

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

УСПЕХИ
В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ
ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXIV

№ 6

Москва
2020

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 XXXIV,
У78 № 6 (229). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2020. – 175 с.

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

Материалы сборника представлены для широкого обсуждения на XVI Международном конгрессе молодых ученых по химии и химической технологии «УСChT-2020», XXXIV Международной конференции молодых ученых по химии и химической технологии «МКХТ-2020», ряде международных и российских конференций, симпозиумов и конкурсов, а также на интернет-сайтах.

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

УДК 66.01-52
ББК 24. 35

Содержание

ИНЖИНИРИНГ ЭНЕРГОРЕСУРСΟΣБЕРЕГАЮЩИХ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ИННОВАЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ. ЛОГИСТИКА РЕСУРСΟΣБЕРЕЖЕНИЯ, ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ ИННОВАТИКА, СТАНДАРТИЗАЦИЯ И СЕРТИФИКАЦИЯ В ХИМИЧЕСКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Челноков В.В., Раткин И.М., Заболотная Е.

СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ БИОЛОГИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ ВОДЫ.....9

Соломатин А.С., Панкрушина А.В., Царева Е.В, Машенко В.И., Ермакова М.В.

**ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ КОМПОЗИТНЫЕ ЯЧЕЙКИ ДЛЯ ОПТИЧЕСКОГО
ПИНЦЕТА12**

Михайлюкова М.Ю., Федорин Е.А., Меньшова И.И.

**ЛИТИЙ-ИОННЫЕ АККУМУЛЯТОРЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТОНКОПЛЁНОЧНЫХ КРЕМНИЕВЫХ ЭЛЕКТРОДОВ.....15**

Родникова И.С., Заходякин Г.В.

**КОМПЬЮТЕРИЗИРОВАННОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ ЦЕПИ ПОСТАВОК ПО
ПЕРЕРАБОТКЕ ПОПУТНОГО НЕФТЯНОГО ГАЗА С МЕСТОРОЖДЕНИЙ
КАСПИЙСКОГО БАССЕЙНА17**

Григоренко Р.И., Комарова А.Д., Грунский В.Н.

**БЛОЧНО-ЯЧЕЙСТЫЕ СОРБЦИОННО-КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ
РЕГЕНЕРАЦИИ ВОЗДУХА В ЗАМКНУТЫХ ОБЪЕМАХ.....20**

Аршинова И.С., Щербина Е.А., Абрашов А.А.

**РАЗРАБОТКА ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ НИКЕЛЕВЫХ ЧЕРНЫХ
ПОКРЫТИЙ23**

Соломатин А.С., Панкрушина А.В, Царева Е.В, Машенко В.И., Ермакова М.В.

**ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ КОМПОЗИТНЫЕ ЯЧЕЙКИ ДЛЯ ОПТИЧЕСКОГО
МАНИПУЛИРОВАНИЯ.....26**

Апостолов А.Г.

**ОБЗОР ПРИМЕНЕНИЯ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ИССЛЕДОВАНИЯХ В
ОБЛАСТИ ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОГО ИНЖИНИРИНГА.....29**

Зорин Р.А., Алешина В.Х., Григорян Н.С., Ваграмян Т.А.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ БЛЕСКООБРАЗУЮЩИХ ДОБАВОК НА
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МЕДНОГО ГАЛЬВАНИЧЕСКОГО ПОКРЫТИЯ В СКВОЗНЫХ
ОТВЕРСТИЯХ ПЕЧАТНЫХ ПЛАТ35**

Рыбина Е.О., Аверина Ю.М., Меньшиков В.В., Степаньков Е.К.

ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ И ТЕХНИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПРИ БУРЕНИИ НЕФТЯНЫХ СКВАЖИН ВО ЛЬДАХ38

Фарносова Е.Н., Степаненко А.В., Степаненко Е.В.

ПОЛУЧЕНИЕ КЕРАМИЧЕСКИХ МЕМБРАН ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ.....41

Фарносова Е.Н., Степаненко А.В., Степаненко Е.В.

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ МЕМБРАННОГО ПЛАЗМАФЕРЕЗА КАК МЕТОДА ЭФФЕРЕНТНОЙ ТЕРАПИИ44

Курбатов А.Ю., Аверина Ю.М., Кузин Е.Н., Ветрова М.А.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА ЭКСПЛУАТАЦИИ ФИЛЬТРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ В СИСТЕМАХ ДЕЦЕНТРАЛИЗОВАННОГО ВОДОСНАБЖЕНИЯ.....47

Меньшова И.И., Белозерский А.Ю., Баранова Я.П.

ПРИМЕНЕНИЕ РАСЧЕТНО-АНАЛИТИЧЕСКИХ РИСК-ПОКАЗАТЕЛЕЙ ДЛЯ ВЫБОРА СТРАТЕГИЙ РИСК-МЕНЕДЖМЕНТА В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ.....50

Курбатов А.Ю., Аверина Ю.М., Кузин Е.Н., Ветрова М.А.

О ПЕРСПЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ОЗОНА В ПРОЦЕССАХ ДЕЦЕНТРАЛИЗОВАННОГО ОБЕЗЗАРАЖИВАНИЯ И ОБЕЗЖЕЛЕЗИВАНИЯ АРТЕЗИАНСКИХ ВОД.....54

Бобков В.И., Баранова Я.П.

РАВНОМЕРНОЕ НАГРЕВАНИЕ ПЛОТНОЙ МНОГОСЛОЙНОЙ МАССЫ ОКАТЫШЕЙ ЧЕРЕЗ ФОРМИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ВОЛН57

Бобков В.И., Мешалкин В.П.

ОСОБЕННОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК РУДНОГО СЫРЬЯ В УСЛОВИЯХ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПОДГОТОВКИ60

Онисифору П., Мамедова Ч.Б., Касаткин Е.М., Ахмедова Л.С., Чередниченко А.Г.

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА АДСОРБЦИИ ПАРОВ ЭТАНОЛА АКТИВИРОВАННЫМ УГЛЕМ БАУ-А, МОДИФИЦИРОВАННОГО УЛЬТРАЗВУКОМ63

Скрипаченко М.П., Корельштейн Л.Б.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КУБИЧЕСКОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ДЛЯ УСКОРЕНИЯ ТЕПЛОВЫХ И ГИДРАВЛИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ66

Челноков В.В., Михайлов А.В., Заболотная Е.

АКТУАЛЬНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ПРОМЫШЛЕННЫХ МАСШТАБАХ МЕМБРАННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ.....69

Аверина Ю.М., Шепелева А.М., Субчева Е.Н., Абаева Е.А.

ПЕРСПЕКТИВЫ РОССИЙСКОГО РЫНКА СИСТЕМ ВОДОПОДГОТОВКИ В УСЛОВИЯХ КРИЗИСА.....72

Челноков В.В., Балко С.А., Заболотная Е.

**ЭНЕРГОРЕСУРСООЭФФЕКТИВНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПЕРЕРАБОТКИ
УГЛЕВОДОРОДСОДЕРЖАЩИХ ОТХОДОВ ДЛЯ ИНФРАСТРУКТУРНОГО
РАЗВИТИЯ.....75**

Соломатин А.С., Панкрушина А.В, Царева Е.В, Мащенко В.И., Ермакова М.В.

**ОПТИЧЕСКОЕ МАНИПУЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
КОМПОЗИТОВ78**

Соломатин А.С., Панкрушина А.В, Царева Е.В, Мащенко В.И., Ермакова М.В.

**ТРЕХМЕРНОЕ ОПТИЧЕСКОЕ МАНИПУЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ
ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ.....81**

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ, КИБЕРНЕТИКА И МАТЕМАТИКА. ЦИФРОВЫЕ ДВОЙНИКИ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ И ТЕХНОЛОГИЙ

Абрамов А.А., Цыганков П.Ю., Меньшутина Н.В.

**ИЗУЧЕНИЕ МЕТОДОВ И ТЕХНОЛОГИЙ ТРЕХМЕРНОЙ ПЕЧАТИ ДЛЯ
ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ85**

Авинова Е.Ю., Михайлова П.Г.

**РАЗРАБОТКА БАЗЫ ДАННЫХ ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ И МАРКИРОВКИ
ОПАСНЫХ ГРУЗОВ88**

Бабкин М.А., Кольцова Э.М.

**ОБОБЩЕНИЕ МОДЕЛЕЙ ИЗМЕЛЬЧЕНИЯ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ И КАРБИДА
КРЕМНИЯ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ.....91**

Белолипецкий А.А. Цыганков П.Ю. Меньшутина Н.В.

**ГИДРОФОБИЗИРОВАННЫЕ АЭРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ ВОЛОКОН
ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА ДЛЯ СОРБЦИИ НЕФТИ94**

Камынин В.А., Лопатин А.Г., Брыков Б.А.

**РОБАСТНО-АДАПТИВНАЯ СИСТЕМА АВТОМАТИЧЕСКОГО РЕГУЛИРОВАНИЯ
ТЕМПЕРАТУРНОГО РЕЖИМА ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА.....97**

Бученкова О.Г., Скичко А.С.

**РАЗРАБОТКА И АПРОБАЦИЯ УЧЕБНОЙ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ ПО АНАЛИЗУ
РЕЗУЛЬТАТОВ СПЕКТРОСКОПИИ100**

Васильев М.В., Митричев И.И.

**ПРОГРАММНОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ ДЛЯ МОНИТОРИНГА КВАНТОВО-
ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ В LINUX-СИСТЕМАХ НА ЯЗЫКЕ PYTHON 3.....103**

Дерунец Б.С., Филиппова Е.Б.

**ГРАФИЧЕСКИЙ ИНТЕРФЕЙС ДЛЯ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА ХИМИЧЕСКОГО
ПРОИЗВОДСТВА106**

Папаев П.Л., Макляев И.В., Дударов С.П.

**СРАВНЕНИЕ МОДЕЛИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ
РАДИАЛЬНО-БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ И ДВУХСЛОЙНЫХ ПЕРЦЕПТРОНОВ.....109**

Бадалян М.Г., Женса А.В.

**СОЗДАНИЕ ВЕБ-ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА СВОЙСТВ КАТАЛИЗАТОРНЫХ
ПАСТ112**

Ильмурзаева Д.Р., Савицкая Т.В.

**АНАЛИЗ И СРАВНЕНИЕ АЛГОРИТМОВ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНОГО ПОИСКА НА
ПРИМЕРЕ ВЫБОРА ЦЕНТРИФУГ115**

Калайчев Г.В., Кольцова Э.М.

**ПРОГРАММНОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ ДЛЯ МОНИТОРИНГА ИНФОРМАЦИИ,
ПОСТУПАЮЩЕЙ С ЦИФРОВОГО ЗАВОДА118**

Кислинская А. Ю., Цыганков П. Ю., Меньшутина Н. В.

**ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОФОБНЫХ КРЕМНИЕВЫХ АЭРОГЕЛЕЙ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СУШКИ ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ121**

Крашенинников Р.С., Филиппова Е.Б.

**СОЗДАНИЕ ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ ИМИТАЦИИ АВАРИЙНЫХ СИТУАЦИЙ
ДЛЯ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА ПРОИЗВОДСТВА МЕТАНОЛА124**

Лобанов А.В., Филиппова Е.Б.

**РАЗРАБОТКА ВИРТУАЛЬНОГО ПРОСТРАНСТВА ДЛЯ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА
ПРОИЗВОДСТВА МЕТАНОЛА127**

Мохова Е.К., Пальчикова В.В., Гордиенко М.Г.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА В
ПРОЦЕССЕ ВАКУУМНОЙ СУБЛИМАЦИОННОЙ СУШКИ130**

Петров И.Д., Терехова Ю.В.

**РАСШИРЕНИЕ ЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ
АРХЕОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОНТОЛОГИЙ ..133**

Федотова О. В., Цыганков П. Ю., Меньшутина Н. В.

**ПРОЦЕССЫ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ СОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ
ЦЕЛЛЮЛОЗЫ136**

Ходакова Ж.Г., Савицкая Т.В.

**РАЗРАБОТКА НЕЙРОСЕТЕВОЙ МОДЕЛИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ
АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА ИСТОЧНИКАМИ ВЫБРОСОВ ПРЕДПРИЯТИЙ139**

Ходеева М.И., Василенко В.А., Кольцова Э.М.

**РЕАЛИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ КРИСТАЛЛИЗАТОРА
ЕМКОСТНОГО ТИПА ДЛЯ КЛИЕНТ-СЕРВЕРНОГО ПРИЛОЖЕНИЯ.....142**

Соломатин А.С., Панкрушина А.В, Царева Е.В.

**МНОГОПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКИЙ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ ДИСПЛЕЙ С
ФИКСИРОВАННЫМИ ИНДИВИДУАЛЬНЫМИ СЕКТОРАМИ РАЗМЕЩЕНИЯ
ЗРИТЕЛЕЙ.....145**

Соломатин А.С., Панкрушина А.В, Царева Е.В, Мащенко В.И., Ермакова М.В.

**ФОРМИРОВАНИЕ ОБЪЕМНЫМ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИМ КОМПОЗИТНЫМ
ДИСПЛЕЕМ РЕАЛИСТИЧНОГО СТЕРЕОСКОПИЧЕСКОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ148**

Соломатин А.С., Панкрушина А.В, Царева Е.В, Мащенко В.И., Ермакова М.В.

**ПРОЕКТОР С ФИКСИРОВАННЫМИ СЕКТОРАМИ ПРОЕЦИРОВАНИЯ
ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ НА ОСНОВЕ УПОРЯДОЧЕННЫХ
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МИКРОСТРУКТУР 4-ЦИАНО-4-ОКТИЛОКСИДИФЕНИЛА В
БОРОСИЛОКСАНОВЫХ ГЕЛЯХ.....151**

Чернухин А.В., Сверчков А.М., Савицкая Т.В.

**УМНЫЕ ДАТЧИКИ И БАЗА ДАННЫХ КАК ЭЛЕМЕНТЫ ИНФОРМАЦИОННОЙ
СИСТЕМЫ ЭВАКУАЦИИ.....154**

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

**ИССЛЕДОВАНИЕ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА
ПОЛУЧЕНИЯ КЕРАМОМАТРИЧНОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА НА
ОСНОВЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ, МОДИФИЦИРОВАННОГО ДИОКСИДОМ
ЦИРКОНИЯ.....157**

Яхлаков А.А., Филиппова Е.Б.

**РАЗРАБОТКА ГРАФИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ АППАРАТОВ РЕАКЦИОННОГО УЗЛА
СИНТЕЗА МЕТАНОЛА СРЕДСТВАМИ 3D МОДЕЛИРОВАНИЯ.....160**

Заремба Г.А., Трохин В.Е., Бессарабов А.М.

**СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ КАЧЕСТВОМ НАУЧНО-ПРОИЗВОДСТВЕННОГО
КОМПЛЕКСА МАЛОТОННАЖНОЙ ХИМИИ.....163**

Приоров Г.Г., Глушко А.Н., Бессарабов А.М.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ КАЧЕСТВА АВТОДОРОЖНОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ166

Худеев И.И., Лебедев А.Е., Меньшутина Н.В.

**ИЗУЧЕНИЕ ВНУТРЕННЕЙ СТРУКТУРЫ АЭРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ОКСИДА
АЛЮМИНИЯ КАК НОСИТЕЛЕЙ ЛЮМИНОФОРНЫХ ВЕЩЕСТВ168**

Сулова Е.Н., Лебедев А.Е., Ловская Д.Д.

**ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В
ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМАХ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ171**

**ИНЖИНИРИНГ ЭНЕРГОРЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ХИМИЧЕСКИХ
ТЕХНОЛОГИЙ И ИННОВАЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ. ЛОГИСТИКА
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЯ, ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ ИННОВАТИКА,
СТАНДАРТИЗАЦИЯ И СЕРТИФИКАЦИЯ В ХИМИЧЕСКОЙ
ПРОМЫШЛЕННОСТИ**

УДК 574.589

Челноков В.В., Раткин И.М., Заболотная Е.

СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ БИОЛОГИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ ВОДЫ

Челноков Виталий Вячеславович, д.т.н., профессор кафедры логистики и экономической информатики

Раткин Илья Михайлович, студент 2 курса магистратуры факультета инженерной химии;

e-mail: ilya.ratkin@yandex.ru

Заболотная Елена, аспирант 3 года обучения факультета цифровых технологий и химического инжиниринга кафедры логистики и экономической информатики.

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия 125047, Москва, Миусская пл., д. 9В *данной статье приводится обзор основных принципов биологической очистки воды и стоков. Выполнен краткий анализ процессов. Рассматривается актуальность комплексного подхода к созданию сооружений биологической очистки воды.*

Ключевые слова: биологическая очистка, биоплато, антропогенные загрязнения, экосистема, восстановление водоемов, нефтяные загрязнения

MODERN TECHNOLOGIES OF BIOLOGICAL WATER TREATMENT

Chelnokov Vitaliy Vyacheslavovich, Ratkin Ilya Mihaylovich, Zabolotnaya Elena

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia, 125047, Miusskaya 9

The article provides an overview of the basic principles of biological treatment of water and effluents. A brief analysis of the processes is performed. The relevance of a comprehensive approach to the creation of biological water treatment facilities is considered.

Keywords: biological treatment, constructed wetlands, anthropogenic pollution, ecosystem, restoration of lakes, oil pollution.

По принципу действия очистка водных объектов или загрязненных стоков может быть механической (отделение или осаждение нерастворимых фракций), биологической (аэробное и анаэробное преобразование загрязняющих веществ в безопасные, поглощение неразлагаемых токсинов) и физико-химической.

Среди способов очистки стоков и поверхностных вод от загрязнений наиболее безопасным и экономически эффективным в ряде случаев является биологическая очистка. В процессе очистки хозяйственно-бытовых стоков широко используется метод биологической очистки в аэротенках (традиционные поля аэрации). Являясь энергонезависимыми и саморегулирующимися, биологические методы очистки могут быть использованы для решения практически любых задач очистки водных объектов в любых масштабах (от лабораторного аквариума до морской акватории).

Процессы, происходящие при биологической очистке вод, не достаточно глубоко изучены, имеют сложные связи и зависят от множества факторов (температура, освещение, концентрация загрязняющих веществ, внешние экологические и биологические факторы, пищевая конкуренция), что затрудняет аналитическое исследование этих процессов. Создание математической модели такой установки осложняется отсутствием единого теоретического подхода в математической экологии.

Биологическая очистка воды происходит в результате следующих основных процессов:

- сорбция (поглощение) загрязняющих веществ из воды с накоплением этих веществ в тканях применяемых организмов и материалов;
- химическое преобразование (биodeградация) загрязнений и токсинов в менее опасные;
- механическое осаждение взвешенных частиц;
- конкуренция биологических видов (угнетение нежелательной биоты).

Для реализации этих механизмов используются высшие водные растения, микроскопические водоросли, бактерии, искусственные волокна и их сочетания.

Для биологической очистки применяются, в основном, полупогруженные высшие водные растения (ВВР). Корни таких растений полностью погружены в воду и взаимодействуют с растворенными в воде веществами. Роль высших водных растений состоит, прежде всего, в следующем:

- растения стимулируют продуктами своего метаболизма деятельность микроорганизмов, обитающих на их поверхности и непосредственно в воде;
- поглощают из воды некоторые загрязняющие вещества (фенол, нефтепродукты, металлы, азот и фосфор);
- создают активную адсорбирующую и перерабатывающую поверхность;
- поддерживают высокий окислительный уровень за счет обогащения воды растворенным кислородом;
- участвуют в расщеплении или окислении некоторых загрязняющих веществ (не только органических);

- подавляют развитие фитопланктона.

Основные механизмы воздействия ВВР с загрязнителями следующие:

- испарение. Некоторые соединения, такие как фенолы и ароматические углеводороды, поглощаются корнями ВВР и выделяются в атмосферу через устьица;

- осаждение. На корнях и подводных частях растений хорошо задерживаются взвешенные частицы, органические эмульсии, жировые и нефтяные пленки. Они вместе с минеральными частицами и органическими суспензиями образуют более крупные осаждаемые агрегаты, которые в дальнейшем разрушаются уже донными организмами;

- регуляция «цветения» водоема. Крупные макрофиты (такие как тростник, рогоз, рдесты, роголистник и др.), затеняя поверхность воды и поглощая биогенные и другие минеральные соединения, являются мощным антагонистом синезеленых и иных водорослей, подавляют их развитие и этим они устраняют вредное для гидробионтов «цветение» водоемов;

- аккумуляция растениями химических элементов.

Ряд ВВР обладает высокой способностью накапливать минеральные вещества: например, один гектар густых зарослей тростника может аккумулировать в своей биомассе до 6 тонн различных минеральных веществ, в том числе калия – 860 кг, азота – 170 кг, фосфора – 120 кг, натрия – 450 кг, серы – 280 кг, а также кремний и хлор [1]. Из воды и грунта ВВР извлекают соединения тяжелых металлов, синтетические поверхностно-активные вещества. Наибольшая аккумулирующая способность техногенных элементов отмечена у погруженных растений. Многие виды растений обладают высоким избирательным накоплением радиоактивных элементов. Накапливающая способность гидробионтов характеризуется таким показателем, как коэффициент накопления – соотношение концентрации изотопа в организме и воде. Коэффициент накопления у мхов (сфагнум, фонтиналис) составляет 1600 в течение суток, у ряски в течение трех суток экспозиции составил 2500-4000 при концентрации ^{90}Sr 10^{-7} – 10^{-10} Ки. Коэффициент накопления радиоактивного стронция у зеленых водорослей составляет 6000. Таким образом, растения являются резервуаром-накопителем токсичных веществ, изымая их из воды. Для того, чтобы вещества не возвращались обратно в водоем вместе с отмершими частями растений, требуется систематическое выкашивание водных растений;

- фотосинтетическая аэрация водоемов. Увеличивается содержание кислорода в воде под влиянием растений, в результате чего происходит быстрое окисление органического вещества, ускоряется процесс нитрификации, усиливается потребление фотосинтетиками свободной углекислоты;

- преобразование токсинов (минерализация и окислительная функция). Деструкция фенолов в харовых водорослях, например, объясняется

наличием у них фермента фенолоксидазы. В экспериментальных условиях уруть в течение 3-7 дней удаляла из водоема до 50% дифенамида, а водный гиацинт – до 80%; эти растения разлагают этот гербицид на менее устойчивые соединения, которые в дальнейшем разрушаются микроорганизмами.

Основная роль другого участника системы биологической очистки – бактерий, состоит в расщеплении (чаще всего, аэробном) загрязнений [3]. Грибы также участвуют в деградации практически всех органических субстратов, в том числе таких как лигнин, хитин, кератин и других труднодоступных соединений, которые практически не разлагаются бактериями. Традиционная биологическая очистка использует именно бактериальный механизм очистки: аэробный (аэротенки) или анаэробный (метантенки). Кроме того, деятельность бактерий является основным процессом расщепления нефтепродуктов и других органических загрязнений. Как показали эксперименты, наилучших результатов можно добиться используя симбиотическую связку колоний бактерий и высших водных растений

Животные-фильтраторы (прежде всего, двустворчатые моллюски) также принимают участие в очистке воды, извлекая из толщи воды и осаждая на дне взвешенные и слаборастворимые органические и минеральные вещества. Роль фильтраторов в некоторых водоемах может оказаться решающей в процессе очистки.

Однако наилучших результатов добиваются при использовании совокупного действия нескольких факторов, как показано на примере комплексной деструкции нефтяных загрязнений. Разложение нефти – результат совместной деятельности гетеротрофных микроорганизмов и растений.

Разрушение нефти и нефтепродуктов осуществляется в основном за счет жизнедеятельности нефтеокисляющих и сапрофитных бактерий. Наличие ВВР ускоряет бактериальное разложение нефти и нефтепродуктов в 3-5 раз (различные виды нефти: сырая, товарная, эмульгированная, а также нефтепродукты, при концентрации 1 г/л).

Существенная (часто – основная) часть высокотоксичных органических соединений (в частности, фенолов, нефти, пестицидов и др.) разрушается бактериями и грибами, обитающими на поверхности корней ВВР. При этом происходит интенсивное потребление кислорода аэробными микроорганизмами. Окисление двухвалентного железа в трехвалентное также происходит в результате деятельности железобактерий хемолитоавтотрофов, развивающихся на поверхности корней высших водных растений.

Искусственные волокна также способствуют повышению эффективности очистки. С развитием технологий получения углеродных волокон широко стали применяться такие волокна для очистки воды от загрязнений. Применение искусственных волокон развивается в двух различных направлениях: сорбция

и развитие бактериальных колоний на поверхности волокон. С целью сорбции используют активированные волокна, эффективность поглощения которых оказывается выше эффективности поглощения традиционных порошковых сорбентов. Значение удельной поверхности углеродного волокнистого сорбента более $700 \text{ м}^2/\text{г}$ [2]. Для развития колоний бактерий-деструкторов используются более гладкие волокна с поверхностью около $0,5 \text{ м}^2/\text{г}$. Такие волокна подвешивают к корням высших водных растений, существенно увеличивая площадь, предоставленную для формирования бактериальной пленки (известно, что корни водных растений слабо развиты в сравнении с наземными растениями и наличие дополнительной поверхности значительно повышает эффективность работы бактериопланктона).

Современная очистная система биологической очистки использует комплекс описанных механизмов снижения объема загрязняющих веществ. В такой системе используется совместная работа высших водных растений с применением искусственных волокон, бактериопланктона и консументов. Одной из наиболее известной является конструкция плавучего биолато, схема которого представлена на рисунке 1.

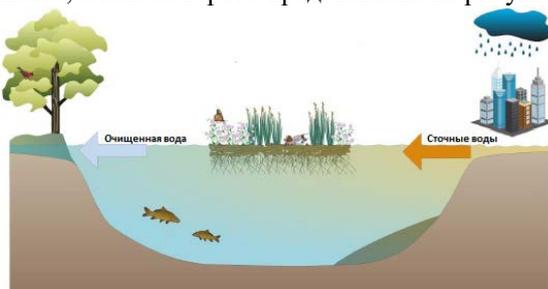


Рис.1. Биолато

Биолато представляет собой плавающий мат высших водных растений с развитой подводной экосистемой (корневая система, система редуцентов и консументов, обитающих в корневой системе лато). Корни высших водных растений контактируют с водной средой, образуя естественную биопленку, что способствует очищению водной среды. При применении в биолато углеродсодержащих волокнистых материалов с высшими водными растениями они образуют большую площадь биопленки (рис. 2). Таким образом, формируется благоприятная среда для жизнеобеспечения аэробных и анаэробных микроорганизмов.

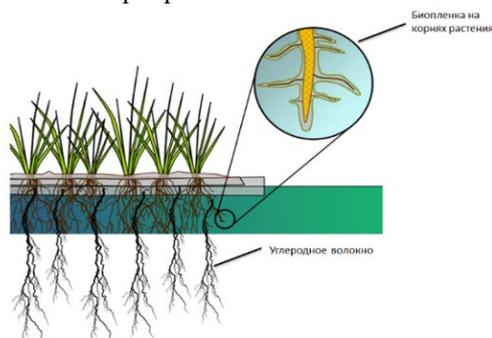


Рис.2. Схема конструкции биолато с углеродным волокном

В такой системе представлены три основных уровня трофической цепи:

- продуценты (высшие водные растения и водоросли). Их основная роль в биолато – это аэрация, создание благоприятных условий для существования бактериопланктона, поглощение продуктов расщепления органики (в первую очередь, это поглощение азота, фосфора, соединений углерода);

- редуценты (в основном, бактерии) разлагают сложные органические соединения до соединений, которые могут быть усвоены продуцентами или до менее токсичных соединений, как например в случае с окислами железа;

- консументы потребляют неразлагаемые органические останки, а также участвуют в выведении малорастворимых соединений фосфора

Некоторые звенья этой цепи не участвуют непосредственно в поглощении или расщеплении загрязнений. Это могут быть рыбы, паразиты, зоопланктон. Роль таких вспомогательных звеньев состоит в создании условий для жизнедеятельности основных рабочих звеньев трофической цепи и замыкании трофической цепи. При определенных условиях в системе наступает динамическое равновесие, что делает такую систему устойчивой и саморегулирующейся. Автономность такой системы очистки позволяет использовать ее на больших площадях, не требуя непрерывного обслуживания и частой замены расходных материалов.

Приведенная в статье технология очистки водных объектов занимает достойное место в списке энерго-ресурсоэффективных производств, обеспечивая безопасный процесс очистки, не нанося вред окружающей среде. Подобные технологии могут быть использованы как для очистки вод от органических загрязнений, СПАВ, так и от соединений тяжелых металлов.

Список литературы

1. Ягодкин Ф.И., Вильсон Е.В., Долженко Л.А., Романенко Е.Ю. Теоретические исследования целесообразности использования «Биолато» для обезжелезивания шахтных вод // Юг России: экология, развитие. — 2017. — Т.12, N2. С.147-158
2. Давлятёрова Р.А., Смирнов А.Д., Ткаченко С.Н. Перспективность применения углеродных волокнистых сорбентов для очистки воды от техногенных загрязнений // Водоснабжение и санитарная техника. — 2010. — № 10, ч. 2 с.12-17
3. Котелевцев С. В., Маторин Д. Н., Садчиков А. П. Экологическая токсикология и биотестирование водных экосистем. Учебное пособие. — ИНФРА-М Москва, 2015. — 252 с

УДК: 535.3+535.5+535.8

Соломатин А.С., Панкрушина А.В., Царева Е.В, Машенко В.И., Ермакова М.В.

ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ КОМПОЗИТНЫЕ ЯЧЕЙКИ ДЛЯ ОПТИЧЕСКОГО ПИНЦЕТА

Соломатин Алексей Сергеевич, д.т.н., профессор, e-mail: Sotrudnica_UNC@mail.ru

Панкрушина Алла Вадимовна, к.т.н., доцент

Царева Елена Владимировна, к.т.н., доцент

Кафедра Информатики и Компьютерного Проектирования

Российский Химико-Технологический Университет им.Д.И. Менделеева, Москва, Россия

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

Машенко Владимир Игоревич, к.х.н., с.н.с учебно–научной лаборатории теоретической и прикладной нанотехнологии Московский государственный областной университет (МГОУ) 141014, Московская область, г.Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24.

Ермакова Мария Вадимовна магистрант факультета Инженерная Академия Российского Университета Дружбы Народов

Разработан матричный оптический элемент из полученных в результате поликонденсации полидиметилсилоксана с концевыми гидроксильными группами с борной кислотой при комнатной температуре жидкокристаллических композитов на основе 4-циано-4-октилосидифенила и боросилоксановых гелей. Предложены оригинальные оптические конструкции на основе новых жидкокристаллических композитов. Показана их актуальность в качестве элементной базы средств оптического манипулирования ультрадисперсными частицами и средами. Предложены методы манипулирования ансамблем частиц, для которых резко различны длины волн для их захвата и удержания оптическим пинцетом.

Ключевые слова: оптическая анизотропия, оптический пинцет, боросилоксановые гели, жидкокристаллические композиты.

LIQUID CRYSTAL COMPOSITE CELLS FOR OPTICAL TWEEZERS

Solomatin A.S., Pankrushina A.V., Tsareva E.V., Mashchenko V.I.*, Ermakova M.V.*

Department of Computer Science and Computer Engineering

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

*Moscow Region State University, 24 Very Voloshinoy str., 141014, Mytishi, Russia

A matrix optical element was developed from liquid crystal composites based on 4-cyano-4-octyloxydiphenyl and borosiloxane gels obtained as a result of polycondensation of polydimethylsiloxane with terminal hydroxyl groups with boric acid at room temperature. Original optical designs based on new liquid crystal composites are proposed. Their relevance as an element base for optical manipulation of ultradisperse particles and media is shown. Methods for manipulating an ensemble of particles with sharply different wavelengths for capturing and holding them with optical tweezers are proposed.

Keywords: optical anisotropy, optical tweezers, borosiloxane gels, liquid crystal composites.

Введение

Нематические жидкие кристаллы (ЖК) [1] и ЖК-композиты [2] широко применяются в оптоэлектронных устройствах, управляемых электрическим полем с низким энергопотреблением. Актуальны новые конструктивные решения средств оптического манипулирования ультрадисперсными средами и системами. В данной работе, являющейся продолжением [2-5], предложены новые решения на основе ЖК-композитов, обладающих перспективными оптическими свойствами. В [3-6] разработан способ их формирования, экспериментально изготовлены цилиндрические ЖК-композитные нити. Предложено в [3] использовать твист-структуры [7] на их основе.

Получение ЖК-композита

К новым решениям в области элементной базы, где в качестве работающего элемента используется единичная капля, относятся микрорезонаторы, работающие на физическом эффекте Whispering-gallery mode (WGM) – распространении волн вблизи изогнутых границ раздела двух сред (волнах шепчущей галереи) [8]. Достаточно давно известны капли ЖК в качестве функционального оптического или электрооптического элемента миниатюрного устройства, и в том числе капли, заключенные в поддерживающую матрицу в ЖК-композитах на основе оптически прозрачных силиконовых материалов, доступных и технологичных.

Для формирования микрокапель ЖК в силиконовой матрице применен оригинальный

подход [5]. С использованием основанной на эффекте образования Рэлеевских мостов жидкости оригинальной методики [3-6] получены ЖК-композиты на основе специально сформированных одноосно вытянутых боросилоксановых (БС) гелей. Вытяжка композитов выше температуры плавления ЖК приводит к получению микроцилиндрических структур, которые постепенно дробятся на капли. Полученный БС-гель и ЖК-композиты на его основе при одноосном растяжении ведут себя подобно полимерной пленке. Свойства текучести, характерные для вязких жидкостей, композит проявляет после снятия внешнего растягивающего напряжения.

К кристаллизации ЖК и к долговременному фиксации полученных микроструктур приводит резкое охлаждение ниже температуры плавления ориентированных ЖК-композитов 4-циано-4-октилосидифенил (8ОЦБ) на основе БС-геля. Могут быть получены, в зависимости от температурных режимов ориентирования и термофиксации композитов, различные микроструктуры (с размерами от долей до десятков микрон) ЖК-фазы в БС-матрицах.

Для формирования линз ЖК [9, 10] перспективно создание микроструктур ЖК в боросилоксановых (БС) [3-5] матрицах с получением микрокапель и микроцилиндров различной геометрии. В [5] предложена матрица ЖК (или ЖК-композитных) микролинз и твист-ячеек.

Оптическое манипулирование объектами

Рассмотрим случай: частица много меньше длины волны. Для металлов и диэлектриков механизм рассеяния света одинаков. Для металлических частиц сразу под перетяжкой в кольцевой части Лаггер-Гауссова пучка ($m=1$), направленного снизу вверх, осуществляется трехмерный захват. Бесселевым пучком осуществляется для группы частиц захват и манипулирование (направлен снизу вверх).

Рассмотрим случай: частица меньше длины волны или сопоставима с ней. Для диэлектрической частицы, захват происходит в соответствии с тем, что луч света – электромагнитная волна. Под действием поля нейтральные атомы и молекулы поляризуются – у каждой нейтральной частицы появляется дипольный момент, пучки поляризуемых молекул и частицы смещаются в область максимальной интенсивности излучения, собираются на оси оптического луча, ориентируясь (при постоянном дипольном моменте) вдоль по электрическому полю лазерного излучения – прозрачная среда (жидкость) становится оптически анизотропной.

Перемещаться вдоль луча прозрачную частицу (поглощающую или отражающую) заставляет давление света. Перемещаться вдоль и поперек луча прозрачную частицу заставляет неравномерность плотности энергии как вдоль светового пучка, так и в сечении. К наименьшей интенсивности пучка (от оси

луча, а в сфокусированном луче от фокуса) перемещается (вылетает из луча) частица с показателем преломления меньшим, чем у окружающей прозрачной среды. К наибольшей интенсивности пучка (к оси луча, а в сфокусированном луче к фокусу) перемещается (затягивается в луч) частица с показателем преломления большим, чем у окружающей прозрачной среды.

В сильно сфокусированном пучке стабильно захватывается большинство биологических объектов. Это связано с тем, что их показатель преломления выше, чем у воды.

Сильно сфокусированным кольцевым (полым) пучком захватываются частицы с низким показателем преломления. Они собираются в центральной (осевой) темной части.

Интерес представляет интерференция падающей и отраженной волн. В пучностях стоячей волны локализируются микроскопические объекты. Между максимумами интенсивности поля стоячих волн – точка стабильного равновесия. В нее могут быть захвачены нейтральные атомы. Для создания стоячей волны дно кюветы следует покрыть отражающим слоем.

Пучок нейтральных атомов может быть отклонен поперечными дипольными силами давления излучения, действующими на индуцированный атомный диполь. Силы пропорциональны градиенту электрического поля. Для этого частота света должна быть настроена близко к атомному резонансу. Луч лазера должен быть параллелен распространяющемуся пучку атомов.

Оптические элементы на основе ЖК-композитов и их применение

Тепловые колебания частицы могут привести к ее выходу из луча. Если луч не сфокусирован, то вследствие его расширения градиент уменьшается. По мере снижения (удаляясь от источника луча) привлекающего управляемую частицу к оси луча градиента интенсивности, она обязательно будет утрачена.

Для фокусировки луча (чтобы луч мог перемещать частицу к области фокуса) в порах матрицы (рис.1) устанавливаются микролинзы ЖК [9, 10] с фокусными расстояниями от десятков микрон до десятков миллиметров. Для регулировки [3-5] интенсивности (управляется электрическим полем прозрачных торцевых электродов вплоть до погашения луча) и поляризации (при изготовлении может быть задана поляризация по какому-либо заранее выбранному правилу для различных пор матрицы) устанавливаются ЖК-композитные твист-элементы.

Структуры из ориентированных кристаллитов переходят в ЖК-фазу при нагревании композитов выше температуры плавления 8ОЦБ (55°C) и могут быть приложением электрического поля, пространственно распределенного по некоторому заранее заданному правилу, переориентированы [9]

под другое фокусное расстояние. Необходимо нагретый (выше 55°C) ЖК в матрицах сначала сориентировать, а затем зафиксировать (обеспечить охлаждение, возможно, внешней средой при достаточном теплообмене) ориентированное состояние при помощи кристаллизации ЖК. Нагрев ЖК-композиата выше 55°C для перехода между режимами требует включения соответствующих средств в конструкцию.

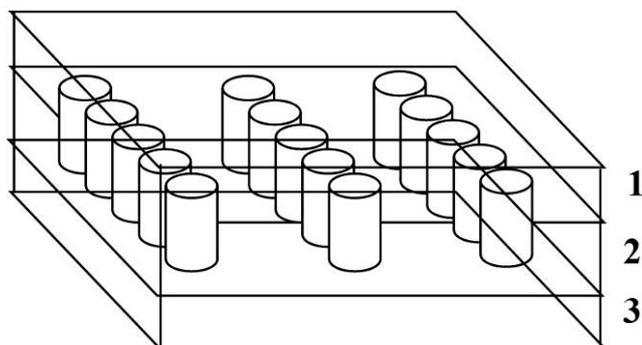


Рис. 1.: 1 прозрачный слой над матрицей; 2 непрозрачный слой, в нем матрица цилиндрических пор, заполненных ЖК-композиатом; 3 прозрачный слой под матрицей.

Выводы

Разработана основанная на ориентированных ЖК-композиатах 4-циано-4-октилосидифенил (8ОЦБ) на основе БС-геля конструкция, позволяющая управлять распределением светового потока в различных (по фокусному расстоянию) режимах. Материалы на базе исследованных ЖК-композиатов могут быть использованы в дисплейной технике и оптоэлектронике.

Отмечена возможность изменения спектральных характеристик луча с использованием WGM эффекта. Это создает перспективу применения полупроводниковых лазеров – удобных и недорогих – с преобразованием их спектра оптимально для манипулирования ультрадисперсными частицами predeterminedенного заранее сорта.

Предложенные конструктивные решения не исключают формирование полого сфокусированного луча для манипулирования частицами с малым (по сравнению с окружающей средой) показателем преломления.

Список литературы

1. Пикин С.А., Блинов Л.М., Жидкие кристаллы. – М.: Наука, 1982. – 208 с.
2. Жаркова Г.М., Сонин А.С. Жидкокристаллические композиты. – Новосибирск: Наука. 1994. 214 с.
3. Соломатин А.С. Особенности формирования микроструктуры и оптические свойства жидкокристаллических композитных твист-ячеек / А.С. Соломатин, В.И. Мащенко, Ю.О. Шашкова, В.В. Беляев // Вестник Московского Государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.53 - 63. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-2-53-63
4. Мащенко В.И. Особенности формирования микроструктуры жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана / В.И. Мащенко, Ю.О. Шашкова, А.С. Соломатин, В.В. Беляев // Вестник Московского Государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.34 - 45.
5. Мащенко В.И. Микроструктуры жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана. Оптические свойства дисперсной жидкокристаллической структуры на их основе / В.И. Мащенко, А.С. Соломатин, Ю.О. Шашкова, В.В. Беляев // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - № 3. - С.97 – 107. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-3-97-107
6. Беляев В.В., Мащенко В.И., Соломатин А.С., Чаусов Д.Н. Способ получения смеси жидкого кристалла с полимером для дисплейной техники и оптоэлектроники // Патент России №0002607454. 2016.
7. Коншина Е.А. Оптика жидкокристаллических сред. – СПб: СПб НИУ ИТМО, 2012. – 99 с.
8. Виноградов А.В., Ораевский А.Н. Волны шепчущей галереи // Соросовский образовательный журнал. – 2001. – Т.7. – №2. – С.96 – 102.
9. Невская Г.Е. Адаптивные линзы на основе жидких кристаллов. / Г.Е. Невская, М.Г. Томилин // Оптический журнал. – 2008. – Т.75. – №9. – С.35-48.
10. Соломатин А.С. Линзы на основе жидких кристаллов с неоднородным радиальным распределением директора // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. – 2016. – № 3. – С. 37–45.

УДК 621.355.9

Михайлюкова М.Ю., Федорин Е.А., Меньшова И.И.

ЛИТИЙ-ИОННЫЕ АККУМУЛЯТОРЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТОНКОПЛЁНОЧНЫХ КРЕМНИЕВЫХ ЭЛЕКТРОДОВ

Михайлюкова Мария Юрьевна, студентка 2 курса магистратуры факультета инженерной химии;
e-mail: super.kappusta@yandex.ru

Федорин Егор Андреевич, студент 2 курса магистратуры факультета инженерной химии;

Меньшова Ирина Игоревна, к.т.н., доц. кафедры ЛогЭКИ.

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

В данной статье показана работа литий-ионного аккумулятора. Приведены достоинства и недостатки применения некоторых материалов и их конфигураций для анодов литий-ионных аккумуляторов. Рассматривается перспектива изучения данного вопроса.

Ключевые слова: литий-ионный аккумулятор, накопление энергии, емкость, кремний, электрод, наноразмер, тонкие плёнки.

NEXT-GENERATION LITHIUM-ION BATTERIES USING THIN-FILM SILICON ELECTRODES

Mikhailiukova Maria Jurievna, Fedorin Egor Andreevich, Menshova Irina Igorevna

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

This article shows the operation of a lithium-ion battery. Advantages and disadvantages of using some materials and their configurations for anodes of lithium-ion batteries are given. The prospect of studying this issue is considered.

Keywords: lithium-ion battery, energy storage, capacity, silicon, electrode, nanoscale, thin films.

В настоящее время литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) представляют собой наиболее быстро растущую систему накопления энергии по сравнению со всеми другими технологиями. Основными компонентами ЛИА, как показано на рис. 1, являются отрицательный электрод (анод), положительный электрод (катод) и сепаратор с погруженным электролитом для обеспечения переноса заряда внутри батареи. Работа литий-ионной батареи основана на многократном переносе ионов лития между анодом и катодом. Анод, также называемый отрицательным электродом, выделяет ионы лития в электролит, что приводит к их транспортировке к катоду, также называемому положительным электродом, который поглощает ионы в процессе разряда. Для оценки эффективности батарей важны некоторые параметры, в том числе обратимая / необратимая емкость, кулоновская эффективность и скорость зарядки.

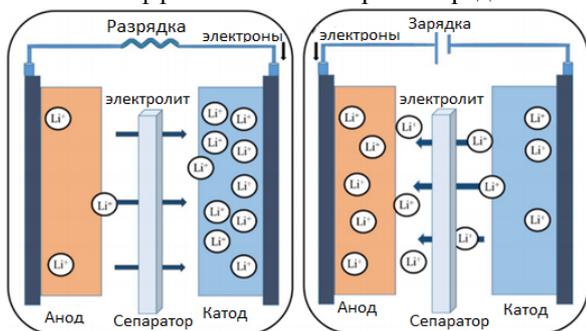


Рис. 1. Основные компоненты и работа вторичной ЛИА во время циклов разрядки и зарядки

Анодные материалы теоретически обладают способностью предлагать более высокую емкость по хранению ионов лития, чем катоды, большая часть исследований была направлена на создание новых анодных материалов с повышенной удельной емкостью, в дополнение к хорошим циклическим и скоростным характеристикам.

Традиционный графит / углеродный анод является наиболее широко используемым коммерческим материалом в ЛИА, поскольку он обладает рядом преимуществ, таких как:

- отличные электрохимические характеристики,
- длительная цикличность,
- хорошая плотность энергии,
- низкое изменение объема (<17%) во время литирования и делитирования.

Однако его использование имеет некоторые ограничения, такие как: ограниченная емкость хранилища с максимальным теоретическим пределом 372 мАч г⁻¹ и проблемы безопасности, связанные с осаждением Li и последующим коротким замыканием. Недостатки, связанные с его конечной плотностью энергии, дали исследователям мотивацию и необходимость поиска альтернативных материалов анода.

Кремний привлек внимание исследователей как один из самых выдающихся альтернативных материалов для анодов ЛИА следующего поколения. Он обладает очень высокой теоретической емкостью хранения (4200 мАч г⁻¹) по сравнению со всеми другими известными материалами. Он в изобилии (второй самый богатый элемент в земной коре), относительно недорог, безопасен и имеет относительно низкий потенциал разряда. Важно отметить, что использование анодов на основе кремния, обладающих высокой гравиметрической и объемной емкостью, может снизить фактическую стоимость ЛИА. Хотя кремний обладает всеми этими преимуществами, устройства на основе кремния долгое время страдали от недопустимого снижения производительности при циклировании из-за большого изменения объема во время интеркаляции / деинтеркаляции Li (~400%).

Поведение батареи зависит не только от внутренних свойств материала анода, включая

физические и / или химические свойства и емкость накопления энергии, но также зависит от кристалличности или аморфной структуры материала анода, а также от формы, размера и состояния компонентов. Было предложено много решений и стратегий для управления и буферизации проблем расширения большого объема кремниевых анодов, как показано на рис. 2. Они включают в себя, но не ограничиваются этим, управление размером посредством сложных материалов и конструкций. Например: узорные тонкие пленки, пористые структуры и конструкции оболочек с сохранением формы. Другим распространенным методом является использование наноразмерных частиц Si, таких как наночастицы, нанопроволоки, наносферы или нанотрубки. Кроме того, нанокompозитные материалы представляют собой другую стратегию, в которой один или несколько дополнительных материалов включены в состав Si, чтобы уменьшить объемное расширение и увеличить электронную проводимость. Еще одной стратегией улучшения циклируемости анода является использование двумерных (2D) тонкопленочных слоев на основе Si.

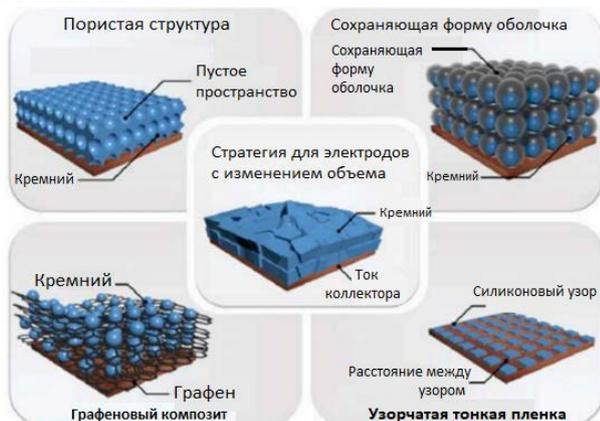


Рис. 2. Предлагаемые подходы для учета большого изменения объема, испытываемого кремнием во время введения / извлечения лития во время циклов зарядки / разрядки

Тонкие пленки представляют собой один из наиболее многообещающих подходов в преодолении двух основных проблем, связанных с кремнием, а именно: низкая проводимость и изменение большого объема. На практике тонкие пленки имеют толщину от десятых долей нанометра до нескольких микрометров. Неотъемлемые преимущества этого подхода включают более высокое среднее выходное напряжение, меньшую массу электрода и более длительный срок службы цикла по сравнению с другими традиционными формами ЛИА. Эта конструкция также полезна для учета механических напряжений, сопровождающих вход / выход литий-ионов. Однако электрохимические особенности получаемых тонкопленочных анодов сильно зависят от наноразмерных эффектов и химического состава материалов анода. Привлекательной особенностью кремниевых тонкопленочных анодов является то, что они не нуждаются в связующем, что дает потенциал для увеличения удельной емкости по сравнению с традиционными анодами, которые содержат до 10–20

мас.% неактивных связующих. Тонкие пленки Si имеют четко определенную геометрию, и их химический состав можно точно контролировать.

За последние несколько лет технические проблемы Si анодов были выявлены благодаря междисциплинарным исследованиям, и основные проблемы были решены с помощью рациональных конструкций, демонстрирующих стабильную производительность при циклировании, а также сохранение высокой емкости.

Хотя были созданы различные связанные структуры и был достигнут значительный прогресс в области накопления энергии, все еще существует много проблем, требующих дальнейшего изучения. Во-первых, умно спроектированные структуры оптимизируют определенные свойства ЛИА, в то же время эти аноды создают другие проблемы. Например, пористые или полые структуры способны приспосабливаться к изменениям объема, но уменьшают объемную емкость всей ячейки. Для распространенного применения портативных, легких, небольших электрических устройств высоко ценится объемная емкость, а также удельная емкость. Таким образом, крайне необходима всесторонняя оценка материалов и конструкций анодов с целью разработки конструкций электродов с улучшенными общими характеристиками.

При тщательном выборе определенных факторов можно получить положительное влияние на электрохимический цикл и цикл зарядки / разрядки непрерывных тонкопленочных анодов из чистого кремния. Этими факторами являются тип и обработка поверхности подложки, морфология пленки, толщина пленки, термическая обработка, включая температуру осаждения и / или последующий отжиг, тип электролита и добавок, а также нижнее и верхнее напряжения отсечки. Однако распространенным среди большинства исследований был тот факт, что тонкопленочные аноды из чистого кремния подвергались быстрой деградации в течение первых нескольких циклов. Большинство исследований справедливо сосредоточены только на одном параметре в качестве источника возможного улучшения, но вполне вероятно, что для достижения приемлемых улучшений необходимо использовать многогранное решение.

Авторы выражают благодарность своему научному руководителю Меньшовой Ирине Игоревне за ценные советы при планировании исследования и рекомендации по оформлению статьи.

Список литературы

1. Кулова Т.Л., Скундин А.М., Андреев В.Н., Грызлов Д. Ю., Мироненко А.А., Рудый А.С., Гусев В. Н., Наумов В.В. Исследование тонкопленочных электродов системы кремний–алюминий–кислород для литий-ионного аккумулятора // Электрохим. энергетика. 2013. Т. 13, № 3. С. 136–143.
2. Кулова Т.Л. Разработка научных основ создания литий-ионного аккумулятора на основе новых отечественных электродных функциональных материалов [Электронный ресурс]. — Режим доступа: http://fcpir.ru/upload/iblock/511/corebofs000080000kgm888elt08n22o_presentation.pdf

УДК 004.94:658.7

Родникова И.С., Заходякин Г.В.

КОМПЬЮТЕРИЗИРОВАННОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ ЦЕПИ ПОСТАВОК ПО ПЕРЕРАБОТКЕ ПОПУТНОГО НЕФТЯНОГО ГАЗА С МЕСТОРОЖДЕНИЙ КАСПИЙСКОГО БАССЕЙНА

Родникова Ирина Сергеевна, студент 1 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

e-mail: moogre5157@mail.ru

Заходякин Глеб Викторович, старший преподаватель кафедры логистики и экономической информатики. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия.

В данной работе рассмотрена проблема утилизации и переработки попутного нефтяного газа с месторождений Каспийского региона. С помощью метода смешанного линейно-целочисленного программирования и инструмента моделирования IBM LogicNet спроектирована цепь поставок нефтехимического предприятия по переработке попутного нефтяного газа в продукцию с высокой добавленной стоимостью. Определены мощности производства в соответствии с прогнозами спроса и объемов добычи, рынки реализации товарной продукции, наиболее рентабельные продукты для производства. Проведен анализ чувствительности модели к изменению различных параметров.

Ключевые слова: попутный нефтяной газ, переработка ПНГ, цепь поставок, проектирование цепи поставок, смешанное линейно-целочисленное программирование

COMPUTER-AIDED SUPPLY CHAIN DESIGN FOR PROCESSING OF ASSOCIATED PETROLEUM GAS FROM THE CASPIAN OIL FIELDS

Rodnikova Irina Sergeevna, Zakhodyakin Gleb Viktorovich

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

This paper considers the processing of associated petroleum gas from oil fields in the Caspian region. We propose a supply chain for a petrochemical plant converting APG into high value-added products. The mixed-integer linear programming and the IBM LogicNet software are used to construct the supply chain model. The required production capacity is estimated based on forecasted field production and demand for the end products. The most profitable product portfolio and the markets for the products are defined. The model sensitivity analysis is provided.

Keywords: APG processing, supply chain, supply chain network design, mixed-integer linear programming.

На сегодняшний день одним из острых вопросов в нефтегазохимической отрасли России и мира стоит решение проблемы переработки попутного нефтяного газа (ПНГ). ПНГ является ценным ресурсом, возможности которого долгое время недооценивали. Попутный нефтяной газ, который представляет собой смесь различных углеводородов (метан, этан, широкая фракция углеводородов) с присутствием небольшого количества примесей, растворен в нефти и может быть выделен в процессе сепарации. ПНГ может быть использован в качестве сырья для производства нефтехимических продуктов, например, полимеров (полиэтилен, полипропилен), а также в качестве сырья для выработки электрической и тепловой энергии.

На шельфе Каспийского моря, на расстоянии 93-126 км от берега, компанией «Лукойл» на сегодняшний день открыто 10 месторождений с суммарными начальными извлекаемыми запасами около 7 млрд. баррелей нефтяного эквивалента. Концепция развития морской части Северо-Каспийского региона подразумевает развитие и освоение следующих месторождений в ближайшие 10 лет: им. В. Филановского, Ракушечное, им. Ю. Кувыкина и 170 км. На рис. 1 представлен график, отражающий текущие и планируемые объемы добываемого ПНГ с данных месторождений [1].

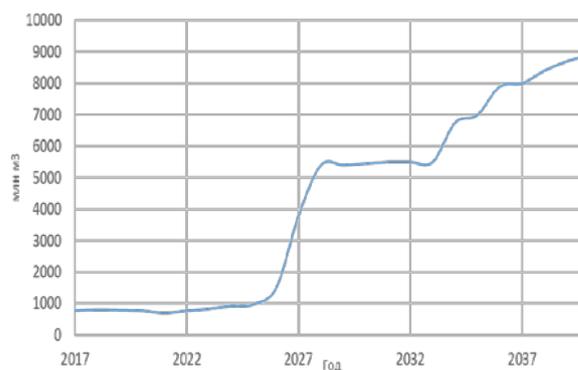


Рис. 1. Динамика добычи ПНГ (акватория Северного Каспия)

Из графика на рис. 1 видно, что в 2019 году объемы добытого попутного нефтяного газа составляли порядка 900 тыс. м³ и с каждым годом возрастают, что требует принимать меры для его рациональной утилизации, так как допустимый уровень сжигания ПНГ на факельных установках составляет только 5% от добытого.

Для более эффективного использования попутного нефтяного газа необходимо предпринимать меры на государственном уровне, направленные на развитие инфраструктуры для его

сбора, подготовки, транспортировки и переработки. Таким образом, использование попутного нефтяного газа в качестве сырья для производства продукции органического синтеза позволит не только избежать сжигания ПНГ на факельных установках, но и создавать продукцию с высокой добавленной стоимостью, которая востребована рынком. Актуальность данной работы обусловлена необходимостью изменения цепи поставок нефтехимических предприятий в связи с обязательным переходом на рациональное использование попутного нефтяного газа.

Эффективным методом решения задач стратегического планирования цепи поставок промышленного производства является компьютерное моделирование. Основанная на методе смешанного линейно-целочисленного программирования модель позволяет описать структуру цепи поставок в целом, включая источники сырья, альтернативные варианты размещения производства и структуры технологической системы, рынки сбыта продукции [2]. Целью моделирования является определение оптимальных по критерию наименьших совокупных затрат или наибольшей чистой прибыли структуры цепи поставок и стратегии развития мощностей в соответствии с прогнозами спроса.

Целью данной работы являлось компьютеризированное проектирование цепи поставок для переработки попутного нефтяного газа на примере ООО «Ставролен», доставка ПНГ на который осуществляется с месторождений ПАО

«Лукойл», расположенных в акватории Северного Каспия. ООО «Ставролен» занимается выпуском продукции органического синтеза, в том числе, полиэтилена низкого давления и полипропилена. Получение этилена и пропилена осуществляется на установках пиролиза из этана и ШФЛУ собственного производства предприятия. Составной частью геохимического комплекса являются газоперерабатывающие установки (ГПУ-1 мощностью 2120 тыс. тонн/год, ГПУ-2 мощностью 4940 тыс. тонн/год) на которых происходит разделение поступающего ПНГ с месторождений Северного Каспия с последующим получением сырья в виде ШФЛУ (ГПУ-1, ГПУ-2) и этана (ГПУ-2) для производим мономеров (этилен, пропилен) и сухой отбензиненный газ (СОГ) (СОГ/этан/ШФЛУ – 0,74/0,26 для ГПУ-1, СОГ/этан/ШФЛУ – 0,74/0,055/0,204 для ГПУ-2), часть которого направляется в ГТС «Газпром», а другая служит топливом для энергоблока.

В качестве инструмента моделирования использован программный продукт IBM LogicNet. С его помощью была создана модель стратегического планирования сроком на 20 лет, разделенная на 4 периода, продолжительностью 5 лет каждый. Для определения оптимальной конфигурации цепи поставок используется критерий «Максимизация прибыли». На рис. 2 представлена концептуальная модель цепи поставок, на которой отображены материальные потоки, а также представлен параметры и переменные, которые необходимы для решения поставленной задачи.

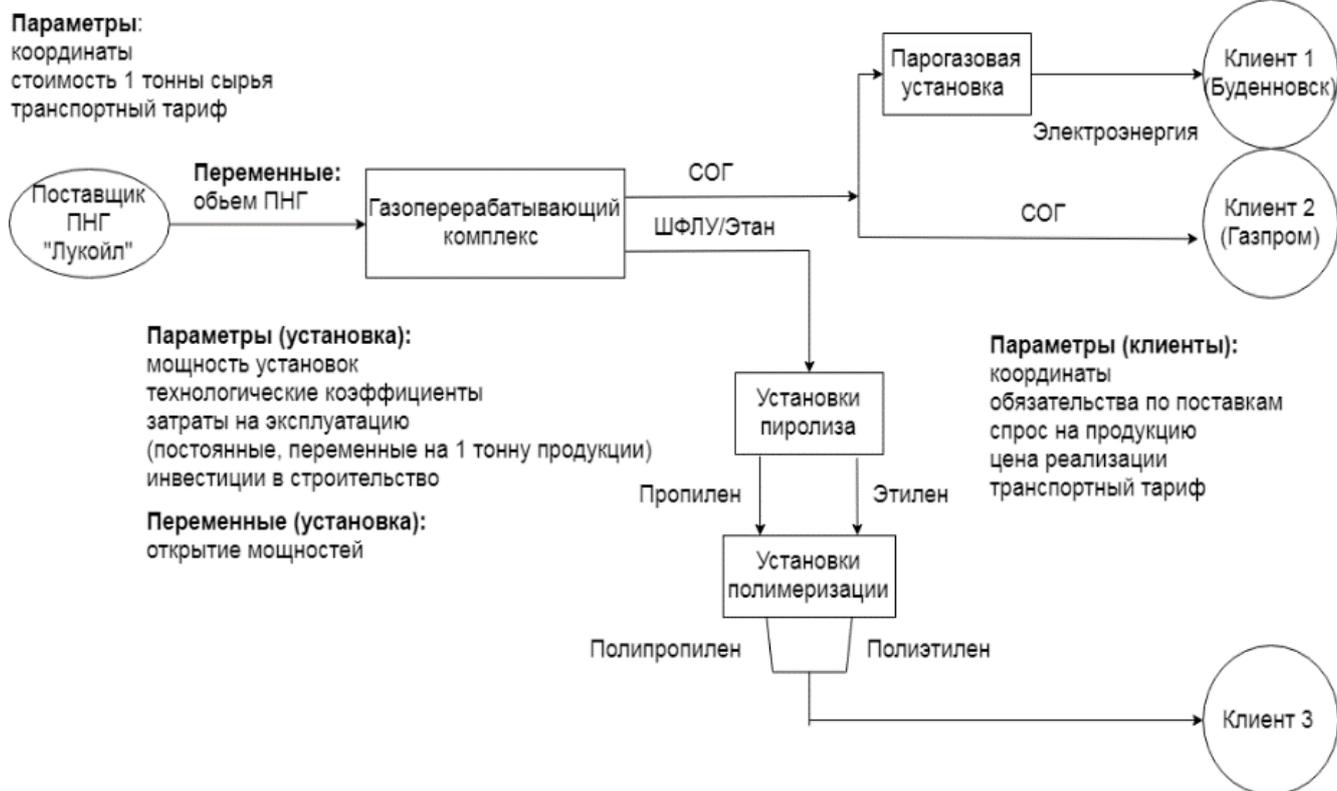


Рис. 2. Концептуальная модель цепи поставок ООО «Ставролен»

УДК 614.89

Григоренко Р.И., Комарова А.Д., Грунский В.Н.

БЛОЧНО-ЯЧЕЙСТЫЕ СОРБЦИОННО-КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ РЕГЕНЕРАЦИИ ВОЗДУХА В ЗАМКНУТЫХ ОБЪЕМАХ

Григоренко Роман Игоревич, аспирант 3-го года обучения кафедры общей химической технологии, e-mail: roman.grigorenko2016@yandex.ru;

Комарова Алла Дмитриевна, аспирант 2-го года обучения кафедры общей химической технологии; Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева; Россия, 125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20.

Грунский Владимир Николаевич, д.т.н., профессор кафедры общей химической технологии, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия.

Исследование основных способов получения матриц регенеративного продукта для применения в средствах индивидуальной и коллективной защиты. Проведены испытания по хемосорбции углекислого газа и выделения кислорода в условиях конвекции. Анализ массовой доли активного кислорода на матрице с нанесенным супероксидом калия.

Ключевые слова: высокопористые ячеистые материалы, надпероксид калия, сорбционные системы, средства защиты человека.

BLOCK-CELL SORPTION-CATALYTIC SYSTEMS FOR AIR REGENERATION IN CLOSED VOLUMES

Grigorenko R.I., Komarova A.D., Grunsky V.N.

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

Research of the main methods of obtaining regenerative product matrices for use in individual and collective protection equipment. Tests on the chemisorption of carbon dioxide and the release of oxygen under convection conditions were performed. Analysis of the mass fraction of active oxygen on a matrix with superoxide of potassium deposited.

Keywords: highly porous cellular materials, potassium peroxide, sorption systems, human protection products.

В настоящее время для регенерации воздуха в изолирующих дыхательных аппаратах и системах регенерации воздуха в замкнутых обитаемых объектах используются регенеративные продукты, основу которых составляют супероксиды натрия и калия (надпероксидные соединения щелочных металлов). В настоящее время в качестве источника кислорода и поглотителя CO_2 в системе жизнеобеспечения используются надпероксиды натрия и калия, которые обладают реакционной способностью к содержащимся в выдыхаемом воздухе CO_2 и парам воды. Существует ряд проблем в их использовании в системах жизнеобеспечения для регенерации воздуха. Основными проблемами применения регенеративных продуктов являются: образование расплавов металлов на поверхности гранул; спекание отработанного продукта; значительное выделение тепла. Так же одной из важных проблем является переработка отработанного продукта, который содержит щелочи и карбонаты. Ряд этих проблем можно решить, используя керамические блочно-ячеистые матрицы. Применение надпероксида калия вместо баллонов с кислородом характеризуется следующими преимуществами:

1) стоимость KO_2 ниже стоимость баллонов с кислородом;

2) изменение цвета KO_2 служит индикатором расхода кислорода (от канареечно-желтого до белого);

3) вся система KO_2 имеет небольшой вес и габариты;

4) применение KO_2 способствует удалению запахов и уничтожению бактерий.

Система жизнеобеспечения, где процесс удаления углекислого газа и выделение кислорода реализуется одновременно, представляет собой единый компактный комплекс с саморегулированием химического состава регенерируемого воздуха [4].

Основной задачей при разработке системы химической регенерации воздуха для средств дыхания коллективного типа является поддержание в замкнутом помещении требуемых концентраций CO_2 и кислорода. Задача решается путем создания оптимальных условий работы регенеративного продукта, обеспечивающих его действенное использование. При этом так же, как и для индивидуальных средств защиты органов дыхания, более полная отработка регенеративного продукта достигается за счет улучшения некоторых критериев взаимодействия регенерируемого воздуха с регенеративным продуктом [5].

Одной из основных проблем при применении надпероксида калия в гранулированной форме является спекание продукта, которое обуславливается снижением степени применения

хемосорбентов. Одним из решений данной проблемы является разработка различных конструкций регенеративных патронов. Разработана модифицированная конструкция патрона, в котором гранулированный CO_2 с помощью металлических экранов был укомплектован тонкими параллельными слоями, где между слоями создавалась воздушная полость (рис. 1).

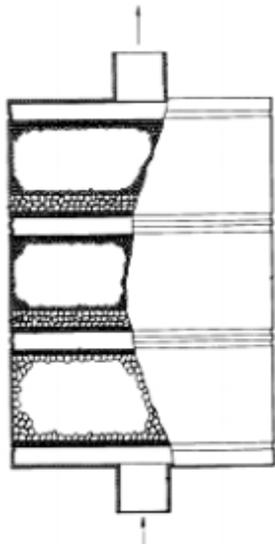


Рис. 1. Конструкция патрона в разрезе с регенеративным продуктом

Первый слой по ходу потока воздуха состоял из крупных гранул размером 10-20 мм, обладающих довольно высокой плотностью. Второй и третий слои состояли из более мелких гранул размером 5-6

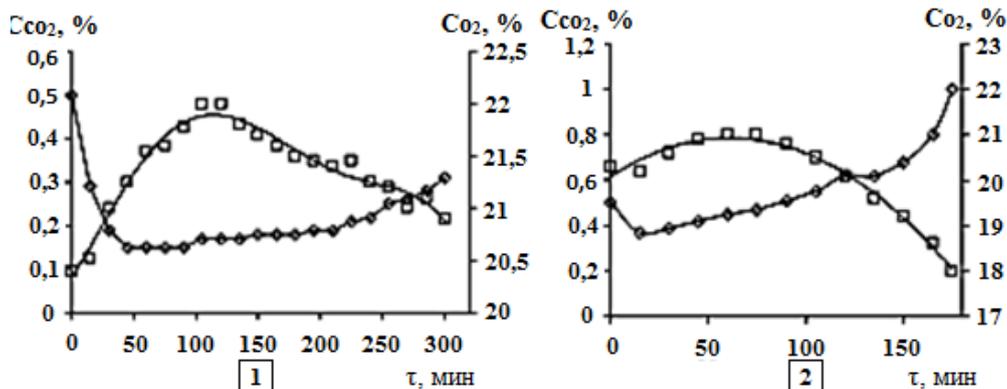
мм, насыпанных на небольшой слой крупных гранул. Присутствие полостей между слоями способствует перераспределению выделяемого при химических реакциях тепла так, что тепло от первого слоя попадает на второй в меньшем количестве, при этом первый слой, обладающий более более плотными и крупными гранулами, в меньшей степени впитывает влагу. В конечном итоге исключается спекание продукта.

Для проведения испытаний на установке был проведен ряд экспериментов. За 4 ч работы в камере, объемом $4,5 \text{ м}^3$, установка поддерживала концентрацию кислорода 20...25 % об., концентрацию CO_2 0,8-1,0 % об., причем, несмотря на высокую влажность регенерируемого воздуха (85-95%), перепроизводства кислорода не наблюдалось. Экспериментальные данные на установке показали, что при правильной конструкции регенеративного патрона, который соответствует ряду требований, может быть достигнут требуемый коэффициент регенерации.

Эффективность очистки газовой атмосферы регенеративным продуктом оценивали в герметичных камерах объемом 3 и 24 м^3 при температуре $20 \pm 5 \text{ }^\circ\text{C}$, влажности $85 \pm 10 \%$, подаче CO_2 и отборе кислорода, соответствующих дыханию 1, 4 и 6 человек. Эксперименты проводились до достижения концентрации CO_2 , равной 1 %, либо в течение заданного времени. Результаты испытаний приведены в табл.1 и на рис. 2.

Таблица 1. Параметры герметичной камеры.

№	$V, \text{ м}^3$	$m, \text{ кг}$	Подача CO_2 , $\text{дм}^3/\text{ч}$	Отбор O_2 , $\text{дм}^3/\text{ч}$	Время, ч	Содержание CO_2 max, % об.	Содержание O_2 , % об.
1	24	3,8	100	112	5	0,31	20,5...22
2	3	2,5	150	168	2,8	1,0	18...21
3	24	3,92	100	112	6,7	0,8	18...21
4	24	1,2	25	28	6	0,2	19...21



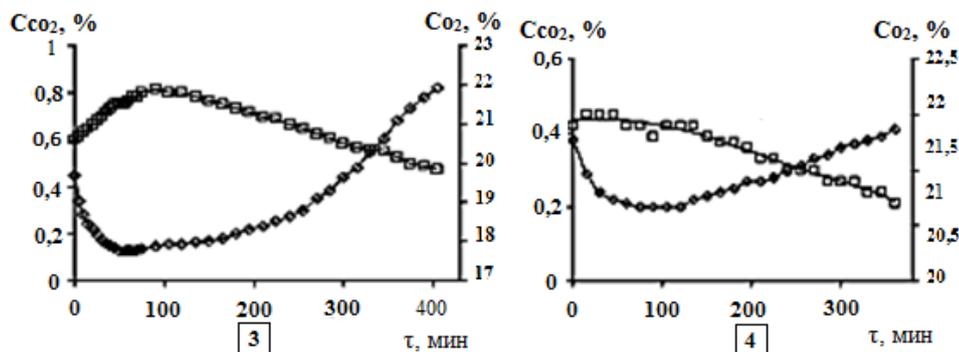


Рис. 2. Изменение содержания CO_2 и O_2 в герметичной камере в опытах № 1 – № 4

Кинетика хемосорбции CO_2 и выделения O_2 исследована в условиях естественной конвекции при температурах 20 и 5 °С. Масса регенеративного продукта составляла 3,9 кг, объем герметичного реактора – 24 м³. Оработанные пластины регенеративного продукта содержали карбонат или бикарбонат калия, не оказывающий вредного воздействия на окружающую среду.

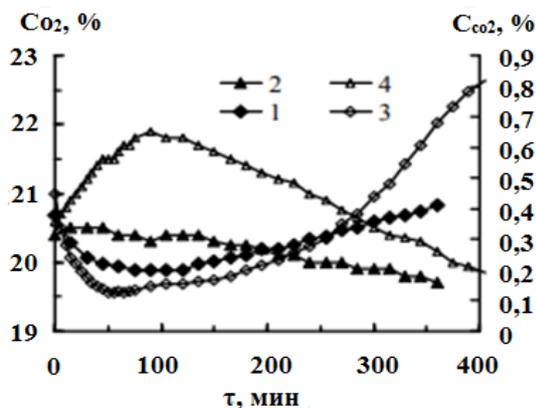


Рис. 3. Изменение концентрации CO_2 и O_2 в реакторе от времени при различных температурах

Концентрация кислорода (рис. 3) проходит через максимум. Для температуры 20 °С этот максимум более выражен, чем для 5 °С. Интересно, что экстремумы на кривых концентраций O_2 и CO_2 не совпадают по времени, что подтверждает выводы авторов более ранних работ о том, что выделение кислорода и поглощение двуокиси углерода происходят на разных активных центрах.

Полученные в процессе изучения результаты дают возможность реализовать имитационные исследования и математическое моделирование процесса регенерации воздуха в реакторах и герметично замкнутом объеме средств коллективной защиты органов дыхания, определять оптимальные режимы функционирования регенеративного оборудования, разрабатывать эффективные системы оптимального управления газовым составом

воздушной среды на большинстве состояний функционирования биотехнического комплекса, осуществлять автоматизированные исследования и разработку средств коллективной защиты органов дыхания.

Показано, что применение новых материалов для очистки и регенерации воздуха дает возможность существенно улучшить технические характеристики изделий, а в некоторых случаях приводит к появлению новых свойств изделий.

Список литературы

1. Жданов Д. В. Исследование кинетики процесса получения супероксида калия из щелочного раствора пероксида водорода / Д. В. Жданов, Ю. А. Ферапонтов // ЖПХ. - 2005. -Т. 78, Вып. 2. -С. 121 - 124.
2. Ферапонтов Ю. А. Влияние материала реактора на стабильность щелочного раствора пероксида водорода / Ю. А. Ферапонтов, М. А. Ульянова, Д. В. Жданов // Химическая технология. - 200.- С. 12.
3. Пат. 2210417 Российская Федерация, МПК А62Д 9/00. Регенеративный продукт / Н. Ф. Гладышев, Ю. А. Ферапонтов, Д. В. Жданов (Россия); заявитель: ФГУП «ТамбовНИХИ»; патентообладатель: ОАО «Корпорация «Росхимзащита». - № 2002117817/12; заявл. 02.07.2002; опубл. 20.08.2003. -15 с.
4. Семенова Г. В. Формирование слоев супероксида калия разложением дипероксогидрата пероксида калия / Г. В. Семенова, Н. Ф. Гладышев, Т. П. Сушкова, Т. В. Гладышева // Вестник ВГУ. Серия химия, биология. Фармация. - 2005. - № 1. - С. 52-56.
5. Дорохов Р. В. Поиск путей интенсификации процесса получения регенеративного продукта на матрице в вакууме / Р. В. Дорохов, Н. Ф. Гладышев, С. И. Дворецкий, Т. В. Гладышева, Э. И. Симаненков // Вестник ТГТУ. - 2006. -Т. 12, № 4А. – С. 1057-1060.

УДК 621.793.3

Аршинова И.С., Щербина Е.А., Абрашов А.А.

РАЗРАБОТКА ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ НИКЕЛЕВЫХ ЧЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ

Аршинова Ирина Станиславовна, студент 1 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: arisca@mail.ru;

Щербина Екатерина Алексеевна, аспирант кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии;

Абрашов Алексей Александрович, к.т.н., доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии.

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

125047, Москва, Миусская площадь, д. 9

Получение черных конверсионных покрытий, не содержащих хром, является важной задачей. В настоящей работе были получены черные Ni-P покрытия. В ходе работы были определены свойства полученных покрытий. Было показано, что черные Ni-P покрытия, прошедшие термообработку, устойчивы к истиранию, а также имеют высокие антикоррозионные свойства.

Ключевые слова: химическое никелирование, черные никелевые покрытия, Ni-P покрытия

DEVELOPMENT OF A PROCESS FOR PRODUCING CHEMICAL NICKEL BLACK COATINGS

Shcherbina Ekaterina Alekseevna, Arshinova Irina Stanislavovna, Abrashov Aleksey Aleksandrovich

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

The preparation of black chromium-free conversion coatings is an important task. In the present work, black Ni-P coatings were obtained. In the course of the work, the properties of the resulting coatings were determined. It has been shown that black Ni-P coatings that have undergone heat treatment are resistant to abrasion and also have high anti-corrosion properties.

Keywords: electroless nickel plating, black nickel coatings, Ni-P coatings.

Одной из разновидностей черных защитно-декоративных покрытий являются Ni-P слои. Они используются для придания изделиям функциональных и защитно-декоративных свойств, увеличения коррозионной стойкости и твердости [1]. Содержание фосфора в Ni-P покрытиях обуславливает многие их свойства, например, электропроводность, электрокаталитическую активность, коррозионную стойкость и механические свойства [2].

Данные покрытия могут стать хорошей альтернативой часто используемым токсичным хромсодержащим покрытиям. Уже сейчас черные Ni-P покрытия находят применение в автомобильной и аэрокосмической областях [3].

Формирование черных Ni-P-покрытий проходит в два этапа: на первом этапе идет осаждение Ni-P пленки, на втором этапе покрытие приобретает черный цвет за счет образования пор на поверхности в ходе травления в азотной кислоте (HNO₃) [4].

Настоящая работа посвящена разработке процесса химического никелирования и изучению свойств полученного покрытия.

Для осаждения Ni-P покрытия использовался раствор, состав и диапазон допустимых значений pH которого приведены в таблице 1. Растворение осуществляли в дистиллированной воде при постоянном перемешивании со слабым подогревом. pH доводили водным раствором аммиака (NH₄OH).

Таблица 1. Состав и параметры процесса для химического осаждения Ni-P покрытий

Компонент	Концентрация, г/л
NiSO ₄ ·7H ₂ O	35
NaH ₂ PO ₂ ·H ₂ O	25
CH ₃ COONa	18
Молочная кислота	34
Лимонная кислота	5
pH = 5,3–5,5	

Осаждение производили на пластины холоднокатаной стали марки 08пс. Перед нанесением Ni-P покрытия осуществлялась следующая подготовка поверхности:

- обезжиривание образцов с помощью венской извести с последующей сушкой на воздухе;
- активация поверхности методом погружения образцов в раствор соляной кислоты (HCl);
- промывка в дистиллированной воде.

Для получения Ni-P покрытий стальные образцы погружали в приготовленный раствор на 3 часа при температуре 90-92°C. Процесс проходил в термостатирующей бане прецизионной серии LOPLB-200. Образцы подвергались сушке на воздухе. Затем происходило травление в азотной кислоте (HNO₃).

Исследовалась зависимость цвета полученной пленки от концентрации и продолжительности процесса травления. Образец с Ni-P покрытием опускали в раствор азотной кислоты (HNO₃) разной

концентрации при разных температурах на несколько минут. Концентрация растворов азотной кислоты (HNO_3) варьировалась в диапазоне 5–9 М, продолжительность обработки – в диапазоне 3–7 минут, а температура – в диапазоне 30–60°C. После травления образцы промывали дистиллированной водой и подвергали сушке.

Было установлено, что наиболее черные покрытия образуются при травлении в азотной кислоте (HNO_3) с концентрацией от 6М и выше, оптимальной являлась температура 40°C. При этом, продолжительность обработки должна составлять не менее 5–5,5 минут.

Исследование шероховатости поверхности проводилось при помощи конфокального лазерного микроскопа OLYMPUS LEXT4100. Установлено, что шероховатость в ходе травления возрастает с 0,504 до 0,707 (рис. 1).

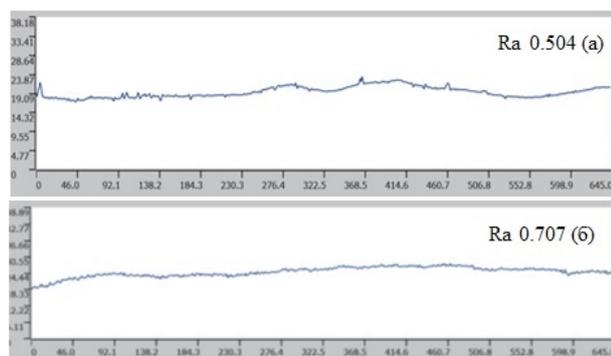


Рис.1. Шероховатость Ni-P покрытия до (а) и после (б) травления в азотной кислоте (HNO_3)

Фотография поверхности, полученная на электронном растровом микроскопе (рис. 2), свидетельствует о том, что процесс травления сопровождается образованием микроскопических конических пор, перпендикулярных к поверхности. Диаметр пор, глубина и расстояние варьировались от доли микрометра до нескольких микрометров или примерно от одной до нескольких длин волн света. Таким образом, поры, захватывающие любой падающий свет в широком спектральном диапазоне, обуславливают черный цвет покрытия.

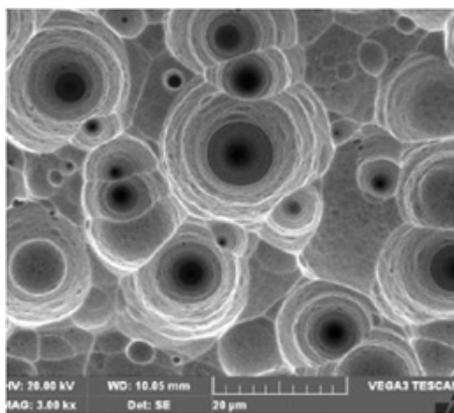


Рис.2. Фотография поверхности Ni-P покрытия после травления в азотной кислоте (HNO_3)

Толщина покрытий определялась с помощью конфокального лазерного микроскопа OLYMPUS LEXT4100. Показано, что Ni-P покрытие до травления имеет толщину 30 мкм. После травления толщина снижается до 7 мкм, из которых 2-3 мкм это сформированный черный слой. Таким образом, стравливается более 20 мкм покрытия, полученного на первом этапе.

РФЭ-спектры регистрировали с помощью специальной камеры CLAM100, установленной на Оже-микроскопе HB100 (Vacuum Generators, GB). Было выявлено, что на поверхности присутствуют оксиды двух- и трехвалентного никеля, а также соединения никеля с фосфором (рис. 3).

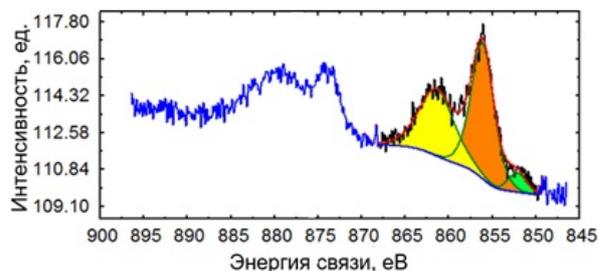
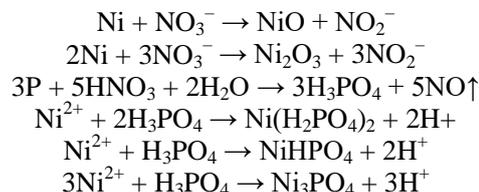


Рис. 3. Индивидуальный РФЭ-спектр никеля

С учетом полученных данных можно предположить, что в процессе осаждения протекают следующие реакции:



Для улучшения качества получаемого покрытия использовали термообработку в течение получаса при температуре 220°C в сушильном шкафу ШС-80-01МК СПУ.

Было выявлено, что в процессе термообработки шероховатость покрытий увеличивается до 1,212 (рис. 4).

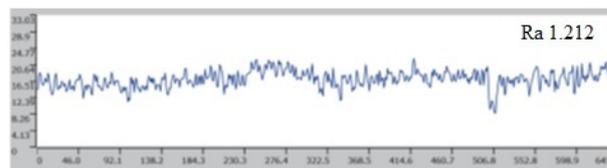


Рис.4. Шероховатость Ni-содержащей поверхности после травления в азотной кислоте (HNO_3) с последующей термообработкой

Стойкость Ni-P покрытий к истиранию до термообработки и после исследовалась на модернизированном ротационном абразиметре Taber Elcometer 5135. Также была исследована стойкость к истиранию черных гальванических никелевых и хромовых покрытий. Количество циклов до

появления первых признаков истирания у черных покрытий без термообработки составило 850 циклов, после термообработки – 11750 циклов, для черного гальванического никеля – 3000 циклов, для черного гальванического хрома – 13000 циклов.

Испытания на коррозионную стойкость проводились в 5%-ном растворе NaCl и pH 3,1–3,5, доведенном уксусной кислотой. Образцы с полученным покрытием погружали в раствор и засекали время до появления первых признаков красной коррозии. Также была исследована коррозионная стойкость черных гальванических никелевых и хромовых покрытий. Для покрытий прошедших термообработку это время составило 98 часов, для не прошедших – 39 часов, для черного гальванического никеля – 50 часов, для черного гальванического хрома – 120 часов.

Таким образом, обработка в азотной кислоте позволила получить Ni-P покрытия черного цвета, превосходящие по коррозионной стойкости и стойкости к истиранию черные гальванические никелевые покрытия. Стоит заметить, что существенным недостатком используемого в процессе осаждения метода являются большие потери цветного металла при стравливании.

Список литературы

1. Qi Z., Lu W., Guo A. et.al. Investigation on circular plating pit of electroless Ni-P coating // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2014. Vol. 53. P. 3097-3104.
2. Lin J.-D., Chou C.-T. The influence of phosphorus content on the microstructure and specific capacitance of etched electroless Ni-P coatings // *Surface and Coatings Technology.* 2019. Vol. 368. P. 126-137.
3. Sosa Domigues A., Peres Bueno J.J., Zamudio Torres I., Mendoza Lopez M.L. Characterization and corrosion resistance of electroless black Ni-P coatings of double black layer on carbon steel // *Surface and Coatings Technology.* 2017. Vol. 326. Part A. P. 192-199.
4. Sosa Domigues A., Peres Bueno J.J., Zamudio Torres I., Mendoza Lopez M.L. Corrosion study of electroless deposited nickel-phosphorus solar absorber coatings on carbon steel // *Int. J. Electrochem. Sci.* 2017. Vol.12. P. 2987-3000

УДК: 535.3+535.5+535.8

Соломатин А.С., Панкрушина А.В., Царева Е.В., Машченко В.И., Ермакова М.В.

ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ КОМПОЗИТНЫЕ ЯЧЕЙКИ ДЛЯ ОПТИЧЕСКОГО МАНИПУЛИРОВАНИЯ

Соломатин Алексей Сергеевич, д.т.н., профессор, e-mail: Sotrudnica_UNC@mail.ru

Панкрушина Алла Вадимовна, к.т.н., доцент

Царева Елена Владимировна, к.т.н., доцент

Кафедра Информатики и Компьютерного Проектирования

Российский Химико-Технологический Университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

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

Машченко Владимир Игоревич, к.х.н., с.н.с учебно-научной лаборатории теоретической и прикладной нанотехнологии Московский государственный областной университет (МГОУ) 141014, Московская область, г.Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24.

