁴. Таким образом, только при высоких степенях превращения можно использовать модель, не учитывающую радиальный перенос массы, и, таким образом, ускорить выполнение расчетов.

Список литературы

1. Fogler H.S. Essentials of Chemical Reaction Engineering (Part 1) / Pearson Education, Inc., 2011. p. 708
2. Н. В. Верниковская, Ю. В. Малоземов, С. А. Покровская. Каталитические процессы в реакторах с неподвижным слоем // Учебно-методическое пособие. 2008. с.11
3. Митричев И.И., Женса А.В., Кольцова Э.М. Термодинамические критерии оценки кинетических параметров каталитических реакций // Журнал физической химии. 2017. Т. 91, № 1. С. 49–57.
4. Berger R.J., Kapteijn F. Coated-Wall Reactor Modeling Criteria for Neglecting Radial Concentration Gradients. 1.Empty Reactor Tubes//Industrial & engineering chemistry research. 2007. Т.46, №12. С.3863-3870.

УДК 330.1

Миннибаева А.Р., Аверина Ю.М., Ветрова М.А., Калякина Г.Е.

ОФИЦИАЛЬНЫЙ СПОСОБ СБОРА ПЕРВИЧНЫХ ДАННЫХ О ПРЕДПРИЯТИИ

Миннибаева Аклима Римовна, студентка 2-го курса магистратуры, кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии РХТУ им. Д. И. Менделеева;

e-mail: aklima.minnibaeva@yandex.ru

Аверина Юлия Михайловна к.т.н., ассистент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва

Ветрова Маргарита Александровна – студентка каф. ИМиЗК РХТУ имени Д.И. Менделеева;

Калякина Галина Евгеньевна – студентка каф. ИМиЗК РХТУ имени Д.И. Менделеева;

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

Россия, 125047, Москва, Миусская пл., 9.

В данной статье на примере действующего предприятия проведен краткий анализ финансово-хозяйственной деятельности. Проведен анализ динамики состава имущества и источников финансовых ресурсов предприятия. Показана возможность получить информацию из официальных источников о любой компании, проверить контрагента, оценить финансовые и налоговые риски.

Ключевые слова: предприятие, анализ финансово-хозяйственной деятельности, проект «ЗАЧЕСТНЫЙБИЗНЕС».

THE OFFICIAL WAY OF COLLECTING PRIMARY DATA ABOUT THE COMPANY

Minnibaeva A.R., Averina J.M., Vetrova M.A., Kalyakina G.E.

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

In this article, a brief analysis of financial and economic activities is carried out on the example of an operating enterprise. The analysis of the dynamics of the composition of property and sources of financial resources of the enterprise is carried out. The opportunity is shown to get information from official sources about any company, check the counterparty, assess financial and tax risks.

Key words: enterprise, analysis of financial and economic activity, project "ZACHESTNYBIZNES".

Для предпринимателей, ведущих собственное дело, актуальной проблемой является определение деловых партнеров на рынке с чистой репутацией. Каждый первый тот или иной выбор в пользу конкретного партнера связан с некоторым риском в большей или меньшей степени: например, вы не скажете со сто процентной уверенностью, что к компании, с которой вы намерены вести общие дела, налоговая служба не имеет никаких претензий.

С целью обезопасить предпринимателей от сотрудничества с недобросовестными фирмами («фирмами-однодневками» или мошенниками) и сократить финансовые риски, был создан портал о компаниях и бизнесе РФ «ЗАЧЕСТНЫЙ БИЗНЕС». Первостепенная задача, которую решает проект – это сделать максимально открытыми и доступными сведения о юридических лицах и индивидуальных предпринимателях, зарегистрированных на территории РФ. На портале любой предприниматель имеет право бесплатно и без регистрации проверить своих потенциальных партнеров по бизнесу. Информация обновляется ежедневно и получена из официальных источников (ФНС, Росстат, Арбитражный суд и др.). На этом ресурсе возможно получить информацию ЕГРЮЛ/ЕГРИП, о видах и основных направлениях деятельности компании или ИП, данные о руководителях и учредителях, финансовую отчетность и найти связанные компании. Вся имеющаяся там информация является открытой и общедоступной согласно нормативно-

правовым актам Российской Федерации. Стоит отметить, что воспользоваться данными портала имеют право и рядовые граждане, решившие заключить договор с конкретной фирмой на оказание услуг[1].

С другой стороны предприниматели не обязаны осуществлять проверку своих потенциальных деловых партнеров перед заключением договора, однако, это один из способов снижения рисков налоговых и гражданско-правовых. Первостепенным будет разумно руководителю компании проанализировать надежность, платежеспособность и юридическую правоспособность компании.

В данной статье на примере предприятия БИНАКОР-ХТ проведен краткий анализ финансово-хозяйственной деятельности, данные для которого были использованы с портала «ЗАЧЕСТНЫЙБИЗНЕС». Основным видом экономической деятельности компании является "научные исследования и разработки в области естественных и технических наук прочие". Также ООО "БИНАКОР-ХТ" работает еще по 18 направлениям[2].

Анализ финансовой отчетности – это искусство преобразования данных, содержащихся в финансовой отчетности, в информацию, необходимую для принятия обоснованных решений. Финансовый анализ предусматривает использование различных форм финансовой отчетности. Эти формы отчетности выполняют многообразные

функции. Во-первых, баланс представляет в совокупности данные об активах, обязательствах и собственном капитале фирмы на конец года. Во-вторых, отчет о прибылях и убытках обобщает информацию о выручке и затратах фирмы за определенный период времени, опять же за год [3].

Расчет и анализ определенных показателей составляют основу оценки финансово-хозяйственной деятельности предприятия, которые отображают:

- имущественный потенциал предприятия;
- ликвидность и платежеспособность предприятия;
- финансовую устойчивость предприятия;
- деловую активность предприятия;
- прибыль и рентабельность предприятия;
- положение предприятия на рынке ценных бумаг.

Работая с балансом, следует выявить те статьи, которые подверглись наибольшему изменению в течение отчетного года и, следовательно, оказали наибольшее влияние на финансовое состояние фирмы.

Анализ динамики состава имущества и источников финансовых ресурсов предприятия показывает прирост имущества и капитала (рис. 1, рис. 2) за анализируемый период.

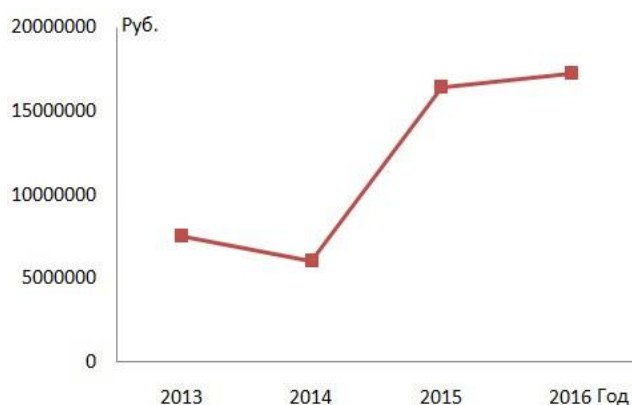


Рис. 1. Валюта баланса за отчетный период

С конца 2013 г. по конец 2016 г. валюта баланса увеличилась на 9701000 руб. или на 129%. Это свидетельствует о расширении деятельности предприятия.

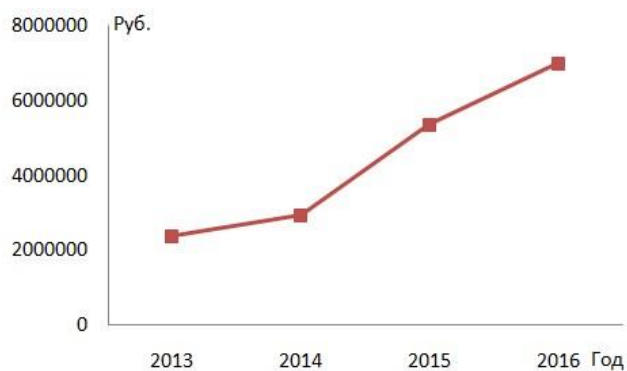


Рис. 2. Капитал за отчетный период

Прирост капитала за отчетный период повысился на 4529000 и составляет 190%, это свидетельствует о том, что финансовая зависимость фирмы от внешних инвесторов значительно уменьшилась и повысилась его рыночная устойчивость. Рассмотрим соотношение необоротных и оборотных активов (рис. 3), которое характеризует, сколько рублей, вложенных в долгосрочные активы, приходится на один рубль, вложенный в оборотные средства. За отчетный период (2013-2016 гг.) наблюдается повышение данного коэффициента, это свидетельствует, что предприятие стало более ресурсоемко, стал выше производственный риск, поскольку вложения в долгосрочные активы должны окупаться за счет будущих поступлений.

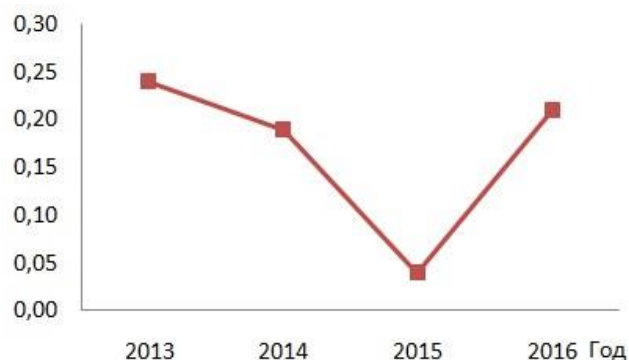


Рис. 3. Соотношение необоротных и оборотных активов

Коэффициент текущей ликвидности - это наиболее общий и часто используемый показатель ликвидности. Коэффициент отражает способность компании погашать текущие (краткосрочные) обязательства за счёт только оборотных активов. Чем показатель больше, тем лучше платежеспособность предприятия. Как видно на рисунке 4, значение коэффициента незначительно снижается. Однако значение не критическое, предприятие в состоянии стабильно оплачивать текущие счета. Нормальным считается значение коэффициента 2 и более (это значение наиболее часто используется в российских нормативных актах; в мировой практике считается нормальным от 1.5 до 2.5, в зависимости от отрасли). Значение более 3 может свидетельствовать о нерациональной структуре капитала [4].

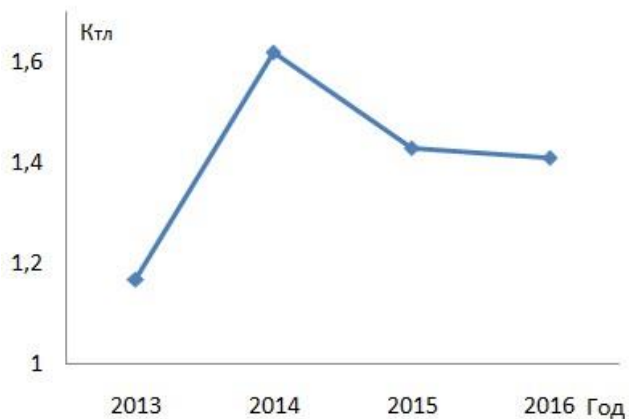


Рис. 4. Коэффициент текущей ликвидности

На рис. 5 мы наблюдаем в 2016 году положительную тенденцию снижения дебиторской задолженности. Уменьшение этого показателя говорит о восстановлении деятельности компании, выходе на новый уровень поставок или реализации услуг, наличия активов у предприятия и правильной маркетинговой политике.

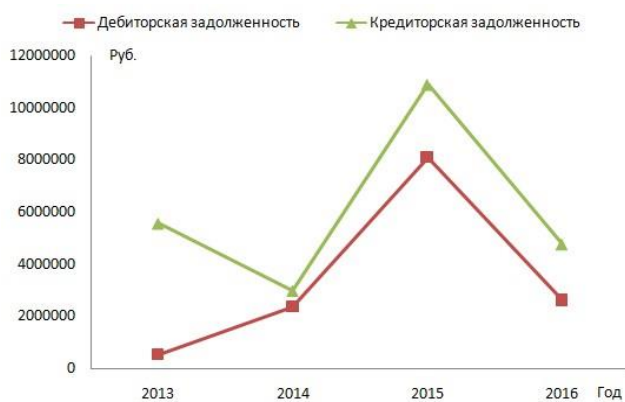


Рис. 5 Дебиторская и кредиторская задолженность

Важным проявлением динамической устойчивости предприятия служит её кредитоспособность. Организация является кредитоспособной, если у неё существуют предпосылки для получения кредита и способность своевременно возратить взятую ссуду с уплатой причитающихся процентов за счёт прибыли или других финансовых ресурсов. Снижение кредиторской задолженности в 2014 и 2016 году (рис. 5) говорит о своевременном выполнении договорных обязательств.

Показатель рентабельности характеризуют эффективность работы предприятия в целом, доходность различных направлений деятельности, окупаемость затрат и т.д. Он более полно, чем прибыль, отражают окончательные результаты хозяйствования, потому что их величина показывает соотношение эффекта с наличными или использованными ресурсами.

Как видно на рисунке 6 общая рентабельность предприятия до 2015 года увеличилась, а в 2016 снизилась и составила 6%. Однако, общая рентабельность в 2013 году имела отрицательное значение, что свидетельствовало об убыточности производства. Одни из возможных причин падения рентабельности - снижение рентабельности продаж и уменьшение оборачиваемости [2,3].

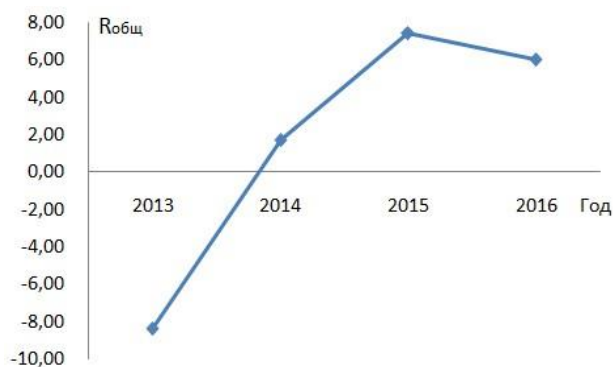


Рис. 6. Общая рентабельность предприятия

Несмотря на то, что компания переживает тяжелые времена, она имеет достаточно высокие шансы повысить свои показатели на рынке, об этом свидетельствует увеличение оборотных активов, что ведет к увеличению оборачиваемости совокупных активов и создает благоприятные условия для финансовой деятельности предприятия.

Данный анализ продемонстрировал, что информация, размещенная на портале «ЗАЧЕСТНЫЙБИЗНЕС», актуальна и применима для собрания первичных данных о предприятии и оценки финансово-хозяйственной деятельности предприятия.

Работа выполнена при финансовой поддержке РХТУ им. Д.И. Менделеева. Номер проекта Х032-2018.

Список литературы

1. Всероссийская система данных о компаниях и бизнесе [Электронный ресурс]. URL: <https://zachestnybiznes.ru> (Дата обращения: 19.03.2018).
2. Всероссийская система данных о компаниях и бизнесе. ООО «БИНАКОР-ХТ» финансовая отчетность [Электронный ресурс]. URL: https://zachestnybiznes.ru/company/ul/1107746392918_7707725653_OOO-BINAKOR-HT (Дата обращения: 21.03.2018).
3. Основы финансового менеджмента: [перевод с английского] / Джеймс С. Ван Хорн, Джон М. Вахович, мл. - Москва: Вильямс, 2010. - 1225 с.
4. Ликвидность. Расчет коэффициентов ликвидности [Электронный ресурс]. URL: https://www.audit-it.ru/finanaliz/terms/liquidity/calculation_of_liquidity.html (Дата обращения: 22.03.2018).

УДК 547.215:66.097.3

Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Левчук Н.А.

РАЗРАБОТКА КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РЕАКЦИИ ГИДРОИЗОМЕРИЗАЦИИ Н-ПЕНТАНА В 2-МЕТИЛБУТАН НА Pd –СОДЕРЖАЩИХ ЦЕОЛИТАХ ТИПА MOR**Писаренко Елена Витальевна**, д.т.н., профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва, e-mail: evpisarenko@mail.ru**Пonomarev Андрей Борисович** к.х.н., старший научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, Россия, Москва.**Левчук Наталья Андреевна** студент 4 курса бакалавриата, РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва.

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

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

ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН

Изучена кинетика реакции гидроизомеризации n-пентана в 2-метилбутан на Pd/MOR катализаторе. При проведении экспериментов в проточном реакторе варьировали в широком диапазоне состав сырья, температуру и давление в реакторе. Построена кинетическая модель реакции гидроизомеризации n-пентана в 2-метилбутан и методом максимального правдоподобия определены численные значения кинетических констант модели. Показана адекватность разработанной модели экспериментальным данным.

Ключевые слова: моделирование, кинетическая модель, оценка параметров, цеолиты, гидроизомеризация, n-пентан

DEVELOPMENT OF THE KINETIC MODEL OF N-PENTANE HYDROISOMERIZATION REACTION TO 2-METHYL BUTANE OVER Pd-CONTAINING ZEOLITES OF MORDENITE TYPEPisarenko E.V.¹, Ponomaryov A.B.², Levchuk N.A.¹¹D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia²Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia

The kinetics of n-pentane hydroisomerization reaction to 2-methylbutane over Pd / MOR catalyst was studied. While carrying out experiments in a plug flow reactor, the feed composition, temperature and pressure in the reactor were varied in a wide range. The kinetic model of n-pentane hydroisomerization reaction to 2-methylbutane has been developed. Numerical values of kinetic constants were estimated by maximum likelihood method. The adequacy of kinetic model developed to experimental data was proved.

Keywords: modeling, kinetic model, parameter estimation, zeolites, hydroisomerization, n-pentane

В настоящее время в связи с ухудшающейся экологической обстановкой в крупных мегаполисах мира для снижения вредных выбросов в окружающую среду все более жесткие требования предъявляются к качеству производимых моторных топлив. В частности, к содержанию в них алкилароматических углеводородов, которое должно составлять не более 20-30 % масс. Последнее обстоятельство приводит к увеличению доли разветвленных алкановых углеводородов в моторных топливах и как следствие этого к процессам их производства изомеризацией алканов. Поэтому целью данного исследования является установление стадийного механизма реакции гидроизомеризации n-пентана в 2-метилбутан, построение кинетической модели реакции гидроизомеризации n-пентана с последующей оценкой констант модели и проверкой ее адекватности экспериментальным данным.

Кинетические эксперименты проводились в проточном реакторе на катализаторе Pd/MOR с объемом загружаемого катализатора 0.01, 0.02, 0.04 л. Температура проведения реакции варьировалась в пределах от 603 до 640 К, давление от 10 до 30 атм,

мольное соотношение водород/n-пентан от 2.0 до 10.0, время контакта от 0.5 до 2 ч. Состав продуктового потока анализировался на выходе из реактора методом газовой хроматографии.

Предложен многостадийный механизм реакции, включающий 3 небоденштейновских вещества: n-пентан, водород и 2-метилбутан. В качестве ключевого вещества выбран n-пентан. Следовательно, система дифференциальных уравнений кинетической модели может быть представлена в виде одного дифференциального уравнения для n-пентана и двух алгебраических уравнений химических инвариантов для 2-метилбутана и водорода.

$$\frac{dP_{\text{НП}}}{d\tau} = - \frac{k_1(A \cdot P_{\text{НП}} - B)}{1 + (k_2 - k_3) \frac{P_{\text{НП}}}{P_{\text{H}_2}} + k_3 \frac{P_{2\text{МБ}}}{P_{\text{H}_2}}}, \quad (1)$$

$$A = \frac{1 + K_p}{K_p \cdot P_{\text{H}_2}} \quad B = \frac{P_{\text{НП}}^0 + P_{2\text{МБ}}^0}{K_p \cdot P_{\text{H}_2}}, \quad (2)$$

Начальные условия:

$$\tau = 0 \quad P_{НП}(0) = P_{НП}^0 \quad P_{2МБ}(0) = P_{2МБ}^0 \\ P_{H_2}(0) = P_{H_2}^0, \quad (3)$$

Где $P_{НП}$, $P_{2МБ}$, P_{H_2} – парциальные давления н-пентана, 2-метилбутана, водорода;

A – атм⁻¹,

B – безразмерная;

K_p – константа равновесия реакции гидроизомеризации н-пентана, безразмерная;

k_1 – кинетическая константа, атм/ч,

k_2, k_3 – безразмерные.

$$P_{2МБ} = (P_{НП}^0 + P_{2МБ}^0) - P_{НП}, \quad (4)$$

$$P_{H_2}(0) = P_{H_2}^0, \quad (5)$$

Система дифференциально-алгебраических уравнений (1)-(5) дополняется системой дифференциальных уравнений в вариациях по константам. При этом получаем общую систему дифференциальных уравнений в вариациях по константам. На основе вектор-функции решений последней для любого дискретного или непрерывного плана эксперимента, построенного в выбранной области экспериментирования G , оказывается возможным оценить точность вычисляемых по результатам эксперимента констант кинетической модели и точность прогнозирующих способностей самой модели.

Для оценки кинетических констант модели поставлена серия последовательно планируемых кинетических экспериментов. Кинетические константы модели оценивались по результатам эксперимента методом максимального правдоподобия (МП). Показано, что непланируемые эксперименты характеризуются значительными дисперсиями опытов, поэтому проводилось последовательное планирование экспериментов по критерию D-оптимальности, которое заключалось в постановке каждого последующего опыта в тех точках спектра плана эксперимента, которые характеризовались минимальным значением детерминанта дисперсионно-ковариационной матрицы оценок параметров модели

$$\Sigma_k^r = [M(\xi(\hat{x}))]^{-1}.$$

$$\det \Sigma_k^r(\xi^*) = \min_{\xi} \left| \Sigma_k^r(\xi(\hat{x})) \right|, \quad (6)$$

Процедура построения высокоточной кинетической модели осуществляется следующим образом. В области проведения опытов G задается стартовый план эксперимента и вероятностная мера $\xi(\hat{x})$, определяющая число поставленных опытов и условия их проведения.

Информационная матрица плана эксперимента $M(\xi(\hat{x}))$ представима в виде:

$$M(\xi(\hat{x})) = \sum_{u=1}^n \beta_u \omega(\hat{x}_u) \varphi(\hat{x}_u, k) \left[\varphi(\hat{x}_u, k) \right]^T, \quad (7)$$

где \hat{k} – вектор кинетических констант; \hat{x} – вектор управляющих переменных; $\varphi(\hat{x}, k)$ – вектор частных производных отклика η модели по кинетическим константам n – число опытов спектра плана $\xi(\hat{x})$; $\omega(\hat{x}_u)$ – вес \hat{x}_u -го наблюдения.

При этом дисперсия отклика $\sigma_{\eta}^2(\hat{x}, k)$ вычисляется по уравнению:

$$\sigma_{\eta}^2(\hat{x}, k) = \varphi^T(\hat{x}, k) (M(\xi(\hat{x})))^{-1} \varphi(\hat{x}, k), \quad (8)$$

где матрица $\Sigma(\xi(\hat{x})) = (M(\xi(\hat{x})))^{-1}$ – дисперсионно-ковариационная матрица вектора оценок констант \hat{k} кинетической модели.

Для определения точности полученных оценок констант и оценки точности прогноза по модели рассчитываются дисперсионно-ковариационная матрица оценок констант модели, а также дисперсия отклика модели. Установлено, что детерминант информационной матрицы значимо отличается от нуля, а недиагональные элементы корреляционной матрицы K значимо отличаются от единицы. Следовательно, доказано, что все три кинетические константы k_1, k_2, k_3 допускают оценку. Показано, что дисперсия наблюдений, оцененная по модели не превышает дисперсии наблюдений, определенной экспериментально.

УДК 65.011.56

Ремизов М.Ю., Егоров А.Ф.