Ермакова Мария Вадимовна магистрант факультета Инженерная Академия Российского Университета Дружбы Народов

Разработан на основе 4-циано-4-октилосидифенила и боросилоксановых гелей матричный оптический элемент. На основе новых жидкокристаллических композитов предложены актуальные оптические конструкции элементной базы средств оптического манипулирования ансамблем частиц. Предложены методы манипулирования ультрадисперсными частицами и средами, для которых существенно различны длины волн их захвата оптическим пинцетом. Рассмотрено оптическое манипулирование как аналог мембранного разделения смеси частиц, а также для обеспечения реакции смеси частиц.

Ключевые слова: оптическая анизотропия, оптический пинцет, боросилоксановые гели, жидкокристаллические композиты.

LIQUID CRYSTAL COMPOSITE CELLS FOR OPTICAL MANIPULATION

Solomatin A.S., Pankrushina A.V., Tsareva E.V., Mashchenko V.I.*, Ermakova M.V.*

Department of Computer Science and Computer Engineering

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

*Moscow Region State University, 24 Very Voloshinoy str., 141014, Mytishi, Russia

A matrix optical element was developed on the basis of 4-cyano-4-octyloxidiphenyl and borosiloxane gels. On the basis of new liquid-crystal composites, current optical designs of the element base for optical manipulation of an ensemble of particles are proposed. Methods for manipulating ultradisperse particles and media for which the wavelengths of their capture by optical tweezers are significantly different are proposed. Optical manipulation is considered as an analogue of membrane separation of a mixture of particles, as well as for providing a reaction of a mixture of particles.

Keywords: optical anisotropy, optical tweezers, borosiloxane gels, liquid crystal composites.

Введение

Целью данной работы, являющейся продолжением [1-3], стала разработка на основе обладающих перспективными оптическими свойствами жидкокристаллических (ЖК) композитов [4, 5], изготовление которых описано в [1-3, 6], новых конструктивных решений для селективного (для мелких частиц различны длины волн их захвата) оптического пинцета. В качестве альтернативы мембранного разделения смеси частиц предложены оптические методики, обеспечивающие также и химическую реакцию заданных компонентов смеси.

Непрозрачная частица не фиксируется в фокусе луча, а выталкивается им по направлению светового потока давлением света. Прозрачные частицы (с показателем преломления больше чем у окружающей среды) накапливаются на оси, а затем смещаются в фокус луча, по градиенту интенсивности. Прозрачные частицы с показателем

преломления меньше, чем у окружающей среды, перемещаются против градиента, их собирают в полом луче в темной осевой части.

Тепловые колебания приводят к выходу частицы из недостаточно сфокусированного луча – при малом градиенте интенсивности. Луч сфокусированный перемещает частицу от области захвата (ближе фокусного расстояния) до фокуса.

Управляемые электрическим полем торцевых прозрачных электродов, твист-структуры [7] на основе ЖК-композитов удобны как регуляторы интенсивности луча, поляризация которого задана при изготовлении твист-элемента – одного из установленных в цилиндрических порах матрицы (рис.1). Поляризация может быть задана по некоему закону при изготовлении – например одинаковая для нескольких элементов.

Для фокусировки луча в тех же порах устанавливаются ЖК микролинзы [8, 9] с

фокусными расстояниями от десятков микрон до десятков миллиметров, для их формирования удобны микроструктуры ЖК-композитов [1-3].

Охлаждение ниже температуры плавления ориентированных ЖК-композитов 4-циано-4-октилосидифенил (8ОЦБ) на основе БС-геля приводит к кристаллизации ЖК и к долговременному фиксированию полученных микроструктур с размерами от долей до десятков микрон ЖК-фазы в БС-матрицах, в зависимости от температурных режимов ориентирования и термофиксации композитов.

Структуры из ориентированных кристаллитов переходят в ЖК-фазу и могут быть приложением электрического поля переориентированы [8] под другое фокусное расстояние линз ЖК при нагревании композитов выше 55°C - температуры плавления 8ОЦБ. Для нагрева требуются конструктивные электронагревательные элементы.

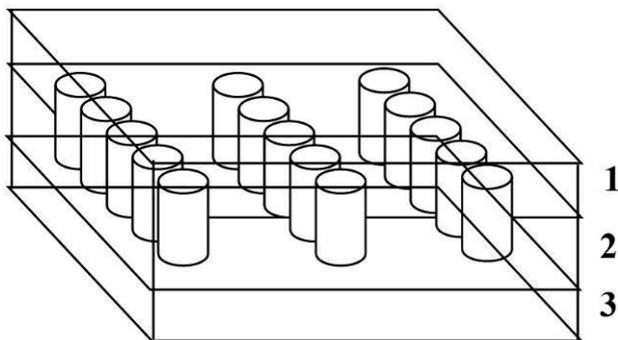


Рис. 1. 1 прозрачный слой над матрицей; 2 непрозрачный слой, в нем матрица цилиндрических пор, заполненных ЖК-композитом; 3 прозрачный слой под матрицей.

Оптический пинцет как аналог мембранной сепарации

Для ультрадисперсных частиц в жидкой прозрачной среде важное значение имеет определяемый их химическим составом спектр их поглощения/пропускания. Для многополосного спектра луча поляризованного света определяется набор захватываемых частиц. Для монохромного луча – какой-то приоритетно захватываемый сорт. Также имеет значение размер частиц – меньше или около длины волны света (про значение показателя преломления уже упоминалось выше).

Лучи света из пор матрицы (рис.2) захватывают мелкие частицы между матрицей и фокусным расстоянием, привлекают их на ось каждого луча и перемещают к фокусу. На фокусном расстоянии (см. выше – от десятков микрон до десятков миллиметров) частицы окажутся уже по другую сторону перфорированного экрана (рис.2), отверстия которого точно напротив пор матрицы. Таким образом, селективно будет отобрана некая составляющая ультрадисперсной среды и перемещена за экран, как в мембранных технологиях.

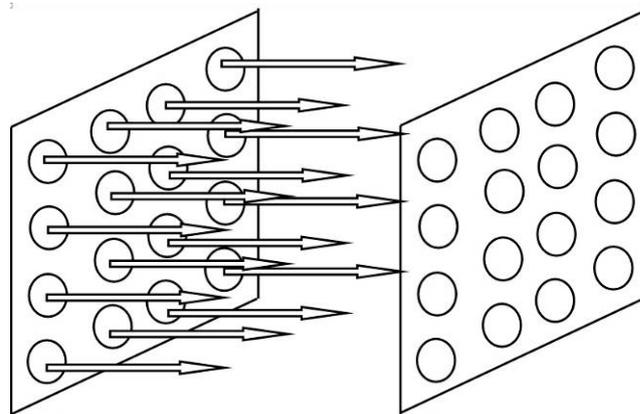


Рис. 2. Оптическое манипулирование как аналог мембранного разделения смеси частиц.

Можно пополнять расход частиц, добавляя смесь, обогащенную ими, в ближнюю к матрице часть (то есть до экрана). Тогда процесс будет идти непрерывно, сепарируя исходную смесь на высокообогащенную данным сортом частиц (за экраном) и обедненную (перед экраном). Поскольку размеры отверстий много меньше площади экрана, то диффузионное перемешивание невелико.

По мере перемещения частиц, попавших в луч, за экран, они заменяются новыми, попадающими в луч под влиянием процессов диффузии. Она ускоряется с ростом температуры, но есть предел способности луча удерживать частицы (противодействовать их тепловым колебаниям). Это определяет оптимальную температуру селективного оптического отбора частиц, заменяющего традиционные мембранные технологии в данном случае.

Оптический пинцет для химического реактора.

По аналогии с рассмотренным выше процессом селективного отбора (сепарирования) частиц заданного сорта, можно (рис.3) обеспечить отбор двух сортов (на рис.3 обозначены как А и В) частиц с, вполне возможно, различными длинами волн (частицы могут иметь разные спектральные диапазоны прозрачности) для их селекции. Частицы двух сортов отбираются из смесей в двух разных объемах и поступают в расположенный (рис.3) между ними объем.

Как уже говорилось выше, фокусные расстояния при селекции располагаются за экраном, то есть, в данном случае, для обоих сортов частиц фокусные расстояния лучей находятся в том объеме, куда частицы перемещаются. Поэтому фокусы можно совместить, и тогда частицы наиболее сконцентрируются именно в одном и том же малом пространстве вблизи фокуса и интенсивность реакции между ними будет наибольшей, в том числе при невысокой температуре, что удобно для оптической селекции.

Для совмещения фокусов необходимо, чтобы лучи были соосны, то есть экраны расположены с учетом этого требования, а матрицы с обеих сторон

имеют одинаковое количество лучеиспускающих пор.

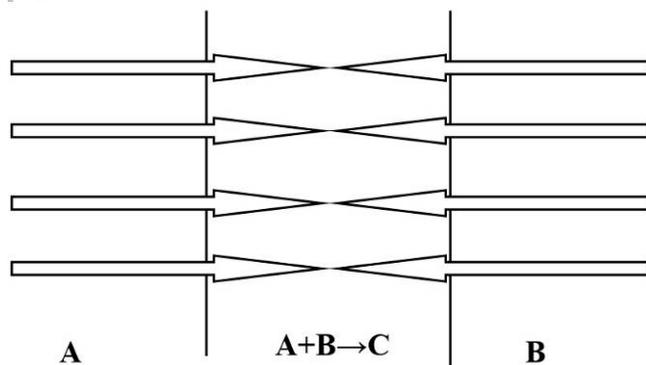


Рис.3. Оптическое манипулирование обеспечивает реакцию смеси частиц.

Выводы

Основанная на ориентированных ЖК-композициях 4-циано-4-октилбензилфенил (8ОЦБ) на основе БС-геля конструкция, позволяющая управлять в различных режимах распределением светового потока, обеспечивает оптическое манипулирование ультрадисперсными средами, их сепарирование и избирательные химические реакции.

Список литературы

1. Соломатин А.С. Особенности формирования микроstructures и оптические свойства жидкокристаллических композитных твист-ячеек / А.С. Соломатин, В.И. Мащенко, Ю.О. Шашкова, В.В. Беляев // Вестник Московского Государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.53 - 63. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-2-53-63
2. Мащенко В.И. Особенности формирования микроstructures жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана / В.И. Мащенко, Ю.О. Шашкова, А.С. Соломатин, В.В. Беляев // Вестник Московского Государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.34 - 45.
3. Мащенко В.И. Микроstructures жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана. Оптические свойства дисперсной жидкокристаллической структуры на их основе / В.И. Мащенко, А.С. Соломатин, Ю.О. Шашкова, В.В. Беляев // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - № 3. - С.97 – 107. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-3-97-107
4. Пикин С.А., Блинов Л.М., Жидкие кристаллы. – М.: Наука, 1982. – 208 с.
5. Жаркова Г.М., Сонин А.С. Жидкокристаллические композиты. – Новосибирск: Наука. 1994. 214 с.
6. Беляев В.В., Мащенко В.И., Соломатин А.С., Чаусов Д.Н. Способ получения смеси жидкого кристалла с полимером для дисплейной техники и оптоэлектроники // Патент России №0002607454. 2016.
7. Коншина Е.А. Оптика жидкокристаллических сред. – СПб: СПб НИУ ИТМО, 2012. – 99 с.
8. Невская Г.Е. Адаптивные линзы на основе жидких кристаллов. / Г.Е. Невская, М.Г. Томилин // Оптический журнал. – 2008. - Т.75. - №9. - С.35-48.
9. Соломатин А.С. Линзы на основе жидких кристаллов с неоднородным радиальным распределением директора // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2016. № 3. С. 37–45.

УДК 66.02, 66.023.2

Апостолов А.Г.

ОБЗОР ПРИМЕНЕНИЯ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ИССЛЕДОВАНИЯХ В ОБЛАСТИ ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОГО ИНЖИНИРИНГА

Апостолов Апостол Георгиев, студент 2 курса магистратуры факультета Цифровых технологий и химического инжиниринга; e-mail: apostolov_muctr@mail.ru

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

Настоящая статья предоставляет читателю возможность узнать больше об использовании технологий аддитивного производства для нужд экспериментальной химии и химической технологии, благодаря проведённому анализу отечественных и зарубежных научных работ.

Ключевые слова: аддитивные технологии, химия, химическая технология, 3D печать, прототипирование, масштабирование химико-технологических процессов.

AN ANALYSIS OF THE APPLICATION OF ADDITIVE MANUFACTURING TECHNOLOGIES IN STUDIES IN THE FIELD OF CHEMISTRY AND CHEMICAL ENGINEERING

Apostolov Apostol Georgiev

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

The following article presents to the reader an opportunity to find out more about the use of additive manufacturing technologies for the needs of experimental chemistry and chemical technology as a result of the analysis of domestic and foreign research papers.

Keywords: additive technologies, chemistry, chemical engineering, 3D printing, prototyping, chemical process scaling up.

Введение

Перед тем как изложить довольно обобщённый анализ, показывающий, как на сегодняшний день учёные химики и инженеры-химики используют цифровые технологии для совершенствования процессов химической индустрии, необходимо коротко ознакомиться с историей и методами построения физических структур по технологии прибавления материала.

До появления цифровых технологий обработки и создания виртуальных и физических объектов, производство деталей, узлов и машин осуществлялось полностью по технологиям отнятия материала. Это, прежде всего, относится к области машиностроения и токарной обработки для создания деталей, узлов, механизмов и аппаратов. Однако развитие вычислительных устройств, их эволюция и создание всё более эффективных программных комплексов для обработки данных и симулирования разных физических процессов в виртуальной среде, привело к появлению идей, а потом и к созданию методов и техник для получения физических объектов из цифровых моделей.

Таким образом, в начале 80-х годов XX века была создана первая технология изготовления физических объектов методом послойного затвердевания фотополимерной смолы. Изобретатель и инженер Чарльз Халл, создал стереолитографический метод печати трёхмерных объектов фотополимером, затвердевающим под воздействием ультрафиолетового света. В 1984 году был запатентован первый в мире 3D принтер, а в

1986 году была создана и компания, занимающаяся продвижением технологии трёхмерной печати, моделирования, сборки принтеров и поставкой фотополимеров.

С тех пор многое изменилось – увеличилось количество методов выращивания объектов, производительность принтеров, разнообразие материалов из которых можно изготовить объект, а самое главное – доступность технологии трёхмерной печати.

Аддитивные технологии, аддитивное производство – с англ. – *additive techniques, additive manufacturing (add – добавлять, прибавлять; additive – прибавляемый)*, как видно из происхождения слов, указывает на значение – это технологии создания физических объектов (имеющие любую форму) методом прибавления материала.

В доступном русскоязычном пособии [1] приведено определение аддитивных технологии из стандарта ASTM F2792.1549323. Документ разработан Американским международным обществом тестирования и материалов (*American Society of Testing and Materials International – ASTM International*). Определение описывает аддитивные технологии как : «*на английском – process of joining materials to make objects from 3D model data, usually layer upon layer, as opposed to subtractive manufacturing technologies*», тогда на русском языке можно перевести: процесс присоединения материала, с целью чтобы построить (построения) объектов из данных (по данным) трёхмерной модели, как правило, слой за слоем, в отличие от отнимающих

технологий». Приведённое определение является достаточно чётким и ясным.

Так как в настоящей работе интерес представляет использование ниже приведённых аддитивных технологий (см. Табл. 1.), в химии и химической технологии, подробно не рассмотрены технологии трёхмерной печати. Следует отметить, что за последние десятилетия темпы изучения аддитивных

технологий растут, поэтому можно найти большое количество научных и научно-популярных работ, описывающих как подробно, так и обобщённо принципы создания трёхмерных физических объектов.

Основываясь на анализе работ [2,3], на сегодняшний день можно выделить следующие методы создания трёхмерных объектов:

Таблица 1. Виды наиболее часто используемых аддитивных технологий для мелкосерийного производства и прототипирования деталей, механизмов и аппаратов в машиностроении.

Метод	Технология	Исходные материалы
Экструзионный	Моделирование методом послойного наплавления (FDM – fused deposition method)	Термопластики: чаще всего полимолочная кислота (PLA), акрилонитрилбутадиенстирол (ABS) и др.
Порошковый	Прямое лазерное спекание металлов (DMLS – direct metal laser sintering)	Практически любые металлические сплавы
	Электронно-лучевая плавка (EBM – electron beam melting)	Титановые сплавы, кобальтохромовые сплавы, нержавеющая сталь, алюминий
	Выборочная лазерная плавка (SLM – selective laser melting)	Сплавы Ti, сплавы Ст-Мо, нержавеющая сталь, сплавы Al
	Выборочное тепловое спекание (SHS – selective heat sintering)	Порошковые термопластики
	Выборочное лазерное спекание (SLS – selective laser sintering)	Термопластики, металлические порошки, керамические порошки
Струйный	Струйная трехмерная печать (3DP – three dimension print)	Гипс, пластики, металлические порошки, песчаные смеси
Ламинирования	Метод послойного ламинирования (LOM - laminated object manufacturing)	Листовой материал (бумага, металлическая фольга, пластиковая пленка)
Полимеризации	Стереолитография (SLA - stereolithography)	Фотополимеры
	Цифровая светодиодная проекция (DLP – digital laser processing)	

Использование аддитивных технологий в области экспериментальной химии.

Большое распространение технологии трёхмерного моделирования получили в области экспериментальной химии и технологии получения стёкол и керамик. Благодаря трёхмерной печати можно создавать формы любой сложности для дальнейшей отливки или спекания объектов. В работе [4] наглядно показаны возможности создания сложных форм для горячего литья огнеупорной керамики методами экструзионной аддитивной технологии. Благодаря этому исследователи улучшили литейные формы и изучили свойства полученных объектов. Авторы отмечают положительное влияние использования сжигаемых полимерных форм полученных методами экструзионной печати для отливки сложных геометрических силикатных и керамических

изделий, что существенно упрощает исследование их физических свойств и возможное производство.

Другая работа в области химии и технологии керамики и силикатов [5] исследует возможности получения прозрачного силикатного стекла. Прозрачные образцы силикатного стекла с предварительно заданной формой получены благодаря использованию стереолитографического метода печати. Для получения прозрачного стекла, предварительно в фотополимерной смоле распределяются частицы мелкодисперсного диоксида кремния и нанокompозита (аморфные наночастицы кремния). Далее после смешения компонентов получилась многокомпонентная смола, которая была использована в качестве носителя для предварительной печати объектов. После затвердевания полимера модели были подвергнуты высокотемпературному спеканию. Как показали

результаты, полученные стёкла были прозрачными и сохранили заданную предварительной печати форму.

Работа [6], которая тоже находится в области химии и технологии керамики, рассматривает путь получения кремний-углеродной керамики с заданной пористостью. Учёным удалось получить керамику, с разной пористостью используя разновидность технологии стереолитографии. Похожая работа [7] предлагает метод быстрого высокотемпературного синтеза керамики любой формы, а для придания формы изделию, на подготовительной стадии, также используются SLA аддитивные технологии.

Использование аддитивных технологий для интенсификации химических процессов в реакторной среде и при создании и исследовании новых типов реакторов.

Работа [8] подробно раскрывает возможности использования аддитивных технологий при создании реакторов, химико-технологических систем и их лабораторное исследование. Авторы рассмотрели и испытали возможность создания микрореакторов и реакционных систем при использовании аддитивных технологий. В работе проанализированы пять наиболее развитых аддитивных технологий – стереолитография (SLA – stereolithography), метод многоструйного моделирования (MJM – multi jet modelling), выборочная лазерная плавка (SLM – selective laser melting), лазерное спекание (LS – laser sintering), моделирование методом послойного наплавления (FDM – fused deposition method). Благодаря использованию этих аддитивных технологий были созданы разные микрореакторы, что позволило изучить их эффективность при протекании разных органических и неорганических реакций. В работе также приводится обобщающая таблица, где сравнены преимущества и недостатки основных методов 3D печати для изготовления микрореакторов и реакторных систем.

Работа [9] описывает создание сложных химических соединений. Там отмечается, что синтез некоторых активных лекарственных веществ, на сегодняшний день является достаточно сложный химический и технологический процесс, требующий большое количество ресурсов. Авторы отмечают, также, что лабораторный синтез любого химического соединения, в тонкой химической технологии, сильно отличается от промышленного его получения. Однако исследователи из Университета Глазго, проанализировали путь синтеза несколько важных активных фармацевтических веществ и решили, что могут изменить масштабы и систему их синтеза. При помощи САПР была спроектирована компактная установка синтеза. Далее цифровой проект был реализован, при помощи аддитивной технологии послойного наплавления материала. В качестве материала для реакторов был использован полипропилен. Таким образом, была доказана возможность уменьшения размеров производства, а

также, что при помощи аддитивных технологий можно создать копию промышленной установки синтеза в масштабе и испытать разные режимы работы и формы реакторов. Также было подтверждено, что при разных режимах работы системы синтеза, конечный продукт не изменялся. Очень важно оценить, что таким в процессе разработки была создана цифровая копия установки синтеза и благодаря этому возможно создание симуляции движения потока реагента в объёме реактора. Таким образом, цифровой двойник установки предоставляет возможность гораздо быстрее дорабатывать и совершенствовать процесс и аппарат, что повысит эффективность и качество [39, 45].

В работе [10] представлен обзор уровня техники и возможностей будущего использования аддитивного производства (АП). Учёные рассматривают использование трехмерной (3D) печати или АП для исследования химических процессов и их приложение в аналитической химии. Был сделан вывод, что трёхмерная печать потенциально может революционизировать химическое производство, позволяя создавать модели и прототипы, что было бы невозможно при использовании других технологий [11]. Кроме того технологии аддитивного производства позволяет инженерам и ученым быстро замкнуть цикл разработки, изготовления и применения изделий и прототипов. Эти аспекты имеют особое значение для процессов и аппаратов химической технологии, где гибкость в конструкции реактора и интеграция аналитики в реальном времени часто являются ограничивающими факторами. Применение 3D-печати по отношению к химическим процессам открывает новое исследовательское пространство на стыке химии и техники, о котором впервые сообщил коллектив учёных [12].

В работе [13] рассмотрено и проанализировано как компьютерные технологии изготовления в сочетании с подходами моделирования и обработки данных изменяют способ изготовления и проектирования функциональных объектов. Работа предлагает использование аддитивных технологии для создания катализаторов и в химическом машиностроении. Авторы работы рассматривают неуклонно возрастающее влияние аддитивного производства на создание и внедрение нового оборудования для химических лабораторий и опытных производств. Отмечается, что еще на ранней стадии, быстрый и плавный переход между цифровыми данными и физическими объектами, обеспечиваемый инструментами аддитивных технологий изготовления объектов, идёт на пользу, как при разработке, так и производству реакторов и структурированных катализаторов. Также благодаря оптимизации геометрии реакторов, с помощью вычислительной гидродинамики и экспериментальной оценки свойств, аддитивное производство сокращает разрыв между теорией и

экспериментом, обеспечивая точное изготовление деталей и узлов. В своей работе учёные освещают исследования с использованием 3D-печати и компьютерного моделирования в качестве цифровых инструментов для проектирования и изготовления реакторов и структурированных катализаторов. Их целью является научно-исследовательский вклад работы для стимулирования взаимодействия на перекрестке химии и материаловедения, с одной стороны, и цифрового изготовления и компьютерного моделирования, с другой.

Выводы

Проведённый анализ научных работ предоставляет возможность сделать вывод, что использование аддитивных технологий для изготовления компьютерно-оптимизированных геометрий физических объектов и их экспериментальное изучение приведёт к усилению взаимодействия между профессиональными сообществами, занимающимися экспериментальной и модельно-конструкторской работой. Это создаст необходимость в формировании междисциплинарных профилей для изучения возможностей разработки компьютерно-программируемых материалов и установок для химии и химической технологии. Эти и другие изменения могут стать частью образовательных программ для подготовки ученых и инженеров, которые будут применять новые возможности цифрового производства [14-25].

Главное направление использования 3D-печати на данный момент в первую очередь удовлетворяет быстро меняющиеся потребности в исследовательских лабораториях. Химические реакторы и другие аппараты могут быть спроектированы и потенциально изготовлены для выполнения высокоспецифичных экспериментов. При необходимости, путем взаимодействия с аналитическим оборудованием можно выполнять анализы при интеграции во время производства в технологическую систему детектирующие устройства. Кроме того, аддитивное производство облегчает использование концепций прототипирования оборудования, как например проточных реакторов в лабораторных масштабах, то уровень промышленного производства напрямую будет зависеть от внедрения цифровых технологий в образование и НИОКР [43-45]. Если рассмотреть, фармацевтическую и другие отрасли тонкой химической технологии, где при производстве используются периодические реакторы, всё связано напрямую с технологическим циклом, выполняемым в лабораторном синтезе продуктов. Изучение реакций, протекающих в проточных реакторах в лабораторных масштабах, позволило бы исследовать и расширить условия синтеза химических продуктов в более широком диапазоне (например, некоторые реакции не считаются безопасными для проведения в реакторах периодического действия) [41-42]. Следовательно, использование аддитивных технологий позволило бы использовать

технологические карты и получать продукты, которые в настоящее время недоступны в промышленном масштабе. [29-35]

Однако необходимо отметить, что требуется повышение термической и химической совместимости строительных материалов для 3D-печати. Это способствовало бы более широкому влиянию аддитивного производства на непрерывное химическое производство [8]. Основные шаги уже были предприняты путем использования полипропилена, металлов и керамики для 3D-печати.

Тем не менее, все еще большое влияние имеет конечная стоимость печати, пока не возможно достаточно точно контролировать шероховатость поверхности внутренних частей реактора из-за чего могут нарушаться некоторые гидродинамические условия протекания реакции. Необходимо усовершенствовать или создавать стандарты и стандартизированные протоколы для испытаний изделий полученных путём аддитивных технологий и т.д. [36-39]

Новые подходы к изготовлению деталей могут помочь в решении этих проблем. Например, шероховатость внутренней поверхности в реакторах, полученных при помощи 3D-печати, напрямую связана с ориентацией детали во время печати, толщиной слоя и способом создания внутренних пустот, а также тип и возможности для удаления материала подложки детали.

Существенное влияние на разработку и интенсификацию оказывает область цифрового моделирования гидродинамики потока на микроуровне. Вследствие этих исследований при использовании стереолитографических методов печати набирает обороты для изготовления микрореакторов с особой схемой внутренних каналов потока и высоким качеством поверхности. Однако фотополимеры обычно имеют плохую термическую и химическую стабильность. Тогда можно использовать «керамическую стереолитографию» для производства высококачественных керамических деталей путем фото-сшивания керамических порошков с последующим выгоранием и спеканием связующего, а это может быть значимым направлением для изучения в этом контексте. По сравнению с литьем керамики под давлением этот подход позволяет создавать более сложные геометрии и избегает затрат и задержек изготовления пресс-форм [13].

Благодарности

Автор выражает свою благодарность за помощь в написании работы академику Мешалкину Валерию Павловичу.

Список литературы

1. М.А. Зленко, А.А. Попович, И.Н. Мутьлина, «Аддитивные технологии в машиностроении», СПбГУ, Санкт Петербург, 2013. – 222 с.
2. С. Н. Литунов, В. С. Слободенюк, Д. В. Мельников – Обзор и анализ аддитивных

- технологий. Часть 1., Омский научный вестник, №1 (145) 2016, с.12-16.
3. С.Н. Литунов, В.С. Слободенюк, Д.В. Мельников, В.В. Федянин, Н.С. Кошечева Обзор и анализ аддитивных технологий. Часть 2., Омский научный вестник. – 2016. – №5 (149). – с.20-24.
 4. Опыт практического применения аддитивных технологий в производстве керамических изделий / М.М.Киселев, М.А.Вартанян, В.И.Путляев, П.В.Евдокимов, Е.В.Кукуева // Успехи в химии и химической технологии. – 2017. – №3(184). – с.46-48.
 5. Kotz, F., Arnold, K., Bauer, W. et al. Three-dimensional printing of transparent fused silica glass. *Nature* 544, 337–339 (2017). <https://doi.org/10.1038/nature22061>
 6. Zocca, A., Gomes, C., Staude, A., Bernardo, E., Günster, J., & Colombo, P. (2013). SiOC ceramics with ordered porosity by 3D-printing of a preceramic polymer. *Journal of Materials Research*, 28(17), 2243-2252. doi:10.1557/jmr.2013.129
 7. Wang C, Ping W, Bai Q, et al. A general method to synthesize and sinter bulk ceramics in seconds. *Science*. 2020;368(6490):521-526. doi:10.1126/science.aaz7681
 8. Capel AJ, Edmondson S, Christie SD, Goodridge RD, Bibb RJ, Thurstans M. Design and additive manufacture for flow chemistry. *Lab Chip*. 2013;13(23):4583-4590. doi:10.1039/c3lc50844g
 9. Kitson PJ, Marie G, Francoia JP, et al. Digitization of multistep organic synthesis in reactionware for on-demand pharmaceuticals. *Science*. 2018;359(6373):314-319. doi:10.1126/science.aao3466
 10. Anastas, P.T., Sans, V., Dragone, V. and Cronin, L. (2020). Applications of 3D Printing in Synthetic Process and Analytical Chemistry. In *Handbook of Green Chemistry*, P.T. Anastas (Ed.). doi:10.1002/9783527628698.hgc141
 11. Dimitrov, D., Schreve, K., and de Beer, N. (2006) Advances in three dimensional printing – state of the art and future perspectives. *Rapid Prototyping Journal*, 12, 136–147.
 12. Symes, M.D., Kitson, P.J., Yan, J., Richmond, C.J., Cooper, G.J.T., Bowman, R.W., Vilbrandt, T., and Cronin, L. (2012) Integrated 3D-printed reactionware for chemical synthesis and analysis. *Nature Chemistry*, 4, 349–354.
 13. Parra-Cabrera C, Achille C, Kuhn S, Ameloot R. 3D printing in chemical engineering and catalytic technology: structured catalysts, mixers and reactors. *Chem Soc Rev*. 2018;47(1):209-230. doi:10.1039/c7cs00631d
 14. Мешалкин В. П., Ходченко С. М. Сущность и виды инжиниринга энергоресурсоэффективных химико-технологических систем // Все материалы. Энциклопедический справочник. — 2017. — № 6. — С. 2–10.
 15. Мешалкин В. П., ТОВАЖНЯНСКИЙ Л. Л., КАПУСТЕНКО П. А. Основы теории ресурсосберегающих интегрированных химико-технологических систем. — Нац. техн. ун-т Харьков. политехн. ин-т (Харьков), 2006. — 411 с.
 16. Мешалкин В. П., Образцов А. А. Оптимизация компоновки объектов химических производств как задача ресурсосбережения // Логистика и экономика ресурсосбережения и энергосбережения в промышленности (МНПК ЛЭРЭП-4-2009). Сборник научных трудов Междунар. науч.-практ. конф. (Самара, 21-23 сентября 2009г.). — Т. 1. — Самара: Самарский гос. аэрокосмический университет им. академика С.П. Королёва Самара: Самарский гос. аэрокосмический университет им. академика С.П. Королёва, 2009. — С. 168–172.
 17. Мешалкин В. П. Ресурсоэнергоэффективные методы энергообеспечения и минимизации отходов нефтеперерабатывающих производств: основы теории и наилучшие практические результаты. — М.; Генуя: Химия, 2010. — 393 с.
 18. Meshalkin V.P. Energy-saving technology performance and efficiency indexes // *Chem. Eng. Transactions*. – 2009. – Т. 18. – С. 953-958.
 19. Мешалкин В.П., ТОВАЖНЯНСКИЙ Л.Л., КАПУСТЕНКО П.А. Основы энергоресурсоэффективных экологически безопасных технологий нефтепереработки. – Харьков: НТУ «ХПИ», 2011. – 616 с.
 20. ГОСТ Р 57306-2016. Инжиниринг. Терминология и основные понятия в области инжиниринга.
 21. ГОСТ Р 52104-2003. Ресурсосбережение. Термины и определения.
 22. ГОСТ Р 53905-2010. Энергосбережение. Термины и определения.
 23. ГОСТ Р ИСО 50001-2012. Системы энергетического менеджмента.
 24. ГОСТ Р 56222-2014. Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Термины и определения в области материалов.
 25. ГОСТ Р ИСО 14001-2016. Системы экологического менеджмента. Требования и руководство к применению.
 26. [http://eippcb.jrc.ec.europa.eu/reference/Best Available Techniques REFERENCES](http://eippcb.jrc.ec.europa.eu/reference/BestAvailableTechniquesREFERENCES) «BAT-BREF».
 27. Боравский Б.В., Скобелев Д.О., Венчикова В.Р., Боравская Т.В. Наилучшие доступные технологии. Аспекты практического применения. – М.: «Перо», 2014. – 184с.
 28. Мешалкин В.П. Логистика и электронная экономика в условиях перехода к устойчивому развитию. - М.: АНО «Изд-во физ.-мат. лит.», 2004. - 408 с.
 29. Л. Осика. Современный инжиниринг: определение и предметная область // *ЭнергоРынок*. – апрель 2010. – № 04 (76) (<http://www.e-m.ru/er/2010-04/29516/>).
 30. Мешалкин В.П. Экспертные системы в химической технологии. – М.: Химия, 1993.

31. Мешалкин В.П., Мошев Е.Р. Комплекс программ поддержки жизненного цикла трубопроводных систем нефтехимических предприятий // Прикладная информатика. 2016. Т. 11. № 4 (64) С. 57-75/
32. Методология структурного анализа и проектирования: [Пер. с англ.] / Дэвид А. Марка, Клемент Л. МакГоуэн; Предисл. Д. Т. Росса. – М.: Фирма "Мета Технология", 1993. – 240 с.
33. Руководящий документ РД IDEF 0 – 2000. Методология функционального моделирования IDEF0. – М.: Госстандарт России.
34. Ицкович Э.Л. Развитие АСУ технологического производства в рамках концепции Индустрия 4.0 (Industry 4.0), «Датчики системы», №7 (2016) июль 2017.
35. Справочник химика 21. Химия и химическая технология / URL: <http://www.chem21.info> (дата обращения: 15.05.2020)
36. Белоглазов Н.Н., Муравьев А.И. Интенсификация и повышение эффективности химико-технологических процессов, «Химия», 1988. – 206 с. :ил.
37. Кардашов Г.А. Физические методы интенсификации процессов химической технологии, – М.: «Химия», 1990, – 208с.
38. Кафаров В. В., Мешалкин В. П. Ресурсосберегающие химические производства // Итоги науки и техники. ВИНТИ. Сер. Процессы и аппараты хим. технологии. — Т. 15. — 1987. — С. 85–158.
39. Jacob A. Moulijn, Andrzej Stankiewicz, Johan Grievinka, Andrzej G´orak. Process intensification and process systems engineering: A friendly symbiosis
40. Edited by Frerich Johannes Keil. Process intensification / URL: <https://www.degruyter.com/view/j/revce.2018.34.issue-2/revce-2017-0085/revce-2017-0085.xml> (дата обращения: 15.05.2020)
41. Кафаров В.В., Мешалкин В.П. Анализ и синтез химико-технологических систем: - М.: Химия, 1991. -432 с.
42. European roadmap of process intensification / Creatieve Energie / URL: https://traxxys.com/wp-content/uploads/2017/05/2.2.8.1_Technology_Report_Reactive_Distillation_Schoenmakers.pdf (дата обращения: 15.05.2020)
43. R. Smith Chemical Process Design and Integration, 2nd. Ed, "WILEY", 435 p.
44. J.J. Klenes, P.S. Varbanov etc., Sustainable Process Integration and Intensification, 2nd ed., DEGRUYTER, 789p.
45. Andrzej I. Stankiewicz, Jacob A. Moulijn Process Intensification: Transforming Chemical Engineering // Chemical Engineering Progress.- 2000. - pp.22-34.

УДК 621.357.7

Зорин Р.А., Алешина В.Х., Григорян Н.С., Ваграмян Т.А.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ БЛЕСКООБРАЗУЮЩИХ ДОБАВОК НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МЕДНОГО ГАЛЬВАНИЧЕСКОГО ПОКРЫТИЯ В СКВОЗНЫХ ОТВЕРСТИЯХ ПЕЧАТНЫХ ПЛАТ

Зорин Роман Анатольевич, студент 1 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: ZorinRoman@list.ru;

Алешина Венера Халитовна, ассистент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии;

Григорян Неля Сетраковна, к.х.н., доцент, профессор кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии;

Ваграмян Тигран Ашотович, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой инновационных материалов и защиты от коррозии.

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

Настоящая работа посвящена изучению стадии гальванического меднения сквозных отверстий многослойных печатных плат. Металлизация отверстий является одной из самых сложных стадий и требует высокотехнологичных электролитов и оборудования. Изучено влияние блескообразующей добавки на равномерность медного покрытия в отверстиях и на поверхности печатных плат и исследована возможность ее использования в отечественных электролитах гальванического меднения сквозных отверстий печатных плат.

Ключевые слова: печатные платы, сквозные отверстия печатных плат, рассеивающая способность, равномерность покрытия, блескообразующая добавка (Brightener).

STUDY OF THE EFFECT OF A GLOSS-FORMING ADDITIVE ON THE DISTRIBUTION OF GALVANIC COPPER PLATING IN THE THROUGH HOLES OF PRINTED CIRCUIT BOARDS

Zorin R.A., Aleshina V.Kh., Grigoryan N.S., Vagramyan T.A.

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

This work is devoted to the study of the stage of galvanic copper plating through holes of multilayer printed circuit boards. Metallization of holes is one of the most difficult stages and requires high-tech electrolytes and equipment. The effect of the brightening additive on the uniformity of the copper coating in the holes and on the surface of the printed circuit boards is studied and the possibility of its use in domestic electrolytes of galvanic copper plating through holes of the printed circuit boards is studied.

Keywords: printed circuit boards, through holes of printed circuit boards, throwing power, coating uniformity, gloss-forming additive (Brightener).

Введение

С развитием технологий возрастает актуальность создания высокоточных печатных плат (ПП), которые являются основным компонентом электронных устройств. Печатная плата представляет собой пластину из диэлектрика (стеклотекстолит, гетинакс и др.), на поверхности и в объеме которых сформированы электропроводящие элементы электронной схемы, которые предназначены для электрического и механического соединения компонентов электроники.

С учетом современных требований к габаритам и компактности изделий наиболее востребованными в промышленности и составляющими основную долю объема выпускаемых печатных плат являются многослойные печатные платы (МПП), представляющие собой запрессованные чередующихся слои диэлектрика с нанесенным токопроводящим рисунком (ТПР). ТПР располагаются на внешних сторонах и внутренних слоях диэлектрика, электрическая связь между которыми осуществляется посредством металлизации сквозных отверстий ПП.

Основными требованиями к гальваническому медному покрытию внутри отверстий и на поверхности

ПП являются: сплошность и равномерность покрытия, в т.ч. отсутствие эффекта «собачья кость» – избыточного нарастания металла на входе отверстия. Кроме того, толщина меди в отверстиях должна быть не менее 75-80 % толщины меди на поверхности ПП, а медное покрытие должно быть блестящим. [5]

Теоретическая часть

Для металлизации отверстий в печатных платах требуются высокотехнологичные процессы гальванического меднения, которые смогут обеспечить высокую производительность и качество изделий.

Класс печатных плат зависит от значения аспектного соотношения – отношения диаметра отверстий к толщине ПП, ширины проводников, расстояния от края площадки и так далее. [2]. Технологические возможности современных производств с каждым годом возрастают и реальные значения аспектного соотношения достигают значений 0,125; 0,100; 0,083 и менее.

Меднение сквозных отверстий печатных плат с малыми значениями аспектного соотношения является сложной и трудоёмкой операцией, во многом определяющей в дальнейшем качество конечного изделия[3].

Факторы, от которых зависит равномерность гальванического покрытия: рассеивающая способность электролита (РС), размер катода, отношение размеров анода и катода, расстояние между ними, использование реверсивного тока, перемешивания, покачивания катодных штанг и ультразвукового воздействия [3].

Перспективными электролитами меднения отверстий ПП являются серноокислые электролиты, содержащие Cu^{2+} и H_2SO_4 в соотношении 1:10, а также ионы Cl^- и Fe^{2+} . Введение в данный электролит одновременно трех типов добавок (ингибирующая, выравнивающая, блескообразующая) позволяет повысить РС электролита и обеспечить равномерность и блеск покрытия как внутри отверстий, так и на поверхности ПП.

Экспериментальная часть

Исследовано влияние блескообразующих добавок на распределение медного покрытия в отверстиях и на поверхности ПП [4]. В качестве образцов использовались тест-купоны из фольгированного диэлектрика FR-4 толщиной 1,5 мм с отверстиями Ø 0,2 мм. Для придания электропроводности стенкам отверстий тест-купоны предварительно подвергались химическому меднению (1-3 мкм), после чего осуществлялось гальваническое осаждение меди при следующих параметрах процесса: плотность тока $i = 2 \text{ А/дм}^2$, продолжительность $\tau = 57 \text{ мин}$, температура электролита 20-25 $^\circ\text{C}$, механическое перемешивание на магнитной мешалке (750 об/мин).

Для оценки распределения медного покрытия в отверстиях ПП пользовались современным методом расчета РС с помощью поперечных шлифов с применением 2-х уравнений, используемых зарубежными производителями: минимальный РС_{min} (1) и максимальный РС_{max} (2) уравнения. Методы (рис. 1) основаны на измерении толщины покрытия на стенках отверстия (точки В₁-В₆) и на поверхности заготовки (точки S₁-S₄) на расстоянии 25 мкм от угла отверстия. Расчет РС производили с помощью уравнений:

$$PC_{\min} = \frac{(B_2 + B_4)/2}{(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)/4} \cdot 100\%, \quad (1)$$

$$PC_{\max} = \frac{(B_1 + B_2 + B_3 + B_4 + B_5 + B_6)/6}{(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)/4} \cdot 100\%. \quad (2)$$

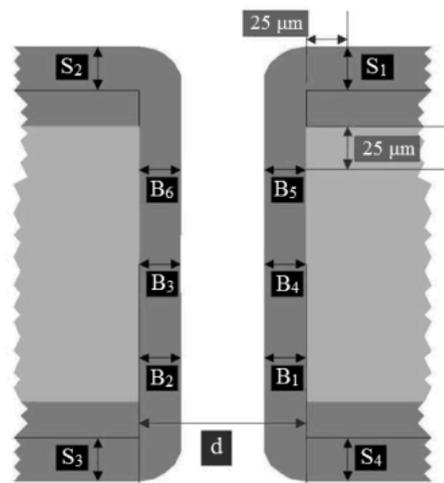
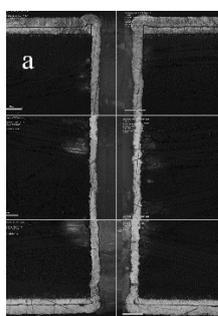


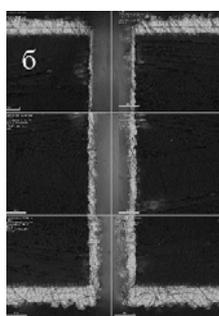
Рис. 1. Схема поперечного шлифа отверстия тест-купона: d – диаметр отверстия

Фотографии поперечных сечений сквозных отверстий тест-купонов были получены на конфокальном лазерном микроскопе OLYMPUS LEXT OLS4100 при 1069-ти кратном увеличении. Для получения целостной картины отверстия, получаемые шесть фотографий частей отверстия соединялись в одно изображение.

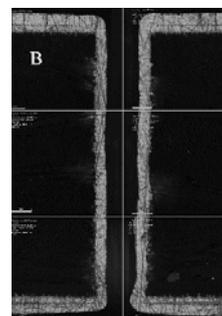
На основании литературных данных [6] в качестве базового был выбран электролит, содержащий (г/л): $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 60, H_2SO_4 (96 %) 220, $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 0,5, NaCl 0,12. По данным, представленным на рис. 2а, видно, что покрытие, осажденное из базового электролита в отверстиях ПП, не отвечает требованию 0,7:1 - отношению толщин покрытия внутри отверстия и на поверхности. Добавление к базовому электролиту зарубежной блескообразующей добавки позволяет получать более равномерное по толщине покрытие, но оно также не отвечает требованию 75-80% от толщины покрытия на поверхности платы (рис. 2 б). При использовании электролита зарубежного аналога распределение покрытия в отверстии соответствует предъявляемым требованиям (рис. 2 в).



PC_{min} = 77 %
PC_{max} = 90 %
δ_{вн} = 17 мкм
δ_{сн} = 21 мкм



PC_{min} = 80 %
PC_{max} = 90 %
δ_{вн} = 16 мкм
δ_{сн} = 20 мкм



PC_{min} = 106 %
PC_{max} = 106 %
δ_{вн} = 27 мкм
δ_{сн} = 25 мкм

Рис. 2. Фотографии поперечных шлифов отверстий ПП Ø 0,2 мм с медным покрытием: а – базовый электролит; б – а + блескообразователь; в – зарубежный аналог; δ_{вн} – толщина покрытия внутри отверстия; δ_{сн} – толщина покрытия на поверхности ПП

Были исследованы ряд соединений из класса тиолов, органических сульфидов и дисульфидов и найдено соединение, представляющей собой вещество из класса сульфоновых кислот и обозначенной нами Б-1, позитивно влияющее на равномерность распределения медного покрытия в отверстиях плат в интервале концентраций его в растворе 0,002-0,1 г/л [6]. На рис. 3 приведены фотографии поперечных шлифов

металлизированных отверстий и данные по рассеивающей способности при использовании соединения Б-1. В диапазоне концентраций добавки Б-1 0,002-0,005 г/л наблюдается равномерное распределение меди в отверстиях и на поверхности тест-купона, эффект «собачьей кости» отсутствует. При концентрации добавки более 0,005 г/л равномерность покрытия ухудшается.

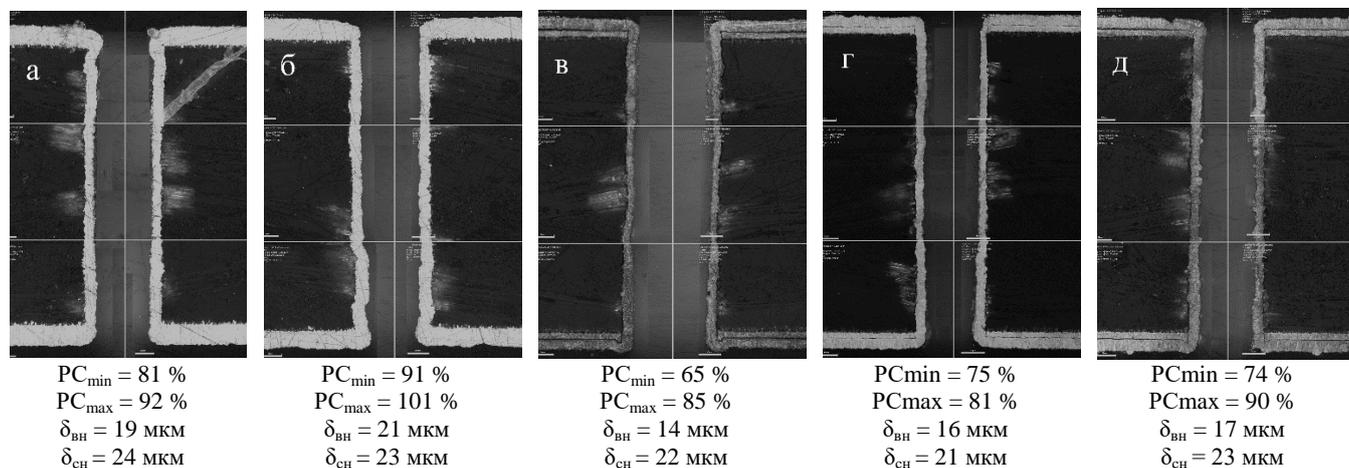


Рис. 3. Влияние концентрации блескообразующей добавки Б-1 на распределение медного покрытия Ø 0,2; x1069:
а – 0,002 г/л; б – 0,005 г/л; в – 0,01 г/л; г – 0,05 г/л; д – 0,1 г/л

Выводы

Установлено, что использование добавки Б-1, представляющей собой вещество из класса сульфоновых кислот, в качестве блескообразователя, при ее концентрации в электролите 0,002-0,005 г/л, позволяет получать покрытия, отвечающие предъявляемым требованиям по равномерности в отверстиях и на поверхности МПП.

Список литературы

1. Брусницына Л.А., Степановских Е.И. Технология изготовления печатных плат. — Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2015. — 200 с.
2. Чернышов А. Классы точности печатных плат и современные технологии // Печатный монтаж. 2009. №6. С. 18-21.

3. Медведев А. Конструкции и принципы изготовления печатных плат // Технологии в электронной промышленности. 2011. №4. С. 12-18.
4. Acidic aqueous composition for electrolytic copper plating: pat. WO 2018/033461 A1. Germany. Заявл. 10.08.2017; опубл. 22.02.2018. 65 p.
5. Electrolytic copper plating bath composition and a method for their use: pat. WO 2016/169952 A1. Germany. Заявл. 20.04.2016; опубл. 27.10.2016. 48 p.
6. Tzu-Chi Chen, Yao-Lin Tsay, Chia-Fu Hsu, Wei-Ping Dow et. al. Effects of Brighteners in a Copper Plating Bath on Throwing Power and Thermal Reliability of Plated Through Holes // Electrochimica Acta. — 2016. Vol. 212. — P. 572-582.

УДК 553.982.2

Рыбина Е.О., Аверина Ю.М., Меньшиков В.В., Степанков Е.К.

ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ И ТЕХНИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПРИ БУРЕНИИ НЕФТЯНЫХ СКВАЖИН ВО ЛЬДАХ

Рыбина Евгения Олеговна, студентка 1 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: rybina97@mail.ru;

Аверина Юлия Михайловна, к.т.н., доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии;

Меньшиков Владимир Викторович, д.т.н., профессор кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия.

Степанков Егор Кириллович, Остравский технический университет, Острава, Чехия

В данной статье рассматривается проблема бурения нефтяных и газовых скважин в жестких условиях. Определены требования к буровому оборудованию и установлены условия для применения промывочной жидкости, без загрязнения окружающей среды.

Ключевые слова: бурение скважин, ледники, промывочная жидкость.

ECOLOGICAL AND TECHNICAL ASPECTS IN DRILLING OIL WELLS IN ICE

Rybina E.O., Averina Yu.M., Menshikov V.V., Stepankov E.K.

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

This article discusses the problem of drilling oil and gas wells in harsh conditions. The requirements for drilling equipment are defined and the conditions for the use of flushing fluid, without environmental pollution, are established.

Keywords: drilling, glaciers, flushing fluid.

Одним из более действенных способов исследования ледниковых отложений нашей планеты считается бурение скважин с отбором керна находящихся вокруг скважины с последующим изучением отобранных проб и проведением анализов.

Своеобразные характеристики льда, такие как: состав, строение ледников и ледниковых покровов; геологические, климатические, природные, и технико-экономические обстоятельства проведения исследований требуют улучшения имеющихся разработок и создания новых нестандартных методик бурения скважин с применением методик ресурсосбережения [1].

Снега и заледенения считаются одними из главных элементов оболочки Земли. Ледники занимают площадь около 16 млн км² или 11 % площади всей суши [2]. В значимой мере с ними связаны показатели степени заледенения и заснеживания, от них зависит возможность освоения новых, малоисследованных районов Арктики.

Известны две ключевые особенности ледников и ледовых покровов, которые обуславливают интерес к их освоению. В первую очередь, ледники заключают в себе значительную массу пресной воды всей Земли. Вместе с тем, они формируют особенности климата, оказывая непосредственное влияние на его изменения. Кроме того, в ледниках содержатся включения земного и неземного происхождения, которые ценны для исследования: земная и космическая пыль, вулканический пепел, пузырьки древней атмосферы и т.д.

Основная проблема ледниковых районов заключается в труднодоступности инфраструктур и неблагоприятных для работы условий. Для Гренландии и Антарктиды характерен почти

сплошной ледяной покров на суши в сочетании с тяжелыми льдами на шельфе, экстремально низкие температуры, значительная удаленность от пунктов снабжения и совершенно не развитая инфраструктура. В связи с этим задачи, связанные с технологиями бурения и способами проходки, остаются нерешенными. Доставка техники к месту бурения осуществляется различными способами: автотранспорт, санно-гусеничным транспортом и по воздушным путям. При таких условиях особое значение имеют габариты бурового оборудования и его масса. От этих показателей зависит эффективность бурения.

В настоящее время научно-исследовательскими предприятиями разработаны буровые установки для проведения буровых работ в жестких климатических условиях. Чаще всего конструкторы упрощают установки за счет исключения ряда компонентов, проводя ручное бурение. Этот способ позволяет исключить механические приводы, и крупногабаритные электрические генераторы. Для конструкций буровых установок существуют общие требования, включающие возможность разбора на самостоятельные сборочные единицы, минимальную трудоемкость и легкость монтажных работ. Кроме общих требований к конструкции буровых установок, таких как: возможность ее разделения на независимые сборочные единицы, минимальная трудоемкость и удобство сборочных операций, обеспечение возможности компоновки из стандартных и унифицированных частей, к буровому оборудованию для проходки скважин в ледниках предъявляются следующие особые требования:

- масса отдельных узлов и частей оборудования, не превышающая максимальную грузоподъемность транспорта;

- соответствующие транспортным средствам размеры оборудования;
- максимальная облегченность оборудования;
- наименьший размер энергопотребления оборудования;
- устойчивость материалов к температурным условиям (до $-90\text{ }^{\circ}\text{C}$ для поверхностного и до $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ для забойного оборудования)[3].

Таким образом, буровое оборудование, соответствующее перечисленным характеристикам, позволяет применять энергоэффективное оборудование из легкосплавных и композитных материалов взамен традиционных конструкций зданий и платформ [4, 5].

В качестве значимого вклада в освоение льдов Антарктиды следует вспомнить бурение сверхглубокой скважины 5Г, благодаря которой исследователи Национального минерально-сырьевого университета "Горный" достигли поверхности подледникового озера «Восток» [6]. Уникальность водоема состоит в том, что он был изолирован под толщей льда в 4 км от земной атмосферы несколько миллионов лет. Как было сказано ранее, ледники играют важную роль в формировании климата на планете. В связи с этим перед исследователями стояла задача не только разработать принципиально новые технологии, но и найти решения, которые будут экологически чистыми, чтобы не загрязнять озеро. Для проникновения в водоем был создан специальный снаряд ТДПО-132, использование которого предполагало наличие безопасной кремнийорганической жидкости. В целом, технология бурения складывалась следующим образом:

- проходка скважины до глубины в 3720 м;
- заполнение 100-метрового интервала кремнийорганической жидкостью;
- проходка толщи в 30 м с помощью ТБПО, формирование пилот-скважины в 3 раза меньшей диаметром. Снаряд при контакте с водой озера обеспечивал экологическую безопасность вскрытия, выполняя функцию клапана и разобшая скважину и озера;
- подъем воды из озера в скважину на высоту 30 м;
- замерзание воды, последующее бурение образовавшегося льда и получение керна для исследований.

Главным источником экологической опасности практически для всей окружающей среды – атмосферы, растительности и животного мира, поверхностных и подземных вод, ландшафта – являются вещества, содержащиеся в промывочных средах и их отходах. Промывочная среда представляет собой специальную низкотемпературную жидкость, которая заполняет ствол глубокой скважины. Она выполняет функции по очистке забоя от продуктов разрушения и обеспечению устойчивости ствола скважины.

Исследования на станции "Восток" позволили определить основные требования к промывочной жидкости. Их можно сформулировать следующим образом [7]:

- способная к регулированию плотность от 900 до 950 кг/м^3 ;
- холодоустойчивость;
- невысокая вязкость;
- устойчивость;
- способностью к минимальному физико-химическому взаимодействию со льдом и поверхностями оборудования;
- невысокая стоимость;
- соответствие требованиям и нормам безопасности.

Экологичность промывочных жидкостей имеет особое значение, поскольку их контакт с окружающей средой может иметь необратимые последствия. Наиболее действенными в бурении средами принято считать смеси легких углеводородных жидкостей, к которым относятся авиационные и дизельные топлива, гидрофобные растворители. Однако они не соответствуют критерию экологической чистоты, а их применение запрещено специальными международными соглашениями.

На рис.1 представлена классификация используемых в практике бурения органических жидкостей с перспективным классом кремнийорганических жидкостей. Рассмотрим подробнее их свойства и влияние на окружающую среду.

Углеводородные жидкости – это сложные смеси ароматических углеводородов, парафинов, нафтеннов. В приготовлении жидкостей для бурения скважин используются дизельное топливо и авиационные виды топлива различных марок, а также растворители. Тем не менее, керосины имеют особую высокую токсичность и даже в малых количествах способны отравлять низшие формы жизни в водоемах. Кроме того, углеводороды в их составе являются труднорастворимыми. Высокая концентрация керосина оказывает негативное воздействие на человека в первую очередь через органы дыхания. Отравляющим эффектом также обладают этиленовые углеводороды, которые способны раздражать кожу и слизистые глаз. Его допустимая концентрация в воздухе – не более 10 мг/м^3 , в больших количествах он поражает центральную нервную систему[6]. Фторуглероды принято считать относительно безвредными для человека веществами. Однако ученые установили, что содержащие фторуглерод вещества оказывают разрушающее действие на озоновый слой Земли. В связи с принятыми протоколами их применение было сокращено в 2000 году. Использование новых озонобезопасных марок фторуглеродов должно быть также прекращено к 2030 году [6].



Рис. 1 Классификация промывочных жидкостей для бурения скважин во льдах

Применение этиленгликоля и этилового спирта при бурении имеет негативные последствия в случае изменения температуры. Под воздействием тепла снижение концентрации приводит к вымерзанию влаги и образованию шуги, которая создает проблемы для спуско-подъемных операций. Кроме того, этиленгликоль – очень токсичное соединение, которое оказывает негативное воздействие на человека. К высокотоксичному веществу также относится n-Бутилацетат, применение которого при бурении нежелательно. Он является агрессивным растворителем и разрушает все типы резины, а также полимеры. Известен случай, когда при бурении скважины в Гренландии в скважине, залитой n-Бутилацетатом, под его воздействием была разрушена изоляция грузонесущего кабеля.

Как показывает обзор всех трех вышеуказанных жидкостей, их характеристики не соответствуют всем требованиям для применения в промывочной среде. Ученые Санкт-Петербургского государственного горного института и Университет Копенгагена провели совместное исследование для поиска новых соединений, которые можно использовать при бурении без вредного воздействия на окружающую среду. В результате работ было предложено применять низкотемпературные полиметилсилоксановые соединения (ПМС-р), которые относятся к классу кремнийорганических жидкостей [6]. Данные соединения используют в промышленности как охлаждающие и гидравлические жидкости в силу устойчивости к температурам до -100°C . Жидкости из полиметилсилоксановых соединений относятся к полимерам с небольшой молекулярной массой. Они бесцветны и соответствуют всем перечисленным требованиям, которые предъявляются к промывочным жидкостям для бурения. Кроме того, ПМС-р имеют высокие диэлектрические показатели, они коррозионностойкие и совершенно безопасны для различных форм жизни. Их вязкость минимально зависит от температуры.

В настоящее время российские и зарубежные ученые сосредоточены на разработке способов для непосредственного проникновения в озеро «Восток».

Это станет возможно благодаря бурению скважины, которую заполняют низкотемпературной кремнийорганической жидкостью. Ожидается, что при контакте жидкости с водой озера, возможно обитающая там микрофлора, не вступит с ней в контакт, а значит, сохранится жизнеспособность микроорганизмов.

Работа выполнена при финансировании РХТУ им. Д.И. Менделеева, ВИГ № X-2020-011.

Список литературы

1. Н.А. Алферова, А.М. Минакова, Ю.М. Аверина, В.В. Меньшиков. Зеленая химия и тенденция ее развития // Успехи в химии и химической технологии. — 2017. — Т. 31, № 15. — С. 84–85.
2. Н.И. Васильев, П.Г. Талалай, В.М. Зубков, А.В. Красилев, М.В. Зубков. Ликвидация осложнений и аварий при бурении глубоких скважин в ледниках. // Записки горного института, Т. 178, -2018. — С.181-187
3. Н.И. Васильев, П.Г. Талалай, Л.М. Саватюгин. Особенности проектирования оборудования для бурения скважин в ледниках. // Записки горного института, Т. 157, -2016. С.153-156
4. Композиционные материалы. Классификация, особенности свойств, применение и технологии получения / Ю. М. Аверина, Е. Н. Субчева, Е. В. Юртов, О. В. Зверева. — РХТУ им. Д. И. Менделеева Москва, 2017. — 128 с.
5. Ахметова В.Н., Барабанщикова Е.А., Аверина Ю.М. Контроллинг на малых инновационных предприятиях // Успехи в химии и химической технологии. 2017. Т. 31. № 15 (196). С. 76-77.
6. В.С. Литвиненко. Уникальные техника и технологии бурения скважин во льдах Антарктиды. // Записки горного института, Т. 210, -2019. — С.5-10
7. Литвиненко В.С., Талалай П.Г., Чистяков В.К. Промывочные среды для бурения скважин в криолитозоне и ледниках. СПб.: СПГИ, 2006.

УДК 666.3/7
УДК 681.84.081.5

Фарносова Е.Н., Степаненко А.В., Степаненко Е.В.

ПОЛУЧЕНИЕ КЕРАМИЧЕСКИХ МЕМБРАН ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ

Фарносова Елена Николаевна, кандидат технических наук, доцент кафедры мембранной технологии; **Степаненко Ангелина Владимировна**, студентка 3 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

e-mail: avstep.info@yandex.ru

Степаненко Елена Владимировна, студентка 3 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга.

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

В данной статье рассмотрены основные стадии золь-гель технологии изготовления керамических мембран, описаны области их оптимального применения, приведена сравнительная характеристика керамических и полимерных мембран, проанализированы достоинства и недостатки золь-гель метода получения керамических мембран и оценена технико-экономическая эффективность.

Ключевые слова: мембранный процесс, золь-гель метод, керамические мембраны, полимерные мембраны, коллоидная система.

PREPARATION OF CERAMIC MEMBRANES BY SOL-GEL METHOD

Farnosova Elena Nikolaevna, Stepanenko Angelina Vladimirovna, Stepanenko Elena Vladimirovna
D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia, 125047, Miusskaya 9.

This article discusses the basic technologies for manufacturing ceramic membranes, the use of their optimal application, the comparative characteristics of ceramic and polymer membranes, the advantages and disadvantages of producing ceramic membranes are identified, and the technical and economic efficiency is estimated.

Keywords: membrane processes, sol-gel method, ceramic membrane, polymer membrane, colloidal system.

Мембраны по составу подразделяют на органические и неорганические. К органическим относятся природные и синтетические мембраны. Наибольшее применение в настоящее время получили полимерные синтетические мембраны, поскольку, во время синтеза данных мембран можно целенаправленно получать мембраны с заданным строением и пористыми характеристиками. К преимуществам таких мембран относятся их невысокая стоимость. К неорганическим мембранам относятся керамические, стеклянные, металлические и другие мембраны. Синтез таких мембран требует значительно больших экономических затрат и более сложного аппаратного оформления. В последние годы в мировой практике всё более широкое применение находят мембраны на основе неорганических материалов [1].

Существуют различные способы получения керамических (неорганических) мембран: керамический метод (спекание порошков), золь-гель технология, осаждение паром и различные комбинации этих методов. Наиболее распространённым является золь-гель метод.

Золь-гель метод - это способ получения материалов, включающий получение золя с последующим переводом его в гель [2]. Золь - это свободнодисперсная коллоидная система с жидкой дисперсионной средой и твердой нанодисперсной фазой, отличающаяся от геля тем, что она не

затвердевает, остается всегда жидкой. Гель - это связнодисперсная коллоидная система, которая, в отличие от золя, имеет пространственную структуру, которая сообщает гелю механические свойства твердых тел. Стабильность золя сильно влияет на характеристики получаемого геля: чем устойчивее золь, тем плотнее структура геля. Используя этот метод, можно получать как монолитные материалы (стекло, керамика), так и высокодисперсные порошки и волокна. На рис. 1 представлена схема, иллюстрирующая золь-гель синтез.



Рис. 1. Превращение золя в гель

Следует отметить, что золь-гель технология (sol-gel wet coating) - это общее название процесса, и для получения каждого конкретного материала с

нанесенным слоем используется определенная методика нанесения.

Процесс получения материалов или покрытий на основе золь-гелей включает в себя несколько стадий:

1. Получение агрегативно устойчивого золя. Реакции гидролиза и поликонденсации, протекающие быстро при диапазоне температур 18-100°C (оптимально 50°C), приводят к образованию коллоидного раствора - золя - частиц гидроксидов, размер которых не превышает несколько десятков нм [3].

2. Формирование слоя. Стадия погружения подложки в систему и стадия её извлечения. На стадии погружения подложка находится в контакте с системой для нанесения. Слой образуется за счет перераспределения частиц дисперсной фазы из объема системы на поверхность подложки. Это перераспределение может происходить за счет притяжения частиц к подложке и их последующей адагуляции. Выбор времени погружения носителя в систему зависит от скорости протекания процесса адагуляции частиц, из которых в дальнейшем формируется слой, к носителю. Если же при взаимодействии частиц с носителем адагуляции не происходит (высокий энергетический барьер), время погружение может быть минимизировано, а основной стадией, влияющей на процесс формирования слоя, будет стадия извлечения носителя;

3. Образование геля. Это процесс превращения свобододисперсной системы (золя) в связнодисперсную. При достижении критической концентрации частиц образуется трёхмерная структура, в которой удерживается растворитель;

4. Выдержка геля во времени. На этой стадии происходит выделение дисперсионной среды (H₂O), уплотнение геля. Увеличивается его прочность;

5. Сушка. В процессе сушки испарение жидкости приводит к образованию пор, в которых возникают капиллярные напряжения, растущие с уменьшением размера пор и при наличии пор различного диаметра. Эти напряжения приводят к растрескиванию геля, уменьшающемуся с повышением прочности его структурной сетки. Напряжения пропорциональны скорости сушки и толщине геля. Сушка геля, которая может проводиться как при комнатной температуре, так и при нагревании, приводит к удалению из него воды, спирта, органических остатков, что проявляется в уменьшении массы и объема (усадке) геля и в изменении его плотности;

6. Термообработка при высокой температуре (до 800°C), в результате которой происходит спекание частиц слоя. Поры в высушенных образцах гелей имеют в основном переходный характер в интервале от 5 до 25 нм [4]. Иногда при синтезе материалов золь-гель методом необходимо повторить осаждение – цикл сушки-термообработки, что может привести к значительному увеличению времени и стоимости материалов [5].

По сравнению с другими методами получения керамических мембран золь-гель метод обладает

рядом преимуществ: простота аппаратного оформления, снижение энергетических затрат, повышение производительности процесса, возможность регулирования характеристик получаемого слоя и, соответственно, керамической мембраны.

Однако существует ряд недостатков золь-гель технологии: усадка при спекании, хрупкость мембраны после сушки, а также высокая стоимость исходных металлоорганических соединений. Однако высокая стоимость способа может быть снижена за счет перехода от органического сырья к солям этих элементов, способных к гидролизу. Золь-гель процесс достаточно сложный, требует повышенных температур, поэтому логично, что керамические мембраны получают с высокой себестоимостью (в 3-5 раз больше, чем полимерных), что является основным недостатком этих мембран, но их применение в различных областях абсолютно незаменимо.

В настоящее время золь-гель метод получения композитных мембран со слоями на основе Al₂O₃, BiO₂, TiO₂, ZrO₂ хорошо развит. Нанесение слоев на основе других оксидов позволяет получать мембраны, которые могут выполнять не только разделительные, но и другие функции одновременно. При получении асимметричных мембран традиционно используется макропористая подложка, на которую промежуточными и селективными слоями наносятся различные методы. Пористые подложки чаще всего представляют собой керамические микрофльтрационные мембраны с большими размерами пор. В качестве материала для промежуточных слоев обычно используются недорогие оксиды кремния и алюминия [6]. На мировом рынке химической промышленности уникальным мембранным продуктом являются композитные керамические мембраны «Трумем» (TRUMEM). Это сложные мембраны из двух материалов - пористой металлической подложки (основы) и активного керамического слоя. Двухслойные мембраны «Трумем» обычно состоят из подложки из нержавеющей стали и тонкого керамического слоя из TiO₂, TiO₂ / Al₂O₃, ZrO₂ или SiO₂. Размер пор мембраны TRUMEM составляет 0,03-0,2 мкм. Поскольку для их изготовления используются нанодисперсные керамические материалы, неорганические мембраны «Трумем» являются гибкими. По технологическим параметрам мембраны «Трумем» сравнимы с лучшими полимерными мембранами. Они имеют размер пор от 0,03 до 1,0 мкм (т.е. класс ультра- и микрофльтрации), имеют все преимущества неорганических мембран, срок их службы не менее 10 лет, доступны в виде пластин 287 × 287 мм и трубы диаметром более 10 мм. Общая толщина мембраны «Трумем» составляет до 200 микрон, а толщина активного слоя - до 10 микрон. По словам разработчиков и производителей, мембраны «Трумем» могут использоваться в самых разных отраслях промышленности, включая нефтехимию.

Очень эффективно использование мембран «Trumet» и аппаратов на их основе для очистки воды, загрязненной нефтью и нефтепродуктами [7].

Рассмотрим основные характеристики керамических мембран. Любая керамическая мембрана состоит из двух и более слоев, которые формируются последовательно. При общей толщине мембраны в несколько миллиметров разделительный слой имеет толщину в несколько микрометров. Мембраны из керамики могут иметь геометрическую форму в виде трубок или многоканальных блоков (рис. 2). Следствием такой формы и большой толщины стенок является очень низкая удельная производительность, ведущая к большим капитальным затратам на изготовление установок (большая площадь мембран, повышенная материалоемкость), чем при использовании полимерных мембран. С другой стороны, во многих случаях можно ожидать и более длительного срока их эксплуатации.



Рис. 2. Различные формы керамических мембран [8]

Основные преимущества керамических (неорганических) мембран над полимерными (органическими) заключаются в следующем:

1. Применяются при наличии агрессивных сред, высоком содержании растворителей и широком диапазоне pH, в котором они сохраняют свое строение и свойства. Однако эта оценка является относительно условной. Например, серебряные мембраны устойчивы к воздействию сильных щелочей и некоторых сильных кислот, но растворяются в присутствии серной и азотной кислоты. К тому же существует ряд полимерных мембран, рабочий диапазон pH которых составляет 1-13. Тем не менее, неорганические мембраны подвержены меньшему воздействию со стороны органических растворителей и различных химических реагентов.

2. Используются при достаточно высоких температурах технологического процесса. Например, стальные мембраны выдерживают температуру в 400°C, стеклянные мембраны - 700°C, а керамические можно использовать до 800°C.

3. Мембраны, полученные золь-гель методом, отличаются тонкими порами и узким распределением размеров в рабочем слое.

4. Механическая прочность.

5. Керамические не уплотняются при значительном увеличении давления, вследствие этого не снижается их водопроницаемость [9].

Благодаря этим преимуществам керамические мембраны все чаще используются для очистки

жидкостей и газов в биотехнологической, пищевой, фармацевтической, химической, металлургической и других отраслях промышленности. Качество золь-гель покрытия является залогом функциональности и долговечности керамических мембран [10]. Получение высокоселективных мембран, позволяющих разделять жидкие смеси высокомолекулярных соединений на узкие фракции, до сих пор остается сложной и трудной задачей. Высокая стоимость керамических мембран компенсируется их более высокой проницаемостью для полимеров и сроком службы до 10 и более лет вместо 1 года для полимерных мембран. Таким образом, использование керамических мембран быстро окупается за счет более высокой производительности и длительного срока службы.

Список литературы

1. Каграманов Г. Г. Научные основы технологии и применения керамических мембран // ДИ Менделеева. – 2002.
2. http://www.nanometer.ru/2010/10/17/zol_gel_219_461.html (дата обращения 30.05.2020)
3. Ciora, R. J. Preparation and reactive applications of nanoporous silicon carbide membranes / R. J. Ciora, B. Fayyaz, P. K.T. Liu, V. Suwanmethanond, R. Mallada, M. Sahimi, T. T. Tsotsis // Chemical Engineering Science. – 2004. – V. 59. – P. 4957-4965.
4. Zabolotnaya E., Menishova I.I. A Membrane System for the Treatment of Waste Water Containing Organic Compounds // Fibre Chemistry, Vol. 51, No. 4, November, 2019 (Russian Original No. 4, July–August, 2019, DOI 10.1007/s10692-020-10093-x, pp. 272-274.
5. Gavrilova N. N. et al. Sol-Gel Synthesis of Membrane Mo₂C/Al₂O₃ Catalysts with Different Architectures and Their Catalytic Activity in the Reaction of Carbon Dioxide Conversion of Methane // Kinetics and Catalysis. – 2018. – Т. 59. – №. 5. – С. 635-643.
6. Калмыков А. Г. Коллоидно-химические основы золь-гель метода получения мембран со слоями CuO и ZnO : дис. – Калмыков Антон Георгиевич.–М.–2013–181 с.
7. <http://www.vevivi.ru/best/Zol-gel-metod-poluchenie-dispersnykh-oksidov-gidroksidov-i-nanokompozitov-ref227927.html> (дата обращения 30.05.2020)
8. Мулдер, М. Введение в мембранную технологию / М. Мулдер - Москва: Издательство «Мир», 1999. - 513 с.
9. Петухов Д. И. и др. Газоселективные мембраны и мембранные катализаторы на основе пленок пористого оксида алюминия // Всероссийская конференция по наноматериалам (НАНО 2009), Екатеринбург. – 2009.
10. Carrasco-Amador J. P. et al. Influence of substrate and sintering temperature on the thickness and number of layers of 3YSZ multilayer sol-gel coatings // Ceramics International. – 2020.

УДК 66.081.6-278

Фарносова Е.Н., Степаненко А.В., Степаненко Е.В.

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ МЕМБРАННОГО ПЛАЗМАФЕРЕЗА КАК МЕТОДА ЭФФЕРЕНТНОЙ ТЕРАПИИ

Фарносова Елена Николаевна, кандидат технических наук, доцент кафедры мембранной технологии; **Степаненко Ангелина Владимировна**, студентка 3 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

e-mail: avstep.info@yandex.ru

Степаненко Елена Владимировна, студентка 3 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга.

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

В данной статье рассмотрен метод мембранного плазмафереза с использованием трековых мембран, описаны достоинства и недостатки данного типа мембран и их перспективные области применения, доказана эффективность этого метода.

Ключевые слова: мембранный плазмаферез, трековые мембраны, плазмафильтр.

EFFECTIVENESS OF MEMBRANE PLASMAPHERESIS AS A METHOD OF EFFERENT THERAPY

Farnosova Elena Nikolaevna, Stepanenko Angelina Vladimirovna, Stepanenko Elena Vladimirovna

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia, 125047, Miuskaya 9

This article discusses the method of membrane plasmapheresis using track membranes, describes the advantages and disadvantages of this type of membrane and their promising areas of application, the effectiveness of this method is proved.

Keywords: membrane plasmapheresis, track membranes, plasma filter.

Плазмаферез как метод эфферентной терапии находит всё более широкое применение. Одним из видов эфферентной терапии является мембранный плазмаферез - удаление не цельной крови, а ее жидкой части - плазмы, в которой содержатся токсические и метаболические вещества, носители причин болезней, через фильтрацию крови в плазмафильтрах. Это безболезненный и безопасный метод очищения крови, который применяется для лечения и профилактики множества заболеваний. Целью проведения данного метода является качественное и количественное изменение клеточного, белкового, водно-электролитного, ферментного и газового состава крови.

Существует два основных метода плазмафереза - гравитационный и фильтрационный. Первый осуществляется центрифугированием крови с постоянным или прерывистым её потоком в специальных аппаратах. Второй метод основан на фильтрации крови в специальных плазмафильтрах. В мире выпускаются плазмафильтры из полых пористых волокон. В последнее десятилетие успехи мембранной технологии позволили приблизить их к широкой медицинской практике. В наибольшей степени этому способствовали создание плазмафильтра «РОСА» и аппарата «ГЕМОФЕНИКС», разработанные российской компанией «ТРЕКПОР ТЕХНОЛОДЖИ» [1].

Аппарат для мембранного плазмафереза «ГЕМОФЕНИКС» в комплекте с плазмафильтром «РОСА» предназначен для проведения процедуры лечебного и донорского плазмафереза в эфферентной медицине или донорстве [2].

Мембранный плазмаферез на данном аппарате характеризуется рядом преимуществ:

1. По сравнению с центрифужным методом - разделение крови происходит не на центрифуге (т.е. гравитационным способом), а в нанофильтре, что исключает травматизацию форменных элементов крови;
2. Время процедуры сокращается за счет непрерывного процесса очищения крови;
3. С помощью данного аппарата возможно осуществление забора плазмы и у доноров. Получение требуемого объёма плазмы производится довольно быстро, качество получаемой плазмы соответствует всем требованиям службы крови;
4. Объём крови, забираемый за один цикл, составляет 10 мл, что позволяет работать с детьми, ослабленными пациентами и пожилыми людьми;
5. Одноразовость всех используемых материалов. Процедура проводится в стерильных условиях, что гарантирует дополнительную защиту от заражения крови;
6. Одноигольное подключение аппарата к пациенту, которое предохраняет пациента от инфицирования и повышает безопасность

процедуры в целом, а также минимально травмирует вены;

7. Непрерывный компьютерный мониторинг за ходом процедуры гарантирует абсолютную безопасность.

Принцип работы устройства Немофених основан на заборе крови, разделении ее на плазму и составные элементы (эритроциты, лейкоциты и тромбоциты). В результате чего клетки крови возвращаются в организм, а плазма собирается в отдельный контейнер и утилизируется. Не происходит травмирования форменных элементов крови. На рисунке 1 представлено схематичное изображение мембранного разделения крови.

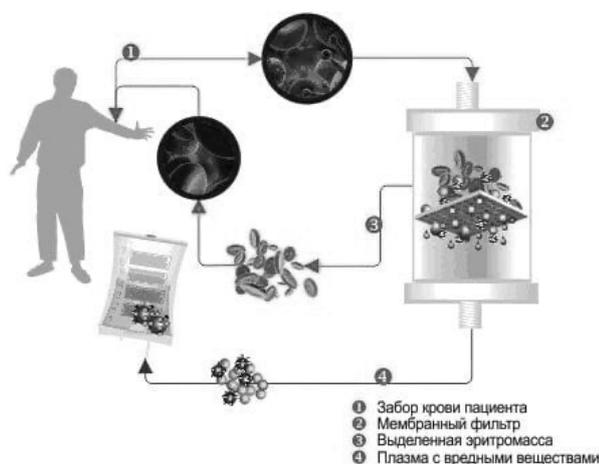


Рис.1. Мембранный плазмаферез [3]

В настоящее время для микро- и ультрафильтрации применяются, в основном, импортные мембранные материалы, высокая стоимость которых ограничивает их широкое использование. Для микрофильтрационных процессов в биотехнологии, медицине, микробиологии и вирусологии и др. перспективно применение трековых мембран.

Как известно, трековые мембраны изготавливаются исключительно плоскими, и они абсолютно совместимы с кровью [4]. Для мембранного плазмафереза основу плазмафильтра составляет трековая мембрана - тонкая полимерная пленка из полиэтилентерефталата толщиной 10 мкм с порами диаметром около 0,5 мкм. Наличие в мембране пор такого диаметра позволяет проходить свободно, без препятствий через нее всем компонентам жидкой части крови и задерживать на ней все форменные элементы. Для изготовления трековых мембран используются тонкие полимерные пленки (10–25 мкм), которые облучают потоком тяжелых энергий тяжелых ионов (аргон, криптон и ксенон) в ускорителях (циклотронах) или в специальной установке в ядерном реакторе [5]. Ионный поток, проходящий через пленку, воздействует на макромолекулы, разрывая химические связи в цепи, в результате чего образуется зона радиационного

повреждения. Каждый ион на своем пути повреждает молекулы полимера, оставляя скрытый след, известный как трек (отсюда и название «трековой» мембраны). Для получения сквозных отверстий, т.е. пор цилиндрической формы, облученную пленку подвергают ультрафиолетовому излучению или травлению в специальном растворе [6]. Благодаря этой технологии синтеза ТМ диаметры всех пор полностью идентичны. На основе трековых мембран создан плазмафильтр «Роса».

У трековых мембран (рис.2) все поры являются «калиброванными». Ни один другой материал для микрофильтрации не обладает таким свойством. Для них характерен ситовый механизм задержания микрочастиц. Именно поэтому трековые мембраны используются в качестве эталонного теста при определении селективности других типов фильтров. Обладают узким распределением пор по размерам, по сравнению с анизотропными, высокой селективностью производительностью и прочностью, химической стойкостью, стабильностью механических свойств в широком диапазоне температур, имеют низкую адсорбционную способность по отношению к вирусам [7]. Однако они характеризуются низкими физико-механическими свойствами, умеренной химической стойкостью и плохой термостойкостью (до 120 °С). Это не позволяет использовать их в качестве матрицы для создания радиационно-защитных композитов, в том числе для космической промышленности [8].

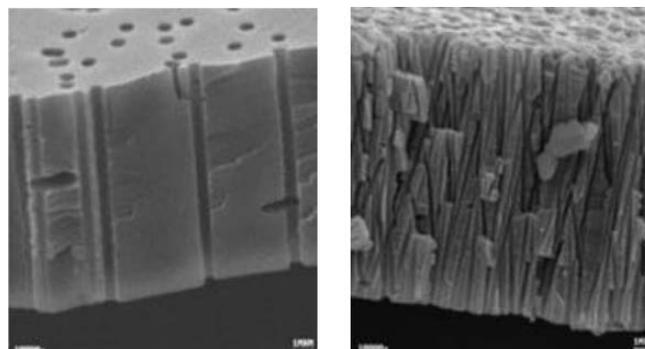


Рис. 2. Поперечный разрез трековых мембран из полиэтилентерефталата [9]

Трековые мембраны хранятся в сухом виде относительно долгое время без какого-либо изменения их свойств. Они устойчивы к микробиологической атаке, геометрия их пористой структуры не изменяется от рН или ионной силы фильтруемой среды, их термическая стабильность позволяет подвергать мембраны любым методам тепловой и химической стерилизации. Последнее играет наиболее значимую роль в мембранных процессах в биотехнологии и при фильтрации воды с бактериальными загрязнениями [10].

Из всех возможных методов эфферентной терапии плазмаферез является наиболее универсальным и эффективным, а мембранный плазмаферез с использованием плазмафильтров

ROSA является самым простым и доступным для применения не только в крупных специализированных центрах, но и практически в любом медицинском учреждении. Однако, несмотря на простоту этого метода, его разработка требует специальной подготовки медицинского персонала, как врачей, так и процедурных медсестер [11]. Более широкое внедрение методов эфферентной терапии в клиническую практику бесспорно позволит повысить качество медико-профилактической помощи населению. Мембранный плазмаферез с использованием отечественных плазмофильтров ROSA позволяет получать высококачественную плазму, отвечающую нормативным требованиям. Это открывает перспективы их использования в Службе крови для получения донорской плазмы и других препаратов крови.

Список литературы

1. Воинов В. А. Эфферентная терапия. Мембранный плазмаферез //СПб.: Эскулап. – 2002.
2. Трущенко А. М., Авдашова Л. П., Пушкарева И. Н. Заготовка компонентов крови методами плазмоцитафереза в 1477 воено-морском клиническом госпитале с 2009 по 2011 гг //Здоровье. Медицинская экология. Наука. – 2012. – Т. 47. – №. 1-2.
3. <http://plazmaferrez-spb.ru/> (дата обращения: 27.05.2020)
4. Свитцов А. А. Введение в мембранную технологию. – ДеЛи принт, 2007.
5. V.V. Shirkova, S.P. Tretyakova Physical and chemical basis for the manufacturing of fluoropolymer track membranes Radiat. Meas., 28 (1997), pp. 791-798, 10.1016/S1350-4487(97)00186-8 ([https://doi.org/10.1016/S1350-4487\(97\)00186-8](https://doi.org/10.1016/S1350-4487(97)00186-8))
6. R. Kumar, Kamakshi, S. Shisodia, M. Kumar, K. Awasthi Effect of UV irradiation on PC membrane and use of Pd nanoparticles with/without PVP for H2 selectivity enhancement over CO2 and N2 gases Int. J. Hydrogen Energy, 43 (2018), pp. 21690-21698, 10.1016/j.ijhydene.2018.06.094 (<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.06.094>)
7. Акименко С. Н. и др. Свойства трековых мембран на основе полиэтиленнафталата //ВИНИТИ. Сер.«Критические технологии». Мембраны. – 2002. – №. 15. – С. 21-28.
8. M. Kutuzau, A. Kozlovskiy, D. Borgekov, I. Kenzhina, M. Zdorovets, A. Chernik, O. Alisienok, A. Shumskaya, E. Kaniukov Optimization of PET ion-track membranes parameters Mater. Today Proc., 7 (2019), pp. 866-871, 10.1016/j.matpr.2018.12.086 (<https://doi.org/10.1016/j.matpr.2018.12.086>)
9. Центр прикладной физики ЛЯР ОИЯИ. Интернет-ресурс http://flerovlab.jinr.ru/flnr/cap_track_rus.html
10. Zabolotnaya E., Menishova I.I. A Membrane System for the Treatment of Waste Water Containing Organic Compounds //Fibre Chemistry, Vol. 51, No. 4, November, 2019 (Russian Original No. 4, July—August, 2019, DOI 10.1007/s10692-020-10093-x, pp. 272-274.
11. Zabolotnaya E., Chelnokov V.V., Menshov I.I. Criteri selezione dei metodi fisico-chimici e fisici per il trattamento delle acque di scarico nella produzione di coloranti per l'industria tessile // Italy, Rome: Atti del 2° Simposio Italo-Russo Risparmio Energetico, Conservazione delle Risorse e Recupero dei Rifiuti 2019

УДК 628.16

Курбатов А.Ю., Аверина Ю.М., Кузин Е.Н., Ветрова М.А.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА ЭКСПЛУАТАЦИИ ФИЛЬТРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ В СИСТЕМАХ ДЕЦЕНТРАЛИЗОВАННОГО ВОДОСНАБЖЕНИЯ

Курбатов Андрей Юрьевич – канд. техн. наук, ассистент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии РХТУ им. Д.И. Менделеева 125047, Москва, Миусская площадь дом 9. andreikurbatov@yandex.ru

Кузин Евгений Николаевич – канд. техн. наук, доцент кафедры промышленной экологии РХТУ им. Д.И. Менделеева 125047 Москва, Миусская площадь дом 9

Аверина Юлия Михайловна – канд. техн. наук, доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии РХТУ им. Д.И. Менделеева 125047 Москва, Миусская площадь дом 9

Ветрова Маргарита Александровна – магистр 2-го года обучения кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии РХТУ им. Д.И. Менделеева 125047 Москва, Миусская площадь дом 9

В статье рассмотрены особенности практического применения методов фильтрации, используемых в процессах доочистки воды объектов децентрализованного водоснабжения. Проведено сравнение эффективности и технологических особенностей засыпных фильтров и керамических ультрафильтрационных мембран. Определены и охарактеризованы основные достоинства и недостатки указанных фильтрующих элементов, сформировано заключение о наибольшей перспективности применения ультрафильтрационных керамических мембранных фильтров в процессах децентрализованной водоподготовки.