ВЫБОР SCADA-СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА АНАЛИЗА ИЕРАРХИЙ

Ремизов Максим Юрьевич, магистрант 1 курса факультета информационных технологий и управления РХТУ им. Д.И. Менделеева, e-mail: maxremz@gmail.com

Егоров Александр Фёдорович, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой компьютерно-интегрированных систем в химической технологии РХТУ им. Д.И. Менделеева

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

В работе проведен анализ SCADA-систем и методов многокритериальной оптимизации. Рассмотрены их функции и характеристики. Представлены результаты по выбору наилучшей SCADA-системы методом анализа иерархий. Проведен сравнительный анализ результатов для выбора наилучшей SCADA-системы.

Ключевые слова: SCADA-системы, многокритериальная оптимизация.

SELECTION OF SCADA-SYSTEMS USING THE HIERARCHY ANALYSIS METHOD

Remizov M.Y., Egorov A.F.

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

In this work the analysis of SCADA-systems and methods of multicriteria optimization is made. Functions and characteristics of study objects are considered. The results of choosing the best SCADA-system by the method of hierarchy analysis are presented. Comparative analysis of the results for choosing the best SCADA-system is made.

Keywords: SCADA-systems, multicriteria optimization.

Введение. Современные автоматизированные системы управления представляют собой многоуровневые человеко-машинные системы, на одном из уровней которых используется SCADA-системы (Supervisory Control and Data Acquisition) – системы сбора данных и оперативного диспетчерского управления.

В настоящее время известно достаточно большое количество как зарубежных, так и отечественных фирм по разработке SCADA-систем. В связи с этим возникает проблема выбора оптимальной SCADA-системы, но при этом существует ряд трудностей, связанных с тем, что отдельные программные продукты приходится сравнивать сразу по нескольким критериям, таким как надежность, техническая поддержка и т. д.

В таких условиях для выбора наилучшей SCADA-системы необходима разработка специальных алгоритмов, что и является целью данной работы.

Анализ отечественных и зарубежных SCADA-систем. Основными функциями SCADA-систем являются: сбор данных от контроллеров; первичная обработка данных; архивизация данных; представление трендов измеряемых величин; сообщение о неисправностях и авариях; печать протоколов и отчетов; ввод в систему команд операторов; связь с другими пультами операторов; решение прикладных задач на базе текущих данных.

К SCADA-системам предъявляются следующие основные требования: надежность системы; безопасность управления; точность

обработки и представления данных; простота расширения системы.

Системы, выбранные для сравнения, представлены в таблице 1. [1,2,3]

Таблица 1. SCADA-системы

SCADA	Фирма-изготовитель	Страна
InTouch	Wonderware	США
iFIX	Intellution	США
Genesis32	Iconics	США
Monitor Pro	Schneider Electric	Франция
Trace Mode	AdAstra	Россия, г. Москва

Решение задачи и анализ результатов выбора SCADA-системы. В соответствии с методом анализа иерархий для выбора наилучшей SCADA-системы разработан следующий алгоритм:

1. Решение задачи выбора оптимальной SCADA-системы следует начинать с декомпозиции проблемы. Была составлена иерархия критериев, по которым производили сравнение, представленная на рисунке 1.

2. На каждом уровне иерархии на основе суждений эксперта строятся матрицы попарных сравнений. Элементы иерархии сравниваются по специальной девятибалльной шкале. Матрица представлена в таблице 2.

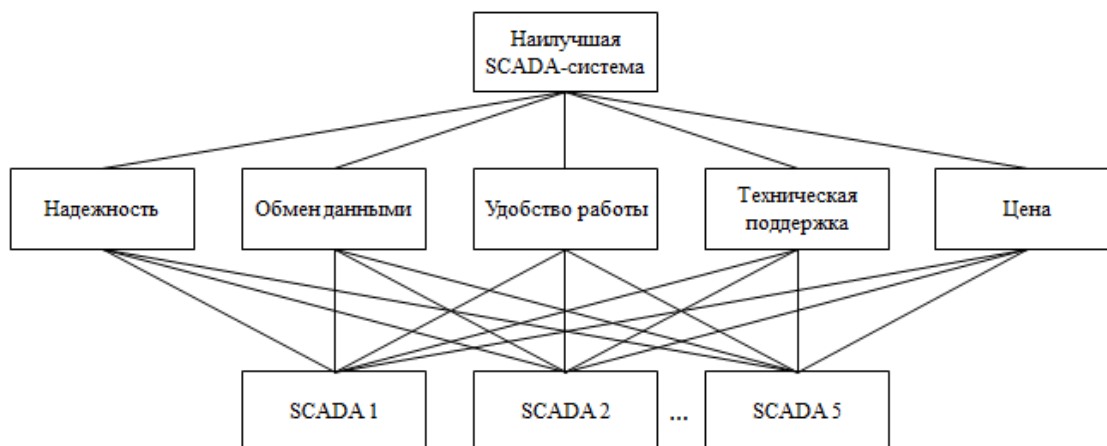


Рис.1. Иерархия задачи выбора SCADA-системы.

Таблица 2. Матрица попарных сравнений.

Производительность	Trace Mode	Monitor Pro	InTouch	iFix	Genesis32
Trace Mode	1	a ₁₂	a ₁₃	a ₁₄	a ₁₅
Monitor Pro	1/ a ₁₂	1	a ₂₃	a ₂₄	a ₂₅
InTouch	1/ a ₁₃	1/ a ₂₃	1	a ₃₄	a ₃₅
iFIX	1/ a ₁₄	1/ a ₂₄	1/ a ₃₄	1	a ₄₅
Genesis32	1/ a ₁₅	1/ a ₂₅	1/ a ₃₅	1/ a ₄₅	1

3. Для каждой матрицы попарных сравнений рассчитывается собственный вектор (формула 1).

$$\bar{w} = \begin{bmatrix} \sqrt[n]{a_{11} a_{12} \dots a_{1n}} \\ \sqrt[n]{a_{21} a_{22} \dots a_{2n}} \\ \vdots \\ \sqrt[n]{a_{n1} a_{n2} \dots a_{nn}} \end{bmatrix} \quad (1)$$

4. Вектор приоритетов альтернатив относительно какого-либо критерия вышестоящего уровня иерархии получается нормированием собственного вектора соответствующей матрицы попарных сравнений.

5. Проводится оценка согласованности суждений эксперта путем расчета трех характеристик: собственного значения матрицы: λ_{\max} , далее рассчитывается индекс согласованности (ИС) матрицы попарных сравнений, после чего берется отношение ИС к среднему случайному индексу (СИ) для матрицы того же порядка. Полученное значение называется отношение согласованности матрицы (ОС) (формула 2).

$$ОС = \frac{ИС}{СИ} \quad (2)$$

Приемлемым считается значение ОС меньше или равное 0,10

6. В случае если ОС матрицы больше 0,10 эксперту следует пересмотреть суждения [4,5,6]

Таким образом, решением задачи является вектор приоритетов альтернатив относительно верхнего уровня иерархии, на основании которого лицу, принимающему решение, рекомендуется выбрать ту альтернативу, приоритет которой максимален.

По такому алгоритму сравнивались все критерии и подкритерии. Расчет производился с помощью табличного процессора Microsoft Excel. После сравнения программных продуктов по всем критериям, был произведен выбор наилучшей SCADA-системы

Результаты выбора наилучшей SCADA-системы представлены в таблице 3.

Таблица 3. Приоритеты выбора SCADA-систем.

Приоритеты выбора SCADA-систем							
	Надежность	Обмен данными	Удобство работы	Тех. Поддержка	Цена	Вектор	Приоритет
Trace Mode	0,17	0,434	0,577	0,555	0,229	0,212	0,261
Monitor Pro	0,175	0,140	0,061	0,108	0,056	0,131	0,161
InTouch	0,273	0,154	0,064	0,059	0,071	0,188	0,231
iFIX	0,211	0,159	0,185	0,147	0,189	0,159	0,195
Genesis32	0,171	0,113	0,102	0,131	0,454	0,123	0,152
Сумма						0,813	
ИС	0,034	0,016	0,017	0	0,0016		
Отношение согласованности						0,021	

Анализ результатов выбора наилучшей SCADA-системы представлен на рисунке 2.

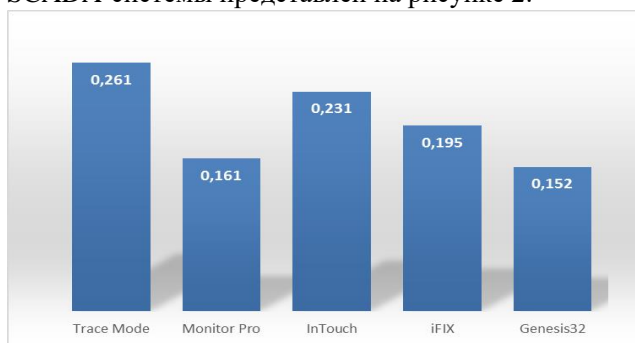


Рис. 2. Ранжирование альтернатив при выборе наилучшей SCADA-системы.

Результаты расчета на основе заданных матриц попарных сравнений показывают, что оптимальной является отечественная SCADA-система Trace Mode. На диаграммах видно, что этот программный продукт имеет максимальный приоритет при выборе наилучшей SCADA-системы.

Список литературы

1. SCADA системы для АСУ ТП. SCADA-SOFTLOGIC-MES-EAM [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.adastra.ru/> (дата обращения 9.03.2018).
2. ICONICS GENESIS32 Версия 6.0 Начальные сведения и ускоренное ознакомление с основными подсистемами [Электронный ресурс]. - Режим доступа: ftp://ftp.prosoft.ru/pub/Software/ICONICS/GEN32/Russian/Documentation/V6/GettingStarted/Gen32_GetStarted_ver6.pdf (дата обращения 10.03.2018).
3. Wonderware FactorySuite InTouch Руководство пользователя [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://intouch.ru/support/InTouchUG.pdf> (дата обращения 10.03.2018).
4. Т. Саати. Принятие решений. Метод анализа иерархий: Пер. с англ., - М.: Радио и связь, 1993. - 320 с
5. О. И. Ларичев. Теория и методы принятия решений, а также Хроника событий в Волшебных странах: Учебник. - М.: Логос, 2000. - 296 с.
6. Н. П. Деменков. Нечеткое управление в технических системах, М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2005. - 200 с.

УДК 004.021.13

Захаренкова Н.Ю., Семенов Г.Н

РАЗРАБОТКА БАЗЫ ДАННЫХ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ БИБЛИОТЕКИ ПРЕДПРИЯТИЯ НА ОСНОВЕ СВОБОДНОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

Захаренкова Наталья Юрьевна, студентка 4 курса факультета информационных технологий и управления;
Семенов Геннадий Николаевич, к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий, e-mail: sem1237@yandex.ru;
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20

Предложена концептуальная модель научно-технической библиотеки предприятия, в которой хранятся отчеты о выполненных научно-исследовательских работах. Разработана информационно-логическая модель базы данных, позволяющая выполнять пользовательские запросы. Предложен набор свободно распространяемого программного обеспечения, позволяющий реализовать базу данных и приложения при минимальных затратах для предприятия.

Ключевые слова: база данных, электронная библиотека, информационно-логическая модель, свободно распространяемое программное обеспечение.

DEVELOPMENT OF THE DATABASE AND APPLICATIONS OF THE SCIENTIFIC AND TECHNICAL ELECTRONIC LIBRARY OF THE ENTERPRISE ON THE BASIS OF FREE SOFTWARE

Zakharenkova N. Yu., Semenov G. N.
D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

A conceptual model of the scientific and technical library of the enterprise is proposed, in which the reports on the performed scientific research are kept. An information-logical model of the database has been developed that allows performing user requests. A set of free software is offered, which allows to implement the database and applications with minimum costs for the enterprise.

Keywords: database, electronic library, information-logical model, free software.

Введение

В научных центрах важнейшим звеном по переработке и предоставлению информации являются информационно-библиотечные, научные интеллект-центры. Они берут на себя функции по структуризации и упорядочиванию накопленной информации для наиболее быстрого предоставления ее по запросу пользователей. Информационный центр связывает приоритеты своей деятельности с созданием условий полного и оперативного обеспечения информацией научных работников на основе прогрессивных информационно-коммуникационных технологий. Эффективность научной работы научно-исследовательской организации находится в прямой зависимости от качества информационного обеспечения.

Одним из основных источников научно-технической информации при выполнении научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ является фонд научно-технических изданий (научно-техническая библиотека) организации, в котором хранятся отчеты о ранее выполненных научно-исследовательских работах, технические задания, проектная и конструкторская документация на опытно-конструкторские работы, ГОСТы, диссертации, монографии, сборники статей, конференций и другие документы. Данные документы представлены в бумажном виде и их поиск осуществляется посредством алфавитного

каталога, что существенно затрудняет поиск требуемой информации, а зачастую приводит к тому, что искомые документы остаются не найденными в отведенное время.

Имеющиеся на рынке программного обеспечения продукты, предназначенные для создания и обеспечения функционирования электронных библиотек, не учитывают особенностей научно-технических библиотек научных организаций, основным элементом хранения которых является отчетная научно-техническая документация о научно-исследовательских и опытно-конструкторских работах, и не обеспечивают ее эффективный поиск и анализ. Перспективным направлением повышения качества информационного обеспечения научной организации является создание электронной научно-технической библиотеки, обеспечивающей оперативный поиск (в том числе по содержанию документов) и эффективный доступ к ресурсам библиотеки.

В государственных учреждениях Российской Федерации были введены ограничения на импортное программное обеспечение. В связи с этим в данной работе предлагается проект базы данных (БД) для электронной библиотеки предприятия с использованием свободно распространяемого программного обеспечения

Процесс разработки БД представляется следующими этапами:

1. определение и анализ требований к электронной библиотеке;
2. разработка концептуальной модели электронной библиотеки;
3. разработка инфологической и даталогической моделей БД;
4. рабочее проектирование БД и приложения.

Для определения требований к базе данных был проведен анализ функционирования научно-технической библиотеки, а также проведен анализ особенностей документов, хранящихся в ней. Технологии электронных хранилищ документов, реализованные с помощью аппаратно-программных средств, обеспечивают высоконадежное хранение больших объемов информации (порядка терабайт) с возможностью их резервного копирования,

поддержку различных форматов представления электронных документов, фиксирование связей между документами, разграничение прав доступа к ресурсам.

Таким образом, информационная система электронной библиотеки, содержащая отчеты по научно-исследовательским работам (НИР) должна обеспечивать централизованное хранение результатов, полученных в научно-исследовательских работах, в электронном виде, их анализ, а также предоставление оперативного, качественного доступа пользователей к указанным НИР.

Концептуальная модель

Предлагаемая концептуальная модель электронной библиотеки отчетов по НИР основана на типовой информационной системе хранилищ документов (рисунок 1).



Рисунок 1. Концептуальная модель электронной библиотеки отчетов результатов НИР

Предлагаемая модель включает в себя подсистемы:

- подсистема ввода документов в архив (предназначенная для ввода документов в архив и сохранения электронных образцов документов);
- подсистема хранения документов, состоящую из архива долгосрочного хранения (предназначенную для хранения документов, которым более 10 лет) и оперативного архива (архив отчетов результатов НИР за последние 10 лет) проект базы данных используется в этой подсистеме (оперативный архив);
- подсистема доступа к хранилищу данных (данная подсистема должна обеспечивать доступ к учетной информации, а также к просмотру электронных копий отчетов результатов НИР, а также обеспечивать поиск по определенным параметрам);
- подсистема администрирования должна обеспечивать удаление и добавление пользователей, ведение классификаторов и ряд других традиционных операций.

Инфологическая и даталогическая модели

Анализ особенностей документов показал основные сущности и их атрибуты для проектирования инфологической модели БД. По результатам анализа функционирования научно-технической библиотеки был выявлен ряд наиболее встречающихся запросов пользователей:

- вывод списка отчетов определенного автора (список научных трудов);
- по конкретной организации-разработчика (например, для конкурсных рекомендаций);
- вывод отчетов определенного шифра;
- вывод отчетов одного года;
- вывод отчета по определенному этапу;
- поиск по ключевым словам.

Таким образом, анализ предметной области и запросы пользователей легли в основу разработки инфологической модели данных, состоящей из сущностей с их атрибутами и связей между сущностями (рисунок 2).

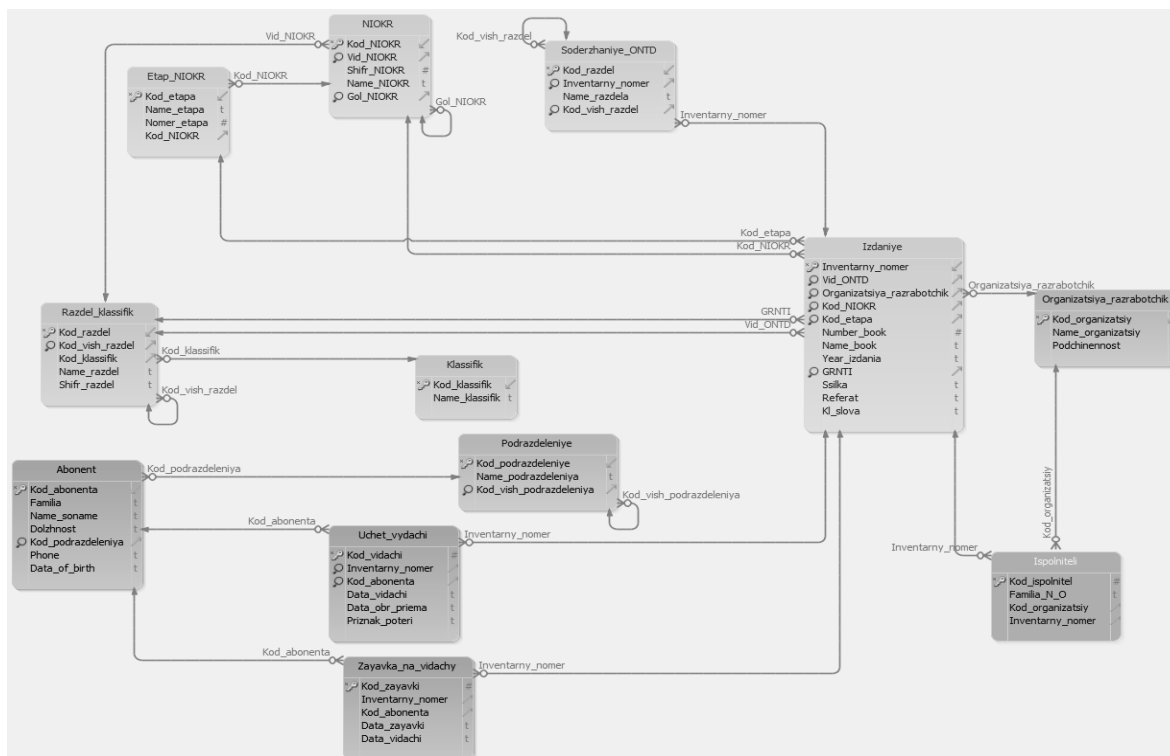


Рисунок 2. Инфологическая модель базы данных электронной библиотеки отчетов результатов НИР

Для разработки даталогической модели БД в рамках программного импортозамещения коммерческих СУБД была выбрана свободно-распространяемая СУБД Postgres Pro Standard, удовлетворяющая требованиям высокоэффективных ИС [1]. Postgres Pro – Российская СУБД, разработанная компанией Postgres Professional на основе свободно-распространяемой СУБД PostgreSQL. Postgres Pro входит в реестр российского программного обеспечения поставляется для операционных систем Linux и Windows. PostgreSQL не просто реляционная, а объектно-реляционная СУБД. Это даёт некоторые преимущества над другими СУБД с открытым исходным кодом, а именно поддержка пользовательских объектов и их поведения.

Структура даталогической модели для выбранной СУБД практическая не отличается от инфологической модели.

Средства разработки

Средствами разработки приложений для БД также выбрано свободно-распространяемое и условно свободно-распространяемое программное обеспечение.

Для разработки веб-приложения БД в среде клиент-сервер был выбран активно развивающийся в настоящее время язык программирования PHP.

Для построения инфологической и даталогической моделей базы данных

использовалась программное средство проектирования баз данных DbSchema (бесплатная пробная версия 7.4.14), которое представляет собой клиентский графический интерфейс клиента базы данных и конструктор диаграмм с интерактивными диаграммами.

В качестве СУБД была выбрана современная свободно распространяемая СУБД PostgreSQL версия 8.4 (размер БД неограничен), обладающая высокой эффективностью полнотекстового поиска, а также возможностью хранения документов в самой базе данных.

Для создания веб-интерфейса использовалась программное средство для СУБД PostgreSQL PHP Generator Lite Edition (версия 17.10). Данное свободное программное средство позволяет создавать веб-приложения с профессиональным качеством для баз данных PostgreSQL без какого-либо программирования. Это позволило сгенерировать основу кода под спроектированную базу данных, а также обеспечить некоторые функции такие как, полнотекстовый поиск и ряд других.

Литература

1. Импортозамещение программного обеспечения в России [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://zimport.ru/importozameshnenie-v-it/> (Дата обращения 20.05.2017).

УДК678.742

Климашева Е.И., Кладовщикова О.И., Тихонов Н.Н., Мусина А.Р.

КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ТРУБ НА ОСНОВЕ СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА**Климашева Екатерина Ивановна**, студентка 2 курса магистратуры факультета нефтегазохимии и полимерных материалов; e-mail: black94-08@bk.ru**Кладовщикова Ольга Игоревна**, студентка 2 курса магистратуры факультета нефтегазохимии и полимерных материалов; e-mail: olgaviniyard@yandex.ru;**Тихонов Николай Николаевич**, к.х.н., доцент кафедры переработки пластмасс; e-mail: nik270651@yandex.ru;**Мусина Алина Расимовна**, студентка 4 курса факультета нефтегазохимии и полимерных материалов; e-mail: alina.rasimovna@yandex.ru;

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

Целью данной работы являлась разработка полимерных композитов на основе полиэтилена высокой плотности, сверхвысокомолекулярным полиэтиленом, а также модифицирование полученных смесей наноразмерными модификаторами. Установлено, что увеличение концентрации сверхвысокомолекулярного полиэтилена в полимерной смеси снижает коэффициент трения, а модификация смеси полиэтилена высокой плотности-сверхвысокомолекулярного полиэтилена наномодификаторами увеличивает степень кристалличности полимерной композиции.

Ключевые слова: сверхвысокомолекулярный полиэтилен, полимерные нанокompозиты, полиэтилен высокой плотности.

COMPOSITE MATERIALS BASED ON ULTRA-HIGH-MOLECULAR-WEIGHT POLYETHYLENE FOR PIPES PRODUCTION

Klimasheva E.I., Kladoschikova O.I., Tihonov N.N., Musina A.R.

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

The aim of this work was the development of polymeric composites on the basis of high density polyethylene, ultra-high molecular-weight polyethylene, as well as modification of the resulting composites with nanoscale modifiers. It was established that that increasing the concentration of UHMWPE in the polymer blend decreases the friction coefficient, and modification of a mixture of UHMWPE and HDPE with nanomodifiers increases the crystallinity of the composition.

Keywords: ultra-high-molecular-weight polyethylene, high density polyethylene, polymer nanocomposites,

Сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ) является уникальным полимером, для которого характерна высокая ударная вязкость, высокое сопротивление истиранию и растрескиванию, а также нулевое водопоглощение. Коэффициент трения скольжения СВМПЭ превосходит сталь [1]. Коррозионная стойкость делает его эффективным в сопротивлении износу даже при температурах ниже нуля. Однако его широкое использование в настоящее время ограничено из-за отсутствия эффективных технологий переработки его в изделия. Одним из путей решения этой проблемы является создание полимерных композитов на основе смеси СВМПЭ с другими полимерами, в частности полиэтиленом высокой плотности [2]. Способность полиэтилена перерабатываться всеми доступными методами позволяет получать на основе его смесей с СВМПЭ технологические материалы с улучшенным комплексом эксплуатационных свойств.

В качестве основных объектов исследований в работе использованы СВМПЭ с молекулярной массой 4,2 млн и ПЭВП марки 273-83. СВМПЭ вводили в полиэтилен высокой плотности в концентрациях от 0 до 30 масс. %.

Известно, что у СВМПЭ отсутствует текучесть при условиях переработки промышленных

термопластов [3]. Поэтому интерес представляло исследование технологических свойств композитов ПЭВП – СВМПЭ. Оценка технологических свойств проводилась по величине показателя текучести расплава полимерных смесей при температуре 230°C. Сравнительный анализ полученных результатов (рис.1) показывает, что при увеличении содержания СВМПЭ в составе композита более 20%, ПТР падает ниже 0,1 г/10 мин. Поэтому увеличение содержания СВМПЭ свыше 30% нецелесообразно, поскольку переработка полимерных материалов с такими реологическими характеристиками сопряжена с высокими энергозатратами.

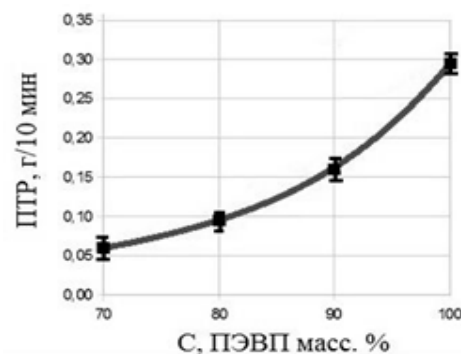


Рис.1. Зависимость показателя текучести расплава композита от содержания СВМПЭ.

Влияние СВМПЭ на деформационно-прочностные характеристики полимерных композитов оценивали по изменению предела текучести и относительного удлинения при растяжении. Результаты измерений показывают, что введение СВМПЭ в ПЭВП в исследуемом интервале концентраций не приводит к заметному изменению предела текучести при растяжении. В то время как зависимость относительного удлинения от содержания СВМПЭ в ПЭВП имеет экстремальный характер с максимумом в области 10 масс. % СВМПЭ. Относительное удлинение увеличивается с 200% до 300% (рис.2). Дальнейшее увеличение содержания СВМПЭ приводит к снижению относительного удлинения.

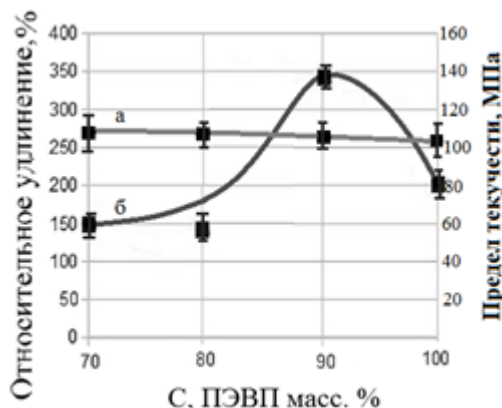


Рис.2. Зависимость деформационно-прочностных характеристик композита от содержания СВМПЭ (а — предел текучести, б — относительное удлинение)

Также было интересно узнать влияние содержания СВМПЭ, характеризующегося низким коэффициентом трения, на коэффициент трения полученных композиций. Трибометрические исследования, проводимые методом абразивного трения (рис.3), показали, что модификация ПЭВП СВМПЭ приводит к значительному снижению коэффициента трения во всем исследуемом диапазоне концентраций СВМПЭ. С увеличением содержания СВМПЭ от 0 до 30 масс. % коэффициент трения уменьшается почти в 3 раза с 0,32 до 0,12.

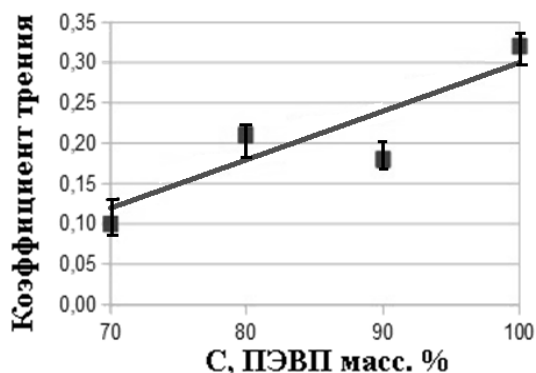


Рис.3. Зависимость коэффициента трения композита от содержания СВМПЭ

Сравнительный анализ полученных результатов исследования полимерных смесей на основе ПЭВП и СВМПЭ показывает, что полученные материалы

имеют значительно более высокий комплекс свойств по сравнению с ПЭВП. Однако довольно низкая текучесть таких материалов не позволяет перерабатывать их эффективно современными методами экструзии и литья под давлением. Использование традиционных методов повышения текучести полимеров, таких как пластификация или введение смазок может привести к ухудшению деформационно-прочностных и эксплуатационных характеристик полимерных композитов. Поэтому в настоящей работе для регулирования свойств полученных материалов был использован метод структурной модификации наноразмерными наполнителями различной химической природы и формы. Содержание нанонаполнителя варьировали при проведении исследования от 0 до 0,5 масс. %.

Наномодификаторы обладают большой площадью поверхности и большой поверхностной энергией, затрудняющей равномерное распределение их в полимерной матрице. Для того чтобы обеспечить эффективность воздействия наномодификаторов на структуру и свойства полимера в данной работе был разработан специальный метод введения их в композицию.

Технологические свойства модифицированных полимерных смесей изучены в работе методом капиллярной вискозиметрии на вискозиметре постоянных давлений ИИРТ-А по величине показателя текучести расплава. Сравнительный анализ результатов исследований, показывает, что зависимость показателя текучести расплава полимерных композитов от содержания органобентонита имеет экстремальный характер с максимумом в области 0,1 масс. % модификатора (рис.4).

Оценка влияния наномодификаторов на деформационно-прочностные свойства полимерных композитов была проведена по результатам испытаний при растяжении по величине предела текучести и относительного удлинения при разрыве. Сравнительный анализ данных показывает, что модификация полимерных композитов ПЭВП-СВМПЭ нанодисперсными наполнителями не оказывает существенного влияния на прочность, но значительно увеличивает относительное удлинение исследуемого полимерного композита при содержании органобентонита 0,1 масс. % от 148 до 311%. Дальнейшее увеличение содержания органобентонита снижает этот показатель.

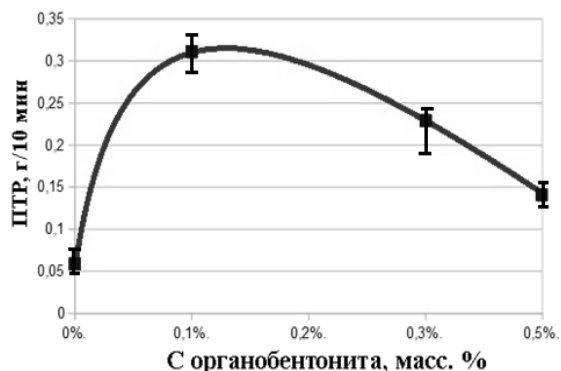


Рис.4. Зависимость показателя текучести расплава композита от содержания органобентонита

Применение СВМПЭ в узлах трения обусловлено прежде всего его низким коэффициентом трения и крайне низкой его истираемостью по сравнению с ПЭВП. Совмещение СВМПЭ с ПЭВП приводит к изменению его фрикционных характеристик. Поэтому в работе было исследовано влияние наномодификаторов на фрикционные свойства изучаемых полимерных композитов. Установлено, что зависимость коэффициента трения полимерного композита (ПК) от содержания наноструктурного наполнителя имеет экстремальный характер с максимумом в области 0.3 масс. %.

Перспективным направлением применения полимерных композитов ПЭВП-СВМПЭ может явиться изготовление труб для перекачки сырой нефти и нефтепродуктов. Однако использование для этих целей как ПЭВП, так и СВМПЭ сопряжено со значительными затратами энергии, поскольку они хорошо смачиваются парафинами. Поэтому представляет интерес оценка влияния состава композиций на смачивание их сырой нефтью. Оценка этого эффекта проводилась по величине угла смачивания нефтью поверхности пластинки из ПК. Результаты исследования представлены на (рис.5).

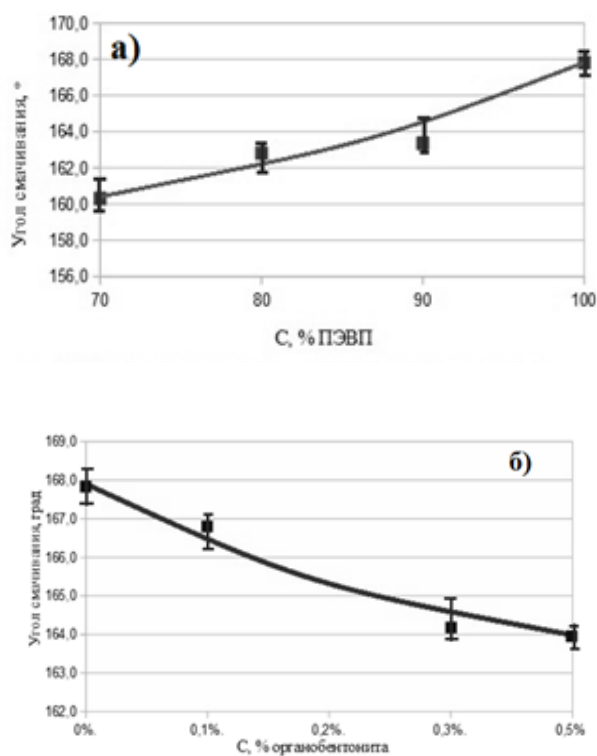


Рис.5. Значения смачиваемости композиций в зависимости от содержания: а) СВМПЭ, б) органобентонита

Из них видно, что увеличение содержания в композиции как СВМПЭ, так и органобентонита приводит к снижению величины угла смачивания, что указывает на изменение поверхностного натяжения нефти на границе раздела с модифицированным ПК.

Структурообразование в смесях полимеров при введении наноразмерных наполнителей является важным фактором, определяющим их влияние на полимеры. В данной работе структурные изменения при модификации полимеров наноразмерными наполнителями изучали методами ДСК и термомеханики. Анализ полученных результатов показывает, что модификация ПК ПЭВП-СВМПЭ органобентонитом приводит к увеличению содержания кристаллической фазы (степени кристалличности), поскольку тепловые эффекты плавления и кристаллизации увеличиваются. Использование в качестве модификатора углеродных нанотрубок, наоборот, приводит к снижению тепловых эффектов плавления и кристаллизации, степень кристалличности уменьшается. Представляет интерес изменение деформационной теплостойкости изучаемого ПК при его модификации наносистемами. Так, введение в смесь ПЭВП-СВМПЭ 0,3 масс.% органобентонита приводит к уменьшению величины деформации по результатам термомеханических испытаний при температуре 100°C почти в 2,5 раза. Это может свидетельствовать об увеличении деформационной теплостойкости таких материалов, что позволяет рекомендовать их также для изготовления труб, предназначенных для транспортировки горячей воды.

Список литературы

1. Properties of ultra high molecular weight polyethylene (UHMWPE) / Murtfeldt H. J. // Eng. Plast., 1990. 3. № 6.
2. Галибеев С.С., Хайруллин Р.З., Архиреев В. П., Сверхвысокомолекулярный полиэтилен. Тенденции и перспективы / Казанский национальный исследовательский технологический университет (Казань), 2008.
3. Нгуен С.Т., Панин С.В., Корниенко Л.А., Антифрикционный материал на основе СВМПЭ при добавлении MoS₂ / Национальный исследовательский Томский политехнический университет (Томск), 2014.

УДК 66.023

Дмитриев Е.А., Тарасова Т. А., Кузнецова И. К., Кабанов О.В.

ИЗУЧЕНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ КОЛОННЫХ АППАРАТОВ С ПОМОЩЬЮ МОДЕРНИЗИРОВАННОГО МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНОГО ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА С АВТОМАТИЗИРОВАННЫМ СБОРОМ ИНФОРМАЦИИ

Дмитриев Евгений Александрович, (1952-2017) д.т.н., профессор, заведующий кафедрой процессов и аппаратов химической технологии РХТУ им. Д. И. Менделеева 2004-2017 гг.

Тарасова Татьяна Александровна, к.т.н., доцент кафедры процессов и аппаратов химической технологии РХТУ им. Д. И. Менделеева, e-mail: artana@bk.ru;

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

125047, Москва, Миусская площадь, дом 9

Кузнецова Ирина Константиновна, к.т.н., доцент кафедры процессов и аппаратов химической технологии РХТУ им. Д. И. Менделеева

Кабанов Олег Викторович, доцент кафедры процессов и аппаратов химической технологии РХТУ им. Д. И. Менделеева.

Отработана методика наглядного наблюдения особенностей газожидкостных турбулентных течений в барботажном слое на тарелке колонного аппарата модернизированного многофункционального комплекса.

Использование программного комплекса позволило установить факт наличия незначительных колебаний перепада давления на тарелке даже при постоянных расходах фаз, а также получить графическую иллюстрацию перехода от нормального режима работы тарелки к резкому увеличению уноса.

Исследования проводились при работе тарелок в разных режимах и были отмечены точки перехода от одного режима работы тарелки к другому. Была построена измерительная характеристика прибора, отображающего перепад давления на тарелке.

Ключевые слова: газожидкостные течения, колонные аппараты, работа тарелки, гидродинамические режимы, ситчатая тарелка, барботаж.

STUDY OF HYDRODYNAMICS OF COLUMN MACHINES WITH A MODERNIZED MULTIFUNCTION HYDRODYNAMIC COMPLEX WITH AUTOMATED DATA COLLECTION

E.A. Dmitriev, T.A. Tarasova, I.K. Kuznezova, O.V.Kabanov

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

The technique of visual observation of the features of gas-liquid turbulent flows in the bubbling layer on the plate of the column apparatus of the modernized multifunctional complex has been worked out.

The use of the software complex made it possible to establish the fact that there are insignificant fluctuations in the pressure drop on the plate even at constant phase outlays, and also to obtain a graphic illustration of the transition from the normal operation mode of the plate to a sudden increase in entrainment.

The studies were carried out when the plates were operated in different modes and the transition points from one operation mode of the plate to the other were noted. The measuring characteristic of the device displaying the pressure drop on the plate was constructed.

Keywords: gas-liquid flows, column equipment, plate work, hydrodynamic regimes, sieve plate, bubbling.

Современные системы обучения призваны формировать у выпускников технических университетов соответствующие компетенции, которые необходимы для разработки и внедрения новых технологий, что является основным направлением развития производства. Поэтому в технических ВУЗах все большее внимание уделяется созданию и внедрению в учебный процесс информационно-компьютерных систем, стандартного программного обеспечения и пакетов прикладных программ. Разрабатываются

автоматизированные системы контроля знаний, системы проектирования и научных исследований, а также виртуальные лабораторные практикумы. Последние играют особенно важную роль в подготовке и повышении квалификации инженера, поскольку позволяют имитировать реальный процесс, происходящий внутри химико-технологических схем. Достоинством таких лабораторий является то, что они могут охватить весь комплекс вопросов и задач проектирования и эксплуатации химических производств, представить

все возможные комбинации оборудования и технических параметров процессов. Однако данные системы имеют и недостатки: не возникает прямых связей с реальными процессами и аппаратами, нет представления о масштабе явлений и т.д.

В целях сочетания реального и виртуального процессов на кафедре процессов и аппаратов химической технологии РХТУ им Д.И. Менделеева был создан многофункциональный лабораторный комплекс для проведения экспериментов по гидродинамике одно- и двухфазных потоков [1].

Комплекс оснащен приборами и датчиками для измерения параметров и регулирования процесса, которые выведены на пульт управления. Одновременно данные этих приборов отражаются на виртуальных приборах в компьютерной программе, что позволяет получать и обрабатывать данные экспериментов в виде графиков и таблиц. Такая организация процесса позволяет визуально наблюдать протекание реального и виртуального гидродинамического процесса. В комплексе предусмотрена возможность выделения контуров для проведения семи экспериментальных работ. Во всех работах измерения можно проводить как с помощью обычных измерительных приборов, так и с помощью виртуальных приборов.

Зная о широком применении колонных аппаратов в химической промышленности, в комплекс был введен колонный аппарат с ситчатыми тарелками и экспериментально определены диапазоны устойчивой работы тарелки. После отработки методик измерения данных с внешнего оборудования, контроля измеряемых параметров в ходе проведения экспериментов и получения воспроизводимых данных была проведена модернизация комплекса.

Модернизация позволила использовать комплекс для отработки методики наглядного наблюдения особенностей газожидкостных турбулентных течений в барботажном слое на тарелке колонного аппарата.

Использование программного комплекса позволило установить, что даже при постоянных расходах фаз наблюдаются незначительные колебания перепада давления на тарелке, с амплитудой около 0,03 кПа. Использование же только реального прибора измерения перепада давления не позволяет установить этот факт т. к. таковой прибор не обладает достаточной точностью измерения. Позже выяснилось, что данные колебания носят характер синусоиды и могут быть вызваны крупномасштабными

турбулентными пульсациями в барботажном слое на тарелке. Ниже на рис.1 приведено графическое отображение данного явления в программном комплексе *LabVIEW*:

Скачок кривой в начале графика соответствует переходу от нормального режима работы тарелки к резкому увеличению уноса. Затем, после снижения расхода газа до нормального режима, в течение почти 6-ти минут расход газа не менялся, однако сопротивление тарелки изменялось колебательно с небольшой амплитудой.

Данное явление описано в литературе [2-4] при исследовании особенностей газожидкостных турбулентных течений в барботажном слое.

Следует также заметить, что показания данных в программной среде *LabVIEW* практически совпадают с показаниями приборов. Разве что, программа обладает небольшой инерционностью, в результате чего возникает запаздывание отображения параметров (около 3-4 секунд).

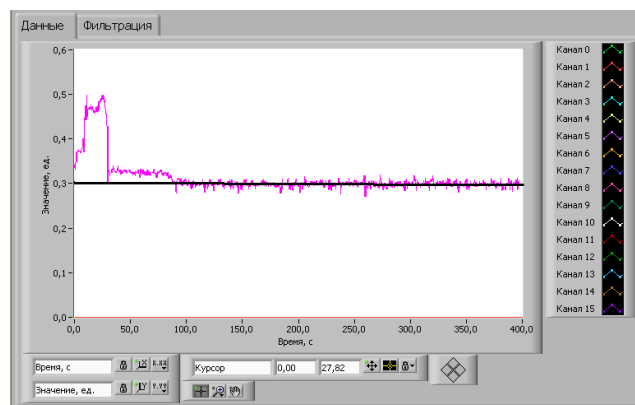


Рис.1 Изображение в среде LabVIEW изменения сопротивления тарелки во времени при расходе жидкой фазы $V_x = 38$ л/час

Исследования проводились при работе тарелок в режиме проваливания жидкости, в режиме нормальной работы и в режиме уноса жидкости. Были также отмечены точки перехода от одного режима к другому. Унос жидкости наблюдался только при расходе жидкости $V_x = 38$ л/час, а при больших расходах жидкости тарелки работали без уноса во всем диапазоне изменения скоростей газа. Замечен был и тот факт, что с увеличением расхода жидкости значения расхода газа, при которых прекращается провал, изменяются незначительно. Результаты эксперимента по измерению сопротивления орошаемой тарелки приведены в таблице №1.

Таблица №1. Результаты эксперимента по испытанию орошаемой тарелки при $V_x = 38$ л/час

степень открытия затвора, ед.	расход газа, $м^3/с$	перепад давления по дифманометру, мм в ст.	перепад давления по дифманометру, кПа	показания прибора, кПа
80	0,0004157	1	0,00981	-0,02
71,8	0,0017134	4	0,03924	0,01
60	0,0038679	12	0,11772	0,09
48	0,0067982	22	0,21582	0,18
40,2	0,0086736	24	0,23544	0,20
35,3	0,0102334	26	0,25506	0,23
28	0,0130135	29	0,28449	0,25
25	0,0143735	32	0,31392	0,28
21,3	0,0162955	35	0,34335	0,34
19	0,0176667	37	0,36297	0,33
17,5	0,0186536	45	0,44145	0,42
17,1	0,0189311	50	0,4905	0,46

Жирным шрифтом в таблице №1 обозначены расходы газа, соответствующие прекращению провала жидкости ($V_y = 0,0067982$ $м^3/с$) и резкому увеличению уноса ($V_y = 0,0176667$ $м^3/с$).

На основании всех полученных данных в экспериментах с сухой и орошаемой тарелкой была построена измерительная характеристика прибора, отображающего перепад давления на тарелке. Данные были аппроксимированы прямой линией с целью определения достоверности показаний прибора. В настройку прибора была внесена соответствующая поправка.

Литература

1. Дмитриев Е.А., Лисин С.Ю. Расчет и оценка гидравлического сопротивления тарельчатого аппарата с помощью программной среды LabVIEW. Успехи в химии и химической технологии: Сб. науч. тр. – М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2006, т. 20, № 2. – с. 68 - 72.
2. Александров И. А. Массопередача при ректификации и абсорбции многокомпонентных смесей. Л., «Химия», 1975. 320 с.
3. Аксельрод Л. С., Дильман В. В. О барботаже при малых скоростях газа. – «Журнал прикладной химии», 1954, № 5, т. XXVII, с. 485-492.
4. Coulson J.M., Richardson J.F., Sinnott R. K. Chemical Engineering, 1983, v. 6, № 1, p. 541.

УДК 628.1

Аверина Ю.М., Курбатов А.Ю., Джессу Лубо Ивон Седрик, Ветрова М.А.

ГИДРОДИНАМИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ПРИРОДНОЙ ВОДЫ

Аверина Юлия Михайловна – к.т.н., доцент каф. ИМиЗК, председатель ОСМУСС РХТУ имени Д.И. Менделеева, e-mail: averinajm@mail.ru;

Ветрова Маргарита Александровна – студентка каф. ИМиЗК РХТУ имени Д.И. Менделеева;

Курбатов Андрей Юрьевич – генеральный директор ООО «КОБГАРД»

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
125190, Москва, Миусская пл., 9

Джессу Лубо Ивон Седрик (Республика Кот Дивуар) – магистр кафедры физической и коллоидной химии РУДН
Российский университет дружбы народов (РУДН), Москва, Россия
117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6.

Статья посвящена современному исследованию в области эффективных и экологически безопасных методов очистки воды. В ходе исследований разработана схема установки гидродинамической обработки природной воды для очистки от растворенных форм железа и марганца. Предложенный способ может быть использован для водоподготовки частных домов и коттеджей.

Ключевые слова: очистка воды, обезжелезивание, окисление железа, аэрация, дегазация, удаление солей жёсткости, обеззараживание, гидродинамическая обработка воды.

HYDRODYNAMIC PROCESSING OF NATURAL WATER

Averina Yu.M. Kurbatov A.Yu., Jess Loubo Yvonne Cedric, Vetrova M.A.

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

Sedric Ivon Anry Sedric (Cote d'Ivoire)

Peoples Friendship University of Russia, Moscow, Russia,

The article is devoted to modern research in the field of ecologically safe and simultaneously effective methods for water treatment. The scheme of installation for hydrodynamic processing of natural water is given. The proposed method can be used for water treatment of private houses and cottages.

Key words: water purification, deironing, iron oxidation, aeration, degassing, removal of hardness salts, disinfection, hydrodynamic water treatment.

Наличие чистой воды является одним из основных факторов, определяющим возможность существования человека. По данным ООН, сейчас уже почти все поверхностные и менее половины подземных вод, используемых в процессе жизнедеятельности человека, проходят вынужденные стадии очистки [1].

Основными проблемами, принуждающими осуществлять водоподготовку природных вод, являются такие факторы как:

- повышенное содержание вредных для организма человека веществ в воде (железо, марганец, тяжёлые металлы, растворенные газы и т.д.);
- содержание в воде, так называемых, «солей жёсткости», приводящих к выходу из строя различного теплотехнического оборудования в процессе его работы и вредно влияющих на кожный покров человека.
- содержание в воде различных патогенных микроорганизмов (кишечная палочка и т.д.).