Ключевые слова: водоснабжение, очистка, фильтрация, керамические мембраны

COMPARATIVE ASSESSMENT OF OPERATION OF FILTERING ELEMENTS IN DECENTRALIZED WATER SUPPLY SYSTEMS

Kurbatov A.Y., Kuzin E.N., Averina J.M., Vetrova M. A.
D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia

The article discusses the features of the practical application of filtration methods used in the processes of post-treatment of water in decentralized water supply facilities. The efficiency and technological features of the charge filters and ceramic ultrafiltration membranes are compared. The main advantages and disadvantages of these filtering elements are identified and characterized, a conclusion is drawn on the most promising use of ultrafiltration ceramic membrane filters in decentralized water treatment processes.

Keywords: water supply, purification, filtration, ceramic membranes

Проблема очистки природной воды от растворённых соединений железа, марганца, солей жёсткости и сероводорода особенно актуальна для жителей загородных домов и владельцы малых предприятий. В основе водоснабжения подобных объектов лежит использование грунтовой или артезианской воды, качество которой зачастую не соответствует минимальным требованиям безопасности [1].

В основе простейшей системы очистки подобной воды лежит фильтрация воды через «баллонные» фильтры с различными фильтрующими, каталитическими или ионообменными загрузкими. Ключевым достоинством подобных фильтрующих систем является одновременное протекание процессов окисления растворённых металлов (железо и др.) и фильтрация образовавшихся нерастворимых частиц.

Основным недостатком такой технологии водоподготовки является необходимость регулярной регенерации загрузки различного рода химическими реагентами, а также необходимость периодической полной замены загрузки вследствие физического

износа частиц и потери каталитических или ионообменных свойств.

С точки зрения экологии наиболее привлекательными являются безреагентные методы очистки воды – аэрация воздухом, озонирование или физические методы обработки воды (акустические, магнитные, кавитационные) с последующей фильтрацией на керамических или полимерных фильтрах. Ключевым преимуществом подобных технологий является модульное исполнение, позволяющее повышать количество степеней очистки присоединяя дополнительные модули. При необходимости после окисления и фильтрации могут быть добавлены модули адсорбционной очистки и ультрафиолетового обеззараживания [2-4].

Основной задачей данной работы является сравнение технических характеристик классических песчаных «баллонных» фильтров и керамических ультрафильтрационных мембран.

На первом этапе эксперимента была проведена оценка влияния фракционного состава песчаной загрузки (0,1 - 1,5 мм) на эффективность фильтрации различных загрязняющих веществ. Окисление растворённых соединений железа проводили при

помощи гидродинамического кавитатора, что позволило отказаться от применения различных реагентов, озона и предварительной аэрации воды [5-7].

С учетом особенностей процесса регенерации фильтрующей загрузки из кварцевого песка (обратная промывка), характеристики движения потока жидкости будут в первую очередь зависеть от геометрических характеристик частиц применяемого кварцевого песка. Принципиальная схема установки, которая используется в экспериментах, представлена на рисунке 1. Оценку уровня загрязнённости

фильтрующей загрузки проводили по изменению входного давления на фильтре (в случае потери свойств – возрастание давления).

В ходе эксперимента были получены данные по эффективности очистки воды от заданных загрязняющих веществ в зависимости от размера фильтрующей загрузки. Результаты экспериментов представлены в таблице 1. Исходные параметры обрабатываемой воды: рН – 7,21; минерализация – 275 ± 10 мг/л; железо – 1,34 мг/л; жесткость – 6,73 мг-экв/л.

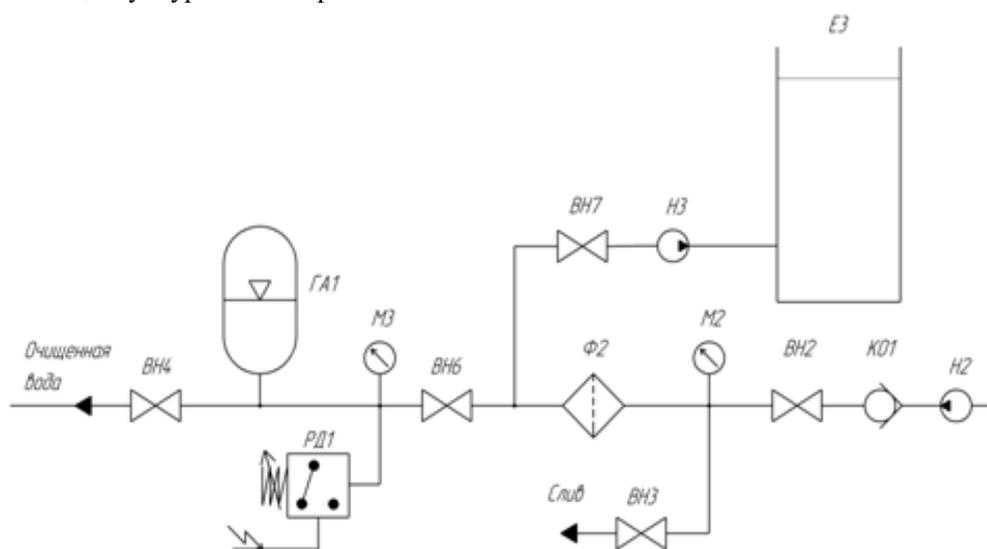


Рис. 1 – Гидравлическая схема работы модуля фильтрации на основе кварцевого песка с ручным управлением Н2, Н3 – насосы повышающего давления, Е3 – емкость с очищенной водой, ВН2, ВН3, ВН4, ВН6, ВН7 – краны, КО1 – обратный клапан, М2, М3 – манометры, Ф2 – фильтр, ГА1 – гидроаккумулятор, РД1 – реле давления.

Таблица 1.
Оценка эффективности очистки воды в зависимости от размера фильтрующей загрузки

№ п/п	Физико-химические показатели качества	Фракции частиц кварцевого песка, мм				
		0,1-0,2	0,2-0,63	0,5-0,8	0,5-1,0	0,8-1,4
1	рН, ед.	7,21	7,21	7,21	7,21	7,21
2	Минерализация, мг/л	274,01	268,14	267,89	275,24	279,87
3	Железо общее, мг/л	0,12	0,07	0,08	0,1	0,13
4	Жесткость общая, мг-экв/л	6,19	6,05	5,98	6,17	6,25

Как видно из данных таблицы 1 максимальная эффективность очистки достигается при использовании фильтрующей загрузки с размером 0,2-0,63 мм. Регенерация фильтра в процессе обратной промывки позволяла на 100 % восстановить фильтрующие свойства загрузки.

По результатам эксперимента были сформулированы следующие выводы: использование фильтров с песчаной загрузкой имеет ряд особенностей (размер загрузки, линейная скорость фильтрации и пр.), а процесс регенерации загрузки возможен только при условии соблюдения псевдооживленного слоя фильтрующего материала.

Использование частиц кварцевого песка с размером <0,2 мм позволит существенно повысить эффективность фильтрации, при определенных условиях эксплуатации фильтра (промывка, взрыхление) будет происходить их вынос из фильтра, что приведет к необходимости добавки новой фильтрующей загрузки. Основным преимуществом использования в качестве фильтрующего материала кварцевого песка является его низкая стоимость.



Рисунок 2 – общий вид применяемых керамических мембранных фильтров.
А – фильтр в сборе, Б – трубчатые керамические мембраны

В качестве альтернативного метода фильтрации были использованы керамические мембранные элементы. Общий их вид представлен на фотографии (Рисунок 2). Отличительной особенностью подобных фильтров является точность регулирования давления.

Данные по эффективности очистки воды при использовании керамических мембранных фильтров представлены в таблице 2.

Из данных таблицы 2 видно, по своей эффективности керамические мембранные фильтры не уступают, а по ряду веществ и превосходят фильтры с кварцевой загрузкой.

Таблица 2.

Эффективность очистки с использованием керамических мембранных фильтров

Показатель	pH	Минерализация, мг/л	Железо общее, мг/л	Жесткость общая, мг-экв/л
Значение	7,21	267,2	0,03	6,12

Заключение

Проводя сравнительный анализ двух типов фильтрующих элементов можно сформулировать следующие выводы:

Кварцевый песок: наиболее дешевый тип фильтрующей загрузки, однако его применение осложнено необходимостью постоянного контроля за уровнем фильтрующей загрузки, сложностью процессов обслуживания и регенерации, необходимостью организации резервуара накопителя промывной воды, и значительными габаритами фильтрующего оборудования.

Керамические мембранные элементы: относительно дорогостоящая установка, максимально простая и автоматизированная в эксплуатации, отличающаяся повышенной эффективностью и компактностью. Именно простота обслуживания и эксплуатации, а также высокая эффективность делают данный тип фильтров наиболее перспективным для применения в системах децентрализованной очистки воды.

Работа выполнена в рамках программы поддержки молодых ученых-преподавателей РХТУ им. Д.И. Менделеева (Заявка К-2020-015)

Список литературы

1. Фрог Б.Н., Первов А.Г. Водоподготовка: учебник для вузов – Москва: Издательство Ассоциации строительных вузов (АСВ), 2014. – 507 с.
2. Громовласов А.А., Копылов А.С., Пильщиков А.П. Водоподготовка: процессы и аппараты. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 272 с.
3. Водоподготовка: Справочник. / Под ред. д.т.н., С.Е. Беликова. М.: Аква-Терм, 2007. – 240 с.
4. Хохрякова Е.А. Фильтры для очистки воды М.: Аква-Терм, 2013. — 102 с.
5. Аверина Ю. М., Курбатов А. Ю., Джессу Лубо И.С., Ветрова М. А. Гидродинамическая обработка природной воды // Успехи в химии и химической технологии. — 2018. — Т. 32, № 1. — С. 43–45.
6. Averina J.M., Zhukov D.Y., Kurbatov A.Y., Kaliakina G.E., Panfilov V.I. Methods of intensification of iron-containing natural water purification processes//International Multidisciplinary Scientific GeoConference SGEM. 2018. Т. 18. № 1.5. С. 345-350.
7. Аверина Ю.М., Терпугов Г.В., Никитин В.А., Канделаки Г.И. Керамические трубчатые мембраны в качестве диспергирующего материала//Успехи в химии и химической технологии. 2010. Т. 24. № 2 (107). С. 47-51.

УДК 338.984

Меньшова И.И., Белозерский А.Ю., Баранова Я.П.

ПРИМЕНЕНИЕ РАСЧЕТНО-АНАЛИТИЧЕСКИХ РИСК-ПОКАЗАТЕЛЕЙ ДЛЯ ВЫБОРА СТРАТЕГИЙ РИСК-МЕНЕДЖМЕНТА В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

Меньшова Ирина Игоревна, к.т.н, доцент, преподаватель кафедры логистики и экономической информатики
Белозерский Андрей Юрьевич, д.т.н., профессор, преподаватель кафедры логистики и экономической информатики

Баранова Яна Павловна, студент 1 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, учебный мастер I категории; e-mail: mitchick@yandex.ru

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

Предложена обобщенная логико-информационная процедура определения новых расчетно-аналитических риск-показателей для металлургических предприятий в условиях неопределенности, использование которой позволяет осуществлять выбор экономически эффективных методов риск-менеджмента на различных этапах развития опасных ситуаций.

Разработана методика применения новых расчетно-аналитических риск-показателей для выбора рациональной стратегии риск-менеджмента в условиях неопределенности на основе использования сбалансированной системы показателей BSC и теории управления ограничениями системы для решения задачи управления рисками промышленных предприятий.

Ключевые слова: *риск-менеджмент, опасные ситуации, удельные показатели энергоресурсоемкости, экологическая безопасность металлургических производств, расчетно-аналитические риск-показатели*

APPLICATION OF CALCULATION AND ANALYTICAL RISK INDICATORS FOR SELECTION OF RISK MANAGEMENT STRATEGIES UNDER UNCERTAINTY

Menshova I.I., Belozersky A.Yu., Baranova Y.P.

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

A generalized logical and information procedure for determining new calculated and analytical risk-indicators for metallurgical enterprises in conditions of uncertainty is proposed, the use of which allows to select cost-effective risk-management methods at different stages of development of dangerous situations.

The method of application of new calculation and analytical risk indicators for selection of rational risk management strategy in conditions of uncertainty based on the use of balanced BSC system of indicators and theory of system limitation management to solve the problem of risk management of industrial enterprises has been developed.

Keywords: *risk management, hazardous situations, specific indicators of energy intensity, environmental safety of metallurgical production, calculated and analytical risk indicators*

Основные факторы рисков металлургических предприятий связаны с зависимостью данных предприятий от сырьевой базы, возможными сбоями в производственных процессах, изменениями конъюнктуры рынка производимой продукции, изменениями на макроуровне и др [1].

Анализ факторов риска и их систематизация должны в конечном итоге приводить к оценке этих факторов и к принятию решений на ее основе [2]. Принимаемые управленческие решения должны быть ориентированы на минимизацию негативного воздействия этих факторов, посредством эффективного управления ими при возможности, или же, при отсутствии возможности воздействовать на факторы риска, к регулярному учету факторов при принятии решений и контролю над ними.

Процедура анализа уровня риска с использованием модели опасной ситуации на основе применения нового понятия «расчетно-аналитический риск-показатель», которая алгоритмизирует и упрощает использование различных математических методов управления рисками в условиях неопределенности.

Расчетно-аналитический риск-показатель - это произведение значения вероятности (возможности)

отклонения в результате возникновения опасного события либо отдельных показателей производственно-хозяйственной деятельности предприятия, либо их совокупности от целевых значений, которые установлены сбалансированной системой показателей эффективности (BSC), на величину данного отклонения (или ущерба, вызванного данным отклонением) [3]. В качестве целевых значений исходной BSC могут рассматриваться нормативные значения, указанные в справочных BREF-BAT документах по наилучшим доступным технологиям.

Для построения модифицированной сбалансированной системы показателей эффективности металлургического предприятия с учетом оценок риска, так называемой RBSC-системы предложена трехэтапная методика[4]:

На первом этапе формируется исходная корпоративная BSC система показателей. Этап начинается с построения стратегических карт. Они представляют собой инструмент, который позволяет руководству предприятия формировать наглядное отображение эффективного способа создания ценности, увязывая систему стратегических целей с причинно-следственными связями.

На втором этапе осуществляется построение модифицированной RBSC-системы. На основании выделенных с помощью горизонтальной стратегической карты «целевых ограничений» определяют подцели деятельности предприятий, соответствующие каждому виду опасной ситуации, и осуществляют построение «стратегической карты рисков». Стратегическая карта рисков предприятия  взаимосвязей между видами рисков, причинами их возникновения и мероприятиями по предотвращению/снижению ряда основных функциональных рисков, которые влияют на показатели эффективности предприятия.

Управление выявленным основным ограничением в соответствии с концепцией теории системных ограничений (ТОС) проводится на третьем этапе. Это системный подход, который основывается на жесткой причинно-следственной логике и объединяющий в себе как логические инструменты, так и логистические решения, суть которой заключается в концентрации ресурсов организации на устранении тех ограничений, которые не позволяют компании полностью реализовать её потенциал [5].

ТОС усиливает способность менеджеров разрабатывать решения в сфере управления рисками для улучшения уровня деятельности производственных систем предприятия в целом.

На основе построения предложенной модифицированной RBSC-системы можно определять типы опасных ситуаций на предприятии, а также выявить основные лимитирующие ограничения для развития предприятия. В связи с этим автором предложена двухэтапная процедура риск-менеджмента на металлургических предприятиях: определение расчетно-аналитических риск-показателей с использованием модифицированной RBSC-системы и управление ограничениями опасными ситуациями определенного типа.

На основании изложенных выше обобщенной логико-информационной процедуры определения новых расчетно-аналитических риск-показателей, методики применения новых расчетно-аналитических риск-показателей для выбора рациональных стратегий риск-менеджмента, а также базовой системы стратегий риск-менеджмента металлургических предприятий предложена методика выбора множества рациональных мероприятий для реализации стратегии риск-менеджмента в условиях неопределенности, которая включает

следующие основные этапы [6]:

-1 этап. Выявление факторов (причин возникновения) опасных ситуаций, источников рисков во внешней и внутренней среде металлургических предприятий; мониторинг опасных ситуаций.

-2 этап. Определение опасных ситуаций, оценка взаимосвязей между выделенными системными факторами и характеристиками опасных ситуаций.

На основании информации о факторах опасных ситуаций и источниках рисков во внутренней и внешней среде, полученной на предшествующем этапе, а именно в результате многофакторного анализа и попарного

сравнения воздействий на предприятие различных совокупностей неопределенных факторов внешней и внутренней среды, определяется набор опасных ситуаций, характерных для деятельности металлургического предприятия.

-3 этап. Выявление основных видов возможных функциональных рисков на металлургических предприятиях.

-4 этап. Разработка системы стратегических целей предприятия, в том числе с учетом стратегии управления рисками, и оценка степени их достижения на основе значений расчетно-аналитических риск-показателей модифицированной RBSC-системы в условиях неопределенности.

-5 этап. Идентификация и определение вида риска, являющегося основным ограничением системы и разработка мероприятий по управлению уровнем риска с использованием методов теории управления ограничениями систем.

-6 этап. Расчет значения интегрального риск-показателя и определение зоны принадлежности уровня риска.

-7 этап. Выбор рациональной стратегии управления рисками.

-8 этап. Выбор инженерно-технологических, организационно-экономических и административно-управленческих мероприятий по управлению рисками с использованием рациональной стратегии.

К числу основных мероприятий по управлению рисками предприятий металлургии относят: избежание; лимитирование; локализация; диверсификация; самострахование; внешнее страхование; хеджирование;

-9 этап. Формирование множества рациональных мероприятий по управлению рисками с учетом отраслевых и внутренних особенностей металлургических предприятий.

10 этап. Оценка экономической эффективности риск-менеджмента металлургических предприятий в условиях неопределенности.

Методика управления рисками металлургических предприятий в условиях неопределенности основана на использовании основных положений серии международных стандартов, а также справочных документов ЕС по наилучшим доступным технологиям (BREF-BAT) и обеспечивает международную гармонизацию требований по регламентации и стандартизации рациональных бизнес-процессов риск-менеджмента металлургических предприятий на различных стадиях управления рисками в условиях неопределенности.

Предложена методика выбора наилучших доступных технологий в металлургии с учетом методов управления возможными техногенно-природными рисками, состоящая из следующих этапов:

1. Комплексная оценка воздействия на окружающую природную среду предприятия. Металлургия — это сложное и опасное производство, где любое нарушение технологического процесса может повлечь тяжелые и катастрофические последствия. Все это определяет необходимость внедрения в методологию оценки воздействия на различные

компоненты окружающей среды расчетов ущерба в случае возникновения техногенных катастроф.

В соответствии с методологией, оценка комплексного воздействия технологии на окружающую среду осуществляется на основании следующих основных четырех принципах:

Первый этап - определение области применения альтернативных технологий и их идентификация. В данном случае предполагается, что должны быть определены параметры или показатели производственного процесса, которые позволят проводить оценку технологий с точки зрения различных позиций.

Второй этап - инвентаризация выбросов, сбросов, отходов и потребления сырья и энергии. В данном случае должны быть представлены в виде перечня значимые входные и выходные потоки, характеризующие каждую из рассматриваемых технологий.

Третий этап - учет эффектов, связанных с воздействием технологии на различные компоненты окружающей среды. Учет различных загрязняющих веществ: токсичность для человека, глобальное потепление, токсичность для водных объектов, кислотные осадки, эвтрофикация, истощение озонового слоя, вероятность образования тропосферного озона.

Четвертый этап - интерпретация взаимовлияния и противоречий при оценке воздействия на различные компоненты окружающей среды. Для оценки полученных результатов возможно применение трех различных подходов:

Первый подход заключается в сравнении рассчитанных и рассмотренных воздействий для каждой из семи экологических проблем.

Второй подход позволяет провести сравнение вкладов, которые вносит рассматриваемая технология в каждую из семи экологических проблем с общеевропейскими ссылочными показателями.

Третий подход позволяет сравнить рассматриваемые отдельные загрязняющие вещества с данными Европейского регистра выбросов и сбросов загрязняющих веществ.

На основании описанной методологии осуществляется оценка и выявление наилучшей технологии с точки зрения оказания её воздействия на окружающую среду при нормальном протекании производственного процесса.

Далее осуществляется расчет величины технологического риска, как произведения возможности наступления рисков ситуаций и их возможного ущерба (экспертные оценки)..

Таким образом, одним из подходов к определению наилучшей технологии с точки зрения комплексного её воздействия на окружающую среду является суммирование результатов по выбросам в случае нормальной и экстремальной реализации технологии и выбора минимального значения.

1. Расчет затрат на реализацию производственной технологии и ее эксплуатационных экономических показателей. На данном этапе особую роль играет задача оптимизации удельных показателей

энергоресурсоемкости и экологической безопасности металлургических производств, для решения которой следует более глубоко изучить физико-химические процессы преобразования материальных потоков в техносфере на основе использования понятия «поток химического элемента», или «элементопоток» металлургического производства. Из литературы известно, под техногенным элементопотоком, понимается поток некоторого химического элемента, движущийся не только по технологической схеме производства, но и по всей цепи поставок металлургического предприятия, включающей добычу сырья в ОПС, транспортировку и складирование сырья, распределение готовой продукции, все операции обращения с отходами производства и потребления, в том числе их возврат на повторную переработку (рециклинг) и захоронение, а также распространение исследуемого химического элемента с выбросами и отходами в окружающую природную среду.

Исследование риска как многостадийного процесса перехода из одного опасного состояния в другое, характеризующееся более высоким уровнем воздействия на деятельность предприятия, позволило автору разработать логико-информационную процедуру вычисления новых расчетно-аналитических риск-показателей для металлургических предприятий в условиях неопределенности, которая отображает стадии возникновения, развития и реализации опасной ситуации, а также учитывает возможность использования различных инструментов и мероприятий по предотвращению/снижению уровня рисков.

Предложенная методика применения новых расчетно-аналитических риск-показателей для выбора рациональных стратегий риск-менеджмента предприятия в условиях неопределенности основана на использовании теории управления ограничениями систем (Theory of Constraints, TOC), модифицированной с учетом новых расчетно-аналитических риск-показателей исходной сбалансированной системы показателей эффективности (BSC), а также расширенной системы риск-показателей RBSC и организационно-координирующих новых типов иерархических стратегических карт, которые отображают основные ограничения системы и цели управления рисками при неопределенности, что обеспечивает принятие научно-обоснованных решений по упреждению и снижению функциональных рисков металлургических предприятий.

Предложена классификация новых расчетно-аналитических риск-показателей металлургических предприятий в условиях неопределенности по следующим признакам: число отклонений значений уровней рисков от целевых показателей модифицированной RBSC-системы; степень нестационарности и устойчивость рисков.

Вся совокупность выделенных новых типов расчетно-аналитических риск-показателей образует интегральный риск-показатель предприятия.

Комплексное управление рисками на предприятии предлагается осуществлять на основе стратегии, выбор которой зависит от принадлежности данной оценки

интегрального риска некоторой интервальной зоне: зона критического, угрожающего, умеренного или допустимого риска.

Таким образом, на основе перехода от совокупности различных видов функциональных рисков предприятия

к единой интегральной оценке риска предложена методика выбора стратегии управления рисками (рисунок 1).

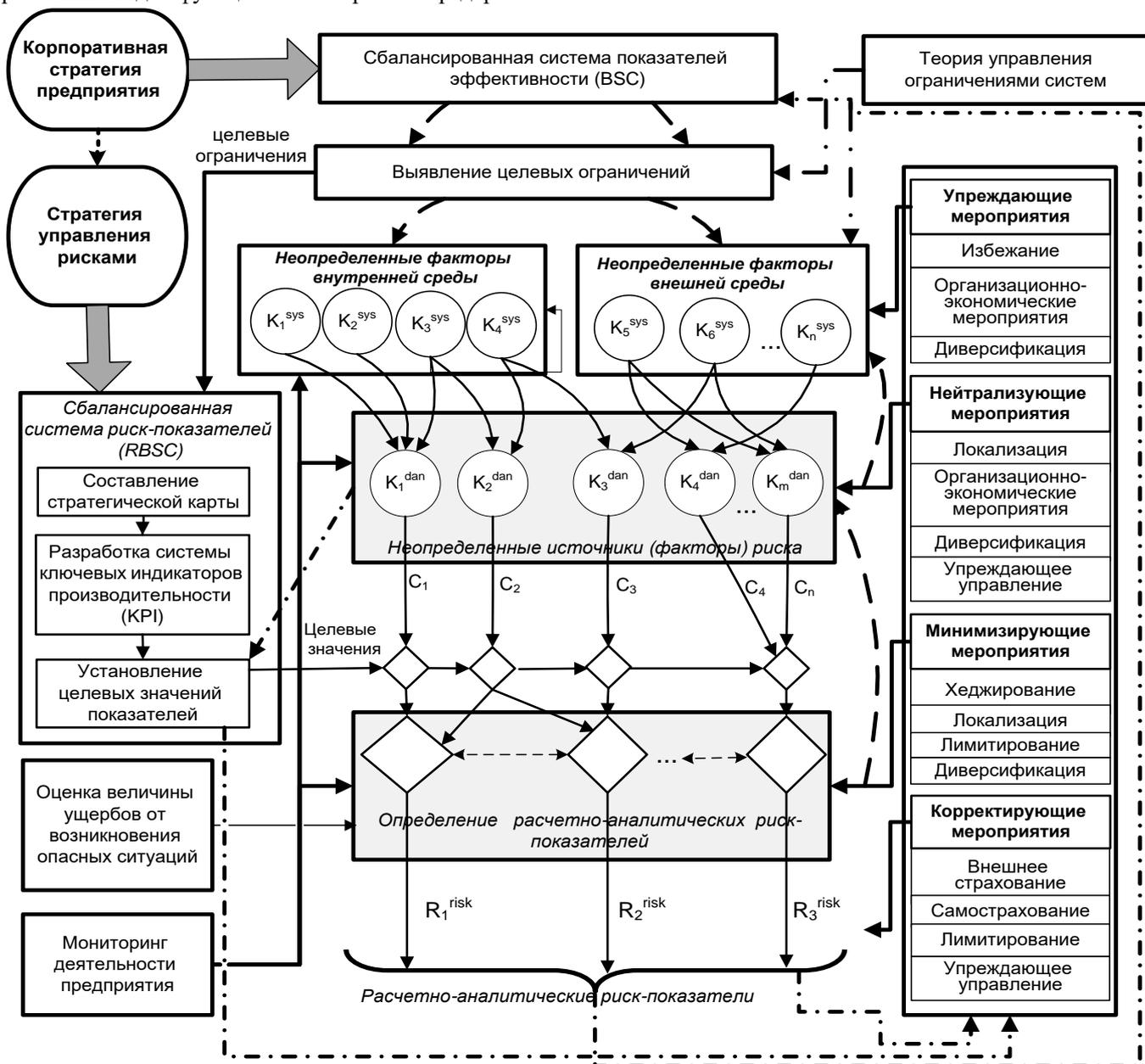


Рисунок 1. Логико-информационная процедура вычисления новых расчетно-аналитических риск-показателей для металлургических предприятий в условиях неопределенности

Список литературы

1. Белозерский А.Ю. Методическое обеспечение анализа и управления рисками металлургических предприятий в условиях неопределенности: диссертация ... доктора экономических наук: 08.00.05 — М., 2012.— 319 с.: ил.
2. Хохлов, Н.В. Управление риском / Н.В. Хохлов. М.: ЮНИТИ-ДАТА, 2001.—239 с.
3. Волкова В.Н. Теория систем : учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки магистров «Системный анализ и управление» / В.Н. Волкова, А.А. Денисов. Москва : Высшая школа, 2006. 511 с.

4. Мешалкин В.П., Белозерский А.Ю. Комплексная нечетко-логическая модель управления рисками металлургического предприятия // Логистика и экономика ресурсо- и энергосбережения в промышленности: Сб. тр. IV Межд. Науч.-практ. Конф. Самара, 2009. С. 26-32
5. Буянов В.П. Рискология, управление рисками / В.П. Буянов, К.А. Кирсанов, Л.А. Михайлов. М.: Экзамен, 2002. - 384с.
6. Белозерский А.Ю. Управление рисками предприятия в контексте теории ограничений систем // Путеводитель предпринимателя. 2011. Вып. XII С.27-30

УДК 628.16

Курбатов А.Ю., Аверина Ю.М., Кузин Е.Н., Ветрова М.А.

О ПЕРСПЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ОЗОНА В ПРОЦЕССАХ ДЕЦЕНТРАЛИЗОВАННОГО ОБЕЗЗАРАЖИВАНИЯ И ОБЕЗЖЕЛЕЗИВАНИЯ АРТЕЗИАНСКИХ ВОД

Курбатов Андрей Юрьевич – канд. техн. наук, ассистент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии РХТУ им. Д.И. Менделеева 125047, Москва, Миусская площадь дом 9. andreikurbatov@yandex.ru

Кузин Евгений Николаевич – канд. техн. наук, доцент кафедры промышленной экологии РХТУ им. Д.И. Менделеева 125047 Москва, Миусская площадь дом 9

Аверина Юлия Михайловна – канд. техн. наук, доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии РХТУ им. Д.И. Менделеева 125047 Москва, Миусская площадь дом 9

Ветрова Маргарита Александровна – магистр 2-го года обучения кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии РХТУ им. Д.И. Менделеева 125047 Москва, Миусская площадь дом 9

В статье рассмотрены перспективные методы водоподготовки для децентрализованного водоснабжения, в частности озонирование питьевой воды. Описаны положительные и отрицательные стороны процесса озонирования, а так же особенности протекания реакций.

Ключевые слова: водоподготовка, озонирование воды, гидродинамическая обработка воды.

ABOUT THE PROSPECTS OF USE OF OZONE IN THE PROCESSES OF DECENTRALIZED DISINFECTION AND DECONGERIZATION OF ARTESIAN WATERS

Kurbatov A. Y., Kuzin E. N., Averina J. M., Vetrova M. A.
D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia

The article discusses promising methods of water treatment for decentralized water supply, in particular, ozonation of drinking water. The positive and negative sides of the ozonation process, as well as the features of the reaction are described.

Keywords: water treatment, ozonation of water, hydrodynamic treatment of water.

Геологический возраст воды на нашей планете по разным источникам оценивается от 3 до 5 миллиардов лет, поэтому даже самая чистая вода в процессе контакта с минеральными породами накапливает в себе примеси и микроэлементы. В артезианской (наиболее чистой) воде могут присутствовать растворенный водород, гидроксил-радикал, а также ионы натрия магния, железа, калия. Кроме того, артезианская вода содержит в себе кислотные анионы, такие как карбонаты, хлориды и сульфаты. Кристаллическая чистота воды зачастую может быть обманчива. В воде озёр, рек и прудов помимо вышеуказанных веществ протекают различные биологические процессы, в результате которых образуется широкий спектр органических веществ и метаболитов. Употребление такой воды без предварительной подготовки может быть опасно для жизни и здоровья.

Основной задачей предприятий, занимающихся процессами водоподготовки является обеспечение требуемого качества воды, а также организация своевременной ее подачи в необходимом количестве потребителю. При этом вопрос стоимости процесса питьевой водоподготовки играет ключевую роль. В качестве обеззараживающего реагента обычно применяют сильные окислители или ультрафиолетовое облучение.

На сегодняшний день наиболее распространёнными окислителями являются хлор и его производные, пероксид водорода, перманганат калия и озон. Данные реагенты помимо обеззараживающего эффекта способны окислять растворимые формы отдельных металлов (например, железа или марганца) и переводить их в нерастворимое состояние. В последнее время все больше предприятий водоподготовки выбирают в качестве замены процессу хлорирования – озонирование воды.

Несмотря на то, что озон самый дорогостоящий химический реагент для водоподготовки, поскольку оборудование для получения озона требует значительных капитальных затрат, а процесс синтеза озона характеризуется высокими энергозатратами. Кроме того, необходимо помнить, что озон – это высокотоксичное соединение, способное повредить верхние дыхательные пути и при высокой его концентрации в воздухе привести к тяжелому отравлению или смерти. Предельно допустимая концентрация озона (ПДК_{р,з}) составляет 0,1 мг/м³, при этом для сравнения предельно допустимая концентрация хлора в воздухе рабочей зоны составляет 1 мг/м³, что в десять раз выше [1].

Несмотря на указанные недостатки озон имеет ряд важных преимуществ. Озон по своему

окислительному потенциалу (таблица 1) уступает только фтору (не применяют в водоподготовке) и гидроксил-радикалу, что позволяет уничтожать споры, вирусы и бактерии, содержащиеся в питьевой воде.

Таблица 1.
Окислительные потенциалы различных реагентов, используемых в процессах водоподготовки

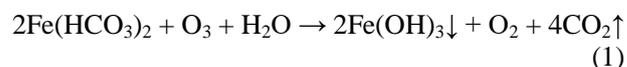
Окислитель	Окислительный потенциал (eV)
ОН•	2,80
O ₃	2,07
H ₂ O ₂	1,77
Гидроксил-радикал	1,70
Перманганат калия	1,67
Диоксид хлора	1,50
Хлор и его производные	1,36
Кислород	1,23

Другим преимуществом озона является отсутствие побочных продуктов (например, хлор фенолов при использовании хлора), что положительно сказывается на органолептических свойствах подготавливаемой воды. Кроме того, озон генерирующее оборудование имеет следующие положительные свойства:

- ✓ Озонаторные установки процесса водоподготовки весьма компактны;

- ✓ Озонаторные установки полностью автономны;
- ✓ Озон производится непосредственно в месте применения;
- ✓ Отсутствие логистических цепей поставки реагентов;
- ✓ Озон не требует складских помещений для хранения;
- ✓ Не требуется приготовление рабочих растворов заданной концентрации перед применением;
- ✓ Значительное сокращение площади реагентного хозяйства;
- ✓ «Зеленая» технология.

Процессы окисления соединений железа в артезианской воде (преимущественно форма гидрокарбонатов) озоном протекают с высокой скоростью и описываются реакцией 1, при этом согласно стехиометрическому расчету, для окисления 1 мг ионов Fe²⁺ требуется 0,14 мг озона.



Из литературных источников [2,3] известно, что обязательным условием для эффективного применения метода озонирования с целью окисления железа и одновременного обеззараживания требуется не менее 3,5 мг (O₃)/л обрабатываемой воды, а время контакта не менее 4-х минут. Механизм обеззараживающего действия озона представлен на рисунке 1.



Рисунок 1. Механизм обеззараживающего действия озона

Несмотря на высокую эффективность в процессах обеззараживания озон имеет крайне короткий период жизни, а достигнутый эффект сохраняется непродолжительное время. Именно поэтому в системах водоподготовки городов для длительного обеззараживающего эффекта (более 2 часов) применяют производные хлора.

В процессе обезжелезивания питьевой воды с использованием озона первоначально образуются мелкодисперсные взвеси окислов железа, которые в последствии являются катализатором процесса деструкции озона [4]. Наиболее целесообразно применять процессы озонирования при высоких расходах воды, из подземных источников. В

зависимости от различных факторов скорость распада озона может существенно различаться (Таблица 2)

Таблица 2.

Период полураспада озона в зависимости от температуры

Температура воздуха, °С	Время
-50	1 месяц
-35	18 дней
-25	8 дней
0	3 дня
20	90 минут
50	5-10 минут

Как видно из таблицы 2, с ростом температуры процесс распада озона ускоряется. Данный параметр особенно актуален для артезианских вод, поскольку процесс будет протекать в нескольких температурных диапазонах. От 1 до 4 °С в момент эжекции озона в поднимаемую из скважины воду, до 20-25 градусов при ее подаче в систему водоснабжения. На основании данных таблицы 2 можно предположить, что бактерицидного эффекта озона при небольших объемах водоподготовки (например, частный дом) будет достаточно для достижения заданных СанПин требований.

Заключение

На основании проанализированных данных можно сделать вывод, что, несмотря на определенные недостатки, озон является наиболее подходящим реагентом для использования в системах децентрализованной водоподготовки. Применение озона не требует постоянных закупок реагентов и обеспечивает максимальное качество окисления большей части органических веществ, а также на 100 % обеззараживает воду и удаляет привкусы, цветность и запах. С учетом маленького расстояния (время доставки воды) между потребителем и установкой обезжелезивания и обеззараживания процесс будет происходить в проточном режиме, а окислительного действия озона будет достаточно для отказа от дополнительного хлорирования.

Одним из возможных вариантов дополнительного увеличения эффективности, и, как

следствие, снижение расхода озона является применение систем гидроакустического смешивания воды с озоном. В процессе гидроакустического воздействия скорость разложения озона будет дополнительно увеличиваться за счет образования гидроксил-радикалов. Помимо этого, будет достигнута максимальная степень диспергирования озона во всем объеме воды и упрощение аппаратной схемы процесса за счет отказа от использования системы впрыска [7-8].

Работа выполнена в рамках программы поддержки молодых ученых-преподавателей РХТУ им. Д.И. Менделеева (Заявка К-2020-015)

Список литературы

1. Громовласов А.А., Копылов А.С., Пильщиков А.П. Водоподготовка: процессы и аппараты. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 272 с.
2. Хохрякова Е.А. Фильтры для очистки воды / Библиотека Акватерм
4. Гевод, В. С. Загрязнение питьевой воды внутри водопроводов и экономичный способ ее доочистки в местах потребления / В. С. Гевод, И. А. Борисов // Водные ресурсы и климат: материалы V Международного Водного Форума, / Белорусский государственный технологический университет. - Минск: БГТУ, 2017. – Ч. 2. – С. 10-18
5. Шиян Л.Н., Мачехина К.И., Кончакова Н.В. Механизм образования коллоидных соединений железа в процессе водоподготовки // Современные проблемы науки и образования: элект. научный журн. 26.08.2013. URL: <http://www.science-education.ru/110-9969> (дата обращения 30.04.2020).
6. Бубликова Е.В. Современное аппаратное оформление процесса озонирования при водоподготовке и обработке сточных вод. 2003.
7. Гидродинамическая обработка природной воды / Ю. М. Аверина, А. Ю. Курбатов, И. С. Джессу Лубо, М. А. Ветрова // Успехи в химии и химической технологии. — 2018. — Т. 32, № 1. — С. 43–45.
8. Влияние газосодержания при очистке воды на скорость окисления растворимых форм металлов / Ю. М. Аверина, О. В. Зверева, А. Ю. Курбатов и др. // Znanstvena misel journal (Slovenia, Ljubljana) ISSN 3124-1123. — 2018. — № 19. — С. 51–55.

УДК 66.047

Бобков В.И., Баранова Я.П.

РАВНОМЕРНОЕ НАГРЕВАНИЕ ПЛОТНОЙ МНОГОСЛОЙНОЙ МАССЫ ОКАТЫШЕЙ ЧЕРЕЗ ФОРМИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ВОЛН

Бобков Владимир Иванович, студент 2 курса магистратуры факультета инженерной химии; e-mail: vovabobkoff@mail.ru**Баранова Яна Павловна**, студент 1 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, учебный мастер I категории

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

В данной статье рассматривается задача о равномерном нагреве движущейся плотной многослойной массы окатышей на конвейере сложной химико-энерготехнологической системы – обжигово-конвейерной машины. Рассматривается вопрос оптимизации химико-энерготехнологических процессов обжига окатышей по критерию энергоресурсоэффективности.

Ключевые слова: температура, окатыши, обжигово-конвейерная машина, химико-энерготехнологический процесс, химико-энерготехнологическая система, энергоресурсоэффективность, оптимизация, оптимальное управление.

UNIFORM HEATING OF DENSE MULTILAYER MASS PELLETS THROUGH FORMATION HEAT WAVES

Bobkov Vladimir Ivanovich, Baranova Yana Pavlovna

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

This article discusses the problem of uniform heating of the moving dense multilayer mass of pellets on the conveyor of a complex chemical and energy technological system - a burning and conveyor machine. The issue of optimization of chemical and energy technological processes of pellet burning according to the criterion of energy resource efficiency is considered.

Keywords: Temperature, pellets, burning and conveyor machine, chemical and power process, chemical and power system, energy efficiency, optimization, optimal control.

Актуальность управления химико-энерготехнологическими процессами, протекающими при термической обработке окомкованного рудного сырья в движущейся плотной многослойной массе на колосниковой решётке обжигово-конвейерной машины определяется высокой энергоемкостью процессов и влиянием множества факторов. Теплоперенос в плотной многослойной массе химически реагирующих дисперсных частиц описывается уравнением теплопроводности для задачи внутреннего теплообмена в окатыше и уравнением теплообмена между греющим газом и окатышами. Математическое описание, базируется на системе дифференциальных уравнений с частными производными, а её конечно-разностный вид представлен авторами в [1].

Режимы энергоресурсоэффективного функционирования сложной химико-энерготехнологической системы – обжигово-конвейерной машины, работающей на заданном сырье, при известной высоте и фракционном составе засыпки обеспечиваются: нагревом окатышей до максимально возможной температуры с максимально возможной скоростью. Выдерживанием материала при этой температуре в течение времени, необходимого для завершения процессов диссоциации карбонатов и спекания, что следует из зависимости этих процессов от

температуры. Таким образом, задача сводится к поиску оптимального управления, параметры которого - начальная температура $T_{g0}(\tau)$ и скорость греющих газов на входе в слой $W_g(\tau)$, когда $T_{gh} \rightarrow T_{gh}^{MAX}$. В этом случае реализуется максимально возможная средняя температура газа в слое и при соответствующем коэффициенте теплоотдачи будет обеспечен наиболее интенсивный нагрев материала. Особенности протекания химико-энерготехнологических процессов, на конвейере обжиговой машины, в движущейся плотной многослойной массе окатышей, накладывают ограничения на функционирование химико-энерготехнологической системы в целом [2].

Температура газа-теплоносителя на выходе из многослойной массы ограничена условиями работы колосниковой решетки $T_{gh} \leq T_{gh}^{MAX}$. Скорость газа ограничена производительностью тягодутьевых установок $0 < W_{gh} \leq W_{gh}^{MAX}$, температура греющих газов на входе – техническими возможностями горна и максимально возможной температурой нагрева окатышей по условию проведения процесса спекания. Авторами предложен эвристический критерий оптимальности $|T_m - T_m^{MAX}| \rightarrow \min$ [3]. При решении задачи оптимизации, применялся метод

деформируемого многогранника, а для выполнения ограничений – алгоритм скользящего допуска.

Результаты вычислительных экспериментов, по разработанной математической модели и оптимизации критерия $|T_m - 850| \rightarrow \min$, в условиях ограничений на управляющие переменные $0,1 < W_{g0} < 1,0$, $400 < T_{g0} < 1500$ представлены на рис.

1 – 4. В расчётах применялись следующие характеристики: радиус окатышей - 1 см, высота их многослойной массы 20 см.

Тепло-физические характеристики материала и кинетические константы химической реакции взяты из [4].

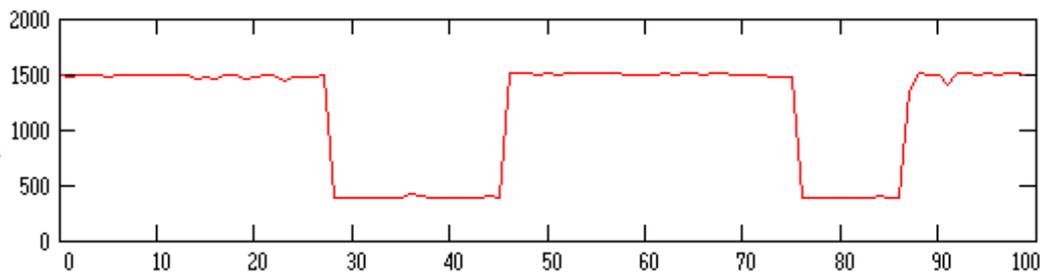


Рис.1. Распределение температуры газа-теплоносителя на входе в многослойную массу окатышей.

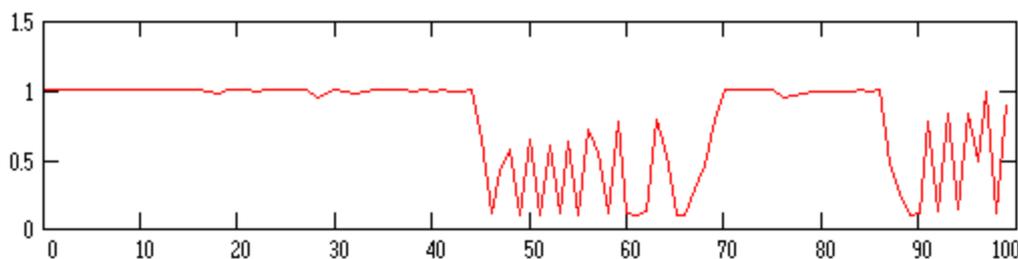


Рис.2. Распределение скорости подачи газа-теплоносителя на входе в многослойную массу окатышей.

Известно, что тепловой импульс в среде с поглощением локализуется в конечной пространственной области и может служить средством воздействия на реагирующий материал. Тепловое воздействие на зернистый материал должно быть сосредоточено в пределах толщины слоя. Таким образом, создавая тепловую волну за счет резкого увеличения теплоотдачи на начальном этапе прогрева материала, можно локально повышать температуру в зоне реагирования без существенного повышения температуры газов на выходе из слоя. Что явно прослеживается на Рис.4. Для удобства анализа результатов время пребывания окатышей в обжигово-конвейерной машине представлено в процентах.

В области конвейера обжиговой машины 0 – 26% формируется тепловая волна, где температура и скорость газа-теплоносителя наибольшие из возможных (рис. 1,2). После этой области, когда тепло нагревающего газа-теплоносителя достигает максимально возможной температуры выхода из многослойной массы окатышей T_{gh}^{MAX} происходит резкое падение температуры подаваемого газа-теплоносителя до наименьшей, но скорость потока газа-теплоносителя остается максимальной чтобы обеспечить наиболее эффективный теплообмен между ним и окатышами в многослойной массе (участок конвейера 26 – 45%).

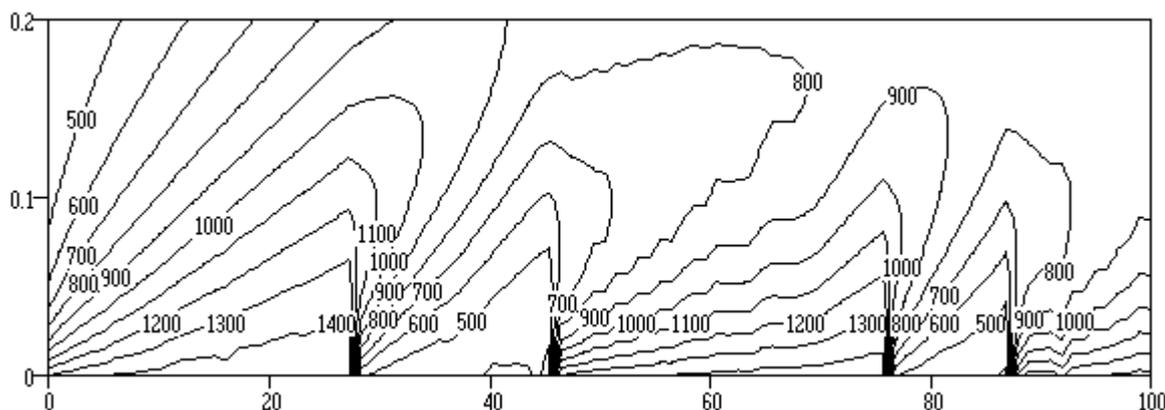


Рис.3. Температурное поле газа-теплоносителя в многослойной массе окатышей.

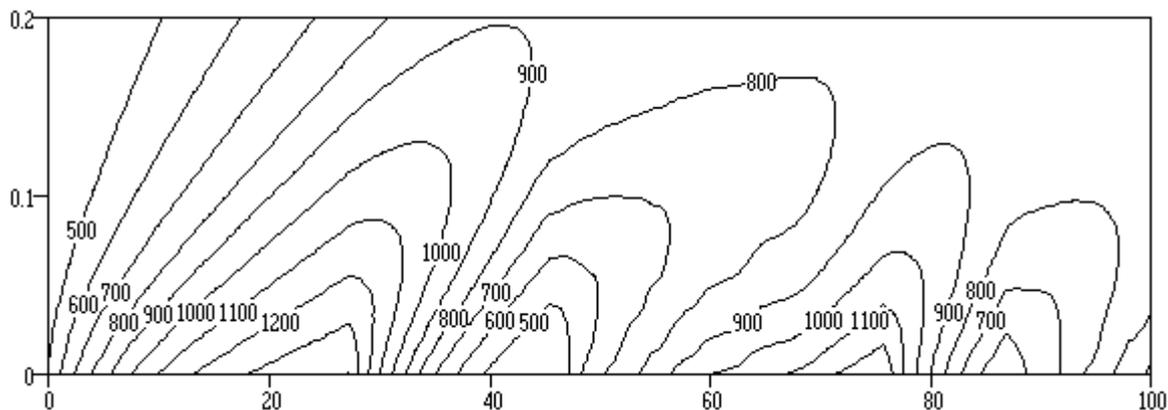


Рис.4. Температурное поле окатышей в многослойной массе.

Причем в этой области конвейера происходит перенос тепловой энергии с нижних, хорошо прогретых слоев, навверх, к наименее нагретым. Затем температура газа-теплоносителя повышается до максимально возможной, а скорость подачи газа-теплоносителя в многослойную массу окатышей варьируется около минимально возможной: что обеспечивает более “спокойный” прогрев материала окатышей. Затем температура газа-теплоносителя снижается, скорость его подачи возрастает, и опять происходит перенос тепла от нижних горизонтов многослойной массы к верхним. В силу того что верхние слои постепенно нагреваются до максимальной температуры T_m^{MAX} процесс волнообразования затухает к нижним слоям (участок 45 -100% рис. 4.) и в пределе достигается постоянная по высоте многослойной массы температура окатышей T_m .

Из анализа полученных результатов видно, что при такой постановке задачи оптимизации обеспечивается равномерный нагрев движущейся на конвейере плотной многослойной массы окатышей за наименьшее время до определенной температуры в условиях технологических ограничений. Эти ограничения образуют температурные волны, обеспечивающие нагрев многослойной массы окатышей. С точки зрения энергоэффективности, такой волнообразный перенос тепловой энергии нежелателен. Для энергоресурсоэффективного функционирования химико-энерготехнологической системы производства окатышей, следует формировать одну, движущуюся вглубь многослойной массы окатышей, затухающую на эндотермические химико-энерготехнологические процессы, тепловую волну [5].

Таким образом, оптимальное управление химико-энерготехнологическими процессами обжига окатышей посредством изменения параметров $W_{g0}(\tau)$ и $T_{g0}(\tau)$ дает возможность обеспечить энергоресурсоэффективное функционирование

химико-энерготехнологической системы производства окатышей, удовлетворяющую необходимым технологическим требованиям. Формирование программированного распределения температуры газоза-теплоносителя и скорости его подачи по длине обжигово-конвейерной машины достигается перераспределением подачи топлива и воздуха в горелочные устройства и режимом работы эксгауэров.

Список литературы

1. Бобков В.И. Исследование технологических и тепло-массообменных процессов в плотном слое дисперсного материала // Тепловые процессы в технике. — 2014. — №3. — С.139-144.
2. Бобков В.И. Ресурсосбережение в электротермии при подготовке сырья на обжиговых машинах конвейерного типа // Электротехнология. — 2015. — №7. — С.26-34.
3. Мешалкин В.П., Бобков В.И., Дли М.И. Автоматизированная система поддержки принятия решений по управлению энергоресурсоэффективностью химико-энерготехнологической системы обжига фосфоритовых окатышей // Теоретические основы химической технологии. — 2019. — Т. 53. № 6. — С. 609-616.
4. Богатырев А.Ф., Панченко С.В. Математические модели в теплотехнологии фосфора. М.: МЭИ, 1996. – 207с.
5. Бобков В.И., Кулага Н.Ф. Оптимальное управление термически активируемыми процессами подготовки дисперсного сырья в плотном слое // Научное обозрение. — 2015. — №17. — С.113-120.

УДК 66.047

Бобков В.И., Мешалкин В.П.

ОСОБЕННОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК РУДНОГО СЫРЬЯ В УСЛОВИЯХ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПОДГОТОВКИ

Бобков Владимир Иванович, студент 2 курса магистратуры факультета инженерной химии;
e-mail: vovabobkoff@mail.ru

Баранова Яна Павловна, студент 1 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, учебный мастер I категории

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

В статье рассматривается актуальная научно-практическая проблема определения коэффициентов теплопроводности и объёмной теплоёмкости рудного сырья в температурных диапазонах термической обработки на обжиговых конвейерных машинах. Учены, сопровождающие обжиг сырья термически активируемые эндотермические реакции диссоциации карбонатов.

Ключевые слова: теплоёмкость, теплопроводность, тепломассообмен, обжиг сырья, обратная коэффициентная задача теплопроводности.

PECULIARITIES DETERMINATION OF THERMOPHYSICAL CHARACTERISTICS ORE RAW MATERIALS IN CONDITIONS OF THERMAL PREPARATION

Bobkov Vladimir Ivanovich, Baranova Yana Pavlovna

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

The article discusses the current scientific and practical problem of determining coefficients of thermal conductivity and volume heat capacity of ore raw materials in temperature ranges of thermal treatment on burning conveyor machines. Heat-activated endothermic reactions of carbonate dissociation accompanying the raw material annealing are considered.

Keywords: Heat capacity, heat conductivity, heat mass exchange, raw material roasting, inverse coefficient problem of heat conductivity.

Эффективность использования энергии особенно в химико-энерготехнологических процессах определяется возможностью управления физико-химическими превращениями, протекающими в сырьевом материале при термической подготовке и переработке на базе интенсификации тепло- и массообмена. В свою очередь управление и оптимизация физико-химических и тепло- и массообменных процессов зависит от степени их изученности, глубины понимания всей гаммы явлений в рассматриваемой химической технологии.

Основанием для более углубленного изучения процессов является низкая на сегодняшний день эффективность использования материальных и энергетических ресурсов в процессах и аппаратах термической подготовки рудного сырья.

Управление, например, процессом обжига сырьевых материалов с целью установления и поддержания рациональных тепловых режимов работы конвейерной обжиговой машины приводит к необходимости изучения стационарного и динамического режимов работы плотной многослойной массы окатышей с перекрёстной подачей газа-теплоносителя. Для этого необходимо иметь научно обоснованное представление о внутреннем тепловом состоянии материала, влияющим на физико-химические превращения [1].

В данной работе рассматривается задача оптимального управления внутренним тепловым состоянием системы с распределёнными (во времени

и пространстве) параметрами, произвольной геометрии (шар, цилиндр, плоскость). В качестве критерия оптимальности принято наименьшее отклонение от заданного распределения температуры $T^*(\tau, x)$. Управляющими параметрами являются коэффициенты системы ρc и λ . Задача оптимального управления в такой постановке эквивалентна обратной коэффициентной задаче, которая заключается в отыскании тепло-физических характеристик материалов.

Вообще говоря, обратные задачи являются некорректно поставленными по Адамару [2], поэтому необходимо применение регуляризующих алгоритмов. В данной работе использован принцип *естественной регуляризации*, основанный на "вязкостных" свойствах вычислительных алгоритмов [2].

Перенос тепла в системе осуществляется теплопроводностью при наличии химических реакций, описываемых феноменологически [3]. Математическая модель представлена уравнениями:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{x^n} \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda x^n \frac{\partial T}{\partial x} \right) - q\omega; \quad (1)$$

$$\omega = \frac{d\eta}{d\tau} = k_0 (1-\eta)^p \exp\left(-E/RT\right) \quad (2)$$

начальные и граничные условия:

$$\begin{aligned} \tau = 0, \quad T = T_0, \quad \eta = 0; \\ x = 0, \quad \partial T / \partial x = 0; \\ x = x_0, \quad \lambda (\partial T / \partial x) = q^*; \end{aligned} \quad (3)$$

где: λ - коэффициент теплопроводности материала; τ и x соответственно временная и пространственная координаты; ρ - плотность материала; c - удельная изобарная теплоемкость; η - степень реагирования; k_0 - коэффициент проницаемости; E - энергия активации; q - тепловой эффект реакции; n - показатель характеризующий геометрию системы (0-плоскость, 1-цилиндр, 2-шар); q^* - тепловой поток на границе.

Распределение температуры $T^*(\tau, x)$ получено в численном эксперименте, решением

$$\begin{aligned} (\rho c)_i^k \left((T_i^k - T_i^{k-1}) / \Delta \tau \right) = x_i^{-n} \Delta x^{-2} \left[x_{i+1/2}^n \lambda_{i+1/2}^k (T_{i+1}^k - T_i^k) - x_{i-1/2}^n \lambda_{i-1/2}^k (T_i^k - T_{i-1}^k) \right] + q_i^k, \\ (\eta^k - \eta^{k-1}) / \Delta \tau = k_0 (1 - \eta_{k-1})^p \exp(-E/RT_i), \quad \lambda_{i\pm 1/2} = (\lambda_i \pm \lambda_{i-1}) / 2. \end{aligned}$$

Решение прямой задачи методом прогонки дает возможность получить $T^*(\tau_k, x_i)$.

Задача оптимального управления ставит целью: определить ρc и λ так, чтобы $T(\tau_k, x_i)$ - решение задачи (1-3), как можно меньше отличалось от $T^*(\tau_k, x_i)$, то есть чтобы функционал $J(\rho c, \lambda)$ был минимальным.

$$J_k = \sqrt{\sum_i [T(\tau_k, x_i) - T^*(\tau_k, x_i)]^2} \rightarrow \min$$

Следуя Алифанову [4] функционал J_k на каждом временном слое будем называть *невязкой*. Последовательно на каждом временном слое ρc и λ определяются из условия минимума невязки.

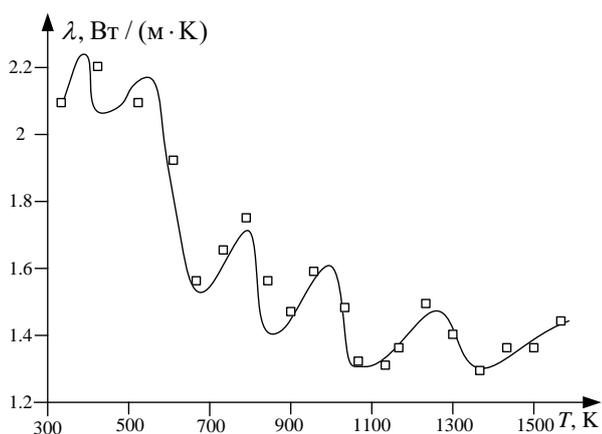


Рис.1. График зависимости от температуры, полученный в вычислительном эксперименте, коэффициента теплопроводности; \square - экспериментальные данные.

В данном исследовании рассматривается метод деформируемого многогранника, несколько более сложный по сравнению с прямым поиском, но

прямой задачи теплопроводности, где ρc и λ являются функциями температуры.

При решении нелинейных задач аналитическими методами возникают существенные математические трудности, которые требуют разработки специальных методов решения [97]. Причем возможность получения аналитического решения и выбор метода существенным образом зависят от вида нелинейностей в дифференциальных уравнениях и в граничных условиях. Численное решение рассматриваемой нелинейной задачи представляется единственно-возможным.

Уравнения (1) и (2) и граничные условия (3) записываются в неявной конечно-разностной форме. При этом учтено, что ρc , λ , η зависят от температуры, а температура - $T = T(\tau, x)$.

Конечно-разностные уравнения имеют вид:

оказавшийся весьма эффективным и легко осуществляемым на ЭВМ. Он исключает определенные практические трудности при использовании регулярных симплексов, а именно отсутствие ускорения поиска и трудности при проведении поиска на искривленных поверхностях "оврагах" и "хребтах".

При практической реализации на ЭВМ многих методов нелинейного программирования значительная доля машинного времени тратится на то, чтобы обеспечить строгое выполнение требований допустимости.

Алгоритм скользящего допущения позволяет улучшить значения целевой функции как за счет информации, получаемой в допустимых точках пространства решений, так и за счет информации, которую удается получить при прохождении через некоторые точки, лежащие вне допустимой области, но являющимися близкими к допустимым.

Алгоритм скользящего допущения с оптимизацией по методу деформируемого многогранника реализован при решении поставленной задачи. Причем, в силу реализуемости конкретного физико-технического процесса, на ρc и λ были наложены следующие ограничения: $0 < \lambda < 5$, $0 < \rho c < 5 \cdot 10^6$. Для увеличения скорости нахождения минимума невязки на каждом последующем временном слое (шаге), в качестве начальной точки поиска, берется найденная точка минимума на предыдущем временном слое (шаге). Решение задачи реализовано в виде программы на языке Borland C++ Результаты расчёта для фосфоросодержащего рудного материала совпадают с экспериментальными данными [5] и представлены на Рис.1, 2.

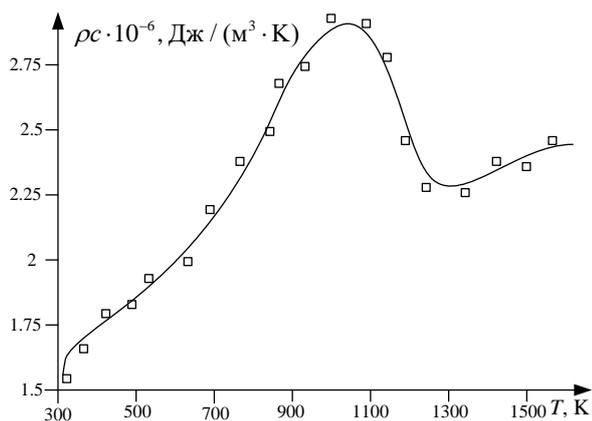


Рис.2. График зависимости от температуры, полученный в вычислительном эксперименте, коэффициента объемной теплоемкости; □ - экспериментальные данные.

Предложенный алгоритм и разработанная программа, могут быть использованы для широкого круга задач подобного типа без существенных изменений. По результатам расчетов видно, что управление посредством коэффициентов ρc , λ дает возможность осуществить программируемый нагрев с высокой точностью и следовательно удовлетворить необходимым технологическим условиям.

Благодарности. Авторы выражает глубокую благодарность своему методическому наставнику и учителю, научному руководителю – академику РАН, заслуженному деятелю науки РФ, директору

Международного Института Логистики Ресурсосбережения и Технологической Инноватики (НОЦ) РХТУ имени Д.И. Менделеева **Валерию Павловичу Мешалкину** за неустанный внимание, всестороннюю помощь, ценные научно-методические советы и рекомендации.

Список литературы

1. Мешалкин В.П., Бобков В.И., Дли М.И. Автоматизированная система поддержки принятия решений по управлению энергоресурсоэффективностью химико-энерготехнологической системы обжига фосфоритовых окатышей // Теоретические основы химической технологии. — 2019. — Т. 53. № 6. — С. 609-616.
2. Тихонов А.Н., Кальнер В.Д., Гласко В.Б. Математическое моделирование технологических процессов и метод обратных задач в машиностроении. – М.: Машиностроение, 1990. - 264с.
3. Мешалкин В.П., Бобков В.И., Дли М.И., Ходченко С.М. Компьютерное моделирование химико-энерготехнологического процесса обжига движущейся многослойной массы фосфоритовых окатышей // Доклады Академии наук. 2017. Т. 477. № 5. С. 559-562.
4. Алифанов О.М. Обратные задачи теплообмена. – М.: Машиностроение, 1988. – 280с.
5. Богатырев А.Ф., Панченко С.В. Математические модели в теплотехнологии фосфора. М.: МЭИ, 1996. – 207с.

УДК 661.183.2.

Ониси́фору П., Мамедова Ч.Б., Касаткин Е.М., Ахмедова Л.С., Чередниченко А.Г.

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА АДСОРБЦИИ ПАРОВ ЭТАНОЛА АКТИВИРОВАННЫМ УГЛЕМ БАУ-А, МОДИФИЦИРОВАННОГО УЛЬТРАЗВУКОМ

Ониси́фору Перса – бакалавр кафедры Физической и коллоидной химии РУДН,

Мамедова Чичак Байрам кызы – бакалавр кафедры Физической и коллоидной химии РУДН,

Касаткин Евгений Михайлович – аспирант кафедры Физической и коллоидной химии РУДН,

Ахмедова Луиза Сулейман кызы – аспирант кафедры Физической и коллоидной химии РУДН,

Чередниченко Александр Генрихович – д.х.н., заведующий кафедрой Физической и коллоидной химии РУДН,

Российский университет дружбы народов (РУДН), Москва, Россия

117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д.6. *e-mail: sorbotek@yandex.ru

В ходе проведенных исследований была осуществлена ультразвуковая модификация отечественного активированного угля БАУ-А и изучены закономерности процесса адсорбции паров этанола при температуре 25,0 °С для модифицированных и немодифицированных сорбентов. Анализ полученных результатов показал, что после модификации ультразвуком сорбционная емкость образцов по отношению к этанолу увеличивается на 3,5 %. При этом существенно меняются параметры математического описания процесса адсорбции алифатического спирта, связанных с изменением наблюдаемого порядка адсорбции этанола с псевдопервого на псевдвторой. Аналогичные изменения происходят при использовании для описания этого процесса диффузионных моделей. При этом для исходного сорбента хорошо работает уравнение Морриса-Вебера, а для модифицированного – уравнение Еловича. Полученные результаты свидетельствуют о существенном влиянии ультразвуковой модификации на адсорбционные свойства активированного угля.

Ключевые слова: активированные угли, адсорбция газов, летучие органические соединения, охрана окружающей среды

STUDY OF THE PROCESS OF ETHANOL VAPOR ADSORPTION BY ACTIVE CARBON BAU-A AFTER MODIFICATION BY ULTRASOUND

Onisiforou Persa, Mamedova Chichak Bayram kizy, Kasatkin Evgeny Mikhaylovich, Akhmedova Luisa Suleymanovna, Cherednichenko Alexander Genrikhovich

Peoples' Friendship University of Russia, 6 Miklukho-Maklaya Street, Moscow, 117198, Russian Federation

During the research, ultrasonic modification of domestic activated carbon BAU-A was performed and the regularities of the process of adsorption of ethanol vapor at a temperature of 25.0 °C for modified and modified sorbents were studied. Analysis of the results showed that after modification by ultrasound, the sorption capacity of samples in relation to ethanol increases by 3.5 %. At the same time, the parameters of the mathematical description of the aliphatic alcohol adsorption process significantly change, related to the change in the observed order of the ethanol adsorption process from pseudo-first to pseudo-second. Similar changes occur when using diffusion models to describe this process. The Morris-Weber equation works well for the original sorbent, and the Elovich equation works well for the modified one. The obtained results indicate a significant influence of ultrasonic modification on the adsorption properties of activated carbon.

Key words: activated carbon, gas adsorption, volatile organic compounds, environmental protection

Интенсивное развитие мирового промышленного производства сопровождается дальнейшим ухудшением экологической обстановки из-за попадания в атмосферу и водные бассейны токсичных отходов [1]. Летучие органические соединения (ЛОС) являются одними из наиболее распространенных загрязнителей, попадающих в окружающую среду с газовыми выбросами или с неочищенными сточными водами промышленных предприятий [2]. Среди ЛОС заметное место занимают органические растворители, которые используются при проведении синтеза, операций очистки и приготовления товарных форм химической продукции. В настоящее время существует целый ряд технологических решений, позволяющих не только добиться значительного уменьшения содержания ЛОС в атмосфере и сточных водах, но и решить задачу создания замкнутых производственных циклов. При этом одновременно достигается глубокая очистка газовых выбросов, водных стоков и осуществляется рецикл органических растворителей в

технологический процесс [2]. Для достижения необходимой эффективности при решении экологических задач часто используют сочетание нескольких методов очистки, рассчитанных на предварительную и финишную обработку загрязненной воды или воздушной среды.

В современных технологиях очистки значительный практический интерес представляют ионообменные смолы и активированные угли [3-4]. Они обладают высокой сорбционной емкостью по отношению к химическим соединениям различной природы и состава, способны к регенерации, имеют низкую себестоимость и успешно используются на стадии финишной очистки воды и газовых выбросов [1-4]. В настоящее время известно большое количество промышленных марок активированных углей различного назначения. Их разнообразие определяется конкретными условиями получения и свойствами исходного сырья [2,5]. Высокие технические характеристики делают эти углеродные сорбенты

важными компонентами современных мировых технологий. Поэтому проведение научных исследований, направленных на разработку новых типов активированных углей, является актуальной задачей. Существенную роль при разработке нового сорбционного материала играют методы модификации уже существующих углеродных сорбентов, которые могут заключаться в их химической или физико-химической обработке [2].

Экспериментальная часть

Ультразвуковое модифицирование активированного угля проводили на приборе УЗДН в среде этилового спирта в течение 60 минут при мощности 440 Вт/см². После окончания процесса модифицирования поглощенный этиловый спирт удаляли из сорбента путем ступенчатого нагревания при атмосферном давлении: 72 часа при температуре 150 °С и 8 часов при температуре 300 °С.

Эксперименты по исследованию закономерностей процесса адсорбции паров этанола проводили при температуре 25±1°С. Образец активированного угля массой около 4,0 г помещали в открытый бюкс и выдерживали 2 часа при температуре 150 °С в сушильном шкафу при атмосферном давлении. Затем бюкс с образцом закрывали крышкой и охлаждали до комнатной температуры. В эксикатор объемом 3,0 литра заливали 250 мл этанола и плотно закрывали его крышкой. Для проведения эксперимента в чистый бюкс помещали точную навеску (около 2,5 г) высушенного образца активированного угля, закрывали бюкс крышкой и определяли общую массу на аналитических весах с точностью ±0,0001 г. Затем открытый бюкс помещали на опорную решетку эксикатора с органическим растворителем, избегая контакта с жидкой фазой, крышку эксикатора закрывали и начинали отсчет времени. Количество адсорбируемого растворителя в исследуемом активированном угле определяли гравиметрическим методом. Для этого через определенные интервалы времени эксикатор быстро открывали, бюкс с образцом закрывали крышкой, доставали из эксикатора и взвешивали на аналитических весах. Полученный результат фиксировали, а бюкс с образцом возвращали в эксикатор для продолжения эксперимента. Последнее измерение, соответствующее состоянию полного насыщения (равновесия), проводили через 24 часа после начала эксперимента.

Расчет удельного количества адсорбированного вещества в расчете на 1 г сорбента (г/г) проводили по формуле (1):

$$q_t = \frac{m_t - m_0}{m_0} \quad (1)$$

где q_t – количество адсорбированного этанола, г/г; m_0 и m_t – масса бюкса с АУ в начале эксперимента и в текущий момент времени, г.

На основании полученных данных определяли зависимость удельного количества поглощенного этанола от времени (изотерму адсорбции). Для

выяснения закономерностей процесса адсорбции кинетические результаты обрабатывались с использованием уравнения Лагергрена псевдопервого порядка (2), Хо-Маккея псевдвторого порядка (3), диффузионных уравнений Еловича (4) и Морриса-Вебера (5) [6]:

$$\text{Log}(q_e - q_t) = \text{Log}(q_e) - \frac{k_1}{2,303} \times t \quad (2)$$

где q_e и q_t – адсорбционная емкость в момент равновесия и в момент времени t , г/г; t – время, мин; k_1 – константа скорости псевдопервого порядка, мин⁻¹.

$$\frac{1}{q_t} = \frac{1}{k_2 \times q_e^2} + \frac{t}{q_e} \quad (3)$$

где q_e и q_t – удельная адсорбционная емкость в момент равновесия и в момент времени t , г/г; t – время, мин; k_2 – константа скорости псевдвторого порядка, г/г×мин.

$$q_t = \frac{1}{\beta} \times \ln(\alpha \times \beta) + \frac{1}{\beta} \times \ln t \quad (4)$$

где q_t – удельная адсорбционная емкость в момент времени t , г/г; β – константа десорбции, г/г; α – начальная скорость адсорбции, г/г×мин.

$$q_t = k \times t^{1/2} + C \quad (5)$$

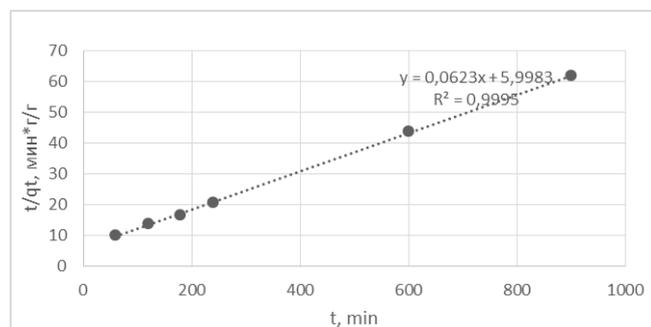
где q_t – удельная адсорбционная емкость в момент времени t , г/г; t – время, мин; k – константа скорости диффузии уравнения Морриса-Вебера, г/г×мин^{1/2}; C – константа сопротивления в пограничном слое.

Полученные результаты приведены в табл. 1.

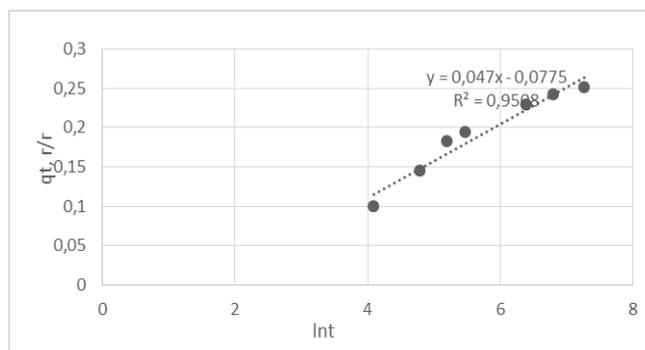
Обсуждение результатов

Проведенные исследования показали, что равновесное значение удельной сорбционной емкости (q_e) при адсорбции паров этанола у активированного угля БАУ-А составляет 0,2424 г/г, а у модифицированного сорбента БАУ-А-УЗО – 0,2509 г/г, что на 3,5 % выше, чем у исходного активированного угля. При этом кинетика процесса хорошо описывается уравнением Лагергрена (всевдопервого порядка) в случае применения угля БАУ-А и уравнением Хо-Маккея (псевдвторого порядка) после модифицирования сорбента ультразвуком. Использование диффузионных уравнений для описания полученных результатов тоже показало существенные различия в свойствах угольного сорбента до и после модифицирования. Так динамика процесса адсорбции этанола до модификации БАУ-А ультразвуком хорошо описывалась уравнением Морриса-Вебера, а после модифицирования его применение дало неудовлетворительный результат. При этом хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных наблюдалось в случае использования уравнения Еловича (рис.1). Таким образом, несмотря на незначительное изменение величины удельной сорбционной емкости после

модификации, результаты, полученные в ходе расчетов, свидетельствуют о существенных изменениях в механизме стадийных процессов, протекающих при адсорбции паров этанола. Эти различия связаны с изменением формального порядка реакций адсорбата с поверхностью адсорбента и закономерностями диффузии молекул этанола к внешней и внутренней поверхности активированного угля.



а



б

Рис. 1. Результаты, полученные при линеаризации уравнения Лагергрена (а) и Еловича (б) для описания процесса адсорбции паров этанола модифицированным ультразвуком активированным углем БАУ-А-УЗО

Таблица. 1. Результаты моделирования процесса адсорбции паров этанола активированным углем БАУ-А и модифицированным ультразвуком активированным углем БАУ-А-УЗО

Название модели	Значение параметров математического описания процесса		
Лагергрена	$K_1, \text{мин}^{-1}$	$q_e, \text{г/г}$	R^2
БАУ-А / БАУ-А-УЗО	0,0044 / 0,0037	0,2942 / 0,1796	0,9861 / 0,9192
Хо-Маккея	$K_2, \text{г/г} \times \text{мин}$	$q_e, \text{г/г}$	R^2
БАУ-А / БАУ-А-УЗО	0,0007 / 0,1667	0,3371 / 0,1605	0,9689 / 0,9995
Морриса-Вебера	K	C	R^2
БАУ-А / БАУ-А-УЗО	0,0097 / 0,0058	0,0387 / 0,0826	0,9731 / 0,8614
Еловича	$\alpha, \text{г/г} \times \text{мин}$	$\beta, \text{г/г}$	R^2
БАУ-А / БАУ-А-УЗО	3,9819 / 0,2725	12,346 / 21,277	0,9471 / 0,9508

Выводы

В ходе проведенных исследований были изучены количественные закономерности процесса адсорбции паров этанола промышленным активированным углем БАУ-А и модифицированным ультразвуком активированным углем БАУ-А-УЗО. Показано, что после обработки ультразвуком удельная сорбционная емкость угольного адсорбента возрастает на 3,5 %. При этом наблюдается изменение формального порядка процесса с псевдопервого на псевдвторой и смена использованной для описания процесса диффузионной модели. Так до модификации ультразвуком хорошее совпадение экспериментальных и расчетных данных наблюдалось при использовании уравнения Морриса-Вебера, которое после модификации пришлось заменить на уравнение Еловича, учитывающее влияние диффузионных факторов на внешней поверхности и внутри пор адсорбента на ход адсорбции этанола. Влияние ультразвука в процессе модифицирования, очевидно, заключается в образовании дополнительного количества микро- и мезопор, обеспечивающих увеличение сорбционной

емкости активированного угля, а также в изменении количественного распределения пор по размерам.

Публикация подготовлена при поддержке Программы РУДН «5-100»

Литература

1. Б.Н. Фрог, А.Г. Первов. Водоподготовка М.: АСВ, 2015. 512 с.
2. В.М. Мухин, В.Н. Клушин. Получение и применение углеродных адсорбентов. М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева. 2012. 305 с.
3. Ю.А. Лейкин. Физико-химические основы синтеза полимерных сорбентов. М.: БИНОМ, 2015. 416 с.
4. Х. Кинле, Э. Бадер. Активные угли и их промышленное применение. Л.: Химия, 1984. 216 с.
5. В.М. Мухин, И.Д. Зубова, В.В. Гурьянов, А.А. Курилкин, В.С. Гостев. Новые технологии получения активных углей из реактопластов // Сорбционные и хроматографические процессы. 2009. Т. 9, вып. 2. С.191-195.
6. А.В. Вишняков, Н.Ф. Кизим. Физическая химия. Учебник для ВУЗов. М.: Химия, 2012. 840 с.

УДК 517.518

Скрипаченко М.П., Корельштейн Л.Б.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КУБИЧЕСКОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ДЛЯ УСКОРЕНИЯ ТЕПЛОВЫХ И ГИДРАВЛИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ

Скрипаченко Мария Павловна, аспирантка 1 курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; e-mail: maskrip@list.ru

Корельштейн Леонид Бенционович, к.ф.-м.н, доцент

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

В данной статье предлагается использовать кубическую сплайн-интерполяцию при обработке данных термодинамических библиотек. Проведена проверка данного метода на нефтяной фракции. Полученные результаты хорошо аппроксимируют данные из термодинамической библиотеки.

Ключевые слова: термодинамическая библиотека, интерполяция, кубический сплайн, узлы интерполирования, метод прогонки.

USING CUBIC INTERPOLATION TO OPTIMIZE THE DYNAMIC CALCULATION PROCESS

Scripachenko Maria Pavlovna, Korelstein Leonid Bentsionovich.

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

This article proposes to use cubic spline interpolation in the processing of thermodynamic data libraries. The proposed method has been verified on oil fraction and ethanol. Estimated data results are consistent with thermodynamic library.

Keywords: thermodynamic library, interpolation, cubic spline, interpolation nodes, tridiagonal matrix algorithm.

Введение

Существует множество программ, выполняющих гидравлические и тепловые расчеты для проектирования объектов различных отраслей промышленности. При этом для трубопроводов и оборудования химических предприятий необходимо выполнять расчет фазового равновесия (ФР) сложных смесей, а также теплофизических и транспортных физических свойств (ТФС) жидкой и газовой фаз, при постоянно меняющихся термодинамических параметрах. Такой расчет выполняется путем вызова соответствующих термодинамических библиотек (например, библиотеки «СТАРС» компании НТП Трубопровод, «Simulis Thermodynamics» компании ProSim, разработанной сотрудниками МЭИ библиотеки «WaterSteamPro» и др.) Чем сложнее трубопровод и решаемая задача, тем больше требуется запросов к термодинамическим библиотекам. Их число начинает исчисляться сотнями, тысячами и даже десятками тысяч, причем с ростом сложности состава продукта и используемой термодинамической модели растет и время одиночного расчета ТФС и ФР. Это приводит к значительному замедлению скорости гидравлических и тепловых расчетов и делает затруднительным решение задач оптимизации на основе таких расчетов. Поэтому существует большая потребность в уменьшении количества запросов программ к термодинамическим библиотекам.

Для этого предлагается заменить большинство обращений к библиотекам на использование

результатов интерполяции по небольшому числу заранее или динамически насчитываемых точек. Настоящая статья представляет собой первый шаг в этом направлении.

Предметом настоящего исследования является возможность применения для решения описанной выше задачи одномерной кубической сплайн интерполяции. Этот способ имеет широкое применение в силу нескольких причин [1]:

- интерполяционная кривая проходит через исходные точки
- интерполирующая функция по крайней мере дважды непрерывно дифференцируема
- поскольку сплайн является кусочной функцией, его модификация требует перестроения только части составляющих его многочленов

Основная часть

Для разработки математических моделей использованы данные термодинамической библиотеки «СТАРС». В данной статье рассмотрены результаты применения метода кубической сплайн интерполяции для зависимости ТФС от температуры. В качестве примера взято два вещества: первое - нефтяная фракция с начальной температурой кипения 240°C, температура конца кипения 350°C и относительной плотностью 0,84, второе вещество - этиловый спирт с температурой в тройной точке 159К и критической температурой 514К. В таблице 1 представлены данные по кинематической вязкости нефтяной фракции в зависимости от температуры для 5 точек.

Таблица 1. Данные по кинематической вязкости в зависимости от температуры для нефтяной фракции

Температура (°C)	x_i	480	720	960	1200	1400
Кинематическая вязкость 10^6 (м ² /с)	y_i	2,1168	3,3325	3,9813	3,2772	9,5199

Для начала зададим вид кубического полинома:

$$\varphi_i(x) = a_i + b_i * (x - x_{i-1}) + c_i * (x - x_{i-1})^2 + d_i * (x - x_{i-1})^3$$

где a_i, b_i, c_i, d_i - коэффициенты сплайна на i -ом участке $[x_{i-1}, x_i]$.

В работах [2-4] подробно описан вывод формул для нахождения коэффициентов сплайна.

Для нахождения коэффициентов необходимо составить трехдиагональную матрицу, которая имеет ненулевые элементы только на главной и смежных с ней по обе стороны диагонали, и вектор-столбец (определение элементов матрицы и вектора-столбца также представлено в работах [2-4]). Для решения такой системы алгебраических уравнений применяют метод прогонки. Метод прогонки является прямым методом решения СЛАУ с трехдиагональной матрицей и подробно описан в работах [5-7]

Рассчитаем значения сплайнов при каждом значении температуры от 480 до 1400 °С. Построим график (Рис. 1) сплайнов и график значений кинематической вязкости от температуры, определенный непосредственно с использованием библиотеки «СТАРС». На графике видно, что кубическая интерполяция с достаточной точностью приближается к расчетной кривой, о чем также говорит относительная погрешность, которая составляет 0,12%. Полученные значения говорят о высоком совпадении данных интерполяции с результатами, возвращаемыми библиотечными функциями, при использовании всего 5 точек интерполяции.

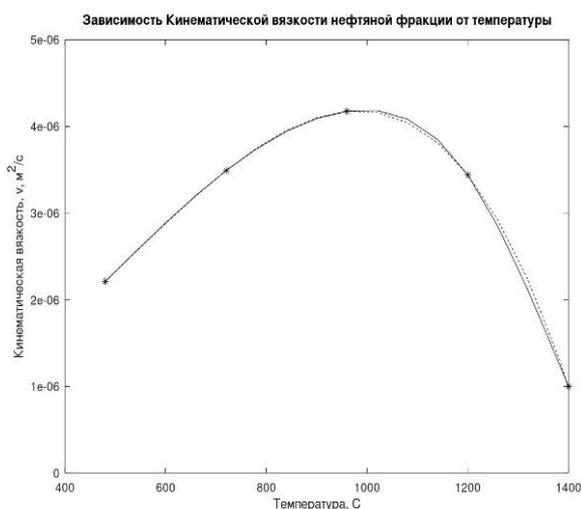


Рис. 1. График зависимости кинематической вязкости нефтяной фракции от температуры * - точки для интерполяции, сплошная линия – кубическая сплайн-интерполяция, пунктирная линия – расчетная кривая)

С целью дальнейшего исследования характера поведения зависимостей рассмотрим давление насыщенных паров. Сплайн-интерполяция была проведена по 5 точкам (температура взята от 0 до 280 °С). Коэффициенты сплайна рассчитываются так же, как и в первом случае.

Поскольку характер изменения давления в левой и правой частях температурного интервала

существенно различны, повысить точность интерполяции можно, если вместо прямой зависимости выбрать для интерполяции зависимость логарифма приведенного давления насыщенных паров от температуры. Такая функция интерполируется сплайнами с максимальной относительной погрешностью 0,28% (Рис.2).

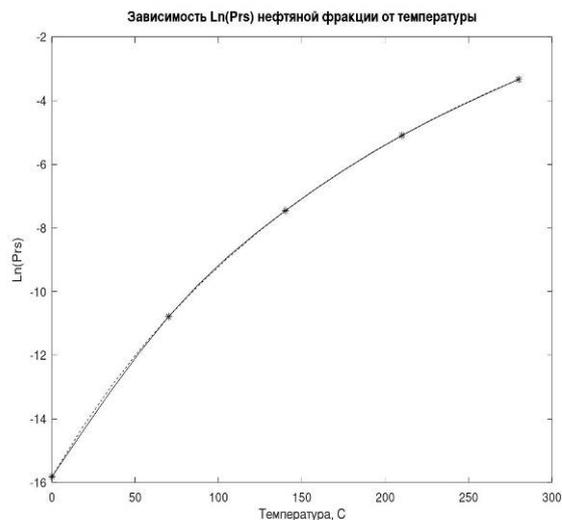


Рис. 2. График зависимости натурального логарифма приведенного давления насыщенных паров нефтяной фракции от температуры * - точки для интерполяции, сплошная линия – кубическая сплайн-интерполяция, пунктирная линия – расчетная кривая)

Важным фактором при выборе вида интерполяции послужил тот факт, что сплайн-интерполяция позволяет учитывать при построении интерполирующей кривой значения первой производной. В настоящей работе для определения производной $dLnP/dT$ было применено уравнение Клайперона-Клаузиуса для этилового спирта. На графиках (рис. 3, 4) представлены зависимости натурального логарифма приведенного давления насыщенных паров от натурального логарифма приведенной температуры. Для получения интерполирующей кривой (рис. 3) также определялись все коэффициенты каждого сплайна. В случае применения производных не возникает необходимость производить решение СЛАУ, т.к. для всех интервалов коэффициенты полинома определяются по значениям функции и ее производной на концах интервала, что значительно сокращает время определения значений зависимой переменной. Погрешность для интерполяции без применения данных по производным составляет 0,011%, в случае с применением данных по производным погрешность составляет 0,21%. Такая погрешность вполне допустима при определении термодинамических свойств для гидравлических и тепловых расчетов трубопроводов.

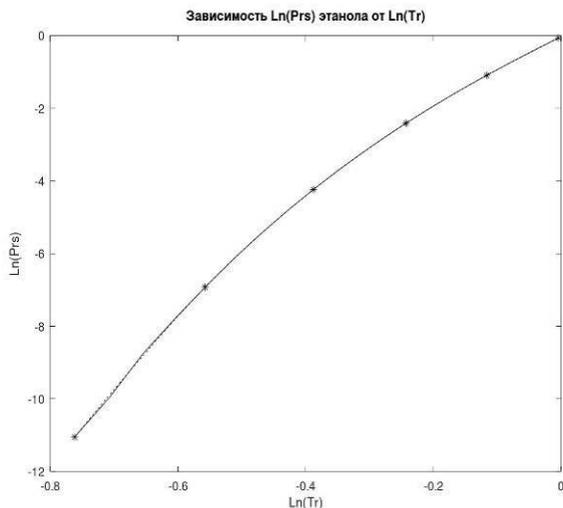


Рис. 3. График зависимости натурального логарифма приведенного давления насыщенного пара этилового спирта от натурального логарифма температуры (* - точки для интерполяции, сплошная линия – кубическая сплайн-интерполяция, пунктирная линия – расчетная кривая)

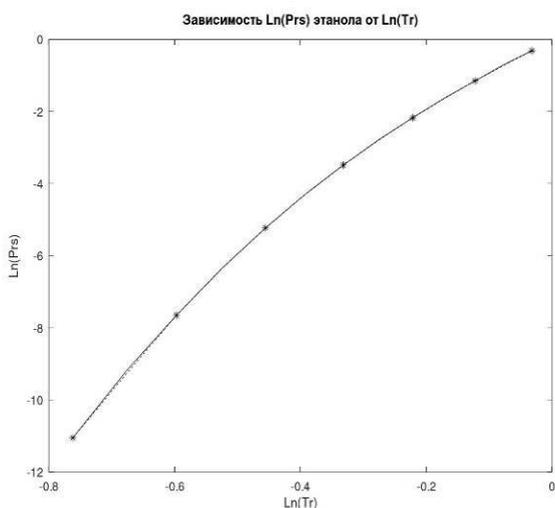


Рис. 4. График зависимости натурального логарифма приведенного давления насыщенного пара этилового спирта от натурального логарифма температуры с применением данных по первой производной (* - точки для интерполяции, сплошная линия – кубическая сплайн-интерполяция, пунктирная линия – расчетная кривая).

Выводы

Численный анализ требуемого числа вызовов в сравнении с затратами на построение сплайнов свидетельствует о целесообразности применения метода сплайн-интерполяции, так как результаты таких расчетов хорошо согласуются с данными термодинамических библиотек и могут быть использованы в инженерной практике. При этом важен правильный выбор термодинамических функций – для успешной интерполяции они должны примерно равномерно меняться на всем рассматриваемом интервале интерполяции.

Список литературы

1. IBIS-модели и их применение в задачах ЭМС / Лемешко Н.В., Кечиев Л.Н., Захарова С.С.-М.: Грифон, 2016. – 192 с.
2. Фокс. А., Пратт М. Вычислительная геометрия. Применение в проектировании и на производстве: Пер. с англ. -М.: Мир, 1982. -304 с., ил.
3. Вержбицкий В.М. Численные методы (математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения): Учеб. пособие для вузов. -М.: Директ-Медиа, 2013. 400 стр.
4. Larry A. Glasgow, Applied Mathematics for Science and Engineering / Larry A. Glasgow, Department of Chemical Engineering, Kanadas, 2014. p.250
5. Пирумов У.Г. Численные методы: учеб. Пособие для студ. вузов / У.Г. Пирумов. 4-е изд., стереотип. – М.: Дрофа, 2007.-221 с.: ил.
6. Chattot J.J. Computational aerodynamics and fluid dynamics: an introduction/ Jean-Jacques Chattot. Includes bibliographic reference and index.
7. Даугавет И.К. Теория приближенных методов. Линейные уравнения. – 2-е изд., перераб. И доп. -СПб.: БХВ-Петербург, 2006. -228 с.: ил.

УДК

Челноков В.В., Михайлов А.В., Заболотная Е.

АКТУАЛЬНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ПРОМЫШЛЕННЫХ МАСШТАБАХ МЕМБРАННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Челноков Виталий Вячеславович, д.т.н., профессор кафедры логистики и экономической информатики

Михайлов Александр Васильевич, студент 2 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга

e-mail: mr.mikhailovalex@mail.ru

Заболотная Елена, аспирант 3 года обучения факультета цифровых технологий и химического инжиниринга кафедры логистики и экономической информатики;

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

В статье рассмотрена возможность использования мембранных технологий и расширение исследований по разработкам их производства. Проведен анализ имеющихся мембранных технологий в Российской Федерации и выявлено что это связано с повышенным интересом к технологии со стороны потребителей как бытовых фильтров, так и промышленных систем.

Ключевые слова: мембранные технологии, промышленные масштабы, энергоресурсоэффективные технологии.

THE RELEVANCE OF INDUSTRIAL USE OF MEMBRANE TECHNOLOGY IN THE RUSSIAN FEDERATION

Chelnokov Vitaliy Vyacheslavovich, Mikhailov Alexandr Vasilievich, Zabolotnaya Elena

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

The article considers the possibility of using membrane technologies and the expansion of research on the development of their production. The analysis of existing membrane technologies in the Russian Federation is carried out and it is revealed that this is due to the increased interest in technology on the part of consumers of both household filters and industrial systems.

Keywords: membrane technologies, industrial scale, energy resource-efficient technologies.

Наша страна имеет все возможности в кратчайшие сроки не только решить ряд производственных проблем, пищевых производств, водоснабжения и других трудностей на основе мембранных технологий, но и выйти на мировой рынок мембранных технологий с оригинальными конкурентоспособными разработками [1].

Российская мембранная наука продолжает занимать лидирующие позиции в мире. Благодаря многолетней государственной поддержке, к концу 80-х годов нам удалось получить ряд фундаментальных результатов в области физической химии мембранного разделения, создать производство различных типов мембран, мембранных модулей и установок [2]. Была создана Национальная научная школа, теоретические и прикладные работы наших ученых и инженеров получили широкое признание в России и мире, установлены рабочие контакты с зарубежными университетами и фирмами.

За последние три года ученые и инженеры в области мембранной техники были трижды удостоены премии Правительства Российской Федерации в области науки и техники. Мембранные устройства для питьевой воды получили серебряные и золотые медали на выставке Eureka в Брюсселе [3]. Ожидается, что глобальный рынок мембранных технологий значительно вырастет благодаря продолжающимся исследованиям и разработкам в этой области. Мембраны занимают через селективную разделительную стенку. Только некоторые вещества могут проникнуть через

мембрану, в то время как другие вещества не могут. Мембранная технология относится к ряду очень характерных и различных процессов разделения [4]. Эти процессы имеют один и тот же тип, так как каждый из них использует мембрану. Мембраны чаще всего используются для получения воды из сточных вод, поверхностных или подземных вод. В последнее десятилетие мембранная технология стала более сложной технологией разделения. Главная сила мембранной технологии заключается в том, что она хорошо работает даже без добавления каких-либо химических веществ, как видно из рисунка 2. Он использует относительно низкую энергию и хорошо организованные и безотказные процессы [5-7].

Сегодня, благодаря своей способности выполнять тонкую фильтрацию и реактивности, мембраны постепенно занимают рыночную долю систем обратной засыпки и других типов фильтров для решения бытовых и промышленных задач. [1].

Уровень конкуренции на российском рынке мембран достаточно высок. Основным двигателем рынка являются компании-производители, предлагающие системы фильтрации на основе мембранных элементов отечественных и зарубежных производителей, а также инжиниринговые компании, специализирующиеся на поставке решений и обслуживании промышленных объектов. Основная конкуренция в сегменте производства мембран и модулей из-за слабости отечественного производства возникает между иностранными компаниями, предлагающими широкий ассортимент продукции

для различных нужд. В среднесрочной перспективе участники рынка ожидают увеличения доли рынка китайских производителей мембран, которые продают мембраны по более низким ценам по сравнению с западными продуктами. [2-4].

К основным конкурентным преимуществам производителя мембран относятся: качество выпускаемой продукции (номинальные характеристики и долговечность), ассортимент (различные виды фильтрации; специальные мембраны, модули и решения для реализации специализированных производственных процессов), наличие дистрибьюторской сети в виде производителей фильтрующего оборудования, активно работающих на рынке и инжиниринговых компаний. В задачи последних входит, в частности, своевременная поставка потребителям сменных мембранных модулей. [5-6].

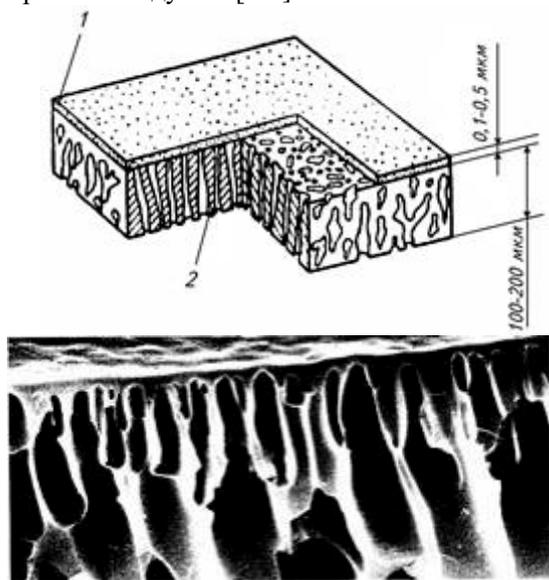


Рисунок 1. Мембраны — инновационный материал для очистки жидких и газовых сред

Повышенный спрос со стороны предприятий пищевой промышленности и производства напитков открывает путь для увеличения спроса на эту технологию. Мембраны стали высококонкурентной технологией среди доступных традиционных технологий. Наличие полупроницаемых мембран — это факт, на котором основан процесс мембранного разделения. Принцип действия этой технологии довольно прост. Мембрана играет роль специального фильтра, который позволяет воде течь через нее, так как она улавливает взвешенные твердые частицы и многие другие вещества. [6].

Существует несколько процессов, которые позволяют веществам проходить через мембрану. Некоторые из примеров этих методов заключаются в следующем:

- введение электрического потенциала;
- применение под высоким давлением;
- поддержание градиента концентрации с обеих сторон мембраны.

Ожидается, что расширение применения этой технологии в пищевой промышленности и производстве напитков в ближайшие годы ускорит рост мирового рынка мембранных технологий. Кроме того, растущее использование технологий рекуперации энергии и охраны окружающей среды, вероятно, будет способствовать развитию мембранных технологий на мировом рынке. [8].

В настоящее время в России производится достаточно широкий спектр мембран, мембранных элементов и установок, в том числе установки для разделения и очистки жидкостей на основе современных неорганических мембран, газоразделительные аппараты, мембранные системы для разделения плазмы крови, мембраны и мембранные элементы для очистки воды и органических жидкостей, мембраны и мембранное оборудование для современных методов анализа воды и др.

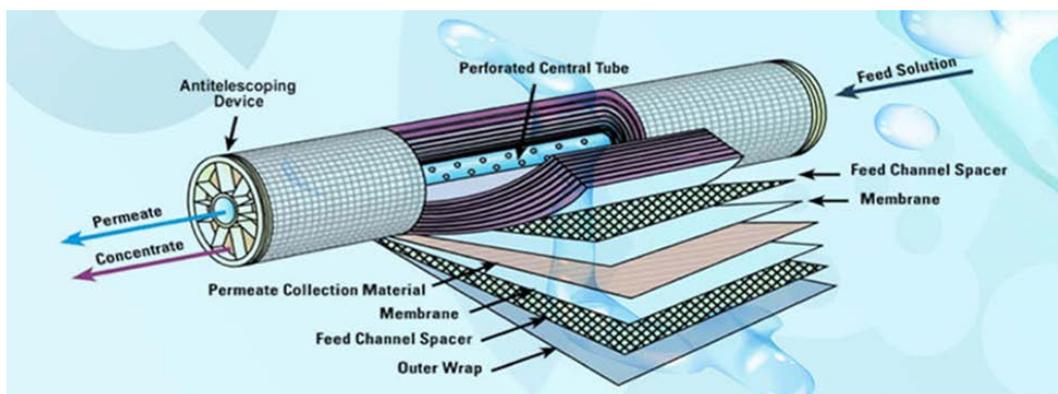


Рисунок 2. Мембранная технология очистки.

Организации, производящие мембранные установки и очистители воды, имеют самые разные родословные. Некоторые из них существовали еще в СССР и начали свою деятельность в области мембранной технологии более 20 лет назад. В основном они были созданы в новых экономических условиях частными предпринимателями, которые

правильно оценили растущий потенциал мембранных технологий.

Почти исключительно успешными на рынке были те компании, которые были основаны мембранными специалистами или набирали специалистов и выпускников РКГУ им. Д. И. Менделеева, которые оставались свободными.

За последние 3 года на рынке не появилось ни одной новой инжиниринговой компании. Слияния или укрупнения компаний также не произошло.

Большинство инжиниринговых компаний работают в области водоподготовки и питьевого водоснабжения, где практически не требуется никаких исследований. В Российской Федерации

насчитывается более 120 инжиниринговых компаний. Они крайне неравномерно распределены по регионам (Рис. 3), что определяется не промышленным потенциалом региона, а наличием специалистов (например, в Дальневосточном регионе нет инжиниринговых компаний).

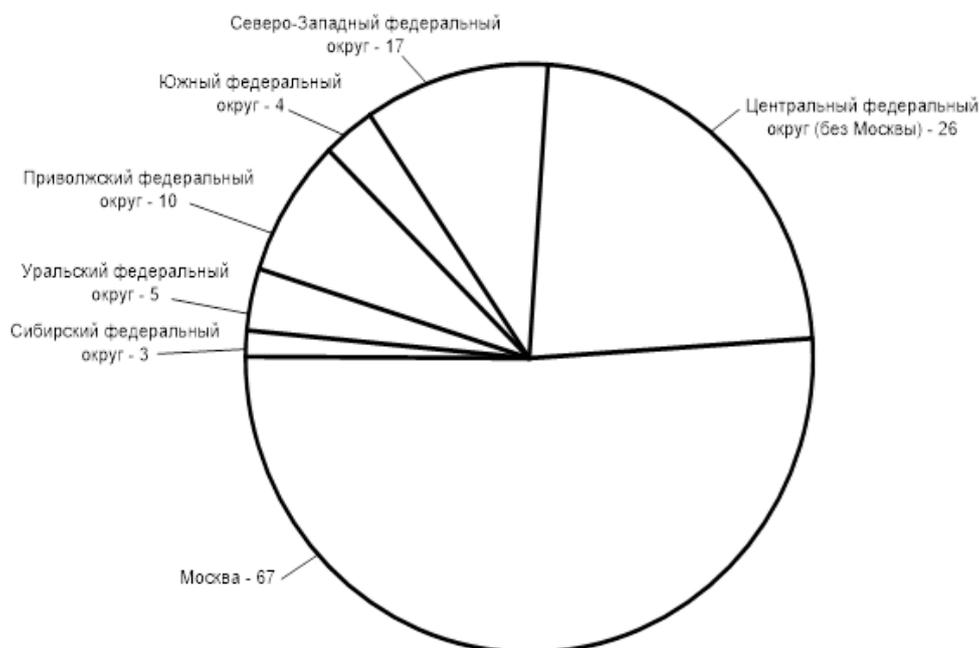


Рисунок 3. Региональное распределение инжиниринговых компаний

При всем разнообразии производителей мембранной техники, количество производителей мембран не изменилось за последние пять лет, и мы имеем их и имеем все необходимые предпосылки для того, чтобы занять свою нишу в этой высокотехнологичной сфере продукции и услуг.

Список литературы

1. Платэ Н.А. Промышленные процессы мембранного разделения газов / Н.А. Платэ, С.Г. Дургарьян Ю.П. Ямпольский // Химическая промышленность. - 1988. - №4. 3 – 6 с.
2. Ohno M. Comparison of gas membrane separation cascades using conventional separation cell and two-unit separation cells / M. Ohno, T. Morisue, O. Ozaki // J. Nucl. Sci. and Technol. - 1978. - v. 15. - №5. 376 – 379 p.

3. Maison S.L. Separation of gases with synthetic membranes / S.L. Matson, J. Lopez, J.A. Quinn // Chem. Eng. Sei. - 1983. - v.38. - №4 503-507 p.
4. Мулдер М. Введение в мембранную технологию / М. Мулдер. -М.: Мир, 1999. 337 с.
5. Hwang S.-T. Membranes in separations / S.-T. Hwang, K. Kammermeyer. - New York: Wiley-Interscience, 1975. 385 p.
6. Prasad R., Notaro F., Thompson D.R. Evolution of membranes in commercial air separation. // J. Membrane Sci., 1994. 225-248 p.
7. Мулдер М. Введение в мембранную технологию. М.: Мир, 1999. 513 с.
8. Бессарабов Д.Г., Бекман И.Н. Модель массопереноса в интегрированных мембранно-абсорбционных газоразделительных системах с подвижным селективным абсорбентом. // Вестн. Моск. Ун-та. Сер.2 Химия, 1993. 604-611 с.

УДК 628.16

Аверина Ю.М., Шепелева А.М., Субчева Е.Н., Абаева Е.А.

ПЕРСПЕКТИВЫ РОССИЙСКОГО РЫНКА СИСТЕМ ВОДОПОДГОТОВКИ В УСЛОВИЯХ КРИЗИСА

Аверина Юлия Михайловна – канд. техн. наук, доцент каф. ИМиЗК;
Шепелева Александра Мирославовна – студентка группы ТМ-46 каф. ИМиЗК;
Субчева Елена Николаевна – ассистент каф. ИМиЗК;
Абаева Екатерина Андреевна – магистр каф. ИМиЗК;
 РХТУ им. Д.И. Менделеева 125047 Москва, Миусская площадь дом 9

В данной статье описан сравнительный анализ технологического развития в области водоподготовки в России и за рубежом. Рассмотрены технологии водоподготовки, применяемые в России и за рубежом, проанализирован российский и зарубежный рынок в сфере водоочистки.

Ключевые слова: водоснабжение, очистка, фильтрация, мембраны

PROSPECTS FOR THE RUSSIAN MARKET OF WATER TREATMENT SYSTEMS UNDER THE CONDITIONS OF THE CRISIS

Averina Yu.M., Shepeleva A.M., Subcheva E.N., Abaeva E.A.

This article describes a comparative analysis of technological development in the field of water treatment in Russia and abroad. The technologies of water treatment used in Russia and abroad are considered, the Russian and foreign markets in the field of water purification are analyzed.

Key words: water supply, purification, filtration, membranes

Водоподготовка – это процесс обработки воды с целью доведения ее до заявленного качества. Вода для водоподготовки поступает из природных источников, которые бывают двух типов: подземные и поверхностные. Цель водоподготовки заключается в очистке воды от различных примесей (грубодисперсных, коллоидных), а также, от содержащихся в ней солей. Результатом водоподготовки является предотвращение отложений накипи, замедление процесса коррозии металла, а также уменьшение загрязнений обрабатываемых материалов технологических процессов [1-3].

В настоящее время имеется многообразие различных схем, методов и установок для водоподготовки. Использование той или иной схемы,

или метода подготовки воды зачастую объясняется выбором конкретного источника [4, 5]. Должна быть определена технологическая надежность и гигиеническая эффективность. Водоснабжение должно работать бесперебойно с соблюдением всех требований санитарного законодательства в области качества воды [6].

По оценкам, мировой рынок мембранной фильтрации оценивается в 13,5 млрд долларов США в 2019 году (таблица 1) и, согласно прогнозам, достигнет 19,6 млрд долларов США к 2025 году, при среднем показателе роста в 6,4% с 2018 по 2025 год. Растущие требования к безопасности воды и простоте очистки значительно подпитывают рынок мембранной фильтрации.

Таблица 1. Мировой рынок оборудования для очистки воды в 2019 году.

Ключевые технологии	Доход в млрд \$/год	Доля рынка, %
Мембранный биореактор	1,07	2
Мембрана обратного осмоса	2,91	5,4
Мембрана микрофильтрации	1,57	2,9
Ультрафильтрационная мембрана	2,00	3,7
Нанофильтрационная мембрана	0,71	1,3
Ультрафиолет	0,86	1,6
Озон	0,30	0,5
Хлорирование	1,68	3,1
Деминерализация	1,29	2,4
Обезвоживание осадка	2,84	5,3
Сушка осадка	1,19	2,2

Анализ отечественного и зарубежного опыта проблем станций водоподготовки, входящих в системы водоснабжения, позволяет говорить о том, что производство чистой воды может являться неустойчивым динамическим процессом. К основным причинам, которые усложняют работу сооружений станций водоподготовки, относятся:

- повышенный износ основного оборудования и сооружений, трубопроводов, арматуры;
- применение традиционных технологий (осветление, обесцвечивание, обеззараживание) и реагентов, которые не всегда обеспечивают соответствие качества очищенной воды нормативным требованиям в условиях повышенного загрязнения поверхностных источников воды;
- отсутствие обработки осадков отстойных сооружений и промывных вод фильтров, загрязнение ими окружающей среды [7-10].

Ожидается, что мировой рынок воды и очистки сточных вод вырастет в среднем на 6,5% с 2019 года и достигнет 211,3 млрд. долларов к 2025 году по данным Meticulous Research. Общий мировой рынок мембранных технологий оценивается на уровне порядка 15,6 млрд. долларов (2012 год), из него 5-6 млрд. долларов приходится на жидкофазные мембранные процессы, которые являются крупнейшим сегментом применения мембранных технологий. Распределение рынка мембранных технологий по сегментам в процентах приведены на рисунках 1 и 2.

Для улучшения положения российских компаний на мировом рынке, необходимо наличие устойчивых, экономичных, надежных и безопасных систем снабжения населения питьевой водой. Этого можно достичь при совместном использовании источников поверхностных и подземных вод при строгом соблюдении всех экологических норм, обеспечивающих их не истощительную эксплуатацию, а также при применении современных технологий водоподготовки.

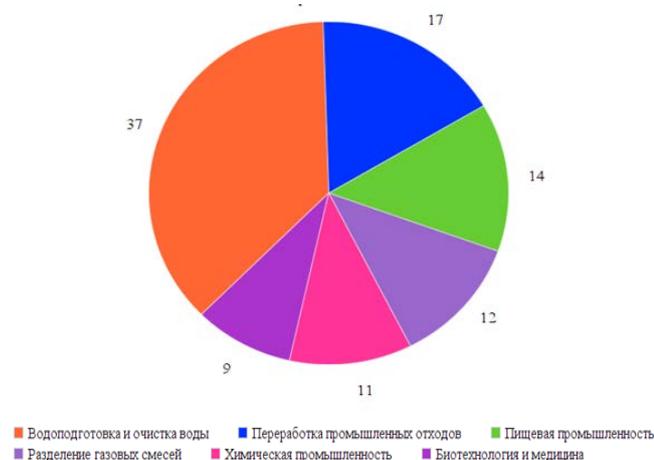


Рис.1. Сегменты потребления на рынке мембранных технологий в процентах.

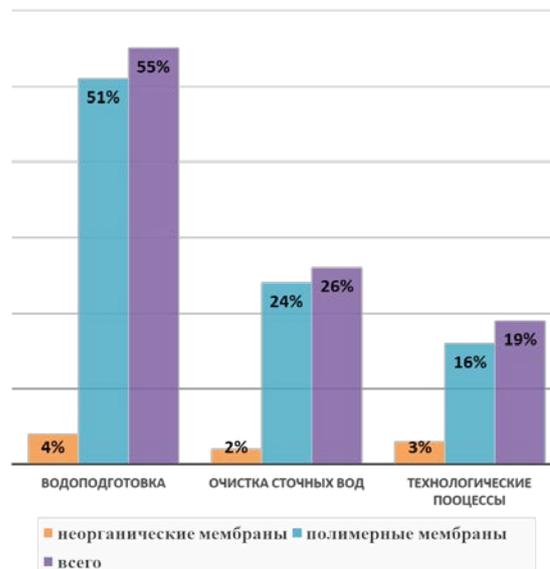


Рис. 2. Распределение продаж мембранных модулей по сферам их применения на мировом рынке.

Важную роль при этом играет экономия воды, поскольку неоправданно высокий объем забираемой и в значительной мере, теряемой при доставке потребителю и использовании воды — фактор, повышающий неустойчивость водоснабжения.

Существенно повысить технический уровень водоподготовки можно если:

- внедрить системы поддержки принятия оперативных инженерных решений,
- использовать прогрессивные методы обеззараживания воды с применением современных химических средств,
- проводить мониторинг качества воды в водопроводных сетях,
- поддерживать нормативный уровень качества сбрасываемых сточных вод в промышленности и коммунальном хозяйстве,
- модернизировать оросительные системы в сельском хозяйстве.

Таким образом, разработка и внедрение систем управления водными ресурсами и водохозяйственными системами на основе информационно-вычислительных комплексов, использующих гидрологические, эколого-экономические и экономико-математические модели, позволит значительно улучшить положение российских компаний на мировом рынке (рис. 3).

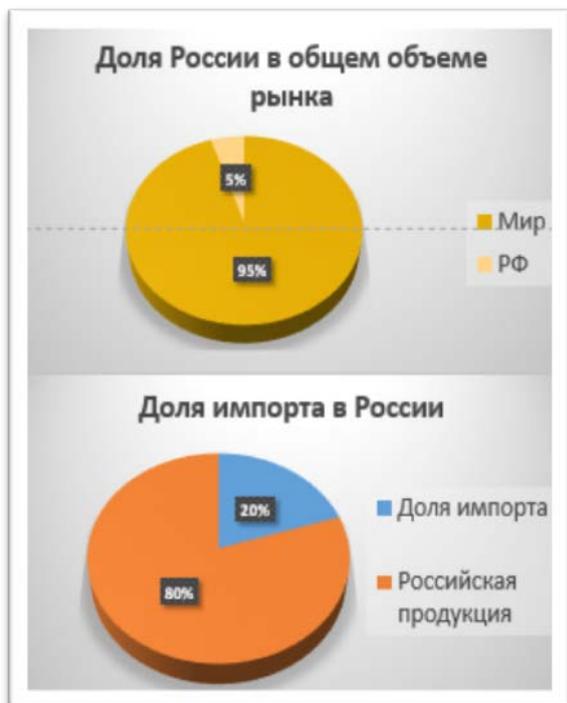


Рис. 3. Анализ динамики развития российского рынка мембранных модулей.

Объективные тенденции, такие как изменения климата, усиление дефицита воды, рост антропогенной нагрузки на экосистемы и т.п., таковы, что сложность задач управления водными ресурсами и водным хозяйством нарастают. Сохранение нынешнего уровня технической и методологической поддержки системы управления и квалификации занятых в ней кадров, неизбежно приведет к дальнейшему снижению качества управления. Опережающее (в сравнении с ростом сложности задач управления) повышение этого уровня абсолютно необходимо для решения проблем водного хозяйства. Россия должна выбрать путь интенсификации своей экономики, а для этого надо развивать не новые сырьевые отрасли взамен существующих, а ресурсосбережение. В полной мере это относится и к водопользованию, поскольку его эффективность у нас совершенно недостаточна, состояние водных объектов в промышленно развитых регионах неудовлетворительно, жилищно-коммунальный сектор пребывает на уровне — в лучшем случае — пятидесятилетней давности (если судить по развитым странам), а новые технологии водопотребления в сельском хозяйстве практически не внедряются. При выборе стратегии интенсификации водопотребления в собственном хозяйстве наша страна сможет принять активное и эффективное участие в разрешении проблемы дефицита пресной воды в Узбекистане, а также, возможно, в Казахстане и Туркменистане, поскольку у России в принципе есть все необходимое, чтобы стать технологическим лидером для этих республик.

Таким образом, маркетинговый анализ российского и зарубежного рынка показал, что мембранные технологии, а именно

микрофильтрация, ультрафильтрация, нанофильтрация, обратный осмос являются наиболее перспективными в области водоподготовки, но существенно не развитыми в России. Для компенсации отставания России должна быть в первую очередь снижена себестоимость производства. Анализ выручки крупнейших отечественных производителей мембранных модулей дал основания полагать, что целесообразно расширять российское производство.

Работа выполнена при финансировании РХТУ им. Д.И. Менделеева, ВИГ № X-2020-011.

Список литературы

1. Фрог Б.Н., Первов А.Г. Водоподготовка: учебник для вузов – Москва: Издательство Ассоциации строительных вузов (АСВ), 2014. – 507 с.
2. Громовласов А.А., Копылов А.С., Пильщиков А.П. Водоподготовка: процессы и аппараты. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 272 с.
3. Комягин Е.А., Мынин В.Н., Ляпин И.Ф., Аверина Ю.М., Лопатюк Ю.Ю., Терпугов Г.В., Терпугов Д.Г. Пути решения проблемы очистки сточных вод от тяжелых и радиоактивных металлов//Экология и промышленность России. 2008. № 11. С. 21-23.
4. Аверина Ю.М., Кабанов О.В., Кацерева О.В., Комляшов Р.Б., Сальникова О.Ю., Терпугов Г.В., Труберг А.А. Обезжелезивание природных вод с применением наномембран//Успехи в химии и химической технологии. 2009. Т. 23. № 2 (95). С. 14-17.
5. Водоподготовка: Справочник. / Под ред. д.т.н., С.Е. Беликова. М.: Аква-Терм, 2007. – 240 с.
6. Аверина Ю.М., Меньшиков В.В. Практическое изучение основ технологии обезжелезивания природных вод до питьевого качества различными режимами фильтрации с применением керамических мелкопористых трубчатых мембран//Успехи в химии и химической технологии. 2015. Т. 29. № 1 (160). С. 82-85.
7. Павлов Д.В., Вараксин С.О., Аверина Ю.М. Современная ресурсосберегающая система очистки промышленных сточных вод//Водоочистка. 2012. № 1. С. 10-14.
8. Хохрякова Е.А. Фильтры для очистки воды М.: Аква-Терм, 2013. — 102 с.
9. Averina J.M., Zhukov D.Y., Kurbatov A.Y., Kaliakina G.E., Panfilov V.I. Methods of intensification of iron-containing natural water purification processes//International Multidisciplinary Scientific GeoConference SGEM. 2018. Т. 18. № 1.5. С. 345-350.
10. Аверина Ю.М., Терпугов Г.В., Никитин В.А., Канделаки Г.И. Керамические трубчатые мембраны в качестве диспергирующего материала//Успехи в химии и химической технологии. 2010. Т. 24. № 2 (107). С. 47-51.

УДК

Челноков В.В., Балко С.А., Заболотная Е.

ЭНЕРГОРЕСУРСОЭФФЕКТИВНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПЕРЕРАБОТКИ УГЛЕВОДОРОДСОДЕРЖАЩИХ ОТХОДОВ ДЛЯ ИНФРАСТРУКТУРНОГО РАЗВИТИЯ

Челноков Виталий Вячеславович, д.т.н., профессор кафедры логистики и экономической информатики

Балко Сергей Алексеевич, студент 2 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга

e-mail: sab@mail.ru

Заболотная Елена, аспирант 3 года обучения факультета цифровых технологий и химического инжиниринга кафедры логистики и экономической информатики;

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

В статье рассмотрена возможность энергоресурсоэффективной технологии переработки углеводородсодержащих отходов. Проведен анализ инфраструктурного развития и предложены подходы к переработке углеводородсодержащих и органических отходов в высококалорийное горючее с организацией технологического процесса.

Ключевые слова: высококалорийное горючее, энергоресурсоэффективная технология, инфраструктурное развитие, углеводородсодержащие и органические отходы.

ENERGY-RESOURCE-EFFICIENT TECHNOLOGY FOR THE PROCESSING OF HYDROCARBON-CONTAINING WASTE FOR INFRASTRUCTURAL DEVELOPMENT

Chelnokov Vitaliy Vyacheslavovich, Balko Sergey Alexeevich, Zabolotnaya Elena

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

The article considers the possibility of energy-efficient technology for processing hydrocarbon-containing waste. The analysis of infrastructure development is carried out and approaches to the processing of hydrocarbon-containing and organic waste into high-calorific fuel with the organization of the technological process are proposed.

Keywords: high-calorific fuel, energy-efficient technology, infrastructure development, hydrocarbon-containing and organic waste.

Перечень направлений развития рынка для таких технологий переработки углеводородсодержащих отходов в энергоносители имеет все предпосылки активно развиваться. Перспективны сегменты переработки углеводородов в синтез-газ с дальнейшим использованием двигателей внутреннего сгорания (ДВС) для выработки электроэнергии с применением газификации угля, тяжелых фракций нефти, биотоплива, в частности, древесины. Приоритет этого топлива для такого применения определяется большим выходом летучих, обогащающих генераторный газ, исключительно низким содержанием золы и серы и высоким – кислорода. Последнее сокращает расход воздуха на газификацию и вместе с этим – содержание балластного N₂ в ее продуктах. Использование же газификации в установках с ДВС отмечается в литературе крайне редко, и нет примеров его представительного рассмотрения. Помимо затруднений, вызываемых относительно высоким содержанием золы и серы, при использовании угля существенно снижается качество генераторного газа, теплота его сгорания снижается при этом на ~ 20%. В промышленности РФ действующих установок с газификацией угля и ДВС, несмотря на отмеченную выше проблему и ажиотаж вокруг нее, практически нет. Однако и при использовании биотоплива в отечественных и зарубежных разработках показателей, сопоставимых с ожидаемыми в

рассматриваемом проекте, не достигнуто. Установок с газификацией угля и СПД на Западе нет.

Таким образом, реализация рассматриваемого проекта может обеспечить приоритет отечественных разработок в рассматриваемой области.

Кроме того, СПДК и СПДГН позволяют сжигать последовательно углеводороды и обеспечить раздельное получение товарного жидкого горючего топлива - сжиженного метана и сжиженных более тяжелых фракций в «баллонах». Остаточный газ – синтез-газ как горючее для генерации энергии обеспечения ХТС и на сторону. [1-3, 5].

Актуально создание технологий использования, переработки газовых ресурсов в местах добычи и других углеводородных композиций в системах с газовым двигателем и воспламенением от сжатия.

Технологии СПДК и СПДГН перспективны как более экономичные, а также позволяют достичь более высоких значений экологических показателей. Технологии СПДК и СПДГН обеспечивают решение инфраструктурных проблем зависимости транспортных предприятий от конъюнктуры на рынке жидких моторных топлив и их доставки в труднодоступные регионы [1, 4, 5].

Проблема снижения энергоёмкости национального продукта требует изыскания и внедрения энергоэффективных технологий во все сферы народного хозяйства. Это особенно актуально

для топливно-энергетического комплекса, обеспечивающего примерно четверть ВВП. Наиболее эффективным данное направление становится при сопутствующем привлечении в целях генерации энергии нетрадиционного углеводородсодержащего сырья, включая природный попутный (нефтяной) газ (ПП(Н)Г), газообразные, жидкие и твердые органические и синтетические углеводородсодержащие отходы агропромышленного, коммунального (ТКО), перерабатывающего и горнорудного комплексов. В таких перспективных сырьевых позициях входит номенклатура дешевых и стратегически приоритетных твердых топлив, прежде всего углей, посредством газификации которых в содержащий водород синтез-газ (СВСГ), обеспечивается реальная возможность создания энергоустановок на таком топливе с высоким КПД (значительно более 50%).

Производство пригодного горючего топлива из углеводородсодержащих и органических отходов прежде всего связано с получением синтез-газа, образующегося в процессе термохимических реакций (пиролиза) при высоких температурах с ограничением по доступу кислорода в систему переработки.

На рисунке 1 представлена принципиальная схема управляемой генерации водородсодержащего синтез-газа из углеводородов [2-4].

В основу вышеуказанной химико-технологической схемы положены классические принципы общей химической технологии.

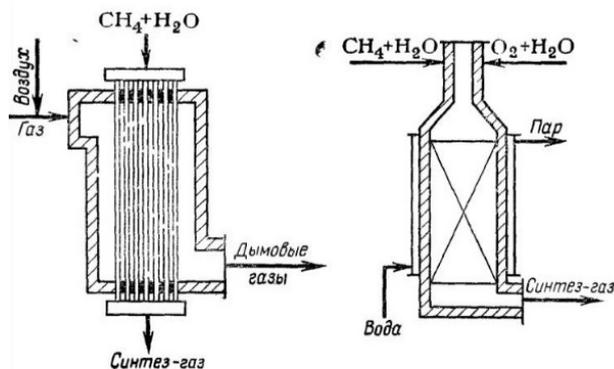


Рисунок 1. Принципиальная схема управляемой генерации водородсодержащего синтез-газа из углеводородного сырья

Синтез-газ после термической переработки отходов характеризуется нестабильностью состава и наличием высоко токсичных и способных к восстановлению диоксинов, а также фуранов и бензапиренов.

В связи с достаточно широкой сырьевой базой наибольший интерес представляет применение СВСГ в качестве ДВС [2-4]. При этом, многочисленными опытами установлена возможность полной нейтрализации токсичных диоксинов, а также фуранов и бензапиренов в

поршневых агрегатах при высоких значениях давления и температур систем внутреннего сгорания.

Исследованиями установлен, что применение СВСГ в качестве горючего для ДВС компонентной добавки или к газомоторному топливу считается даже предпочтительнее, чем чистого водорода, т. к. присутствующие в синтез-газе элементы сгорают вместе с водородом, образуя минимальное количество вредных выбросов в атмосферу. При этом, энергоустановки для производства синтез-газа синтезируют и потребляют водород сами, создавая условия отсутствия требований иметь специальное хранилище на транспортном или ином средстве для его хранения в сжатом или сжиженном состоянии. Кроме того, общий КПД силовой установки, включающей реактор для получения синтез-газа, повышается за счет использования для работы реактора теплоты отработавших газов двигателя.

В современных условиях конкуренции высокие эколого-экономические запросы к коммерчески привлекательным решениям по оптимизации процессов и организации автоматизированного управления смесеобразования и сгорания синтез-газа в цилиндрах двигателя требуют дальнейшего теоретического и экспериментального исследования для определения рациональных параметров рабочего цикла, которые обеспечили наиболее выгодное сочетание расхода топлива, мощности двигателя, эффективных и экологических показателей ДВС.

Однако, к сожалению, в настоящее время надежных экспериментальных и теоретических данных об особенностях организации рабочего цикла двигателей, работающих на синтез-газе недостаточно.

Для самовоспламенения в газовом двигателе необходима высокая степень сжатия, что трудно организовать в классическом варианте двигателя. Для изготовления необходимо использовать цилиндр, способный выдержать высокое давление. Исследованиями [2-5] установлено, что оптимально организовать впуск газа как в двухтактном двигателе. Перевод дизельного двигателя в режим газового дизеля - это самый эффективный способ конвертации с точки зрения решения энергоэкологических проблем по сравнению с существующими (зажиганием от искры и газодизельным процессом, где в качестве запальной дозы используется дизтопливо).

При использовании в качестве горючего топлива синтез-газ, до определенного предельного соотношения содержащий водород, важным технико-технологическим преимуществом является возможность переработки такого газа с применением двигателей внутреннего сгорания (ДВС) на основе или с модификацией типовых заводских аппаратно-узловых решений. При этом возможно значительно улучшить эксплуатационные качества и характеристики модифицированных конструкций таких двигателей в аспектах экологической безопасности выбросов в атмосферу после процессов

сгорания и по удельным показателям потребления, энергоэффективности, теплоотдачи и другим. Рядом научных групп специалистов [1, 2] разработаны опытные образцы и проведены исследовательские исследования с использованием систем искрового зажигания. На рисунке 2 представлена принципиальная схема генерации синтез-газа с использованием систем искрового зажигания.



Рисунок 2. Принципиальная схема генерации водородсодержащего синтез-газа с использованием систем искрового зажигания

Предложенные выше подходы к переработке углеводородсодержащих и органических отходов в высококалорийное горючее с организацией технологического процесса газового двигателя позволяют создать полноценный газовый двигатель с

внешним смесеобразованием и активаторами воспламенения, получаемыми из природного газа непосредственно на борту транспортной силовой установки (ТСУ).

Список литературы

1. Петров П. П. Свободнопоршневые двигатели в технологических установках. - Газохимия, 2008. - № 5. - С. 65-68.
2. Petrov P.P. Svobodnoporshnevyye dvigateli dlya gazovoi promyshlennosti. M.: NPF EKIP, 2009.
3. Савицкий А. И., Петров П. П., Савенков А. М. и др. Выбор гибридной силовой установки мобильных транспортных средств // Транспорт на альтернативном топливе. - 2011. - № 5 (24)
4. Chelnokov V.V., Glushko A.N., Matasov A.V. Impact of Organizational and Environmental Mechanism on the Hydrocarbon Production in the Arctic / Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences. – 2016 – V.7 – №.5 – P. 2765-2776.
5. Петров П. П., Савенков А. М., Савицкий А. И. Свободнопоршневые двигатели для газовой промышленности // Транспорт на альтернативном топливе. - 2009 - № 4(10). С. 53-57.

УДК: 535.3+535.5+535.8

Соломатин А.С., Панкрушина А.В., Царева Е.В., Мащенко В.И., Ермакова М.В.

ОПТИЧЕСКОЕ МАНИПУЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ

Соломатин Алексей Сергеевич, д.т.н., профессор, e-mail: Sotrudnica_UNC@mail.ru

Панкрушина Алла Вадимовна, к.т.н., доцент

Царева Елена Владимировна, к.т.н., доцент

Кафедра Информатики и Компьютерного Проектирования

Российский Химико-Технологический Университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

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

Мащенко Владимир Игоревич, к.х.н., с.н.с учебно-научной лаборатории теоретической и прикладной нанотехнологии Московский государственный областной университет (МГОУ) 141014, Московская область, г.Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24.

Ермакова Мария Вадимовна магистрант факультета Инженерная Академия Российского Университета Дружбы Народов

На основе новых жидкокристаллических композитов на основе 4-циано-4-октилосидифенила и боросилоксановых гелей предложены средства оптического манипулирования ультрадисперсными средами. Рассмотрено оптическое манипулирование для обеспечения многостадийных химических реакций, а также для обеспечения пространственно-неоднородного распределения (концентрации) частиц.

Ключевые слова: оптическая анизотропия, оптический пинцет, боросилоксановые гели, жидкокристаллические композиты.

OPTICAL MANIPULATION BASED ON LIQUID CRYSTAL COMPOSITES

Solomatina A.S., Pankrushina A.V., Tsareva E.V., Mashchenko V.I.*, Ermakova M.V.*

Department of Computer Science and Computer Engineering

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

*Moscow Region State University, 24 Very Voloshinoy str., 141014, Mytishi, Russia

Based on new liquid-crystal composites based on 4-cyano-4-octyloxydiphenyl and borosiloxane gels, optical manipulation of ultrafine media is proposed. Optical manipulation is considered for providing multi-stage chemical reactions, as well as for providing spatially inhomogeneous distribution (concentration) of particles.

Keywords: optical anisotropy, optical tweezers, borosiloxane gels, liquid crystal composites.

Введение

Целью данной работы о применении жидкокристаллических (ЖК) композитов [1,2] в оптическом манипулировании, являющейся продолжением [3-5], стала разработка средств обеспечения многостадийных химических реакций, а также заданного заранее пространственно неоднородного распределения определенных светоманипулируемых селективно сортов частиц. ЖК-композиты, предложенные в [3-6], служат основой для получения твист-структур [7], помещаемых последовательно с ЖК микролинзами [8, 9] в порах матрицы.

В практике светоманипулирования особое место занимает селективное манипулирование с помощью заранее выбранного по длине волны луча, соответствующего спектральному диапазону прозрачности именно (только) определенного сорта частиц (и притом с показателем преломления больше окружающей среды).

Для концентрации наибольшего количества частиц, попавших в луч, и в том числе не вполне прозрачных (давление света немного отталкивает их), лучи с одинаковой поляризацией скрещивают (собирают) в одной точке, своего рода накопителе частиц.

Оптический пинцет

Частица, если она поглощает или рассеивает свет, то давлением света перемещается вдоль луча от источника света. Если же частица преломляет (пропускает) свет того спектрального диапазона, которым она освещена, то будет втягиваться в луч (при показателе преломления больше чем у окружающей среды) или выталкиваться из луча (если показатель преломления меньше чем у окружающей среды). В первом случае частицы накапливаются в фокусе луча. Во втором случае частицы накапливаются в полове (кольцевого фокусирования) луче в его темной осевой части.

Тепловые колебания частицы позволяют ей выйти из слабо удерживающего ее луча с ростом температуры или по мере удаления в нефокусированном луче от источника, так как луч слабеет.

Матрица с расположенными в цилиндрических порах твист-регуляторами интенсивности на основе ЖК-композитов и ЖК линзами [8, 9] с фокусными расстояниями от десятков микрон до десятков миллиметров позволяет поляризованным (поляризация определяется при изготовлении матрицы и может быть распределена между порами по какому-либо выбранному заранее правилу) лучом манипулировать ультрадисперсными частицами.

Структуры из ориентированных кристаллитов переходят в ЖК-фазу и могут быть приложением электрического поля переориентированы [8] под другое фокусное расстояние линз ЖК при нагревании композитов выше 55°C - температуры плавления 8ОЦБ. Для нагрева требуются конструктивные электронагревательные элементы. Охлаждение ниже температуры плавления ориентированных ЖК-композитов 4-циано-4-октилосидифенил (8ОЦБ) на основе БС-геля приводит к кристаллизации ЖК и к долговременному фиксированию полученных микроструктур размерами от долей до десятков микрон ЖК-фазы в БС-матрицах, в зависимости от температурных режимов ориентирования и термофиксации композитов.

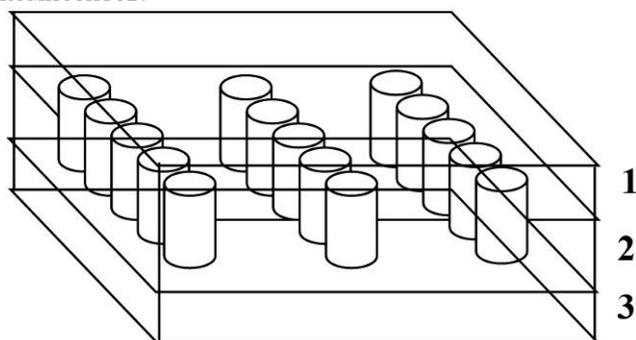


Рис. 1. 1 прозрачный слой над матрицей; 2 непрозрачный слой, в нем матрица цилиндрических пор, заполненных ЖК-композитом; 3 прозрачный слой под матрицей.

Оптический пинцет для многостадийного химического реактора.

Манипулируя селективно частицами, переместим (рис.2) частицы сортов А и В в объем, где они прореагируют друг с другом $A+B \rightarrow C$. Аналогично для компонентов реакции $D+E \rightarrow F$. Затем из емкостей с продуктами этих реакций продукты С и D перемещаются (рис.2) в области светоманипулирования селективно именно этими частицами (предполагается, что продукты С и D представлены в виде частиц) и снова обеспечивается реакция между селективно отобранными частицами $C+F \rightarrow G$. Таким образом, обеспечим селективным светоманипулированием достаточно интенсивный при невысокой температуре многостадийный химический процесс.

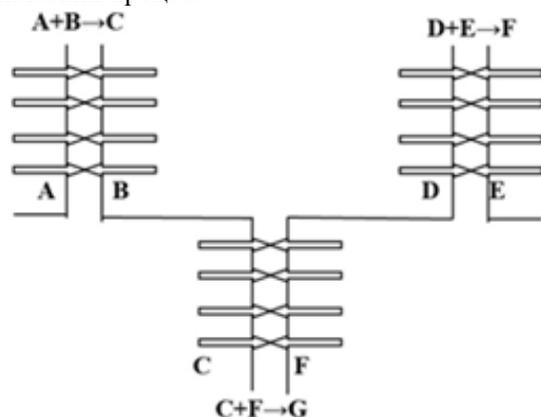


Рис.2. Оптическое манипулирование обеспечивает многостадийные химические реакции.

Оптический пинцет с концентрированием захваченных частиц в местах скрещивания лучей.

В местах скрещивания лучей с одинаковой поляризацией (рис.3) образуются максимумы интенсивности. Частицы, прозрачные в используемом спектральном диапазоне и имеющие показатель преломления больше чем у окружающей среды, передвигаются вдоль луча вблизи его оси и останавливаются (накапливаются) в максимумах интенсивности – в фокусе или в местах скрещивания лучей.

Как описано выше, матрица позволяет задать некое заранее определенное состояние поляризации лучей и тем самым (если две матрицы перпендикулярно друг другу направлены и лучи скрещиваются) задать в пространстве распределение максимумов интенсивности и путей передвижения частиц (вдоль оси лучей). Регулируя интенсивность лучей вплоть до минимума (погашения), можно отключать те или иные максимумы интенсивности в местах скрещивания лучей. Тогда накопленные в них частицы приходят в движение и перемещаются к следующему максимуму.

Таким образом, получается система контролируемого пространственного распределения частиц, селективно по длине волны (лучи могут быть разного цвета) и по поляризации (определяет максимумы в пересечениях лучей) накапливающихся в определенных точках (дискретных областях) и по мере регулирования интенсивности перегруппировывающихся. Скорость движения частиц неодинакова, зависит от интенсивности луча и прозрачности частицы (давление луча), размеров и формы частицы (сопротивление среды).

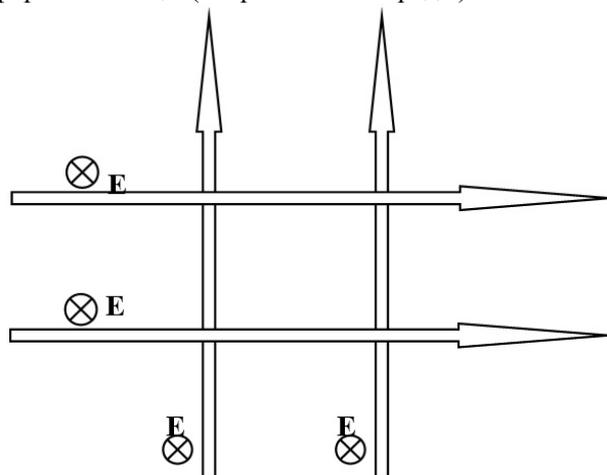


Рис.3. Оптическое манипулирование скрещенными лучами с регулируемой интенсивностью обеспечивает сортировку частиц по широкому ряду параметров.

Выводы

Основанная на ориентированных ЖК-композитах 4-циано-4-октилосидифенил (8ОЦБ) на основе БС-геля конструкция, позволяющая управлять в различных режимах распределением светового потока, обеспечивает оптическое манипулирование ультрадисперсными средами, их

сепарирование и избирательные химические реакции.

Список литературы

1. Пикин С.А., Блинов Л.М., Жидкие кристаллы. – М.: Наука, 1982. – 208 с.
2. Жаркова Г.М., Сонин А.С. Жидкокристаллические композиты. – Новосибирск: Наука. 1994. 214 с.
3. Соломатин А.С. Особенности формирования микроструктуры и оптические свойства жидкокристаллических композитных твист-ячеек / А.С. Соломатин, В.И. Машенко, Ю.О. Шашкова, В.В. Беляев // Вестник Московского Государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.53 - 63. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-2-53-63
4. Машенко В.И. Особенности формирования микроструктуры жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана / В.И. Машенко, Ю.О. Шашкова, А.С. Соломатин, В.В. Беляев // Вестник Московского Государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.34 - 45.
5. Машенко В.И. Микроструктуры жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана. Оптические свойства дисперсной жидкокристаллической структуры на их основе / В.И. Машенко, А.С. Соломатин, Ю.О. Шашкова, В.В. Беляев // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - № 3. - С.97 – 107. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-3-97-107
6. Беляев В.В., Машенко В.И., Соломатин А.С., Чаусов Д.Н. Способ получения смеси жидкого кристалла с полимером для дисплейной техники и оптоэлектроники // Патент России №0002607454. 2016.
7. Коншина Е.А. Оптика жидкокристаллических сред. – СПб: СПб НИУ ИТМО, 2012. – 99 с.
8. Невская Г.Е. Адаптивные линзы на основе жидких кристаллов. / Г.Е. Невская, М.Г. Томилин // Оптический журнал. – 2008. - Т.75. - №9. - С.35-48.
9. Соломатин А.С. Линзы на основе жидких кристаллов с неоднородным радиальным распределением директора // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2016. № 3. С. 37–45.

УДК: 535.3+535.5+535.8

Соломатин А.С., Панкрушина А.В., Царева Е.В., Мащенко В.И., Ермакова М.В.

ТРЕХМЕРНОЕ ОПТИЧЕСКОЕ МАНИПУЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ

Соломатин Алексей Сергеевич, д.т.н., профессор, e-mail: Sotrudnica_UNC@mail.ru

Панкрушина Алла Вадимовна, к.т.н., доцент

Царева Елена Владимировна, к.т.н., доцент

Кафедра Информатики и Компьютерного Проектирования

Российский Химико-Технологический Университет им.Д.И. Менделеева, Москва, Россия

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

Мащенко Владимир Игоревич, к.х.н., с.н.с учебно-научной лаборатории теоретической и прикладной нанотехнологии Московский государственный областной университет (МГОУ) 141014, Московская область, г.Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24.

Ермакова Мария Вадимовна магистрант факультета Инженерная Академия Российского Университета Дружбы Народов

Рассмотрено, для обеспечения многостадийной селекции частиц и трехмерного оптического манипулирования пространственно-неоднородными средами, применение новых конструктивных решений на основе 4-циано-4-октилосидифенила и боросилоксановых гелей.

Ключевые слова: оптическая анизотропия, оптический пинцет, боросилоксановые гели, жидкокристаллические композиты.

THREE-DIMENSIONAL OPTICAL MANIPULATION BASED ON LIQUID CRYSTAL COMPOSITES

Solomatin A.S., Pankrushina A.V., Tsareva E.V., Mashchenko V.I.*, Ermakova M.V.*

Department of Computer Science and Computer Engineering

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

*Moscow Region State University, 24 Very Voloshinoy str., 141014, Mytishi, Russia

The use of new design solutions based on 4-cyano-4-octyloxidiphenyl and borosiloxane gels is considered to provide multi-stage selection of particles and three-dimensional optical manipulation of spatially inhomogeneous media.

Keywords: optical anisotropy, optical tweezers, borosiloxane gels, liquid crystal composites.

Введение

Оптическое манипулирование, и в том числе пространственно неоднородное распределение спектрально селективных светоориентируемых частиц и трехмерное манипулирование ими, конструктивные решения и новые жидкокристаллические (ЖК) композитные [1,2] материалы рассмотрены в данной работе, являющейся продолжением [3-5]. Предложено использовать микроструктуры ЖК в боросилоксановых (БС) [3-6] композитах для формирования твист-структур [7] регуляторов интенсивности поляризованного света и микролинз [8,9] для фокусировки луча.

Оптический пинцет

Микроструктуры ЖК размещаются в цилиндрических порах матрицы (рис.1). Фокусные расстояния микролинз ЖК составляют от десятков микрон до десятков миллиметров. Твист-структуры регулируют интенсивность луча, управляемые электрическим полем прозрачных торцевых электродов. Поляризация задается при изготовлении матрицы по какому-либо правилу индивидуально

для каждой цилиндрической поры. Интерес представляет возможность в дискретные периоды времени перенастраивать фокусные расстояния микролинз ЖК, которые в остальное время энергонезависимы.

К долговременному фиксированию полученных микроструктур приводит охлаждение ниже температуры плавления ориентированных ЖК-композитов 4-циано-4-октилосидифенил (8ОЦБ) на основе БС-геля. Кристаллизация ЖКс размерами, в зависимости от температурных режимов ориентирования и термофиксации композитов, от долей до десятков микрон ЖК-фазы в БС-матрицах. Требуется конструктивные электронагревательные элементы, чтобы приложением электрического поля переориентировать [8] под другое фокусное расстояние линзы ЖК при нагревании композитов выше 55°C - температуры плавления 8ОЦБ (структуры из ориентированных кристаллитов переходят в ЖК-фазу).

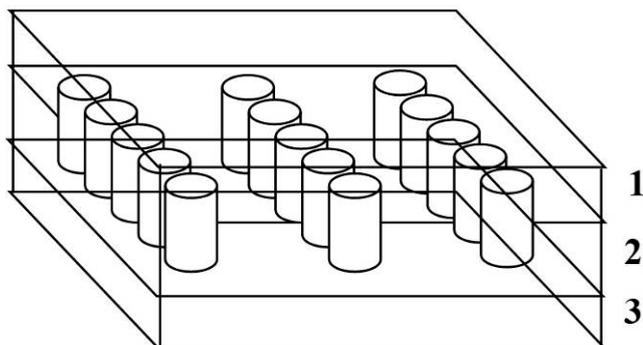


Рис. 1. 1 прозрачный слой над матрицей; 2 непрозрачный слой, в нем матрица цилиндрических пор, заполненных ЖК-композитом; 3 прозрачный слой под матрицей.

Луч поляризованного света заданного спектрального диапазона избирательно захватывает частицы, прозрачные в данном диапазоне, с показателем преломления больше, чем у окружающей среды, и притом по размеру меньше или сопоставимые с длиной волны. Захваченные частицы смещаются к оси луча и давлением света перемещаются к его фокусу. Если показатель преломления прозрачной частицы меньше, чем у окружающей среды, то частица смещается в темную область – выходит из луча или, если луч полый (сфокусирован в кольцевое сечение), то захватывается в осевой части. Если частица в заданном спектральном диапазоне непрозрачна, то она отталкивается лучом света и постепенно выходит из луча.

Оптический пинцет обеспечивает селекцию частиц по их способности покидать луч света

Для селекции частиц по комплексу характеристик часто используют мембранные технологии. В данной работе предлагается это сделать оптическим манипулированием. Способность частиц выйти из луча определяется тепловыми колебаниями (температурой среды), прозрачностью частицы, ее показателем преломления, размерами и формой частицы, а также градиентом интенсивности потока излучения в поперечном сечении луча. Вблизи (рис.2) матрицы с порами – источниками лучей света область с исходной смесью частиц в прозрачной среде. Луч света захватывает удобные для манипулирования частицы, остальные из луча вытесняются, и затем луч перемещает частицы за экран с отверстиями (отверстия напротив пор матрицы), находящийся на расстоянии от матрицы несколько меньше фокусного. Затем луч подвергается перефокусировке и перемещает частицы за следующий экран. И так несколько раз. По мере удаления от матрицы, луч слабее удерживает частицы, и они разделяются по способности выходить из луча под влиянием тепловых колебаний.

В результате в каждой локальной области между перфорированными экранами соберется своя отдельная по составу смесь частиц, что и требовалось. Кроме того, состав смеси сильно зависит от температуры – от тепловых колебаний, выводящих частицы из луча. Также смесь в принципе зависит от спектрального поддиапазона луча – определяющего сорт частиц, прозрачных в данном диапазоне. Интенсивность каждого индивидуального луча, регулируемая в широком диапазоне, позволяет создать любую заданную пропорцию различных по способности покидать луча захваченных частиц, накопившихся в каждой из областей между перфорированными экранами. Таким образом, можно обеспечить широкое разнообразие собранных в областях между перфорированными экранами смесей светоориентируемых частиц.

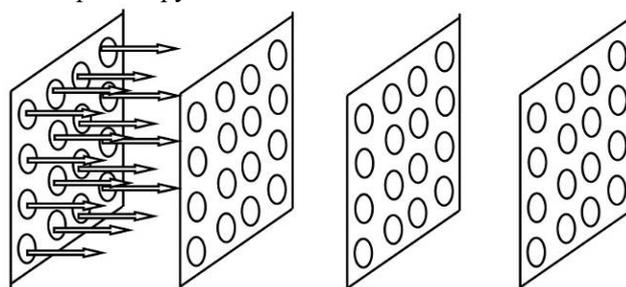


Рис.2. Оптическое манипулирование обеспечивает сортировку частиц по способности покидать луч света.

Оптический пинцет обеспечивает трехмерное манипулирование и селекцию частиц

Используя три взаимно перпендикулярно ориентированные матрицы (рис.1), можно сосредотачивать светоманипулируемые (подходящие по прозрачности в используемом спектральном диапазоне, величине показателя преломления, размерам) частицы в местах пересечения лучей с одинаковой поляризацией света, так как там будут максимумы интенсивности. По мере надобности, регулируя интенсивность индивидуального луча, можно отменять максимум в какой-то определенной точке, и тогда частицы пойдут вдоль интенсивного луча до следующего максимума интенсивности. Таким образом, можно создавать безо всяких перфорированных экранов любую по сложности трехмерную заранее заданную картину распределения светоориентируемых частиц для данного используемого спектрального диапазона или комбинации спектральных диапазонов (сортов частиц) и перемещать их вполне контролируемо от одной локальной окрестности (точки) пересечения лучей до заранее выбранной другой точки, то есть перестраивать трехмерное распределение частиц по своему усмотрению.

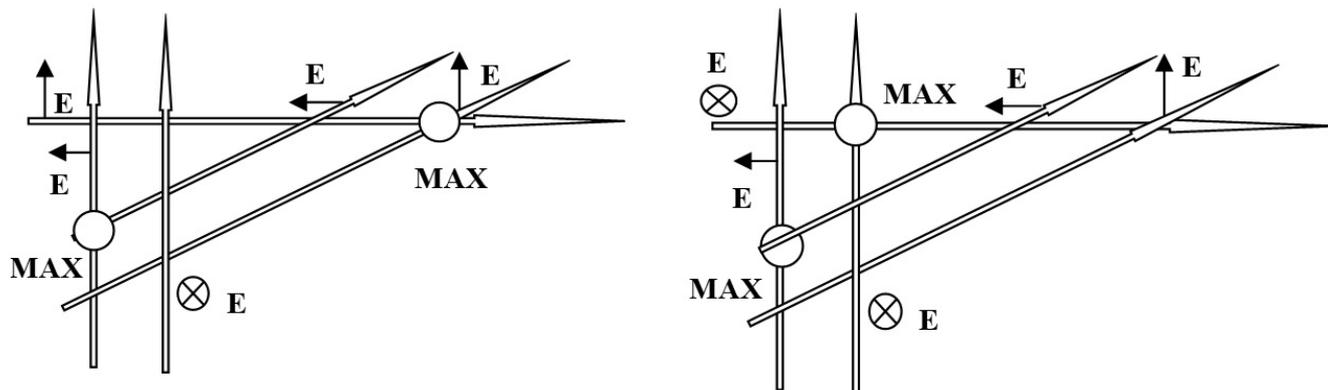


Рис.3. Трехмерное оптическое манипулирование частицами.

Выводы

Оптическое манипулирование ультрадисперсными средами и их многоступенчатое сепарирование в различных режимах распределения светового потока обеспечивает конструкция, основанная на ориентированных ЖК-композициях 4-циано-4-октилксилоксибензил (8ОЦБ) на основе БС-геля.

Показана перспективность оптического манипулирования для сепарирования смесей частиц и в том числе формирования смесей с заранее предопределенным составом.

Показана возможность формирования трехмерно распределенной и в том числе резко дискретной – в максимумах интенсивности - концентрационной неоднородности смеси частиц в прозрачной среде (жидкости) и возможность быстро и контролируемо перестраивать объемное концентрационное распределение частиц в широких пределах

Список литературы

1. Пикин С.А., Блинов Л.М., Жидкие кристаллы. – М.: Наука, 1982. – 208 с.
2. Жаркова Г.М., Сонин А.С. Жидкокристаллические композиты. – Новосибирск: Наука. 1994. 214 с.
3. Соломатин А.С. Особенности формирования микроструктуры и оптические свойства жидкокристаллических композитных твист-ячеек / А.С. Соломатин, В.И. Мащенко, Ю.О. Шашкова, В.В. Беляев // Вестник Московского Государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.34 - 45. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-2-34-45

Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.53 - 63. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-2-53-63

4. Мащенко В.И. Особенности формирования микроструктуры жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана / В.И. Мащенко, Ю.О. Шашкова, А.С. Соломатин, В.В. Беляев // Вестник Московского Государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.34 - 45. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-2-34-45

5. Мащенко В.И. Микроструктуры жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана. Оптические свойства дисперсной жидкокристаллической структуры на их основе / В.И. Мащенко, А.С. Соломатин, Ю.О. Шашкова, В.В. Беляев // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - № 3. - С.97 – 107. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-3-97-107

6. Беляев В.В., Мащенко В.И., Соломатин А.С., Чаусов Д.Н. Способ получения смеси жидкого кристалла с полимером для дисплейной техники и оптоэлектроники // Патент России №0002607454. 2016.

7. Коншина Е.А. Оптика жидкокристаллических сред. – СПб: СПб НИУ ИТМО, 2012. – 99 с.

8. Невская Г.Е. Адаптивные линзы на основе жидких кристаллов. / Г.Е. Невская, М.Г. Томилин // Оптический журнал. – 2008. - Т.75. - №9. - С.35-48.

9. Соломатин А.С. Линзы на основе жидких кристаллов с неоднородным радиальным распределением директора // Вестник МГОУ. Серия: Физика-математика. 2016. № 3. С. 37–45.

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

УДК 681.65

Абрамов А.А., Цыганков П.Ю., Меньшутина Н.В.

ИЗУЧЕНИЕ МЕТОДОВ И ТЕХНОЛОГИЙ ТРЕХМЕРНОЙ ПЕЧАТИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

Абрамов Андрей Александрович, студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: druci@mail.ru;

Цыганков Павел Юрьевич, к.т.н., ведущий инженер международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий;

Меньшутина Наталья Васильевна, д.т.н., профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов управления, руководитель международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий;

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

Изучены технологии формирования трехмерных объектов с использованием полимеров. Технология прямой чернильной печати рассматривается как один из способов получения трехмерных объектов с использованием вязких материалов. Произведена модернизация коммерческого 3D принтера с целью реализации процесса трехмерной печати гелевыми материалами. Для модернизированного устройства подобран состав чернил, обладающий подходящими реологическими свойствами. Произведена трехмерная печать гелевыми материалами.

Ключевые слова: аддитивное производство, 3D- печать, гелевые материалы, прямая чернильная печать.

STUDYING METHODS AND TECHNOLOGIES OF 3D PRINTING FOR OBTAINING HIGHLY-POROUS MATERIALS

Abramov A.A., Tsygankov P.U., Menshutina N.V.

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

The technology of forming three-dimensional object using polymers are studied. Direct ink writing is considered as one of the ways to obtain three-dimensional objects using viscous materials. The commercial 3D printer was modernized to implement the process of three-dimensional printing with gel materials. An ink composition having suitable rheological properties has been selected for the upgraded device. The three-dimensional printing using gel materials is made.

Keywords: additive manufacturing, 3D printing, gel material, direct ink writing

3D печать является одним из способов получения трехмерных объектов со сложной геометрией путем послойного нанесения материала. Данный способ обеспечивает уменьшение отходов при производстве, в отличие от традиционных способов формования, которые подразумевают удаление лишнего материала [1].

Трехмерная печать является быстроразвивающейся отраслью, что обуславливает ее применение во многих сферах человеческой деятельности: архитектуре, строительстве, медицине, фармацевтике и так далее. На сегодняшний день существует огромное разнообразие методов и технологий трехмерной печати, которые классифицируются в зависимости от исходных материалов и способов воздействия на них. Однако, наиболее востребованными являются технологии послойного наплавления [2] и стериолитографии [3]. Востребованность описанных технологий обусловлена их простотой, большим выбором материалов, скоростью процесса и наименьшим количеством дефектов у получаемых изделий, по сравнению с другими технологиями.

Технология послойного наплавления (Рис. 1) предполагает использования термопластичных

полимеров таких как: ПЛА (полилактид), АБС (акрилонитрил бутадиен стирол), нейлон и другие. Во время процесса трехмерной печати выбранный материал подается в экструдер-устройство, предназначенное для послойного формирования изделия. В экструдере располагается нагревательный элемент, который позволяет нагреть материал до температуры плавления и обеспечить беспрепятственное нанесение на поверхность рабочей области. Экструдер перемещается по контуру модели, формируя слои до тех пор, пока не будет сформирована заданная геометрия изделия. Основным недостатком, рассматриваемой технологии, является невысокая скорость печати.

Разработанная Чарльзом Халлом технология стериолитографии (Рис. 2), в отличие от послойного наплавления характеризуется высокой скоростью печати и качеством получаемых изделий. Однако, данная технология может использовать только полимеры, которые подвергаются отверждению под действие определенного излучения, что ограничивает выбор материалов. Во время процесса печати источник излучения перемещается в соответствие с контуром цифровой модели по емкости с фотоактивным полимером. Данный

процесс инициирует реакцию фотополимеризации и обуславливает отверждение полимера в заданных областях. После завершения слоя происходит перемещение рабочей поверхности на величину толщины слоя и процесс повторяется. Данные операции повторяются до полного формирования геометрии изделия.

Существенным недостатком перечисленных методов является ограниченный набор применяемых материалов. Поэтому в настоящее время исследуются новые материалы и технологии для реализации процесса трехмерной печати, что позволит существенно расширить область применения аддитивных технологий. Одним из наиболее перспективных методов получения новых материалов с использованием процессов трехмерной печати является прямая чернильная печать [4].

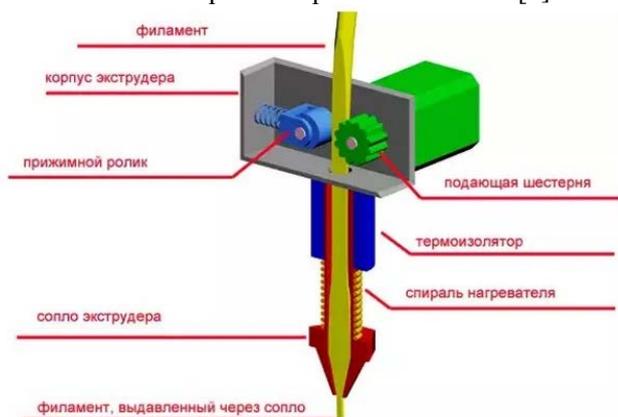


Рис. 1. Реализация технологии послойного наплавления



Рис. 2. Реализация технологии стереолитографии

Метод прямой чернильной печати позволяет получать мезо- и микроструктуры с использованием экструзии. Не смотря на кажущуюся схожесть с технологией послойного наплавления, метод прямой чернильной печати (Рис.3) подразумевает использование вязких материалов, а не термопластичных полимеров. После нанесения на поверхность рабочей области происходит их отверждение за счет испарения, гелеобразования, реакций, вызванных растворителем, или других процессов, что приводит к формированию устойчивой трехмерной структуры.

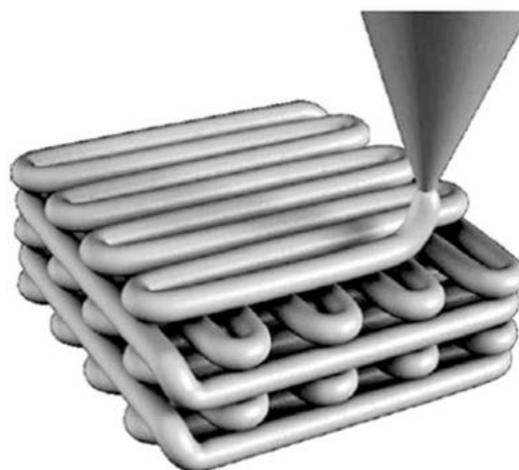


Рис.3. Реализация метода прямой чернильной печати

В настоящий момент существуют большое разнообразие материалов для реализации данной технологии:

- коллоидные материалы
- материалы с наполнителем из наночастиц
- органические материалы с летучей средой
- полиэлектролитные материалы
- золь-гель материалы

Как и другие технологии трехмерной печати, прямая чернильная печать имеет свои недостатки, одним из которых является сложность выбора состава материалов для печати. Это обусловлено тем, что они должны обладать определенными реологическими свойствами, обеспечивать беспрепятственное прохождение через устройство экструзии и сохранять форму после осаждения на поверхность рабочей области. Таким образом, разработка новых материалов для печати является актуальной задачей, в том числе разработка состава чернил для получения высокопористых материалов, таких как аэрогель.

Устройство 3D принтера, реализующего данную технологию, оснащается насосом или шприцом, для обеспечения проталкивания вязкого материала через сопло для нанесения на поверхность рабочей области. Основными отличиями в устройствах печати являются: конструкция сопла, конструкция продавливающего устройства, а также система управления движением печатающего элемента.

Форма и диаметр сопла определяет толщину продавливаемого материала, что влияет на качество получаемого изделия и на тип материала для печати (т.е. его вязкость, наличие наноматериалов). Конструкция продавливающего устройства определяет возможность контроля объемного расхода материала, точность подачи, а также скорость, с которой может происходить процесс получения трехмерных объектов. Система управления движением является определяющим параметром при выборе материала печати, скорости ведения процесса, точности получаемого изделия и максимальных размеров изделия.

Рассмотренные факторы оказывают значительное влияние на стоимость устройства печати и производительность технологии прямой чернильной печати. Разработка устройства, реализующего данную технологию также является актуальной задачей для минимизации стоимости и увеличения производительности технологии прямой чернильной печати.

В данной работе произведена разработка и модернизация конструкции 3D принтера для реализации метода прямой чернильной печати. В рамках данного метода был подобран состав вязких материалов на основе альгината натрия и произведен процесс трехмерной печати с их использованием.

Формирование трехмерных объектов с помощью разработанной конструкции 3D принтера и выбранного состава материала состоит из нескольких этапов. Первым этапом является формирование трехмерных моделей в среде автоматизированного проектирования Autodesk Inventor 2019. После чего следует этап преобразования трехмерной модели в специальном программном обеспечении- слайсере. В качестве данного программного продукта выступает программа RepetierHost. Ее функционал позволяет производить точную настройку процесса печати, а именно скорости формирования слоя, его толщину, а также материала для печати. Заключительным этапом является трехмерная печать разработанных моделей. Процесс печати проводится при скорости перемещения печатающего устройства 7 мм/с, температура рабочей области 20°C, экструдера 25°C. Объемный расход гелевого материала составил 275 мм³/с. Результат печати представлен на рисунке 4.

После окончания процесса печати полученные образцы помещаются в раствор 1 масс.% CaCl₂ для завершения этапов формирования твердой трехмерной структуры. Полученные материалы могут найти применение в электронике,

медицине, а также как один из способов доставки лекарственных препаратов.

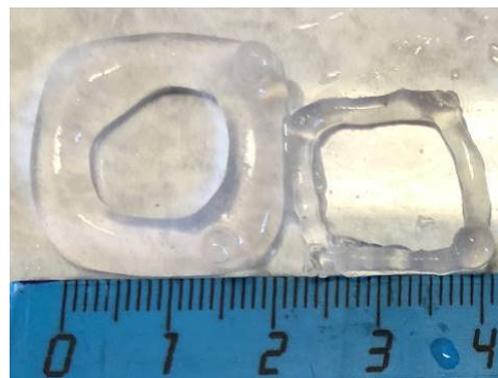


Рис. 4. Материалы, полученные с использованием процесса трехмерной печати

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

Список литературы

1. Ivanova O., Williams C., Campbell T. Additive manufacturing (AM) and nanotechnology: promises and challenges // *Rapid Prototyping Journal*. – 2013. – vol. 19, № 5. – pp. 353-364.
2. Dudek P. FDM 3D printing technology in manufacturing composite elements // *Archives of Metallurgy and Materials*. – 2013. – vol. 58, № 4. – pp. 1415-1418.
3. Hull C. W. Apparatus for production of three-dimensional objects by stereolithography // *Book Apparatus for production of three-dimensional objects by stereolithography* / EditorGoogle Patents, 1986.
4. Mortara L., Hughes J., Ramsundar P. S., Livesey F., Probert D. R. Proposed classification scheme for direct writing technologies // *Rapid Prototyping Journal*. – 2009.

УДК 004.421+614.75

Авинова Е.Ю., Михайлова П.Г.

РАЗРАБОТКА БАЗЫ ДАННЫХ ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ И МАРКИРОВКИ ОПАСНЫХ ГРУЗОВ

Авинова Екатерина Юрьевна, студент 2 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Михайлова Павла Геннадьевна, к.т.н., доцент, доцент кафедры компьютерно-интегрированных систем в химической технологии, e-mail: mikhaylova_pavla@muctr.ru;

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

На основе анализа международной и отечественной документации разработана база данных по опасным грузам, в которой содержатся сведения по свойствам, классу опасности и маркировке груза, а также по сопроводительной документации, необходимой для безопасной перевозки. Реализован веб-интерфейс базы данных с использованием HTML, PHP, CSS и JavaScript.

Ключевые слова: безопасное обращение, опасные грузы, грузы с опасными химическими веществами, база данных.

DEVELOPMENT OF A DATABASE FOR CLASSIFICATION AND LABELLING OF DANGEROUS GOODS

Avinova E. Y., Mikhaylova P. G.

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

Based on the analysis of international and domestic documentation, the structure of the database on dangerous goods has been developed, which contains information on the properties, hazard class and marking of the cargo, as well as on the accompanying documentation necessary for safe transportation. Implemented a web-based database interface using HTML, PHP, CSS, and JavaScript.

Keywords: safe handling, dangerous goods, goods with hazardous chemicals, database.

Введение

Объемы использования химической продукции, в том числе ее транспортировка, ежегодно увеличиваются. Кроме того, в мире каждый год синтезируются новые виды химических веществ и смесей. Недостовверная оценка и недостаточное информирование об их опасности может привести к возникновению различных инцидентов и аварий.

Для обеспечения безопасности при транспортировке опасных грузов важную роль играет определение класса опасности и маркировки, что, в свою очередь, влияет на выбор оборудования для перевозки, минимизацию риска возникновения аварийных ситуаций, а также на принятие эффективных мер по локализации и ликвидации аварий.

При категорировании опасных грузов и определении их транспортной маркировки необходимо учитывать, что одни и те же вещества, из которых состоит груз, могут обладать несколькими видами опасности. Например, груз может представлять собой взрывчатое вещество, и одновременно относиться к токсичным веществам.

Классификация и маркировка опасных грузов в России осуществляется на основе [1, 2]. Согласно [1], если груз относится к нескольким классам опасности, то определяется приоритет класса

опасности в соответствии с таблицей 2 данного ГОСТа. Исключение составляют классы опасности, перечисленные в п. 5.7.3 [1], так как данные классы всегда являются приоритетными.

Основными документами в области регулирования перевозок опасных грузов различными видами транспорта являются [3-6].

Для обеспечения безопасности при транспортировке опасных грузов автомобильным, железнодорожным, авиа- и морским транспортом разработаны аварийные карточки, письменные инструкции и др. в соответствии с [3-7]. В них содержится информация по средствам индивидуальной защиты, мерам первой помощи, средствам нейтрализации, а также действиям, необходимым при возникновении аварийных ситуаций.

Для определения класса опасности, транспортной маркировки, обеспечения безопасности, предупреждения, локализации и ликвидации аварий при транспортировке грузов с опасными химическими веществами необходимы данные об их физико-химических, токсических и экотоксических свойствах.

Поиск актуальной, полной и достоверной информации по опасным грузам является достаточно трудоемкой задачей. Для этого могут использоваться

данные проектной документации, паспортов безопасности химических веществ, карточек перевозимых грузов, результаты исследований и испытаний, базы данных и программное обеспечение (ПО), а также другие информационные источники.

Анализ специализированных программных комплексов [11] показал, что они как правило, ориентированы на перевозку грузов одним видом транспорта, а в информационных системах по свойствам химических веществ [12 – 14] не отражаются детальные требования к опасным веществам/грузам, включенные в национальное законодательство.

В настоящей работе представлены результаты разработки отдельных частей программного комплекса для классификации и маркировки грузов с опасными химическими веществами. Одной из таких частей является база данных (БД).

Разработка структуры базы данных

С использованием программного комплекса SyBase PowerDesigner (пробная версия) [8] разработана логическая модель (структура) базы данных по классификации и маркировке опасных грузов с учетом норм и правил российского и международного законодательства [1 – 7].

Логическая модель выполнена в виде ER-диаграммы (от англ. entity-relationship model, модель «сущность-связь»). Физическая модель (структура) базы данных реализована в полном соответствии с логической с использованием [8], а также MySQL менеджер, который является составляющей Open Server Panel (доступ – свободный) [9]. Open Server Panel – это удобная платформа для разработки, отладки и тестирования веб-проектов, а также для предоставления веб-сервисов в локальных сетях. Данный программный комплекс также использован для заполнения таблиц.

Структура базы, представленная в [15] дополнена 20 таблицами (всего 27 таблиц), содержащих сведения о свойствах (физико-химических, токсических, экотоксических), классах опасности химической продукции и грузов, их транспортной маркировке, аварийным карточкам и

инструкциям при различных видах перевозки.

Реализация веб-интерфейса базы данных

Реализован веб-интерфейс базы данных с использованием HTML, PHP, CSS и JavaScript. Для подключения сайта к базе данных, вывода значений и других целей используется PHP (Hypertext Preprocessor, препроцессор гипертекста) версии 7.3.

В системе разграничены права пользователей. Можно выделить две роли: гость и администратор.

Функция, которую может выполнять гость – это просмотр информации. Пользователям с ролью «гость» не требуется регистрация на сайте. Функции администратора: просмотр информации, редактирование, удаление и добавление данных, для выполнения которых требуется регистрация.

База данных выполняет ряд следующих функций:

1. Просмотр информации:

- о видах опасности по физико-химическим, токсическим и экотоксическим свойствам веществ в соответствии с [10];

- о классах опасности груза в соответствии с [1];

- о маркировке груза и о видах знаков опасности в соответствии с [2];

- об аварийных карточках при перевозке груза ЖД, авиа-, морским транспортом в соответствии с [4 – 7], а также письменных инструкций при перевозке опасных грузов автомобильным транспортом в соответствии с [3].

2. Вывод значений, а именно: поиск по наименованию, номеру ООН и классификационному шифру опасного груза информации по основным свойствам, показателям опасности груза и его компонентов; классу опасности и соответствующей данному грузу маркировке, аварийных карточек и письменных инструкций при различных видах перевозок.

На рисунке 1 представлен фрагмент страницы для поиска информации.

На рисунке 2 представлен фрагмент страницы по результату поиска на примере азота охлажденного жидкого (номер ООН 1977).

БАЗА ДАННЫХ ПО ОПАСНЫМ ГРУЗАМ			
Поиск	Введите: наименование, номер ООН, классификационный шифр		
Войти	<input type="text"/>	<input type="button" value="Найти"/>	
Все грузы			
№ п.п.	Наименование груза	Номер ООН	Классификационный шифр
1	Азот охлажденный жидкий	1977	2213
2	Алюминия нитрат	1438	5113
3	Агидол-1	3077	9063
4	Кислота изовалериановая	3265	8012
5	Метилхлороформ	2831	6113
6	Дибромметан	2664	6113
7	Тетрахлорэтан	1702	6112
8	Аллилформиат	2336	3021

Рис. 1. Страница поиска

Азот охлажденный жидкий	
Поиск	<u>Номер ООН:</u> 1977
Войти	<u>Классификационный шифр:</u> 2213
Основные свойства:	
<u>Тип груза:</u> Индивидуальное вещество	
<u>Синоним:</u> Азот; Азот жидкий технический первого, второго сорта; NITROGEN N2; Азот чистоты 99,988%	
<u>Агрегатное состояние:</u> Сжиженный газ	
<u>Внешний вид:</u> Бесцветная жидкость	
<u>Применение:</u> Азот N применяется в химической промышленности для синтеза аммиака, для создания низких температур, используется в качестве инертной среды при проведении некоторых химических реакций, для наполнения электрических ламп, при электросварке металлов.	

Рис. 2. Результаты поиска на примере азота охлажденного жидкого (номер ООН 1977)

На данный момент в базе содержатся сведения о 57 грузах, представляющих собой как индивидуальные вещества, так и смеси.