При наличии в планируемых для водоснабжения населения поверхностных источниках веществ, требующих их удаление, существует возможность применения подземных источников воды. Подземные источники в этом случае более перспективны, т.к. в меньшей степени подвержены дополнительному загрязнению из атмосферы или окружающей среды. При этом подземные источники, в зависимости от района расположения, в некоторых случаях содержат в себе, повышенные в несколько раз от норматива, различные минеральные соли и органические вещества.

В Российской Федерации, среди подземных источников водоснабжения, достаточно часто наблюдается превышение в несколько раз по содержанию двухвалентного железа в воде, что вызывает необходимость производить водоподготовку воды из такого источника. В противном случае при постоянном употреблении человеком такой воды со временем у него может возникнуть болезни пищеварительной системы, почек и печени, не говоря уже о состоянии кожных

покровов. По нормам СанПиН 2.1.4.1074-01, содержание общего железа в воде должно быть не более 0,3 мг/л, марганца – 0,1 мг/л, жёсткости – 7,0 мг-экв./л.

Также стоит отметить и тот факт, что при содержании в воде железа выше нормы в ней образуются железобактерии, которые сами по себе для здоровья человека не опасны, чего нельзя сказать о продуктах жизнедеятельности этих бактерий.

На данный момент основными проблемами в водоподготовке являются процессы по удалению растворенных форм железа и марганца, а так же солей жёсткости, что в свою очередь определяет перспективы развития исследований в этой области. В зависимости от окислительно-восстановительного потенциала, которым обладает вода, а так же значения её рН, железо в ней может существовать в различных формах [2,3].

Ключевой задачей описанного в статье проекта является разработка многофункциональной и экологически адаптированной установки для очистки вод, как с поверхностных, так и из подземных источников, для массового круга потребителей. Предлагаемая установка представляет собой аналог основных применяемых на данный

момент установок очистки природных вод, в которой стадии обработки воды осуществляются при помощи гидродинамического генератора колебаний (ГДГК).

При прохождении через ГДГК в жидкости реализуются кавитационные (волновые) эффекты. ГДГК-устройство способствует интенсификации массообменных процессов лишь за счёт использования собственной кинетической энергии обрабатываемого потока жидкости. Так же в результате такой гидродинамической обработки возрастает насыщение воды воздухом, тем самым способствуя увеличению скорости процесса окисления растворимых форм железа. После прохождения обрабатываемой жидкости через ГДГК-устройство окисленные/нерастворимые соединения выпадают в осадок и их остаётся лишь удалить с помощью стандартного фильтровального оборудования..

За счёт многофункциональности применяемого ГДГК-устройства, разрабатываемая установка может быть достаточно компактной. Нами предложена принципиальная схема для осуществления гидродинамической обработки природной воды, представленная на рисунке 1.

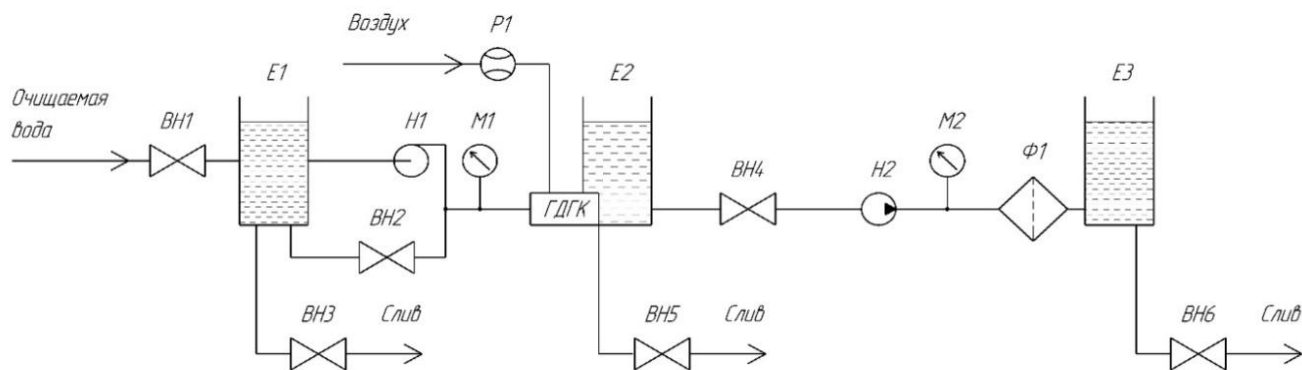


Рис. 1. Принципиальная схема установки для гидродинамической обработки природной воды:

Н1, Н2 – насосы; М1, М2 – манометры, ВН1-ВН6 – вентили, Р1 – ротаметр, E1-E3 – ёмкости, ГДГК – гидродинамический генератор колебаний, Ф1 – фильтрующий элемент;

Методика проведения гидродинамической обработки воды

Для проведения процесса водоочистки обрабатываемая вода накапливается в ёмкости E1, из которой она забирается центробежным насосом Н1 и прокачивается через гидродинамический генератор колебаний (ГДГК) в ёмкость с обработанным раствором E2. При прохождении обрабатываемой воды через ГДГК в ней возникают волновые процессы (при определённых гидродинамических параметрах движения жидкости), способствующие ускорению массообменных реакций.

Конструкционная геометрия ГДГК-устройства, при закручивании потока в рабочей камере устройства, создаёт в ней зону разрежения, куда конструкцией предусмотрено (при необходимости) дозировать воздух для его дальнейшего диспергирования с целью насыщения

обрабатываемой воды кислородом. Расход воздуха, эжектируемого за счёт разрежения в рабочей камере ГДГК, регулируется при помощи ротаметра Р1.

Обработанная таким образом вода из ёмкости E2 насосом Н2 подаётся на фильтрующий элемент с необходимым давлением. При выборе фильтрующих элементов, есть возможность использования широкого спектра различных фильтрующих материалов, как природного так и синтетического происхождения. Так же можно использовать автоматизированные системы фильтрации, основанные на ультрафильтрации и обратном осмосе. Очищенная после процесса фильтрации вода накапливается в ёмкости E3.

Ключевым моментом является тот факт, что представленная схема водоочистки описывает процесс однократного прохождения воды через ГДГК. При многократной обработке воды при

помощи ГДГК степень и результаты её обработки значительно увеличиваются.

В процессе работы представленной установки требуется лишь промывка засыпного фильтра (кварцевый песок, гидроантрацит и т.д.) противотоком для «механического удаления» образовавшихся в процессе обработки воды нерастворимых частиц или регенерация блоков ультрафильтрации (в зависимости от типа применяемого блока фильтрации). В качестве фильтрующей загрузки в фильтрах могут быть также использованы полимерные фильтрующие нетканые материалы, разработка которых активно ведется на кафедре физической и коллоидной химии РУДН. Для улучшения органолептических показателей воды на финишной стадии очистки предусмотрена возможность применения фильтрующих элементов со специально подобранными марками активированного угля.

При этом не стоит забывать и об экономической стороне вопроса, т.к. заявленная технология, где ключевую роль играет пара «насос + ГДГК» на практике обеспечивает собой замену сразу нескольких стадий обработки, что в конечном итоге снижает финишную стоимость очистки воды.

Важно отметить, что разрабатываемые для обработки природной воды ГДГК-устройства позволяют реализовывать следующие процессы в очищаемой воде:

- ✓ окисление растворённых веществ в воде до их нерастворимых форм;
- ✓ умягчения до требуемых норм;
- ✓ снижения солесодержания до требуемых норм;
- ✓ дегазации;
- ✓ аэрации;
- ✓ частичного обеззараживания.

Использование гидродинамической кавитации более выгодно в сравнении с известными методами и устройствами ультразвуковой кавитации: меньшие удельные затраты энергии и металлоемкость кавитирующих аппаратов, простота их конструкций, отсутствие кавитационного износа деталей, непрерывность работы, большая производительность, широкие диапазоны регуляции режимов работы, отсутствие сложного электронного оборудования, меньшая стоимость аппаратов и т.д.

Выводы

Представленная установка не требует существенных затрат на обслуживание, т.к. нет специальных химически регенерируемых сред, дополнительного использования химических реагентов и быстроизнашивающихся компонентов (явление кавитации не разрушает стенки ГДГК т.к. разрыв сплошности потока происходит не как при «обтекании твёрдого тела» - вблизи самого твёрдого тела, а по оси движения закручиваемого потока жидкости, что предохраняет стенки рабочей камеры ГДГК от схлопывающихся кавитационных пузырьков).

Экологическая составляющая разрабатываемой установки очистки природной воды проявляется не только в процессе обработки воды, но и при процессе регенерации используемых для процесса фильтрации материалов. При промывке фильтрующего элемента (кварцевый песок, гидроантрацит, мембранный блок ультрафильтрации и т.д.) будет использована уже очищенная вода, а т.к. в процессе обработки природной воды не применялось никаких дополнительных химических реагентов и каталитических засыпок, требующих химической регенерации, то процесс промывки будет осуществлён при более меньших затратах самих промывных вод, которые в дальнейшем можно напрямую отправлять в обычную канализацию.

Также стоит отметить, что конструкция ГДГК-устройства не содержит движущихся частей, что проявляется в простоте его применения и, соответственно, надёжности. Предложенный способ может быть использован в области водоподготовки для частных домов, коттеджей и промышленных предприятий, а также сельского и коммунального хозяйства, как в централизованных, так и децентрализованных системах водоснабжения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РХТУ им. Д.И. Менделеева. Номер проекта Х032-2018.

Список литературы

1. Крушенко Г.Г., Сабирова Д. Р., Петров С. А., Талдыкин Ю. А. Проблема воды // Вода и экология. Проблемы и решения. 2000. № 3. 28 с.
2. Крайнов С.Р., Швец В.М. Геохимия подземных вод хозяйственно-питьевого назначения. - М.: Недра.1987. 237 с.
3. Кирюхин В.К., Мелькановицкая С.Г., Швед В.М. Определение органических веществ в подземных водах. - М.: Недра, 1976. 192 с

УДК 621.032

Смыслова В.Г., Макаров В.В.

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ ОПТИЧЕСКИ ОТБЕЛИВАЮЩИХ ВЕЩЕСТВ

Смыслова Валентина Геннадьевна, студентка 4 курса факультета информационных технологий и управления, e-mail: ohkote@yandex.ru;

Макаров Владимир Валентинович, д.т.н., профессор, профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

На основе двухпотоковой модели для плоскопараллельного слоя рассеивающей среды исследованы спектрально-люминесцентные свойства оптически отбеливающих веществ. В результате работы были рассчитаны спектры отражения, определены координаты цвета в колориметрическом пространстве UVW и степень белизны.

Ключевые слова: люминесценция, оптически отбеливающие вещества, цветовые характеристики материалов.

STUDY OF SPECTRAL AND LUMINESCENT PROPERTIES OF OPTICALLY BLEACHING AGENTS

Smyslova V.G., Makarov V.V.

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

Optically bleaching spectral and luminescent properties have been investigated on the base of plane-parallel layer of two-fluxed approximation. Reflection spectral coefficients, UVW-colour space tristimulus values and witness have been calculated.

Keywords: luminescence, optically bleaching agents, coloristic properties of materials.

Оптически отбеливающие вещества применяются для придания различным материалам (бумаге, пластическим массам, натуральным и синтетическим волокнам и т.п.) белого цвета. Они являются компонентом моющих веществ. Оптически отбеливающие вещества – это бесцветные флуоресцирующие красители, поглощающие оптическое излучение в ближней UV-области электромагнитного спектра и флуоресцирующие в его видимой области [1]. Методы синтеза и применения оптически отбеливающих веществ изложены в литературе [2-4].

Органические оптически отбеливающие вещества люминесцируют по механизму молекулярной люминесценции [5]. Следовательно, между поглощением оптического излучения и люминесценцией имеется определённая связь, позволяющая сформировать модель, отображающую рассматриваемые в работе оптические закономерности.

В работе сформулирована и решена задача исследования спектрально-люминесцентных и колористических характеристик материалов, содержащих оптические отбеливатели и оценивания степени их белизны.

Перечисленные характеристики определены на основе двухпотоковой модели плоскопараллельного слоя рассеивающей люминесцирующей среды. Двухпотоковая модель для монохроматического излучения имеет вид граничной задачи для системы неоднородных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами, имеющей аналитическое решение, в результате которого определяется интенсивность световых потоков в спектре [6-8].

Тогда по определению выражение для коэффициента отражения монохроматической волны от внешней границы слоя оптически бесконечной толщины имеет вид:

$$R_{\lambda} = \frac{1}{I_{0\lambda}} B_{\lambda'} + \frac{1}{I_{0\lambda'}} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} D_{\lambda} d\lambda, \quad (1)$$

$$\text{при } \lambda' \neq \lambda \text{ и } R_{\lambda} = \frac{1}{I_{0\lambda'}} (B_{\lambda'} + D_{k\lambda'}), \quad (2)$$

$$B_{\lambda'} = \frac{b_{\lambda'} I_{0\lambda'}}{a_{\lambda'} + k_{\lambda'}}, \quad (3)$$

$$D_{\lambda} = \frac{g_{\lambda\lambda'} (a_{\lambda'} + b_{\lambda'} - k_{\lambda'}) N_{\lambda}}{b_{\lambda}^2 - a_{\lambda}^2 + k_{\lambda}^2}, \quad (4)$$

$$\text{при } \lambda' = \lambda, N_{\lambda} = \frac{A_{\lambda} (a_{\lambda} + k_{\lambda})}{b_{\lambda}}, \quad (5)$$

$$A_{\lambda} = -\frac{b_{\lambda} I_{0\lambda}}{a_{\lambda} + b_{\lambda}}, \quad (6)$$

$$a_{\lambda} = \alpha_{\lambda\lambda'} c + r_{\lambda\lambda'} + \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (7)$$

$$b_{\lambda\lambda'} = r_{\lambda\lambda'}, \quad (8)$$

$$k_{\lambda\lambda'} = \sqrt{a_{\lambda\lambda'}^2 - b_{\lambda\lambda'}^2}, \quad (9)$$

$$g_{\lambda\lambda'} = \alpha_{\lambda\lambda'} \gamma_{\lambda'} \cdot c, \quad (10)$$

где – $\alpha_{\lambda\lambda'}$, $r_{\lambda\lambda'}$, $\delta_{\lambda\lambda'}$ соответственно коэффициенты поглощения оптического излучения отбеливателей, материал среды и коэффициент рассеяния излучения средой;
 c – концентрация отбеливателя (доли);

γ_{λ} – квантовый выход люминесценции;
 λ – длина волны света в области поглощения (нм);
 λ' – длина волны света в зоне люминесценции (нм).

При известных значениях оптических параметров δ_{λ} , r_{λ} , α_{λ} , δ_{λ}' , r_{λ}' , α_{λ}' и квантового выхода люминесценции γ_{λ} определен спектральный коэффициент отражения оптического излучения от слоя среды, содержащей оптически отбеливающее вещество, в зависимости от его концентрации (рис. 1). На рисунке приведены также спектры поглощения оптического излучения слоем среды.

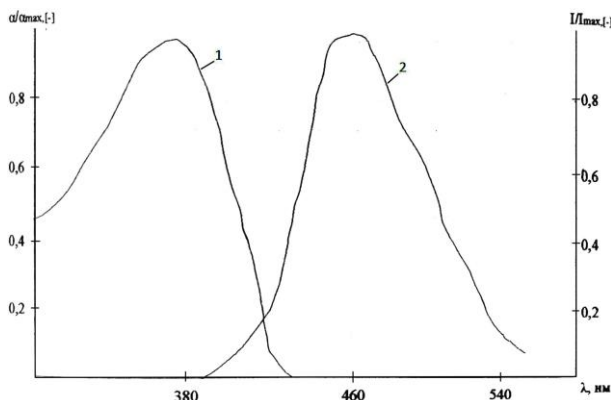


Рис. 1. 1-спектры поглощения оптического излучения плоскопараллельным слоем рассеивающей среды и 2-его люминесценции

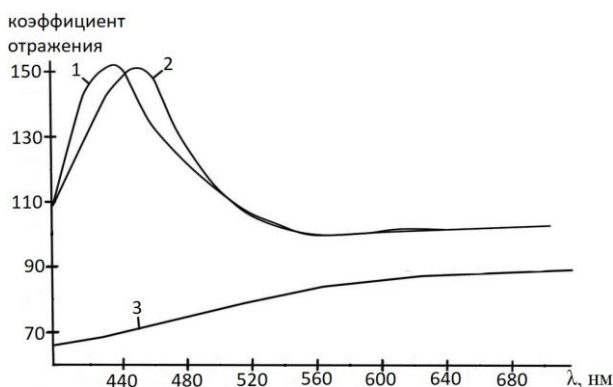


Рис. 2. 1-экспериментальный спектр отражения от границы плоскопараллельного люминесцирующего слоя рассеивающей среды, 2-рассчитанный по модели, 3-в отсутствие отбеливателя

Координаты цветности отбеливающего препарата определены в равноконтрастном цветовом пространстве UVW по формулам [9]

$$u = \frac{4X}{X + 15Y + 3Z}, v = \frac{4Y}{X + 15Y + 3Z}, \quad (11)$$

где

$$X = \int_{400}^{700} R_{\lambda} E_{\lambda} \bar{x}_{\lambda} d\lambda', Y = \int_{400}^{700} R_{\lambda} E_{\lambda} \bar{y}_{\lambda} d\lambda', Z = \int_{400}^{700} R_{\lambda} E_{\lambda} \bar{z}_{\lambda} d\lambda', \quad (12)$$

и изображены на диаграмме цветности UV (рис. 3) Ординаты кривых сложения $E_{\lambda} \bar{x}_{\lambda}$, $E_{\lambda} \bar{y}_{\lambda}$, $E_{\lambda} \bar{z}_{\lambda}$ стандартизированы [11]

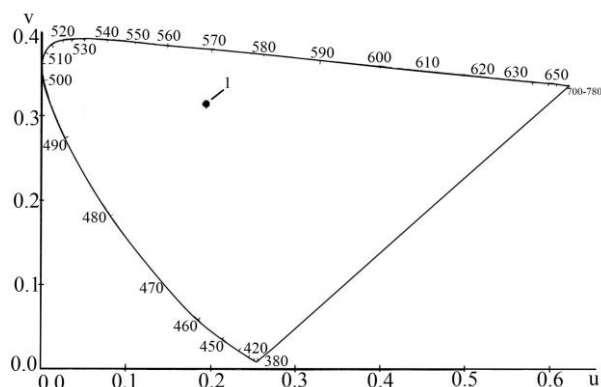


Рис. 3. Диаграмма цветности; 1- координаты цветности среды, содержащей оптически отбеливающий препарат

В качестве источника облучения принят стандартный источник D_{6500} , в энергетическом спектре которого значительна доля UV-излучения [9,12], координаты цветности источника D_{6500} $u_0=0,1978$, $v_0=0,3123$. Степень белизны W определялась по формуле [9]:

$$W=1000(x_0-x)-650(y_0-y)$$

где x_0, y_0 – координаты цветности источника.

Таким образом, в работе рассчитан спектральный коэффициент отражения от рассеивающего люминесцирующего слоя среды.

Список литературы

- 1.Красовицкий Б.М., Болотин Б.М. Органические люминофоры. – М.: Химия, 1984. - 336 с.
- 2.Емельянов А.Г. Оптические отбеливающие вещества и их применение в текстильной промышленности. – М.: Легкая индустрия, 1971. - 272 с.
- 3.Бочаров В.Г., Каримова А.З. Оптические люминесцирующие отбеливатели. ЦНИИТЭИлегпром, М.:1973. – 48 с.
- 4.Рискина И.Х. – ЖВХО им. Д.И. Менделеева, 1970, т.15, вып.3 – С. 257-262.
- 5.Левшин В.А. Фотолюминесценция твёрдых и жидких веществ – М-Л: 1951. - 456 с.
- 6.Каримова А.З. Канд. дисс – М.: 1973, -150 с.
- 7.Каримова А.З., Макаров В.В., Бочаров В.Г. Анилинокрасочная промышленность, 1972. вып.5 - С. 104-110
- 8.Бочаров В.Г., Каримова А.З., Макаров В.В. Журнал прикладной спектроскопии. - 1971, Т. 15, № 4. - С. 636 - 641.
- 9.Джадд Д., Вышецки Г. Цвет в науке и технике - М.: Мир, 1978. - 592 с.
- 10.Макаров В.В. Канд. дисс. – М.: 1975. -179 с.
- 11.Юстова Е. Н. Таблицы основных колориметрических величин. – М.: Стандарт, 1967, - 35 с.
- 12.Международный светотехнический словарь - М.: Русский язык, 1979. -278 с.

УДК 004.428.4:614.849

Чернухин А.В., Сверчков А.М.

КОМПЛЕКС ПРОГРАММНЫХ СРЕДСТВ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ ПО ЭВАКУАЦИИ ПЕРСОНАЛА ПРЕДПРИЯТИЯ

Чернухин Артём Валерьевич, студент 4 курса факультета информационных технологий и управления, e-mail: dr.chernuhin@yandex.ru;

Сверчков Андрей Михайлович, ассистент кафедры компьютерно-интегрированных систем химической технологии, e-mail: andrey_sverchkov@mail.ru;

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

Разработка программных средств, предназначенных для сбора и анализа данных об эвакуации каждого отдельно взятого сотрудника на предприятии, актуальна в настоящее время. Существуют комплексные информационные системы эвакуации, учитывающие разнообразные факторы неопределенности и на их основании строящие индивидуальный маршрут движения по предприятию в случае чрезвычайной ситуации. Данные системы весьма эффективны, но часто возникает необходимость проанализировать сведения о том, насколько точно сотрудник следовал персональному плану эвакуации. Это приводит к необходимости разрабатывать специализированные программные приложения, позволяющие аккумулировать, хранить и оценивать информацию о передвижении работников на предприятии в случае аварийной ситуации.

Ключевые слова: программное приложение, эвакуация, сбор данных, анализ данных, работа с GPS.

COMPLEX OF SOFTWARE OF INFORMATION SYSTEM FOR EVACUATION OF THE ENTERPRISE'S PERSONNEL

Chernuhin A.V., Sverchkov A.M.

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

The development of software applications designed to collect and analyze data on the evacuation of each individual employee in the enterprise is currently relevant. There is an integrated information system of evacuation, taking into account various factors of uncertainty and on that basis build an individual route of the enterprise in case of emergency. These systems are very effective, but often there is a need to analyze information about how accurately the employee followed the personal evacuation plan. This leads to the need to develop specialized software applications that allow to accumulate, store and evaluate information about the movement of employees in the enterprise in the event of an emergency.

Keywords: software application, evacuation, data collection, data analysis, work with GPS.

В настоящее время в России бурными темпами проходит автоматизация всех отраслей промышленного производства, что приводит к усложнению инфраструктуры предприятий, которые представляют собой многоуровневые организационно-технические системы.

Вместе с усложнением процесса производства наблюдается усложнение информационных систем эвакуации персонала на предприятии в случае чрезвычайной ситуации. Данные системы направлены на правильную и своевременную организацию эвакуации, что способствует снижению числа пострадавших, а в большинстве случаев помогает полностью избежать жертв.

Одним из важнейших показателей, анализ которого происходит на уровне планирования, является время эвакуации. Данный параметр отображает время, за которое люди должны эвакуироваться в безопасную зону без причинения вреда их жизни и здоровью. На практике в большинстве случаев эта важнейшая величина

рассчитывается по упрощенным математическим моделям, которые не учитывают многих факторов. Вследствие этого возникает задача проверки оптимальности и апробации в реальных условиях разработанных эвакуационных путей. Лучший способ провести такую оценку – проведение учебной эвакуации, в результате которой будут сделаны соответствующие выводы.

С целью информационной поддержки указанной задачи авторами разработан комплекс программных средств, позволяющий:

- В режиме реального времени осуществлять индикацию местоположения каждого сотрудника с сохранением маршрута его движения для последующего анализа;
- Проводить анализ эвакуации на предмет возникающих нарушений либо отклонений в ее процессе.