Сочетание функциональности информационных систем по свойствам химических веществ и специализированных программ для информационного сопровождения перевозки опасных грузов – отличительная черта представленной БД. Её использование позволит упростить и ускорить процедуру по классификации, маркировке и документированию транспортировки грузов с опасными химическими веществами.

База данных будет являться структурным элементом, а алгоритмы, представленные в [15] положены в основу разрабатываемого программного комплекса для классификации и маркировки грузов с опасными химическими веществами, предназначенного для компаний и организаций, которые планируют, осуществляют или контролируют перевозку опасных грузов.

Список литературы

- ГОСТ Р 57478-2017. Грузы опасные. Классификация // Техэксперт [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200145665> (дата обращения: 10.05.2020).
- ГОСТ Р 57479-2017. Грузы опасные. Маркировка // Техэксперт [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200145666> (дата обращения: 10.05.2020).
- Европейское соглашение о международной дорожной перевозке опасных грузов (ДОПОГ) // КонсультантПлюс [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_121040/ (дата обращения: 10.05.2020).
- Международный морской кодекс по опасным грузам. Издание 6.: СПб.: ЗАО «ЦНИИМФ», 2007. – 512 с.
- Правила перевозок опасных грузов по железным дорогам от 05.04.96 № 15 (с изм. от 15.05.2019) // Техэксперт [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/902165571> (дата обращения: 10.05.2020).
- Технические инструкции по безопасной перевозке опасных грузов по воздуху // Международная

организация гражданской авиации (ИКАО) [Электронный ресурс]. – https://www.icao.int/publications/Documents/9284_2011_2012_add_05_ru.PDF (дата обращения: 10.05.2020).

7. Аварийные карточки на опасные грузы, перевозимые по железным дорогам СНГ, Латвийской Республики, Литовской Республики, Эстонской Республики (с изменениями на 19.05.2016) // Техэксперт [Электронный ресурс]. – <http://docs.cntd.ru/document/902165597> (дата обращения: 10.05.2020).

8. PowerDesigner // Sybase CIS [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.sybase.ru/products/powerdesigner> (дата обращения: 10.05.2020).

9. Open Server Panel // Open Server [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://ospanel.io/> (дата обращения: 10.05.2020).

10. ГОСТ 32419-2013. Классификация опасности химической продукции. Общие требования // Техэксперт [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200107879> (дата обращения: 16.05.2020).

11. Научные подразделения СГУПС - НИЛ Совершенствование условий перевозок опасных грузов – Разработки. // Сибирский государственный университет путей сообщения. [Электронный ресурс]. – <https://www.stu.ru/science/index.php?page=1035> (дата обращения: 16.05.2020).

12. BarTender // BarTender [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://ru.seagullscientific.com/label-design-and-printing/regulations-standards/ghs/> (дата обращения: 16.05.2020).

13. ADRpro // ADRpro [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.adrpro.pogt.ru/#vozmozhnosti> (дата обращения: 16.05.2020).

14. Chemdox Material Safety Data Sheet // Chemdox [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.chemdox.com/en/software_program.shtml (дата обращения: 16.05.2020).

15. Авинова Е.Ю., Михайлова П.Г. Разработка алгоритма и базы данных для классификации грузов с опасными химическими веществами // Успехи в химии и химической технологии. – 2019. – № 11. – С. 6-8.

УДК 519.6:004.942

Бабкин М.А., Кольцова Э.М.

ОБОБЩЕНИЕ МОДЕЛЕЙ ИЗМЕЛЬЧЕНИЯ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ И КАРБИДА КРЕМНИЯ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Бабкин Михаил Андреевич, студент 2 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: shar170@yandex.ru;

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

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

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

Разработана кинетическая модель измельчения оксида алюминия и карбида кремния на основе экспериментальных данных. Полученная модель итерационно просчитывает каждый шаг по времени процесса измельчения, что снижает эффективность. Поэтому модуль, включающий в себя кинетическую модель, был использован для генерации обучающей выборки для алгоритмов машинного обучения. На основе полученной выборки была обучена быстрая модель, предсказывающая время измельчения частиц от исходного до необходимого конечного размера.

Ключевые слова: дробление частиц, математическое моделирование, кинетика измельчения, машинное обучение.

GENERALIZATION OF MODELS OF GRINDING ALUMINUM OXIDE AND SILICON CARBIDE BY METHODS OF MACHINE LEARNING

Babkin M.A., Koltsova E.M.

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

A kinetic model of grinding aluminum oxide and silicon carbide based on experimental data has been developed. The resulting model iteratively calculates each step in time of the grinding process, which reduces efficiency. Therefore, a module including a kinetic model was used to generate a training set for machine learning algorithms. Based on the obtained sample, a fast model was trained predicting the time of particle grinding from the initial to the required final size.

Keywords: particle fragmentation, mathematical modeling, grinding kinetics, machine learning

Математические модели, способные прогнозировать процесс измельчения на основе свойств измельчаемых материалов и параметров мелющих устройств могут применяться в различных сферах. Такие модели могут быть использованы в качестве расчётной системы в более крупных, составных программах, таких как цифровые двойники заводов. В академической сфере, программный модуль может упростить процесс исследования тех или иных параметров и свойств материалов, получаемых в теории, без использования реальных ресурсов.

Ранее на основе экспериментов, проведённых в планетарной мельнице, были получены данные о измельчении оксида алюминия и карбида кремния [1,2]. Эти данные легли в основу кинетической модели, использующей уравнение баланса числа частиц и движущую силу дробления. В балансовой модели, имеется два слагаемых, отвечающих за уход частиц из определённой фракции размеров и слагаемое, отвечающее за приход частиц из фракции более крупных частиц.

$$\frac{df}{dt} = -f(r)A(r) + \int_r^R f(\gamma)A(\gamma)B(r, \gamma)d\gamma \quad (1)$$

В данную кинетическую модель входит движущая сила, представляющая собой критерий Вебера, умноженный на феноменологический коэффициент, что является потоком измельчения.

$$We = \frac{\rho_2^0 d_q^{5/3} \varepsilon^{2/3}}{2\Sigma_{r1} - \Sigma_{rr}} \quad (2)$$

где ρ - плотность частиц, d - диаметр частиц, ε - удельная мощность на перемешивание, Σ_{r1} - поверхностная энергия частицы, Σ_{rr} - поверхностная энергия в зоне контакта частиц. Таким образом скорость измельчения частиц зависит от критерия Вебера. В данную зависимость, так же входит удельная мощность на перемешивание, которая напрямую зависит от параметров измельчающего устройства.

На основе экспериментов по измельчению оксида алюминия была получена регрессионная зависимость удельной мощности на перемешивании [1]. Она включает в себя размеры мелющих шаров планетарной мельницы и отношение их массы к массе измельчаемого материала.

$$\varepsilon = a_0 + a_1 \cdot z_1 + a_2 \cdot z_2 + a_{12} \cdot z_1 \cdot z_2 \quad (3)$$

$$z_1 = \frac{m_{ball}}{m_p} \in [3:1; 5:1]; z_2 = \frac{d_0}{d_{ball}}, d_{ball} \in [2mm; 5mm]; \quad (4)$$

На основе экспериментальных данных, измельчения карбида кремния, была получена зависимость для мощности на перемешивании, которая включает в себя зависимость от скорости вращения барабана и плотности мелющих шаров [2]. Так же данные эксперименты включают

варьирование поверхностно активных веществ, что позволило включить в модель поверхностные энергии материалов.

$$\varepsilon = b_0 + b_1 * x_1 + b_{11} * x_1^2 + b_2 * x_2 + b_{22} * x_2^2 \quad (5)$$

$$x_1 = n_{\text{оборотов}}/n_0, x_2 = \rho_{\text{мел.тел.}}/\rho_0 \quad (6)$$

Результатом обобщения моделей стал программный модуль, моделирующий кинетику процесса измельчения и включающий в себя обе модели, как для оксида алюминия, так и для карбида кремния. Данный модуль рассчитывает распределение частиц по размерам, в различные моменты времени, используя разностную схему. Используемая схема, предиктор-корректор,

позволяет сделать расчёт устойчивым и не чувствительным к флуктуациям в системе. Такой расчёт занимает продолжительное время, но даёт более подробные данные, такие как распределение частиц по размерам, средний размер частиц, отклонение среднего размера и другие статистические данные. Исходя из основных параметров дробления, была составлена обучающая выборка, включающая в себя 35 тысяч примеров, отображающих зависимость параметров дробления, исходного среднего размера частиц и требуемого конечного среднего размера к времени дробления.

Обобщенные используемые параметры приведены в таблице 1.

Таблица 1. Фундаментальные параметры дробления

Обозначение	Название	Варьируемое значение
$\Sigma_{ш}$	Поверхностная энергия шаров, Дж/м ²	ZrO ₂ – 7.48, WC – 15.
Σ_m	Поверхностная энергия материала, Дж/м ²	Al ₂ O ₃ – 2.6, SiC – 3.3
$R_{ш}$	Размер шаров, мм	1-10
ω	Скорость вращения, об/мин	250, 400
$\rho_{ш}$	Плотность шаров, кг/м ³	ZrO ₂ – 5680, WC – 15770
ρ_m	Плотность материала, кг/м ³	Al ₂ O ₃ – 4000, SiC – 3210
t	Время, с	600 – 3600
$M_{ш}$	Доля шаров	0.75, 0.80, 0.833
M_m	Доля материала	0.25, 0.20, 0.167
f	Распределение частиц по размерам	-
r_{start}	Стартовый средний размер частиц, мкм	3-30

Используя алгоритм машинного обучения, называемый голосующий регрессор, удалось комбинировать такие алгоритмы как лес случайных деревьев и экстремум дерева. Суть голосующего регрессора заключается в том, что он использует несколько вложенных алгоритмов, усредняя и оптимизируя их выходы, посредством голосования и весов. Алгоритмы случайного леса деревьев и экстремум дерева базируются на графах решений, с некоторыми отличиями в выборе оптимальных решателей. По данным статьи [3] методы случайного леса и экстремум дерева являются наиболее надёжными, в сравнении с методами случайного пространства, бэггинга деревьев и одиночного дерева решений.

Для реализации расчёта описанными методами, использовалась библиотека sklearn на языке программирования Python 3, в которой авторами реализованы методы кросс-валидации для автоматизированного поиска оптимального значения параметра числа решателей и размеров выделяемых бутстрапингом выборок. Метод кросс-валидации позволяет найти коэффициент детерминации. Коэффициент детерминации (R^2) — это значение

которое, характеризует долю вариации (дисперсии) результативного признака, объясняемую регрессией, в общей вариации (дисперсии). Для экстремум деревьев, кросс-валидация определила что оптимальным является 10 решателей, что даст коэффициент детерминации в размере 0.925. Для леса случайных деревьев это значение 0.9993 для 7 решателей. В то время как при использовании этих двух методов, количество решателей отличается, 1 и 4 для леса случайных деревьев и экстремум деревьев соответственно.

На графике ниже представлено сравнение работы трёх алгоритмов с экспериментальными данными. Результат работы, отображение зависимости конечного среднего размера частиц от времени измельчения для измельчения оксида алюминия, шарами диоксида циркония размером 2мм и соотношением масс 3:1.

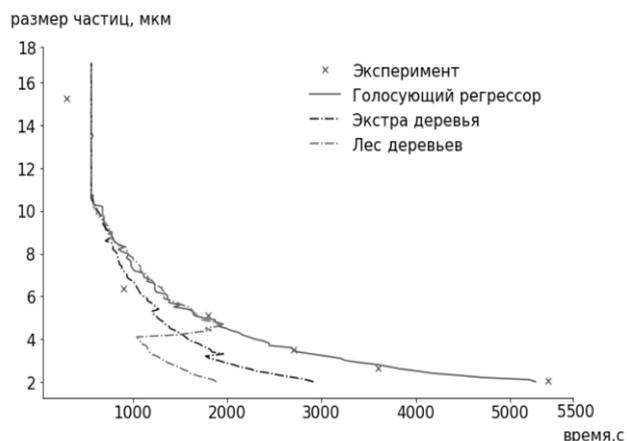


Рис. 1. Изменение среднего размера частиц во времени

Как видно на графике, сами по себе методы экстра деревьев и случайного леса, не отображают действительную кинетику процесса, в то время как обученные и отрегулированные голосующим регрессором, эти методы описывают кинетику процесса и совпадают с экспериментальными данными.

Полученная модель машинного обучения я, сохранён с использованием библиотеки *Pickle*, которая позволяет сохранить в файловую систему обученную модель, воспроизводимую на любой вычислительной машине, поддерживающей следующие технологии: *Python 3*, *Scikit-Learn* и *Pickle*. Формирование входных данных реализуется простым словарём, содержащим 9 параметров, описанных в таблице выше.

Таким образом, в результате обобщения двух кинетических моделей была получена быстрая с точки зрения длительности расчёта модель на основе алгоритмов машинного обучения. Плюсами которой являются скорость расчёта, простота входных данных, минусом данной модели является низкая

информативность, так как она позволяет узнать время дробления от исходного среднего размера, до требуемого. В отличие от модели основанной на машинном обучении, модель, основанная на дифференциальных уравнениях, имеет значительно более длительный расчёт, но более подробный результат вычислений. Дифференциальная балансовая модель, рассчитывает распределение частиц по размерам, из которого можно получить такие статистические данные как геометрический, арифметический и гармонический средний размер, отклонение размера от среднего, и процентное содержание частиц различных размеров. Так же дифференциальная кривая, позволяет получить интегральную кривую, необходимую для принятия решения, о целесообразности проведения обработки материала, технологом на предприятии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ соглашение № 14.574.21.0158, уникальный идентификатор работ (проекта) RFMEFI57417X0158.

Список литературы

1. Е. М. Koltsova, М. А. Babkin, A.S. Shaneva. To the Question of Determining the Limiting Particle Size of Corundum during Grinding // Mechanical Engineering And Robotics research – 2020. Vol. 9, No. 2, - P. 207-211,
2. Иванников А.И., Кольцова Э.М. Расчёт устойчивого к дроблению размера частиц при дроблении карбида кремния с добавками// УСПЕХИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ, – 2019. – Т. 33. –Н. 11 –С.: 44-46
3. P. Geurts, D.Ernst, L.Wehenkel. Extremely randomized trees// Machine Learning 2006 –P. 33

УДК 544.723.212

Белоліпецкiй А.А. Цыганков П.Ю. Меньшутина Н.В.

ГИДРОФОБИЗИРОВАННЫЕ АЭРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ ВОЛОКОН ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА ДЛЯ СОРБЦИИ НЕФТИ

Белоліпецкiй Александр Александрович, студент 3 курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга

e-mail: belolipetsky@list.ru

Цыганков Павел Юрьевич, к.т.н., ведущий инженер Международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий

Меньшутина Наталья Васильевна, профессор, д.т.н., руководитель Международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий

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

В данной статье рассматриваются гидрофобизированные метилтриметоксисилом (МТМС) аэрогели на основе волокон полиэтилентерефталата (ПЭТ), а также сравниваются с сорбентами присутствующими на рынке. Данные аэрогели могут быть изготовлены из переработанных пластиковых бутылок и использованы в качестве абсорбирующих губок при разливах нефти. Материал можно изготавливать экономически эффективным способом. Формирование структуры аэрогеля происходит в процессе добавления поливинилового спирта и сшивающего агента к волокнам ПЭТ с последующей лиофильной сушкой и гидрофобизацией образца. За счет высокой разветвленной структуры материал имеет более высокие абсорбционные показатели, чем у коммерческих сорбентов.

Ключевые слова: аэрогель, ПЭТ, абсорбция, разливы нефти, пластиковые отходы

HYDROPHOBIZED AEROGELS BASED ON POLYETHYLENE TEREPHTHALATE FIBERS FOR OIL SORPTION

Belolipetsky A.A. Tsygankov P.Y. Menshutina N.V.

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

This article discusses hydrophobized methyltrimethoxysilane (MTMS) aerogels based on polyethylene terephthalate (PET) fibers, and also compares them with sorbents present on the market. These aerogels can be made from recycled plastic bottles and used as absorbent sponges for oil spill cleaning application. The material can be produced in a cost-effective way. The formation of the aerogel structure occurs during the addition of polyvinyl alcohol and a cross-linking agent to PET fibers, followed by lyophilic drying and hydrophobization of the sample. Due to its high branched structure, the material has higher absorption rates than commercial sorbents.

Keywords: aerogel, PET, absorption, oil spill, plastic waste

Сорбция и отделение нефти становятся важными процессами из-за ее случайных разливов и утечек, что происходит в следствии коррозии и превышения срока эксплуатации трубопроводов, несовершенства оборудования и постоянно растущих темпов добычи нефти. Так в России ежегодно происходит порядка 25 тысяч разливов и в окружающую среду попадает около 1,5 млн тонн нефти, что превышает в два раза количество нефти, попавшей в Мексиканский залив в 2010 году при аварии на платформе Deepwater Horizon, которая вызвала экологическую катастрофу [1].

Для решения данной проблемы используются различные синтетические и природные сорбенты, которые имеют как преимущества, так и недостатки. Одни из этих сорбентов имеют высокую нефтепоглощающую способность, но не позволяют использовать их вторично, а другие имеют низкую стоимость, но крайне малую эффективность применения. Эффективность сорбентов для сбора нефти оценивают, в первую очередь, по значению нефтеёмкости, а проблему параллельного водопоглощения можно устранить практически для

всех материалов дополнительной гидрофобизацией. Существуют три основных группы методов для сорбции нефти: химические методы [2], биоремедиация почв, загрязненных нефтью [3], и физические методы сорбции [4]. Если рассматривать недостатки некоторых из методов, то у химических можно выделить невозможность регенерации и повторного применения. Проблемой биоремедиации является зависимость биосорбентов от конкретного региона, климатических условий, а также необходимость предварительного анализа для подбора штамма, что в большинстве случаев сделать невозможно. Как и в случае химических сорбентов, использовать биосорбенты можно только однократно [5].

Исследование рынка сорбентов показывает, что среди большинства промышленных потребителей нефтепоглотителей самым популярным является метод физической сорбции. Этот метод обладает высокой эффективностью, так как существуют различные пористые материалы, которые просты в эксплуатации и имеют низкую стоимость. Еще одним преимуществом физической сорбции является

то, что поглощенная нефть может быть возвращена для дальнейшей переработки путем отжима, дистилляции, а также при использовании центробежных установок, увеличивающих коэффициент регенерации [6].

Рассмотрим наиболее популярные сорбенты, представленные на рынке, которые используются при разливах нефти. Так полипропиленовые прокладки и полипирроловые губки часто используются для сорбции нефти. Абсорбционная ёмкость полипропиленовых прокладок приблизительно равняется 11 г/г, тогда как у других синтетических полимерных сорбентов, таких как полиэфирные, полипирроловые и полиуретановые губки, составляет 2,9 г/г, 25,0 г/г и 30,0 г/г, соответственно [7]. Существует тип аэрогелей на основе углеродных нанотрубок и графена, показывающие необычайно высокие сорбционные свойства порядка 120–150 г/г, которые являются рекордсменами по сорбции нефти среди остальных сорбентов [8]. Тем не менее, массовое производство таких аэрогелей может иметь потенциальную опасность для здоровья и окружающей среды из-за их наноразмерных частиц углерода. На рынке также присутствуют пористые пенополиуретаны, пенополистирол и полипропиленовые губки, сделанные из пластиковых отходов, имеющие низкую стоимость и нефтепоглощающую способность, которая равняется приблизительно 11,0–40,0 г/г [9].

Для удешевления производства высокоэффективных волокнистых сорбентов для сбора нефти с поверхности воды и одновременного решения проблемы эффективной утилизации крупнотоннажных пластиковых отходов, авторами [10] разработаны сорбенты на основе переработанных пластиковых бутылок. Аэрогель (рис.1) изготавливается на основе волокон из переработанного полиэтилентерефталата, например, использованные пластиковые бутылки.



Рис. 1. Аэрогель на основе переработанных волокон ПЭТ

Средний диаметр таких волокон составляет 10–100 мкм, а длина 20–200 мм. Далее к волокну добавляют поливиниловый спирт (PVA) и сшивающий агент глутаральдегид (GA). После

процесса шивания следует сублимационная сушка образца и дальнейшая гидрофобизация, посредством химического осаждения метилтриметоксисилана из паровой фазы. При этом контактный угол с каплями воды составляет 135–137°. Результаты исследования показывают, что аэрогели на основе волокон полиэтилентерефталата обладают более высокими показателями поглощения нефти, приблизительно 70–80 г/г, чем коммерческие абсорбенты, такие как полипропиленовые прокладки и полипирроловые губки. Данный тип аэрогелей имеет более низкую поглощающую способность в сравнении с аэрогелями, изготовленных с добавлением графена и нанотрубок, но преимуществом аэрогелей из переработанного пластика является их экологически безопасный способ изготовления, рентабельность и простота при массовом производстве, а также способность выдерживать большое количество циклов регенерации, что дает возможность их многократного использования. Материал также имеет хорошую сорбционную способность при поглощении различных органических растворителей, более 40 г/г при сорбции ацетона, этанола и изопропанола [10].

В данном случае, важную роль при сорбции нефти играет морфология пор и плотность структуры (рис.2).

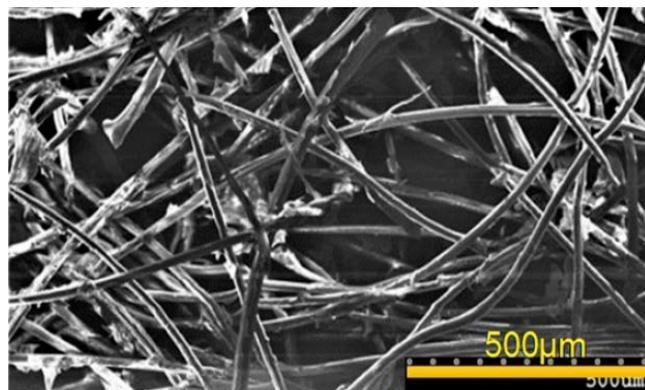


Рис. 2. Морфология аэрогеля на основе переработанных волокон ПЭТ

Высокие сорбционные показатели при поглощении нефти объясняются макропористой структурой с размером пор (>50 нм) и пористостью 99,5 % при плотности 7 мг/см³. В исследовании показано, что, изменяя концентрацию и диаметр волокон переработанного ПЭТ можно влиять на размеры пор, что в свою очередь влияет на сорбционные показатели материала. Так, например, аэрогель при концентрации волокон 0,5 wt%, 1,0 wt% и 2,0 wt% будет иметь нефтепоглощающую способность 79,4 г/г, 58,5 г/г и 46,3 г/г, соответственно [10].

На данном этапе авторами этой статьи были получены первые образцы аэрогеля из волокон переработанного пластика (рис.3). В дальнейшем планируется подробное изучение свойств и морфологии данного материала. Так, к примеру,

запланировано исследование пористой структуры материала с использованием метода азотной порометрии, исследование кинетики процесса сорбции нефти и различных нефтепродуктов при различных условиях, подбор наиболее эффективного метода восстановления сорбента для его повторного использования после поглощения сорбата, а так же установление максимально возможного количества циклов регенерации. Большой интерес представляет сравнение аэрогеля, полученного методом лиофильной сушки, с образцами полученными методами сверхкритической и тепловой сушки, с целью установления оптимальной структуры для увеличения сорбционных свойств.



Рис. 3. Полученный аэрогель на основе переработанных волокон ПЭТ

В заключение можно сказать, что разработка и использование аэрогелей из переработанных волокон полиэтилентерефталата позволит повысить эффективность процессов ликвидации разливов нефти, используя при этом относительно дешевое производство материала, основанное на использовании вторичных пластиковых отходов. Исследования демонстрируют потенциал аэрогелей, как перспективного материала для очистки нефтяных разливов.

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

Список литературы

1. <https://greenpeace.ru/expert-opinions/2019/04/19/kak-reshit-problemu-razlivov-nefti-v-rossii/> (дата обращения: 20.05.2020)
2. Y. Gong, X. Zhao, Z. Cai, S.E. O'Reilly, X. Hao, D. Zhao. A review of oil, dispersed oil and sediment interactions in the aquatic environment: influence on the fate, transport and remediation of oil spills // *Mar. Pollut. Bull.* – 2014. – vol. 79. – pp. 16–33.
3. R.C. Prince. *Bioremediation of Marine Oil Spills BT - Handbook of Hydrocarbon and Lipid Microbiology* // Springer Berlin Heidelberg. – 2010. pp. – 2617–2630.
4. J. Saleem, M. Adil Riaz, M. Gordon. Oil sorbents from plastic wastes and polymers: a review // *J. Hazard Mater.* – 2018. – vol. 341. – pp. 424–437.
5. Каменщиков Ф.А., Богомольный Е.И. Удаление нефтепродуктов с водной поверхности и грунта // М. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2006. 528 с
6. Фонарева К.А. Сорбция нефтепродуктов полиэтилентерефталатным волокном и его регенерация центробежным способом: Автореф. дис. канд.техн. наук. – Уфа, 2017. – 23 с.
7. R. Tjandra, G. Lui, A. Veilleux, J. Broughton, G. Chiu, A. Yu, Introduction of an enhanced binding of reduced graphene oxide to polyurethane sponge for oil absorption // *Ind. Eng. Chem. Res.* – 2015. – vol. 54. – pp. 3657–3663.
8. J. Li, J. Li, H. Meng, S. Xie, B. Zhang, L. Li, H. Ma, J. Zhang, M. Yu, Ultra-light, compressible and fire-resistant graphene aerogel as a highly efficient and recyclable absorbent for organic liquids // *J. Mater. Chem. A.* – 2014. – vol. 2. – pp. 2934–2941
9. G. Wang, H. Uyama, Facile synthesis of flexible macroporous polypropylene sponges for separation of oil and water // *Sci. Rep.* – 2016. – vol. 6. – 21265.
10. Duyen KhacLe, Gek Nian Ng, Hong Wei Koh, Xiwen Zhang, QuocBaThai, Nhan Phan-Thien, Hai Minh Duong. Methyltrimethoxysilane-coated recycled polyethylene terephthalate aerogels for oil spill cleaning applications // *Materials Chemistry and Physics.* – 2020. – vol. 239, 122064.

УДК 004.896

Камынин В.А., Лопатин А.Г., Брыков Б.А.

РОБАСТНО-АДАПТИВНАЯ СИСТЕМА АВТОМАТИЧЕСКОГО РЕГУЛИРОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРНОГО РЕЖИМА ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА

Камынин Вячеслав Андреевич, студент 4 курса бакалавриата факультета Кибернетики;

Лопатин Александр Геннадиевич, к.т.н, доцент, заведующий кафедрой автоматизации производственных процессов;

Брыков Богдан Александрович, ассистент кафедры автоматизации производственных процессов;

e-mail: brybogdan@yandex.ru

Новомосковский институт РХТУ им. Д.И. Менделеева, Новомосковск, Россия

В статье предлагается к рассмотрению задача автоматизации процесса суспензионной полимеризации. Обоснована необходимость перехода к сложным алгоритмам управления температурой реактора. Для решения задачи предлагается использовать робастно-адаптивный подход, основанный на методах нечеткой логики, нечетких контроллеров и супервизорных систем. Приведена структурная схема предлагаемой системы, проведено имитационное моделирование и сравнительный анализ качества работы системы, сделаны выводы.

Ключевые слова: *fuzzy регулятор, супервизор, робастность, адаптивность, химический реактор, суспензионная полимеризация, MATLAB Simulink.*

A ROBUST-ADAPTIVE CONTROL SYSTEM OF THE CHEMICAL REACTOR TEMPERATURE REGIME

Kamynin Vyacheslav Andreevich, Brykov Bogdan Aleksandrovich, Lopatin Aleksandr Gennadievich

Novomoskovsk Institute of MUCTR, Novomoskovsk, Russia

The article proposes to consider the task of automating a suspension polymerization process. The necessity of transition to complex reactor temperature control algorithms is substantiated. To solve the problem, it is proposed to use a robust-adaptive approach based on the methods of fuzzy logic, fuzzy controllers and supervisory systems. The block diagram of the proposed system is presented, simulation and comparative analysis of the quality of the system are carried out, conclusions are drawn.

Key words: *fuzzy controller, supervisor, robustness, adaptability, chemical reactor, suspension polymerization, MATLAB Simulink.*

Ключевой вектор развития химической промышленности во всем мире предполагает стремление к интенсификации темпов выпуска продукции в совокупности с соблюдением мер энерго- и ресурсосбережения, а также развитием автоматизированных безотходных производств. В этой связи, существенный прогресс наблюдается во многих отраслях промышленности, например, в области синтеза высокомолекулярных соединений – полимеров, важнейших соединений, из которых изготавливается огромное число продуктов: краски, пластмассы, резины, пленки и т.д. Всестороннему исследованию процессов полимеризации посвящено немало работ отечественных и зарубежных авторов, в том числе, значительная часть работ рассматривает задачи автоматизации процессов синтеза полимеров, в которых объектом управления является реактор-полимеризатор.

Существует весьма обширная классификация процессов полимеризации [1], останавливаться на которой подробно не будем. Отметим лишь, что каждый из многочисленных методов синтеза полимеров имеет свои характерные особенности, по совокупности которых стоит выделить процесс свободно-радикальной суспензионной полимеризации. Такой метод синтеза полимеров

широко используется на химических предприятиях России для синтеза таких полимеров, как полистирол, полиметилметакрилат и т.д., поэтому изучение такого процесса с целью его оптимизации и усовершенствования технологии производства является актуальной задачей.

Как указано ранее, объектом управления в процессах суспензионной полимеризации является реактор-полимеризатор периодического действия, принципиальная схема и расчет которого был выполнен в работе [2]. Особенностью процессов суспензионной полимеризации является экзотермический характер протекания реакции, обусловленный множеством неотвратимо возникающих факторов, главным из которых является гель-эффект. Такой характер протекания процесса обуславливает необходимость охлаждения реакционной смеси путем подачи хладагента в рубашку реактора для удержания постоянного изотермического температурного режима в реакторе. Именно расход хладагента является основным управляющим воздействием в системах автоматического регулирования температурного режима реактора-полимеризатора.

Помимо охлаждения реакционной смеси с помощью хладагента, при суспензионной

полимеризации практикуется проведение процесса с большим содержанием воды в самой реакционной смеси, что существенно снижает потенциальное количество получаемого продукта с 1 цикла производства. Действительно, при синтезе полиметилметакрилата в реакторах объемом 20 м³ при соотношении мономера и воды (М:В), равном 1:4, можно за 1 цикл производства получить порядка 3800 кг продукта. Если бы была теоретическая возможность проведения процесса при М:В, равном 1:3, без изменения других условий протекания процесса, то выход продукта увеличился бы на 950 кг, т.е. практически на 25%. Осуществить такие условия протекания процесса с использованием классических систем управления невозможно из-за существенной нелинейности объекта управления, что не позволит подобрать оптимальные настройки регулятора.

Таким образом, становится очевидной необходимость синтеза сложной системы автоматического регулирования (САР), способной в

режиме реального времени менять свою структуру для эффективного управления температурой реактора в экстремальных условиях процесса, практически на границе устойчивости.

Рассмотрим структурную схему управляющего устройства, предлагаемого в работе (рис. 1). Как видно из рис.1, в основе управляющего устройства лежит ПИД-подобный нелинейный контроллер, реализованный с помощью трех параллельно соединенных одномерных нелинейных систем нечеткого вывода. Именно эти 3 контроллера вырабатывают управляющее воздействие на объект управления. Нелинейность нечетким контроллерам удалось придать путем нелинейного распределения функций принадлежности у выходной переменной (рис. 2). База знаний контроллеров включает в себя 11 правил, по 1 правилу для каждого термина входной и выходной переменной. Подробный обзор принципа функционирования нелинейных контроллеров описан нами в [3].

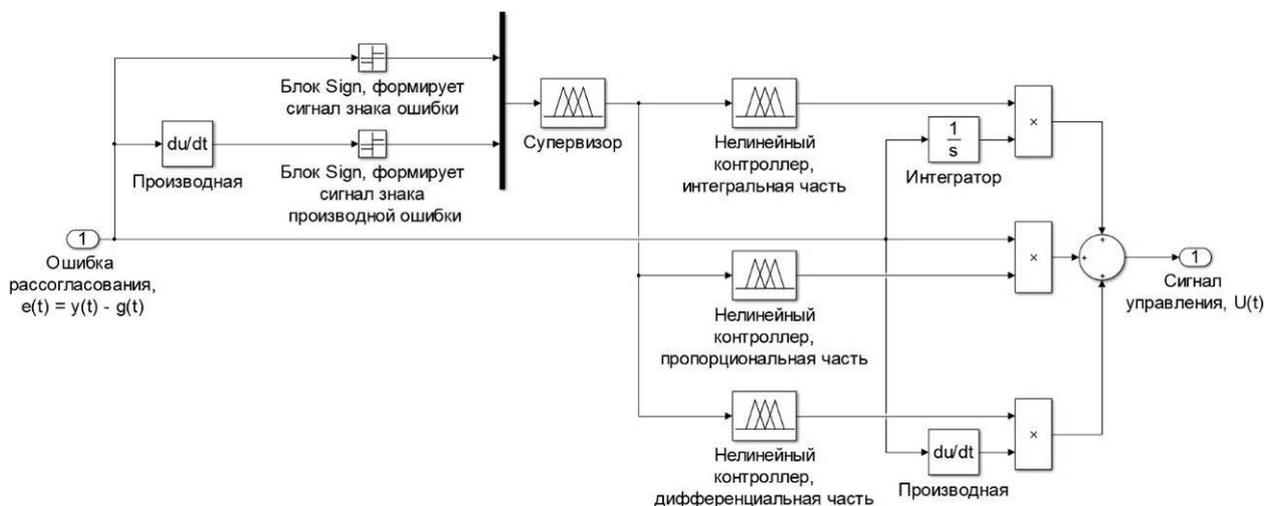


Рис.1. Структурная схема управляющего устройства

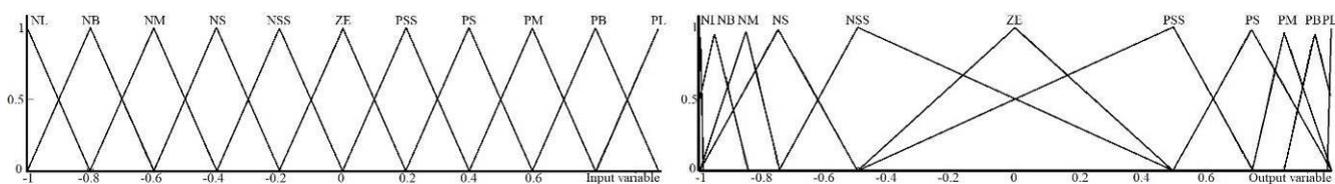


Рис.2. Распределение функций принадлежности: слева – входной переменной, справа - выходной

Также необходимо отметить наличие нечеткого супервизора, который вырабатывает входные сигналы для ПИД-подобного контроллера, в зависимости от текущей ситуации на объекте управления, позволяя «ослабить» настройки регулятора с целью избежать выхода из устойчивого состояния, так и «усилить» их, чтобы быстрее подавить нежелательное динамическое отклонение. База знаний супервизора, его структура и принцип действия приведены в [4].

Ключевой особенностью предлагаемой структурной схемы является факт использования знака ошибки регулирования и знака ее производной

в качестве входных переменных для супервизора. Использование знаков этих двух величин позволяет отказаться от нормировки сигналов к определенному диапазону в зависимости от конкретного объекта управления, т.е. благодаря отказу от реальных значений входных параметров предлагаемый супервизорная часть управляющего устройства будет универсальной и не требующей предварительной настройки.

Для оценки эффективной предлагаемой структуры необходимо провести ряд экспериментальных исследований на математической модели объекта управления.

Математическая модель реактора-полимеризатора в виде передаточной функции по каналу «Расход хладагента – температура реакционной смеси» была получена в [2].

Для сравнительного анализа качества переходного процесса в дополнение к робастно-адаптивной САР (РАСАР) синтезировали одноконтурную САР с ПИД регулятором. Регулятор для классической САР (КСАР) был настроен по методу Копеловича с упором на апериодический переходный процесс. В результате имитационного моделирования в MATLAB Simulink были получены переходные процессы по возмущению (рис. 3). Причем, для чистоты эксперимента, для обеих САР

использовано идентичное возмущающее воздействие. Кроме того, при моделировании были смитированы 2 ситуации:

- когда объект управления находится в номинальном режиме работы (это характерно для начальной и конечной стадии процесса) – рисунок 3а;

- когда параметры объекта управления претерпевают критические изменения – коэффициент усиления увеличивается в 5 раз, а постоянная времени, напротив, уменьшается на 20% (это характеризует стадию гель-эффекта, подробнее об этом мы писали в [2]) – рисунок 3б.

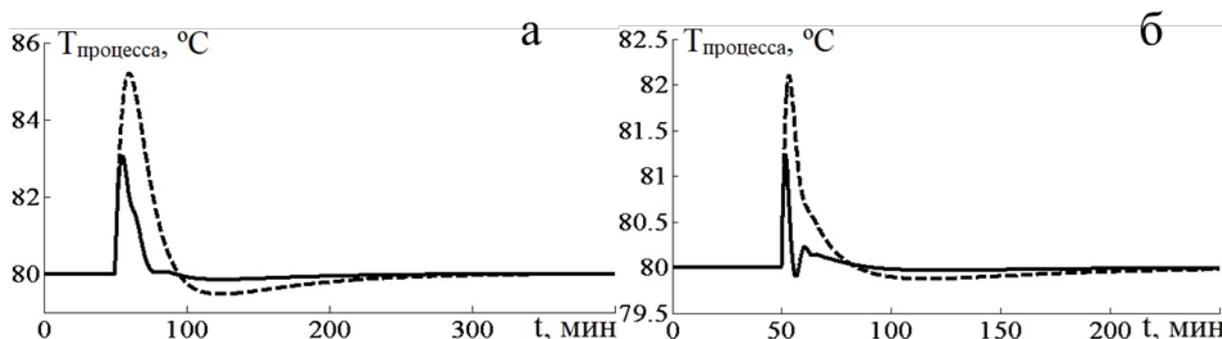


Рис.3. Переходные процессы классической САР (пунктирная линия) и робастно-адаптивной САР (сплошная линия)
а – номинальный режим работы объекта, начальная и конечная стадии процесса
б – критический режим работы объекта, соответствующий проявлению гель-эффекта

Проанализируем полученные результаты, рассчитав показатели качества. Ключевыми показателями качества в контексте управления химическим реактором-полимеризатором являются время регулирования t_p и динамическое отклонение Y_{din} , поскольку для процесса полимеризации критически важно как можно скорее подавить возмущающее воздействие при минимальном «выбеге» температуры за заданное значение. Показатели качества сведены в таблицу 1.

Таблица 1. Показатели качества переходных процессов классической и робастно-адаптивной САР

	Номинальный режим		Критический режим	
	КСАР	РАСАР	КСАР	РАСАР
t_p , мин	109	21	18	4
Y_{din} , °C	5.2	3.0	2.1	1.2

Исходя из рассчитанных показателей качества, можно сделать ряд выводов. Во-первых, использование предлагаемой в работе системы способствует существенному сокращению времени переходных процессов (в 4-5 раз) по сравнению с КСАР. Во-вторых, РАСАР обеспечивает практически двукратное превосходство по значению динамического отклонения в обоих из представленных для рассмотрения ситуаций. Такие результаты моделирования свидетельствуют о целесообразности применения робастно-адаптивного

подхода и правильности выбора и настройки нелинейных контроллеров и супервизора.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ. Проект № 20-07-00914 «Разработка интеллектуального управления в многоуровневых и распределенных промышленных системах в условиях неустранимой неопределенности и помех».

Список литературы

1. Системный анализ процессов химической технологии. Процессы полимеризации / Кафаров В.В., Дорохов Н.И., Дранишников Л.В. – М.: Наука, 1991. 352 с.
2. Вент Д.П., Лопатин А.Г., Брыков Б.А. Исследование математической модели промышленного реактора-полимеризатора // Вестник международной академии системных исследований. Информатика, экология, экономика. — 2018. — Т. 20, № 1. — С. 9–23.
3. Синтез интеллектуального робастного регулятора системы автоматического управления температурой химического реактора / Д. П. Вент, А. Г. Лопатин, Б. А. Брыков, В. А. Камынин // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. — 2019. — Т. 1, № 12. — С. 523–529.
4. Разработка адаптивного супервизорного регулятора для системы управления реактором радикальной полимеризации / А. Ф. Егоров, А. Г. Лопатин, Д. П. Вент, Б. А. Брыков // Химическая технология. — 2020. — Т. 21, № 4. — С. 186–192.

УДК 372.862:53.082.54

Бученкова О.Г., Скичко А.С.

РАЗРАБОТКА И АПРОБАЦИЯ УЧЕБНОЙ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ ПО АНАЛИЗУ РЕЗУЛЬТАТОВ СПЕКТРОСКОПИИ

Бученкова Оксана Григорьевна, студент 1 курса магистратуры, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

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

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

Работа посвящена разработке учебной лабораторной работы по спектральным методам анализа. Рассмотрена основная классификация методов спектроскопии, разработана методология проведения лабораторной работы. Проведена апробация лабораторной работы в рамках дисциплины «Методы диагностики и испытание изделий в нанотехнологиях». Показано влияние выбора максимумов или минимумов в области осцилляций спектра на результаты расчёта. Проанализированы полученные результаты, рассчитана дисперсия случайной выборки и стандартное отклонение. Предложен план организации занятия для проведения разработанной лабораторной работы.

Ключевые слова: спектроскопия, спектр пропускания, тонкая плёнка, область осцилляций, лабораторная работа, апробация задания, методические рекомендации.

DEVELOPMENT AND TESTING OF TRAINING LABORATORY WORK ON THE ANALYSIS OF SPECTROSCOPY RESULTS

Buchenkova Oksana Grigorievna, Skichko Alexey Sergeevich.

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

The work is devoted to the development of training laboratory work on spectral analysis methods. The basic classification of spectroscopy methods was considered, and the methodology of laboratory work was developed. The laboratory work was tested within the discipline "Methods of diagnostics and testing of products in nanotechnology". The influence of choice of maximums or minimums in the range of spectrum oscillations on calculation results is shown. The obtained results are analyzed, the variance of random sampling and standard deviation are calculated. The plan of organization of the lesson for the developed laboratory work is proposed.

Keywords: spectroscopy, transmittance spectrum, thin film, oscillation range, laboratory work, task testing, methodological guidelines.

Введение

В настоящее время стремительно развиваются такие отрасли промышленности, которые связаны с получением и применением новых материалов – медицина, биотехнология, фармацевтика, нанотехнология и др. Для производства материалов с определёнными характеристиками необходимо постоянно контролировать процесс их получения. Также от современных специалистов в области получения материалов требуется уметь анализировать свойства полученных материалов при помощи различных методов исследования и специальных приборов. Наибольшее распространение имеют методы, которые обладают наибольшей разрешающей способностью, доступностью и простотой методологии проведения анализа. К таким методам относится спектроскопия и её виды.

Спектроскопию используют для изучения свойств наноматериалов как метод контроля качества продуктов в промышленности и научных исследованиях [1-3]. Различают эмиссионные и абсорбционные методы спектрального анализа [4].

Методы первой группы основаны на регистрации атомных спектров поглощения с помощью спектрографа. Абсорбционные методы основаны на поглощении света свободными атомами. По характеру получаемых результатов различают качественный анализ (определяется состав образца), полу-количественный (оценка содержания компонентов) и количественный (определяется точное содержание веществ в пробе) [4].

Таким образом, существует востребованность в специалистах, которые имеют основные представления о современных методах исследования и диагностики материалов (включая спектроскопию), а также обладают навыками их использования. Поэтому целью настоящей работы является разработка лабораторной работы по спектроскопическим методам исследования и анализ результатов её апробации.

Постановка задачи и планируемые результаты

Спектроскопические методы, основанные на исследовании спектров пропускания, рассматриваемые в данной лабораторной работе,

относятся к неразрушающим методам контроля толщины пленок, позволяющим определить толщину однородной пленки с точностью до единиц нанометров. Методы применимы к однородным пленкам, в которых наблюдаются эффекты интерференции света, проявляющиеся в осцилляциях спектра пропускания пленки на подложке [5].

Измерение спектров пропускания света $T(\lambda)$ через плоские тонкие пленки в области прозрачности позволяет определить составляющие комплексного показателя преломления $\eta = n - ik$, коэффициент поглощения α и толщину пленки d . Коэффициент преломления зависит от длины волны. Зависимость $n(\lambda)$ называют законом дисперсии коэффициента преломления, для расчёта которого в области осцилляций спектра можно использовать формулу [5]:

$$n(\lambda) = \sqrt{N(\lambda) + \sqrt{N^2(\lambda) - (n_0 n_1)^2}}, \quad (1)$$

где $N(\lambda)$ – вспомогательная функция:

$$N(\lambda) = \frac{n_0^2 + n_1^2}{2} + 2n_0 n_1 \frac{T_{\max}(\lambda) - T_{\min}(\lambda)}{T_{\max}(\lambda) T_{\min}(\lambda)}. \quad (2)$$

Найдя $n(\lambda)$, можно определить толщину пленки по значениям для двух максимумов или минимумов спектра:

$$d = \frac{M \lambda_1 \lambda_2}{2(n(\lambda_1) \lambda_2 - n(\lambda_2) \lambda_1)}, \quad (3)$$

где M – количество осцилляций между двумя экстремумами (например, $M = 1$ для двух ближайших друг к другу минимумов);

$\lambda_1, n(\lambda_1)$ и $\lambda_2, n(\lambda_2)$ – соответствующие длины волн и показатели преломления для двух выбранных экстремумов.

В ходе выполнения лабораторной работы студентам ставится задача определить толщину плёнки по спектру пропускания.

В качестве исходных данных задается:

- спектр пропускания тонкой пленки (графическая зависимость $T(\lambda)$);
- показатель преломления среды (воздуха): $n_0 = 1$;
- показатель преломления подложки, n ;
- два экстремума (максимума или минимума) на спектре.

На первом этапе студентам необходимо выписать значения пропускания, соответствующие заданным экстремумам на спектре, $T_{\max 1}, T_{\max 2}$ ИЛИ $T_{\min 1}, T_{\min 2}$, в зависимости от варианта. Далее необходимо построить фрагмент огибающей функции и с её помощью определить недостающие данные: $T_{\max 1}, T_{\max 2}$, если заданы $T_{\min 1}, T_{\min 2}$ и наоборот. Для построения фрагмента огибающей функции выбирается три противоположных экстремума, интервал которых включает заданные длины волн и строится

аппроксимационная зависимость с помощью методов вычислительной математики.

Далее, по выражению (9) необходимо рассчитать $n(\lambda_1), n(\lambda_2)$, подставляя соответствующие длины волн. И по выражению (11) определить толщину образца.

Задаваемые экстремумы не обязаны быть соседними на спектре, что позволяет предусмотреть разнообразие вариантов для выполнения лабораторной работы. В качестве одной из допустимых методик может быть задание каждому студенту индивидуальной пары экстремумов на спектре с последующей статистической обработкой результатов, полученных группой в целом. Случайный выбор пары экстремумов, а также погрешности, вводимой при построении фрагмента огибающей, обуславливают некоторое различие конечных результатов.

Основным фактором, влияющим на результаты расчета, является выбор максимумов или минимумов в области осцилляций спектра. Если брать для расчёта точки в начале или в конце колебаний спектра, то погрешность нахождения толщины плёнки увеличивается. Поэтому при выборе конкретного задания не рекомендуется использовать экстремумы, близкие к границам области осцилляций спектра, или задавать их исключительно с целью демонстрации появления грубой ошибки при статистической обработке экспериментальных данных.

Результаты апробации

В рамках дисциплины «Методы диагностики и испытание изделий в нанотехнологиях» направления подготовки бакалавриата 28.03.02 «Наноинженерия» была проведена лабораторная работа по разработанной методике. В качестве исходных данных для анализа студентам был предложен спектр пропускания плёнки SnO_2 (рис.1) [5].

Результат, который должны получить студенты соответствует приблизительно 1,5 мкм. Данные, полученные на практике, представлены в таблице 1.

Видно, что результаты, полученные для вариантов № 1–4, достаточно близки друг к другу, а результат, полученный в случае варианта № 5, содержит ошибку, которую можно считать грубой. Это произошло потому, что исходные данные для варианта № 5 были заданы в начале области осцилляций спектра. Таким образом, студентам была продемонстрирована грубая ошибка в определении толщины плёнки, возникающая при подобном выборе экстремумов. Для дальнейшей статистической обработки результаты варианта № 5 не учитывались.

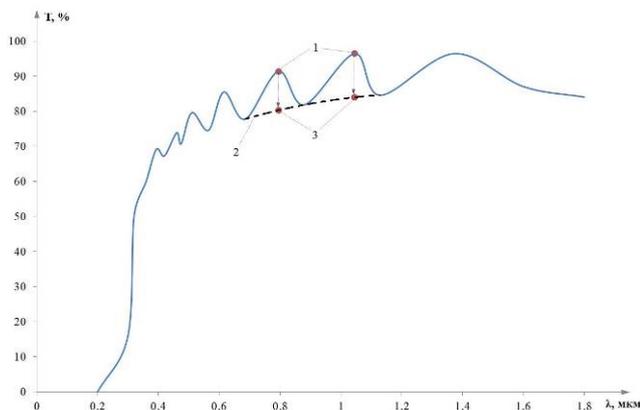


Рис. 1. Спектр пропускания тонкой пленки SnO₂ [5] и его обработка: 1 – пример выбора T_{max1} , T_{max2} в качестве исходных данных для выполнения лабораторной работы; 2 – построение фрагмента огибающей функции с помощью трех противоположных минимумов; 3 – определение T_{min1} , T_{min2}

Таблица 1. Результаты расчёта толщины пленки SnO₂ в зависимости от выбора пары экстремумов на спектре пропускания в качестве исходных данных

Номер варианта	Тип экстремума	λ_1 , мкм	λ_2 , мкм	d , мкм
1	максимум	0,795	1,045	1,6522
2	максимум	0,510	0,615	1,4914
3	минимум	0,565	0,685	1,6100
4	минимум	0,475	0,565	1,5016
5	минимум	0,420	0,475	1,8175

В завершении лабораторной работы студентам было предложено рассчитать дисперсию случайной выборки и стандартное отклонение. Для заданного спектра были получены следующие результаты: дисперсия – 0,00635, стандартное отклонение – 0,0797. Это говорит об относительно небольшом расхождении результатов и высокой точности выбора расчёта.

В качестве методических рекомендаций для проведения разработанной лабораторной работы можно предложить следующий план организации занятия:

- объяснение основ спектроскопических методов анализа, основанных на спектрах пропускания;
- подробный и поэтапный разбор методологии расчёта толщины пленки по спектру пропускания;
- разбор формул, приведенных в методологии расчёта, объяснение каждого параметра;
- детальное описание способа построения фрагмента огибающей функции $T_{max}(\lambda)$ или $T_{min}(\lambda)$ на спектре пропускания;
- рекомендации по организации расчётного модуля на рабочем листе Excel;
- анализ и обобщение результатов, полученных для разных вариантов заданий;
- статистическая обработка полученных результатов.

Список литературы

1. Садретдинова Р.М., Елизарова А.А. Изучение структуры модифицированного льняного масла методом ИК-спектроскопии // Вестник современных исследований. – 2019. – № 1.12. – С. 20-22.
2. Гатауллин А.Р., Богданова С.А., Галяметдинов Ю.Г. Диспергирование фуллерена C₆₀ в организованных средах // Жидкие кристаллы и их практическое использование. – 2019. – № 1. – С. 6-13.
3. Gray C.J., Compagnon I., Flitsch S.L. Mass spectrometry hybridized with gas-phase InfraRed spectroscopy for glycan sequencing // Current Opinion in Structural Biology. – 2020. – V. 62. – P. 121-131.
4. Scienceforum.ru: Материалы VII Международной студенческой научной конференции «Студенческий научный форум»: сайт. Москва, 2015. URL: <http://scienceforum.ru> (дата обращения: 02.03.2020).
5. Мошников В.А., Александрова О.А. Новые наноматериалы. Синтез. Диагностика. Моделирование. Лабораторный практикум // Санкт-Петербург: издательство СПбГЭТУ «ЛЭТИ». – 2015. – С. 133-140.

УДК 004.457

Васильев М.В., Митричев И.И.

ПРОГРАММНОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ ДЛЯ МОНИТОРИНГА КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ В LINUX-СИСТЕМАХ НА ЯЗЫКЕ PYTHON 3

Васильев Михаил Васильевич, студент 2 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: mihail_was96@mail.ru;

Митричев Иван Игоревич, к.т.н., старший преподаватель кафедры информационных компьютерных технологий, e-mail: imitrichev@muctr.ru;

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

Представлено программное приложение, разработанное для мониторинга программных процессов и обработки квантово-химических расчётов, произведённых с помощью пакета Orca. Описана концепция и возможности взаимодействия модулей приложения. Сделаны выводы о полученных преимуществах и оптимизации времени.

Ключевые слова: orca, программный мониторинг, модульное взаимодействие.

SOFTWARE APPLICATION FOR MONITORING QUANTUM CHEMICAL CALCULATIONS UNDER LINUX SYSTEMS IN PYTHON 3

Vasilev M.V., Mitrichev I.I.

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

A software application developed for monitoring software processes and processing quantum chemical calculations made using the Orca package is presented. The concept and possibilities of interaction between application modules are described. Conclusions are drawn about the benefits and time optimization.

Keywords: orca, program monitoring, modular interaction.

В настоящее время при квантово-химическом моделировании специалисты сталкиваются со множеством трудностей, почти всегда это связано со спецификой деятельности отдельного специалиста и зависит от используемого программного обеспечения и решаемых задач. Однако существует общая проблема. Квантово-химическое моделирование является очень затратным как с точки зрения ресурсов, так и с точки зрения времени. Не все квантово-химические методы возможно ускорить путём наращивания количественной вычислительной мощности. Качественное увеличение вычислительных мощностей зачастую тоже невозможно по причине высокой стоимости оборудования и технологических ограничений. Под количественной вычислительной мощностью здесь подразумевается увеличение количества вычислительных ядер, под качественной – увеличение тактовой частоты работы ядра процессора. Сложность, а соответственно и время расчёта, зависит от размера моделируемой системы и точности получаемой модели. Поэтому одни расчёты могут длиться меньше часа, а другие больше недели. [1]

В связи с неопределённостью конечного времени расчёта, а также с учетом внешних негативных факторов, таких как непредвиденное отключение системы питания на вычислительном оборудовании, у специалиста по квантово-химическому моделированию может наблюдаться снижение

эффективности работы. Суммируя накопленный опыт за 3 года работы в области квантово-химического моделирования, был сделан вывод о том, что наибольшее количество потерянного рабочего времени связано с длительными квантово-химическими расчётами (предполагаемое время расчета – более одной недели). За такое долгое время концентрация специалиста на данном расчете уменьшается, и при возможном кратковременном отключении питания вычислительных машин и других сбоях время, прошедшее до устранения неполадки, является максимальным. Это безусловно сказывается негативно на времени всего исследования в целом. Поэтому нами было разработано программное модульное приложение, для осуществления удобного программного мониторинга за квантово-химическими расчетами, написанное под операционную систему Linux на языке Python 3. Приложение позволяет специалисту полностью забыть про расчет до момента его завершения или экстренной ситуации. Также приложение содержит модуль, который был написан специально для квантово-химического пакета Orca, который на основе полученных данных из расчета проводит анализ и парсинг необходимой информации, в зависимости от пожелания пользователя.

Программа состоит из следующих модулей, связанных между собой (рисунок 1).

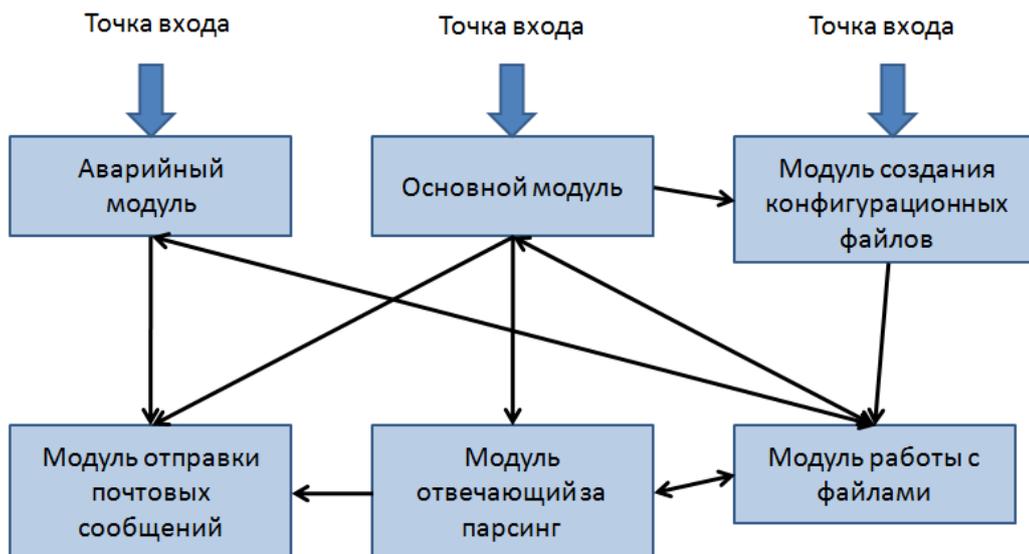


Рис. 1. Спроектированная схема приложения

Квантово-химическое моделирование с помощью пакета Orca начинается непосредственно с подготовки входных данных. Входные данные подаются в виде файлов, как правило, в качестве основных используются два. Один файл с расширением "xyz", в котором записана трехмерная геометрия системы (расположение атомов), второй файл с расширением "inp", в котором указываются входные параметры для расчета. Выходные данные принято записывать в файл с расширением "out". [2]

В качестве точки входа для разработанного нами приложения могут быть использованы три модуля. Первый из них – "Модуль создания конфигурационного файла", который с помощью простых для пользователя вопросов, создаёт файл с расширением "json", в котором хранит настройки приложения. На данный момент, файл хранит 4 параметра:

- 1) Название процесса, за которым ведется мониторинг.
- 2) Почтовые адреса на которые будут рассылаться уведомления.
- 3) Состав результирующего файла.
- 4) Отправка по почте дополнительных файлов расчета.

Следующий модуль называется "Основной модуль", данный модуль, как и предыдущий запускается из консоли, но принимает входной параметр – путь к каталогу с расчетом. Затем он считывает параметры конфигурационного файла и проверяет их на корректность, в случае некорректности вызывает "Модуль создания конфигурационного файла". "Основной модуль" устанавливает мониторинг за выбранным процессом, проверяя нахождение и его активность в системе.

Как только отслеживаемый процесс меняет свой статус, программа вызывает "Модуль отвечающий за парсинг" и проверяет выходные файлы расчёта на предмет корректного завершения. Если расчет по каким-то причинам закончился неудачно, программа посылает уведомление об ошибке, вызывая "Модуль отправки почтовых сообщений", если расчет закончился удачно, программа формирует файлы для отправки и только потом отправляет их по почте.

Третьей точкой входа в приложение может служить "Аварийный модуль", который настраивается в системе таким образом, что запускается при каждом включении оборудования, проверяя состояние расчета с помощью файла, который хранит текущий статус расчета или статус расчета на момент непредвиденного отключения оборудования. Данный файл формируется "Основным модулем". Если статус расчета при включении оборудования – "незаконченный", то вызывается "Модуль отправки почтовых сообщений" и высылается соответствующее уведомление.

"Модуль работы с файлами" является исключительно вспомогательным и служит лишь для оптимизации кода программы.

"Модуль отправки почтовых сообщений" может отправлять несколько вариантов уведомлений по заранее описанным шаблонам. В случае отсутствия сети Интернет на вычислительной машине, модуль продолжит попытки отправки сообщения, проверяя соединение через установленные промежутки времени. На рисунке 2 представлен скриншот полученного уведомления об успешном завершении расчета на вычислительной машине с названием "ikt110". К письму приложены выходные файлы расчета и краткий анализ результатов.

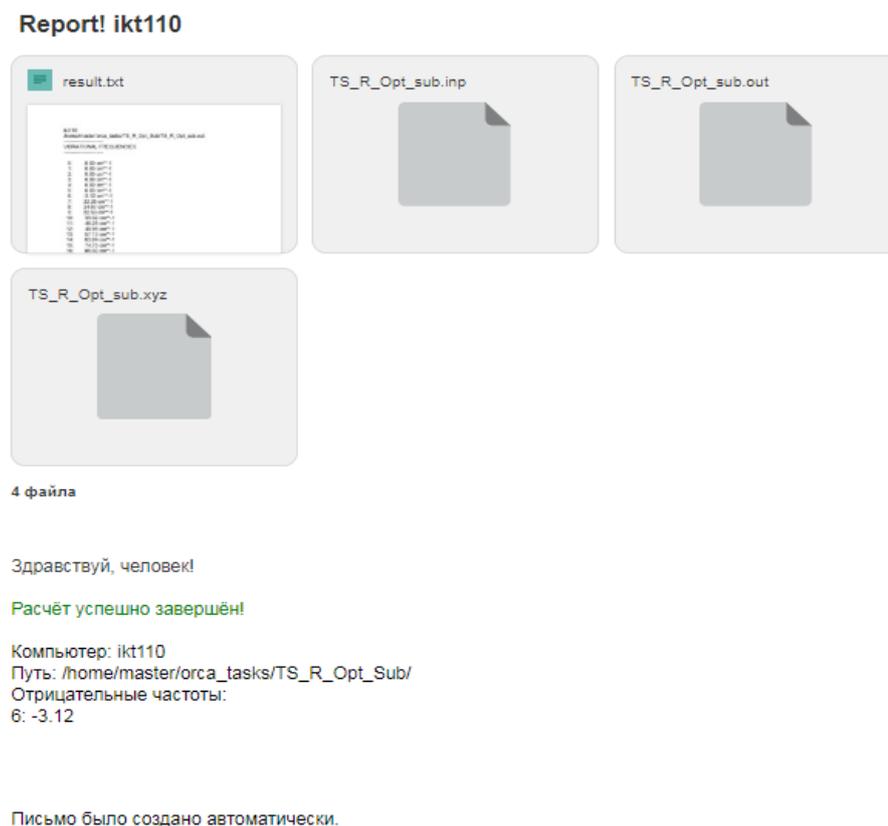


Рис. 2. Пример полученного уведомления

Для запуска приложения на вычислительном оборудовании, необходимо установить интерпретатор языка Python 3 и указать к нему путь для переменной окружения. В готовых сборках программы присутствует свой интерпретатор, который пользователь может использовать или нет, по своему желанию. Корректная работа приложения обеспечена с интерпретаторами Python начиная с версии 3.4. С более старшими версиями интерпретаторов программа не тестировалась.

Программа была протестирована на нескольких вычислительных машинах со следующими характеристиками: процессор — Intel Core i7 4770 с оперативной памятью – DDR3 16Gb и машинах с процессором Intel Core i5 6400 с оперативной памятью DDR4 12Gb, а также на ноутбуке с процессором Intel Core i5 3230M с оперативной памятью DDR3 12Gb. Программа продемонстрировала полный заявленный функционал, потребляя меньше сотой доли процента вычислительных ресурсов оборудования на всех машинах. Программа прошла все проверки на случаи аварийных ситуаций.

За время тестирования программы в рабочем режиме были выделены ее положительные характеристики:

1) Высокая степень автономности, что позволяет специалисту не тратить время на проверку состояния расчета.

2) Высокие конфигурационные возможности, которые позволяют с минимальными изменениями кода программы применять данное приложение для других вычислительных пакетов.

3) Низкая нагрузка на вычислительные ресурсы, что крайне важно на загруженном оборудовании.

4) Кроссплатформенность среди Linux-подобных систем.

Ошибок при работе программы обнаружено не было.

Опыт использования программы позволяет нам сделать вывод, что время решения одной подзадачи (оптимизация геометрии, расчет частот колебаний, сканирование поверхности потенциальной энергии) при решении квантово-химических задач сокращается в 1,5-2 раза.

Список литературы

1. Neese, F. "The ORCA program system" Wiley interdisciplinary Reviews - Computational Molecular Science, 2012, Volume 2, Issue 1, Pages 73–78.
2. Frank Neese, Frank Wennmohs. An ab initio, DFT and semiempirical SCFMO package Version 3.0.3. Max-Planck-Institute for Chemical Energy Conversion. Germany, Mülheim, 2015, 595 p.

УДК 004.942:661.721.4

Дерунец Б.С., Филиппова Е.Б.

ГРАФИЧЕСКИЙ ИНТЕРФЕЙС ДЛЯ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА ХИМИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА

Дерунец Богдан Сергеевич, студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

e-mail: real.man.07@mail.ru

Филиппова Елена Борисовна, к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия.

Данная статья посвящена процессу создания графического интерфейса оператора АСУ для цифрового двойника химического производства, а именно, промышленного производства метанола. Рассматривается выбор оптимальной среды разработки для создания окон оператора на химическом производстве, а также перспективность цифровых двойников химического производства.

Ключевые слова: среда разработки, цифровой двойник химического производства, графический интерфейс, окно оператора.

GRAPHIC INTERFACE FOR DIGITAL DOUBLE OF CHEMICAL PRODUCTION

Derunets Bogdan Sergeevich, Filippova Elena Borisovna

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

This article is devoted to the process of creating a graphical interface for an ACS operator for a digital double of chemical production, namely, the industrial production of methanol. The choice of the optimal development environment for creating operator windows in the chemical industry, as well as the prospects of digital counterparts in chemical production, are examined.

Keywords: development environment, digital double chemical production, graphical interface, operator window.

В настоящее время с развитием цифровых технологий происходит цифровизация различных сфер общества. Промышленное производство не является исключением, поэтому на основе реально существующих предприятий создаются так называемые «Цифровые двойники промышленных производственных процессов» (Digital Twin). Цифровой двойник – это цифровая модель процессов или объектов, которая зачастую предназначена для улучшения и повышения качества продукции, производимой на предприятии [1].

Существует несколько основных видов «цифровых двойников»:

- «Цифровой двойник» продукта – представляет собой виртуальную модель продукта. В производстве он используется перед настройкой рабочей линии, чтобы проанализировать его поведение перед запуском и в дальнейшем прогнозировать его функционирование.
- «Цифровой двойник» процесса – это уже несколько моделей, которые имитируют непосредственно сами производственные процессы. Они позволяют разрабатывать для компании наиболее эффективную организацию производства. Процесс оптимизируется за счет виртуальных двойников продукта для каждой единицы оборудования.
- «Цифровой двойник» системы – виртуальные модели всей системы в целом. Они включают в себя объемы данных, производимых продуктами и устройствами в системе, обычно такие двойники

оптимизируют все стадии, необходимые для производства конечного продукта [2].

На основе цифрового двойника продукта создается цифровой двойник, уже готовый к эксплуатации, также учитывается применение программного обеспечения, которое дает возможность обрабатывать данные об его производительности и эффективности в реальном эксплуатационном режиме. Как следствие, информацию, полученную таким образом можно использовать при создании или модернизации цифрового двойника продукта процесса и даже цифрового двойника системы, что крайне необходимо при оптимизации уже готовых решений, позволяя значительно повышать производительность технологических систем при создании новой продукции. Благодаря виртуальным тренажерам, созданным на базе цифровых двойников промышленных производств, сотрудники имеют возможность в достаточном объеме пройти подготовку, прежде чем совершать какие-либо действия на реальном производстве, что крайне важно для безопасности производства, а также для формирования профессиональных знаний и приобретения ими соответствующей квалификации.

Для любого такого двойника системы или производства необходим графический интерфейс пользователя, с помощью которого осуществляется управление самим процессом производства. Графический пользовательский интерфейс (GUI) – это тип пользовательского интерфейса. Он позволяет быстро ориентироваться в компьютере или каком-либо устройстве и выполнять различные действия с

помощью необходимых графических окон, значков, визуальных индикаторов. Интерфейс должен быть понятен любому пользователю интуитивно без необходимости обращения к руководству. Для этого обычно необходимы графические справки [3].

Почти все современные графические интерфейсы строятся по модели WIMP-Window, Icon, Menu, Pointer (окно, иконка, меню, указатель). Элементы графического интерфейса, так называемые виджеты (widget – штука), обычно располагаются внутри окон. Меню может располагаться в различных частях окна. Его предназначение всегда одинаково: оно служит для выбора действий из определенного предоставленного набора. С помощью указателя пользователь сообщает программе те действия, которые он хочет выполнить. Графический интерфейс приобретает независимость от языка программирования с помощью иконок, они позволяют ориентироваться гораздо быстрее в самом интерфейсе, поэтому первоочередной задачей любого графического интерфейса должно являться упрощение коммуникации между самим интерфейсом и пользователем, следовательно, он должен быть удобен и понятен для типичных действий и операций [4].

Существует ряд стилей пользовательского интерфейса, которые получили наибольшее распространение: графический пользовательский интерфейс (GUI), пользовательский веб-интерфейс (WUI), объектно-ориентированный пользовательский интерфейс. Стилевые окна, детали, виджеты WUI-интерфейса зачастую не значительно отличаются от GUI.

Основные особенности приложения с использованием WUI-стиля:

- Веб-браузер обеспечивает меню для Web-приложения.
- Выбор действий ограничен в связи с меню, которое обеспечивает доступ к функциям, и не всегда является легкодоступным.
- Информация отображается в GUI-окне, называемом веб-браузером, свойства окна могут быть различными, в зависимости от вида браузера.
- Создание специализированных меню требует дополнительной работы по программированию.
- Веб-браузер также служит для обеспечения базовых возможностей навигации с помощью различных кнопок на панели инструментов.

Проектирование интерфейса представляет собой многоэтапный процесс, каждый из этапов которого в свою очередь состоит из отдельных задач. Одной из таких задач является выбор среды, на которой будет базироваться основная структура WUI [5].

Для создания графического интерфейса цифрового двойника химического производства был выбран Vue.js, прогрессивный фреймворк для создания пользовательских интерфейсов, его ядро решает задачи уровня представления (view), это упрощает интеграцию с другими библиотеками. Данный фреймворк позволяет работать с графическими объектами, меняя их размеры, координаты, точки привязки, также с его помощью возможно создание графических редакторов, так как он предназначен для удобства прототипирования сложных пользовательских веб-интерфейсов.

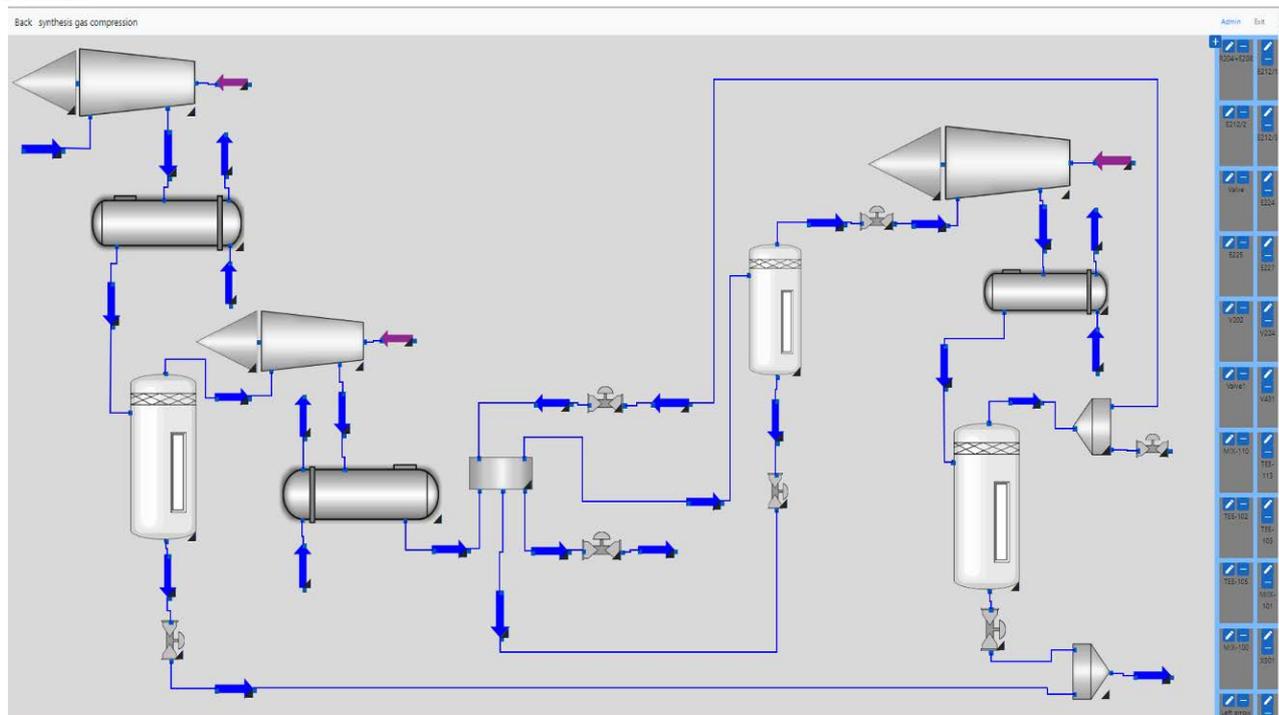


Рис. 1. Пример окна оператора АСУ

В ходе работы была рассмотрена и детально изучена технологическая схема синтеза метанола на основе реального промышленного производства, которая была смоделирована в специализированной

программе Unisim Design в динамическом режиме. Пакет UniSim Design АО «ХОНЕВЕЛЛ» – это программа, позволяющая создавать статические технологические схемы с моделями различных

аппаратов, параметры которых не меняются со временем, и динамические, а также системы автоматического управления ими.

Используя прототип данной схемы, были выполнены рисунки моделей аппаратов в программе Adobe Photoshop для последующей возможности внесения их в общую коллекцию аппаратов. На рис.1 коллекция аппаратов представлена справа, с ее помощью можно добавлять аппараты и располагать их в окне оператора по техническому регламенту производства. Также для аппаратов были созданы направления входящих и выходящих потоков, их тоже можно добавлять в окно оператора из коллекции аппаратов. Потоки не привязываются к аппаратам, а лишь имеют определенные параметры, а также свое определенное наименование.

Сама коллекция аппаратов, окно их добавления, изменения свойств аппаратов и последующего возможного их удаления были реализованы с помощью фреймворка Vue.js. Для хранения данных о каждом аппарате используется Django, свободный фреймворк для веб-приложений на языке Python. Свойства аппаратов, которые смоделированы в Unisim Design передаются от каждого аппарата в базу данных, откуда уже потом считываются для определенного аппарата в веб-интерфейсе, параметры могут считываться из базы данных как для статических, так и для динамических режимов моделирования производства метанола, связь происходит при помощи фреймворка Django.

В окне свойств для любого выбранного аппарата пользователь имеет возможность добавлять его наименование, ставить точки привязки к определенным потокам, в том числе энергетическим, выбирать размеры самого аппарата, или добавлять аппараты по соответствующим им пропорциям, также реализована возможность удаления аппарата из схемы в окне оператора без его удаления из коллекции. При удалении аппарата из коллекции, он автоматически удаляется и из схемы в окне оператора.

Веб-страница, в разметку которой добавляются аппараты, написана на стандартизированном языке разметки HTML с использованием формального языка описания внешнего вида документа CSS. Пользователь имеет возможность не только добавлять необходимые аппараты, из представленных в коллекции аппаратов, располагая их для удобства читаемости компонентов и данных к ним, но и изменять свойства аппаратов, которые уже расположены на самой схеме, при необходимости изменяя пропорции или добавляя новые точки привязки. Действия пользователя могут быть также отменены при нажатии соответствующей кнопки в окне изменения свойств.

Технологическая схема промышленного производства метанола состоит из нескольких основных этапов: предреформинга и реформинга, охлаждения конвертированного газа, компрессии синтез-газа и непосредственно самого ключевого этапа - синтеза метанола. Для удобства читаемости параметров были созданы мнемо-схемы, которые являются частями одной общей технологической схемы промышленного производства метанола. Каждая

из мнемо-схем - это производственный этап общей технологической схемы. Чтобы избежать перегруженности мнемо-схем и снижения их читаемости этапы синтеза метанола, компрессии синтез-газа, охлаждения конвертированного газа разделены, каждый на две части. Это обеспечит оператору автоматизированной системы управления технологическим процессом (АСУТП) возможность более внимательно и комфортно следить за состоянием параметров при регулировании или управлении ими. Переключение между мнемо-схемами, происходит по ссылкам на соответствующие разделы, при этом есть возможность при необходимости возвращаться к любой мнемо-схеме, не выходя из самого окна оператора.

Таким образом, в ходе данной работы были:

- выполнены рисунки моделей аппаратов технологической схемы для последующего их добавления в окно оператора АСУТП промышленного производства метанола;
- на языке программирования Java Script с использованием фреймворка Vue.js спроектирована коллекция аппаратов с возможностью добавления в нее новых аппаратов;
- разработан программный модуль интерфейса с использованием фреймворков Django, Vue.js, языков программирования Python, Java Script, языка разметки HTML и языка описания внешнего вида веб-документа (стилей) CSS для цифрового двойника химического производства, а именно, промышленного синтеза метанола.

Список литературы

1. Курганова Н. В., Филин М. А., Черняев Д. С., Шаклеин А. Г., Намиот Д. Е. / Внедрение цифровых двойников как одно из ключевых направлений цифровизации производства // International Journal of Open Information Technologies ISSN: 2307-8162. - Vol. 7, №.5, 2019. - С.105-106.
2. Кокорев Д. С., Юрин А. А. / Цифровые двойники: понятие, типы и преимущества для бизнеса // COLLOQUIUM-JOURNAL. – 2019. - №10 (34). – С. 2-3.
3. Миронов А. С. / Пользовательский интерфейс // Молодой ученый. — 2016. — №15(119). — С. 145-147. – URL: <https://moluch.ru/archive/119/33034> (дата обращения:25.05.2020).
4. Ермаков М.К., Герасимов А.Ю., Куц Д.О., Новиков А.А. Проведение итеративного динамического анализа приложений, предоставляющих графический интерфейс пользователя. Труды ИСП РАН, том 29, вып. 1,2017г., стр. 120-121. DOI: 10.15514/ISPRAS-2017-29(1)-8.
5. Сергеев С. Ф., Падерно П. И., Назаренко Н. А. // Введение в проектирование интеллектуальных интерфейсов: Учебное пособие. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2011. – С. 29-34.

УДК 004.8

Папаев П.Л., Макляев И.В., Дударов С.П.

СРАВНЕНИЕ МОДЕЛИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ РАДИАЛЬНО-БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ И ДВУХСЛОЙНЫХ ПЕРЦЕПТРОНОВ

Папаев Павел Леонидович, старший преподаватель кафедры информационных компьютерных технологий;
Макляев Илья Васильевич, студент 2 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

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

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

Рассмотрены нейронная сеть радиально-базисных функций (РБФ-сеть) и двухслойный перцептрон как методы получения математического описания процессов в химической технологии и смежных отраслях. На основе анализа алгоритмов обучения, времени и вычислительных затрат на обучение, ошибок обучения и тестирования даются рекомендации по использованию рассмотренных архитектур.

Ключевые слова: искусственная нейронная сеть, сеть радиально-базисных функций, РБФ-сеть, двухслойный перцептрон, математическая модель.

COMPARISON OF MODELING ABILITY BETWEEN RADIAL BASIS FUNCTION NEURAL NETWORKS AND DOUBLE-LAYER PERCEPTRONS

Paapaev P.L., Maklyaev I.V., Dudarov S.P.

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

There was considered the neural radial basis function network (RBF network) and the double-layer perceptron as methods of receiving the mathematical description of processes in chemical technology and adjacent branches. There was given recommendations on considered architectures application basing on analysis of training algorithms, training time, training computational expense, errors on training and testing.

Keywords: artificial neural network, radial basis function neural network, RBF network, double-layer perceptron, mathematical model.

Задачи моделирования процессов в химической технологии, фармацевтической промышленности, биотехнологии и смежных отраслях традиционно решаются с помощью классических подходов и методов, получивших своё развитие в 60–80 гг. XX века. В последние десятилетия большую популярность приобрело нейросетевое моделирование. Благодаря большому количеству существующих архитектур искусственных нейронных сетей с помощью них можно решать различные разновидности задач моделирования. В данной работе проводится сравнение моделирующей способности двухслойных перцептронов и нейронных сетей радиально-базисных функций.

Двухслойные перцептроны представляют собой искусственные нейронные сети прямого распространения, имеющие, в общем случае, произвольное количество входных и выходных переменных [1]. В структуре таких сетей всего два слоя нейронов: скрытый и выходной. Количество входов сети соответствует количеству входных переменных математической модели, а количество нейронов выходного слоя и, соответственно, выходов нейронной сети – количеству выходных переменных математической модели. Количество скрытых нейронов может варьироваться разработчиком модели в зависимости от сложности связи входов и выходов, разнообразия и количественного состава примеров

обучающей выборки и, как правило, должно быть больше числа выходных переменных. Двухслойные перцептроны содержат однотипные, обычно одинаково настроенные нейроны с сигмоидной логистической активационной функцией.

Нейронные сети радиально-базисных функций также имеют двухслойную структуру [1], однако нейроны в скрытом и выходном слоях различаются между собой. Скрытый слой – это слой радиально-базисных функций. В качестве активационной функции таких нейронов обычно используется одномерная или многомерная (в зависимости от размерности задачи моделирования) функция Гаусса. Количество скрытых нейронов определяется количеством заданных стационарных узлов интерполирования, а выходы этих нейронов, соответственно, представляют собой меру степени соответствия вектора входных переменных центрам одного из узлов. Нейроны второго (выходного) слоя призваны линейно взвесить выходы нейронов скрытого слоя, что позволяет рассчитать выходы сети для поданной на неё входной комбинации значений переменных.

Обе представленные архитектуры искусственных нейронных сетей неоднократно доказывали свою эффективность при решении различных задач моделирования в ранее проведённых исследованиях [2–4]. В данной работе проводится сравнение

эффективности решения задач моделирования с использованием этих двух альтернативных архитектур.

К основным критериям сравнения двух архитектур нейронных сетей можно отнести: алгоритм обучения, время обучения, время расчёта по обученной нейронной сети, сложность структуры, объём вычислений, ошибки обучения и тестирования, принципы подбора параметров настройки сети. Многие из перечисленных критериев связаны между собой. Проведём последовательное сравнение рассматриваемых архитектур по перечисленным выше критериям.

Обе архитектуры обучаются по принципу обучения с учителем. Он подразумевает наличие обучающего множества, представляющего собой массив сопоставленных друг с другом входных и выходных переменных. В обоих случаях цель обучения нейронной сети – определение таких значений весовых коэффициентов, при которых рассчитанные значения выходных переменных будут наиболее близки к выходным значениям обучающих примеров. В случае двухслойных перцептронов алгоритм обучения заключается в многократном уточнении весов, ход которого зависит от начальной инициализации весовых коэффициентов и порядка предъявления обучающих примеров. В наибольшей степени это проявляется в алгоритме обратного распространения ошибки [1]. В зависимости от сложности структуры нейронной сети и рельефа поверхности функции ошибки для обучения перцептронов могут применяться и другие алгоритмы градиентного, детерминированного и случайного поиска. В нейронных сетях на основе радиально-базисных функций весовые коэффициенты выходного слоя могут быть вычислены однозначно за один расчётный цикл с использованием базовых операций матричной алгебры благодаря линейной связанности с выходными значениями и, как следствие, с погрешностью расчёта для каждого отдельно взятого примера. Указанные отличия в организации алгоритма обучения определяют возможность дообучения двухслойных перцептронов при появлении новых обучающих векторов и необходимость обучения с самого начала в аналогичной ситуации для РБФ-сетей.

По времени обучения РБФ-сети и двухслойные перцептроны могут сильно различаться из-за особенностей организации алгоритма подбора весовых коэффициентов. Если для РБФ-сетей это происходит быстро, во многих случаях мгновенно вследствие однократного выполнения расчётного цикла, то для двухслойных перцептронов процесс может растянуться даже на минуты и часы. В последнем случае продолжительность обучения будет очень чувствительна к размерности задачи, структуре сети объёму обучающей выборки.

Длительность обучения двухслойных перцептронов никак не сказывается на времени их практического использования. Так же, как и для РБФ-

сетей расчёт по уже обученному перцептрону выполняется быстро за однократный проход сигналов от входов к выходам.

По сложности структуры рассматриваемые сети практически не отличаются. Обе они двухслойные с прямым распространением сигналов. В обоих случаях нелинейность обработки входов достигается за счёт применения активационной функции: в РБФ-сетях – функции Гаусса, в перцептронах – сигмоидной логистической функции. Единственное существенное отличие в том, что в двухслойных перцептронах нелинейное преобразование сигналов осуществляется в обоих слоях, а в РБФ-сетях только в скрытом слое. Близость структуры этих двух сетей приводит к минимальной, практически несущественной разнице в объёме вычислений по обученным сетям.

Обе сети одинаково чувствительны к объёму и репрезентативности обучающих данных. Чем больше примеров обучающей выборки, тем меньше должны быть ошибки обучения и тестирования при адекватной сложности структуры сети. Однако если при настройке двухслойных перцептронов учесть репрезентативность данных в обучающей выборке практически не представляется возможным, то для РБФ-сетей это возможно сделать, регулируя плотность узлов интерполирования в скрытом слое.

В качестве одного из основных параметров настройки обеих архитектур нейронных сетей используется параметр насыщения активационной функции – коэффициент при аргументе в экспоненте. Чем он выше, тем более строгая селективность выходного значения наблюдается для значений аргументов. И наоборот, чем ближе параметр насыщения к нулевому значению, тем в меньшей степени учитывается влияние аргумента активационной функции. При подборе параметра насыщения важно найти правильный баланс между его большой и малой величиной, так как слишком большое значение приведёт к минимизации диапазона значений аргумента, влияющих на результат вычисления, а слишком маленькое – к размытости и неопределённости этого диапазона.

Обобщённые результаты сравнения двух архитектур приведены в таблице 1.

Практические результаты сравнения моделирующей способности РБФ-сетей и двухслойных перцептронов продемонстрированы на рис. 1. Рассматривалась выборка из 88 обучающих примеров, описывающая изменение концентрации молочной кислоты в биореакторе. В качестве нейросетевых моделей рассматривались и сравнивались двухслойный перцептрон с 5 нейронами в скрытом слое и нейронная сеть радиально-базисных функций с 5 скрытыми радиальными элементами. В обоих случаях параметр насыщения активационных функций равнялся 2,0. Тестирование проводилось на 10 примерах для конкретного эксперимента. В результате ошибка тестовой выборки для РБФ-сети составила 10,7%, для перцептрона – 5,97%.

Таблица 1. Сравнение влияния РБФ-сетей и двухслойных перцептронов на ход и результат моделирования

Критерий сравнения	Нейронная РБФ-сеть	Двухслойный перцептрон
Организация алгоритма обучения	Однократный расчёт весовых коэффициентов	Многочисленное повторение цикла обучения
Возможность дообучения	Нет	Есть
Однозначность результата обучения	Есть	Нет
Продолжительность обучения	Быстро	Медленно
Время использования обученной сети	Быстро	Быстро
Слоёв с нелинейным преобразованием сигналов	Один	Два
Возможность учёта плотности обучающих данных	Есть	Нет

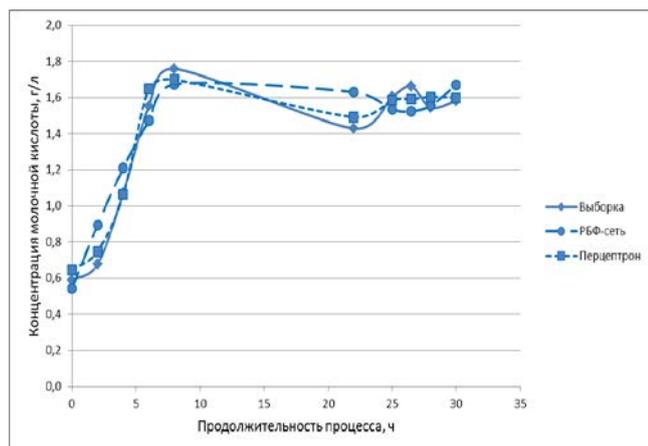


Рис. 1. Изменение концентрации молочной кислоты в биореакторе: фактическое (выборка), модель на основе перцептрона, модель на основе РБФ-сети

По результатам проведённого сравнения можно сделать следующие основные выводы:

1. Двухслойные перцептроны требуют более продолжительного обучения и большего расхода вычислительных ресурсов во время процесса обучения;

2. При эквивалентных по сложности структурах двухслойные перцептроны позволяют получить математическое описание с меньшим уровнем ошибки, чем РБФ-сети;

3. РБФ-сети целесообразно применять в качестве инструмента для получения математического

описания функций со сложным рельефом поверхности и неоднородной плотностью значений входных переменных в обучающей выборке.

Список литературы

1. Дударов С. П., Папаев П. Л. Теоретические основы и практическое применение искусственных нейронных сетей. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2014. – 104 с.

2. Александров А. К., Дударов С. П. Моделирование процесса перемешивания в реакторе и определение его оптимальных конструктивных характеристик с использованием нейронных сетей радиально-базисных функций/ А. К. Александров, С. П. Дударов. – Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXXIII, № 11. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2019. – с. 12–14.

3. Маркин И. С., Дударов С. П. Программное обеспечение для интерполирования полей загрязнения атмосферы в режиме реального времени с использованием нейронных сетей радиально-базисных функций/ И. С. Маркин, С. П. Дударов. – Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXXII, № 1. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2018. – с. 12–14.

4. Дударов С. П., Папаев П. Л., Кудряшов А. Н., Карибова Ю. А. Ячеечно-нейросетевые модели в задачах экологической безопасности. – Искусственный интеллект и принятие решений, 2011, № 2. – с. 31–39.

УДК 004.942; 66.011

Бадалян М.Г., Женса А.В.

СОЗДАНИЕ ВЕБ-ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА СВОЙСТВ КАТАЛИЗАТОРНЫХ ПАСТ

Бадалян Максим Грачьевич, студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Женса Андрей Вячеславович, к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий.

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

e-mail: andreygensa@mail.ru

Разработано веб-приложение с минимальными системными требованиями, при помощи которого пользователь может регулярно проводить расчеты конечных химических, физических и механических свойств катализаторных паст. В этом приложении используется модель формования пасты с использованием экструзионного метода, эта модель позволяет рассчитать концентрации компонентов сплошной фазы. Система включает в себя базу данных и веб-приложение, допускающее динамические, гибкие наборы входных параметров.

Ключевые слова: катализаторные пасты, базы данных, веб-приложение.

CREATION OF A WEB APPLICATION FOR CALCULATING THE PROPERTIES OF CATALYST PASTS

Badalyan Maksim Grachyaevich, Zhensa Andrey Vyacheslavovich

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

A web application with minimal system requirements has been developed, with use of which one can regularly perform calculations of the final chemical, physical and mechanical properties of the catalyst paste. This application includes a paste molding model with an extrusion method, this model allows to calculate the concentrations of the components of the continuous phase. The system includes a database and a web application that allows dynamic, flexible sets of input parameters.

Keywords: catalyst pastes, databases, web application.

Благодаря скачку в развитии таких отраслей, как химическая, нефтехимическая, автомобильная промышленность и так далее, привело к тому, что растет актуальность в применении катализаторов. Наиболее успешной практикой является использование катализаторов с развитой геометрической формой. Существует большое количество способов формовки катализаторов, среди которых в рамках этой работы рассматривается экструзия.

В связи с широким распространением сложных процессов, подразумевающих под собой в том числе проведение комплексных вычислений, нуждающихся в компьютерных вычислительных мощностях, возникла задача в разработке и оптимизации таких инструментов, программ и приложений, позволяющим ученым и специалистам указанных отраслей проводить все необходимые расчеты.

Учитывая вышеизложенное, можно сформулировать цель работы: создание такого веб-приложения, которое сможет предсказывать необходимые параметры и переменные процессов, возникающие при формировании катализаторной пасты.

Вместе с целью можно поставить следующие задачи:

1. Разработка веб-приложения (в том числе серверной расчетной части веб-приложения), которое будет отвечать за получение конечных параметров физико-химических свойств катализаторных паст α -Fe₂O₃ с помощью инструментов веб-разработки,

которыми в данном случае выступают язык JavaScript, язык разметки HTML5 и такие технологии, как CSS3, JSON и др.

2. Разработка базы данных, содержащей в себе начальные концентрации компонентов, используемых для получения катализаторных паст. База данных также содержит и соответствующие компонентам физико-химические и механические свойства.

3. Использование адаптивного подхода при разработке фронт-энда. Максимизировать скорость расчетов внутри приложения.

При разработке использовалась программная платформа ASP.NET Core [1], с помощью которой создавалось приложение для отображения расчетных данных.

Говоря об актуальности практической части работы и её ценности вообще, можно сказать, что на текущий момент большинство расчетных модулей, программ, приложений реализованы в формате десктопной программы, что подразумевает целый ряд ограничений и неудобств. Реализованное в рамках данной работы веб-приложение разработано с использованием передовых технологий программирования, доступно на любой вычислительной машине, имеющей доступ к Интернету. Приложение предсказывает свойства физико-химических и механических свойств катализаторных паст α -Fe₂O₃ при известных начальных концентрациях компонентов. А также при решении обратной задачи, то есть для расчета начальных компонентов для заданных физико-

химических (пластическая прочность и вязкость) и механических свойств (механическая прочность и пористость) катализаторных паст α -Fe₂O₃.

Интерфейс приложения представлен в виде веб-страницы с размещённой на ней формой для исходных условий процесса экструзивного формования (рис. 1). Заполненная форма может быть отправлена на сервер для вычисления по её значениям характеристик катализаторной пасты. Для ограничения несанкционированного доступа к системе предусмотрен механизм авторизации. Неавторизованный пользователь (гость) может только просматривать результаты ранее произведённых вычислений.

Авторизованному пользователю открывается доступ к основному функционалу системы:

1. Расчёт характеристик пасты, полученной из заданного состава исходных веществ. Расчёт

производится по математической модели расчета свойств катализаторных паст [2].

2. Подбор состава, необходимого для получения пасты с характеристиками, максимально близкими к заданным. Для подбора состава дополнительные вычисления не производятся; вместо этого выполняется проход по базе ранее проведённых результатов в поиске паст с похожими характеристиками. Результаты поиска ранжируются по близости к искомым характеристикам, и пользователю возвращается самый близкий вариант. В нижней части страницы отображается история ранее проведённых расчётов. Выбрав необходимый результат щелчком мыши, можно загрузить детальные параметры расчёта в поля формы. Если исследователя не устраивает полученный им результат, то он может запросить его удаление из базы результатов.

Рис. 1. Интерфейс веб-приложения

Все компоненты приложения, отвечающие непосредственно за процесс вычислений, расположены в серверной части приложения. Серверная часть представляет собой приложение на языке C#, предназначенное для выполнения на высокопроизводительной удалённой машине, доступной через Интернет. При этом, если возникнет такая необходимость, серверную часть можно запустить и на локальном компьютере. Структура серверной части организована по парадигме MVC (Model-View-Controller). Согласно этой парадигме, логика приложения разбита на три независимые, но взаимодействующие с собой части:

1. Модель инкапсулирует данные, используемые как входные данные расчётов, а также результаты этих расчётов.

2. Вид (интерфейс) представляет данные модели в удобной форме.

3. Контроллер содержит всю логику приложения, в том числе методы Compute и Extrude, в которых проходят все вычисления, связанные с процессом моделирования формирования паст.

Для создания приложения использовался фреймворк ASP.NET Core, созданный специально для упрощения разработки веб-приложений и веб-сервисов. Компоненты этого фреймворка используются для приёма HTTP-запросов от клиентов, десериализации передаваемых данных, вызова соответствующих методов контроллера, и передачи результатов обратно.

Даже на достаточно мощном компьютере процесс расчёта занимает не меньше одной минуты. Однако, прирост производительности даёт то, что каждый из одновременно проводимых расчётов производится в отдельном потоке – в том случае, если пользователь воспользовался функцией «Загрузить файл» и тем самым инициировал сразу несколько расчётов. Дополнительный прирост производительности придаёт оптимизация излишних вычислений: перед началом нового расчёта сервер сканирует базу данных в поисках уже проведённого расчёта с такими же входными данными. Если такой расчёт был найден, то его результат сразу возвращается пользователю.

№	МАССА ОКСИДА ЖЕЛЕЗА (г)	МАССА РАСТВОРА МЦ (г)	МАССА РАСТВОРА ПВА (г)	ПЛАСТИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ (кПа)	ВЛАЖНОСТЬ (%)	ВЯЗКОСТЬ (Па·с)	МЕХАНИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ (МПа)	ПОРИСТОСТЬ	
1	550	55.0	87.0	64.0	18.9	0.0120	0.423	0.571	✘
2	700	50.0	87.0	1.54E+3	16.0	15.3	1.26	0.505	✘
3	550	50.0	67.0	1.19E+3	16.0	2.16	1.03	0.523	✘
4	655	50.0	87.0	1.11E+3	16.0	3.34	1.07	0.519	✘
5	625	50.0	82.0	1.10E+3	16.0	2.87	1.06	0.521	✘

Рис. 2. Таблица результатов проведённых вычислений

Все расчеты выполняются на удалённом (или локальном) сервере, а доступ к интерфейсу можно получить по протоколу HTTP с помощью любого современного веб-браузера. Таблица результатов проведённых вычислений представлена на рис. 2.

Все результаты проведённых вычислений сохраняются сервером в базу данных SQLite. SQLite – компактная свободная библиотека для работы с базами данных с помощью языка запросов SQL. Все данные баз при этом сохраняются в один файл, что идеально подходит для приложений с простой структурой и незначительным объёмом хранимой информации.

Помимо этого, приложением также используется фреймворк Entity Framework Core. Компоненты этого фреймворка выполняют роль посредника между сервером баз данных и самим приложением, и поэтому позволяют работать с содержимым базы

данных так, как если бы оно находилось внутри обычного массива данных, избавляя от необходимости вручную составлять запросы на языке SQL. С помощью EF Core в приложении установлена взаимосвязь между моделями результатов вычислений и содержимым базы данных, что позволяет в значительной степени упростить задачу загрузки и сохранения информации.

Структура базы данных приведена на рис. 3. Все результаты проведённых вычислений сохраняются в таблице Computations. У каждого элемента этой таблицы присутствует поле UserID, в которое записывается уникальный идентификатор пользователя, проведшего это вычисление. Вся информация о пользователях, включая их идентификаторы, хранится в таблице Users.

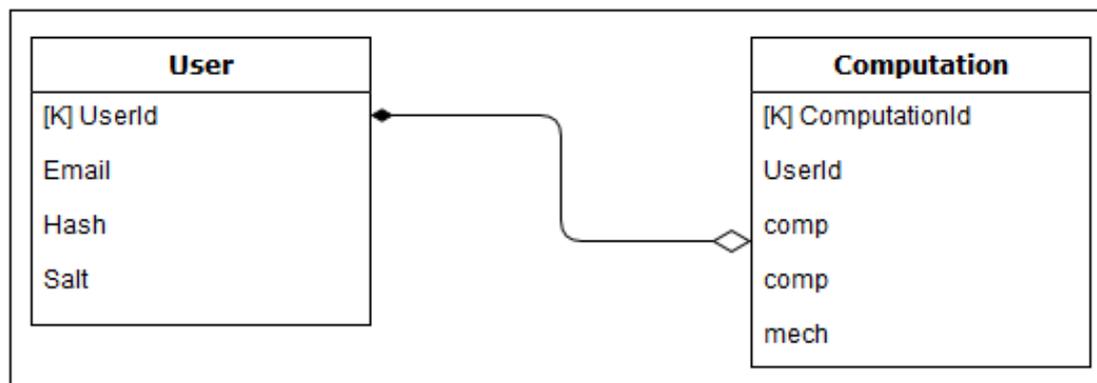


Рис. 3. Схема базы данных приложения

Передача данных между клиентом и сервером происходит по протоколу HTTP. Для передачи информации происходит её сериализация в формат JSON (JavaScript Object Notation). Структура передаваемых данных представляется в виде текстового файла, который затем сжимается и прикрепляется к телу HTTP-запроса или ответа.

В данной работе получены следующие результаты:

1. Создано приложение и серверный модуль, на котором проводятся вычисления начальных концентраций для получения катализаторной пасты.

2. Разработана база данных начальных концентраций компонентов для получения катализаторных паст.

3. При создании приложения использовалась блочная вёрстка и увеличена адаптивность приложения.

4. Реализован функционал вычисления оптимальных начальных параметров для заданной катализаторной пасты.

Список литературы

1. Эспозито, Дино. Программирование на основе Microsoft® ASP.NET MVC [Текст] : [с учетом версии ASP.NET MVC 3 : перевод с английского] / Дино Эспозито. - 2-е изд. - Санкт-Петербург : БХВ-Петербург, 2012. - 447 с.
2. Женса А. В., Кольцова Э. М., Петропавловский И. А., Костюченко В. В. Математическое моделирование течения водно-оксидных катализаторных паст в поршневом экструдере // Теоретические основы химической технологии. – 2006. – Том 40 – № 2. – С. 157-162.

УДК 66.023

Ильмурзаева Д.Р., Савицкая Т.В.

АНАЛИЗ И СРАВНЕНИЕ АЛГОРИТМОВ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНОГО ПОИСКА НА ПРИМЕРЕ ВЫБОРА ЦЕНТРИФУГ

Ильмурзаева Динара Ризабековна, студент 2 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва, e-mail: dinara_ilm@mail.ru;

Савицкая Татьяна Вадимовна, д.т.н, профессор кафедры компьютерно-интегрированных систем в химической технологии РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва, e-mail: savitsk@muctr.ru;

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

В статье рассматривается применение алгоритмов поиска для выбора оборудования. Приводится сравнение работы алгоритмов. В качестве примера приводится выбор центрифуг для химического производства. Критериями оценки являются основные характеристики рассматриваемого типа промышленного оборудования. В результате предлагается список из нескольких наиболее подходящих решений.

Ключевые слова: выбор оборудования, алгоритм выбора оборудования, многокритериальный поиск, многоассортиментное производство.

ANALYSIS AND COMPARISON OF MULTI-CRITERION SEARCH ALGORITHMS BY THE EXAMPLE OF THE CENTRIFUGES SELECTION

Ilmurzaeva Dinara Rizabekovna, Savitskaya Tatyana Vadimovna.

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

The article discusses the use of search algorithms for equipment selection. A comparison of the operation of the algorithms is given. An example is the selection of centrifuges for chemical production. Evaluation criteria are the main characteristics of the type of industrial equipment under consideration. As a result, a list of some of the most appropriate solutions is proposed.

Keywords: equipment selection, equipment selection algorithm, multi-criteria search, multi-assortment production.

Задача выбора оборудования является очень серьезным этапом в проектировании химических производств. В стране утверждена стратегия развития химического комплекса до 2030 года [1], которая заключается в проектировании новых химических производств и модернизации устаревших. Сделать процесс перехода к новым производствам более быстрым и с наименьшими потерями поможет эффективное решение по технологическому оборудованию, которое будет удовлетворять основным критериям проектировщика.

Существуют методы многокритериального принятия решений, которые могут подойти для данной задачи, в статье рассматриваются – PROMETHEE II, МАИ, SAW [2-3]. Также приводится метод поиска решения с использованием разработанного авторами алгоритма [4].

Метод PROMETHEE II входит в семейство методов PROMETHEE разработанных Жан-Пьер Брансом в 1982 году. Это семейство методов предназначено для решения дискретных многокритериальных задач. Название PROMETHEE расшифровывается как “Preference Ranking Organization Method for Enrichment Evaluations”, переводя на русский язык: “Метод Формирования Рангов Предпочтения для Обогащения Оценок”. В частности, метод PROMETHEE II используется для полного ранжирования альтернатив. Данный метод

имеет широкое применение в различных областях, таких как: химия, промышленность, логистика, управление бизнесом и финансами, медицина.

SAW («Simple Additive Weighting») «Метод простого суммарного взвешивания» является широко используемым методом многокритериального принятия решений. Оценка альтернативы в этом методе равна взвешенной сумме предпочтений. Используя этот метод, лицо принимающее решение (ЛПР), получает общую оценку каждой альтернативы, путем умножения веса важности каждого критерия на нормализованную оценку и суммирования оценок по критериям.

МАИ (Метод анализа иерархий) разработан Томасом Саати. Суть метода заключается в исследовании сложных систем посредством попарных сравнений. Метод применяется во всем мире для принятия решений, касающихся управления на межгосударственном уровне до отраслевых решений и частных проблем в бизнесе, промышленном производстве, образовании.

Специфика конкретной задачи выбора оборудования, свойства критериев, а также дальнейшее применение метода в информационной системе требуют иного подхода к решению задачи. Разработанный алгоритм [4] позволяет работать в случаях, когда максимальная эффективность оборудования достигается при наибольшем значении, так и когда максимальная эффективность

достигается при наименьшем значении критерия. В алгоритме используется достаточно простой математический аппарат, что позволяет легко его запрограммировать и внедрить в информационную систему.

Поиск с использованием разработанного алгоритма заключается в группировке (агрегации) имеющихся альтернатив по общим признакам, в случае задачи выбора оборудования - этим признаком является серия оборудования. Затем происходит анализ каждого критерия, и, в зависимости от условий задачи, выставляются оценки по этому критерию. Шкала оценок зависит от общего количества сравниваемого оборудования. Шкала может изменяться при добавлении или исключении оборудования из списка сравнения. В этом случае, ранее выставленные оценки будут пересчитываться. Разработанный алгоритм также можно применять во многих сферах человеческой деятельности.

Далее приводится сравнение перечисленных выше методов на примере выбора центрифуг. Постановка задачи выбора оборудования может сильно различаться в зависимости от условий в которых находится производитель. Постараемся привести достаточно объективную постановку задачи.

Исходными данными являются 32 фильтрующих центрифуги, представленных в каталоге компании PEATOPГ[5]:

- LGZ/PGZ 800, LGZ/PGZ 1000, LGZ/PGZ 1250, LGZ/PGZ 1500, LGZ/PGZ 1600, LGZ/PGZ 1800 – с ножевым съемом и нижней выгрузкой осадка;
- PLD 800, PLD 1000, PLD 1250, PLD 1600, PLD 1800 – с ножевым съемом и нижней выгрузкой осадка;
- PSB 600, PSB 800, PSB 1000, PSB 1200, PSB 1250, PSB 1500 – с верхней выгрузкой осадка;
- PSD 800, PSD 1000, PSD 1200, PSD 1250, PSD 1500, PSD 1600, PSD 1800 – с верхней выгрузкой осадка;
- PQFB 600, PQFB 800, PQFB 1000, PQFB 1250 – с верхней выгрузкой осадка;
- GKF800, GKF1000, GKF1250, GKF1600 – горизонтальные центрифуги с ножевым съемом осадка.

Постановка задачи: требуется подобрать фильтрующую центрифугу для модернизации многоассортиментного химического производства. Центрифуга должна удовлетворять следующим требованиям для критериев:

- 1) загрузка сырья (кг) - максимальная;
- 2) мощность (кВт) - высокая;
- 3) фактор разделения (безразмерная величина) - максимальный;
- 4) стоимость (руб.) - минимальная;
- 5) габаритные размеры (длина, ширина, высота (мм)) - минимальные;
- 6) вес (кг) - минимальный.

Для подбора центрифуг методом PROMETHEE и SAW используется простое приложение для многокритериальной оценки альтернатив, разработанное в среде MS Excel, в качестве стандартной надстройки. Приложение написано в Visual Basic, название надстройки - SANNA [6] (система анализа альтернатив), надстройка распространяется в свободном доступе, для загрузки файла необходимо указать имя и почту. SANNA поддерживает пять основных методов для многокритериальной оценки альтернатив (WSA, TOPSIS, ELECTRE, PROMETHEE I, II, MAPPAC). Приложение может решать многокритериальные задачи с максимум 100 альтернативами и 50 критериями оценки.

Первый шаг - это создание набора данных, для этого нужно указать размерность задачи и в появившейся таблице заполнить исходные данные (значения альтернатив (моделей) и соответствующие им значения критериев).

Вторым шагом указывается какие критерии нужно максимизировать, а какие минимизировать. Далее выбираем метод PROMETHEE, задаем линейный тип функции предпочтения, для каждого из критериев, и пороговые значения для этих функций, затем задаются веса критериев. Помимо линейного типа функции предпочтения, в программе можно использовать функцию Гаусса, квазилинейную функцию, кривую безразличия. После подтверждения пользователями введенных данных, фиксируются граничные значения критериев между областью предпочтения и областью безразличия и выполняется расчет.

В результате работы метода PROMETHEE формируется матрица предпочтений, по значению суммарного потока которой выбирается наиболее подходящий вариант центрифуги. Суммарный поток характеризует разницу между положительными и отрицательными оценками модели оборудования.

Для метода простого суммарного взвешивания функции предпочтения и параметры для критериев задавать не нужно. Автоматически формируются веса критериев и нормализуются значения критериев. Нормализация в программе производится линейно.

Подбор центрифуг методом анализа иерархий проводится в электронной таблице Microsoft Excel, без использования программных модулей, так как у свободно распространяемых программных продуктов, реализующих данный метод, имеются ограничения по количеству используемых альтернатив и критериев. При решении ведется построение иерархической структуры задачи, по шкале относительной важности Саати строится матрица парных сравнений. Далее следует попарное сравнение альтернатив по каждому из критериев. По значению глобального приоритета делается вывод о наиболее подходящей модели центрифуги.

Разработанный алгоритм [4] по данной задаче также реализован в электронной таблице Microsoft

Excel. Сначала происходит группировка имеющегося оборудования по представленным сериям. Затем идет сравнение характеристик с учетом требований задачи к критериям. Оценка производится следующим образом, если было необходимо максимальное значение показателя, то выставление оценок шло прямо пропорционально, т.е. с увеличением показателя увеличивалась и оценка на один балл и наоборот. Вторым шагом являлось

суммирование полученных оценок для каждой альтернативы. В каждой сформированной группе выбирались центрифуги имеющие наибольший показатель эффективности. Затем формируется группа из лучших центрифуг в каждой серии и уже происходит сравнение непосредственно в этой группе. Результаты выбора оборудования 4 методами представлены на рис. 1.

PROMETHEE	WSA(Простого суммарного	АНР (Анализа иерархий)	Разработанный алгоритм
LGZ/PGZ 800	LGZ/PGZ800	LGZ/PGZ 800	LGZ/PGZ 800
PSB 800	PSB 800	PSD 800	PSD 800

Рис. 1. Результат выбора центрифуг 4 методами

Центрифуга модели LGZ/PGZ 800 является наилучшим решением во всех методах. Поэтому можно сделать вывод о том, что она является наиболее подходящей альтернативой для решаемой задачи. Это доказывает приемлемость подхода к решению задачи выбора оборудования, основанного на использовании многокритериальных методов принятия решений. Центрифуга модели PSB 800 отличается от PSD 800 более высокой стоимостью, в методах PROMETHEE и SAW вес данного критерия был одинаков, а в разработанном алгоритме и МАИ использовался другой подход к оценке, что отражает сходство методов.

При использовании всех методов обязательным является наличие матрицы критерий-альтернатива. В МАИ экспертам также требуется на основе оценочной шкалы Т.Саати проставить суждения. Если количество экспертов небольшое, то возникают проблемы при использовании данного метода. При увеличении размерности задачи, ручной расчет становится производить затруднительно не столько из-за сложности математических вычислений, сколько из-за усложнения структуры данных.

В методе SAW помимо матрицы критерий-альтернатива также задаются веса критериев, используются безразмерные значения показателей сравнения. В отличие от метода PROMETHEE в SAW не используются границы безразличия и предпочтения, которые помогают определить строгое предпочтение одной альтернативы над другой. В разработанном алгоритме, методе SAW, PROMETHEE обязательным является задание направления оптимизации каждого критерия (минимизация или максимизация).

Разработанный алгоритм имеет достаточно легкий математический аппарат и несложную алгоритмизацию решения. Благодаря этому, его можно автоматизировать и внедрять в информационные системы, где лицо, принимающее решение (ЛПР) сможет оценить каждую из

выбираемых альтернатив, имея наиболее подробную информацию об оборудовании. Данный способ требует минимум дополнительных сведений при решении и выдает аналогичные результаты.

Список литературы

1. Приказ Министерства промышленности и торговли РФ и Министерства энергетики РФ от 14.01.2016 г. № 33/11 “О внесении изменений в Стратегию развития химического и нефтехимического комплекса на период до 2030 года, утвержденную приказом Минпромторга России и Минэнерго России от 8.04.2014 г. № 651/172./ГАРАНТ.РУ информационно-правовой портал [Электронный ресурс]–Режим доступа: <https://www.garant.ru/products/ipo/prime/doc/71224670/> (дата обращения 10.05.2020).
2. Figueira J., Greco S., Ehrgott M. Multiple criteria decision analysis: state of the art surveys.// New York: Springer science + Business media. – 2005. С. 133-162, 200-232.
3. Abdullah L. and Adawiyah C. R., Simple Additive Weighting Methods of Multicriteria Decision Making and Applications: A Decade Review //International Journal of Information Processing and Management (IJIPM). – 2014. vol. 5, № 1, С. 39-49.
4. Ильмурзаева Д.Р., Савицкая Т.В. Разработка алгоритма выбора оборудования для решения задач многоассортиментных химических производств// Успехи в химии и химической технологии. 2019 г. Т. 33.№ 11(221). – С. 47-49.
5. Сайт компании Reatorg Technologies [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.reatorg.ru/equipment/> (дата обращения 10.05.2020).
6. Сайт надстройки для MS Excel – Sanna 2014 [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://nb.vse.cz/~jablon/sanna.htm> (дата обращения 14.05.2020).

УДК 004.457

Калайчев Г.В., Кольцова Э.М.

ПРОГРАММНОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ ДЛЯ МОНИТОРИНГА ИНФОРМАЦИИ, ПОСТУПАЮЩЕЙ С ЦИФРОВОГО ЗАВОДА

Калайчев Глеб Валерьевич, студент 2 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга

e-mail: gleb172v@gmail.com

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

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

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

Представлено программное приложение, разработанное для мониторинга технологических данных цифрового двойника. Программа представляет собой WEB-интерфейс и связанную с ним базу данных, в которую поступают измеряемые параметры с аппаратов. Для реализации программного модуля использовался язык программирования Python. Также был написан скрипт, позволяющий связывать данный сервер со средой разработки Unity3D.

Ключевые слова: цифровые двойники, мониторинг процессов, WEB-интерфейс

SOFTWARE APPLICATION FOR MONITORING INFORMATION COMING FROM A DIGITAL FACTORY

Kalaychev G.V., Koltsova E.M.

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

The software application developed for monitoring the technological data of a digital double is presented. The program is a WEB-interface and a database connected with it, into which the measured parameters are received from the devices. To implement the software module, the Python programming language was used. A script was also written that allows you to associate this server with the Unity3D development environment.

Keywords: digital twin, process monitoring, WEB-interface

В настоящее время в мировой экономике происходят обширные изменения, направленные на всеобщую цифровизацию [1-2]. Цифровые технологии, с учетом глобализации общества, увеличения доступности и ускорения передачи информации, открывают новые возможности для стимуляции и исполнения инновационных процессов. Все это привело к бурному развитию компонентов, которые стали важной частью, так называемой, цифровой экономики.

Технологические системы – это сложные социально-технические системы, подверженные различным коллизиям из-за постоянных процессов, происходящие внутри них, механизмов и приборов, благодаря которым возможно протекание этих процессов, а также из-за человеческого фактора. Как правило, материалы на производственных предприятиях являются токсичными, легковоспламеняющимися или взрывоопасными, в то время как необходимость оптимизации производства приводит к тому, что условия эксплуатации подвергаются жестким ограничениям, таким как высокое давление или высокая температура. В промышленности имеется множество датчиков и исполнительных механизмов, продолжительная неисправность которых сказывается на производительности процесса, что может привести к серьезным проблемам безопасности. В целях пресечения аварийных ситуаций на производстве существует

необходимость внедрять интеллектуальные системы мониторинга и управления. Одним из способов является создание цифрового двойника производства.

Цифровой двойник – программный аналог физического устройства, точные виртуальные копии машин или систем, которые моделируют внутренние процессы объекта, его техническую спецификацию, поведение в реальной среде, а также имеют обратную связь, которая характеризуется программным воздействием на копию. Следовательно, использование цифровых двойников позволяет моделировать ситуации, которые невозможно воспроизвести на реальном объекте. Это могут быть как преднамеренные коллизии, исследование которых позволяют предсказать поведение устройства в нештатных ситуациях, так и попытки оптимизации, связанные либо с заменой каких-либо аппаратов внутри реально существующего объекта, либо с отладкой процессов внутри системы [3-4].

Для анализа временных рядов, которые были получены в специализированном пакете моделирования технологических систем, была разработана программа, которая представляет собой WEB-интерфейс и базу данных, накапливающая поступающие данные. Также был реализован клиент-серверный механизм взаимодействия между существующей математической моделью реального объекта, которая была создана в прикладном пакете моделирования UniSim и средством 3D визуализации

Unity3D. Данная связь осуществляется путем обмена данными между Unity и сервером. Со стороны клиента отправляется GET-запрос с ключом, который определяет выбранный аппарат, для получения информации из базы данных об этом устройстве. В обратном направлении отправляется объект JSON, информацией об объектах/объекте. Полученные данные обрабатываются при получении, если нужно разбиваются на части в зависимости от того, для какого аппарата требуется получить необходимые данные, пользователь может увидеть актуальные

значения параметров объекта, смоделированного в UniSim. (рисунок 1).

Приложение состоит из следующих модулей, связанных между собой (рисунок 2). Точкой входа в программу является запуск основного файла `manage.py`, который является диспетчером процессов. По мере получения информации, и ее сохранения в базе данных, в отдельном файле ведется логирование осуществляемых записей, также предусмотрено сохранение общих логов приложения. Настройка сервера, базы данных и уровень логирования задается в конфигурационном файле.

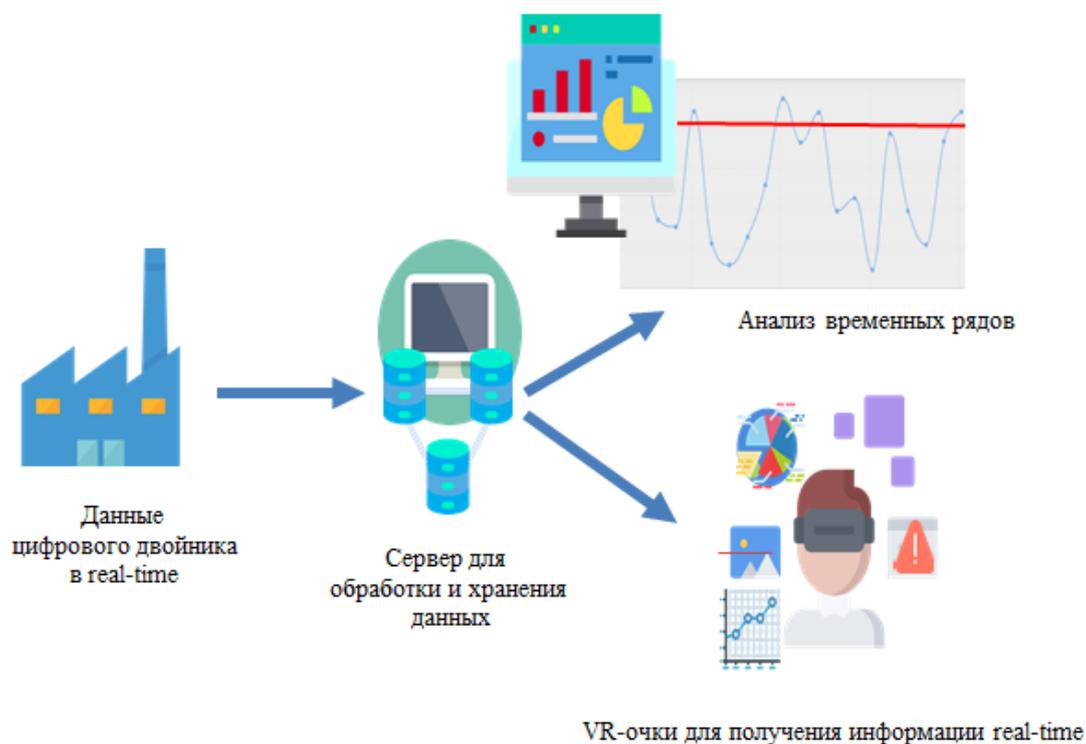


Рис. 1. Основной функционал сервера

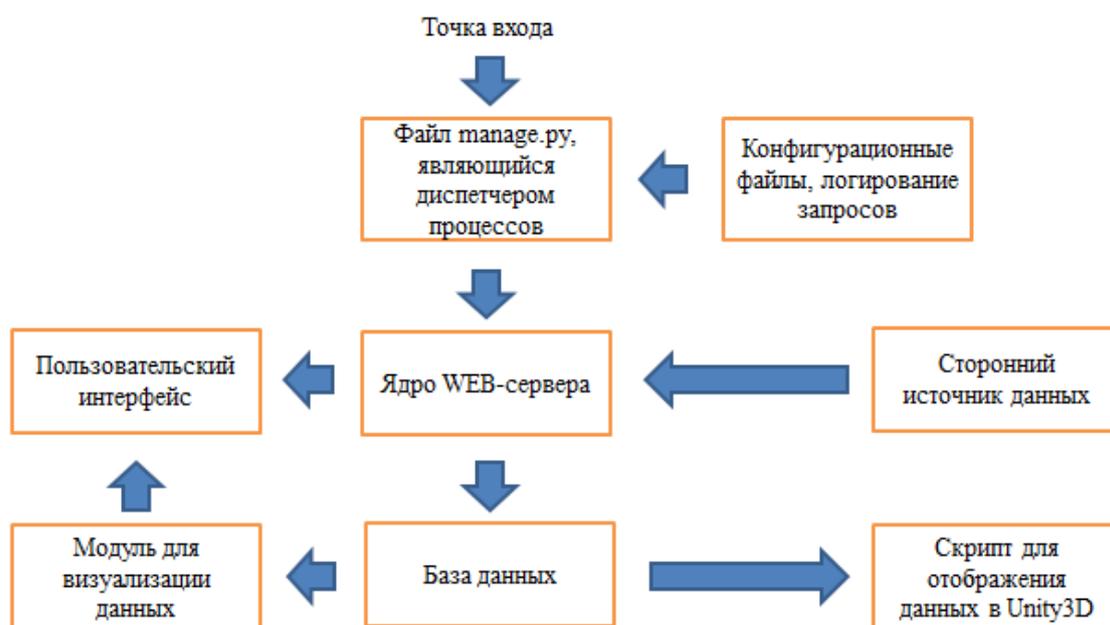


Рис. 2. Схема WEB-сервера

После запуска сервера, информация о состоянии аппаратов принимается из сторонних источников в формате JSON с помощью технологии REST (Representational State Transfer — «передача состояния представления»), в дальнейшем, эта информация парсится и сохраняется в базе данных. Для отображения WEB-страниц, созданы статические шаблоны, которые принимают текущую информацию, непосредственно во время их открытия. Это позволяет снизить нагрузку на сервер и ускорить его производительность.

Одна из шаблонных страниц является таблицей со списком всех аппаратов, она содержит следующие



Рис. 3. Пример изменения параметров одного из аппаратов

Для приложения был выбран язык программирования Python, серверная часть, запросы из базы данных и сторонних источников реализованы с помощью фреймворка Django. Для визуализации данных был подключен фреймворк Dash, который направлен для визуализации научных данных. В качестве базы данных используется объектно-реляционная СУБД PostgreSQL и ее расширение TimeseriesDB. Данное расширение позволяет использование технологий создания, так называемых, гипертаблиц, которые упрощают работу с временными рядами и ускоряют запросы и транзакции.

Использование WEB-интерфейса, существенно упрощает взаимодействия между облачными системами хранения информации, а благодаря кроссплатформенности и развитию интернета упрощает удаленный доступ пользователей физического объекта к его цифровой копии. Скрипт, осуществляющей передачу информации из базы данных в среду разработки 3D моделей Unity, написан на языке C#, с использованием библиотеки UnityWebRequest, для настройки клиент-серверного взаимодействия.

Для корректной и универсальной работы сервера, а также для взаимосвязи сред моделирования выбран абстрактный, объектно-ориентированный подход. В результате, была получена модель, которая не зависит от количества и вида объектов, информацию о которых необходимо получить. В связи с этим работа API сервера масштабируема, единственным

полем является одинаковые названия объектов, которые существуют в визуальном интерфейсе и в математической модели. Имя объекта является ключом к получению информации о нем, так как для создания цифрового двойника используется спецификация, в техническом регламенте которой, указаны имена аппаратов.

Список литературы

1. Müller, R., Vette-Steinkamp, M., Hörauf, L., Speicher, C., Burkhard, D. Development of an Intelligent Material Shuttle to Digitize and Connect Production Areas with the Production Process Planning Department. *Procedia // CIRP.* – 2018. – vol. 72. – pp. 967–972.
2. Gianluca Elia, Alessandro Margherita, Claudio Petti An Operational Model to Develop Technology Entrepreneurship “EGO-System” // *International Journal of Innovation and Technology Management.* – 2016. – vol. 13. – pp. 1–23.
3. Rui He, Guoming Chen, Che Dong Shufeng, Sun Xiaoyu Shen Data-driven digital twin technology for optimized control in process systems // *ISA Transactions.* – 2019. – vol. 95. – pp. 221–234.
4. Cheng Y, Zhang Y, Ji P. Cyber-physical integration for moving digital factories forward towards smart manufacturing: a survey // *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology.* - 2018. - №12. – pp. 9-21

УДК 544.774.2.

Кислинская А. Ю., Цыганков П. Ю., Меньшутина Н. В.

ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОФОБНЫХ КРЕМНИЕВЫХ АЭРОГЕЛЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СУШКИ ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ

Кислинская Алина Юрьевна, студент 1 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва, e-mail: linakislinskaya@gmail.com

Цыганков Павел Юрьевич, к.т.н., ведущий инженер международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий РХТУ им. Д. И. Менделеева, e-mail: pavel.yur.tsygankov@gmail.com

Меньшутина Наталья Васильевна, д.т.н., профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов управления РХТУ им. Д. И. Менделеева, руководитель международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий РХТУ им. Д. И. Менделеева, e-mail: chemcom@muctr.ru

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия
125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20. Телефон +7(965)254-43-99

В работе описываются методики получения гидрофобных аэрогелей с внедренными углеродными нанотрубками (УНТ) с концентрацией до 5 масс.%. Образцы были получены с использованием двухстадийного золь-гель процесса с последующей гидрофобизацией поверхности в силанах и с использованием сушки при комнатной температуре. Для изучения пористой структуры образцов использовался метод азотной порометрии. Гидрофобные кремниевые аэрогели с УНТ обладают удельной площадью поверхности от 364 до 438 м²/г при концентрации УНТ от 1 до 5 масс.%.

Ключевые слова: гидрофобные аэрогели, углеродные нанотрубки, сушка при атмосферном давлении, изотермы адсорбции-десорбции, распределение пор по размерам.

HYDROPHOBIC SILICA-NANOTUBES AEROGELS DRIED AT AMBIENT PRESSURE

Kislinskaya A.Yu., Tsygankov P.Yu., Menshutina N.V.

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

The paper describes methods for producing hydrophobic aerogels with embedded carbon nanotubes (CNTs) with a concentration of up to 5 wt.%. Samples were obtained using a two-stage sol-gel process, followed by hydrophobization of the surface in silanes and using drying at ambient pressure. To study the porous structure of the samples, the method of nitrogen porosimetry was used. Hydrophobic silicon aerogels with CNTs have a specific surface area of 364 to 438 m²/g with a CNT concentration of 1 to 5 wt.%.

Keywords: hydrophobic aerogels, carbon nanotubes, drying at ambient pressure, adsorption-desorption isotherms, pore size distribution.

В настоящее время сферы применения кремниевых аэрогелей в науке и технологии значительно увеличилось, благодаря сочетанию их множества уникальных свойств. Большой интерес представляют гидрофобные кремниевые аэрогели, полученные с помощью сушки при комнатной температуре, так как одним из недостатков кремниевых аэрогелей, препятствующий их крупномасштабной коммерциализации, является чувствительность к влаге, которая оказывает на аэрогель разрушительный характер [1,2].

В данной работе рассматривается получение гидрофобных аэрогелей с внедренными углеродными нанотрубками, исследование их гидрофобных и адсорбционных свойств. Представлены результаты азотной порометрии, а также описывается влияние модификации поверхности на такие характеристики материалов, как распределение пор по размерам и площадь удельной поверхности. Проводится сравнение

аэрогелей, полученных с использованием сверхкритической сушки (СКС) и сушки при комнатной температуре.

Были получены гидрофобные кремниевые аэрогели с применением золь-гель метода, который проходит в две стадии с добавлением N, N-диметилформамида (ДМФ). Старение проводилось в два этапа с целью повышения прочности и уменьшения усадки аэрогелей [3]. В качестве модификатора поверхности был использован метилтриметоксисилан (МТМС). Продолжительность модификации варьировалась от 36 часов до 3 суток.

Удельную площадь поверхности рассчитывали с использованием метода БЭТ для изотермического линейного диапазона, а общий объем сорбционной мезопоры при P/P₀ = 0,95. Диаметры пор определяли с использованием алгоритма Барретта-Джойнера-Халенды (ВЖН).

Пористость композиционных гидрофобных

материалов УНТ/аэрогель была посчитана по результатам эксперимента гелиевой пикнометрии и по уравнению (1).

$$\Pi = \left(1 - \left(\frac{\rho_v}{\rho_t}\right)\right) * 100\%, \quad (1)$$

где Π – пористость, %; ρ_v – кажущаяся плотность пористого образца, кг/м³; ρ_t – истинная плотность материала образца, кг/м³.

Усадка была рассчитана по уравнению (2).

$$L = \frac{d_1 - d_2}{d_1}, \quad (2)$$

где L – усадка, %; d_1 – диаметр образца до сушки, мм; d_2 – диаметр образца после сушки, мм.

Было проведено сравнение аэрогелей, полученных с помощью атмосферной сушки и сверхкритической сушки. В ходе эксперимента был сделан вывод о том, что необходимо увеличить время модификации поверхности с 36 часов до 3 суток для увеличения степени гидрофобизации монолитов. Следует отметить, что все образцы продемонстрировали хорошие гидрофобные свойства. Смачиваемость поверхности характеризуется краевым углом смачивания. Капля жидкости на поверхности образцов аэрогелей принимает форму, при которой краевой угол смачивания является тупым, следовательно, поверхность аэрогелей гидрофобная. При длительном контакте с водой образцы аэрогелей не разрушились.

Характеристики полученных композитов (усадка и пористость) приведены в таблице 1.

Таблица 1. Характеристики композитов УНТ/аэрогель

Образец	Тип сушки	Усадка, %	Пористость, %
УНТ 0,1масс. %	АС	9	90
УНТ 0,1масс. %	СКС	7	85
УНТ 5масс. %	АС	8	90
УНТ 5масс. %	СКС	7	89

По данным таблицы можно сделать выводы о влиянии концентрации УНТ и способа сушки на характеристики получаемых образцов аэрогелей. Наименьшую усадку продемонстрировали образцы, полученные с использованием сверхкритической сушки. Кроме того, образцы после СКС и сушки при комнатной температуре обладают высокой пористостью.

Изотермы адсорбции/десорбции азота и

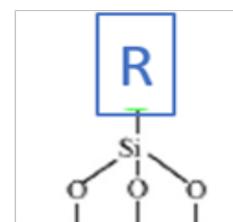
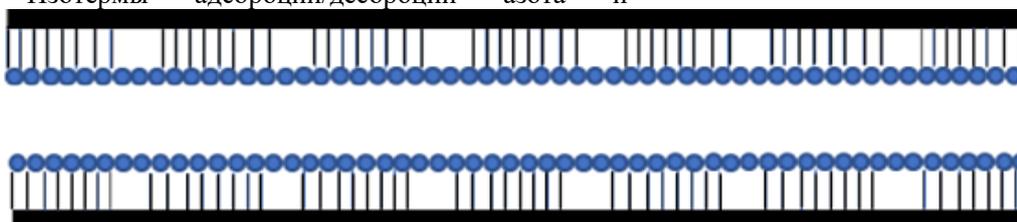
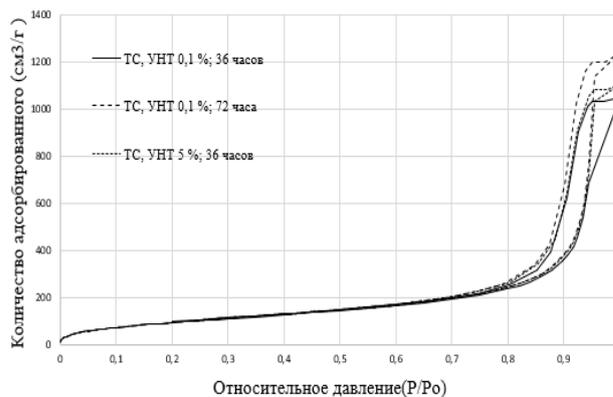
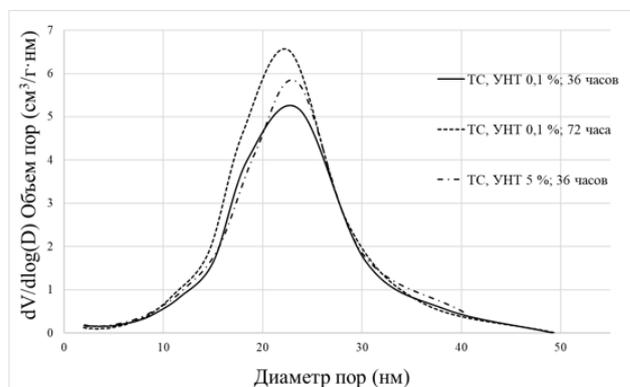


Рис. 2. Схематическая модель получения гидрофобного композитного адсорбента R-SiO₂/УНТ

распределение пор по размерам образцов показаны на рисунке 1. Изотермы адсорбции относятся к IV типу по классификации ИЮПАК [4]. Наличие гистерезиса свидетельствует о капиллярной конденсации азота в мезопорах.



а



б

Рис. 1. Структурные характеристики полученных образцов аэрогелей: а - изотермы адсорбции-десорбции N₂, б – распределение пор по размерам

Узкое распределение указывает на влияние модификации пористой структуры силаном и появлению новых микро- и мезопор. Получение композитных гидрофобных адсорбентов R-SiO₂/УНТ схематически показано на рисунке 2. Полученная изотерма относится к типу H1, который связан с конкретными особенностями структуры пор и лежащего в основе механизма адсорбции. Наличие изотермы данного типа указывает на то, что материалы демонстрируют узкий диапазон однородных мезопор, наличие замедленной конденсации на ветви адсорбции. К таким материалам относятся пористые кремниевые материалы, мезопористые углеродные сорбенты [4].

Полученные результаты согласуются с работой [5]. Узкое распределение указывает на влияние модификации пористой структуры силаном и появлению новых микро- и мезопор. Введение силана в поры привело к сужению пор по размерам в диапазоне от 20 до 100 нм и появлению новых размеров пор.

В таблице 2 приведены площади удельной поверхности образцов с варьированием массовой концентрации УНТ и продолжительностью модификации. Также сравнивалась площадь поверхности образцов, полученных после тепловой сушки и СКС (таблица 2).

Таблица 2. Площадь поверхности аэрогелей в зависимости от типа сушки и продолжительности стадии модификации

Тип сушки	Массовая доля УНТ, %	Продолжительность модификации, час	Площадь поверхности, м ² /г
СКС	0,1	36	438
ТС	0,1	36	364
ТС	0,1	72	370
ТС	5	36	369

Наибольшая площадь поверхности у образцов, полученных с использованием СКС. Это объясняется тем, что данные образцы имеют наименьшую усадку (7 %) по сравнению с образцами, полученными после тепловой сушки. При увеличении продолжительности стадии модификации поверхности с 36 часов до 72 часов большее число образцов сохранили свою форму и не потрескались в результате тепловой сушки.

Разработанная методика позволяет получать аэрогели с использованием тепловой сушки. По результатам азотной порометрии были получены изотермы адсорбции-десорбции. Было установлено, что структура полученных образцов состоит из микро- и мезопор. Введение силана в поры приводит к сужению пор по размерам в диапазоне от 20 до 100 нм и появлению новых размеров пор, в результате чего увеличивается удельная площадь поверхности гидрофобных аэрогелей.

Список литературы

1. Li M. et al. Low density and hydrophobic silica aerogels dried under ambient pressure using a new co-precursor method //Journal of Non-Crystalline Solids. – 2016. – V. 452. – P. 187-193.
2. Shahzamani M. et al. Effect of drying method on the structure and porous texture of silica-polybutadiene hybrid gels: Supercritical vs. ambient pressure drying //Journal of non-crystalline solids. – 2017. – V. 460. – P. 119-124.
3. Liu M., Yang D., Qu Y. Preparation of super hydrophobic silica aerogel and study on its fractal structure //Journal of Non-Crystalline Solids. – 2008. – V. 354. – P. 4927-4931
4. Thommes M. et al. Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report) //Pure and Applied Chemistry. – 2015. – V. 87, №. 9-10. – P. 1051-1069.
5. Lu H. et al. Novel hydrophobic PDVB/R-SiO₂ for adsorption of volatile organic compounds from highly humid gas stream //Journal of hazardous materials. – 2013. – V. 262. – P. 83-90.

УДК 004.422.8: 66.021

Крашенинников Р.С., Филиппова Е.Б.

СОЗДАНИЕ ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ ИМИТАЦИИ АВАРИЙНЫХ СИТУАЦИЙ ДЛЯ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА ПРОИЗВОДСТВА МЕТАНОЛА

Крашенинников Роман Сергеевич, студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;
e-mail: KrashR26@gmail.com

Филиппова Елена Борисовна, к.т.н., доцент кафедры информационный компьютерных технологий.
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия.

При разработке новых и реконструкции существующих производств широко востребованы цифровые двойники. Прогресс в области моделирования технологических процессов позволяет решать всё больше актуальных задач проектирования и управления. В данной работе создан программный модуль имитации аварийных ситуаций для цифровых двойников химических производств на примере цифрового двойника конкретного крупнотоннажного производства метанола. Предложенная структура программного модуля может быть использована для создания цифровых двойников различных химических производств, обучения и сертификации операторов-технологов.

Ключевые слова: цифровой двойник, авария, имитационное моделирование, промышленная безопасность, обучение персонала.

CREATION OF THE EMERGENCY SOFTWARE MODULE FOR THE DIGITAL TWIN OF METHANOL PRODUCTION

Krasheninnikov Roman Sergeevich, Filippova Elena Borisovna

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

In the development of new and reconstruction of existing industries, digital twins are widely in demand. Progress in the field of process modeling allows solving more and more urgent tasks of design and management. We have developed a software module for simulating emergencies for digital doubles of chemical plants using the example of a digital double of a specific large-capacity methanol production. The proposed structure of the software module can be used to create digital twins of various chemical industries, training and certification of operator-technologists.

Keywords: digital twin, emergency, simulation, industrial safety, personnel training.

Развитие цифровых технологий привело к увеличению степени цифровизации промышленных производств и всех связанных с ними процессов. Как следствие, всё более актуальными становятся исследования в области создания так называемых «цифровых двойников промышленных производственных процессов» (Digital Twin), которые начались ещё в 2000-х годах. Цифровой двойник – это цифровая модель физического объекта или процесса в реальном времени, которая используется в процессах оптимизации производства.

Пока не существует единого общепризнанного формализованного определения термина «Цифровой двойник», обычно так называют цифровую динамическую модель в виртуальном мире, которая полностью соответствует физическому объекту в реальном мире, с возможностью имитации его характеристик, поведения, жизненного цикла и производительности.

Существует несколько основных направлений использования цифровых двойников:

1. На основе данных, предоставляемых виртуальной копией реального объекта, можно сделать прогноз и на его основе внести необходимые коррективы на различных этапах жизненного цикла физического объекта.

2. Цифровой двойник промышленного процесса можно использовать для тестирования, то

есть использовать виртуальную копию для испытания различных режимов работы промышленного оборудования с целью поиска оптимальных, критических технологических параметров процесса, отработки сценариев пуска и остановки отдельных аппаратов. Данные, полученные на виртуальной копии, могут помочь в принятии различных решений, при этом без риска сбоя налаженных процессов функционирования оборудования, которые могут привести к остановкам в производственном процессе, и, как следствие, к значительным финансовым потерям.

3. Использование в качестве средства обучения персонала. Виртуальные имитационные тренажеры занимают важное место среди современных средств обучения.

Рассмотрим последний способ применения. По данным анализа расследований аварий на производстве, примерно половина аварийных ситуаций возникает из-за низкой квалификации рабочего персонала. При этом, зачастую операторы знают, что необходимо делать лишь в теории и при возникновении реальной аварийной ситуации теряются из-за отсутствия практики.

При рациональном использовании виртуальных тренажеров в образовательном процессе можно добиться не только совершенствования навыков персонала, но и создания безопасной, экологически

чистой среды, а также экономии внушительных финансовых ресурсов.

Благодаря виртуальным тренажерам, которые создаются на основе цифровых двойников реальных производств, сотрудники могут в полной мере освоить сущность всех протекающих процессов, а так же приобрести соответствующую квалификацию, без угрозы для исправности оборудования, здоровья сотрудников и окружающей среды [1-4].

В рамках данной работы разработан комплекс для имитации аварийных ситуаций в технологической схеме производства метанола компании ОАО «Щекиноазот», смоделированной в специализированном пакете Unisim Design АО «Хоневелл» в динамическом режиме. Пакет UniSim Design – это инструмент, который позволяет создавать как стационарные, так и динамические модели для проектирования разнообразных технологических процессов (в том числе технологических процессов нефтегазовой, нефтеперерабатывающей, нефтехимической и химической промышленности), а также системы автоматического управления этими процессами. UniSim Design включает в себя пакет термодинамических расчетов, позволяющий в широком диапазоне параметров вычислять физические свойства компонентов и их смесей.

Для данной технологической схемы возможно множество аварийных ситуаций. В результате анализа было выделено несколько типов аварийных ситуаций, которые могут возникнуть на реальном

объекте, не зависят от конструкционных особенностей отдельных аппаратов, и при этом возможна их имитация в программе Unisim Design:

- Течь в аппарате;
- Течь в трубе;
- Проскок перегретого хладагента в теплообменник;
- «Залипание» клапана.

Все эти типы аварийных ситуаций могут возникнуть практически на любом химическом производстве, и не привязаны к конструкционным особенностям отдельных аппаратов. В связи с этим, технология их имитации универсальна и может быть использована в дальнейшем в других проектах. Моделирование каждой аварийной ситуации проходит в данной работе в несколько этапов:

1. Выявление потенциального места на схеме для аварийной ситуации;
2. Добавление на схему в Unisim Design дополнительных материальных потоков, необходимых для имитации аварийной ситуации;
3. Написание сценария развития аварийной ситуации;
4. Программное изменение параметров в схеме, согласно написанному сценарию.

Ниже, в качестве примера, будет рассмотрена имитация течи в аппарате на примере сепаратора V224 (рис. 1).

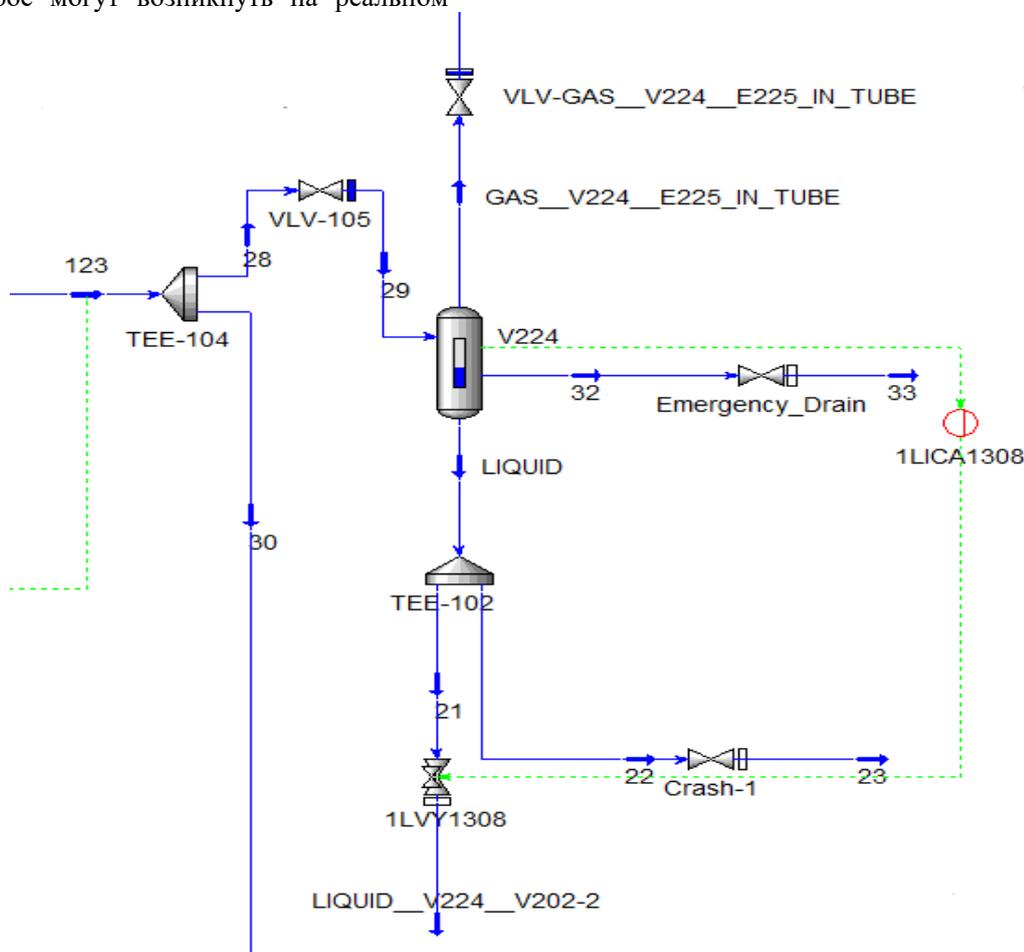


Рис. 1. Имитация течи в аппарате V224

Течь в аппарате – одна из наиболее распространённых ситуаций на реальных производствах. Такие аварии могут приводить не только к полному выходу аппаратуры из строя и нарушению технологического режима, но так же могут быть опасными для окружающей среды и сотрудников предприятия. В данной ситуации, течь приводит к понижению уровня жидкости в сепараторе, что в свою очередь приведет нарушению технологического режима и, возможно, к окончательной порче оборудования. При этом, однако, именно понижение уровня жидкости в аппарате будет являться своеобразным индикатором потенциальной аварии для оператора.

Для имитации аварии рассматриваемого типа в Unisim Design необходимо добавить дополнительные материальные потоки на схему. В данном случае это – потоки 22 и 23, расход которых регулируется при помощи добавленного вентиля Crash-1. При открытии вентиля Crash-1 часть жидкости из сепаратора V-224 начнёт утекать, то есть степень открытия вентиля Crash-1 будет имитировать трещину контролируемого размера. Сценарием данной аварии будет постепенное открытие Crash-1, что будет имитировать постепенное увеличение трещины в аппарате с течением времени. Оператор в свою очередь должен будет заметить утечку, просигнализировать о её наличии при помощи специальной кнопки в окне оператора, а затем полностью переключить технологическую линию на аналогичный аппарат, находящийся в резерве, и полностью слить жидкость из аппарата V224.

Для программного управления схемой во время аварийной ситуации в данной работе используется высокоуровневый кроссплатформенный интерпретируемый язык программирования общего назначения Python. Python поддерживает объектно-ориентированное, структурное, императивное, функциональное, а так же аспектно-ориентированное программирование. Основные архитектурные черты Python — это динамическая типизация, автоматическое управление памятью, полная интроспекция, а так же механизм обработки исключений, поддержка многопоточных вычислений и высокоуровневые структуры данных. Выбор именно этого языка обусловлен его простым и удобным синтаксисом, а так же обширными возможностями его стандартной библиотеки.

Связь между программой и схемой в Unisim Design осуществляется при помощи специально созданного сервера, который позволяет выводить параметры из схемы и изменять их в ней. Управление схемой осуществляется отправлением на сервер HTTP-запросов. На языке Python это реализуется при помощи библиотеки Requests. Библиотека requests – это стандартный инструмент для составления HTTP-запросов в Python. Простой, понятный и аккуратный API этой библиотеки значительно упрощает трудоемкий процесс создания запросов на сервер.

Изначально сценарий аварийной ситуации при помощи специального приложения на сервере преобразуется в формат JSON (JavaScript Object Notation) – стандартный формат одинаково удобный для чтения и человеком и компьютером. JSON – полностью независимый от языка реализации текстовый формат, он использует соглашения, знакомые программистам различных языков программирования, таких как C, C++, C#, Java, JavaScript, Perl, Python и многих других. Все эти свойства и делают JSON хорошим языком обмена данными.

Программа по имитации аварийных ситуаций на этапе инициализации принимает файл в формате JSON, а затем на этапе выполнения отправляет по таймингу, заданному в сценарии, HTTP-запросы на сервер, имитируя тем самым аварию.

Таким образом, в рамках данной работы были решены следующие задачи:

- Разработана динамическая модель промышленного производства метанола в программе Unisim Design.
- Изучены различные возможные аварийные ситуации на производстве.
- Выделено и описано несколько категорий аварийных ситуаций, возможных на данном производстве и пригодных для имитации в Unisim Design.
- Разработан программный модуль на языке программирования Python, позволяющий имитировать описанные аварийные ситуации. Предложенная структура программного модуля может быть использована для создания цифровых двойников различных химических производств, обучения и сертификации операторов-технологов.

Список литературы

1. Гончаров А. С., Саклаков В. М., Савельев А. О. Цифровой двойник: обзор существующих решений и перспективы развития технологии // Информационно-телекоммуникационные системы и технологии. – 2018. – С. 24-26.
2. Пономарев К. С., Феофанов А. Н. Цифровой двойник производства как инструмент цифровизации технологических процессов предприятия // Актуальные тренды и перспективы развития науки, техники, технологий. – 2019. – С. 141-145.
3. Волкова М. М., Манурова Р. А., Шайдуллина Д. Н. Применение виртуальных тренажеров для обучения специалистов нефтегазовой отрасли // Вестник Технологического университета. – 2019. – Т. 22. – №. 4. – С. 115-121.
4. Абазьева М. П. Цифровые двойники: концепция, возможности, перспективы // Наука и бизнес: пути развития. – 2019. – №. 5. – С. 210-212.

УДК 004.946: 66.021

Лобанов А.В., Филиппова Е.Б.

РАЗРАБОТКА ВИРТУАЛЬНОГО ПРОСТРАНСТВА ДЛЯ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА ПРОИЗВОДСТВА МЕТАНОЛА

Лобанов Алексей Владимирович, студент 4 курса бакалавриата цифровых технологий и химического инжиниринга;

e-mail: lobanov.alex2011@yandex.ru

Филиппова Елена Борисовна, к.т.н., доцент кафедры информационный компьютерных технологий.

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

Данная статья посвящена разработке виртуального пространства для цифровых двойников производственных процессов. В качестве конкретного примера рассматривается разработка виртуального пространства для цифрового двойника промышленного синтеза метанола.

Ключевые слова: цифровой двойник, виртуальное пространство.

CREATION OF THE VIRTUAL SPACE FOR THE DIGITAL TWIN OF METHANOL PRODUCTION

Lobanov Alexei Vladimirovich, Filippova Elena Borisovna

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

This article is devoted to the development of a virtual space for digital twins of industrial processes. As a specific example, the development of a virtual space for a digital twin of industrial methanol synthesis is considered.

Keywords: digital twin, virtual space.

В настоящее время, когда интенсивно развиваются цифровые технологии, растет степень использования компьютерных разработок на существующих промышленных предприятиях и производствах. В результате, растет актуальность исследований, в области создания «Цифровых двойников промышленных производственных процессов» (Digital Twin), которые начались ещё в 2000-х годах. Цифровой двойник – это динамическая виртуальная копия физической сущности или процесса в реальном времени, которая используется для понимания, изучения и обновления процессов производства.

В настоящее время единого определения термина «Цифровой двойник» нет. Однако, чаще всего так именуют цифровую копию живой или неживой физической сущности, представляющей собой динамическую модель в виртуальном мире, которая идентична своему физическому объекту в реальном мире, с возможностью моделирования и пародирования всего жизненного цикла, свойств и производительности.

Существует несколько типов цифровых двойников, три основных из них приведены ниже:

1) Модель содержит информационные наборы, необходимые для описания и создания физической версии. Эти цифровые наборы включают в себя, но не ограничиваются, требованиями, спецификациями процессов и услуг, регламентом.

2) Двойник описывает конкретный физический объект, с которым цифровой двойник напрямую связан, на протяжении всего срока службы продукта. Этот тип двойника может содержать в зависимости от способов использования следующие наборы данных: 3D модели, описывающие геометрию и физические свойства объектов, список операций, выполненных при создании этого физического объекта, вместе с

результатами измерений или испытаний над экземпляром, а также рабочее состояние, полученное с помощью датчиков.

3) К этому типу относят объединение ранее указанных типов двойников. Он имеет доступ ко всем прототипам и может запрашивать информацию обо всех объектах. Также данный цифровой двойник постоянно мониторит показания датчиков и сопоставляет данные показания, с теми, которые зафиксировал во время сбоя.

В рамках данной работы представлен цифровой двойник второго типа. Создаваемое нами виртуальное пространство цифрового двойника, есть нечто иное, как 3D модель описывающая, технологию и все основные процессы в химическом производстве метанола. Цифровой двойник, разрабатывается путем выполнения большого числа операций, благодаря которым удастся создать копию химического производства, с учетом технологических норм, регламента и спецификации.

При помощи подобных виртуальных тренажеров, базирующихся на основе цифровых двойников реальных производств, сотрудники могут полностью освоить сущность всех протекающих процессов, ознакомиться с технологией, а также приобрести соответствующую квалификацию, без угрозы при этом для исправности оборудования и здоровья сотрудников. Также детальное изучение подобных цифровых двойников позволяет проработать качественные и количественные характеристики производства, его эффективность и затраты. Создание цифровых двойников способствует адекватному управлению производственными процессами и решению типовых проблем предприятий. К проблемам российских предприятий относятся: срывы сроков выполнения заказов, значительный процент брака,

работа оборудования с недопустимыми параметрами износа и ростом затрат на аварийные ремонты, некачественное обслуживание и фактический расход сырья и энергоресурсов, превышающий технологические нормы. [1-5].

В данном проекте было разработано виртуальное пространство технологического производства метанола. За основу для моделирования взята технологическая схема получения синтез-газа и производства метанола реального химического завода, смоделированная в специализированном пакете Unisim Design в динамическом режиме. Пакет UniSim Design АО «Хоневелл» – это программа, которая позволяет создавать как статические (параметры не меняются со временем), так и динамические (параметры меняются с течением времени) модели для проектирования разных технологических производств и процессов, в том числе технологических процессов нефтегазовой, нефтеперерабатывающей, нефтехимической и химической промышленности, а также разрабатывать системы автоматического управления этими процессами. UniSim Design включает в себя пакет термодинамических расчетов, благодаря которому можно рассчитывать физические свойства смесей компонентов в широком диапазоне параметров.

После переработки технологической схемы в UniSim Design и получения упрощенной схемы производства метанола, полностью отражающей основные элементы производства и имеющей минимально допустимые различия в свойствах и составе выходного продукта, для отображения в виртуальном пространстве был разработан генеральный план создаваемого виртуального производства. При его составлении учитывались: регламент, спецификация на оборудование, нормы и стандарты разработки генерального плана предприятия, а также материалы по уже имеющемуся производству (спутниковая фотосъемка, геолокация, фото и мультимедийные материалы по внешнему виду производства).

Закончив составление плана производства, приступили к моделированию необходимых аппаратов, трубопровода и иных конструкций. При создании 3D моделей учитывались технологический регламент и спецификации на оборудование. В случае нехватки информации использовались данные о типовых аппаратах, а также фото и видео материалы, для упрощения понимания внешнего вида конструкций. При создании 3D моделей использовались такие программы, как: Autodesk 3ds Max, AutoCAD, Blender, SolidWorks. Autodesk 3ds Max. Это программное обеспечение предназначено для 3D моделирования, анимации и визуализации при создании реалистичных трехмерных проектов промышленных изделий, чертежей, объектов свободных форм, персонажей и обстановки в 3D. AutoCAD – современная система автоматизированного проектирования (САПР) для создание трехмерных моделей и чертежей с максимальной точностью, благодаря функциям, направленным на создание машиностроительных, архитектурных и проектов иных направлений. Blender

– программа, предназначенная для создания трехмерных графических изображений, анимации, симуляции, постобработки и монтажа. SolidWorks – это САПР для автоматизации работ предприятия на этапах конструкторской и технологической подготовки производства, обеспечивающая разработку изделий любой степени сложности и назначения.

Завершив создания 3D моделей в выше перечисленных программных обеспечениях, их экспортировали в формат FBX. Сохранение графических объектов в формате FBX позволяет получить объекты с сохранением их размеров без искажений, что существенно упрощает дальнейшую работу, так как метрическая система в Unity, работает иначе, чем привычные нам измерения расстояний и габаритов.

Имея генплан расположения объектов, а также 3D модели аппаратов, деталей трубопровода, вентилей, и иных конструкций приступили к размещению объектов в виртуальном пространстве. Для этого использована платформа Unity, межплатформенная среда разработки, позволяющая создавать всевозможные приложения, работающие на множестве платформ, включая персональные компьютеры, игровые консоли, мобильные устройства, интернет приложения и другие. Unity постоянно дорабатывается, ее функционал расширяется, что привносит дополнительные возможности в разработку.

Сборка технологического производства в виртуальном пространстве, не привязана к конструкционным особенностям отдельных аппаратов. В связи с этим технология импорта и добавления элементов в виртуальную схему в Unity универсальна и может быть использована в других проектах. Добавление каждого из аппаратов проходит в несколько этапов:

1. Выявление места расположение аппарата.
2. Импорт в Unity соответствующей 3D модели, проверка ее на отсутствие искажений или иных деформаций, вызванных изменением формата изображения.
3. Установка аппарата в нужном месте с помощью изменения его координат по осям X, Y, Z.
4. Задание необходимых свойств и материалов данной модели, с учетом технологических норм и спецификации.
5. Добавление свойств Box Collider и RigidBody. Это необходимо сделать для придания дополнительных свойств объектам.
6. Присоединение нового аппарата к уже созданной схеме, посредством добавления нужного количества моделей элементов трубопровода (фланцев, фитингов и т.д.), добиваясь сходства с реальными технологическими линиями.
7. Нанесение номера аппарата на его корпус или добавление текстового поля, для упрощения внешнего распознавания объектов.

На рис. 1 показана создаваемая упрощенная модель промышленного производства метанола. На аппаратах указаны их номера, соответствующие их номерам на чертежах технологической схемы.

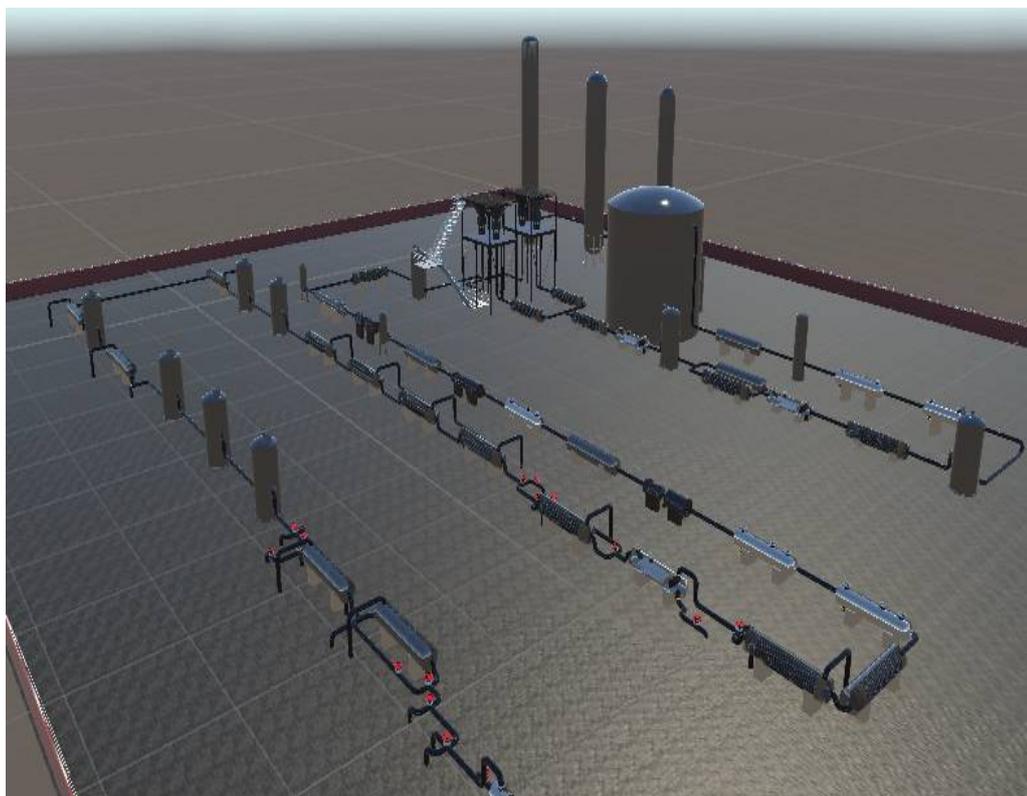


Рис. 1. Схема завода в виртуальном пространстве

После завершения создания технологической схемы производства метанола в виртуальной реальности для большего понимания сути технологических процессов и физико-химических явлений, протекающих в отдельных аппаратах необходимо вывести справочную информацию. Для этого добавлены панели с текстовыми полями, содержащие следующую информацию: названия аппаратов, кратко их технологическое назначение, величины основных технологических параметров (температуры, давления, концентрации и т.д.).

На заключительном этапе создания виртуального приложения добавлены анимации: движения потоков, вращения различных частей аппаратов и вентилей, аварийных ситуаций на производстве. В частности, в случае течи в трубе или аппарате появляется туман. Данные анимации создаются с помощью свойств и функций, доступных в платформе Unity, и скриптов, написанных на языке программирования C#. Анимации дают более полную картину о промышленном производстве, и имеющих в нем место химико-технологических процессах. Для большего удобства при перемещении по виртуальному заводу, добавлены телепорты и транспортное средство, благодаря чему на движение тратится значительно меньше времени.

Таким образом, в рамках данного проекта были разработаны:

- динамическая модель промышленного производства метанола в программе Unisim Design;
- генплан виртуального производства;
- виртуальная модель производственного процесса;

- панели, отображающие состав и свойства потоков в аппаратах;
- анимации для демонстрации движения потоков, принципов работы аппаратов, аварийных ситуаций на производстве.

Список литературы

1. Сайт CYBERLENINKA. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://cyberleninka.ru/article/n/tsifrovoy-dvoynik-proizvodstvennoy-sistemy-na-osnove-programmnogo-obespecheniya-kategorii-mes/viewer> (дата обращения: 25.05.2020).
2. Кокорев Д. С., Юрин А. А. / Цифровые двойники: понятие, типы и преимущества для бизнеса // COLLOQUIUM-JOURNAL. – 2019. - №10 (34). – С. 2-32.
3. Асланова И. В., Mes как основа разработки системы управления производственными процессами предприятия // Российское предпринимательство. – 2017. – Том 18. - № 11. – С. 1651-1658
4. Пономарев К. С., Феофанов А. Н. Цифровой двойник производства как инструмент цифровизации технологических процессов предприятия //Актуальные тренды и перспективы развития науки, техники, технологий. – 2019. – С. 141-145.
5. Курганова Н. В., Филин М. А., Черняев Д. С., Шаклеин А. Г., Намиот Д. Е. / Внедрение цифровых двойников как одно из ключевых направлений цифровизации производства // International Journal of Open Information Technologies ISSN: 2307-8162. - Vol. 7, №5, 2019. - С.105-106.

УДК 519.688

Мохова Е.К., Пальчикова В.В., Гордиенко М.Г.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА В ПРОЦЕССЕ ВАКУУМНОЙ СУБЛИМАЦИОННОЙ СУШКИ

Мохова Елизавета Константиновна, студентка 4 курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Пальчикова Вера Викторовна, аспирант 2 года обучения по направлению подготовки 18.06.01 Химическая технология, e-mail: vverapalchik@gmail.com;

Гордиенко Мария Геннадьевна, к.т.н., доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов; Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия 125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д.20.

Разработано программное обеспечение, которое позволяет рассчитывать изменение влагосодержания и температуры материала, а также подбирать режимы для ведения качественного процесса вакуумной сублимационной сушки. Полученный программный продукт строится на основе одномерной математической модели, описывающей процесс сушки с переносом тепла и влаги вдоль оси X.

Ключевые слова: математическое моделирование, лиофилизация, тепло- и массоперенос, режимы сушки, кинетические характеристики.

MATHEMATICAL MODELING OF HEAT AND MASS TRANSFER IN THE PROCESS OF VACUUM SUBLIMATION DRYING

Mokhova E.K., Palchikova V.V., Gordienko M.G.

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

Software has been developed that allows you to calculate the change in moisture content and temperature of the material, as well as select the modes for conducting a high-quality process of vacuum freeze drying. The resulting software product is based on a one-dimensional mathematical model that describes the drying process with the transfer of heat and moisture along the X axis.

Keywords: mathematical modeling, lyophilization, heat and mass transfer, drying modes, kinetic characteristics.

Введение

Вакуумная сублимационная сушка, также называемая лиофильной сушкой – это процесс, в основе которого лежит фазовый переход «лед-пар», т.е. происходит высушивание предварительно замороженного вещества или материала путем возгонки (сублимации) растворителя, чаще всего воды, при давлении ниже его тройной точки [1].

Процесс лиофилизации направлен на сушку термолabileльных материалов, в качестве которых могут выступать антибиотики, витамины, ферментативные и гормональные препараты. Востребованность сушки вымораживанием заключается в том, что она сохраняет нативные (природные) свойства высушиваемого объекта, а удаление льда сублимацией позволяет сформировать высокопористую структуру материала.

Технологически процесс сублимационной сушки можно разделить на три этапа: предварительная заморозка, сублимация льда (первый период сушки) и тепловая досушка (второй период сушки). Этап предварительной заморозки направлен на преобразование растворителя в лед для создания состояния, подходящего для дальнейшей лиофилизации. В первый период сушки, лед сублимируется путем фазового перехода «лед-пар». Данный этап направлен на удаление свободной, замороженной влаги. Во втором периоде сушки происходит удаление незамороженной или наиболее

прочно связанной с материалом влаги [2].

Сложность в эксплуатации, длительное время сушки и высокие энергозатраты не позволяют проводить весь диапазон исследований, поэтому для описания процесса вакуумной сублимационной сушки, получения кинетических характеристик и выбора режимных параметров создаются математические модели. Они позволяют рассчитывать все необходимые величины для ведения качественного процесса сушки, а также помогают избежать возможность появления экспериментальных ошибок и неоправданных рисков.

Целью данной работы являлась разработка математической модели, которая позволяла бы получить кинетические характеристики, такие как: изменение влагосодержания и температуры материала. А для реализации расчетов с использованием CoDeSys v2.3 было разработано ПО.

Описание модели

Данная математическая модель вакуумной сублимационной сушки является одномерной, т.е. перенос тепла и влаги происходит только вдоль оси X, и строится на уравнениях тепло- и массопереноса. В модели рассматриваются первый и второй периоды сушки, этап предварительной заморозки в структуру настоящей модели не входит.

Для математического описания процесса сушки на этапе сублимации и упрощения расчетов были

сделаны следующие допущения:

1) фронт сублимации – X_p , делит образец на замороженную область I и высушенную область II;

2) граница раздела (фронт сублимации) в процессе сушки равномерно двигается вниз пока вся замороженная свободная влага не удалится из материала толщиной L;

3) на границе раздела фаз выполняется условие: часть массы, которая уходит вверх равна той части массы, которая ушла снизу;

4) температура во всей замороженной области одинаковая, как и температура во всей высушенной области, но между собой данные температуры различаются;

5) высушенная и замороженная области рассматриваются как гомогенные с точки зрения постоянства теплопроводности, плотности и удельной теплоемкости;

6) в замороженной области тепло передается за счет кондуктивного теплоподвода от полки снизу, а в высушенной области тепло передается как кондуктивно, так и радиационно от полки сверху.

Для замороженного слоя I уравнение теплопроводности (1), в диапазоне $0 \leq x \leq X_p(t)$, $t > 0$, представляется следующим образом:

$$\frac{\partial T_I}{\partial t} = a_{eI} \frac{\partial^2 T_I}{\partial x^2} + \frac{Q_{vI}}{\rho_{eI} c_{peI}}, \quad (1)$$

где T_I – температура слоя I, К; t – время, с; a_{eI} – эффективная температуропроводность слоя I, m^2/c ; x – декартова координата, м; Q_{vI} – объемная мощность внутреннего теплового источника, $Вт/м^3$; ρ_{eI} – плотность слоя I, $кг/м^3$; c_{peI} – эффективная удельная теплоемкость слоя I, $Дж/кг \cdot К$.

Граничные условия в нижней части образца: $T_0 = T_I$, $x=0$, $t > 0$, (2)

где T_0 – температура полки, К.

Для высушенного слоя II уравнение теплопроводности (3), в интервале $X_p(t) \leq x \leq L$, $t > 0$, выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial T_{II}}{\partial t} = a_{eII} \frac{\partial^2 T_{II}}{\partial x^2} - \frac{c_{pg}}{\rho_{буII} c_{peII}} \frac{\partial(N_w T_{II})}{\partial x} + \frac{Q_{vII}}{\rho_{буII} c_{peII}}, \quad (3)$$

где T_{II} – температура слоя II, К; c_{pg} – удельная теплоемкость газовой фазы, $Дж/кг \cdot К$; $\rho_{буII}$ – насыпная плотность сухого материала, $кг/м^3$; N_w – поток водяного пара, $кг/м^2 \cdot с$.

Граничные условия для верхней части образца: $T_{II} = T_L$, $x=L$, $t > 0$, (4)

где T_L – температура поверхности, К.

Начальное условие для замороженной и высушенной области: $T_I = T_{II}$, $0 \leq x \leq L$, $t=0$, (5).

Приращение координаты границы раздела фаз ΔX и влагосодержания ΔW в безразмерном виде считалось по уравнениям (6) и (7) для замороженной и высушенной областей соответственно:

$$\Delta X_I^{*n+1} = \Delta W_I^{*n+1} = q_I^{*n+1} \cdot Ste_{VI} \cdot \Delta t^*, \quad (6)$$

$$\Delta X_{II}^{*n+1} = \Delta W_{II}^{*n+1} = q_{II}^{*n+1} \cdot Ste_{VII} \cdot \Delta t^*, \quad (7)$$

где * – безразмерный вид; n – временной слой; Δt – безразмерный шаг по времени; q – безразмерный тепловой поток; Ste_v – модифицированное число Стефана.

Граничное условие: $x=X(t)$, $t > 0$, (8).

Расчет смещения фронта сублимации и изменения влагосодержания проводился по уравнениям (9) и (10) соответственно, в безразмерном виде:

$$X^{*n+1} = X^{*n} + \Delta X_I^{*n+1} + \Delta X_{II}^{*n+1}, \quad (9)$$

$$W^{*n+1} = W^{*n} + \Delta W_I^{*n+1} + \Delta W_{II}^{*n+1}, \quad (10).$$

Перевод влагосодержания в размерный вид осуществлялся по формуле (11):

$$W = W^*(W_p - W_{eq}) + W_{eq}, \quad (11)$$

где W_p – начальное влагосодержание, $кг/кг$; W_{eq} – равновесное влагосодержание на этапе сублимации, $кг/кг$.