Комплекс программных средств состоит из мобильной версии, устанавливаемой на смартфоны или мобильные планшетные компьютеры

сотрудников, и приложения, устанавливаемого на ПК. Для полноценного использования программного комплекса необходимо предварительно загрузить графические материалы и сделать привязку к глобальным геопозиционным данным. Алгоритм работы комплекса следующий:

1. При поступлении сообщения о чрезвычайной ситуации пользователи запускают мобильное приложение (рис. 1) и начинают эвакуацию;
2. Приложение в реальном времени начинает считывать GPS-координаты устройства и отображать местоположение работника на подготовленной и предустановленной заранее графической подложке с нанесенными эвакуационными путями;
3. На протяжении всей эвакуации приложение сохраняет информацию о передвижении каждого работника в базу данных;
4. Ко всей собранной информации имеет доступ приложение для ПК, в котором есть возможность:
 - a. отображения на графической подложке всего пути, проделанного работником во время эвакуации (рис. 2);
 - b. оценки отклонения параметров эвакуации от ожидаемых значений (полученных, например, в результате расчетов);
 - c. оценки точности следования индивидуальному маршруту эвакуации.

Следует отметить тот факт, что иногда в зданиях GPS может некорректно работать из-за слабого сигнала, поэтому лучше использовать данную систему при эвакуации на открытых площадках, производственных цехах и т.д. Из-за специфичности работы с географическими координатами в здании возникает необходимость осреднения части

значений из-за погрешности либо слабого сигнала датчика GPS. Однако с вводом поддержки протокола беспроводного соединения IEEE 802.11mc, также известного как круговая задержка Wi-Fi (RTT), в новой версии ОС Android станет возможным находить координаты внутри зданий. С выходом данной ОС планируется доработка системы для работы с данным протоколом.

Также следует отметить, что разработанный комплекс не позволяет моделировать процесс эвакуации. Он использует в качестве эталонных результатов экспертные оценки или результаты моделирования, полученные в сторонних программных средствах. Также используются готовые графические файлы с нанесенными путями эвакуации, которые реализованы в сторонних, предназначенных для этих целей программных средствах, например, в программном комплексе «ТОХИ+Risk 5» [2], разработанном на основе методических указаний, изложенных в [3,4].

Мобильное приложение разработано для использования в условиях, когда здоровью и жизни человека грозит опасность, поэтому одной из задач было создание максимально упрощенного графического интерфейса приложения. Для смены подложки плана эвакуации при перемещении между этажами предусмотрена отдельная опция выбора этажа.

Основной графический интерфейс программного приложения для ПК представлен в виде инструмента, предназначенного для визуализации данных (рис. 2). В нем отображается вся собранная, обработанная и записанная в БД информация о маршрутах движения персонала во время проведения эвакуации в графическом виде на плане эвакуации из здания.

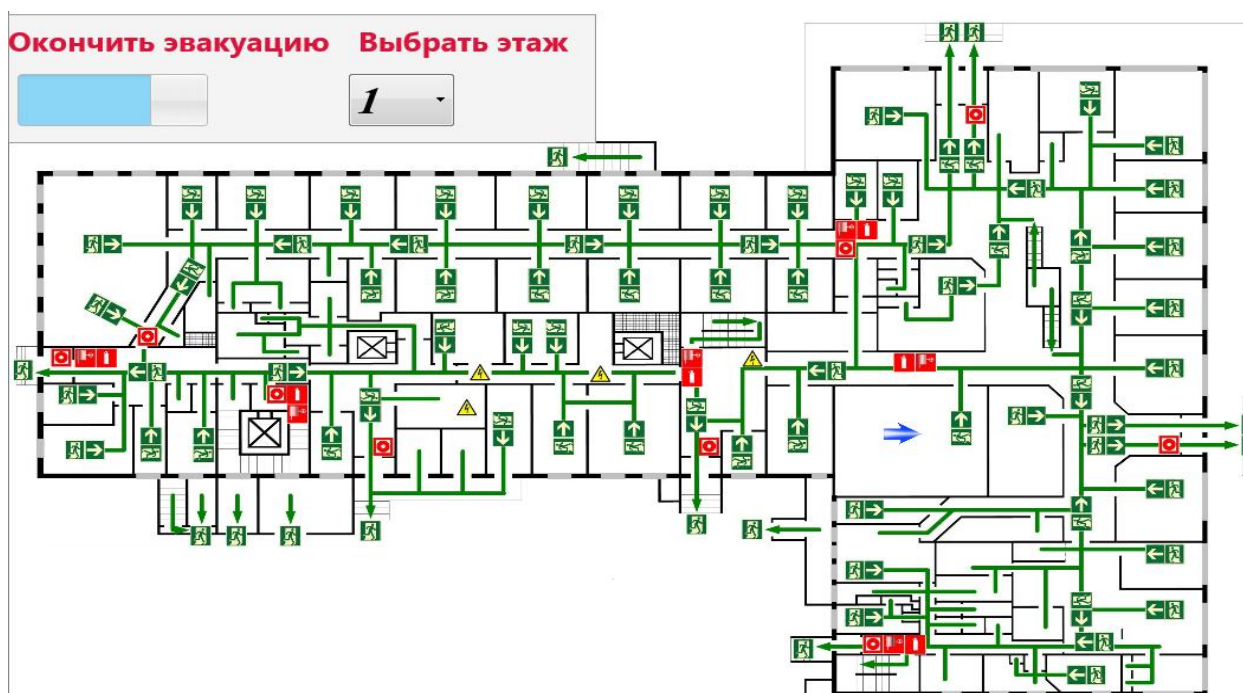


Рис. 1. Интерфейс мобильного приложения

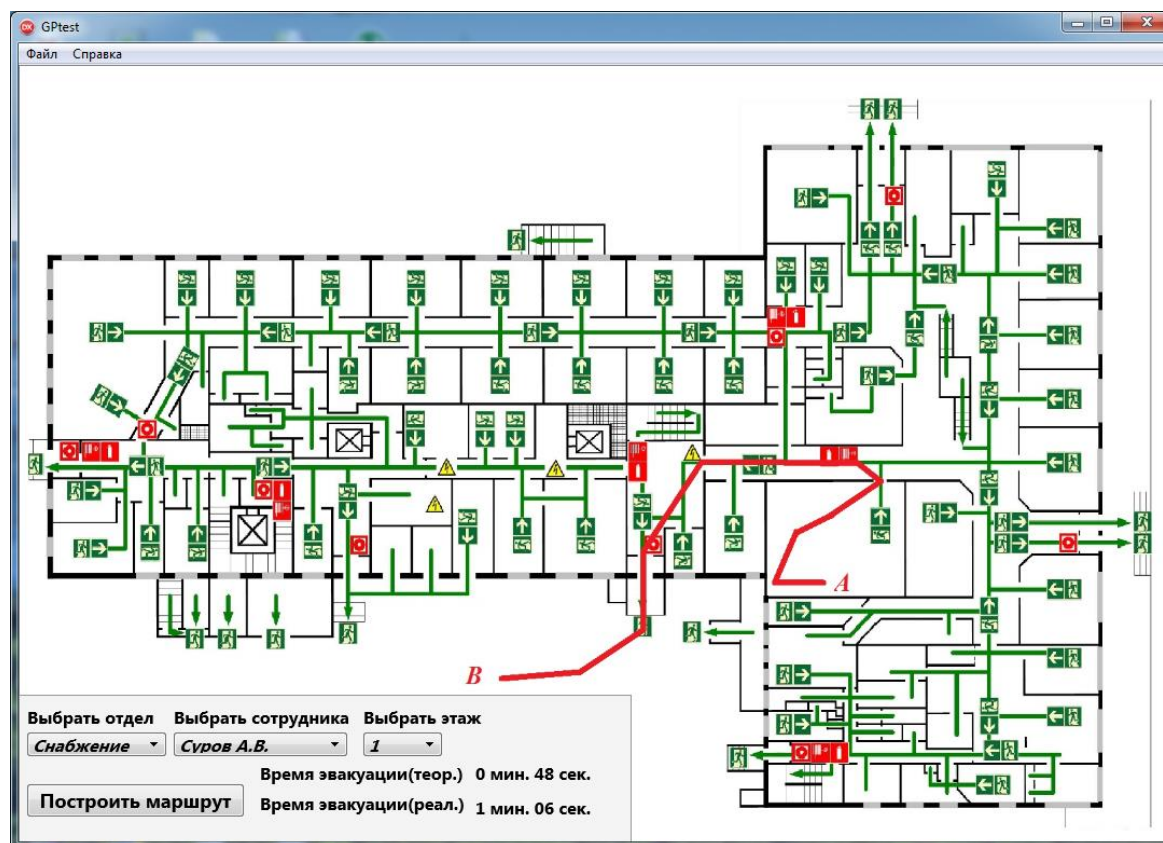


Рис. 2. Интерфейс приложения для ПК

Обработка данных в приложении для ПК состоит в осреднении GPS-координат для построения пути, пройденного в результате эвакуации. Интерфейс предусматривает возможность выбора данных о конкретном человеке, проведение их анализа, возможность смены подложки со схемой этажа и отображение на ней пройденного пути.

Проанализировав все возможности приложений программного комплекса можно сделать вывод, что он представляет большой интерес для разработчиков комплексных информационных систем эвакуации, так как выполняются функции сбора, хранения и обработки информации о передвижении работников на предприятии в случае аварийной ситуации. Также данный программный комплекс позволит сотрудникам предприятий обучиться использованию реальных эвакуационных маршрутов, регламентированных для каждого конкретного местоположения человека.

Данный комплекс программных приложений, состоящий из двух подпрограмм, разработан в интегрированной среде разработки приложений RADStudio Delphi. База данных, в которых хранится информация о перемещении персонала, создана в СУБД SQLite и используется как для работы с мобильным приложением (ОС Android), так и с версией для ПК (ОС Windows).

Литература

1. Кондратьева, Н.В. Информационная система управления эвакуацией людей в больших инфраструктурных объектах / Н.В. Кондратьева // XII ВСЕРОССИЙСКОЕ СОВЕЩАНИЕ ПО ПРОБЛЕМАМ УПРАВЛЕНИЯ ВСПУ-2014. - 2014. - С. 387-393.
2. Агапов, А.А. Использование программного комплекса ТОКСИ+RISK для оценки пожарного риска / А.А. Агапов, И.О. Лазукина, А.Л. Марухленко, С.Л. Марухленко, А.С. Софьин // Безопасность труда в промышленности-2010. №1.- С. 46-52.
3. Приказ МЧС России № 404 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.mchs.gov.ru/document/4453379> (дата обращения 16.03.2018)
4. Приказ МЧС России № 382 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.mchs.gov.ru/law/Normativno_pravovie_akti_Ministerstva/item/5380552 (дата обращения 16.03.2018)

УДК 658.51

Сорокина А.А., Егоров А.Ф.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ТЕХНИКО–ЭКОНОМИЧЕСКОГО ПЛАНИРОВАНИЯ МНОГОАССОРТИМЕНТНОГО ПРОИЗВОДСТВА НЕТКАНЫХ ТЕКСТИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ИЗ ПОЛИПРОПИЛЕНОВОГО ВОЛОКНА

Сорокина Анастасия Алексеевна, магистрант 1 курса факультета информационных технологий и управления РХТУ им. Д.И. Менделеева, e-mail: sakura88@mail.ru

Егоров Александр Фёдорович, д.т.н., заведующий кафедрой компьютерно – интегрированных систем в химической технологии

Кафедра компьютерно – интегрированных систем в химической технологии РХТУ им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия

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

Описывается процесс решения задач технико – экономического планирования на примере производства нетканых текстильных материалов из полипропиленового волокна. Задача решена с помощью трёх программных сред: Microsoft office Excel, MathCad, MATLAB. Рассмотрены понятие и методы решения задач технико-экономического планирования. Представлены результаты по расчету оптимальных объемов выпуска каждого вида продукции и максимальный размер дохода от реализации. Проведен сравнительный анализ результатов расчетов задач.

Ключевые слова: технико – экономическое планирование, нетканые материалы, полипропиленовое волокно, задача линейного программирования.

SOLUTION OF THE PROBLEM OF TECHNO-ECONOMIC PLANNING OF MULTI-ASSORTMENT MANUFACTURE OF NONWOVEN TEXTILE MATERIALS FROM POLYPROPYLENE FIBER

Sorokina A.A., Egorov A.F.

Chair of Computer's Integrated Systems in Chemical Technology, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

The process of solving the problems of technical and economic planning is described on the example of the production of non - woven textile materials made of polypropylene fiber. The problem is solved with the help of three software environments: Microsoft Office Excel, MathCad, MATLAB. Considered concept and methods of solving problems technical and economic planning. The results of are presented comparative analysis of the results On calculation of optimum volumes of release of each kind of production and the maximum size of the income from realization.

Keywords: technical and economic planning, nonwoven materials, polypropylene fiber, linear programming.

Введение

В современном мире, в условиях свободной конкуренции, на многих предприятиях идет процесс развития и внедрения компьютерно-интегрированных информационных систем автоматизированного управления

Цель технико-экономического планирования (ТЭП) заключается в реализации выработанной стратегии путём разработки плана развития предприятия [1].

Задачи ТЭП реализуются в рамках автоматизированных систем управления производством. При этом данная подсистема призвана определить результаты хозяйственной деятельности предприятия, которые должны быть достигнуты предприятием в течение года или более продолжительного периода, а также допустимые объемы ресурсов и затрат, которые могут быть при этом использованы.

ТЭП является частью внутривозвратного планирования, которое состоит из ТЭП и из оперативного планирования. При этом ТЭП охватывает годовой период и распространяется в основном на все предприятие, а оперативный план охватывает внутригодовые периоды (месяц и ниже)

и распространяется как на все предприятие, так и на все его структурные подразделения.

Наряду с этим встречается множество задач, в которых невозможно оценивать решения только по одному критерию. Например, при оценке эффективности деятельности предприятия необходимо одновременно учитывать целый ряд показателей, таких как прибыль, объем выпускаемой продукции, ее себестоимость и т.д. Задачи оценки эффективности решений одновременно по нескольким критериям называют «многокритериальными».

Далеко не всегда критерии эффективности являются количественными величинами. Они могут носить качественный характер и отражать трудно формализуемые признаки, такие, например, как предпочтения и пристрастия. Понятно, что обосновать такие решения только с помощью каких-либо количественных показателей крайне сложно. [2]

Актуальность данной работы заключается в том, что решение задачи ТЭП, является важнейшим этапом планирования производства. Задача решена с помощью трёх программных сред: Microsoft office Excel, MathCad, MATLAB, которые являются

одними из самых удобных и широко используемых программных средств [3].

Модели решения задач технико-экономического планирования

Объектом исследования является многоассортиментное производство нетканых текстильных материалов из полипропиленового волокна.

Технико-экономическое планирование предусматривает разработку целостной системы показателей технического и экономического развития предприятия. В ходе данного этапа планирования обосновываются оптимальные объемы производства, выбираются необходимые производственные ресурсы и устанавливаются рациональные нормы их использования, определяются конечные показатели и т.п.

В качестве основных этапов формулирования задачи ТЭП можно выделить следующие:

- Словесная постановка задач (аналитика);
- Математическое формулирование задач, которое включает:
 - запись математической модели и системы ограничений;
 - запись критерия оптимизации;
 - постановка задачи ТЭП, как задачи линейного программирования в виде оптимизационной задачи;
 - решение задачи ТЭП.

Задачи ТЭП формулируются и решаются как задачи линейного программирования. Для формулирования задачи ТЭП, как задачи линейного программирования необходимо:

1. Выделить переменные решения задачи, значение которых нужно рассчитать $X^T = (x_1, x_2, \dots, x_j, x_n)$; $j=1, n$
2. Записать систему ограничений на ресурсы с использованием переменных решения задач;
3. Записать выражение для критерия оптимальности с использованием переменных решения задач;
4. Записать собственно, постановку задачи оптимизации.

Задачи линейного программирования - это задачи, в которых математические модели системы ограничений и критерий записываются в линейном виде относительно переменных решений задач. Линейное программирование представляет собой наиболее часто используемый метод оптимизации.

Для того чтобы сформулировать задачу технико-экономического планирования многоассортиментного производства нетканых текстильных материалов из полипропиленового волокна, введем следующие обозначения:

- ПП – измельченный полипропилен (в гранулах);
- ШВ₁ – штапельное волокно толщиной 0,35 мм;
- ШВ₂ – штапельное волокно толщиной 0,45 мм;
- НП₁ – напольное покрытие из штапельного волокна толщиной 0,35 мм. Поверхностная плотность 500г/м³;
- НП₂ – напольное покрытие из штапельного волокна толщиной 0,45 мм. Поверхностная плотность 500г/м³;
- ПДА₁ – покрытие для автомобиля из штапельного волокна толщиной 0,35 мм. Поверхностная плотность 350г/м³;
- ПДА₂ – покрытие для автомобиля из штапельного волокна толщиной 0,45 мм. Поверхностная плотность 650г/м³;

Для рассматриваемого производства запись математической постановки задачи будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{cases}
 0,5 \cdot x_1 - 1,01 \cdot x_2 - 0,5 \cdot x_3 + 0,5 \cdot x_4 - 1,01 \cdot x_5 - 0,5 \cdot x_6 \leq 250 & (1) \\
 -0,5 \cdot x_1 + 1,51 \cdot x_2 + 1 \cdot x_3 \leq 100 & (2) \\
 -0,5 \cdot x_4 + 1,51 \cdot x_5 + 1 \cdot x_6 \leq 100 & (3) \\
 x_1 \leq 360 & (4) \\
 x_2 \leq 100 & (5) \\
 x_3 \leq 100 & (6) \\
 x_4 \leq 315 & (7) \\
 x_5 \leq 50 & (8) \\
 x_6 \leq 50 & (9) \\
 x_3 + x_6 \leq 100 & (10) \\
 x_2 + x_5 \leq 100 & (11) \\
 x_3 + x_6 \geq 50 & (12) \\
 x_2 + x_3 \leq x_1 & (13) \\
 x_5 + x_6 \leq x_4 & (14) \\
 x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0, x_4 \geq 0, x_5 \geq 0, x_6 \geq 0 & (15) \\
 R(X) = 2,0 \cdot x_1 + 1,4 \cdot x_2 + 1,8 \cdot x_3 + 1,0 \cdot x_4 + 1,6 \cdot x_5 + 1,2 \cdot x_6; & (16) \\
 X^*(x_1^*, x_2^*, x_3^*, x_4^*, x_5^*, x_6^*) = Arg \max_{X \in \bar{X}} R(X) & (17),
 \end{cases}$$

Где x_j – объемы выпуска продукции.

Это означает, нужно определить оптимальные объемы выпуска каждого вида продукции $x_1^*..x_j^*$; $j = \overline{1,6}$, при которых целевая функция $R(X)$ достигает максимального значения, при условии что $x_1 ..x_j$; $j = \overline{1,6}$, принадлежит некоторой области допустимых значений \bar{X} .

Решение задачи технико-экономического планирования производства нетканых текстильных материалов из полипропиленового волокна.

В таблице 1 представлены данные о затратах ресурсов на единицу продукции.

Таблица 1. Данные о затратах ресурсов на единицу продукции

Ограничения	Вид продукции						Запас ресурса
	ШВ ₁	НП ₁	ПДА ₁	ШВ ₂	НП ₂	ПДА ₂	
Ограничение на исходное сырье (ПВ)	0,5	-1,01	-0,5	0,5	-1,01	-0,5	250 тонн
Ограничение на 1 гр.прод.	-0,5	1,51	1	0	0	0	100 тонн
Ограничение на 2 гр.прод.	0	0	0	-0,5	1,51	1	100 тонн
Ограничение на ёмкость 1 гр.	0	1	0	0	1	0	100 тонн
Ограничение на ёмкость 2 гр.	0	0	1	0	0	1	100 тонн
Контрактные обязательства	0	0	1	0	0	1	50 тонн
Ограничение на ШВ1	-1	1	1	0	0	0	0
Ограничение на ШВ2	0	0	0	-1	1	1	0

Данные по минимальным объемам производств каждого вида продукции приведены в таблице 2.

Таблица 2. Минимальные объемы производств каждого вида продукции

ШВ ₁	НП ₁	ПДА ₁	ШВ ₂	НП ₂	ПДА ₂
0	0	0	0	0	0

Данные по максимально возможным объемам производств каждого вида продукции приведены в таблице 3.

Таблица 3. Максимально возможные объёмы производства каждого вида продукции

ШВ ₁	НП ₁	ПДА ₁	ШВ ₂	НП ₂	ПДА ₂
360	100	100	315	50	50

Величина стоимости единицы готовой продукции каждого вида приведена в таблице 4.

Таблица 4. Величина стоимости единицы готовой продукции каждого вида

	ШВ ₁	НП ₁	ПДА ₁	ШВ ₂	НП ₂	ПДА ₂
Стоимость единицы готовой продукции (y.e.)	1	1,8	1,4	1,2	2	1,6

В таблице 5 приведены результаты расчетов во всех трёх программных средствах:

Таблица 5. Сводная таблица полученных результатов

Обозначение	Расчет с использованием EXCEL	Расчет с помощью Mathcad	Расчет с помощью Matlab
x_1^* (ШВ1)	360	360	360
x_2^* (НП1)	50	50	50
x_3^* (ПДА1)	100	100	100
x_4^* (ШВ2)	50	50	50
x_5^* (НП2)	50	50	50
x_6^* (ПДА2)	0	0	0
R	750 y.e.	750 y.e.	750 y.e.

В итоге решения задачи получен объем выпуска каждого вида продукции ШВ₁ = 360т, НП₁=50т, ПДА₁ = 100т, ШВ₂ = 50т, НП₂50т, ПДА₂ = 0т при которых предприятие получает максимальную прибыль в размере 750 y.e.

Список литературы

1. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии М.: Химия, 1969. — 564 с..
2. Шайкин А.Н. Практические основы линейной оптимизации: Учеб. Пособие / Под ред. А.Ф.Егорова. М.:РХТУ им. Д.И. Менделеева.-2003.- 144 с.
3. Мадера А.Г. Математические модели в управлении. Компьютерное моделирование в Microsoft Excel. Лабораторные работы. Москва.: РГГУ, 2007. - 118 с.

УДК 628.1

Аверина Ю.М., Курбатов А.Ю., Ветрова М.А., Калякина Г.Е.

БЕЗОПАСНЫЙ И ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД ОБРАБОТКИ ПРИРОДНОЙ ВОДЫ

Аверина Юлия Михайловна – к.т.н., доцент каф. ИМиЗК, председатель ОСМУСС РХТУ имени Д.И. Менделеева, e-mail: averinajm@mail.ru

Курбатов Андрей Юрьевич – генеральный директор ООО «КОБГАРД»

Ветрова Маргарита Александровна – студентка каф. ИМиЗК РХТУ имени Д.И. Менделеева;

Калякина Галина Евгеньевна – студентка каф. ИМиЗК РХТУ имени Д.И. Менделеева;

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

125190, Москва, Миусская пл., 9

Статья посвящена современному исследованию в области экологически безопасных и одновременно эффективных методов для обработки воды. Показана принципиальная возможность использования кавитационных явлений в жидкости с целью увеличения скорости процесса окисления растворённого железа. Приведен расчёт кавитационного гидродинамического генератора колебаний.

Ключевые слова: очистка воды, гидродинамическая обработка воды, кавитационные явления в жидкости, установка обработки воды, интенсификация процесса.

SAFE AND EFFECTIVE METHOD OF PROCESSING NATURAL WATER

Averina Yu.M., Kurbatov A.Yu., Vetrova M.A., Kalyakina G.E.

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

The article is devoted to modern research in the field of ecologically safe and simultaneously effective methods for water treatment. The principal possibility of using cavitation phenomena in a liquid is shown to increase the rate of oxidation of dissolved iron. The calculation of the cavitation hydrodynamic oscillator is given.

Key words: water treatment, hydrodynamic water treatment, cavitation phenomena in a liquid, water treatment unit, process intensification.