При составлении математической модели второго периода сушки были приняты следующие допущения:

1) содержание влаги в материале в момент начала второго периода сушки равно равновесному влагосодержанию при средней температуре высушенного слоя в конце этапа сублимации, т.е. $W = W_{eq}$;

2) механизмом массопереноса является десорбция влаги.

Баланс влаги в высушенном слое рассчитывался по формуле (12):

$$\frac{\partial W}{\partial t} = K \cdot (W_r - W), \quad (12)$$

где K – кинетический коэффициент, $с^{-1}$; W_r – равновесное содержание влаги во втором периоде сушки, $кг/кг$.

Начальное условие: $W = W_{eq}$, $t=0$, (13).

Уравнение (14) использовалось для расчета теплового баланса в высушенном слое:

$$-k_e \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + (1 - \varepsilon) \rho_{бу} c_s \frac{\partial T}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \Delta H \cdot \frac{\rho_{бу} \partial W}{M_w \partial t} = 0, \quad (14)$$

где k_e – эффективная теплопроводность высушенного слоя, $Вт/м \cdot К$; T – температура материала, К; ε – пористость; c_s – удельная теплоемкость адсорбента, $Дж/кг \cdot К$; ΔH – теплота адсорбции, $Дж/моль$; M_w – молярная масса воды, $кг/моль$.

Начальное условие: $T = T(x, 0)$, $t=0$, (15).

Граничное условие в нижней части материала: $T = T_0$, $x=0$, $t > 0$, (16).

Граничное условие в верхней части материала: $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$, $x = L$, $t > 0$, (17).

Результаты и обсуждения

Для расчета изменения температуры и влагосодержания материала была написана программа в CoDeSys v2.3. Разработанная программа состоит из блоков для расчета первого и второго периодов сушки, а также блока, осуществляющего переход между ними по соответствующему условию ($W < W_{eq}$). В программу также входят: визуализация вакуумной сублимационной установки, контрольная панель и кривые изменения влагосодержания и температуры, представленные на рисунке 1.

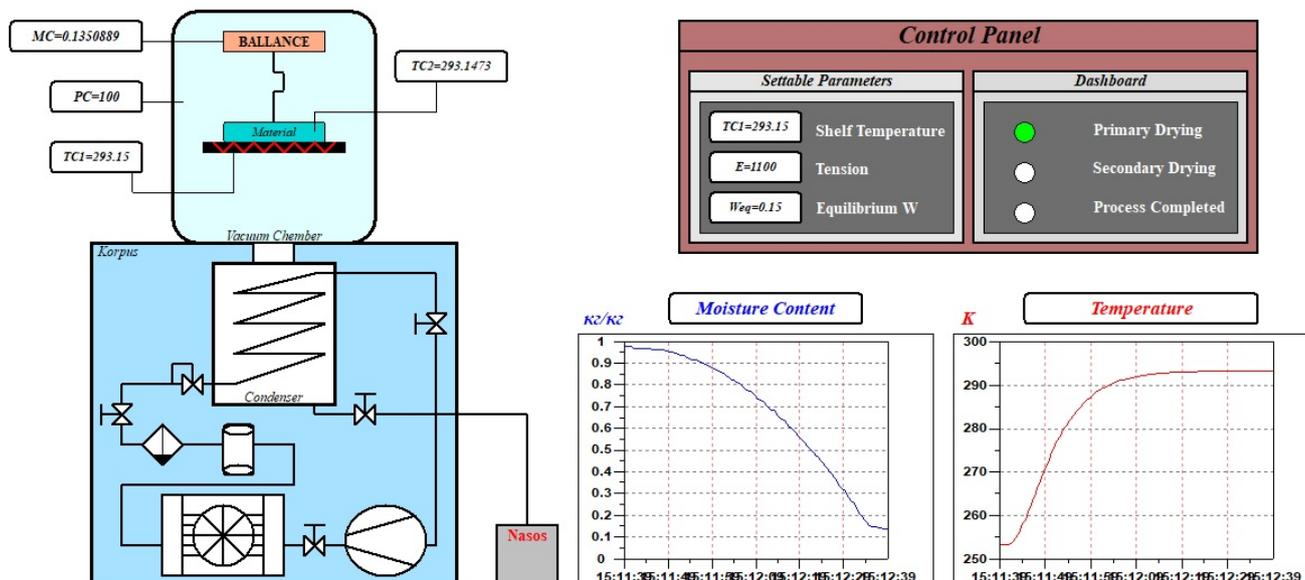


Рис. 1. Визуализация разработанного ПО в CoDeSys v2.3

Математическое моделирование проводилось для образца толщиной 10 мм. Начальное содержание влаги в образце было принято равным 0,98 кг/кг. Результаты моделирования представлены на рисунке 2.

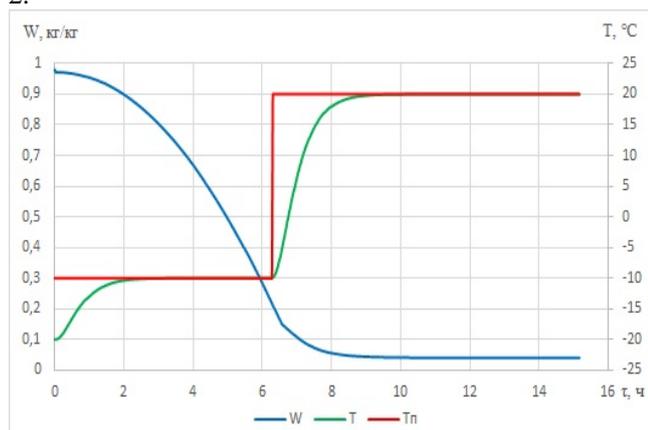


Рис. 2. Кинетика сушки, W – влагосодержание, T – температура материала, T_п – температура полки

Данный температурный режим представляет собой сушку со ступенчатым подогревом полки, температура которой менялась следующим образом:

при $0 \leq t \leq 6,3$ ч – $T_{п} = -10^{\circ}\text{C}$, при $6,3 < t \leq 15,2$ ч – $T_{п} = 20^{\circ}\text{C}$.

В заключении можно отметить, что разработанное ПО строится на уравнениях тепло- и массопереноса и позволяет рассчитывать изменение влагосодержания и температуры материала во время процесса лиофилизации. Благодаря математическому моделированию был получен режим сушки, который обеспечивает постепенный прогрев термолабильного материала и позволяет получить качественный продукт по окончании процесса.

Список литературы

1. Меньшутина Н.В. Инновационные технологии и оборудование фармацевтического производства / Меньшутина Н.В., Мишина Ю.В., Алвес С.В. – Т.1. – М.: Издательство БИНОМ, 2012. – 328 с.
2. Семенов Г.В. Сушка термолабильных продуктов в вакууме – технология XXI века / Семенов Г.В., Касьянов Г.И. // Известия вузов. Пищевая технология. – 2001. – № 4. – С. 5 – 13.

УДК 004.8

Петров И.Д., Терехова Ю.В.

РАСШИРЕНИЕ ЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ АРХЕОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОНТОЛОГИЙ

Петров Иван Дмитриевич, студент 2 курса магистратуры кафедры информационных компьютерных технологий;
Терехова Юлия Владимировна, ассистент кафедры информационных компьютерных технологий, e-mail:
jultevla@gmail.com,

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

В статье рассмотрен процесс создания и расширения логической структуры онтологии археологических исследований. Проанализированы и выведены классы предметной области, выявлены взаимосвязи между ними. Получена логическая структура на основе исходных данных, которая была расширена новыми классами выявленными в ходе анализа. Изучены и рассмотрены функции и возможности специализированного редактора онтологий.

Ключевые слова: археология, онтологии, предметная область, логическая структура, классификация данных.

EXTENSION OF THE LOGICAL DATA MODEL OF THE DOMAIN KNOWLEDGE OF ARCHAEOLOGICAL RESEARCH USING ONTOLOGIES

Petrov I.D., Terehova Y.V.

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

The article describes a process of creating and extending the logical structure of the ontology of archaeological research data. The classes of the domain knowledge and relations between them were analyzed and developed. The logical structure based on the initial data was obtained and expanded by the new classes, which were identified during the analysis. Functionality of a specialized ontology editor is explored and discussed.

Keywords: archeology, ontology, domain knowledge, logical data structure, data classification.

Появление новых способов распространения и хранения информации породило потребность в системах, которые предназначены для решения задач в таких гуманитарных областях науки как археология, историография и источниковедение. Среди проблем, которые возникают у археологов при работе с археологическими материалами, выделяются те, которые заключаются в недоступности информации о базах источников, хранящихся в региональных музеях и институтах, а также в сложности оперативного донесения информации до конечных пользователей[1]. В качестве решения подобных проблем обычно предлагается мультимедийная система того или иного рода презентации материалов археологических раскопок, которые могут работать в онлайн-режиме для того, чтобы множество пользователей могли получить доступ ценной для них к информации. Такие системы обычно создаются вокруг реляционной базы данных с жесткой физической и логической структурами, которые не позволяют гибкое расширение классификации объектов и ориентированы под одну задачу.

Решением данной проблемы может быть создание электронного справочника для структуризации информации в системе. Информационная система сопровождения исследований в таких областях как археология, историография и источниковедение, которая могла бы быть более гибкой и универсальной, требует не только такую же гибкую и универсальную структуру

хранения информации, то есть физический уровень данных, но и уровень логический и концептуальный, который бы помогал пользователям лучше ориентироваться в предметной области. Среди решаемых в этом направлении задач наиболее интересными и актуальными представляются создание электронных справочных систем, концептуализирующих спецификацию предметной области, то есть онтологий[2]. Преимуществами данного подхода в этой проблематике являются:

1) Возможность повторного использования информации в предметной области.

2) Отделение знаний в предметной области от физического уровня хранения данных, необходимых для функционирования системы.

3) Перманентное расширение количества классов в предметной области и связей между ними[3].

Для того чтобы реализовать систему отвечающую вышеописанным технологическим запросам, логическую модель предметной области в данной работе предлагается разработать на основе методологий онтологий.

Для данной задачи было решено использовать готовую инфологическую модель базы данных системы сопровождения археологических раскопок (рис. 1). Основными исходными данными для системы являлись научные отчеты о проделанных археологических исследованиях за сезон. Было решено использовать эту базу данных, классы модели предметной области которой можно перенести в онтологию без изменений, так как

начальный процесс концептуализации уже произведен.

Как видно из данной инфологической модели, выделенные в ней классы близки к объектам и отношениям в предметной области археологических исследований, что соответствует одному из принципов создания онтологии[3].

В эту модель планируется добавить более точную спецификацию предметов по материалу, что покажет возможности свободного расширения онтологии. В нашем случае можно специализировать

стеклянные предметы, то есть те предметы, у которых указано в свойстве материал стекло. Наиболее предпочтительными вариантами для специализации являются бусы и перстни, типизация которых была подробно описана в работе [4]. В ходе концептуализации видов бус и перстней, представленных в той работе, были получены классификации, которые можно использовать для расширения логической модели предметной области (рис. 2).

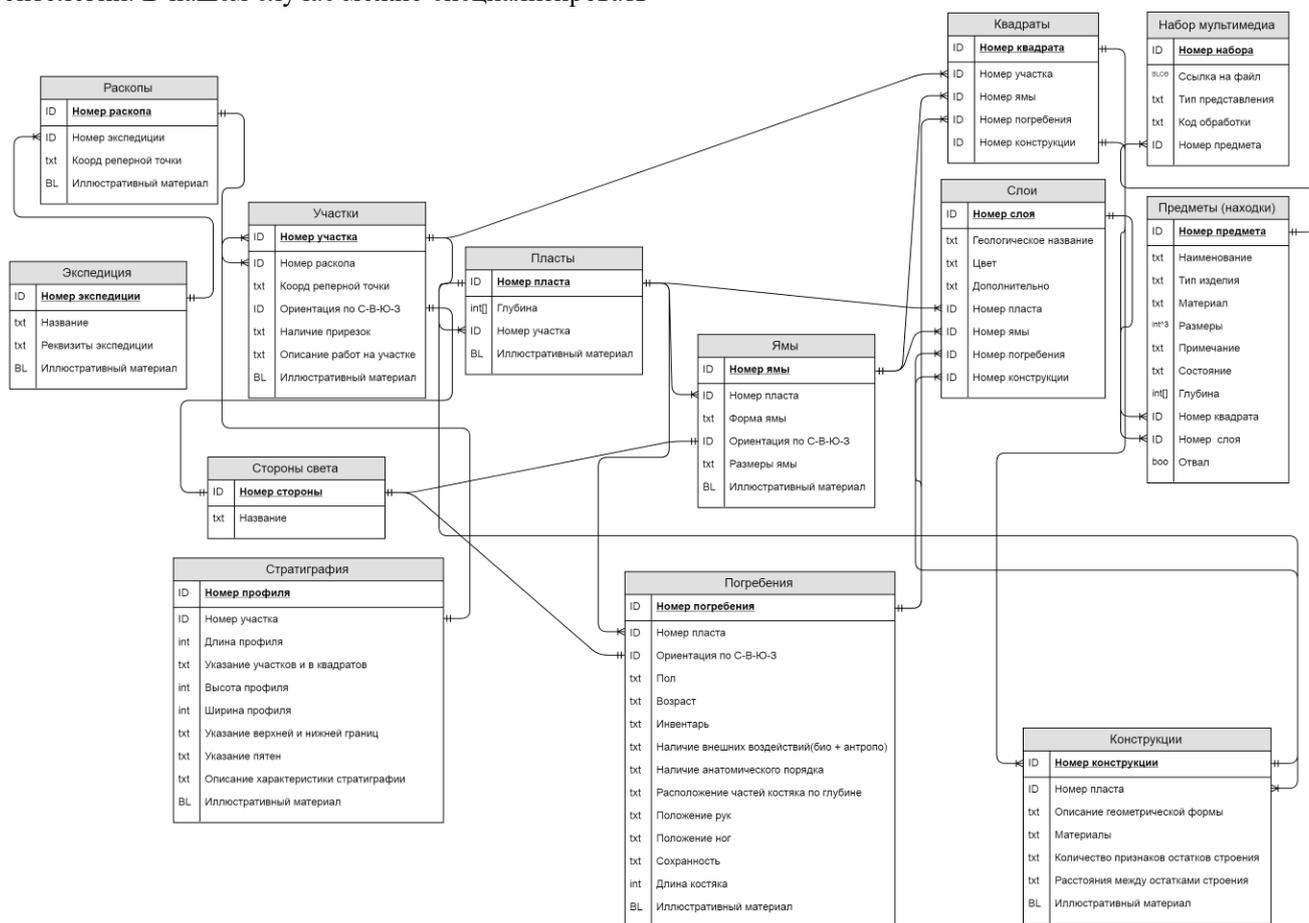


Рис. 1. Инфологическая модель базы данных предметной области



Рис. 2. Классификация стеклянных бус и перстней, полученная в ходе анализа

Как и любой процесс, создание логической структуры онтологии имеет определенный алгоритм. Данный алгоритм состоит из этапа определения классов и этапа расположения классов в древоподобную иерархическую структуру [3].

Для того чтобы расширить логическую структуру достаточно первых двух этапов, в ходе которых мы определим как классы взаимосвязаны между собой. Само по себе расширение структуры онтологии заложено в принципах методологии разработки онтологий, которое заключается в перманентном циклическом расширении и усложнении модели предметной области.

Для реализации структуры онтологии было выбран программный продукт Protege. Protege является открытым бесплатным редактором для создания онтологий и баз знаний [5]. В нем поддерживаются такие форматы как RDF, OWL, XML, из которых было решено выбрать второй, используя этот формат для создания и редактирования баз знаний и сохраняя результаты

работы. Одним из ключевых достоинств Protege является простота в использовании, что повлияло на то, что он применяется многими разработчиками в наукоемких областях [8]. Далее приведены этапы работы по созданию и расширению логики онтологии.

Во время первого этапа была разработана корневая структура онтологии, на основе которой можно было успешно проводить расширение. Было осуществлено следующее:

- 1) Определены классы в онтологии, на основе исходной базы данных археологических материалов.
- 2) Выявлена иерархия классов в данной предметной области, получены более точные взаимосвязи.

Второй этап включал в себя добавление новых классов, что дало расширение предметной области, по материалу, так как был добавлен материал стекло, который связан с основной структурой через корневой элемент.

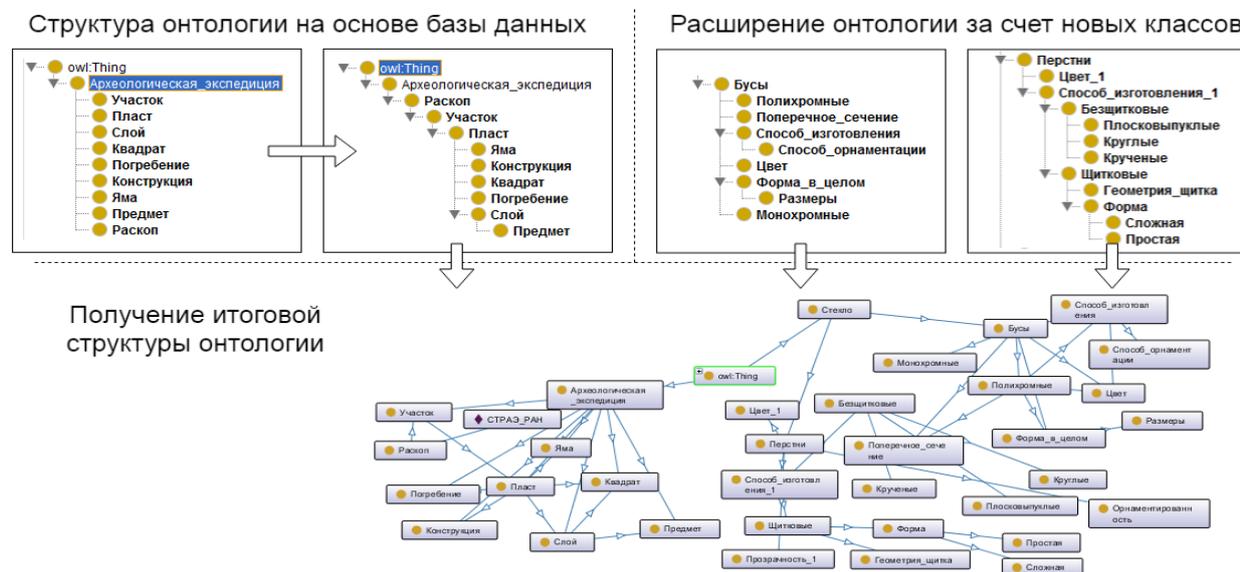


Рис. 3. Процесс создания и расширения структуры онтологии

По результатам данной работы можно заключить:

1. Методология создания онтологий обладает достаточной гибкостью для реализации задач расширения предметных областей исследований;
2. В ходе работы были выявлены некоторые недостатки Protege как редактора онтологий, такие как некорректность в выполнении команд на создание связей и атрибутов.

Наиболее перспективными направлениями дальнейших исследований авторы считают поиск и выбор нового редактора онтологий, который бы более эффективно решал поставленные задачи, а также поиск новых классов для дальнейшего расширения и уже заполнения онтологии конкретными экземплярами.

Список литературы

1. Блохин В. Г., Кузьмин Н. М., Перерва Е. В., Хохлова С. С., Шинкарь О. А. Геоинформационные системы для поддержки археологических данных //

Вестник ВолГУ. Серия 9: Исследования молодых ученых. 2010.

2. Gruber T.R. Toward Principles for the Design of Ontologies Used for Knowledge Sharing. International Journal of Human-Computer Studies, 1993, V. 43, Issues 5-6. - P.907-928.

3. Карпов В. Э. Онтологии [Электронный ресурс] // URL: <http://www.rema44.ru/resurs/study/ai/present/L05-03-onto.pdf> (дата обращения 26.02.2020).

4. Валиулина С.И., Сагманова Г.М. Новые находки стеклянных украшений в Старой Рязани // ЛОМОНОСОВ - 2018. Сборник тезисов XXV Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. — МГУ имени Ломоносова, Москва, 2018.

5. Создание онтологии в Protégé 5.0 [Электронный ресурс] // URL: <https://habr.com/ru/post/277413/> (дата обращения 26.02.2020)

УДК 54.052

Федотова О. В., Цыганков П. Ю., Меньшутина Н. В.

ПРОЦЕССЫ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ СОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Федотова Ольга Вячеславовна, студентка 4 курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; e-mail: fedotova.olga.basic@gmail.ru

Цыганков Павел Юрьевич, к. т. н., ведущий инженер международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий РХТУ им. Д. И. Менделеева;

Меньшутина Наталья Васильевна, д.т.н., профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева, руководитель международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий РХТУ им. Д. И. Менделеева;

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

Разработаны и исследованы методы получения гидрофобных сорбентов на основе целлюлозы путём переработки целлюлозно-бумажных отходов. Изучено влияние концентрации целлюлозного волокна на сорбционные характеристики конечного продукта.

Ключевые слова: сорбенты, целлюлоза, бумажные отходы, разливы нефти.

PROCESSES OF PRODUCING HIGH EFFICIENT SORBENTS BASED ON CELLULOSE

Fedotova O.V., Tsygancov P.Y., Menshutina N.V.

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

Methods of the production of hydrophobic sorbents based on cellulose by processing pulp and paper waste have been developed and investigated. The effect of cellulose fiber concentration on the sorption characteristics of the final product was studied.

Keywords: sorbents, cellulose, paper waste, oil spill.

С ростом нефтяной промышленности разливы нефти и токсичных органических растворителей, возникающие в результате операций по транспортировке, переработке, эксплуатации и хранению, стали настоящей угрозой для окружающей среды и оказывают непоправимое воздействие на экологическую систему. Было оценено, что ежегодные разливы нефтяных продуктов в глобальную морскую среду составляют более 1 433 000 тонн [1]. Среди существующих стратегий, используемых в настоящее время для очистки от нефтяных загрязнений, сорбция считается самым экономичным выбором из-за ее простоты и высокой эффективности. Следовательно, существует потребность в разработке новых экологически безопасных сорбирующих материалов с высокой сорбционной способностью и низкой стоимостью.

Мировой спрос и производство бумаги и картона растут. В следствие этого, ожидается, что годовой объем производства бумаги и картона вырастет примерно с 365 млн. тонн (млн. тонн) в 2006 году до 700 млн. тонн (низкая оценка) и 900 млн. тонн (высокая оценка) в 2050 году [2]. Увеличение производства бумаги и картона, следовательно, приведет к значительному росту бумажных отходов (макулатуры). На данный момент количество макулатуры составляет 25-40% от общего количества твердых бытовых отходов [3]. Такие способы утилизации макулатуры, как захоронение или её сжигание являются экологически и экономически нецелесообразными.

Использование макулатуры как вторичного сырья поможет решить вопросы, связанные с

утилизацией накапливающихся целлюлозно-бумажных отходов и сокращением использования лесных ресурсов. Кроме того, вторичная переработка является менее энергоёмкой, дешёвой и оказывает меньшее воздействие на окружающую среду по сравнению с использованием свежих полуфабрикатов из древесины.

Таким образом, благодаря широкой доступности, относительно низкой стоимости, возобновляемости и биосовместимости, материалы на основе целлюлозы, получаемые путём переработки целлюлозно-бумажных отходов, являются перспективными материалами для исследования их в качестве сорбентов.

Описанные в литературных источниках [4-6] методики получения сорбентов на основе целлюлозы из вторичного сырья можно условно разделить на 2 способа:

1. Диспергирование бумаги в растворителе без каких-либо дополнительных обработок;

2. Диспергирование бумаги в растворителе с последующей дополнительной обработкой с целью очистки целлюлозного материала от типографской краски, клея и прочих материалов, присутствующих в бумажных отходах.

Для обеих методик первой стадией является измельчение бумажных отходов (газеты) и вымачивание её в растворителе в течение суток. В данной работе для проведения сравнительной характеристики в исследовании использовались два растворителя: дистиллированная вода и 5 масс.% раствор гидроксида натрия. Вторая стадия – диспергирование с помощью ротор-статорного

гомогенизатора в течение 10 минут при 9000 об/мин. Затем для первой методики (без дополнительной обработки) суспензии разливаются по формам и замораживаются в течение суток при $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$. Завершающая стадия – сублимационная сушка в течение двух суток.

Для второй методики, после проведения стадий диспергирования, проводилась замена растворителя на этиловый спирт (в течение 3 часов). Затем спустя сутки на 3 часа растворитель заменяется на перекись водорода. Четвертая стадия – промывка дистиллированной водой до нейтрального pH. Суспензии разливаются по формам и замораживаются в течение суток при $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$. Завершающая стадия – сублимационная сушка в течение двух суток. Таким образом, было получено 16 образцов (по двум методикам, с использованием двух разных растворителей на первом этапе

получения). Для сравнения, были взяты различные массы погружаемой в растворитель бумаги на первом этапе: 0,75; 1,5; 3; 3,5 г бумаги/100 г воды. Пористость образцов рассчитывалась по следующей формуле:

$$P = \left(1 - \frac{\rho_{\text{каж}}}{\rho_{\text{цст}}}\right) \cdot 100\% \quad (1)$$

где $\rho_{\text{каж}}$ – кажущаяся плотность образца; $\rho_{\text{цст}}$ – плотность кристаллической целлюлозы ($1,5\text{ г/см}^3$).

В таблице 1 приведены результаты измерений плотности и пористости для каждого образца.

Сканирующая электронная микроскопия (СЭМ) полученных образцов для обеих методик при использовании на первой стадии в качестве растворителя дистиллированной воды представлена на рисунке 1.

Таблица 1. Характеристики полученных образцов

Растворитель	$\text{H}_2\text{O}_{\text{дист}}$ (без обр.)				5 масс.% NaOH (без обр.)			
$m_{\text{бум}}$, г/100 г воды	0,75	1,5	3	3,5	0,75	1,5	3	3,5
$\rho_{\text{каж}}$, кг/м ³	24	25	33	38	8	12	17	22
P, %	98,4	98,3	97,8	97,4	99,4	99,2	98,9	98,6
Растворитель	$\text{H}_2\text{O}_{\text{дист}}$ (с обр.)				5 масс.% NaOH (с обр.)			
$m_{\text{бум}}$, г/100 г воды	0,75	1,5	3	3,5	0,75	1,5	3	3,5
$\rho_{\text{каж}}$, кг/м ³	8	14	16	21	12	14	17	16
P, %	99,4	99,1	98,9	98,6	99,2	99,0	98,9	98,9

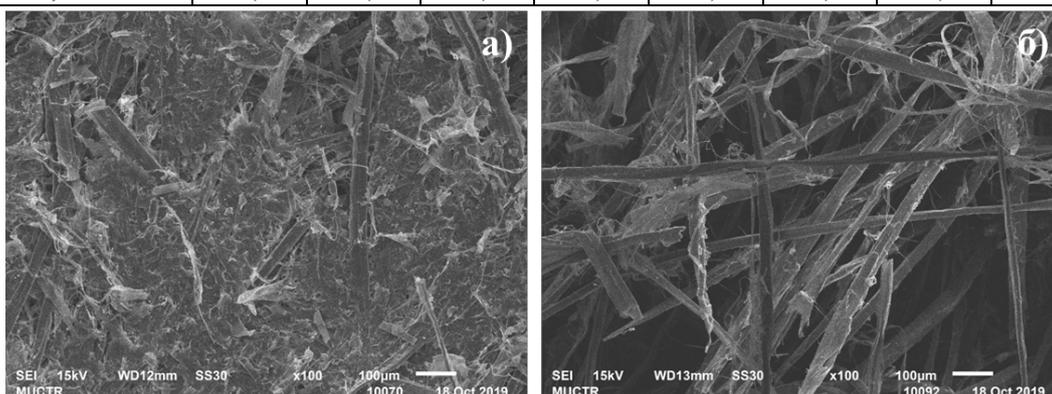


Рисунок 1. СЭМ-изображения полученных образцов: а) по первой методике; б) по второй методике

Сорбирующие материалы из целлюлозных волокон имеют гидрофильный характер. Чтобы получить материал со способностью сорбировать нефть в водных средах, необходимо придание материалам гидрофобных свойств. Гидрофильный характер целлюлозы может быть изменен при использовании гидрофобных агентов, которые реагируют с гидроксильными группами, присутствующими на поверхности волокон.

Для проведения данной функционализации был использован метод осаждения органосиланов из паровой фазы. Полученные образцы и 20 г метилтриметоксисилана (МТМС) были помещены в эксикатор и оставлены в печи при $70\text{ }^{\circ}\text{C}$ на 3 часа. Затем полученные образцы оставляли в печи на 1 час при $60\text{ }^{\circ}\text{C}$ с целью удаления избытка МТМС. На рисунке 2 представлены изображения гидрофобных сорбентов с каплей воды, демонстрирующие наличие угла контакта с водой.

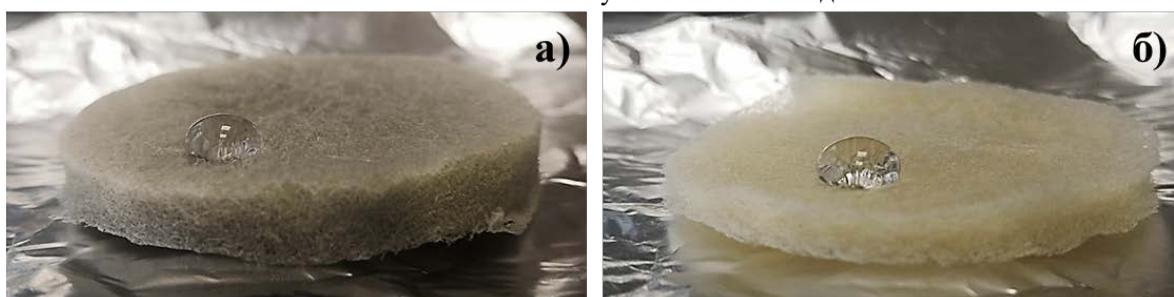


Рисунок 2. Образцы гидрофобных сорбентов с каплей воды: а) полученный, при растворении в воде; б) полученный, при растворении в щёлочи

Наиболее простым и часто используемым методом определения сорбционной ёмкости сорбента является метод, основанный на сравнении массы сорбента до и после процесса сорбции. Для определения сорбционной ёмкости полученных образцов использовались три различные органические жидкости: 95%-й этиловый спирт (C_2H_5OH), дихлорметан (CH_2Cl_2) и машинное масло.

Сперва определялась масса чистых образцов до сорбции. Затем образцы погружались в органическую жидкость при комнатной температуре. Через 30 минут образцы вынимались и измерялась

масса влажного материала. Сорбционная ёмкость определялась как отношение массы сорбированной органической жидкости к массе образца до сорбции:

$$Q = \frac{m - m_0}{m_0} \cdot 100\% \quad (2)$$

где m_0 - масса образца до сорбции, г; m - масса образца после сорбции, г.

Было изучено влияние пористости сорбента на его сорбционную ёмкость. Результаты измерений приведены на рисунке 3.

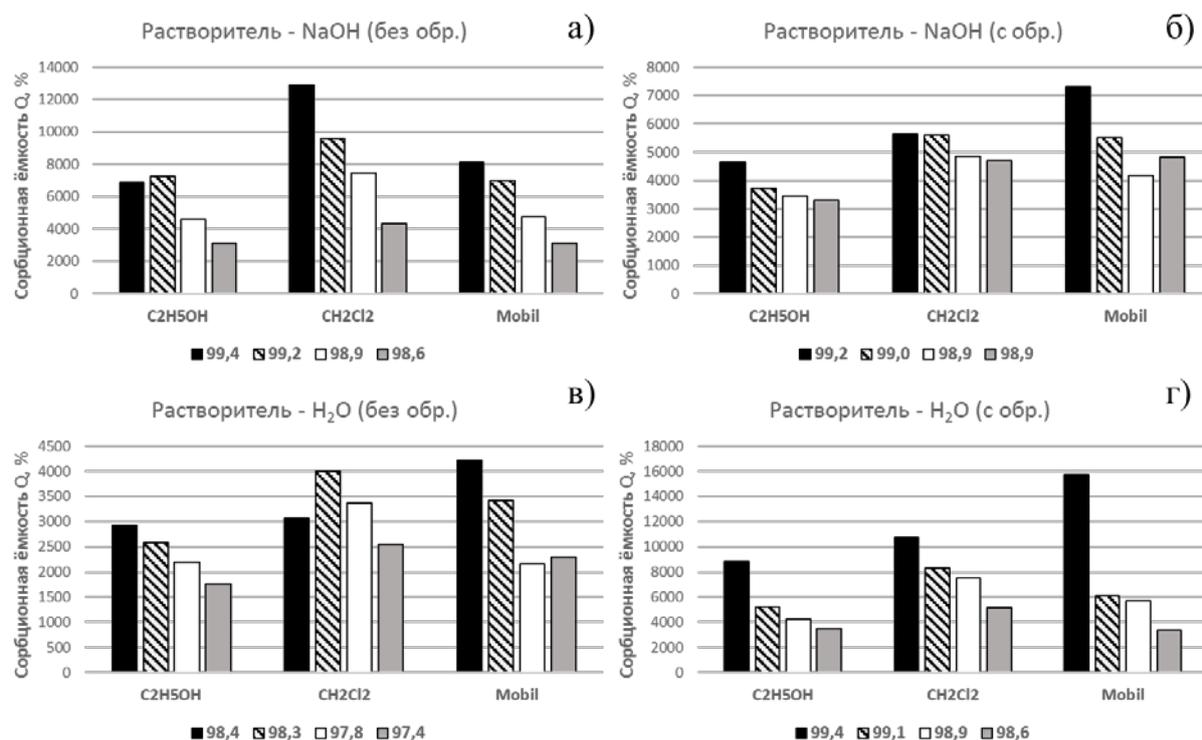


Рисунок 3. Зависимости сорбционной ёмкости от пористости P , % для образцов, приготовленных по: а) и в) – первой методике; б) и г) – второй методике, при сорбции трёх различных органических жидкостей: C_2H_5OH , CH_2Cl_2 и машинное масло Mobil

Из приведённых графиков видно, что в большинстве случаев увеличение пористости сорбента ведёт к повышению сорбционной ёмкости. Также было выявлено, что в случае, когда бумага растворялась в воде, предварительная обработка оказала положительное влияние на сорбционную ёмкость, тогда как при растворении бумаги в 5%-м NaOH предварительная обработка привела к ухудшению сорбционной ёмкости.

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

Список литературы

- Rosell-Melé A. et al. Oil pollution in soils and sediments from the Northern Peruvian Amazon //Science of The Total Environment. – 2018. – Vol. 610. – P. 1010-1019.
- IEA. Energy technology transitions for industry: strategies for the next industrial revolution. – OECD Publishing, 2009.
- Nourbakhsh A., Ashori A. Particleboard made from waste paper treated with maleic anhydride //Waste Management & Research. – 2010. – Vol. 28. – №. 1. – P. 51-55.
- Jin C. et al. Fabrication of cellulose-based aerogels from waste newspaper without any pretreatment and their use for absorbents //Carbohydrate polymers. – 2015. – Vol. 123. – P. 150-156.
- Srasri K. et al. Recovery potential of cellulose fiber from newspaper waste: An approach on magnetic cellulose aerogel for dye adsorption material //International journal of biological macromolecules. – 2018. – Vol. 119. – P. 662-668.
- Nguyen S. T. et al. Cellulose aerogel from paper waste for crude oil spill cleaning //Industrial & engineering chemistry research. – 2013. – Vol. 52. – №. 51. – P. 18386-18391.

УДК 504.064.2.001.18

Ходакова Ж.Г., Савицкая Т.В.

РАЗРАБОТКА НЕЙРОСЕТЕВОЙ МОДЕЛИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА ИСТОЧНИКАМИ ВЫБРОСОВ ПРЕДПРИЯТИЙ

Ходакова Жанна Геннадьевна, студентка 2 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

e-mail: khodakova-zhanna@yandex.ru

Савицкая Татьяна Вадимовна, д.т.н., профессор кафедры компьютерно-интегрированных систем в химической технологии.

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

В данной статье описано создание искусственной нейронной сети на основе данных вычислительных экспериментов для прогнозирования максимальной концентрации загрязняющего вещества в зависимости от расстояния от источника выброса, от высоты над подстилающей поверхностью и от температуры атмосферного воздуха.

Ключевые слова: искусственные нейронные сети, прогнозирование, загрязнение атмосферного воздуха.

DEVELOPMENT OF A NEURAL NETWORK MODEL FOR FORECASTING ATMOSPHERIC AIR POLLUTION BY ENTERPRISE EMISSION SOURCES

Khodakova Zhanna Gennadyevna, Savitskaya Tatiana Vadimovna.

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

This article describes the creation of an artificial neural network based on data from computational experiments to predict the maximum single concentration of a pollutant depending on the distance from the source of emission, on the height above the underlying surface and on the temperature of the atmospheric air.

Keywords: artificial neural networks, forecasting, air pollution.

Данные мониторинга загрязнения воздушного бассейна города характеризуются многомерностью и наличием множества связей между экологическими параметрами. Процессу загрязнения атмосферного воздуха присущи нелинейность и неопределенность, что затрудняет оценку и прогнозирование оператором экологической ситуации. Для повышения оперативности и точности принятия верных управленческих решений в последнее время все чаще используются искусственные нейронные сети, способные работать в условиях нечеткой исходной информации и учитывать скрытые зависимости [1].

Для создания нейронной сети необходимо подготовить выборку исходных данных. Была проведена систематизация имеющихся материалов по прогнозированию уровня загрязнения атмосферного воздуха постоянно действующими источниками выбросов загрязняющих веществ (ЗВ).

Были собраны и проанализированы данные о результатах экспериментов, проводимых в четырех программах для прогнозирования уровня загрязнения: ОНД-86, МПЗВ, ТОХИ^{Risk} (реализующих методику расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий, действующую до 1 января 2018 года и получившую название ОНД-86 [2]) и АРФ (реализующая новую методику расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе, заменившую ОНД-86 с 1 января 2018 года [3]). Разработками кафедры компьютерно-интегрированных систем в химической технологии являются программные модули ОНД-86, МПЗВ и АРФ. Программный комплекс ТОХИ^{Risk}

разработан ЗАО «Научно-технический центр исследований проблем промышленной безопасности», г. Москва (<https://toxi.ru>).

Объектом исследования был выбран постоянно действующий источник №91, расположенный на территории предприятия НАК «Азот» в цехе Карбамид-3, находящийся в г. Новомосковске Тульской области. Приведем некоторые характеристики источника выбросов №91: высота источника - 80 м, диаметр трубы - 1 м, объемный расход газовой смеси на выходе из источника - 0,79 м³/с, максимальное количество загрязняющих веществ, выбрасываемых в атмосферу - 86,6 г/с. Данный источник осуществляет выбросы NH₃.

Формулировка задачи прогнозирования: необходимо провести прогнозирование распределения максимальной концентрации C_z загрязняющего вещества NH₃ при различной температуре воздуха T (°C), на разных высотах z (м) и разном расстоянии x (м) от источника выброса.

Нейросетевая модель будет состоять из трех входов (вход x₁ - температура воздуха T (°C), вход x₂ - расстояние от источника выброса x (м), вход x₃ - расстояние по высоте z (м)) и одного выхода (выход y₁ - максимальная концентрация C_z (мг/м³) загрязняющего вещества на разных высотах z (м) над подстилающей поверхностью).

В качестве информационных неизменяющихся параметров были выбраны: скорость ветра U=2 м/с, расстояние по нормали к оси факела выброса y=10 м.

Диапазон значений по T составил от 5°C до 20°C с шагом 5°C. Диапазон значений по x составил от 50 м до 750 м с шагом 50 м. Диапазон по z составил от 5 м

до 90 м с шагом 5 м, так как при значениях, близких к высоте источника ($H=80$ м), наблюдались самые высокие концентрации загрязняющего вещества, значения резко уменьшались по мере приближения к высоте 90 м и далее не представляли интерес для задачи прогнозирования из-за своих малых значений. Объем выборки составил 1080 строк. Перед загрузкой данной выборки в программу для построения нейронной сети был сформирован файл в формате (.TXT), структура которого представляла собой таблицу, состоящую из столбцов значений параметров (6 столбцов), причем разделение в строках между столбцами было в виде табуляции. Для построения нейронной сети использовалась программа Deductor Studio Academic – аналитическая платформа для создания законченных прикладных решений в области анализа данных. Версия Academic предназначена для образовательных и обучающих целей [4].

Перед созданием нейросетевой модели необходимо корректно настроить процесс обучения. Был выбран случайный способ разделения множества данных, при этом размер обучающего множества составил 80% от исходной выборки, тестового – 20%, установлен вид функции активации – Сигмоида. Для обучения нейронной сети был выбран алгоритм «Back-Propagation» (метод обратного распространения ошибки), позволяющий проводить обучение в режиме

«онлайн»: коррекция весов производится после предъявления каждого примера обучающего множества. Точность обучения, при которой процесс обучения будет остановлен, равна 0,001. Необходимо исследовать влияние параметров обучения искусственной нейронной сети на точность прогнозирования и определить оптимальную структуру и параметры настройки искусственной нейронной сети. Для этого было проведено варьирование числа скрытых слоев и нейронов в них, для лучших структур определена оптимальная скорость обучения, при которой средняя квадратичная ошибка имеет наименьшее значение.

Для нейронных сетей с одним скрытым слоем среднеквадратичная ошибка обучения для структуры 3-10-1 (10 нейронов в скрытом слое) оказалась наименьшей и равна 0,000187 (при скорости обучения 0,1). Также для структуры 3-10-1 определена оптимальная скорость обучения, равная 0,3, при которой среднеквадратичная ошибка равна 0,000136. На рисунке 1 представлен пример отображения статистических характеристик выборки при обучении нейронной сети со структурой 3-10-1 (скорость обучения 0,1): C_z представляет собой расчетные (экспериментальные) значения, C_z_OUT обозначает спрогнозированные значения данной концентрации, C_z_ERR - средняя квадратичная ошибка.

Метка столбца	Статистика: Кол-во значений = 1080						
	↓ Минимум	↑ Максимум	↑ Среднее	↓ Стандартное откл.	Σ Сумма	Σ ² Сумма квадратов	
1 9.0 T	5	20	12,5	5,592759784	13500	202500	
2 9.0 U	2	2	2	0	2160	4320	
3 9.0 x	50	750	400	216,1247709	432000	223200000	
4 9.0 y	10	10	10	0	10800	108000	
5 9.0 z	5	90	47,5	25,95265526	51300	3163500	
6 9.0 C _z	0,0302	68,45707	3,179946019	7,652837816	3434,3417	74113,65605	
7 9.0 C _{z_OUT}	0,03020000038	65,90068401	2,824095098	7,735567937	3050,022706	73179,84737	
8 9.0 C _{z_ERR}	4,212587317E-13	0,00762824293	0,0001868154476	0,0005969669696	0,2017606835	0,0004222147707	

Рис. 1. Набор статистических характеристик для нейронной сети структуры 3-10-1 при скорости обучения 0,1

Среди нейронных сетей с двумя и тремя скрытыми слоями оптимальной структурой стала 3-6-2-1 (сеть с двумя скрытыми слоями, в первом слое шесть нейронов, во втором слое 2 нейрона), для которой значение среднеквадратичной ошибки равно 0,0000936 (скорость обучения 0,1). Для данной структуры определена оптимальная скорость обучения, равная 0,08, при которой ошибка обучения составила 0,0000921.

Для нейронных сетей, обученных на первичной выборке исходных данных характерно следующее: наименьшие расхождения экспериментальных и спрогнозированных значений концентрации аммиака при $x=750$ м наблюдаются для высот z , находящихся в

диапазоне от 65 м до 75 м. Тогда как на интервале от 5 м до 25 м наблюдается максимальное расхождение концентраций аммиака (более, чем в 2 раза).

На следующем этапе было решено расширить выборку исходных данных. Стало очевидно, что необходимо учесть значения концентрации загрязняющего вещества для $z=1,7$ м (уровень среднего роста человека). Также исходная выборка была существенно расширена за счёт включения в нее варьирования по x от 49 м до 749 м с шагом 50 м и по z от 6 м до 91 м с шагом 5 м. Объем расширенной выборки составил 2280 строк, что в 2 раза больше объема первичной выборки. Ниже в таблице 1 представлен фрагмент расширенной выборки.

Таблица 1. Зависимость концентрации загрязняющего вещества NH₃ от высоты z

Т, °С	U, м/с	x, м	y, м	Cz, мг/м ³	
				z=1,7 м	z=5 м
20	2	750	10	0,40278	0,41194
20	2	700	10	0,45957	0,46043
20	2	650	10	0,47639	0,47735
20	2	600	10	0,49312	0,49412
20	2	300	10	0,50046	0,5022
20	2	250	10	0,43718	0,439
20	2	200	10	0,34676	0,34848
20	2	150	10	0,23817	0,2395
20	2	100	10	0,1274	0,12819
20	2	50	10	0,03785	0,03808

Как можно заметить, на высоте $z=1,7$ м концентрация аммиака ниже, чем на высоте 5 м. Но эти значения на расстоянии от источника от 150 м и далее превышают ПДК_{м.р.}=0,2 мг/м³.

Проведено обучение нейросети с помощью расширенной выборки для лучших сетей и параметров настройки, найденных ранее (для нейросети с одним скрытым слоем это структура 3-10-1 со скоростью обучения 0,3; для сети с двумя скрытыми слоями – структура 3-6-2-1 со скоростью обучения 0,08). Если сравнивать среднее значение среднеквадратичной ошибки Cz_ERR для нейронных сетей со структурой 3-10-1, обученных на разных выборках, то для НС, обученной на первичной выборке, ошибка составила 0,000136, когда для НС, обученной на расширенной выборке, ошибка составила 0,000165. Возможно, при переобучении НС разница может нивелироваться. В данном случае важно отметить, что расхождения концентраций для исследуемого ранее диапазона (при $x=750$ м) для высот z от 5 м до 45 м незначительны. Отметим и то, что для высоты $z=1,7$ м (средний рост человека) экспериментальные и спрогнозированные значения концентрации аммиака достаточно близки. Для нейронной сети со структурой 3-6-2-1 (скорость обучения 0,08), обученной на первичной выборке, среднеквадратичная ошибка составила 0,0000921, когда для НС, обученной на расширенной выборке, ошибка составила 0,0000859. Ошибка стала меньше после расширения обучающей выборки. Отметим, что расхождения концентраций для исследуемого ранее диапазона (при $x=750$ м) для высот z от 5 м до 45 м значительны. Для высоты $z=1,7$ м (средний рост человека) экспериментальные и спрогнозированные значения концентрации аммиака сильно расходятся.

Из всего вышеперечисленного необходимо сделать вывод о том, что для прогнозирования концентрации ЗВ на большом расстоянии от источника и при высоте от 1,7 до 25-45 метров лучше использовать нейронную сеть со структурой 3-10-1, используя при обучении расширенную выборку, позволяющую прогнозировать концентрацию ЗВ на уровне роста человека. Для повышения качества прогноза необходимо существенно расширить обучающую выборку путем добавления данных вычислительных экспериментов с варьированием значений расстояния от источника выброса (x , м) и

расстояния по высоте над подстилающей поверхностью (z , м), также варьирование других настроек обучения позволит увеличить точность прогнозирования.

Аналогичный подход может быть применен к другим источникам выбросов для прогнозирования загрязнения атмосферного воздуха различными загрязняющими веществами. Проведение большого количества экспериментов позволило составить достаточно полную картину распределения загрязняющего вещества от источника выбросов, а обученная нейронная сеть даст возможность прогнозировать загрязнение атмосферного воздуха в определенной точке на территории промышленного предприятия и за ее границами.

Полученные результаты могут использоваться не только при составлении рекомендаций для реальных производственных объектов по снижению негативного эффекта источников выбросов, но и позволят усовершенствовать систему мониторинга атмосферного воздуха на территориях, прилегающих к промышленным предприятиям, так как на основании полученных результатов можно рекомендовать различные структуры нейронных сетей в системах поддержки принятия решений по управлению качеством атмосферного воздуха.

Список литературы

1. Егоров А.Ф., Савицкая Т.В. Управление безопасностью химических производств на основе новых информационных технологий. М.: Химия, КолосС, 2004. 416 с.
2. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200000112> (дата обращения: 19.05.2020).
3. Методы расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/456074826> (дата обращения: 19.05.2020).
4. Аналитическая платформа Deductor Studio - [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://basegroup.ru/deductor/components/studio> (дата обращения: 19.05.2020).

УДК 544.421.42:536.755

Ходеева М.И., Василенко В.А., Кольцова Э.М.

РЕАЛИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ КРИСТАЛЛИЗАТОРА ЕМКОСТНОГО ТИПА ДЛЯ КЛИЕНТ-СЕРВЕРНОГО ПРИЛОЖЕНИЯ

Ходеева Мария Игоревна, студент факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;**Василенко Виолетта Анатольевна**, к.т.н., доцент, доцент кафедры информационных компьютерных технологий, e-mail: vavasilenko@muctr.ru;**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

Для разработанного ранее клиент-серверного приложения в области процессов кристаллизации реализован блок математического моделирования. В работе приведена математическая модель кристаллизации в аппарате емкостного типа и результаты расчета по предложенной модели.

Ключевые слова: кристаллизация, экспертная система, база данных, клиент-серверное приложение, математическое моделирование, кристаллизатор с перемешиванием.

IMPLEMENTATION OF THE MATHEMATICAL MODEL OF A CAPACITY TYPE CRYSTALLIZER FOR THE CLIENT-SERVER APPLICATION

KhodeevaM.I., VasilenkoV.A., KoltsovaE.M.

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

For the previously developed client-server application in the field of crystallization processes, a block of mathematical modeling is implemented. The mathematical model of crystallization in a stirred batch crystallizer and the results based on the calculation of the proposed model are presented.

Keywords: crystallization, expert system, database, client-server application, mathematical model, stirred batch crystallizer.

Данная работа является продолжением цикла работ, связанных с разработкой клиент-серверного приложения для интеллектуальной системы в области процессов кристаллизации «IS Crystalogue» [1]. База данных разработана на сервере баз данных MS SQL Server Express. Клиентское приложение разработано на объектно-ориентированном языке программирования C# в среде разработки Visual Studio. Ранее было запрограммировано три основных функциональных блока: блок экспертного выбора конструкции аппарата, блок выбора оборудования, блок инженерного расчета. Все эти блоки обмениваются информацией через банк параметров.

Блок математического моделирования предполагает расчет для трех типов аппаратов: емкостной кристаллизатор с перемешивающим устройством, кристаллизатор с псевдоожиженным слоем и вакуумный кристаллизатор. Моделирование процессов кристаллизации приводит к рассмотрению нелинейных задач и требует разработки эффективных алгоритмов или модификации известных методов.

Используемые алгоритмы должны обеспечивать необходимую точность расчёта быстрых процессов и, вместе с тем, не требовать слишком больших затрат машинного времени на расчёт всей задачи в целом.

Блок математического моделирования предназначен для расчёта динамических

характеристик работы аппарата (временных профилей или профилей по длине/высоте различных физико-химических свойств), исходя из технологических параметров процесса и оборудования.

Математическая модель для охлаждаемого кристаллизатора с мешалкой, работающего в периодическом режиме, разработана ранее с использованием понятия момента функции распределения кристаллов по размерам [2]. Предполагали, что испарение растворителя незначительно, все кристаллы имеют одинаковую форму и размером ядра в момент образования можно пренебречь. Так же можно пренебречь скоростями разрушения, агломерации кристаллов.

Уравнение баланса числа частиц, описывающее вторичное зародышеобразование:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \eta \frac{\partial f}{\partial l} = 0. \quad (1)$$

Уравнение сохранения массы растворённого вещества:

$$\frac{dc}{dt} = - \int_{l_0}^L \rho_2^0 f \bar{\eta} k l^2 dl. \quad (2)$$

Уравнение изменения температуры в аппарате:

$$\left(\rho_1 C_{1T} + C_{2T} \int_{l_0}^L \rho_2^0 f r dl \right) \frac{dT}{dt} = \Delta h \int_{l_0}^L \rho_2^0 f \bar{\eta} k l^2 dl - Q, \quad (3)$$

где f – функция распределения кристаллов по размеру; $\bar{\eta}$ – линейная скорость роста кристалла, м/с; l – линейный размер кристалла, м; c – концентрация растворенного вещества, кг/м³; l_0 – размер зародыша, м; L – максимальный размер кристалла, м; ρ_2^0 – плотность кристалла, кг/м³; k – коэффициент формы; ρ_1 – плотность раствора, кг/м³; C_{1T} , C_{2T} – теплоемкость растворов и кристаллов соответственно, Дж/(кг·К); T – температура, К; r – размер (объем) кристалла, м³; Q – теплота кристаллизации, Дж/(м³·с); Δh – тепловой эффект фазового перехода, Дж/кг.

Кинетика кристаллизации (скорость зародышеобразования I и скорость роста в процессе кристаллизации η) описывается зависимостями:

$$I = k_1 \Delta c^{n_1}, \quad (4)$$

$$\eta = k_2 \Delta c^{n_2}, \quad (5)$$

где I – скорость зародышеобразования; η – скорость роста кристаллов; $k_{1,2}$, $n_{1,2}$ – кинетические параметры;

Δc – движущая сила кристаллизации, кг/м³; рассчитывается по формуле: $\Delta c = c_1 - c_s$; c_s – равновесная концентрация, кг/м³;

Индексы 1, 2 – для параметров соответственно жидкой и твердой фаз.

Начальные и граничные условия имеют вид:

$$c(t_0) = c_0, \quad T(t_0) = T_0, \quad f(t_0, l) = f_0(l), \quad (6)$$

$$f(t, l_0) = I; \quad f(t, L) = 0.$$

С помощью уравнения (1), описывающего механизм вторичного зародышеобразования, можно перейти к системе моментов функции распределения кристаллов по размерам. После проведения ряда математических преобразований и подстановки начальных и граничных условий модель процесса массовой кристаллизации в периодическом кристаллизаторе можно представить в виде:

$$\frac{\partial \mu_0}{\partial t} = I,$$

$$\frac{\partial \mu_n}{\partial t} = n \eta \mu_{n-1},$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -3 \rho_2^0 \eta \mu_2, \quad (8)$$

$$\left(\rho_1 C_{1T} + \rho_2^0 C_{2T} k \mu_3 \right) \frac{dT}{dt} = 3 \Delta h \rho_2^0 k k_2 \Delta c^{n_2} \mu_2 - Q.$$

где μ_n – n -ый момент. Уравнения модели решали численным методом.

Интерфейс блока математического моделирования представлен на рис. 1.

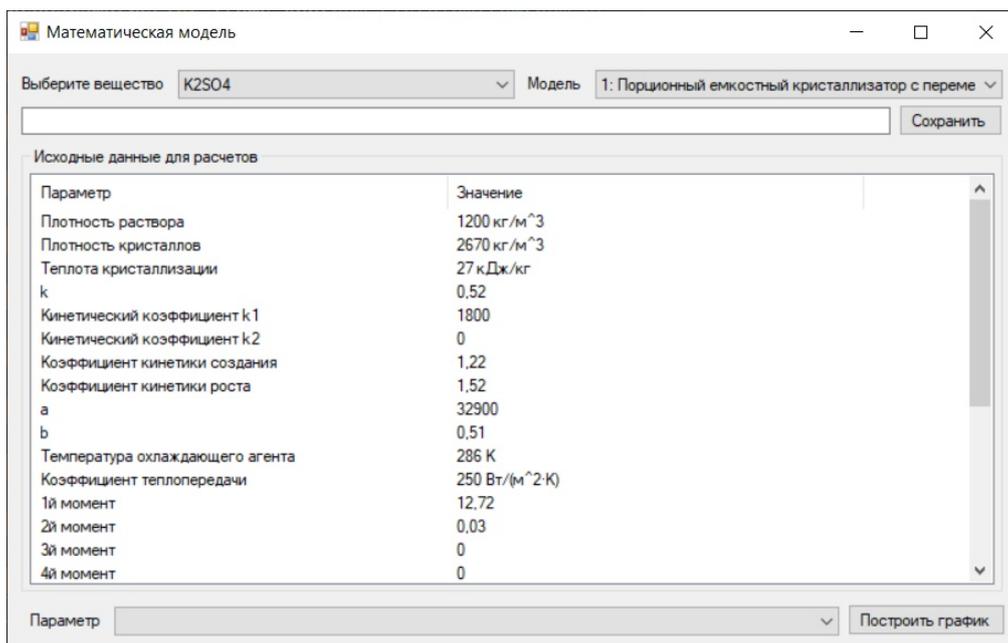


Рис. 1. Интерфейс блока математического моделирования

В качестве параметров модели служат: кристаллизующее вещество, физико-химические свойства вещества, технологические параметры процесса, технологические параметры оборудования.

Каждый параметр задаётся именем, значением, размерностью, а также набором дополнительных характеристик (минимальное и максимальное значения параметра, аппроксимирующая функция и т.д.).

Выходными параметрами процедуры математического моделирования являются внутренние параметры процесса, а также кривые зависимостей различных физико-химических параметров (температуры, концентрации) от времени или по профилю аппарата.

Библиотека, содержащая модель, должна удовлетворять следующим требованиям: функциональная полнота, однозначная идентификация функций, маскировка реализации (внутренняя реализация модели полностью

определена в качестве входных параметров используются только параметры процесса), однозначная и гибкая идентификация входных и выходных параметров.

В качестве примера расчёта математической модели емкостного аппарата рассмотрен расчет для K_2SO_4 .

В результатах расчёта по приведенной выше математической модели емкостного аппарата получены следующие графики: зависимость концентрации раствора от времени (рис. 2.) и зависимость температуры раствора от времени.

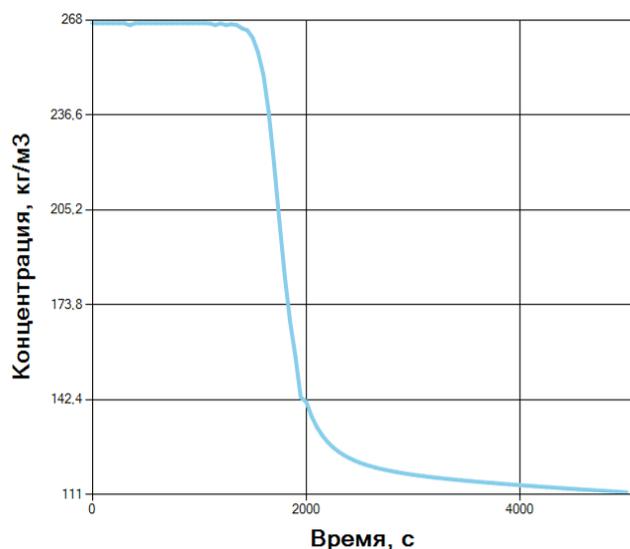


Рис.2. Зависимость концентрации раствора от времени

Разрабатываемая информационная система является весьма актуальной, особенно при

проектировании цифровых двойников промышленных предприятий. Такая система может быть применена в практической деятельности:

1. Для целей проектирования – введение в систему процедур инженерного расчёта позволит автоматизировать и облегчить проектирование аппарата для кристаллизации;
2. Для целей моделирования существующих аппаратов – расчёт математических моделей может дать ценную информацию о поведении параметров внутри аппарата;
3. Для автоматизации научных разработок в области математического моделирования кристаллизации;
4. Для целей обучения и тренинга;
5. Для управления системами, при наличии дополнительных расширений математических моделей, способных рассчитывать управляющие параметры, и механизмов, позволяющих пересылать эти значения на управляющее устройство.

Список литературы:

1. Ходеева М.И., Василенко В.А., Кольцова Э.М., Разработка клиент-серверного приложения по экспертному выбору кристаллизационного оборудования//Успехи в химии и химической технологии. —2019. —№ 11. — т. 33. —с. 92-94.
2. Кафаров В.В., Дорохов И.Н., Кольцова Э.М. Системный анализ процессов химической технологии. Энтروпийный и вариационный методы неравновесной термодинамики в задачах химической технологии. — М.: Наука, 1988.— 367 с.

УДК: 535.8

Соломатин А.С., Панкрушина А.В., Царева Е.В.

МНОГОПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКИЙ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ ДИСПЛЕЙ С ФИКСИРОВАННЫМИ ИНДИВИДУАЛЬНЫМИ СЕКТОРАМИ РАЗМЕЩЕНИЯ ЗРИТЕЛЕЙ

Соломатин Алексей Сергеевич, д.т.н., профессор, e-mail: Sotrudnica_UNC@mail.ru

Панкрушина Алла Вадимовна, к.т.н., доцент

Царева Елена Владимировна, к.т.н., доцент

Кафедра Информатики и Компьютерного Проектирования

Российский Химико-Технологический Университет им.Д.И. Менделеева, Москва, Россия

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

Актуально развитие больших экранов для коллективного просмотра. Для этого необходимо развитие новой элементной базы – пикселей, что и сделано в данной работе. Предложена новая конструкция пикселя. Новые конструктивно обусловленные принципы функционирования жидкокристаллического дисплея изложены в данной работе. Новые принципы управления световым потоком формируют в заранее определенных секторах обзора взаимно независимые визуально-информационные интерактивные пространства.

Ключевые слова: оптическая анизотропия, оптические свойства, дисплей, жидкие кристаллы.

MULTI-USER LIQUID CRYSTAL DISPLAY WITH FIXED INDIVIDUAL AUDIENCE PLACEMENT SECTORS

Solomatin A.S., Pankrushina A.V., Tsareva E.V.

Department of Computer Science and Computer Engineering

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

The development of large screens for collective viewing is relevant. This requires the development of a new element base – pixels, which is done in this work. A new pixel design is proposed. New structurally determined principles of functioning of the liquid crystal display are described in this paper. New principles for the management of the luminous flux are formed in predetermined sectors are mutually independent visual interactive information space.

Keywords: birefringence, LC display, optical anisotropy, discotics, liquid crystals, projector.

Введение

При просмотре коллективного экрана трудно обеспечить его интерактивность вследствие разницы интересов зрителей. Также и его информативность для лиц с резко различными информационными потребностями неудовлетворительна – экран делится на части (отображающие разную информацию), что нарушает основную идею коллективного экрана о предоставлении каждому зрителю большого визуального информационного потока. Необходимо конструктивное решение, обеспечивающее каждой (пространственно локализованной) группе зрителей соответствующий видеоряд, не зависящий от предоставляемого другим группам зрителей. В данной работе, являющейся продолжением [1-2], предложено новое решение этой задачи.

ЖК дисплей с индивидуальным видеорядом

Основные принципы предлагаемого ЖК дисплея. Вводятся фиксированные секторы: характеризуются строго определенным для каждого из них диапазоном углов по вертикали и горизонтали. Световой поток от экрана, формирующий некий визуально-информационный ряд для зрителей, направляется в пределах одного предназначенного для него фиксированного сектора. В разных секторах – разные изображения (информационные визуальные потоки), разные световые потоки от экрана. Органы зрения зрителя находятся в предполагаемом каком-то диапазоне по

высоте (стоя, сидя, и т.д.). В связи с этим, на соответствующей высоте планируются эффективные (разграничивающие локальные области размещения зрителей) границы фиксированных секторов. Фактически это означает, что экран располагается на расчетной высоте и под заданным углом к вертикали (рис.1а). Изменение этих геометрических параметров возможно с целью изменить эффективные границы фиксированных секторов – локализованных областей размещения зрителей (для помещений с заранее известной геометрией и системой фиксированных секторов в помещении возможно проектирование коллективных дисплеев заранее). Каждая локализованная группа зрителей может в интерактивном режиме пользоваться всей поверхностью дисплея (просмотр фильмов, работа на компьютере). Видеоряд для других групп зрителей не будет виден данной группе.

Элемент, обеспечивающий распределение светового потока по фиксированным секторам для предлагаемого дисплея. На рис.2 изображен пиксель. Ячейка с дискотическим жидким кристаллом (на рис.1б обозначены как C_1, C_2, C_3, C_4, C_5), задавая электрическим полем необходимое ориентационное распределение директора ЖК, регулирует яркость (интенсивность пропускания) луча света, проходящего через ячейку. Прошедший через ячейку луч света с заданной яркостью достигает обозначенной на рис.2 единой для всего

пикселя выходной поверхности и преломляется, образуя с нормалью к поверхности углы $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_8$. Таким образом, для каждого из диапазонов углов – горизонтальных и вертикальных – световой поток регулируется по яркости индивидуально. Это позволяет каждому пакету из вышеописанных монохромных пикселей RGB цветов (как обычно и

бывает в дисплеях) посылать в фиксированный сектор с локализованной в нем группой зрителей цветовой луч – соответствующую одному цветному пикселю часть видекартинки. Соответственно, каждая группа зрителей видит их отдельную видекартинку.

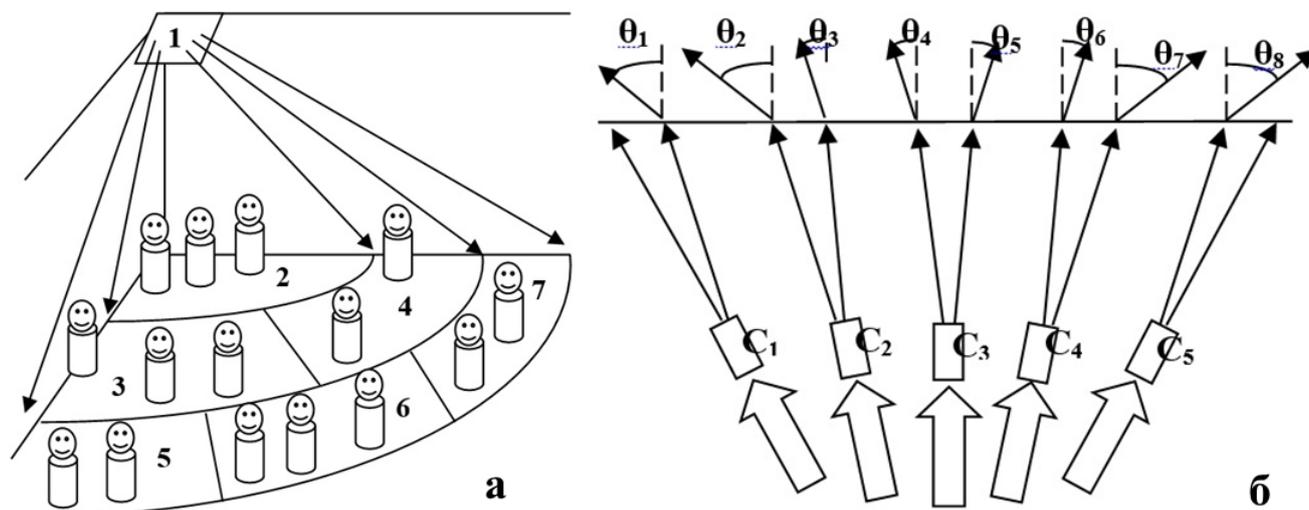


Рис. 1. а – 1 экран; 2, 3, 4, 5, 6, 7 фиксированные сектора и группы зрителей в фиксированных секторах, видящих индивидуальный для каждого сектора видеоряд
 б – Управляемый элемент (пиксель). В его состав входит регулятор интенсивности пропускания света - ячейка с дискотическим жидким кристаллом. Ячейки обозначены на рисунке как C_1, C_2, C_3, C_4, C_5 . Углы вышедших из пикселя световых лучей с нормалью к поверхности обозначены как $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_8$

Ячейка с дискотическим жидким кристаллом – регулятор интенсивности.

Распределение светового потока между оптическими элементами – ячейками ЖК, каждый из которых обслуживает свой собственный фиксированный сектор со зрителями, описано выше и показано на рис.1а, рис.1б. Оптические элементы (рис.3, рис.4) управляемые. Они в принципе предназначены для сравнительно узких фиксированных секторов. На рис.3 показано пропускание света через ячейку с дискотическим жидким кристаллом в отсутствие поля. На рис.4 луч света входит справа налево в прозрачное окошко, которое покрыто поляризатором, пропускающим свет с плоскостью поляризации под углом 45° к плоскости директора. Выходное окошко покрыто анализатором, скрещенным с уже упомянутым

поляризатором на входе. Толщина слоя ЖК подобрана так, чтобы на выходе был линейно поляризованный свет с плоскостью поляризации, перпендикулярной первоначальной. Интенсивность пропускания максимальная.

На рис.3 показано пропускание света при включенном с максимальной напряженностью электрическом поле. Распределение директора ЖК по толщине ячейки содержит переходные приповерхностные области, а посередине ячейки он перпендикулярен приповерхностной ориентации. Толщина слоя полностью переориентировавшегося ЖК соответствует величине входного и выходного окошек. Луч света идет насквозь через однородный слой ЖК без двулучепреломления и поглощается анализатором на выходном окошке. Интенсивность пропускания минимальная.

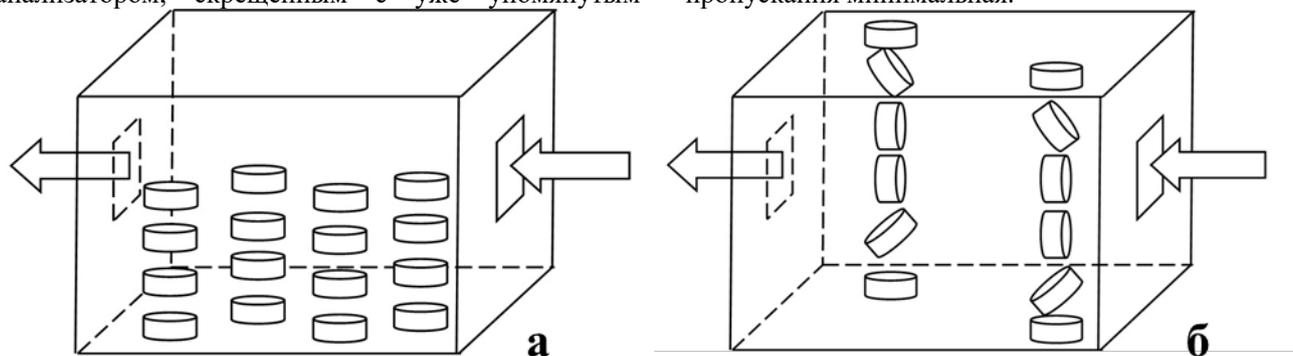


Рис. 2. а – Регулятор интенсивности пропускания света - ячейка с дискотическим жидким кристаллом. Поле отключено, ориентация задана ориентирующими покрытиями на верхней и нижней сторонах ячейки
 б. – Поле включено

Как показано на рис.1б, выходя из пикселя через общую поверхность стекла, свет преломится. В результате для показателя преломления стекла и, для простоты рассуждений, такого же показателя обыкновенного для ЖК, равного 1,5, рассмотрена следующая ситуация (рис.1б). В одной плоскости (например, по горизонтали) расположены пять одинаковых ячеек ЖК, упомянутых выше. Для каждой из них края светового потока приняты как образующие угол 0,1 радиана к нормали выходного окошка ячейки. Ячейки ЖК развернуты веером, предполагается, что подсветка каждой из них идет по нормали к входному окошку. Для той из ячеек, которая на рис.1б обозначена как C_3 (она расположена посередине), вышедший из пикселя световой поток освещает угловой диапазон в пределах углов $8,6^\circ$ к нормали к поверхности стекла. Иначе говоря, углы на рис.1б $\theta_4 = 8,6^\circ$, $\theta_5 = 8,6^\circ$. Для той из ячеек, которая на рис.1б обозначена как C_2 (и для симметричной ей C_4), вышедший из пикселя световой поток освещает

угловой диапазон в пределах углов от $8,6^\circ$ до $26,3^\circ$ к нормали к поверхности стекла. Иначе говоря, углы на рис.2 $\theta_3 = 8,6^\circ$, $\theta_2 = 26,3^\circ$ (симметрично, для C_4 , $\theta_6 = 8,6^\circ$, $\theta_7 = 26,3^\circ$). Для той из ячеек, которая на рис.1б обозначена как C_1 (и для симметричной ей C_5), вышедший из пикселя световой поток освещает угловой диапазон в пределах углов от $26,6^\circ$ до $45,9^\circ$ к нормали к поверхности стекла.

Произведены оценки дифракционного уширения выходного луча в зависимости от ширины выходного окошка (предполагалось, что оно квадратное). Как показано на рис.3а, рис.3б, равномерность распределения интенсивности (яркости) света приемлемая для ограниченного диапазона углов. Практически, можно полагать, что для формирования изображения следует использовать часть светового потока, заключенного в пределах углов 0,1 радиана к нормали выходного окошка ячейки ЖК при ширине окошка 1,2 длины волн.

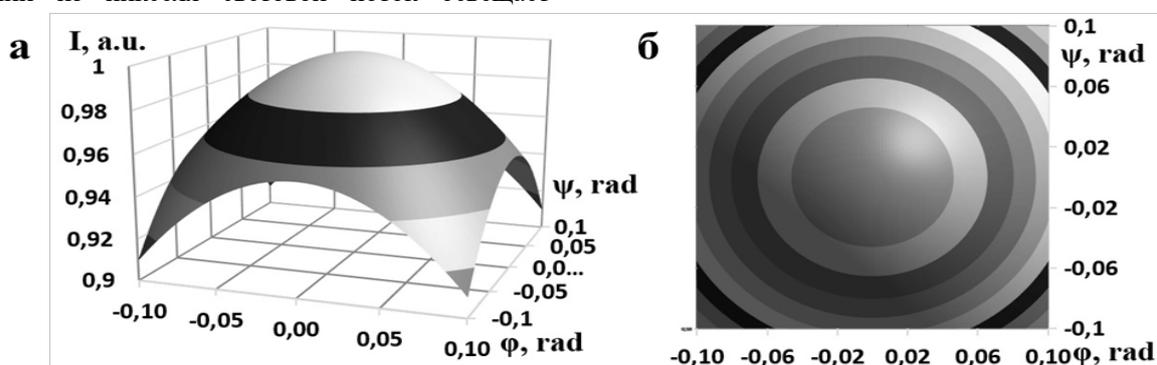


Рис. 3. а – Распределение дифракционной интенсивности при ширине отверстия 1,2 длины волны (слева) б – Распределение дифракционной интенсивности при ширине отверстия 1,2 длины волны с шагом по 0,01 относ.интенсивности от 0,91 до 1 (справа)

Если ставить целью расширение углов обзора экрана, то можно дополнить еще парой (симметрично, по краям) ячеек те, которые изображены на рис.1б. Тогда их угловой диапазон составит (для каждой из них, симметрично) от $45,9^\circ$ до $75,5^\circ$ к нормали к поверхности стекла. Все рассмотренные ячейки расположены симметрично по отношению к средней (к ячейке C_3). Они расположены веером с углом поворота каждой из них на 0,2 радиана к смежной. Предположим, что на рис.1б они расположены веером в горизонтальной плоскости. Такой же веер можно расположить под каким-либо углом к горизонтальной плоскости. Таким образом, можно выполнить пиксель дисплея в виде матрицы регулирующих интенсивность пропускания ячеек ЖК, каждая из которых обслуживает свой угловой диапазон. Матрица, как показано выше, может быть 5X5 или 7X7 или более элементов, то есть 25-49 или более фиксированных секторов с индивидуальным визуальным потоком. На рис.1б те участки выходного стекла пикселя, которые не служат для пропускания световых потоков в пределах указанных угловых диапазонов, затемнены, то есть поглощают весь падающий на них свет.

Выводы

В работе предложены новые принципы управления световым потоком и конструктивные решения. Разработана конструкция основного элемента дисплея – пикселя на основе жидкого кристалла, позволяющая управлять распределением светового потока по фиксированным секторам, что позволяет зрителям (группам зрителей), расположенным в фиксированных секторах, просматривать индивидуально различный видеоряд. Он может применяться в больших помещениях (кинотеатрах) и обслуживать большое число пользователей с индивидуальным для каждой группы видеорядом.

Список литературы

1. Соломатин А.С., Беляев В.В. Дисплей с многопользовательским направленным распределением визуальной информации и проектор с управляемым распределением луча света на основе жидких кристаллов с неоднородным распределением директора // Вестник МГОУ. – 2018. – №1. – С. 47-62.
2. Соломатин А.С. Дисплей с многопользовательским индивидуально-различным отображением. Управляемое распределение проецируемого светового потока проектором на основе жидких кристаллов // Вестник МГОУ. – 2018. – №2. – С. 34-44.

УДК: 535.3+535.5+535.8

Соломатин А.С., Панкрушина А.В., Царева Е.В., Машченко В.И., Ермакова М.В.

ФОРМИРОВАНИЕ ОБЪЕМНЫМ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИМ КОМПОЗИТНЫМ ДИСПЛЕЕМ РЕАЛИСТИЧНОГО СТЕРЕОСКОПИЧЕСКОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ

Соломатин Алексей Сергеевич, д.т.н., профессор, e-mail: Sotrudnica_UNC@mail.ru

Панкрушина Алла Вадимовна, к.т.н., доцент

Царева Елена Владимировна, к.т.н., доцент

Кафедра Информатики и Компьютерного Проектирования

Российский Химико-Технологический Университет им.Д.И. Менделеева, Москва, Россия

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

Машченко Владимир Игоревич, к.х.н., с.н.с. учебно-научной лаборатории теоретической и прикладной нанотехнологии Московский государственный областной университет (МГОУ) 141014, Московская область, г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24.

Ермакова Мария Вадимовна магистрант факультета Инженерная Академия Российского Университета Дружбы Народов

В работе изложены новые принципы управления световым потоком, принципы функционирования и конструктивные решения дисплея на основе 4-циано-4-октилорксидифенила и боросилоксановых гелей с объемным отображающим пространством (объемным распределением пикселей), которые позволяют произвольному числу зрителей просматривать с произвольных точек обзора в реалистическом режиме индивидуальный интерактивный видеоряд – изображения трехмерных объектов, в том числе произвольно движущихся и вращающихся, с соблюдением их основных визуальных свойств.

Ключевые слова: оптическая анизотропия, боросилоксановые гели, жидкокристаллические композиты, дисплей, стереоизображение.

FORMATION OF A REALISTIC STEREOSCOPIC IMAGE BY A THREE-DIMENSIONAL LIQUID-CRYSTAL COMPOSITE DISPLAY

Solomatina A.S., Pankrushina A.V., Tsareva E.V., Mashchenko V.I.*, Ermakova M.V.*

Department of Computer Science and Computer Engineering

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

*Moscow Region State University, 24 Very Voloshinoy str., 141014, Mytishi, Russia

The paper presents new principles of light flow control, principles of operation and design solutions of the display based on 4-cyano-4-octyloxidiphenyl and borosiloxane gels with a volumetric display space (volumetric pixel distribution), which allow an arbitrary number of viewers to view individual interactive video series from arbitrary viewing points in realistic mode - images of three-dimensional objects, including randomly moving and rotating ones, in compliance with their basic visual properties.

Keywords: optical anisotropy, borsiloxane gels, liquid crystal composites, display, stereo image.

Введение

В данной работе рассмотрен разработанный на основе микроструктур жидкокристаллических (ЖК) композитов [1,2] дисплей (рис.1а) с объемным распределением пикселей – объемным отображающим пространством. Он коллективный – позволяет произвольному числу зрителей просматривать изображения трехмерных объектов (в том числе произвольно движущихся и вращающихся) с соблюдением их основных визуальных свойств. Видеоряд индивидуальный – зрители в геометрически локализованных областях (рис.1а) видят отдельную интерактивную картинку для каждой области, не видимую в остальных областях расположения зрителей.

Предложенный коллективный объемный экран может быть востребован в управлении производством (диспетчерские пункты), коллективных играх (на компьютере), показе фильмов (стерео кинотеатр с индивидуальным или

локально-коллективным видеорядом), управлении техническими средствами (кабина самолета), научно-техническом проектировании (системы автоматического проектирования), в медицине (управление медицинскими процедурами, диагностика).

Разделив для каждого пикселя пространство на конструктивно заданные (рис.1б) зоны (диапазоны углов по вертикали и по горизонтали), соответствующие секторам размещения зрителей с индивидуальным для каждого сектора видеорядом (рис.1а), в каждом из них можно, регулируя время свечения соответствующих этим направлениям субпикселей – частей поверхности пикселя (рис.1б), задать большое число градаций яркости каждым из цветов RGB палитры. При проектировании пикселей учитывается, что в реальности не все направления (физическое размещение зрителей над, под и т.д. относительно дисплея) могут успешно использоваться (рис.1а).

Основные новые оптические элементы, конструктивные решения и принципы функционирования

Световоды плоскопараллельного сечения (каждый – одного из RGB цветов) с источником поляризованного (параллельно основной стороне) света в торце (например, в нижнем) располагаются вертикально, с одинаковыми промежутками в горизонтальной плоскости по каждой из двух осей координат, в объеме дисплея. Направление поляризации хорошо сохраняется при неоднократном отражении луча света от стенок световода.

Пиксели на стенке световода (как бусы на нитке) состоят из сегментов – субпикселей, ограниченных каждый криволинейной поверхностью, направляющей световой поток в заданный угловой сектор (рис.1а, рис.1б). Изображаемый предмет виден зрителю как совокупность объемно распределенных точек (каждая составлена из трех монохромных RGB пикселей) его поверхности, посылающих световой поток заданного цвета и яркости в том угловом секторе, где находятся органы зрения зрителя (рис.1а, рис.1б).

Распределение фиксированных секторов можно изменять, если покрыть выпускающую свет поверхность субпикселей регулируемым полем

тонким слоем (линзой) ЖК-композиата (с размерами, в зависимости от температурных режимов ориентирования и термофиксации композитов, от долей до десятков микрон ЖК-фазы в боросилоксановых (БС) матрицах), преломляющего проходящий свет. Требуются конструктивные электронагревательные элементы, чтобы приложением электрического поля переориентировать [3] под другое фокусное расстояние линзы ЖК при нагревании композитов выше 55°C – температуры плавления 8ОЦБ (структуры из ориентированных кристаллитов переходят в ЖК-фазу). К долговременному фиксированию полученных микроструктур приводит охлаждение ниже температуры плавления ориентированных ЖК-композиатов 4-циано-4-октилксилоксибензил (8ОЦБ) на основе БС-геля.

Предложенные конструктивные решения, позволяющие перенастраивать секторы размещения зрителей, развивают идеи коллективного ЖК экрана с фиксированными секторами просмотра индивидуального видеоряда, изложенные в [4,5]. Это позволяет адаптировать коллективный объемный экран к произвольной геометрии помещения и произвольно распределенным в помещении локальным зонам размещения зрителей.

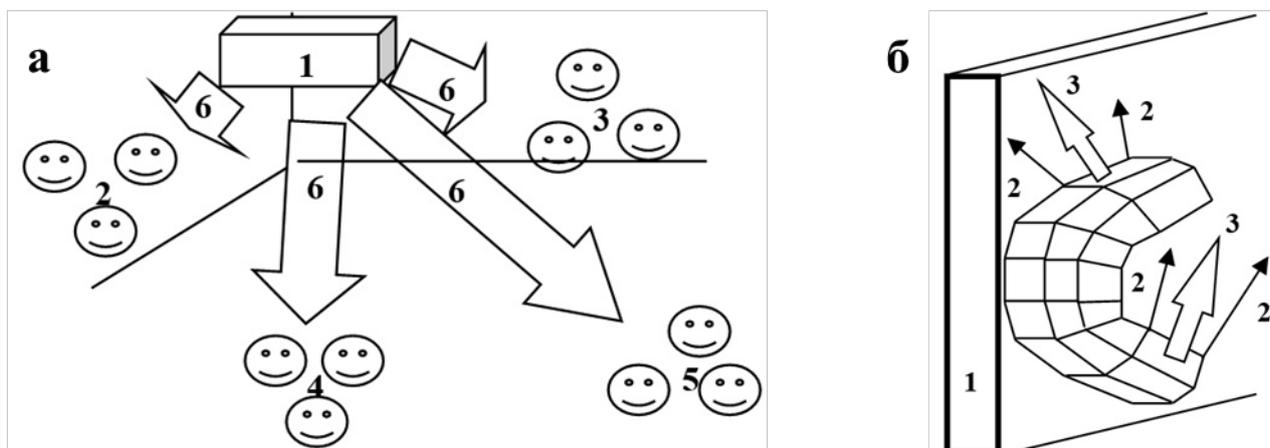


Рис. 1. а – 1 объемный дисплей; 2, 3, 4, 5 группы зрителей в фиксированных секторах, видящих индивидуальный для каждого сектора объемный видеоряд; б – Световые потоки от объемного дисплея в направлении фиксированных секторов б – Плоский световод 1 и часть половинки пикселя с одной из сторон световода. Поверхности субпикселей образуют огранку пикселя, похожую на ювелирные изделия. Световые потоки 3 идут в фиксированных угловых секторах, разделенных границами 2. Группы зрителей в фиксированных секторах видят индивидуальный для каждого сектора объемный видеоряд, фактически видят световой поток от обращенного к ним субпикселя. Световые потоки от пикселя объемного экрана идут в направлении фиксированных секторов расположения зрителей. Их границы смыкаются

Яркость субпикселя, воспринимаемая зрителем, определяется временем его свечения – пропускания света (регулируется пространственное распределение директора заполняющего субпиксель нематического ЖК приложенным электрическим полем) из световода через субпиксель.

Те две параллельные друг другу стороны субпикселя, которые вертикальны и перпендикулярны поверхности световода, покрыты ориентантом, задающим минимальный угол наклона (полярный угол) директора ЖК, то есть вертикально,

параллельно поверхности. Прозрачные электроды нанесены на обе такие стороны субпикселя.

Та сторона субпикселя, которая отделяет его от световода, покрыта материалом, не влияющим на ориентацию используемого сорта ЖК. Вследствие этого, заданная ориентированной стороной вертикальная ориентация директора транслируется во всем объеме субпикселя.

Стенкой субпикселя является непосредственно материал, заполняющий световод, пусть его показатель преломления $n_{\text{light}}=1,55$, пусть у нематического ЖК в объеме субпикселя показатели

преломления $n_o=1,5$, $n_e=1,65$, пусть показатель преломления заполняющей объем дисплея вне световода и субпикселя среды $n_{out}=1,5$.

При темном состоянии субпикселя: поле выключено, на поверхности, отделяющей его от световода, ориентация директора ЖК планарная (вертикально, параллельно основному направлению луча света в световоде). Эффективный показатель преломления ЖК равен $n_o=1,5$, свет не будет поступать из световода, будет так называемое полное внутреннее преломление - отражение луча света от границы раздела (так как показатель преломления материала световода больше).