Применение экологически безопасных и одновременно эффективных методов для обработки природной воды становится приоритетной задачей уже в настоящее время. В связи с этим, одним из возможных решений текущих проблем в водоподготовке на текущем этапе можно считать многофункциональную и одновременно экологичную технологию очистки природной воды, предназначенную для:

- обезжелезивания;
- деманганации;
- умягчения;
- аэрации;
- дегазации;
- обессоливания;
- частичного обеззараживания.

Новизна и актуальность предлагаемого нами решения состоит в том, что все перечисленные выше стадии обработки осуществляются при помощи одного единственного устройства – гидродинамического генератора колебаний (ГДГК) и без какого-либо применения химических реагентов. При прохождении через ГДГК в жидкости реализуются кавитационные (волновые) эффекты. Данное устройство способствует интенсификации массообменных процессов лишь за счёт использования собственной кинетической энергии обрабатываемого потока жидкости. Так же в

результате такой гидродинамической обработки возрастает насыщение воды воздухом, тем самым способствуя увеличению скорости процесса окисления растворимых форм железа.

Одним из основных недостатков широко применяемых сегодня технологий по обработке воды является их экологическая составляющая и узкий диапазон исходных параметров воды. Как известно, самым дешёвым методом очистки воды, (например, от железа и марганца) является метод с применением химических реагентов. В теплоэнергетике также самой дешевой водоподготовкой считается химический метод. Естественно, применение дополнительных химических реагентов отрицательно влияет на окружающую среду. Наряду с этим стоит отметить, что в последнее время усиливается контроль над сбросами сточных вод предприятий и хранению химикатов, что при различных нарушениях способствует увеличению финишной стоимости очистки воды.

С этим учётом можно констатировать, что перспективным развитием в области водоподготовки с целью очистки её от соединений железа и солей жёсткости являются методы очистки без применения дополнительных химических реагентов. В случае с содержанием в воде растворённого железа скорость его окисления ограничивается временем контакта очищаемой воды и воздуха [1], концентрации кислорода в обрабатываемой воде и от площади

поверхности, образованной на границе фаз воды и воздуха [2]. Следовательно, ключевым фактором в процессе окисления растворённого железа кислородом воздуха является значительное увеличение площади контакта фаз воды и воздуха.

На практике добиваются этого эффекта различными способами:

- ✓ диспергированием воздуха в потоке жидкости [3];
- ✓ диспергированием потока жидкости до капельного состояния [4];
- ✓ кавитационной обработкой жидкости [5].

Изучение размеров пузырьков, полученных при барботировании воздуха в жидкость через мелкопористые элементы [6], дало возможность предположить, что можно добиться ещё меньшего размера пузырьков воздуха в воде, что в значительной степени увеличит площадь соприкосновения фаз воды и воздуха, а так же времени контакта растворённого железа и кислорода, за счёт увеличения времени всплытия более мелких по размерам пузырьков воздуха.

Процесс протекания кавитационных явлений в жидкости способствует максимальному диспергированию воздуха в жидкости (при подаче воздуха из вне), что в свою очередь интенсифицирует процесс окисления форм двухвалентного железа [7]. Использование кавитационных явлений в жидкости с целью увеличения скорости процесса окисления растворённого железа даёт возможность не использовать дополнительных химических реагентов, а так же производить обработку воды за более ускоренный период времени [8].

Природа возникновения кавитационных явлений в жидкости может иметь как акустическую природу так и гидродинамическую, но всегда необходимым условием для возникновения кавитационных процессов в жидкости является наличие растворённых в этой жидкости газов.

Образование кавитационных процессов в жидкости за счёт акустической составляющей происходит в результате распространения в этой жидкости ультразвуковых волн, генерируемых источником. При распространении волн растяжения и сжатия в объёме жидкости происходят разрывы её сплошности, в результате чего и возникают кавитационные процессы. Существенным недостатком акустической кавитационной обработки жидкости является тот факт, что интенсивность излучателей ультразвуковых волн обратно пропорциональна расстоянию от точки жидкости до самого излучателя, что свидетельствует о том, что наиболее интенсивные кавитационные процессы будут протекать ближе к источнику излучения, что в свою очередь приведёт к разрушению самого источника.

Образование кавитационных процессов за счёт гидродинамической составляющей происходит при нарушении сплошности потока обрабатываемой жидкости при резком изменении гидродинамических характеристик самого потока

жидкости. Данные эффекты происходят, к примеру, при резком сужении или расширении потока, при обтекании потоком жидкости твёрдого тела с определённой скоростью, при закручивании потока жидкости для придания ему центростремительного ускорения. На практике использование кавитационных процессов за счёт резкого изменения гидродинамики потока жидкости, в сравнении с акустическим аналогом, показывает, что КПД у гидродинамической кавитации в разы больше, чем у акустической [9].

Как было сказано ранее, в процессе схлопывания кавитационных пузырьков происходит возникновение акустических волн, имеющих скорость, не ниже скорости звука. Также стоит отметить, что в процессе кавитационной обработки жидкости происходит образование акустических волн, имеющих свою частоту со средней амплитудой. В этом плане обработку жидкости, с использованием кавитационных гидродинамических устройств, в общем случае, можно именовать волновой обработкой среды. Условия для создания волновых и кавитационных явлений в жидкости проявляется при соотношении определённых параметров воздействия на эту жидкость и гидродинамических составляющих этой жидкости.

В работах [10-13], показана возможность осуществления насыщения жидкости газами. На рисунке 1 представлена принципиальная схема кавитационного гидродинамического устройства.

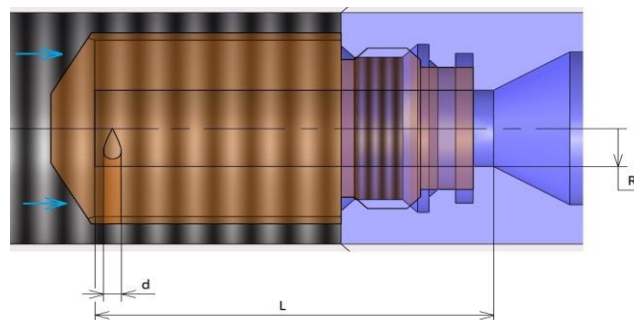


Рис. 1. Схема для расчёта кавитационного гидродинамического генератора колебаний (ГДГК): d – диаметр входных тангенциальных каналов; R – радиус рабочей камеры; L – длина рабочей камеры.

Гидродинамический генератор колебаний состоит из рабочей камеры куда через тангенциальные каналы под определённой скоростью поступает обрабатываемая вода. При попадании жидкости в рабочую камеру её поток претерпевает закручивание, с приобретением центростремительного ускорения, способствующего возникновению разрежения по оси движения потока жидкости в рабочей камеры, что в свою очередь вызывает образование кавитационных явлений в обрабатываемом потоке жидкости [13].

В работах [10-13] приведено, установленное экспериментальным путём, оптимальное отношение площади поперечного сечения к площади боковой поверхности рабочей камеры применяемого кавитационного гидродинамического устройства:

$$\frac{S_3}{S_4} = 0.325 \frac{L^4 Q^3}{S_5^3 R^4} \left[\frac{N}{\left(M - \frac{1}{2} \xi_2 \frac{Q^2}{S_5^2} \right) \left(M + N - \frac{1}{2} \frac{Q^2}{S_5^2} \right)} \right]^{1.5},$$

где

Q – расход жидкости м³/с,
L - длина рабочей камеры, м;

R - радиус рабочей камеры, равный $\sqrt{\frac{S_3}{\pi}}$, м;
S₃ - площадь поперечного сечения рабочей камеры, м²;

S₄ - площадь боковой поверхности рабочей камеры, м²;

S₅ – суммарная площадь сечения входных тангенциальных каналов, м²;

d - диаметр входных тангенциальных каналов, м,

равный $2\sqrt{\frac{S_5}{n\pi}}$, где

n – количество тангенциальных каналов в устройстве;

P₀ - входное давление, Па;

ρ - плотность жидкости, кг/м³;

H - высота столба жидкости в подводящем трубопроводе, м;

ξ₂ - коэффициент гидравлических потерь во входных каналах;

$$N = \frac{Q^2}{S_5^2} \cos^2 \left[\arcsin \left(1 - \frac{d}{2R} \right) \right];$$

$$M = \frac{P_0}{\rho} + gH;$$

В процессе схлопывания кавитационных пузырьков суммарно возникают определённые акустические волны с частото «Ω»:

$$\Omega = \left[\frac{6\sqrt{\pi}Q^2}{S_5 S_3} + \left(\rho M - \frac{1}{2} \xi_2 \frac{Q^2}{S_5^2} \right) \frac{1}{\rho(R - r_k)} \right]^{0.5}$$

, где:

P – давление жидкости на входе в кавитационное гидродинамическое устройство Па,

равное $P_0 + \rho \cdot g \cdot H$;

r_k – радиус кавитационной каверны, м.

Процесс протекания кавитационных явлений в жидкости способствует максимальному диспергированию воздуха в жидкости (при подаче воздуха из вне), что в свою очередь интенсифицирует процесс окисления форм двухвалентного железа. Использование кавитационных явлений в жидкости с целью увеличения скорости процесса окисления растворённого железа даёт возможность не использовать дополнительных химических реагентов, а так же производить обработку воды за

более ускоренный период времени. Предложенный способ может быть использован в области водоподготовки для частных домов, коттеджей и промышленных предприятий, а также сельского и коммунального хозяйства, как в централизованных, так и децентрализованных системах водоснабжения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РХТУ им. Д.И. Менделеева. Номер проекта Х032-2018.

список литературы

1. Николадзе Г.И., Минц Д.М., Кастальский А.А. Подготовка воды для питьевого и промышленного водоснабжения. – М.: Высшая школа. 1984. 368 с.
2. Курбатов А.Ю., Аснис Н.А., Ваграмян Т.А. Способы очистки воды от растворенного железа и марганца. Химическая промышленность сегодня. Москва, 2012. № 4. – С. 48-56.
3. Эжектор и способ его работы: патент RU 2209350 Российская Федерация. Опубликовано 27.07.2003.
4. Установка для обработки и очистки воды: патент RU 2347758 Российская Федерация. Опубликовано 27.02.2009.
5. Установка для обезжелезивания воды: патент RU 2134660 Российская Федерация. Опубликовано 20.08.1999.
6. Аверина Ю.М., Терпугов Г.В., Павлов Д.В., Варакин С.О. Комплексный подход к проблеме обезжелезивания воды. Водоподготовка. Москва, 2010. № 12 (декабрь). – С. 23-26.
7. Кулагин В.А. Гидродинамические воздействия на жидкости, золи, смеси и твердые границы потоков // Вестник КГТУ. Вып.8. Красноярск: КГТУ, 1997. С. 26-43.
8. Федоткин И.М. Физические эффекты при гидродинамической кавитации и их практическое применение. Киев. 2001.
9. Swirling fluid jet cavitation method and system for efficient decontamination of liquids: patent 6,221,260 United States. A61L 2/02. April 2, 1999.
10. Костров С.А. Автоколебательные режимы движения в системах с жидкостью и газом. 1988, 153 с.
11. Калашников Г. А. Автоколебательные режимы в вихревых гидродинамических генераторах колебаний: Автореф. дис. на соиск. учен. степ. канд. техн. наук/ Российская академия наук. Ин-т машиноведения. - М., 1993. 24 с.
12. Украинский Л. Е. Динамические основы волновой технологии: Дис. ... д-ра техн. наук: М., 2006. 239 с.
13. Гидродинамический генератор колебаний: патент RU 2015749 Российская Федерация. Опубликовано 15.07.1994.

УДК 661.715:66.097.3:665.644

Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Черемисин В.А.

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ РЕАКЦИИ ГИДРОИЗОМЕРИЗАЦИИ Н-ГЕКСАНА НА ЦЕОЛИТАХ

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, Россия, Москва.

Черемисин Владислав Анатольевич аспирант факультета Информационных технологий и управления РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва

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

125047, Москва, Миусская пл., д. 9

ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН

Исследована кинетика реакции гидроизомеризации n-гексана на модифицированных цеолитах типа BEA. Эксперименты проводились в проточном реакторе в широком интервале варьирования температур 450-600 К, давлений 1-50 атм, массовых скоростей подачи сырья 0.2-4.0 ч⁻¹, мольных соотношений водород:n-гексан 2.0-8.0. На основании предложенного механизма многомаршрутной реакции гидроизомеризации n-гексана построена соответствующая данному механизму кинетическая модель реакции. По результатам экспериментальных данных методом максимального правдоподобия оценены константы кинетической модели и параметры плотности распределения вероятностей ошибок наблюдений. Доказана адекватность кинетической модели экспериментальным данным.

Ключевые слова: моделирование, механизм реакции, кинетическая модель, оценка параметров, цеолиты, гидроизомеризация, n-гексан

KINETIC STUDIES OF N-HEXANE HYDROISOMERIZATION REACTION OVER ZEOLITES

Pisarenko E. V.¹, Ponomaryov A. B.², Tcheremisin V.A.¹

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

²Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia

The kinetics of the n-hexane hydroisomerization reaction over modified BEA type zeolites was studied. The experiments were carried out in a plug flow reactor in a wide range of temperatures of 450-600 K, pressures of 1-50 atm, mass feedstock flow rates of 0.2-4.0 h⁻¹, molar ratios of hydrogen:n-hexane of 2.0-8.0. Based on the proposed mechanism for the multi-route reaction of hydroisomerization of n-hexane, a kinetic model of the reaction corresponding to this mechanism has been developed. Based on the results of the experimental data, the kinetic model constants and probability density parameters of the observational errors were estimated with the use of the maximum likelihood method. The adequacy of the kinetic model to the experimental data was proved.

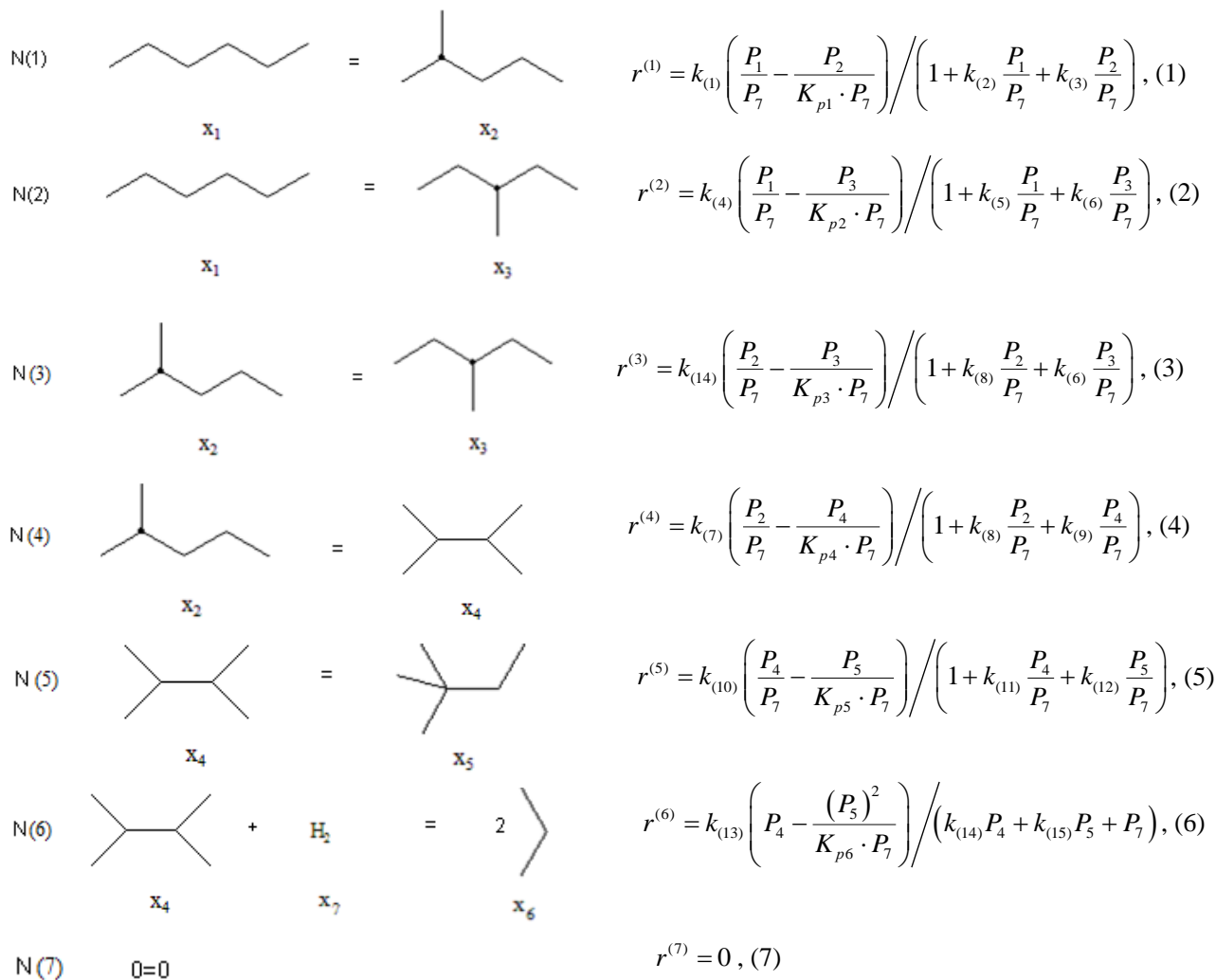
Keywords: modeling, reaction mechanism, kinetic model, parameter estimation, zeolites, hydroisomerization reaction, n-hexane.

В настоящее время все возрастающее значение приобретают процессы синтеза бензиновых моторных топлив – экологически чистых, высокооктановых, с октановыми числами 93-98 по исследовательскому методу – при содержании в них алкилароматических углеводородов менее 20-30 % масс. Следовательно, в топливах должны присутствовать в значительных количествах (более 40-60 % масс.) высокооктановые изоалкановые углеводороды. Традиционно их получают в промышленности изомеризацией низкооктановых парафинов (обычно на основе фракций C₅-C₆), либо алкилированием насыщенных углеводородов олефинами. Получение бензина-алкилата в процессах алкилирования высокозатратно и экологически небезопасно, что сказывается на конечной цене целевого высокооктанового бензина. Использование в бензинах изоалкановых

насыщенных углеводородов экономически существенно более выгодно.

Результаты кинетических лабораторных опытов показывают, что принципиально возможно получать бензины-изомеризаты с октановыми числами 90-92 по исследовательскому методу. Для воплощения этих исследований в промышленности требуется построить высокоточные кинетические модели [1-2]. В предыдущих работах по изомеризации, в частности, n-гексана построены многомаршрутные кинетические модели, не охватывающие некоторые из областей проведения промышленного процесса [3].

Предложен новый 7-маршрутный механизм реакции гидроизомеризации n-гексана, не имеющий перечисленных выше недостатков. Основные маршруты его проведения и скорости реакций по маршрутам представлены ниже.



где $k_{(i)}$ – константа скорости i -ой стадии механизма химической реакции; K_{pi} – константа равновесия i -го маршрута химической реакции; P_i – парциальное давление i -го компонента; $r^{(i)}$ – скорость химической реакции по i -му маршруту; индексы: 1 – н-гексан; 2 – 2-метилпентан; 3 – 3-метилпентан; 4 – 2,3-диметилбутан; 5 – 2,2-диметилбутан; 6 – пропан; 7 – водород.

Проведен каталитический кинетический эксперимент в проточном реакторе под давлением. В ходе проведения каталитических опытов варьировали объемной скоростью сырьевого потока, температурой и давлением в реакторе, мольным отношением водород:н-гексан. Состав продуктов реакции анализировали газохроматографически. Методом максимального правдоподобия по 45 экспериментам оценены кинетические константы модели. Показано, что модель отражает результаты эксперимента в интервалах объемных скоростей потока 0.2-4 ч⁻¹, температур 450-600 К, давлений 1-

50 атм, мольных отношений водород: н-гексан 2.0-8.0.

Полученные результаты моделирования процесса гидроизомеризации н-гексана, подтвержденные результатами эксперимента, позволяют рекомендовать анализируемую модель в практике проектирования промышленных процессов и разработки эффективных систем управления ими.

Список литературы

1. Toch, K. A Systematic Methodology for the Modeling of Intrinsic Chemical Reaction Kinetics: - Hexane Hydroisomerization on a Bifunctional Zeolite / K. Toch, J.W.Thybaut, G.B. Marin // Applied Catalysis A: General. – 2004. – Vol. 269. - P. 203–214.
2. Pisarenko E.V. Analysis and simulation of the nonlinear kinetics of reacting chemical systems / E.V. Pisarenko, V.N. Pisarenko // Theor. Found. Chem. Eng. – 2013. –Vol. 47. –I.2. –P. 128-135.
3. Pisarenko E.V. Analysis and modeling of the hydroisomerization process for n-hexane / E.V. Pisarenko, A.B. Ponomarev, V.N. Pisarenko // Theor. Found. Chem. Eng. – 2018. –Vol. 52. –I.1. –P. 24-34.

УДК 004.666.3-12

Семенов Г.Н., Кольцова Э.М.

ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К ПРОЕКТИРОВАНИЮ БАЗЫ ДАННЫХ ПО КЕРАМИЧЕСКИМ КОМПОЗИТАМ

Семенов Геннадий Николаевич, к.т.н, доцент кафедры информационных компьютерных технологий, e-mail: sem1237@yandex.ru;

Кольцова Элеонора Моисеевна, д.т.н. профессор, заведующая кафедрой информационных компьютерных технологий, e-mail: kolts@muctr.ru;

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

Предложен подход к проектированию базы данных по керамические композитам, учитывающий все особенности сложной структуры многофазных сред композиционных материалов. Разработана инфологическая модель верхнего уровня в виде: модели «сущность – связь» и ключевой модели. Представленные модели позволяют спроектировать базу данных по керамическим композитам, способной к эволюционированию и дать ответы на сложные аналитические запросы.

Ключевые слова: проект базы данных, информационно-логическая модель, керамический композит.

AN APPROACH TO DESIGN OF A DATABASE FOR CERAMIC COMPOSITES

Semenov G.N., Koltsova E.M.

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

An approach to the design of the database on ceramic composites, taking into account all the features of the complex structure of multiphase media composite materials. Designed the information and logical model of the upper level in the form of the model "entity – relationship" and the key-based model. The presented models allow to design a database for ceramic composites, are able to evolve and provide answers to complex analytical queries.

Keywords: database design, information and logical model, ceramic composite.

Введение

В настоящее время спрос на композиционные (включая нано-композиционные) керамические материалы (ККМ) ежегодно растет достаточно большими темпами в связи с широким использованием в различных областях промышленности из-за их уникальных свойств. В связи с этим растет количество публикаций, где отражены способы получения, характерные свойства, области применения таких материалов, что в свою очередь требует систематизации и разработки информационных систем, которые необходимы как для исследователей и технологов в этой области химической технологии.

Разработка адекватной структуры базы данных (БД), учитывающей все необходимые элементы предметной области, способной к эволюционированию и в то же время стабильно работающей, является непростой задачей.

Ранее была разработана реляционная БД для нанокompозитов, состоящая из 12 таблиц [1] и представляющая полимерные нанокompозиты. Однако керамические композиты с их спецификой строения и многокомпонентным составом фаз (матрицы и наполнителя) невозможно представить, не нарушая первой нормальной формы, в подобной реляционной БД с целью построения различных аналитических запросов для пользователей. По нашему мнению необходимо разработать объектно-реляционную модель БД по керамическим композитам, которая позволила бы использовать

всю гибкость объектных БД для такой сложной предметной области как керамические композиты, где существуют различные системы классификации и разработаны антологии верхнего уровня.

Цель данной работы проанализировать публикации по керамическим композитам и разработать информационно-логическую модель БД, которая представляла достаточные данные о свойствах ККМ в зависимости от параметров дисперсионной и дисперсной фазы, а также от параметров процесса получения материала. Реализация этой цели возможна с использованием технологий баз данных и хранилищ данных, кроме того современные информационные технологии позволяют строить сложные аналитические запросы, удовлетворяющие исследователей в этой области.

Описание предметной области

Керамические композиционные материалы состоят керамической матрицы и металлического или неметаллического наполнителя. В качестве матриц используют оксиды металлов и безкислородные соединения – карбиды, бориды, нитриды, силициды.

Существует несколько способов классификации ККМ: по типу матрицы, по структурным признакам и по другим признакам.

По типу матрицы различают ККМ из оксидной керамики, основу которой составляют преимущественно оксиды металлов, и из неоксидной керамики – на основе безкислородных соединений

типа карбидов, боридов, нитридов, силицидов, а также силикаты и алюмосиликаты.

По структурным признакам ККМ подразделяют на дисперсные, армированные, эвтектические.

Дисперсные ККМ состоят из керамической матрицы и распределенных в ней частиц наполнителя.

Армированные ККМ содержат усиливающие элементы (арматуру) различной геометрии,

расположенные в матрице произвольно или ориентировано.

Эвтектические ККМ формируются в процессе направленной кристаллизации эвтектик и состоят из керамической матрицы, в которой распределены выращенные в ней армирующие монокристаллы металла. Характерные свойства получаемых композитов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Основные свойства керамических композитов

Свойство композитной керамики	Единица измерения	Примечание: диапазон
относительная плотность эвтектики	%	$\geq 99,9$
диэлектрическая проницаемость при 1 МГц		8,5 – 10,0
удельное электрическое сопротивление	Ом*см	$6 \cdot 10^{14}$
прочность при изгибе	МПа	≥ 400
модуль упругости	ГПа	не менее 350
ударная вязкость		
микротвердость	ГПа	более 16
удельная масса	г/см	от 3,3 до 3,0
пористость	%	не более 1,0
остаточная пористость	%	не более 3
модуль продольной упругости	ГПа	70-85
предел прочности при растяжении	МПа	180-340
предел прочности при сжатии	МПа	200-320
ударная вязкость	кДж/м ²	0,15-0,2
удельная теплоёмкость	Дж/(кг*К)	800-950
коэффициент теплопроводности	Вт/(м*К)	105-120

Информационно-логическая модель

Процесс проектирования БД представляет собой последовательность переходов от неформального словесного описания предметной области к формализованному описанию объектов предметной области в терминах некоторой модели.

На этапе системного анализа предметной области выполнено подробное описание ее объектов и связей между ними. Сложность формализованного описания ККМ состоит в том, что выше перечисленные керамические материалы и их смеси с минеральными добавками используется для получения или в качестве матрицы или наполнителя композита. Из этого следует, что тип матрицы и наполнителя определяется типом преобладающего вещества в композите, поэтому не всегда точно удается определить тип композита. На характерные свойства композита сильно влияет геометрия и размеры частиц армирующего вещества, что приводит к созданию дополнительных сущностей и связей модели предметной области.

Инфологическая (логическая) модель представляет собой формализованное описание предметной области, которое в дальнейшем служит для согласования требований к БД между заказчиком и проектировщиком. Если придерживаться методологии структурного подхода для моделирования структур данных информационных систем (IDEF1X), то модели данных делятся на уровни: верхнего (модели предметной области проекта) с и нижнего (модели реализации с привязкой к выбранной СУБД).

Модели верхнего уровня в свою очередь делятся на две категории: ER(Entity Relationship)-диаграммы («сущность-связь»), содержащие наиболее общие для рассматриваемой предметной области сущности и связи между ними, и KB(Key Based)-модели (основанные на ключах), содержащие все сущности с их основными атрибутами и отражающие детали и особенности структуры данных предметной области.

Начальным этапом разработки инфологической модели было выделение основных сущностей и связей между ними и построение диаграммы «сущность-связь». На рисунке 1 представлена ER-диаграмма БД по керамическим композитам в нотации IDEF1X верхнего уровня, где представлены основные сущности, информация о которых необходима в решения задач информационной системы.

Данная модель предметной области позволяет представлять следующую информацию, связанную с конкретным композитом:

- информацию по статьям: авторы, наименование, год издания, страна, название журнал, номер журнала, страницы;
- информацию по патентам: название, номер патента, рубрика МПК, авторы;
- содержание дисперсионной среды и дисперсной фазы, армирующего компонента композита;
- свойства рассматриваемого композиционно материала, методы анализа свойств;

д) значения характерных для конкретного композита свойств;

е) способы получения и применения.

Следующим этапом разработки инфологической модели было выделение ключевых атрибутов-

признаков сущностей и полного набора атрибутов, относящихся к области данного проекта реализации, то есть создание полной инфологической модели данных уровня проекта.



Рис. 1. ER-диаграмма верхнего уровня в нотации IDEF1X

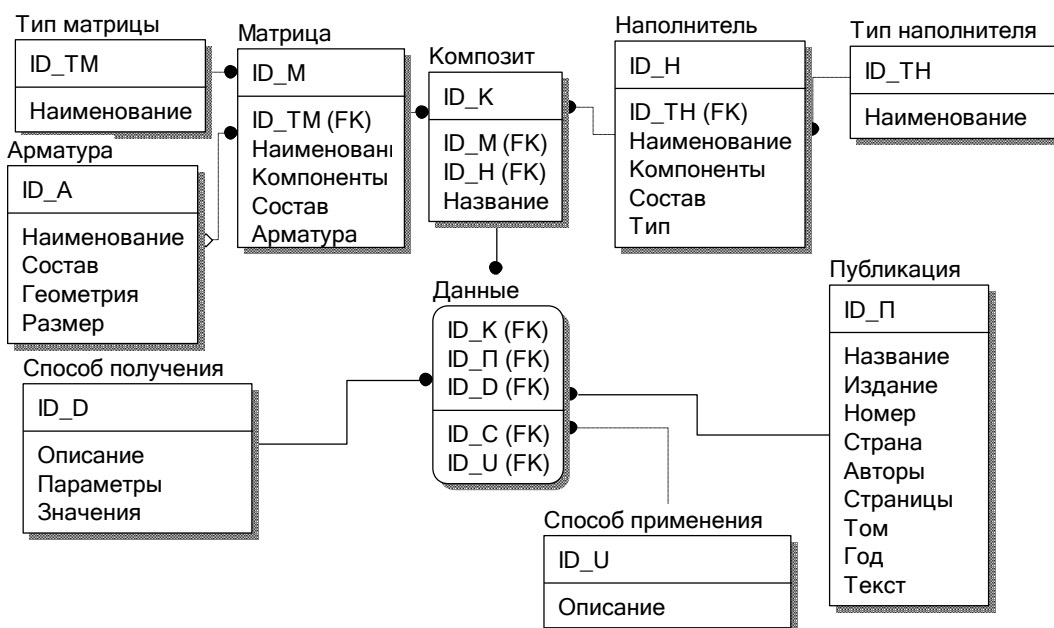


Рис. 2. Ключевая модель верхнего уровня в нотации IDEF1X

Выводы

Предложенный подход к проектированию БД с использованием методов технологии хранения данных позволяет учесть все особенности структуры и свойства сложных композиционных материалов, а также строить аналитические запросы по различным параметрам таких систем. Кроме того можно выявить неисследованные области параметров матрицы и наполнителя при конкретных условиях получения материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Соглашения о

предоставлении субсидии № 14.574.21.0158, уникальный идентификатор работ (проекта) RFMEF157417X0158.

Список литературы

1. Василенко Е.А., Мещерякова Т.В., Кольцова Э.М., Бацелев Ф.В, Порысева Е. А. Разработка фактографической базы данных по нанокompозитам // Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология. — 2010. — Т. 53, № 8. — С. 103-106.

УДК 524.8

Москвичев С.С., Хабибова Н.З.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЁТА ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ПЛОТНОСТИ ВСЕЛЕННОЙ

Москвичев Станислав Сергеевич, магистрант 2-ого года обучения факультета Нефтегазохимии и полимерных материалов кафедры Химической технологии углеродных материалов;

Хабибова Наталья Замиловна, к.т.н., доцент кафедры Процессов и аппаратов химической технологии, email: adrianaadeva@yandex.ru;

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
125047, Москва, Миусская площадь, 9

Приведен расчет плотности энергии-массы Вселенной. В настоящей работе используются данные, полученные наблюдательной астрономией. Предполагается, что дальнейшее изучение квантового вакуума должно пойти только на благо человечества.

Ключевые слова: Вселенная, квантовый вакуум, плотность массы-энергии.

THEORETICAL MODEL OF CALCULATION OF ENERGY DENSITY OF THE UNIVERSE

Moskvichev S.S., Habibova N.Z.

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

The calculation of the density of energy-mass of the Universe. This paper uses data from observational astronomy. It is assumed that the further study of the quantum vacuum should go only for the benefit of mankind.

Keywords: Universe, quantum vacuum, mass-energy density.

Астрономия является одной из самых древних и самых современных наук. Познание Вселенной прошло путь от представления плоской Земли на трех китах до геоцентрической модели Птолемея, гелиоцентрической системы Галилея и Коперника. Открытие закона всемирного тяготения Исааком Ньютоном открыло путь истинно научному изучению Мироздания.

Проблема возникновения Вселенной занимало умы людей очень давно. Согласно мифам многих народов, особенно монотеистических религий, Вселенная возникла не в далеком прошлом. Множество предсказаний возраста Вселенной и пророчества о конце света не подтверждались.

Научно-технический прогресс человечества сделал Вселенную объектом научного исследования. Появились разделы науки о Вселенной – космология, наблюдательная и теоретическая физика (астрофизика), гравитация, квантовая механика.

Основными наблюдаемыми объектами Вселенной являются галактики, в том числе и Млечный путь – Галактика, к которой относится и Солнечная система, звезды, межзвездный газ и пыль (межзвездные туманности).

Как известно, Галактики состоят из сотен миллиардов звезд различной массы, в которых происходит превращение простейших элементов (водорода и гелия) в углерод, азот, кислород, вплоть до трансурановых элементов. Эти элементы являются основой для образования планетных систем из звезд второго и третьего поколений, например, Солнца. Этот процесс происходил в прошлом и продолжается в настоящее время.

Доказано, что в современном состоянии вселенная возникла конечное время назад. Возраст Вселенной оценивают 14-15 миллиардов лет. Замечательной особенностью Вселенной является изотропность и структурность в космических масштабах. Это подтверждается данными наблюдательной астрономии, изотропность реликтового излучения с температурой 2,7 К.

Американский астроном Хаббл (E. Hubble) в 1929 году открыл раздувание Вселенной, т.е. Вселенная эволюционирует, галактики удаляются друг от друга и тем быстрее, чем они дальше.

Гипотезу возникновения Вселенной выдвинул Гамов, аспирант Фридмана. Эта гипотеза называется Большим взрывом сингулярности, т.е. точки нулевого объема, очень высокой плотности и температуры. Сам термин «Большой взрыв» оказался очень живучим и в настоящее время то и дело встречается в астрономической литературе.

Судьба эволюционирующей, раздувающейся Вселенной интересует космологов. Ключевую роль в судьбе Вселенной (закрытая, открытая, стационарная) играет плотность энергии-массы (эквивалентны по Эйнштейну $E = m \cdot c^2$, где E – энергия, m – масса, c – скорость света).

Установлено, что плотность энергии-массы Вселенной близка к критической, грань между закрытой, т.е. переход от расширения к сжатию, и открытой, т.е. бесконечно расширяющейся.

Отклонения плотности энергии-массы вселенной от критической оценивается в 10^{-60} (P.C.W. Daviesh). Высокая степень близости или даже равенство подтверждают измерения высокоточными приборами

реликтового излучения. Температура реликтового излучения оказалась равно $2,725 \pm 0,001$ К. Обнаружена также анизотропность излучения порядка 10^{-4} - 10^{-5} К.

Вопрос плотности энергии-массы осложняется тем обстоятельством, что суммарная масса наблюдаемой материи составляет менее 1% от критической. Наблюдения вращения галактик и скоплений галактик позволяет эту разницу довести до 10-25%. Эту разницу назвали темной материей (не излучает и не поглощает, т.е. не наблюдается). Оставшиеся 75-90% присвоили название темной энергии.

В то же время, очевидно, что наблюдаемая материя возникла из поля пространство-время. Хотя такое название поля не самое удачное, хорошее имя для любого объекта имеет большое значение для усвоения, если не сущности, то популяризации. Можно предложить такие названия как квантовый вакуум, скалярное поле и т.д.

Мнение С. Хокинга (S. Hawking) о том, что полная энергия Вселенной равна нулю не убедительно. Известно, что вакуум участвует в дальнедействующих взаимодействиях – электромагнитном и гравитационном. Возникают понятия отрицательной энергии (раз есть положительная в виде галактик, звезд, планет и т.д.), массы, температуры по Кельвину. Это разумеется не доказательство, на основании для сомнения, но авторитет Хокинга слишком велик для отрицания его мнения.

Логично предположить, что до возникновения, т.е. до «Большого взрыва», энергетическое поле (квантовый вакуум, скалярное поле) существовало. Это можно было назвать «пустым» пространством или «пустой» Вселенной. По этой гипотезе можно вычислить плотность энергии-массы, исходя из факта практически близкой или даже равной критической. Учитывая, что поле равномерно в пространстве, по формуле Шварцшильда (K. Schwarzschild) имеем: $R = \frac{2 \cdot G \cdot M}{c^2}$, где R – гравитационный радиус сферы, м, c – скорость света, равная $3 \cdot 10^8$ м/с, M – масса, кг, G – гравитационная постоянная, равная $6,67 \cdot 10^{-11}$ м³/(кг·с²). Энергия-масса объема одного кубометра (радиуса R=0,62 м) равна:

$$M_V = \frac{R \cdot c^2}{2G} = \frac{0,62 \cdot (3 \cdot 10^8)^2}{2 \cdot 6,67 \cdot 10^{-11}} = 4,18 \cdot 10^{26} \text{ кг}$$

Энергия, в свою очередь:

$$E = M_V \cdot c^2 = 4,18 \cdot 10^{26} \cdot (3 \cdot 10^8)^2 = 3,762 \cdot 10^{43} \text{ Дж/м}^3.$$

Кстати, факт постоянства скорости света в нашей Вселенной, измеренной с большой точностью, тоже является свойством поля данной Вселенной.

Сценарий возникновения и развития Вселенной с образованием материальных объектов (фотоны, барионы, звезды, галактики и т.д.) в предположении, или даже, по мнению основоположников современной космологии, таких как Эйнштейн, Фридман, Хокинг и др., приводит к мысли о сферической форме, т.е. Вселенная-пространство до возникновения наблюдаемых объектов тоже имела сферическую форму.

Другой логичной гипотезой является вращение Вселенной-пространства. Вращение свойственно всем известным объектам материи: ядрам (адрон), планетам, звездам, галактикам.

Вращение создает центробежную силу, т.е. силу отталкивания, раздувания. Такую силу (силу отталкивания, антигравитации) в свою общую теорию относительности (ОТО) Эйнштейн ввел с целью создания модели стационарной Вселенной. Однако после открытия факта раздувания он отказался от этой идеи, назвав это своей ошибкой.

Исследование энергетического поля (квантовое поле, гравитационное поле) развивалось по нескольким направлениям, таким как квантовая гравитация, квантовая хромодинамика (КХД), теория суперструн, супергравитация. Определенные успехи достигнуты в электродинамике, электрослабом взаимодействии. КХД не включает гравитацию, электросильное взаимодействие (структура ядер, адронов), упирается в энергии порядка 10^{15} - 10^{16} ГэВ. Включение гравитации в теорию (теорию суперобъединения) приведет к еще большим, по крайней мере, на несколько порядков, энергиям, например, до 10^{28} ГэВ.

Экспериментальные исследования таких высоких энергий требует создания сложных и дорогостоящих инструментов: наземных и орбитальных телескопов, синхрофазотронов, большого коллайдера. Мощным средством теоретического исследования является математика, вооруженная суперкомпьютерами. Впечатляют достижения квантовой метрологии: время до 10^{-11} секунд, пиковольтметрия до 10^{-14} В, пикоамперометрия до 10^{-15} А, длин до 10^{-11} м. Бурное развитие науки позволяет надеяться, если не полностью решать, то значительно приблизиться к решению законов возникновения, эволюции и судьбы Вселенной.

Возникает тревожный вопрос: любое достижение науки и техники не всегда идет на цели создания благ, часто на создание средств разрушения. Атомная энергия – это не только электростанции, но и бомбы. Термоядерная энергия пока идет только на бомбы, использование ее в мирных делах не достигнуто.

Энергия квантового вакуума-поля на много порядков превосходит известные источники энергии. Такие уровни энергии опасны не только планете, солнечной системе, но и не благоприятны для развития живых организмов, разума и интеллекта. В целом преобладает скептицизм – основа свободомыслия, критики догм науки, религии и философии.

Список литературы

1. Хокинг С. Краткая история Вселенной. – СПб.: Амфора, 2010. – 496 с.
2. Фейгин О. О. Поразительная Вселенная. – М.: Эксмо, 2011. – 288 с.
3. Кристофер де При, Алан Аксельрод: пер. с англ. М. Заболотских. Занимательная астрономия. Все тайны Вселенной. – М.: АСТ: Астрель, 2008. – 374 с.

УДК 628.4

Жуков Д.Ю., Аверина Ю.М., Ветрова М.А.

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ РЕЦИКЛИНГ ОТХОДОВ ПЕРЕРАБОТКИ ОБЕДНЕННЫХ МАРГАНЦЕВЫХ РУД

Жуков Дмитрий Юрьевич – начальник управления научной и инновационной политики, Российский университет дружбы народов (РУДН).

117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6.

Аверина Юлия Михайловна – к.т.н., доцент каф. ИМиЗК, председатель ОСМУСС РХТУ имени Д.И. Менделеева, e-mail: averinajm@mail.ru;

Ветрова Маргарита Александровна – студентка каф. ИМиЗК РХТУ имени Д.И. Менделеева;

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

125190, Москва, Миусская пл., 9

В данной статье описаны разработанные установки рециклинга двух основных видов отходов образующихся в ходе технологической переработки обедненного марганцевого сырья. Предложенный способ внедрения в технологическую схему переработки марганцевых руд отдельного блока переработки позволит перерабатывать отходы в высококачественную конкурентоспособную марганцевую продукцию. Разработанные решения направлены на повышение экологической безопасности технологической переработки обедненного марганцевого сырья.

Ключевые слова: обеднённые марганцевые руды, отходы, экологическая безопасность.

TECHNOLOGICAL RECYCLING OF WASTE MANUFACTURING DIFFERENT MANGANEOUS ORE

Zhukov D.Yu.*, Averina Yu.M., Vetrova M.A.

*Peoples Friendship University of Russia;

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia.

This article describes the developed recycling facilities for the two main types of waste produced during processing of depleted manganese raw materials. The proposed method of introducing into the technological scheme of processing of manganese ores of a separate processing unit will allow to process waste into high-quality competitive manganese products. The developed solutions are aimed at improving the ecological safety of technological processing of depleted manganese raw materials.

Key words: depleted manganese ores, waste, ecological safety.

Систематические научно-прикладные исследования, направленные на разработку комплекса гидрометаллургических технологий и технологического оборудования для переработки бедного, труднообогатимого марганцевого сырья (бедные фосфористые руды (карбонатные и окисные), отвалов горно-обогатительных комбинатов, шлаков ферросплавных производств, донных (шельфовых) железомарганцевых конкреций) в высококачественную конкурентоспособную марганцевую продукцию (чистые оксиды марганца, марганцевые ферросплавы, металлический марганец и лигатуры) проводятся в России для обеспечения экономической (обеспечение экономики страны марганцем) и экологической безопасности (минимизация техногенных отходов и вовлечение в технологический оборот труднообогатимого сырья) [1].

В ходе технологической переработки обедненного марганцевого сырья образуется два основных вида отходов:

1. жидкие – отходы этапа гидрометаллургического передела, которые сравнительно просто (выпаркой и кристаллизацией) на соответствующих участках будут превращаться в ценный побочный продукт – удобрение; одновременно будет образовываться конденсат, подлежащий применению для технологических нужд;

2. твёрдые – отсеивы, хвосты, шламы и шлаки, которые можно использовать для производства стройматериалов, что потребует создания отдельного технологического этапа переработки твёрдых отходов (этапа рециклинга).

Спецификация типов отходов, образующихся на каждом их этапов технологического комплекса переработки марганцевых руд, приведена в табл. 1.

Таблица 1 – Отходы технологического комплекса

Стадия	Процесс	Отходы и побочные продукты производства
Первый уровень комплекса	Физико-механическая подготовка и обогащение марганецсодержащего сырья	отвалы (хвосты) марганцевых руд с содержанием марганца менее 7 %.
Второй уровень комплекса	Узел сульфатного выщелачивания	рудный шлам с низким (< 3 %) содержанием марганца в нейтральной форме
	Нитратный узел	кальций-магниевая селитра
	Хемосорбционный узел	сульфат аммония. широко используется в качестве азотного удобрения
Третий уровень комплекса	Электrolитический узел	шлаки, частично могут использоваться в качестве стройматериалов

Для переработки подобных отходов в стройматериалы разработано несколько технологий, успешно внедрённых в промышленность. В качестве начальной стадии рециклинга рекомендуется технология производства стенового камня из гипсосодержащих отходов электролиза.

Технологическая схема предусматривает следующие пределы.

Приготовление суспензии. Влажный отход разбавляется оборотным фильтратом до получения соотношения Ж:Т = 0,8 – 1,1, перемешивается мешалкой, туда же вводится добавка, регулирующая процесс кристаллизации полугидрата, в количестве 0,01-0,03% от массы сухого отхода.

Автоклавная обработка. Приготовленная суспензия насосом под давлением 2–3 ати непрерывно подается в верхнюю часть автоклава с мешалкой, где происходит дегидратация гипса и кристаллизация из раствора полугидрата сульфата кальция α -формы. Через трубу перекачивания из нижней части автоклава суспензия полугидрата непрерывно поступает на фильтрацию.

Фильтрация. Суспензия полугидрата охлаждается до 90-95°C в расширителе и поступает на фильтр, где обезвоживается. Горячий фильтрат подается на приготовление суспензии, а охлажденный – на узел формования изделий. Полученный после фильтра материал с влажностью 7 – 12% уже является влажным вяжущим, так как состоит в основном из полугидрата сульфата кальция.

Формование изделий. Отфильтрованный материал как полуфабрикат подается в смеситель-активатор, где смешивается с охлажденным фильтратом и подвергается активации для ускорения твердения изделий. Полученной формовочной массой литейной консистенции заполняются формы карусельной

машины. Через 10-15 мин изделия затвердевают, выталкиваются из форм, укладываются на поддоны, пакетируется при помощи упаковочного устройства и в пакетированном виде отправляются на склад готовой продукции.

Для повышения водостойкости в суспензию (до автоклавной обработки) могут вводиться тонкомолотые гидравлические добавки (шлаки, золы, цемент и др.), а для экономии вяжущего в формовочную массу – различные заполнители. Все оборудование линии выпускается в Российской Федерации.

Основная побочная продукция хемосорбционного узла – 23 % раствор аммония сернокислого. После упарки до 35 %, этот раствор является товарным продуктом, соответствующим требованиям стандарта [2]. После упаривания до кристаллического состояния, он становится товарным продуктом. Используется в сельском хозяйстве в качестве азотного удобрения. Характеристика аммония сернокислого безводного $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ (ГОСТ 9097-82): Молекулярная масса – 132,13, плотность 23 % раствора – 1150 кг/м³, ПДК = 10 мг/м³ (3 класс опасности в воде). Растворимость в воде: при 25°C – 46,30 %, при 100°C – 50,42 %. Не горюч, не взрывоопасен.

Основная побочная продукция нитратного узла – раствор нитратов кальция и магния. После упаривания и гранулирования этот отход нитратной технологии превращается в весьма ценный продукт – кальций-магниевую селитру [3]. Этот продукт применяются во множестве отраслей промышленности – от сельского хозяйства, до производства взрывчатых веществ. Так как состав этого продукта весьма сильно зависит от состава исходного сырья, на данном этапе не осуществляется привязка к требованиям какого-либо конкретного стандарта.

В рамках технологического комплекса рециклинга для запуска технологической установки необходимо, чтобы действовал участок выпаривания и кристаллизации растворов.

Для валоризации жидких отходов переработки обедненных марганцевых руд разработан этап рециклинга жидких отходов, состоящий из двух основных узлов:

1. Узел упаривания жидких отходов, поступающих со второго технологического уровня (растворов сульфата аммония или смеси нитратов кальция и магния). Главный аппарат Узла упаривания – электрический упариватель с перемешивающим устройством.
2. Узел сушки и грануляции сгущённых жидких отходов. Главный аппарат Узла – аппарат сушки во взвешенном слое (С1).

Узел упаривания жидких отходов. Упариватель жидких отходов представляет собой ёмкость с внешним электрическим нагревом, перемешивающим устройством и управляющей автоматикой, обеспечивающей необходимую температуру нагрева, его равномерность и степень упаривания. Пар из этого аппарата, через обычный конденсатор, снабжает этап гидрометаллургической переработки и электролиза водным конденсатом, обеспечивающим необходимую чистоту продукции. Упаренный раствор поступает либо на продажу (в тёплый сезон, как жидкое удобрение) либо – на Узел грануляции, для высушивания и упаковки в мешки.

Узел сушки и грануляции сгущённых жидких отходов. Узел грануляции состоит из нескольких аппаратов (рис. 1). Сушка предварительно сгущённых жидких отходов происходит на инертных фторопластовых частицах цилиндрической формы. Аппарат для сушки раствора состоит из основного корпуса, в котором установлено газораспределительное устройство. Газораспределительное устройство с боковой подачей газа выполнено в виде желоба с переменным по высоте сечением, что обеспечивает устойчивый и равномерный контакт горячего газа как с инертными частицами,

находящимися во взвешенном состоянии, так и с высушиваемым материалом.

При тангенциальном подводе газа образуется фонтан инертных частиц, движущихся с высокой скоростью, что обеспечивает устойчивый гидродинамический режим сушки раствора и дробления высушенной пленки. По центру происходит загрузка и распыление раствора сульфата аммония пневматической форсункой.

Готовый продукт выгружается из аппарата вместе с отработанным воздухом через трубопровод. Так как скорость в трубопроводе ниже скорости витания частиц инерта, исключается вынос фторопластовых частиц.

Аппарат снабжен окном-люком, которое может использоваться для наблюдения за работой аппарата и для обслуживания аппарата (загрузки и выгрузки материала, чистки аппарата и т.д.).

Предусмотрена теплоизоляция нижней части аппарата матами из базальтового волокна толщиной 50 мм. Желательно теплоизолировать трубопроводы топчных газов и циклон во избежание их охлаждения до точки росы.

Раствор сульфата аммония, содержащий не более 77 % влаги, подается из исходной емкости в скруббер, где используется для поглощения пыли и подупаривается. Раствор в скруббере циркулирует с использованием бака и насоса, чтобы обеспечить требуемую плотность орошения. Упаренный и сконцентрированный раствор подается на сушку в сушильный аппарат насосом. Снизу в сушильный аппарат вентилятором подается воздух, подогретый в калорифере. В сушильном аппарате, распыляемая жидкость высыхает на поверхности инертных тел, дробится и, в виде порошка, выносится с отработанным воздухом в прямоточный циклон диаметром 150 мм, высотой 700 мм.

Мелкая фракция, уловленная циклоном, выгружается из него в бункер выгрузки готовой продукции, а отработанный воздух, прошедший сухую очистку в циклоне, вместе с мелкой пылью поступает для дальнейшей очистки в скруббер, а затем, дымососом, выбрасывается в атмосферу через трубу.

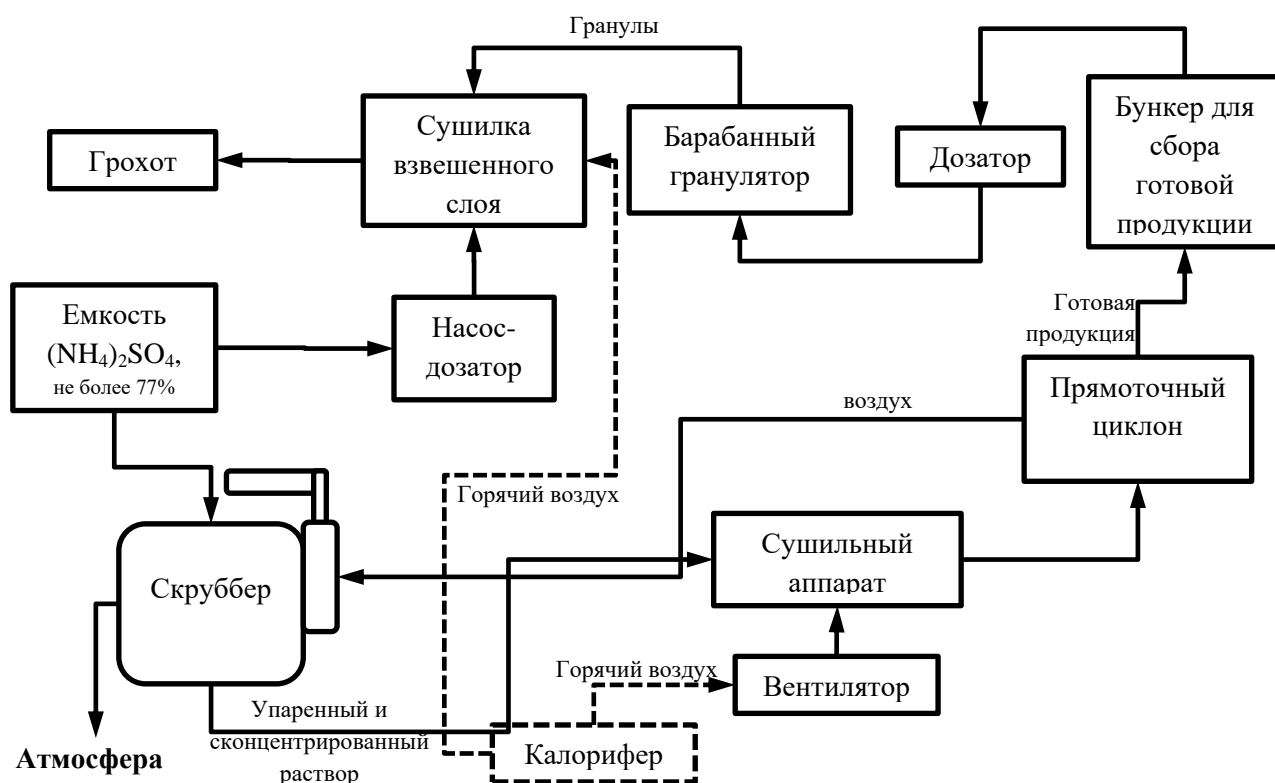


Рис. 1. Узел сушки и грануляции сгущённых жидких отходов

Расход воздуха, подаваемого в сушильный аппарат, и разрежение в аппарате контролируются регуляторами частоты вращения вентиляторов.

Далее пыль, выгруженная из циклона в бункер готового продукта, дозатором, подаётся в барабан-гранулятор. Одновременно насосом-дозатором туда же подается раствор сульфата аммония из ёмкости. Полученные в барабане агломерированные влажные гранулы, высыпаются в сушилку взвешенного слоя, где сушатся нагретым воздухом из калорифера.

Отработанный воздух из сушилки, вместе с мелким продуктом, подается в циклон, и далее — в скруббер. Высушенные гранулы отправляются на грохот, где разделяются по верхнему размеру. Нижняя фракция упаковывается, как готовый продукт. Крупная фракция (которой предполагается немного) высыпается в мешок и затем добавляется в исходный раствор.

Выводы

В технологическом комплексе разработаны установки рециклинга двух основных видов отходов:

– жидких, поступающих с Блока гидрометаллургического передела, которые выпаркой и кристаллизацией на соответствующих участках этого Блока будут превращаться в ценный побочный продукт (удобрение), заодно давая конденсат для технологических нужд;

– твёрдых – отсевы, хвосты, шламы и шлаки, которые можно использовать для производства стройматериалов путем создания отдельного Блока переработки твёрдых отходов.

Разработанные решения направлены на повышение экологической безопасности технологической переработки обедненного марганцевого сырья.

Литература

1. Zhukov D., Malkov A. Advances in Manganese production technology: a new source of economic and environmental security for Russia // Proceedings of the 14th International Multidisciplinary Scientific Geoconference SGEM-2014. Albena, 2014. Volume 4. Environmental Economics. P. 11-16.
2. ГОСТ 10873-73 Аммоний серноокислый (сульфат аммония) очищенный. Технические условия. [Электронный ресурс]. URL: <http://protect.gost.ru/document.aspx?control=7&id=167508>.
3. ГОСТ 4142-77 Кальций азотнокислый 4-водный. Технические условия. [Электронный ресурс]. URL: <http://protect.gost.ru/v.aspx?control=8&baseC=-1&page=0&month=-1&year=-1&search=&RegNum=1&DocOnPageCount=15&id=1>

УДК 519.852.3

Дягилева Ю.Ю., Егоров А.Ф.

РЕШЕНИЕ ТРАНСПОРТНОЙ ЗАДАЧИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАКЕТОВ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ ДЛЯ ПРЕДПРИЯТИЙ ПО ПРОИЗВОДСТВУ АЗОТНЫХ УДОБРЕНИЙ В РОССИИ

Дягилева Юлия Юрьевна, магистрант 1 курса факультета информационных технологий и управления РХТУ им. Д.И. Менделеева, e-mail: little.hustle@gmail.com

Егоров Александр Фёдорович, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой компьютерно-интегрированных систем в химической технологии РХТУ им. Д.И. Менделеева

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

В работе сформулирована транспортная задача для химических предприятий по производству азотных удобрений, проведён анализ основных производителей и потребителей азотных удобрений в России. Транспортная задача решена в трех пакетах прикладных программ. Анализ полученных результатов показал, что правильное формулирование задачи и выбор программных средств для ее решения позволяет оптимизировать планирование потоков транспортировки важных видов химической продукции в России от производителей к потребителям.

Ключевые слова: транспортная задача, MS Excel, Mathcad, Matlab, азотные удобрения, задача линейного программирования.

SOLUTION OF THE TRANSPORT TASK WITH THE USE OF APPLIED PROGRAM PACKAGES FOR ENTERPRISES FOR MANUFACTURING VARIOUS FERTILIZERS IN RUSSIA

Diagileva J.J., Egorov A.F.

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

In work the transport task for chemical enterprises on production of nitrogen fertilizers is formulated, the analysis of the main producers and consumers of nitrogen fertilizers in Russia is carried out. The transportation problem is solved in three application packages. The analysis of the obtained results showed that the correct formulation of the problem and the choice of software to solve it allows to optimize the planning of the flow of transportation of important types of chemical products in Russia from manufacturers to consumers.

Keywords: transport task, MS Excel, Mathcad, Matlab, nitrogen fertilizer, linear programming task.

Введение. При решении задач, связанных с планированием, часто приходится сталкиваться с транспортной задачей, которая является одной из типичных задач исследования операций, относящихся к классу задач линейного программирования. Для решения транспортных задач в работе [1] рассмотрена постановка и методы решения задач линейного программирования.

В пособии [2] рассматривается транспортная задача при планировании рациональных перевозок грузов, загрузки оборудования и других организационных процессов. В одних случаях это означает минимизацию стоимости, в других более важным является выигрыш времени. Первая задача называется транспортной задачей по критерию стоимости, вторая – по критерию времени.

Классическая транспортная задача была не раз сформулирована разными учеными. Звучит она так: «Имеются m пунктов отправления A_1, A_2, \dots, A_m , в которых сосредоточены запасы однородных грузов в количестве соответственно a_1, a_2, \dots, a_m единиц. Имеются n пунктов назначения B_1, B_2, \dots, B_n , нуждающихся в b_1, b_2, \dots, b_n единиц груза.

Известны стоимости (или расстояния) c_{ij} перевозки единицы груза из каждого пункта отправления $A_i, i = 1, 2, \dots, m$, до каждого пункта назначения $B_j, j = 1, 2, \dots, n$. Требуется найти оптимальный план перевозок груза, чтобы затраты на перевозку были минимальными[3].

Транспортная задача для химических предприятий по производству азотных удобрений в России. В работе было выбрано четыре крупнейших в России предприятия, производящие и поставляющие азотные удобрения: АО «Новомосковский азот», ОАО «Невинномысский азот», ОАО «Тольяттиазот» (ТоАЗ), Филиал «Азот» АО «ОХК «УРАЛХИМ» в городе Березники. Месячные запасы аммиачной селитры, которыми располагает предприятие, ограничены.

Чтобы определить потребителей, которые регулярно заказывают аммиачную селитру у вышеуказанных производителей, были проанализированы поставки каждого из предприятий за 2016 год. Из этих списков было выбрано четыре агропромышленных предприятия, которые регулярно делают заказ на аммиачную селитру у ранее указанных поставщиков продукции:

«ЮЖНЫЙ» аграрный комбинат, ООО «Росагро-Заволжье», ООО «Агрофирма КРИММ», СПК «Новопокровский». Перевозка аммиачной селитры может осуществляться различными видами транспорта: железнодорожным сообщением, автотранспортом, водным транспортом. Самый оптимальный и надежный из них – железнодорожный транспорт.

Тарифы на перевозку аммиачной селитры представлены на сайте РЖД: 2,7 руб. за перевоз 1 т груза на 1 километр.

Для удобства восприятия информации была составлена таблица (табл.1), где приведены запасы всех выбранных производителей, спрос всех потребителей и тарифы на перевозку груза от производителей к потребителям.

Таблица 1. Запасы, спрос, тарифы на перевозку

Производители/Потребители	Тарифы на перевозку, тыс. руб				Запасы тыс. т
	АО «ЮЖНЫЙ»	ООО «Росагро-Заволжье»	ООО «Агрофирма КРИММ»	СПК «Новопокровский»	
АО "Новомосковский азот"	1846,8	4830,3	1190,7	1846,8	117
ОАО "Невинномысский азот"	2273,4	5772,6	3526,2	2273,4	110
ОАО "Тольяттиазот"	864	2964,6	1266,3	864	84
"Азот" УралХИМ	2970	1620	2251,8	2970	67
Спрос, тыс. т	90	23	69	88	

Необходимо найти такой план перевозки аммиачной селитры от производителей к потребителям, чтобы совокупные затраты на перевозку были минимальными.

Обозначим через x_{ij} количество единиц сырья, перевозимого от i -го производителя на j -е предприятие. Задача является открытой, так как сумма запасов аммиачной селитры $117 + 110 + 84 + 67 = 378$ тыс. т у производителей не равна сумме потребностей в аммиачной селитре у потребителей: $90 + 23 + 69 + 88 = 270$ тыс. т. Поэтому необходимо ввести фиктивного потребителя с объемом потребностей в 108 тыс. т аммиачной селитры.

Условия доставки необходимого и вывоза имеющегося сырья обеспечиваются выполнением следующих равенств:

$$x_{11} + x_{12} + x_{13} + x_{14} = 117 \quad (1),$$

$$x_{21} + x_{22} + x_{23} + x_{24} = 110 \quad (2),$$

$$x_{31} + x_{32} + x_{33} + x_{34} = 84 \quad (3),$$

$$x_{41} + x_{42} + x_{43} + x_{44} = 67 \quad (4),$$

$$x_{11} + x_{21} + x_{31} + x_{41} = 90 \quad (5),$$

$$x_{12} + x_{22} + x_{32} + x_{42} = 23 \quad (6),$$

$$x_{13} + x_{23} + x_{33} + x_{43} = 69 \quad (7),$$

$$x_{14} + x_{24} + x_{34} + x_{44} = 88 \quad (8),$$

$$x_{ij} \geq 0, \quad i = 1, 2, 3, 4, \quad j = 1, 2, 3, 4.$$

При данном плане перевозок суммарная их стоимость составит:

$$R = 3113x_{11} + 1846,8x_{12} + 4830,3x_{13} + 1190,7x_{14} + 189x_{21} + 2273,4x_{22} + 5772,6x_{23} + 3526,2x_{24} + 3294x_{31} + 864x_{32} + 2964,6x_{33} + 1266,3x_{34} + 5400 * x_{41} + 2970 * x_{42} + 1620 * x_{43} + 2251,8 * x_{44}$$

Таким образом, математическая постановка задачи состоит в нахождении такого неотрицательного решения системы линейных равенств-ограничений, при котором целевая функция примет минимальное значение.

Решение транспортной задачи с использованием пакетов прикладных программ.

MS Excel. Запустим программу MS Excel.

Начиная с ячейки с именем А1 на Листе окна Excel необходимо построить таблицу. Ячейки с адресами В4:Е8 резервируются для переменных $x_{ij} \geq 0$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $j = 1, 2, 3, 4, 5$. Это изменяемые ячейки. В ячейках F4:F8 заносятся запасы аммиачной селитры у производителей, в ячейках В9:F9 заносятся потребности в грузах у потребителей. В ячейки с адресами В15:Е18 заносим коэффициенты матрицы тарифов на перевозку грузов между всеми производителями и потребителями.

Ячейки G4:G8 содержат формулы для расчета ограничений. Формула ограничения (1) занесена в ячейку G4 и имеет вид =СУММ(В4:F4). Соответственно ограничения (2), (3) и (4) занесены в ячейки G5, G6, G7 и G8 в виде формул =СУММ(В5:F5), =СУММ(В6:F6) и =СУММ(В7:F7). В ячейках В10:F10 содержатся формулы ограничений (5)-(8), которые соответственно имеют вид: =СУММ(В4:В8), =СУММ(С4:С8), =СУММ(D4:D8), =СУММ(Е4:Е8).

Формула для расчета целевой функции занесена в ячейку С19 и имеет вид: =СУММПРОИЗВ(В15:F18:В4:Е8). В эту же ячейку будет занесено вычисленное оптимальное значение целевой функции. Решение задачи осуществляется с помощью надстройки *Поиск решения*.

В результате решения мы получаем заполненную таблицу с оптимальным планом перевозки аммиачной селитры, а также в ячейке С19 мы получаем рассчитанный критерий оптимизации.

Mathcad. Запустим программу, перед нами появится рабочее окно со всеми встроенными функциями. Все они просты в применении и представлены на панели инструментов. Запишем глобальную переменную ORIGIN – она задает начало индексации первого члена массива, и приравняем ее к единице, для того, чтобы элементы матрицы не начинались с 0.

Занесем первичные данные: a – запасы всех производителей, b – спрос всех потребителей, матрица C – тарифы на перевозку аммиачной селитры от i -го производителя к j -му потребителю. Также запишем нашу целевую функцию, которая зависит от переменных, начальное приближение $x_{i,j}=100$. Для того чтобы внести в программу существующие ограничения, которые выглядят как система уравнений, нам необходимо ввести ключевое слово `Given`, чтобы указать программе `Mathcad`, что далее следует система уравнений. И теперь остается только задать функцию `Minimize(Z,x)` и запустить программу. Результатом является матрица, определяющая оптимальный план перевозок. Также был рассчитан критерий оптимизации.

Matlab. Для того, чтобы решить поставленную транспортную задачу в пакете программ `MATLAB`, необходимо решать транспортную задачу, как задачу линейного программирования с применением функции `LINPROG`, относящаяся к пакету `OptimizationToolbox`[4]. Запустим программу `MATLAB`. Открывается рабочая среда программы `MATLAB`. Далее необходимо нажать на кнопку

`NewScript`, при этом откроется командное окно (`Command Window`), где мы и будем работать. Далее необходимо ввести вектор « C » транспортных издержек. В решаемой задаче элементами матрицы являются значения стоимости перевозки 1 тонны аммиачной селитры от i -го производителя к j -му потребителю. Далее необходимо задать бинарные коэффициенты в ограничениях, также нужно задать векторы ограничений количества имеющихся и запрашиваемых ресурсов $B = [490; 739; 800; 530; 730; 660; 820; 349]$. Следующим шагом при помощи функции `lb = zeros(16, 1)` обозначим нулевой вектор для задания условия неотрицательности объемов перевозок. Далее при помощи функции `linprog` решаем нашу задачу линейного программирования[5].

Результаты решения, полученного в трех программах, запишем в таблицы.

Таблица 2. Результаты расчета критерия оптимизации(затрат)

Метод	Результат, тыс. руб.
Excel	256132,80
Mathcad	255718.87
Matlab	255718.87

Таблица 3. Оптимальный план перевозок.

Потребители/Производители	АО «ЮЖНЫЙ»	ООО «Росагро-Заволжье»	ООО «Агрофирма КРиММ»	СПК "Новопокровский"
АО "Новомосковский азот"	0,00	0,00	0,00	88,00
ОАО "Невинномысский азот"	90,00	0,00	0,00	0,00
ОАО "Тольяттиазот"	0,00	23,00	2,00	0,00
"Азот" УралХИМ	0,00	0,00	67,00	0,00

После решения поставленной транспортной задачи о перевозке аммиачной селитры от выбранных производителей к выбранным потребителям, можно сказать о правильности подхода к решению транспортной задачи.

Список литературы

1. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии. М.: Химия, 1969. - 564 с.
2. Рустамова М.Б. Решение транспортных задач, Молодой ученый, 2016, 21-23 с. [Электронный ресурс] – Elibragu – научная электронная библиотека. Режим доступа:

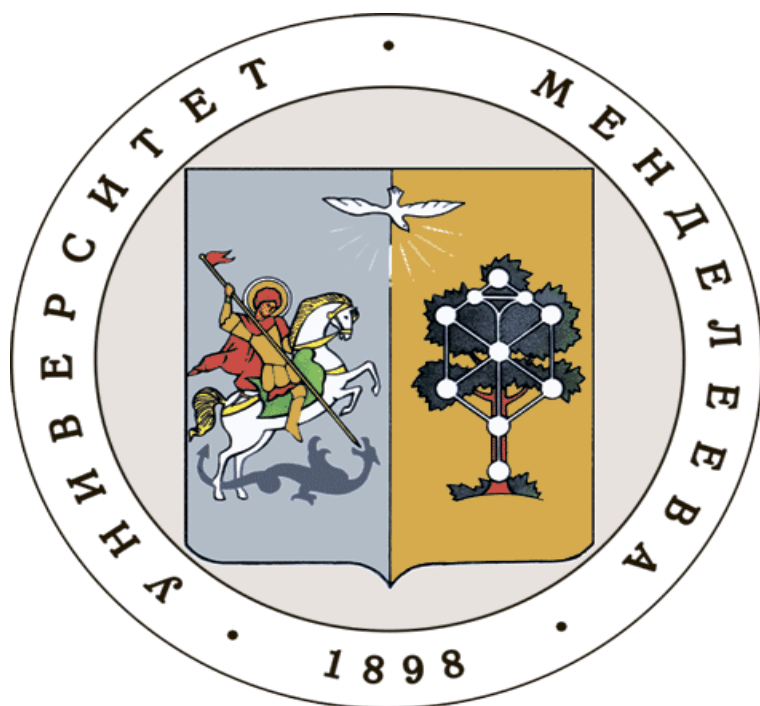
<https://elibrary.ru/item.asp?id=25963920> (дата обращения 26.03.2017)

3. Мадера А.Г. Математические модели в управлении. Компьютерное моделирование в Microsoft Excel. Лабораторные работы. М.: РГГУ, 2007. - 118 с.

4. Список функций `Optimization Toolbox` [Электронный ресурс]// `MATLAB.Exponenta`. Центр компетенции `MathWorks`, 2001-2014. Режим доступа: http://matlab.exponenta.ru/optimiz/book_4/ (дата обращения 15.05.2017)

5. Дяконов В., Круглов В. Математические пакеты расширения `MATLAB`. Специальный справочник. – СПб.: Питер, 2001. – 480

**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 XXXII

№ 1 (197)

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