При светлом состоянии субпикселя: поле включено, на ориентированной стороне угол наклона директора ЖК не изменяется, в объеме субпикселя ориентация директора ЖК распределяется в соответствии с упругими свойствами ЖК и напряженностью поля, на поверхности, отделяющей субпиксель от световода, ориентация директора ЖК планарная (горизонтально, перпендикулярно основному направлению луча света в световоде). Эффективный показатель преломления (директор ЖК параллельно плоскости поляризации луча) равен $n_e=1,65$, луч света преломится на границе раздела, размерами субпикселя определяется поступающая относительная доля светового потока световода.

Световой поток ослабевает после прохождения мимо отбирающего некоторую часть (в зависимости от суммы яркостей субпикселей) света пикселя, для следующего пикселя это учитывается при расчете светлого времени его субпикселей.

Выводы

В работе изложены новые принципы управления световым потоком, принципы функционирования и конструктивные решения дисплея на основе 4-циано-4-октилосидифенила и боросилоксановых гелей с объемным отображающим пространством (объемным распределением пикселей), которые позволяют произвольному числу зрителей просматривать с произвольных точек обзора в реалистическом режиме индивидуальный интерактивный видеоряд - изображения трехмерных объектов, в том числе произвольно движущихся и вращающихся, с соблюдением их основных визуальных свойств. Каждый зритель (локально расположенная группа зрителей) видит собственный видеоряд - остальным его не видно - и может управлять им в интерактивном режиме.

Предложены конструктивные решения, позволяющие перенастраивать секторы размещения зрителей. Это позволяет адаптировать коллективный объемный экран к произвольной геометрии помещения и произвольно распределенным в помещении локальным зонам размещения зрителей.

Предложенный коллективный объемный экран может быть востребован в управлении производством (диспетчерские пункты), коллективных играх (на компьютере), показе фильмов (стерео кинотеатр с индивидуальным или локально-коллективным видеорядом), управлении техническими средствами (кабина самолета), научно-техническом проектировании (системы автоматического проектирования), в медицине (управление медицинскими процедурами, диагностика).

Список литературы

1. Машенко В.И. Особенности формирования микроструктуры жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана / В.И. Машенко, Ю.О. Шашкова, А.С. Соломатин, В.В. Беляев // Вестник Московского Государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.34 - 45.
2. Машенко В.И. Микроструктуры жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана. Оптические свойства дисперсной жидкокристаллической структуры на их основе / В.И. Машенко, А.С. Соломатин, Ю.О. Шашкова, В.В. Беляев // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - № 3. - С.97 - 107. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-3-97-107
3. Невская Г.Е. Адаптивные линзы на основе жидких кристаллов. / Г.Е. Невская, М.Г. Томилин // Оптический журнал. - 2008. - Т.75. - №9. - С.35-48.
4. Соломатин А.С., Беляев В.В. Дисплей с многопользовательским направленным распределением визуальной информации и проектор с управляемым распределением луча света на основе жидких кристаллов с неоднородным распределением директора // Вестник МГОУ. - 2018. - №1. - С. 47-62.
5. Соломатин А.С. Дисплей с многопользовательским индивидуально-различным отображением. Управляемое распределение проецируемого светового потока проектором на основе жидких кристаллов // Вестник МГОУ. - 2018. - №2. - С. 34-44.

УДК: 535.8

Соломатин А.С., Панкрушина А.В., Царева Е.В., Машченко В.И., Ермакова М.В.

ПРОЕКТОР С ФИКСИРОВАННЫМИ СЕКТОРАМИ ПРОЕЦИРОВАНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ НА ОСНОВЕ УПОРЯДОЧЕННЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МИКРОСТРУКТУР 4-ЦИАНО-4-ОКТИЛОКСИДИФЕНИЛА В БОРОСИЛОКСАНОВЫХ ГЕЛЯХ

Соломатин Алексей Сергеевич, д.т.н., профессор, e-mail: Sotrudnica_UNC@mail.ru

Панкрушина Алла Вадимовна, к.т.н., доцент

Царева Елена Владимировна, к.т.н., доцент

Кафедра Информатики и Компьютерного Проектирования

Российский Химико-Технологический Университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

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

Машченко Владимир Игоревич, к.х.н., с.н.с учебно-научной лаборатории теоретической и прикладной нанотехнологии Московский государственный областной университет (МГОУ) 141014, Московская область, г.Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24.

Ермакова Мария Вадимовна магистрант факультета Инженерная Академия Российского Университета Дружбы Народов

В работе изложены новые принципы большого проекционного коллективного экрана и конструктивные решения, которые позволяют проецировать на фиксированные секторы экрана индивидуально различные видеоряда. Зрители задают геометрические параметры секторов проецирования. Разработан основной элемент проектора – пиксель, полученный в результате поликонденсации полидиметилсилоксана с концевыми гидроксильными группами с борной кислотой при комнатной температуре жидкокристаллических композитов на основе 4-циано-4-октилоксидифенила и боросилоксановых гелей.

Ключевые слова: оптическая анизотропия, проектор, боросилоксановые гели, жидкокристаллические композиты.

PROJECTOR WITH FIXED SECTORS FOR PROJECTING INDIVIDUAL IMAGES BASED ON ORDERED CRYSTAL MICROSTRUCTURES OF 4-CYANO-4-OCTYLOXYDIPHENYL IN BOROSILOXANE GELS

Solomatina A.S., Pankrushina A.V., Tsareva E.V., Mashchenko V.I.*, Ermakova M.V.*

Department of Computer Science and Computer Engineering

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

*Moscow Region State University, 24 Very Voloshinoy str., 141014, Mytishi, Russia

The paper presents new principles of large projection collective screen and design solutions that will allow you to project a different video sequence individually on fixed sectors of the screen. Viewers set the geometric parameters of the projection sectors. The main element of the projector, the pixel, was developed from liquid crystal composites based on 4-cyano-4-octyloxydiphenyl and borosiloxane gels obtained as a result of polycondensation of polydimethylsiloxane with terminal hydroxyl groups with boric acid at room temperature.

Keywords: optical anisotropy, projector, borosiloxane gels, liquid crystal composites.

Введение

Актуален проектор, показывающий группам пользователей различные проецируемые видеоряда (вследствие разницы их интересов и выполняемой деятельности) в различных фиксированных секторах проекционного экрана. Нематические жидкие кристаллы (ЖК) [1] широко применяются в электронных устройствах, оптические свойства которых управляются электрическим полем с низким энергопотреблением. Новое решение этой задачи предложено в данной работе, являющейся продолжением [2-5].

Получение ЖК-композита

С использованием основанной на эффекте образования Рэлеевских мостов жидкости оригинальной методики [4-6] получены ЖК-композиты на основе специально сформированных одноосно вытянутых боросилоксановых гелей.

В данной работе использован полидиметилсилоксан с концевыми гидроксильными группами, представляющий собой вязкую прозрачную жидкость и мелкодисперсная порошкообразная борная кислота. Следует отметить, что БС обычно получают нагреванием полиорганосилоксанов с кислородными соединениями бора, такими как БК, бура и др., в то время как БС-гели можно получить при комнатной температуре из ПДМС и БК. Через сутки после смешения данных соединений, вязкость смеси возросла на несколько порядков от ~ 3000 до 550000 мПа*с.

Предполагается, что такое возрастание вязкости обусловлено протеканием обратимой реакции поликонденсации с формированием водородных связей между гидроксильными группами ПДМС и БК. Таким образом, введение БК в ПДМС придает

системе выраженные вязко–упругие свойства, характерные для неньютоновских жидкостей.

Раствор борной кислоты в силиконовом масле готовился следующим образом: отмеренные на весах силиконовое масло и сухой порошок борной кислоты в массовом соотношении 20:1 механически смешивалась. Получилась мутноватая эмульсия с концентрацией раствора 4,75%. Боросилоксановый гель (БС–гель) синтезировали механическим перемешиванием в стеклянном стакане полидиметилсилоксана с концевыми гидроксильными группами (ПДМС), марки СКТН А (молекулярная масса $\sim 20\ 000$ г/моль) с измельченной борной кислотой (БК), марки ХЧ, взятой в количестве 2 мас. %.

Введение ЖК 4–циано–4–октилоксидифенил (8ОСВ) в БС–гель осуществляли путем механического перемешивания при комнатной температуре. ЖК вводили в БС в состоянии мезофазы в концентрации 5 мас. %. Из полученных ЖК–композитов формировали образцы в виде пленок.

Смешение ЖК с БС–гелем незначительно влияет на температуры и характер фазовых переходов ЖК, что было показано методом дифференциальной сканирующей калориметрии.

Процесс получения БС–геля охарактеризован с помощью ротационной вискозиметрии на вискозиметре Viscotester E («Thermoscientific», Германия) при комнатной температуре. Для этого сразу после перемешивания ПДМС с БК в образец в химическом стакане помещали шпindel ротационного вискозиметра и измеряли вязкость в зависимости от времени. По мере увеличения вязкости производили замену шпинделей от L2 до L4, что позволило производить измерения в диапазоне от $1,5 \cdot 10^2$ до $6 \cdot 10^6$ мПа·с.

Как и в предыдущей работе [5], вытяжка композитов выше температуры плавления ЖК приводит к получению микроцилиндрических структур, которые постепенно дробятся на капли. Полученный БС–гель и ЖК–композиты на его основе при одноосном растяжении ведут себя подобно полимерной пленке. Свойства текучести, характерные для вязких жидкостей, композит проявляет после снятия внешнего растягивающего напряжения.

ЖК проектор с индивидуальным видеорядом

Основные принципы предлагаемого ЖК проектора. В каждом фиксированном секторе (характеризуется диапазоном углов по вертикали и горизонтали), как показано на рис.1а, проецируется его индивидуальный видеоряд. Можно проектировать соответствующие проекционные поверхности (в том числе дискретно расположенные)

для помещений заранее заданной геометрии. Области, в которых проецируются различные видеоряды, не перекрываются между собой.

Пиксель для предлагаемого проектора изображен на рис.1б. В составе пикселя: ЖК ячейка–регулятор интенсивности пропускания света; световой поток после регулятора интенсивности проходит линзу ЖК [7] с ЖК–композитом. ЖК линза (рис. 1б) обеспечивает распределение узкого (близкого к коллимированному) светового потока в заданном диапазоне углов, соответствующем угловой величине пикселя проецируемого изображения (угловой диапазон поделить на число пикселей в строку или столбец).

Также возможен переход между режимами с различной геометрией областей (фиксированных секторов). Если же из режима с фиксированными секторами проецирования перейти к обычному режиму проецирования, то тогда количество пикселей изображения определяется суммарным количеством всех пикселей проектора, то есть разрешающая способность изображения очень большая. В таком режиме проектор обеспечивает проекционный коллективный экран с повышенной в несколько раз (по числу строк и столбцов) разрешающей способностью.

Для формирования линз ЖК перспективно создание микроструктур ЖК-1282 в боросилоксановых (БС)[4–6] матрицах с получением микрокапель и микроцилиндров различной геометрии. Структуры из ориентированных кристаллитов переходят в ЖК–фазу при нагревании композитов выше температуры плавления 8ОСВ и могут быть приложением электрического поля, пространственно распределенного по некоторому заранее заданному правилу, переориентированы [7].

Необходимо нагретый (выше 55°C) ЖК в матрицах сначала сориентировать, а затем зафиксировать (обеспечить охлаждение, возможно, внешней средой при достаточном теплообмене) ориентированное состояние при помощи кристаллизации ЖК. Нагрев ЖК–композита выше 55°C для перехода между режимами требует включения соответствующих средств в конструкцию дисплея.

К кристаллизации ЖК и к долговременному фиксированию полученных микроструктур приводит резкое охлаждение ниже температуры плавления ориентированных ЖК–композитов 4–циано–4–октилоксидифенил (8ОСВ) на основе БС–геля. Могут быть получены, в зависимости от температурных режимов ориентирования и термофиксации композитов, различные микроструктуры (с размерами от долей до десятков микрон) ЖК–фазы в БС–матрицах.

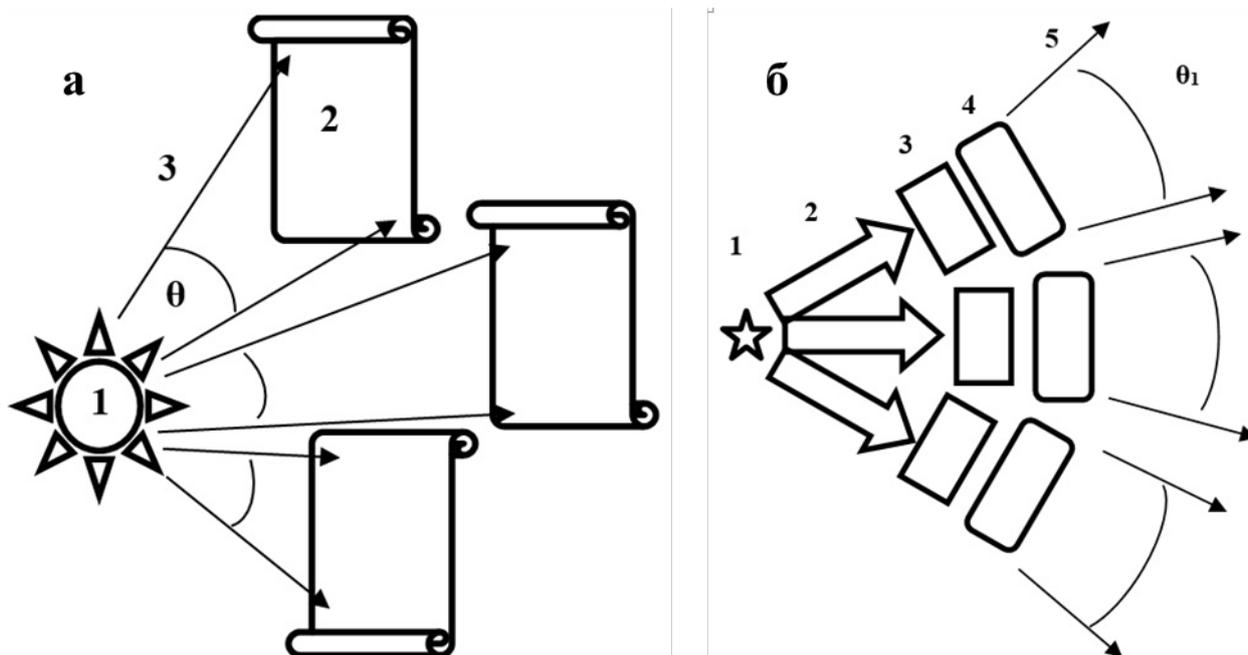


Рис. 1. а – 1 проектор; 2 экран – фиксированный сектор проецирования; 3 край углового диапазона проецирования в фиксированном секторе; θ угловой диапазон проецирования

б – Управляемый элемент (пиксель). В его состав входит: 1 источник света; 2 луч света; 3 регулятор интенсивности пропускания света - ячейка с нематическим жидким кристаллом; 4 линза ЖК, задающая угловой диапазон для выходящего света; 5 край углового диапазона; θ_1 угол, характеризующий угловой диапазон вышедших световых лучей.

Выводы

Разработана основанная на ориентированных ЖК-композициях 4–циано–4–октилоридифенил (8ОЦБ) на основе БС-геля конструкция основного элемента проектора – пикселя, позволяющая управлять распределением светового потока в двух режимах:

- по фиксированным секторам, что позволяет зрителям просматривать одновременно различный видеоряд;
- в режиме коллективного проекционного экрана очень высокой разрешающей способности.

Это позволяет одним таким экраном заменить несколько экранов коллективного пользования. Он может применяться как для ограниченного числа пользователей, так и в больших помещениях (кинотеатрах) и обслуживать большое число пользователей с индивидуальным для каждой группы видеорядом, а также в диспетчерских помещениях на производствах.

Список литературы

1. Пикин С.А., Блинов Л.М. Жидкие кристаллы. – М.: Наука, 1982. – 208 с.
2. Соломатин А.С., Беляев В.В. Дисплей с многопользовательским направленным распределением визуальной информации и проектор с управляемым распределением луча света на основе жидких кристаллов с неоднородным распределением директора // Вестник МГОУ. – 2018. – №1. – С. 47-62.

3. Соломатин А.С. Дисплей с многопользовательским индивидуально-различным отображением. Управляемое распределение проецируемого светового потока проектором на основе жидких кристаллов // Вестник МГОУ. – 2018. – №2. – С. 34-44.

4. Соломатин А.С. Особенности формирования микроструктуры и оптические свойства жидкокристаллических композитных твист-ячеек / А.С. Соломатин, В.И. Машенко, Ю.О. Шашкова, В.В. Беляев // Вестник Московского Государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.53 - 63. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-2-53-63

5. Машенко В.И. Особенности формирования микроструктуры жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана / В.И. Машенко, Ю.О. Шашкова, А.С. Соломатин, В.В. Беляев // Вестник Московского Государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. - 2017. - №2. - С.34 - 45.

6. Беляев В.В., Машенко В.И., Соломатин А.С., Чаусов Д.Н. Способ получения смеси жидкого кристалла с полимером для дисплейной техники и оптоэлектроники // Патент России №0002607454. 2016.

7. Невская Г.Е. Адаптивные линзы на основе жидких кристаллов. / Г.Е. Невская, М.Г. Томилин // Оптический журнал. – 2008. – Т.75. – №9. – С.35-48.

УДК 004.428.4:614.849

Чернухин А.В., Сверчков А.М., Савицкая Т.В.

УМНЫЕ ДАТЧИКИ И БАЗА ДАННЫХ КАК ЭЛЕМЕНТЫ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ ЭВАКУАЦИИ

Чернухин Артём Валерьевич, студент 2 курса магистратуры факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

e-mail: dr.chernuhin@yandex.ru

Сверчков Андрей Михайлович, ассистент кафедры компьютерно-интегрированных систем в химической технологии;

Савицкая Татьяна Вадимовна, д.т.н., профессор кафедры компьютерно-интегрированных систем в химической технологии.

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

В данной статье представлены этапы и результаты разработки умного датчика и базы данных, которые будут использоваться в информационной системе эвакуации на опасных химических производствах. Представлена структура реализованной базы данных, содержащей информацию о параметрах моделирования, помещениях предприятия, сотрудниках, датчиках, устройствах пожаротушения и путях эвакуации. Описана схема работы связи «умный датчик-база данных».

Ключевые слова: умный датчик, база данных, информационная система эвакуации, сбор данных, анализ данных.

SMART SENSORS AND DATABASE AS ELEMENTS OF EVACUATION INFORMATION SYSTEM

Chernukhin Artem Valerievich, Sverchkov Andrew Mikhailovich, Savitskaya Tatiana Vadimovna.

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

This article presents the stages and results of the development of a smart sensor and a database that will be used in the information system for evacuation from hazardous chemical production. The structure of the implemented database is presented, which contains information about the modeling parameters, the premises of the enterprise, employees, sensors, fire extinguishing devices and escape routes. The scheme of the “smart sensor-database” connection is described.

Keywords: smart sensor, database, evacuation information system, data collection, data analysis.

В настоящее время как в России, так и во всем мире активно продолжается автоматизация всех отраслей промышленного производства. Это приводит к усложнению инфраструктуры предприятия, представляющего собой многоуровневую информационно-техническую систему. Вместе с этим возникает необходимость в создании информационной системы, внедрение которой будет направлено на своевременную организацию и проведение эвакуации.

Данная работа посвящена созданию одного из ключевых элементов таких систем - «умному датчику», способному в реальном времени собирать информацию о состоянии производственного объекта, а также будет описана структура базы данных, в которую, помимо данных с датчиков, будут записываться все параметры, необходимые для моделирования эвакуации.

Разработанный датчик выполняет следующие функции:

1. измерять температуру и влажность воздуха;
2. определять число людей в помещении;
3. измерять концентрацию различных газов в воздухе;
4. передавать информацию по беспроводной связи;
5. в случае выхода из строя модуля беспроводной связи датчик будет записывать данные на внутренний накопитель.

На первом этапе была выбрана плата с микроконтроллером, на базе которой будет строиться сам датчик. Наиболее подходящим вариантом является

плата Arduino Uno R3, так как она обладает небольшими габаритами и богатым функционалом, а также огромным числом подключаемых датчиков и исполнительных устройств от сторонних производителей [1].

В качестве датчика температуры и влажности используется модуль DHT11, измеряющий влажность в диапазоне от 0 до 100 %, а показания можно считывать каждые 2 секунды.

Для определения наличия людей в помещении лучше всего подходит PIR-датчик движения. Его конструкция достаточно проста и включает: пироэлектрический элемент, который характеризуется высокой чувствительностью к инфракрасному излучению и полусферу, состоящую из нескольких линз, обеспечивающих фокусировку излучения тепловой энергии. Зона обнаружения движущихся объектов составляет 7 метров, а диапазон угла отслеживания равен 110°. Следуя из функциональных возможностей датчика, можно сделать вывод, что его использование обусловлено как для определения наличия людей в помещении, так и для раннего обнаружения пожара на предприятии [2].

Для определения концентрации различных газов в помещении используются датчики серии MQ, а именно: датчик MQ-2 для определения концентрации дыма; датчик MQ-5 для определения концентрации этилового спирта; датчик MQ-6 для определения концентрации сжиженного газа; датчик MQ-7 для определения концентрации CO; датчик MQ-8 для

определения концентрации водорода; датчик MQ-135 для определения концентрации аммиака. Датчики настроены для фиксирования превышения ПДК максимально разового в рабочей зоне и других помещениях предприятия. Принцип работы датчиков очень схож и основан на изменении сопротивления тонкопленочного слоя диоксида олова SnO_2 при контакте с молекулами определяемого газа. Чувствительный элемент датчика состоит из керамической трубки с покрытием Al_2O_3 и нанесенного на неё чувствительного слоя диоксида олова. Внутри трубки проходит нагревательный элемент, который нагревает чувствительный слой до температуры, при которой он начинает реагировать на определяемый газ. Чувствительность к разным газам достигается варьированием состава примесей в чувствительном слое. Столь широкий спектр используемых датчиков обоснован спецификой различных опасных производственных объектов, на которых могут храниться как смеси углеводороды, так и аммиак, водород или сжиженные углеводородные газы. Датчик же CO универсален и может использоваться на любом производстве. Также изначально планировалось использовать датчик O_2 , так как изменение содержания кислорода в воздухе является одним из первых признаков возникновения пожара на предприятии. Но стоимость датчиков такого типа начинается с 5 тысяч рублей, и их дороговизна обусловлена высокой точностью и чувствительностью, потому на данном этапе от них пришлось отказаться.

Для передачи информации по беспроводной связи используется радиомодуль NRF24L01+PA+LNA, отличающийся повышенной чувствительностью приёмника и увеличенной мощностью передатчика, что позволяет передавать данные на расстояние до 1 км со скоростью 270 КВ/с. Помимо прочего, модуль оснащен чипом RFAxis RFX2401C, объединяющим схемы коммутации передачи и приема. Именно за счет него достигается столь значительное значение расстояния, на которое может передаваться информация.

В качестве временного хранилища данных в случае сбоя работы радиомодуля используется SD-карта, модуль которой так же встроен в датчик и осуществляет функции хранения, чтения и записи информации на карту.

Для точного определения числа сотрудников в помещении используется отдельная плата Arduino Uno R3 с встроенным модулем Arduino RFID RC522, считывающим номер RFID-ключа, необходимого для доступа в помещение.

Следующей задачей является создание базы данных информационной системы эвакуации, в которую будет записываться информация с датчиков, а также будут храниться все данные о проведении и моделировании эвакуации [3].

На рисунке 1 представлена структура разработанной базы данных.

База состоит из 12 таблиц, между которыми установлены связи один ко многим:

- 1) DEPARTMENTS – содержит информацию об отделах предприятия;
- 2) PATHWAYS – содержит информацию о возможных путях выхода из конкретного помещения;
- 3) EMPLOYEE_DATA – содержит информацию о сотруднике;
- 4) EMPLOYEE_CROSSING – содержит информацию о перемещении сотрудника во время эвакуации;
- 5) PARAMETERS_EVACUATION – содержит информацию о рассчитанных параметрах эвакуации;
- 6) SENSORS – содержит информацию о датчиках;
- 7) DATA_FROM_SENSORS – содержит информацию с датчиков;
- 8) INDICATORS – содержит информацию о собираемых датчиком параметрах;
- 9) MODEL_SENS – содержит информацию о модели датчика;
- 10) DEVICES – содержит информацию о механизмах;
- 11) FUNCTIONS_DEVICE – содержит информацию о функциях, выполняемых механизмами;
- 12) PARAMETERS_MODEL – содержит информацию модели расчета времени эвакуации.

На данном этапе в базе хранится информация об индивидуально-поточной и упрощенно-аналитической моделях, что связано с удобством сравнения полученных ими параметров.

Возможно, в дальнейшем придется отказаться от использования сущности FUNCTIONS_DEVICE, так как доработка информационной системы с учетом устройств пожаротушения не представляется целесообразным на данном этапе. Также будет расширяться сущность PARAMETERS_MODEL, потому что сейчас некоторые параметры, необходимые для расчета, приходится хранить в программном приложении.

Сущности SENSORS и DEPARTMENTS связаны через первичный ключ DEP_ID, следовательно, к конкретному помещению привязаны все датчики, которые в нем находятся.

Также данную БД может использовать программное приложение для ПК, которое производит расчет времени эвакуации по индивидуально-поточной модели или упрощенной аналитической модели.

Схема работы связки «умный датчик – БД» выглядит следующим образом:

- 1) Датчик считывает информацию;
- 2) Информация передаётся с датчика по беспроводной связи на приемник, подключенный к персональному компьютеру;
- 3) Исходя из привязки датчика к конкретному помещению, его модели и уникального номера информация с приемника ПК записывает в облачную базу данных.

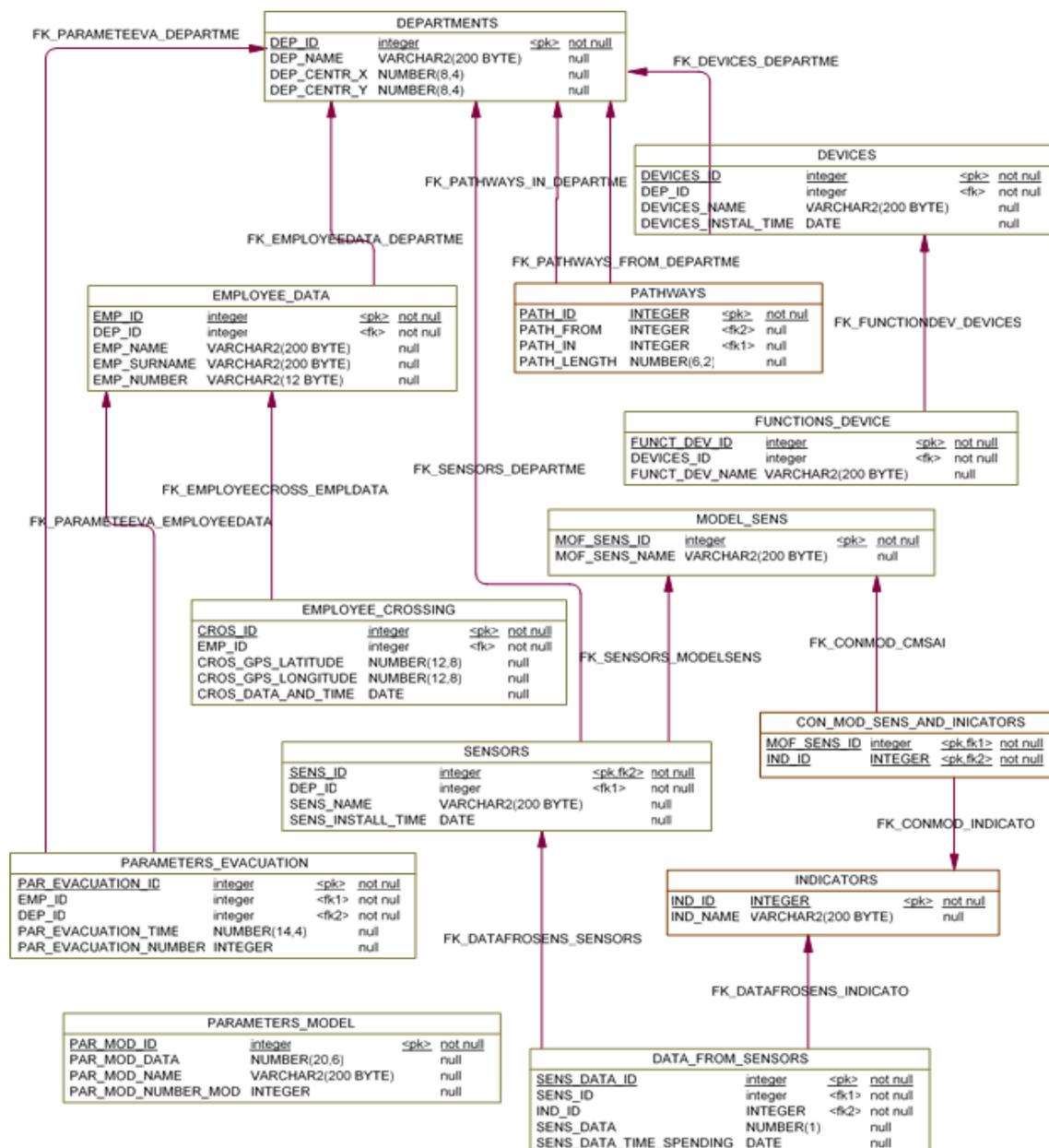


Рис. 1. Структура базы данных

Проанализировав все возможности комплексного умного датчика, можно сделать вывод, что он представляет большой интерес для разработчиков комплексных информационных систем эвакуации, так как полностью соответствует нормам, прописанным в приказе МЧС № 382 [4] и способен: измерять температуру и влажность в помещении; измерять концентрацию различных газов в воздухе; определять наличие людей или возгорания в здании; передавать всю полученную информацию в облачную БД через модуль беспроводной связи; определять точное число людей в помещении с помощью отдельного прибора считывания RFID меток. То же самое можно сказать и о базе данных, аккумулирующей в себе не только данные, считываемые с датчиков, но и информацию о проведении и моделировании эвакуации в целом.

Список литературы

1. Официальный сайт компании Arduino Software. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.arduino.cc/en/Main/Software> (дата обращения: 28.05.2020).
2. Петин В.А. Проекты с использованием контроллера Arduino. 2-е изд. // В.А. Петин // - Санкт-Петербург: Издательство: БХВ, 2015. - 141 с.
3. Чернухин А.В., Сверчков А.М. Комплекс программных средств информационной системы по эвакуации персонала предприятия / А.В. Чернухин, А. М. Сверчков. – Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXXII, № 1. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2018. – с. 48–50.
4. Приказ МЧС РФ от 30.06.2009 № 382 от 12.12.2011г. «Об утверждении методики определения расчетных величин пожарного риска в зданиях, сооружениях и строениях различных классов функциональной пожарной опасности». [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://fire-audit.su/d/514375/d/32.prikaz-mchs-rf-ot-30-iyunya-2009.g.pdf/> (дата обращения: 28.05.2020).

УДК 004.942:666.3-16

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

ИССЛЕДОВАНИЕ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ КЕРАМОМАТРИЧНОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ, МОДИФИЦИРОВАННОГО ДИОКСИДОМ ЦИРКОНИЯ

Шанева Анна Сергеевна, аспирант 3 курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: schaniova.anna@yandex.ru;

Лёвина Светлана Ивановна, студент 4 курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;
Кольцова Элеонора Моисеевна, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой информационных компьютерных технологий;

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

В данной статье приведены экспериментальные исследования процесса получения керамоматричного композиционного материала на основе карбида кремния (90, 70, 50% масс.), модифицированного частицами диоксида циркония частично стабилизированного оксидом иттрия (10, 30, 50% масс.) методом горячего прессования. Приведена математическая модель, отражающая процесс спекания и выбор оптимального режима.

Ключевые слова: керамический композит, карбид кремния, диоксид циркония, оксид иттрия, математическое моделирование, горячее прессование.

RESEARCH AND MATHEMATICAL MODELING OF THE PROCESS OF OBTAINING CERAMIC COMPOSITE MATERIAL BASED ON SILICON CARBIDE MODIFIED BY ZIRCONIUM DIOXIDE

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

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

This article presents experimental studies of the process of obtaining a ceramic composite material based on silicon carbide (90, 70, 50% wt.), modified by zirconia particles, partially stabilized by yttrium oxide (10, 30, 50% wt.) by hot pressing. A mathematical model is presented that reflects the sintering process and the choice of the optimal mode.

Keywords: ceramic composite, silicon carbide, zirconium dioxide, yttrium oxide, mathematical modeling, hot pressing.

Введение

Керамоматричные композиты с бескислородными матрицами помогают в решении важных проблем износа и коррозии материалов, несмотря на высокую температуру и/или сильный термический удар во многих отраслях промышленности, в частности в авиа- и машиностроении.

Карбидокремниевые высокодисперсные материалы обладают такими уникальными свойствами, как окислительная стойкость, термостойкость, химическая инертность, твердость и прочие высокие механические показатели [1]. Матрица из карбида кремния (SiC) является достаточно жесткой и прочной, но, чтобы полностью реализовать ее потенциальные возможности, необходимо увеличить ее трещиностойкость, что достигается путем создания керамических композитов на её основе.

Дисперсное упрочнение SiC-керамики оксидными добавками (порошками) приводит к увеличению прочности и вязкости разрушения, улучшает механические свойства, что выводит керамические композиционные материалы на одно из первых мест среди перспективных конструкционных материалов для аэрокосмической техники [2-3].

В отличие от других керамических материалов, диоксид циркония (ZrO₂) представляет собой материал с очень высокой устойчивости к распространению трещин и обладает термическими, электрическими, оптическими, прочностными и другими свойствами. Стабилизация кубической фазы диоксида циркония различными примесями применяется для предотвращения растрескивания при обжиге и увеличения плотности изделий из керамики на основе ZrO₂, так как в них отсутствуют полиморфные превращения. Наиболее устойчивыми являются твердые растворы Y₂O₃ в ZrO₂ [4].

Горячее прессование отличается от других методов спекания тем, что позволяет получить компактный материал при температуре намного ниже температуры рекристаллизации данного материала. Консолидация порошка реализуется благодаря перестановке частиц и плавному потоку при взаимодействии частиц.

Экспериментальные исследования

Проведены экспериментальные исследования по получению керамического композиционного материала SiC-ZrO₂[Y₂O₃] методом горячего одноосного прессования.

Для получения упрочняющей добавки кубического диоксида циркония (ZrO₂ – 94% масс.), частично стабилизированного оксидом иттрия (Y₂O₃

– 6% масс.) использовали оксихлорид циркония и хлорид иттрия.

Стадии получения $ZrO_2[Y_2O_3]$: обратное гетерофазное осаждение из насыщенного раствора, измельчение в планетарной мельнице, синтез, гранулирование.

Смешение в планетарной мельнице упрочняющей добавки с карбидом кремния в соотношении (9:1, 7:3, 5:5), сушка, гранулирование,

одноосное горячее прессование при 9 режимах, указанных в таблице 1.

В ходе экспериментального исследования методом горячего одноосного прессования был получен композит на основе карбида кремния, с добавлением разных концентраций частично стабилизированного диоксида циркония, в качестве армирующего элемента. Свойства полученного композита $SiC-ZrO_2[Y_2O_3]$ представлены в таблице 2.

Таблица 1. Температурные режимы горячего прессования образцов композита $SiC-ZrO_2[Y_2O_3]$

Номер режима	Содержание SiC, %	Содержание $ZrO_2[Y_2O_3]$, %	Начальная пористость, %	Температура выдержки, °C	Давление выдержки, МПа	Время нагрева, мин	Время выдержки, мин
1	90	10	58,95	1650	35	180	30
2	70	30	58,79				
3	50	50	56,67				
4	90	10	58,95	1700	35		
5	70	30	58,79				
6	50	50	56,67				
7	90	10	58,95	1750	35		
8	70	30	58,79				
9	50	50	56,67				

Таблица 2. Свойства образцов композита $SiC-ZrO_2[Y_2O_3]$, полученных одноосным горячим прессованием

Номер режима	Содержание SiC, %	Содержание $ZrO_2[Y_2O_3]$, %	Прочность при изгибе, МПа	Пористость, %	Средняя плотность, г/см ³
1	90	10	320±5	6,9	2,78
2	70	30	378±5	2,5	3,35
3	50	50	405±5	0,9	4,18
4	90	10	464±5	1,4	3,31
5	70	30	479±5	0,7	3,57
6	50	50	478±5	0,33	4,34
7	90	10	565±5	0,5	3,32
8	70	30	512±5	0,45	3,64
9	50	50	484±5	0,31	4,41

В ходе исследования выявлено, что добавление диоксида циркония в композит на основе карбида кремния увеличивает механические свойства образца, снижает температуру спекания, и приводит к подавлению роста кристаллов карбида кремния в процессе спекания материала.

Математическое моделирование процесса горячего прессования

С целью выявления оптимального температурного режима для проведения численных экспериментов методом горячего прессования использовано математическое моделирование по данным режимов из таблицы 1. В результате экспериментальных исследований выявлено влияние пористости материала на физико-механические свойства полученного композита. Описание процесса горячего прессования основано на определении его движущих сил и степени отклонения системы от состояния равновесия. При его составлении учитываются изменения пористости композита в процессе горячего прессования в качестве следующих параметров: максимальная

температура выдержки, время выдержки, текущее состояние порошковой прессовки.

Функция распределения пор по размерам описывает процесс уменьшения пористости в процессе спекания $f(t, l)$, t – время, l – диаметр поры. Эта функция отражает состояние порошковой прессовки в момент времени t . Уравнение, описывающее процесс уменьшения пор [5]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\partial f \eta(t, l)}{\partial l} = 0; t \in [0; T]; l \in [0; L], \quad (1)$$

где $f(t, l)$ – функция распределения пор по размерам, t – время процесса, η – скорость зарастания поры, l – диаметр поры.

Для решения уравнения (1) использовалась абсолютно устойчивая схема разностной аппроксимации – «Z-схема» (схема имеет второй порядок аппроксимации по времени t и координате) [5]. Разностная схема имеет вид:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \left(\frac{f_{j+1}^{n+1} \eta_{j+1}^{n+1} - f_j^{n+1} \eta_j^{n+1}}{\Delta l} + \frac{f_j^n \eta_j^n - f_{j-1}^n \eta_{j-1}^n}{\Delta l} \right) = 0, \quad (2)$$

где Δt – шаг по времени, Δl – шаг по координате (размеру поры), индекс n отвечает шаг по времени, индекс j – за шаг по координате. Разностная схема (2) является неявной и в силу ее абсолютной устойчивости на ее решении не сказывается величина отношения $\Delta t/\Delta l$. Расчетное значение пористости вычислялось согласно формулам [6]:

$$V_{nop} = \int_0^{L_{max}} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{l}{2}\right)^3 f(l) dl, \quad (3)$$

$$\varepsilon = \frac{V_{nop}}{V_{nop} + V_{ms}} 100\%, \quad (4)$$

Для композита с бескислородной матрицей на основе карбида кремния с добавкой диоксида циркония, который частично стабилизированный иттрием данная модель была дополнена расчётом процесса рекристаллизации. Для описания процесса роста зерна в процессе спекания введем функцию распределения зёрен по размерам $f(t, r)$, где t - время, r - радиус поры. Эта функция отражает состояние порошковой прессовки в момент времени t . Основное уравнение, описывающее процесс увеличения роста зёрен:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \varphi S}{\partial r} = 0; t \in [0; T]; r \in [0; R], \quad (5)$$

где $\varphi(t, r)$ - функция распределения зерна по размерам, t - время процесса, S - скорость роста зерна, r - радиус зерна. Скорость роста зерна S определяется зависимостью:

$$S = \frac{dr}{dt} = L(T - T^*), \quad (6)$$

где T - температура выдержки, T^* - температура усадки, L - феноменологический коэффициент.

Для решения уравнения (5) используется абсолютно устойчивая схема разностной аппроксимации – «зеркальная Z-схема». Разностная схема имеет вид:

$$\frac{\varphi_j^{n+1} - \varphi_j^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \left(\frac{\varphi_j^{n+1} S_j^{n+1} - \varphi_{j-1}^{n+1} S_{j-1}^{n+1}}{\Delta l} + \frac{\varphi_{j+1}^n S_{j+1}^n - \varphi_j^n S_j^n}{\Delta l} \right) = 0, \quad (7)$$

где Δt – шаг по времени, Δl – шаг по координате (размеру зерна), индекс n отвечает шаг по времени, индекс j – за шаг по координате. Разностная схема является неявной и в силу ее абсолютной устойчивости на ее решении не сказывается величина отношения $\Delta t/\Delta l$. Неявная разностная схема «зеркальная Z-схема» аппроксимирует исходную модельную задачу со вторым порядком аппроксимации по времени и по координате: $O(\Delta t^2, \Delta l^2)$.

Заключение

В ходе эксперимента был получен новый композит $\text{SiC-ZrO}_2[\text{Y}_2\text{O}_3]$. Была разработана математическая модель описания процесса спекания методом горячего прессования с учетом рекристаллизация зерна. Установлено, что с увеличением концентрации упрочняющей добавки конечная пористость материала уменьшается, как и при увеличении температуры спекания. Благодаря данной работе был получен оптимальный режим спекания данного композита, а именно соотношение $\text{SiC-ZrO}_2[\text{Y}_2\text{O}_3]$ как 9:1 при максимальной температуре 1750°C .

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-37-90149.

Список литературы

1. Кузнецов Н. Т., Севастьянов В. Г., Симоненко Е. П. Высокодисперсные тугоплавкие соединения для создания высокотемпературных керамоматричных композитов // Российский химический журнал. – 2009. – Т. 53, №. 2. – С. 116-122.
2. Металломатричные композиционные материалы на основе Al-SiC / Е.Н. Каблов [и др.] // Авиационные материалы и технологии. – 2012. – № 5. – С. 373-380.
3. Gubernat A., Stobierski L., Labaj P. Microstructure and mechanical properties of silicon carbide pressureless sintered with oxide additives / Agnieszka Gubernat, Ludoslaw Stobierski, Pawel Labaj // J.Eur. Ceram. Soc. –2007. V. 27. – P. 781-789.
4. Керамика на основе частично стабилизированного диоксида циркония: синтез, структура и свойства при динамическом нагружении / В.В. Милявский [и др.] // Теплофизика высоких температур. – 2011. – Т. 49, №. 5. – С. 707-712.
5. Федосова Н.А. Разработка и математическое моделирование процесса получения керамоматричного композита, армированного углеродными нанотрубками: Автореф. дис. канд. техн. наук. – Москва, 2016. – 16 с.
6. Шанёва А. С., Попова Н. А., Кольцова Э. М. Исследование и математическое моделирование процесса получения керамического композиционного материала SiC-УНТ // Успехи в химии и химической технологии. – 2017. – Т. 31, №. 8 (189). – С. 42-44.

УДК 339.138:628.477.6

Яхлаков А.А., Филиппова Е.Б.

РАЗРАБОТКА ГРАФИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ АППАРАТОВ РЕАКЦИОННОГО УЗЛА СИНТЕЗА МЕТАНОЛА СРЕДСТВАМИ 3D МОДЕЛИРОВАНИЯ

Яхлаков Александр Александрович, студент бакалавр 4 курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: kasabianslaves@gmail.com;

Филиппова Елена Борисовна, к.т.н., доцент кафедры информационный компьютерных технологий; Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия.

Проведено исследование секции каталитического синтеза метанола и секции ректификации комплекса производства метанола. Выполнены механические расчеты и компьютерное проектирование трехмерных моделей промышленных аппаратов: реактора, сепаратора и ректификационной колонны. Цифровое проектирование и моделирование технологических процессов, позволяет объединить всю информацию в одно хранилище и управлять инженерными данными на всех стадиях жизненного цикла объекта.

Ключевые слова: метанол, каталитический реактор, сепаратор, колонна ректификации, промышленные аппараты, трехмерная модель, цифровое проектирование.

DEVELOPMENT OF GRAPHIC MODELS OF DEVICES OF THE REACTION NODE OF SYNTHESIS OF METHANOL BY 3D MODELING

Yakhlakov Aleksandr Aleksandrovich, Filippova Elena Borisovna

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

A study of the catalytic synthesis of methanol section and the rectification section of the methanol production complex was carried out. Mechanical calculations and computer design of three-dimensional models of industrial apparatuses: a reactor, a separator, and a distillation column, were performed. Digital design and modeling of technological processes, allows you to combine all the information in one storehouse and manage engineering data at all stages of the life cycle of the object.

Keywords: methanol, catalytic reactor, separator, distillation column, industrial apparatus, three-dimensional model, digital design.

Цифровые двойники разнообразных объектов: зданий, машин, производственных процессов, заводов позволяют повысить эффективность технологических процессов. К 2021 году половина всех крупных промышленных компаний, по прогнозу консалтинговой компании Gartner, будет использовать цифровые двойники производств. Наиболее активно 3D-модели оборудования используют на нефтеперерабатывающих заводах в "Газпром нефти". С помощью цифрового двойника можно заранее протестировать и оптимизировать любые компоненты решения: механическую часть, электронные элементы, программное обеспечение, или производительность системы [1].

Цифровой двойник представляет собой копию реального объекта или процесса и выполняется с определенной точностью и функционалом для принятия определенных решений. Для проектирования и моделирования виртуального объекта используют набор технологий и программ, позволяющий автоматизировать этот процесс.

Данная работа посвящена разработке графических моделей промышленных аппаратов с использованием автоматизированной системы проектирования CAD-системы SolidWorks и проведение статического анализа опорных

конструкций аппаратов при помощи программного модуля SolidWorks Simulation.

Цель работы - выполнить компьютерное проектирование трехмерных моделей промышленных аппаратов технологической секции каталитического синтеза метанола и секции ректификации производства метанола.

Российский рынок метанола активно развивается, как за счет реконструкции действующих установок, так и за счет ввода новых. Загрузка отечественных мощностей по выпуску метанола уже превышает 90%. Дальнейшее развитие производства становится возможным только при условии введения в эксплуатацию новых высокопроизводительных установок. В России заявлено к реализации не менее 14 крупных метанольных проектов суммарной мощностью около 19 млн. тонн в год [2]. Объектом исследования в работе являются: секция каталитического синтеза метанола и секция ректификации метанола, предметами исследования: каталитический реактор синтеза метанола, сепаратор и колонна отмывки от метанола.

Начальным этапом проектирования стало изучение источников информации о технологии производства метанола [3, 4], в частности секции каталитического синтеза метанола и секции

ректификации. Изучены типовые технологические процессы, аналогичные аппараты и процессы их изготовления [5].

Далее был проведен анализ: технологических режимов, конструкционных параметров химических аппаратов, разработана номенклатура оборудования химических аппаратов (таблицы 1-2).

Таблица 1. Характеристики технологических режимов, протекающих в проектируемых аппаратах

Наименование химических аппаратов	Тип аппарата	Процесс, осуществляемый в аппарате	Компоненты, поступающие в аппарат	Продукты, выходящие из аппаратов	Технологические параметры
Реактор метанола	Вертикальный цилиндрический трубчатый реактор	Гетерогенно-каталитический, изотермический	CH ₄ , H ₂ O, CO, CO ₂ , H ₂ , высшие спирты, N ₂	CH ₄ , CH ₃ OH, CO, CO ₂ , H ₂ , высшие спирты, N ₂	P _{расч.} , T _{расч.} – давление и температура в межтрубном пространстве P _{расч.} , T _{расч.} – давление и температура в трубном пространстве
Сепаратор метанола	Вертикальный цилиндрический сосуд с каплеотбойником	Центрифугирование и гравитационная очистка	Сконденсированный CH ₃ OH, CH ₄ , CO, CO ₂ , H ₂ высшие спирты, N ₂	CH ₄ , CH ₃ OH, H ₂ O CO, CO ₂ *, H ₂ высшие спирты, N ₂	P _{расч.} , T _{расч.} – давление и температура в корпусе аппарата
Колонна отмывки от метанола Сепаратор метанола	Вертикальный цилиндрический тарельчатый аппарат с каплеотбойником	Массообменные процесс, перегонка жидкостей	CH ₃ OH, H ₂ O CO, CO ₂ , H ₂ высшие спирты, N ₂	CH ₃ OH, CO ₂ , высшие спирты, N ₂	P _{расч.} , T _{расч.} – давление и температура в корпусе аппарата

Таблица 2. Номенклатура оборудования

Наименование химических аппаратов	Тип аппарата	Сборочные элементы аппарата	Основные размеры аппаратов
Реактор метанола	Вертикальный цилиндрический трубчатый реактор	Цилиндрическая обечайка, трубная решетка(2 шт.), днище(2шт.), катализаторные трубки, выходное коллекторное устройство	D _{вн} – внутренний диаметр обечайки; H _ц – высота обечайки; H – высота аппарата с опорной конструкцией D _{тр} –
Сепаратор метанола	Вертикальный цилиндрический сосуд с каплеотбойником	Цилиндрическая обечайка, днище (2 шт.), каплеотбойник лопастной, завихритель лопаточного типа	D _{вн} – внутренний диаметр обечайки; H _ц – высота обечайки; H – высота аппарата с опорной конструкцией;
Колонна отмывки от метанола Сепаратор метанола	Вертикальный цилиндрический тарельчатый аппарат с каплеотбойником	Цилиндрическая обечайка, днище(2 шт.), колпачковые однопоточные тарелки, лопастной каплеотбойник, погружной змеевик	D _{вн} – внутренний диаметр обечайки; H _ц – высота обечайки; H – высота аппарата с опорной конструкцией; N – кол-во тарелок;

Процесс синтеза метанола осуществляется по проточной схеме в трех последовательно расположенных реакторах на медь-цинксодержащем катализаторе с промежуточным охлаждением и сепарацией синтез-газа. Отмывка синтез-газа от остаточного содержания паров органических компонентов осуществляется питательной водой в ректификационной колонне.

На этапе конструирования (рис. 1-3) осуществлялись: выбор конструкционных

материалов для аппаратов, расчёт конструкционных размеров, расчётов вспомогательного оборудования. Были рассчитаны: толщины обечайки, днища, трубной решетки, фланцевых соединений и крышки. Проведен статический нелинейный анализ опор аппаратов. При выполнении этого этапа также использовались типовые проектные решения.

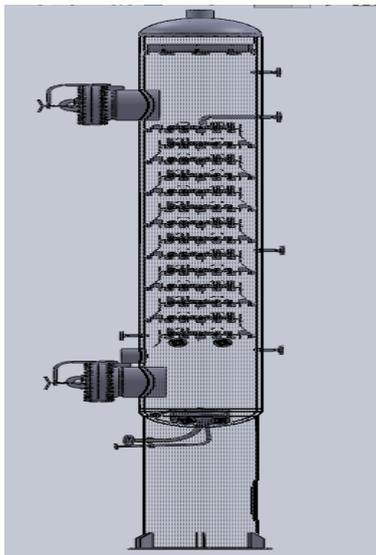


Рис. 1. Колонна отмывки от метанола

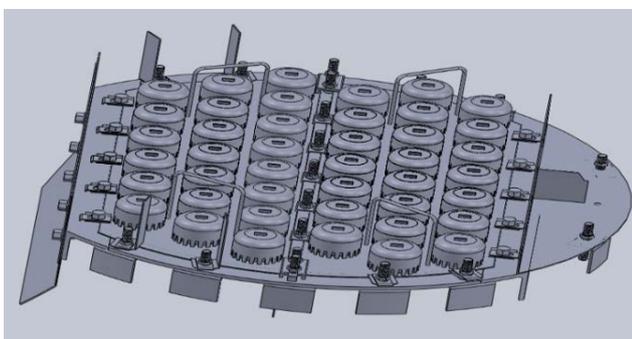


Рис 2. Колпачковая однопоточная тарелка

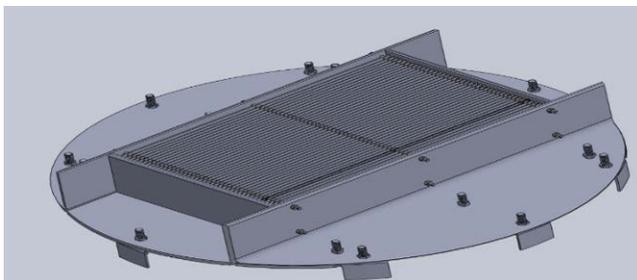


Рис 3. Лопастной каплеотбойник

Таким образом, разработанные графические модели аппаратов могут быть использованы для создания цифрового двойника технологического процесса синтеза метанола и как дидактический материал для студентов, получающих подготовку по химико-технологическим направлениям.

Список литературы

1. Соловьев С.А. Цифровые двойники в промышленности: сегодня и завтра: / С. А. Соловьев – Текст: электронный // iksmedia.ru: [сайт]. – 2019 – 7 мая. – URL: <http://www.iksmedia.ru/articles/5585041-Czifrovye-dvojniki-v-promyshlennost.html#ixzz6MyAw8G3q> (дата обращения: 27.04.2020).
2. Акишин Д.А. Российский метанол: каждый сам за себя. Сможет ли отечественная газо химия расти без поддержки государства / Д. А. Акишин.// Нефтегазовая вертикаль. – 2019. – С. 56-62. – Текст: электронный.
3. Технология синтетического метанола. /Караваяв М.М. Леонов В.Е., Попов И.Г., Шепелев Е.Е.; Под общей редакцией М.М. Караваяв; – Москва: Химия, 1984. – 240 с. – Текст: электронный.
4. Альперт Л.З. Основы проектирования химических установок / Л.З. Альперт – 3 изд. – Москва: Высшая школа, 1976. – 304 с. – Текст: электронный.
5. Основные процессы и аппараты химической технологии: Пособие по проектированию. /Г.С. Борисов, В.П. Брыков, Ю.И. Дытнерский [и др.]; под общей редакцией Ю.И. Дытнерского, 2-е изд., М.: Химия, 1991. – 496 с.– ISBN 5-7245-0133-3– Текст: непосредственный.

УДК 004.9: 061.6: 303.732.4: 681.518

Заремба Г.А., Трохин В.Е., Бессарабов А.М.

СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ КАЧЕСТВОМ НАУЧНО-ПРОИЗВОДСТВЕННОГО КОМПЛЕКСА МАЛОТОННАЖНОЙ ХИМИИ

Заремба Галина Александровна, научный сотрудник;

Трохин Василий Евгеньевич, к.х.н., директор;

Бессарабов Аркадий Маркович, д.т.н., профессор, заместитель директора по науке, e-mail: bessarabov@nc-mtc.ru; АО Научный центр «Малотоннажная химия», Москва, Россия
107564, Москва, ул. Краснобогатырская, д. 42

Проведен анализ состояния малотоннажной химии на зарубежном рынке и в России. Выделены основные проблемы, стоящие перед отраслью. Для научно-производственного комплекса малотоннажной химии рассмотрена и обоснована актуальность создания системы управления качеством на основе современных информационных технологий. Исследована возможность применения международных корпоративных стандартов серии ISO 9000 и ISO 10303 STEP как инструмента повышения эффективности управления в Научном центре «Малотоннажная химия». Показано, что разработка проектно-конструкторской документации на основе CALS-технологии (ISO 10303 STEP) позволяет использовать в полной мере преимущества электронного представления информации.

Ключевые слова: малотоннажная химия, научно-производственный комплекс, управление качеством, системный анализ, ISO 9000, ISO 10303.

QUALITY MANAGEMENT SYSTEM OF THE RESEARCH-AND-PRODUCTION COMPLEX OF FINE CHEMISTRY

Zaremba G.A., Trokhin V.E., Bessarabov A.M.

R&D Centre "Fine Chemicals", Moscow, Russia

The analysis of the state of fine chemistry on the foreign market and in Russia is carried out. The main problems facing the industry are highlighted. For the research-and-production complex of fine chemistry, the relevance of creating a quality management system based on modern information technologies was considered and substantiated. The possibility of applying international corporate standards of the ISO 9000 and ISO 10303 series as a tool to improve management efficiency at the Scientific Center "Fine Chemistry" was investigated. It is shown that the development of design-construction documentation based on CALS technology (ISO 10303) allows you to fully use the advantages of electronic presentation of information.

Keywords: fine chemistry, research-and-production complex, quality management, system analysis, ISO 9000, ISO 10303.

В современном мире малотоннажная химия занимает одно из важнейших мест в структуре глобальной химической индустрии. В США и странах Евросоюза доля высокотехнологичной малотоннажной химической продукции составляет более 40% отраслевого выпуска [1]. В России доля малотоннажной химии в химическом производстве в настоящее время не превышает и 10%, хотя её продукты используются во многих промышленных сегментах страны, включая машиностроение, нефтепереработку и нефтехимию, производство композиционных пластмасс, производство электроники, текстильное производство и др. [2]

Однако в постсоветский период развитию малотоннажных химических производств в Российской Федерации практически не уделялось внимания. В связи с этим значительное число предприятий и производств по выпуску малотоннажной химической продукции, созданных на территории России в советский период, прекратили свое существование. В результате объем выпуска продукции малотоннажной химии в Российской Федерации упал в десятки раз, и основная часть потребностей в этой продукции стала удовлетворяться за счет импорта (по различным группам товаров малотоннажной химии – от 70 до 100%) [2].

По заданию Минпромторга России нами был проведен анализ зарубежного рынка малотоннажной химии (договор № 14411.9990019.13.075 от 31.07.2014 «Разработка рекомендаций по развитию малотоннажной химии для обеспечения высокотехнологичных отраслей промышленности ...»). Было показано, что основное производство этой продукции связано с несколькими фирмами. Крупнейшая из них фирма Sigma-Aldrich выпускает один из самых широких в мире ассортимент реактивов для химического анализа, химических реагентов, полупродуктов для производства новых материалов, биореагентов. Lonza Group Ltd. (Швейцария) является крупнейшим производителем малотоннажных химикатов для фармацевтики, водоподготовки, биологических исследований, пищевой промышленности. Индийская фирма Clearsynth LABs предлагает на рынке 180 000 наименований химикатов, что в плане ассортимента превосходит показатели Sigma-Aldrich. Крупным производителем лабораторных реактивов для научных исследований и реактивов для клинических лабораторий является также Fisher Scientific International Inc.(США). Помимо этих мировых лидеров существует также огромное количество компаний с меньшим количеством наименований реагентов в своих каталогах, но имеющих свою узкую специализацию.

Российские производители на мировой рынок самостоятельно не выходят и в основном обслуживают внутренние потребности страны или стран СНГ. Между тем, малотоннажная химия рассматривается экспертами как чрезвычайно перспективное направление для развития силами малого и регионального бизнесов. Небольшие объемы товарных партий и колоссальный ассортимент востребованной на рынке продукции делают эту область трудно осваиваемой для крупных игроков.

В последние годы, особенно в условиях применения по отношению к нашей стране экономических санкций со стороны стран Запада, возникла угроза, связанная с возможным прекращением поставок в Россию широкой гаммы химических веществ, используемых в различных отраслях промышленности, обеспечивающих безопасность нашей страны. Проблема импортозамещения стала одной из ключевых в государственной промышленной политике [3]. Поэтому развитие производства продукции малотоннажной химии является важной государственной задачей, для решения которой в Минпромторге России проводятся работы по созданию межотраслевого координирующего органа [4].

Одним из перспективных примеров решения этой задачи является создание Научного центра «Малотоннажная химия» (2012 г.) на базе группы производственных компаний «ЭКОС-1» (основана в 1989 году). Получившийся научно-производственный комплекс (НПК) является одним из лидеров российского рынка малотоннажной химии. В ассортимент выпускаемой продукции входит более четырехсот химических продуктов: органические растворители, кислоты и химические реактивы всех квалификаций, реагенты для промышленной водоподготовки, текстильно-вспомогательные вещества и др. НПК – это современный химический холдинг, передовые разработки и команда настоящих профессионалов. Партнерами являются крупнейшие компании, а также государственные структуры.

Основой НПК является производственный комплекс в городе Старая Купавна (Московская область). Стабильное качество продукции обеспечивается благодаря современному многопрофильному оборудованию. Организован непрерывный лабораторный контроль от поставки сырья до отгрузки готовой продукции. Уникальные химические метки в составе выпускаемых реагентов обеспечивают нашим клиентам защиту от контрафакта. Создана развитая производственная инфраструктура и система логистики. Продукция поставляется как по всей России, так и на экспорт. Наша дилерская сеть представлена в 14 городах России.

На заводе большое внимание уделяется аналитическому мониторингу качества. Парк оборудования в лабораториях физико-химического и спектрального анализа используется для автоматизации рутинных операций при различных видах исследований, что позволяет минимизировать влияние человеческого фактора на результат

исследования и оптимизировать сроки выполнения анализа. Аналитический отдел Научного центра «Малотоннажная химия» совместно с аналитической службой АО «ЭКОС-1» осуществляет: разработку общих подходов к анализу реактивов и высокочистых веществ, выявление методов анализа основных групп примесей, разработку оптимальных алгоритмов анализа реактивов и высокочистых веществ, сырья и полупродуктов. Аналитические лаборатории производственного комплекса соответствуют требованиям технической компетенции МИ 2427-2016. Система менеджмента качества АО «ЭКОС-1» соответствует требованиям ГОСТ ISO 9001-2011 (ISO 9001:2008).

Научный центр «Малотоннажная химия» специализируется на разработках полного цикла: от идеи до внедрения технологических решений на производстве. Лаборатории научного центра оснащены новейшими исследовательскими приборами, разработанные технологии защищены патентами на изобретение. Научный центр разрабатывает инновационные материалы, создает химические композиции и технологии, контролирует качество продукции и проводит аналитические исследования. Специалисты центра занимаются научными разработками для микроэлектроники, фармацевтики, авиационно-космической отрасли и военно-промышленного комплекса.

В результате проведенных исследований [5] показано, что наличие сертифицированной системы менеджмента качества научной организации (ISO 9000) является: основным признаком ее конкурентоспособности за счет внедрения единых требований, закрепленных международными стандартами; дает неоспоримые преимущества на внутреннем и внешнем рынке; увеличивает вероятность победы при участии в тендерах, конкурсах, а также при заключении, как внутренних, так и внешних контрактов. Сформулированы основные требования, влияющие на процесс научных разработок: проблема критичности времени, требующегося для создания продукта; проблема повышения качества процессов производства и проектирования; проблемы, связанные с конкуренцией на рынке эксплуатационного обслуживания; проблемы, связанные с непосредственным снижением затрат (прямых и капитальных); вопросы качества труда в производственных и управленческих подразделениях.

В результате проведенной многоуровневой систематизации информационных потоков установлены функциональные задачи (рис. 1.) для каждого иерархического уровня пользователей и четко обозначены горизонтальные уровни управления. Уполномоченные представители высшего руководящего звена формируют координационный совет, принимающий основополагающие решения по формированию стратегии развития предприятия на основании комплексного анализа агрегирующих факторов активаторов и дезактиваторов внешней и внутренней среды.

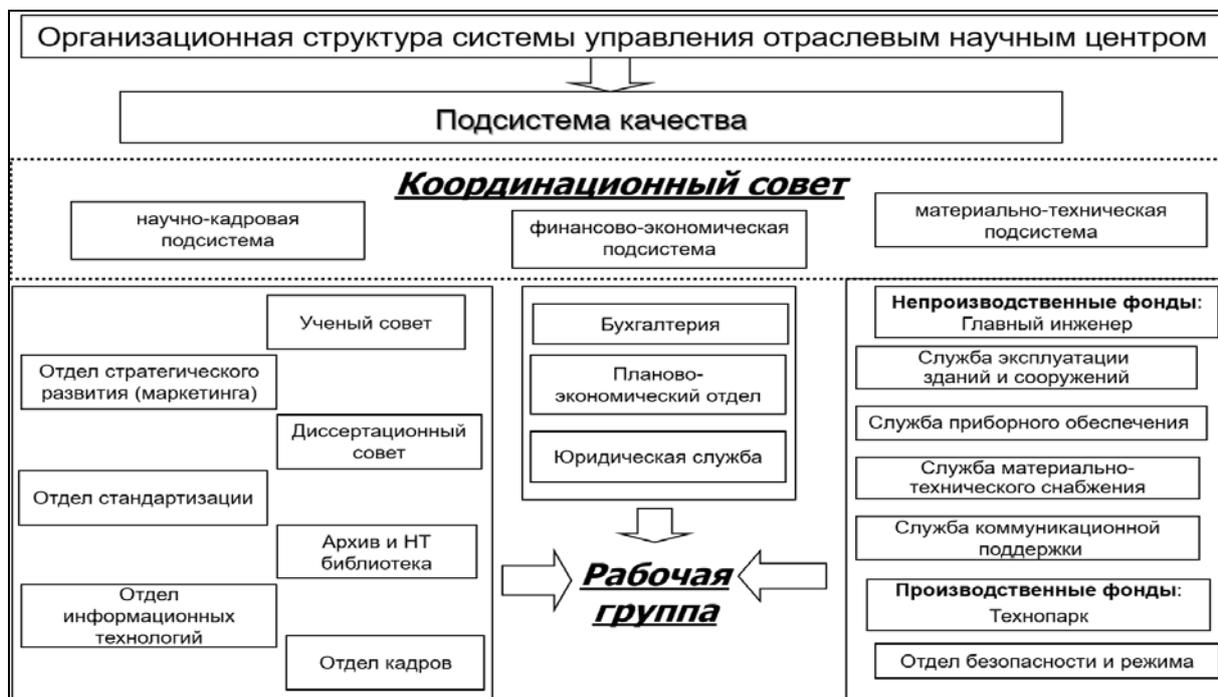


Рис. 1. Организационная структура подсистемы качества научного центра

На втором иерархическом уровне организационной структуры службы качества формируется рабочая группа (рис.1), состоящая из представителей основных функциональных подразделений, которые несут ответственность за разработку конкретных перспективных направлений. На третьем уровне системного анализа сосредоточено описание потоков входной и выходной информации, регулирующие деятельность подсистемы качества научной организации.

Установлены основные требования, влияющие на процесс научных разработок: проблема критичности времени, требующегося для создания продукта; проблема повышения качества процессов производства и проектирования; проблемы, связанные с конкуренцией на рынке эксплуатационного обслуживания; проблемы, связанные с непосредственным снижением затрат (прямые и капитальные); вопросы качества труда в производстве и иных управленческих подразделениях. В этой связи, для того чтобы обеспечить требуемые параметры эффективности деятельности научной организации, обоснована необходимость использования CALS-технологий (ISO 10303), предполагающих автоматизацию не только процессов изготовления продукта, но и процессов их создания и подготовки производства, а также постэксплуатационного обслуживания, включая стадию утилизации [6]. Разработанные технологии реализованы и успешно используются на базе производства АО «ЭКОС-1». Полученные результаты вошли в конкурсные проекты Минобрнауки (№ 02.513.12.3072, № 02.513.123073) и Минпромторга России (№ 16.1CA.12.8003).

Работа проводилась при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) по проекту № 20-03-00515 «Системные исследования жизненного цикла разработки и производства в технологии материалов особой чистоты».

Список литературы

1. Фролова А.В., Лопаткин Д.С. Создание инновационного научно-технологического центра развития малотоннажной химии и особо чистых веществ (на примере инновационного научно-технологического центра «Долина Менделеева») // Успехи в химии и химической технологии. 2019. Т. 33. № 12 (222). С. 31-33.
2. Клепиков Д.Н.; Выголов Н.В.; Ильиных Л.В. Приоритетные направления развития малотоннажной химии в Российской Федерации // Вестник химической промышленности. 2016. № 4. С. 35-43.
3. Распоряжение Правительства Российской Федерации от 15.12.2017 № 2834-р «Об утверждении плана мероприятий ("дорожная карта") по развитию производства малотоннажной химии в Российской Федерации на период до 2030 года»
4. Клевцов А.А., Трохин В.Е., Бессарабов А.М., Стоянов О.В. Разработка стратегии координирующего органа для эффективного управления производством продукции малотоннажной химии в РФ // Вестник технологического университета. 2019. Т. 22, № 11. С. 141-145.
5. Жданович О.А., Айвазян Е.А., Санду Р.А., Бессарабов А.М. Компьютерный менеджмент качества отраслевого НИИ на основе корпоративных стандартов (ISO-9000 и ISO-10303 STEP) // Успехи в химии и химической технологии. 2006. Т. 20. № 1 (59). С. 110-113.
6. Bessarabov A., Stepanova T., Zarembo G., Poluboiarinova E. CALS-based computer-aided support in the chemical industry // Chemical Engineering Transactions. 2016. V. 52. P. 97-102.

УДК 004.9: 303.732.4: 625.75: 625.768.6

Приоров Г.Г., Глушко А.Н., Бессарабов А.М.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ КАЧЕСТВА АВТОДОРОЖНОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ

Приоров Георгий Германович, аспирант;

Глушко Андрей Николаевич, к.т.н., первый заместитель директора, e-mail: ang-rsh@ya.ru;

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» - ИРЕА;

Россия, 107076, Москва, ул. Богородский Вал, д. 3.

Бессарабов Аркадий Маркович, д.т.н., профессор, заместитель директора, e-mail: bessarabov@irea.org.ru;

АО Научный центр «Малотоннажная химия»;

Россия, 107564, Москва, ул. Краснобогатырская, д. 42.

Предложена декомпозиция диаграммы IDEF0 для отображения влияния качества автодорог на обобщающие показатели качества транспортной инфраструктуры и жизни. При системном анализе качества автодорог созданы CALS-системы компьютерного менеджмента качества.

Ключевые слова: системный анализ, диаграмма IDEF0, качество автодорожной инфраструктуры, компьютерный менеджмент качества.

SYSTEM ANALYSIS OF QUALITY OF ROAD INFRASTRUCTURE

Priorov G.G., Glushko A.N., Bessarabov A.M.

NRC «Kurchatov Institute» – IREA, Moscow, Russia

R&D Centre "Fine Chemicals", Moscow, Russia

The decomposition of the IDEF0 diagram is proposed to reflect the influence of the quality of roads on main indicators of the quality of transport infrastructure and life. The CALS-systems of computer-aided quality management have been created in the systematic analysis of the road quality.

Keywords: system analysis, IDEF0 diagram, quality of road infrastructure, computer quality management.

Для детального отображения влияния качества автодорог на общий показатель качества транспортной инфраструктуры Российской Федерации нами был проведен комплекс системных исследований, в ходе которого была предложена адаптация и декомпозиция диаграммы типа IDEF0 (Integration Definition for Function Modeling) [1] с выделением функций и уточнением внутренних связей между ними (рис. 1).

На основании проведенного анализа предложены 3 группы основных взаимосвязанных показателей качества: качество жизни (A1), качество инфраструктуры (A2), качество автодорог (A3). Данные показатели были выделены и указаны на

основе совокупного анализа двух независимых международных отчетов: отчёта о глобальной конкурентоспособности (The Global Competitiveness Report, ежегодный доклад Всемирного экономического форума) и рейтинга глобального показателя доходности (Global liveability index, The Economist Intelligence Unit - EIU). Основной предложенный ими критерий «качества жизни» - Индекс глобальной конкурентоспособности (The Global Competitiveness Index) представляет собой глобальное исследование и сопровождающий его рейтинг стран мира по показателю экономической конкурентоспособности.

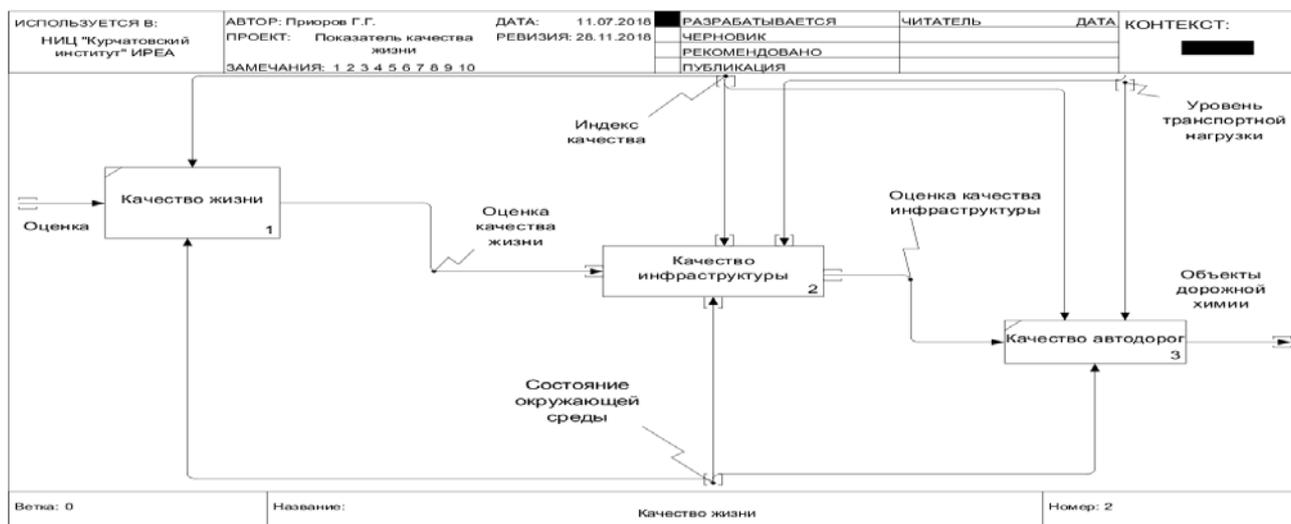


Рис. 1. Диаграмма IDEF0 для декомпозиции 1-го уровня «Качество жизни»

Индекс глобальной конкурентоспособности составлен из 113 переменных, объединенных в 12 контрольных показателей: качество институтов, качество инфраструктуры, макроэкономическая стабильность, здоровье и начальное образование, высшее образование и профессиональная подготовка, эффективность рынка товаров и услуг, эффективность рынка труда, развитость финансового рынка, уровень технологического развития, размер внутреннего рынка, конкурентоспособность компаний, инновационный потенциал.

На 2-м этапе системного анализа проводится декомпозиция диаграммы для функций, входящих в анализируемый показатель «Качества жизни». Рассмотрим вариант декомпозиции функционального блока «Качество инфраструктуры» (A2). В качестве блоков следующего уровня декомпозиции были выбраны шесть основных показателей качества, упомянутые в обоих отчетах и рейтингах, которые в наибольшей степени влияют на

совокупную оценку инфраструктуры страны. Это: железнодорожный транспорт, воздушный транспорт, телекоммуникации, водный транспорт, автомобильный транспорт и качество энергоснабжения. Выделены основные факторы, влияющие на показатели качества и входные/выходные данные. Внешние факторы обозначены вертикальными стрелками (состояние окружающей среды, уровень транспортной нагрузки), входные и выходные данные указаны по горизонтали, слева направо (суммарный индекс качества, совокупная оценка качества инфраструктуры).

На следующем 3-м этапе декомпозиции (рис. 2) рассматривается оценка транспортной инфраструктуры по показателю «Автомобильный транспорт». По данным The Global Competitiveness Report эта оценка зависит от следующих показателей: прямолинейность дороги, скорость движения и качество дорожной инфраструктуры.

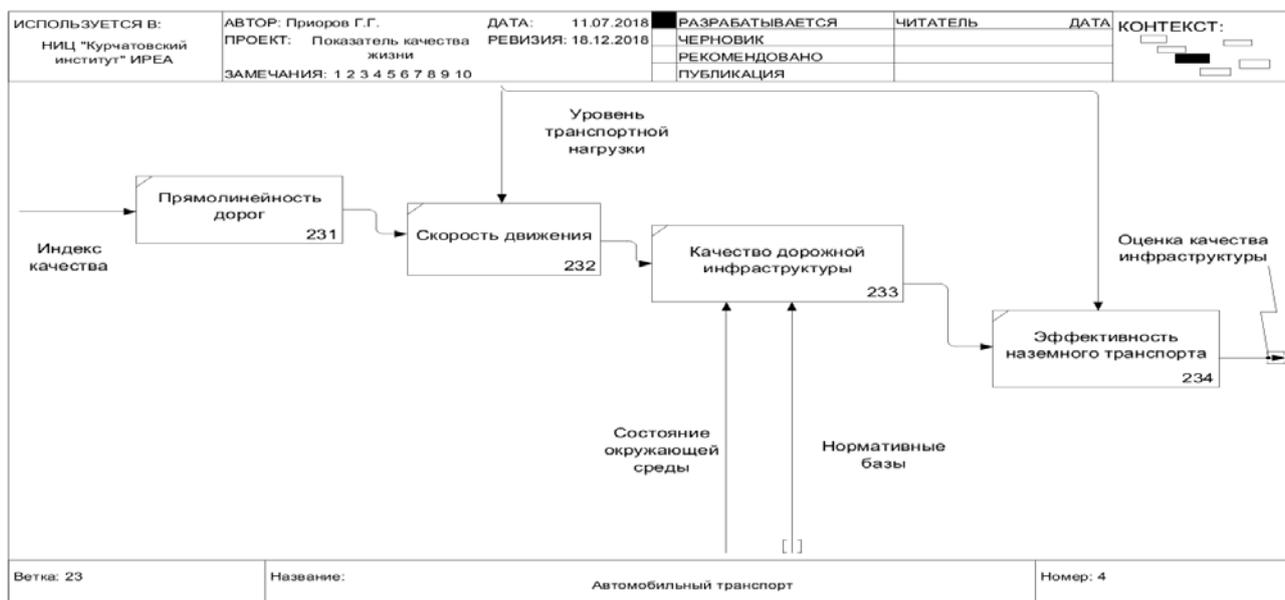


Рис. 2. Диаграмма IDEF0 для декомпозиции 3-го уровня «Качество инфраструктуры»

На 4-м этапе декомпозиции было показано, что на качество автодорожной инфраструктуры оказывают влияние четыре основных фактора: природно-климатические условия; состояние автодорог; уровень технологической культуры; интенсивность транспортной нагрузки [2]. В критерий «Уровень технологической культуры» входят показатели, связанные с обработкой автодорог противогололедными материалами [3] и дорожными пропитками [4]. На CALS-технологиях компьютерного менеджмента качества этих показателей [3, 4] заканчивается декомпозиция автодорожной инфраструктуры.

Работа проводилась при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) по проекту № 18-29-24185 «Научные основы разработки и управления эксплуатацией информационной интеллектуальной системы мониторинга и прогнозирования оценки воздействия

на окружающую среду отходов круглогодичного содержания автодорог».

Список литературы

1. Усков А.А., Жукова А.Г. Подход к оценке сложности диаграмм SADT (IDEF0) // Программные продукты и системы. — 2015. — № 1. — С. 34-37.
2. Кевеш А.Л. Транспорт и связь в России. 2016: Статистический сборник / Росстат. — М., 2016. — 112 с.
3. Contribution of applied chemistry to maintaining Russian highway infrastructure in winter / Glushko A.N. [et al.]. Russian Journal of General Chemistry. — 2015. — V. 85, № 10. — P. 2449-2457.
4. Priorov G., Bessarabov A., Glushko A. Development of industrial production of impregnating compositions for road coatings based on the concept of CALS // Chemical Engineering Transactions. — 2019. — V. 76. — P. 457-462.

УДК 544.774.2

Худеев И.И., Лебедев А.Е., Меньшутина Н.В.

ИЗУЧЕНИЕ ВНУТРЕННЕЙ СТРУКТУРЫ АЭРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ КАК НОСИТЕЛЕЙ ЛЮМИНОФОРНЫХ ВЕЩЕСТВ

Худеев Илларион Игоревич, аспирант 3 курса кафедры кибернетики химико-технологических процессов, ведущий инженер международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий, e-mail: illarionkhudeev@mail.ru;

Лебедев Артем Евгеньевич, к.т.н., с.н.с. международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий;

Меньшутина Наталья Васильевна, д.т.н., профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева, руководитель международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий РХТУ им. Д. И. Менделеева;

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

В работе были получены аэрогели на основе оксида алюминия в форме монолитов. Гели синтезировали с применением золь-гель процесса. В качестве прекурсора использовалась простая неорганическая соль – гексагидрат хлорида алюминия. Реакции гидролиза и конденсации проводили в среде воды и этанола, а инициатором процесса гелеобразования являлся эпихлоргидрин. Полученные материалы обладают развитой удельной поверхностью от 555 до 764 м²/г и низкой плотностью от 0.070 до 0.110 г/см³. Такие материалы являются перспективными для применения в качестве носителей люминофоров.

Ключевые слова: аэрогели на основе оксида алюминия, пористые материалы, сверхкритическая сушка, люминофоры, люминесценция.

INNER STRUCTURE INVESTIGATION OF ALUMINA AEROGELS AS LUMINOPHORE CARRIERS

Khudeev I.I., Lebedev A.E., Menshutina N.V.

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

Alumina aerogels in the form of monoliths were obtained within a work. Gels were synthesized using a sol-gel process. An inorganic salt, aluminum chloride hexahydrate, was used as a precursor. Hydrolysis and condensation reactions were carried out in a medium of water and ethanol, and epichlorohydrin was the initiator of the gelation process. The resulting materials have high specific surface area from 555 to 764 m²/g and low density from 0.070 to 0.110 g/cc. Such materials are promising for use as luminophore carriers.

Keywords: alumina aerogel, porous materials, supercritical drying, luminophore, luminescence.

Введение

Аэрогели представляют собой высокопористые материалы, которые имеют высокую пористость и развитую внутреннюю поверхность [1]. Благодаря особым свойствам, они являются эффективными сорбционными материалами, их можно использовать в качестве носителей активных веществ, тепло- и звукоизоляционных материалов. Аэрогели могут быть изготовлены из веществ неорганической природы, они могут состоять из диоксида кремния, оксидов металлов. Они являются прозрачными материалами, что наряду с прочими свойствами, обуславливает возможность их использование как носителей фотоактивных и люминисцентных материалов [2]. Высокая пористость и развитая поверхность аэрогелей позволяет получать значительные загрузки таких вещества и защитит их от негативного воздействия окружающей среды. Таким образом, с применением аэрогелей могут быть получены новые люминисцентные материалы, отличающиеся более высокой эффективностью.

В рамках работы, в качестве неорганического аэрогеля, выбран аэрогель на основе оксида алюминия. Процесс получения аэрогелей на основе

оксида алюминия состоит из двух основных этапов: получение гелей и их сверхкритическая сушка. Получение гелей может осуществляется с применением золь-гель процесса, инициируемого эпоксидом. В качестве прекурсоров используются неорганические соли, такие как нитраты и хлориды. Для удаления растворителя из пор гелей используется сверхкритическая сушка, применением которой позволяет предотвратить разрушения пористой структуры геля и получить аэрогель с необходимыми свойствами. В качестве сверхкритического флюида используется диоксида углерода ввиду его низкой стоимости, экологической безопасности.

Материалы

Гексагидрат хлорида алюминия ($\geq 99.5\%$, «Компонент-Реактив») являлся источником алюминия, дистиллированная вода, этанол (95%, «Ferane») и изопропанол ($\geq 99.8\%$, «РусХим») использовались в качестве растворителей, эпихлоргидрин («Biochem Chemopharma») использовался как катализатор золь-гель процесса.

Экспериментальная часть

Монолиты гелей на основе оксида алюминия получали с помощью золь-гель процесса, иницируемого эпоксидом. Гексагидрат хлорида алюминия растворяли в этаноле и воде при перемешивании на магнитной мешалке в течение 150 мин. Далее для проведения процесса гелеобразования к полученному раствору добавляли эпихлоргидрин и смесь перемешивали в течение 10 мин. Затем смесь переливали в пластиковые цилиндрические формы для гелирования. Реакционную смесь выдерживали в формах в течение 24 ч. Сформированный гель помещали в этанол на 24 часа для завершения реакций. После чего проводили замену этанола на изопропанол 4 раза через каждые 24 ч для удаления остаточного содержания воды в гелях. Объемное соотношение гелей к спирту составляло 1:4. В ходе золь-гель процесса имеют место реакции гидролиза и конденсации, которые протекают по механизмам оляции и оксаляции [3]. Оляция приводит к образованию гидроксо-мостиков Al-OH-Al между двумя атомами алюминия. Оксаляция приводит к образованию оксо-мостиков Al-O-Al между двумя атомами алюминия. Сочетания таких связей определяет свойства конечной структуры материала.

Молярное соотношение исходных компонентов – «гексагидрат хлорида алюминия : эпихлоргидрин : этанол : вода» = «1 : 10 : 25 : 35».

Процесс сверхкритической сушки гелей проводили на установке собственной конструкции [4]. Процесс проводили при 40 °С и 120 бар. Расход диоксида углерода поддерживали 500 г/ч в течение 1 ч, затем снижали до 300 г/ч и поддерживали 6 ч.

Аналитические исследования

Структурные характеристики аэрогелей на основе оксида алюминия были исследованы с помощью низкотемпературной адсорбции азота (-196 °С) на анализаторе удельной поверхности и пористости ASAP 2020MP (Micromeritics Instrument Corp., США). Перед анализом образцы дегазировали при температуре 85 °С и давлении не более 0.5 мм рт. ст. (0.00067 бар) в течение 12 ч для удаления адсорбированной влаги. Площадь удельной

поверхности определяли по методу Брунауэра-Эммета-Теллера (БЭТ), распределение пор по размерам, средний диаметр пор (D) и объем пор ($V_{ВН}$) по методу Barrett-Joyner-Halenda (ВН).

Пористость аэрогелей определялась по результатам гелиевой пикнометрии (AccuPyc 1340, Micromeritics Instrument Corp., США) и рассчитывалась по формуле:

$$\Phi = \left(1 - \frac{\rho_{ист}}{\rho_{каж}}\right) \cdot 100\%$$

где $\rho_{ист}$ – истинная плотность образцов, определялась с помощью гелиевой пикнометрии при температуре 20 °С (AccuPyc 1340, Micromeritics Instrument Corp., США); $\rho_{каж}$ – кажущаяся плотность.

Кажущуюся плотность пор определяли после измерения линейных размеров и массы полученных образцов по следующей формуле:

$$\rho_{bulk} = \frac{\sum_{i=1}^N m_i}{\sum_{i=1}^N V_i}$$

где m_i – масса i -го образца; V_i – объем i -го образца; N – число одинаковых образцов.

Общий объем пор рассчитывали по формуле:

$$V_{пор} = \Phi / \rho_{каж}$$

Кроме того, определялась общая линейная усадка образцов от начала гелеобразования до получения аэрогеля:

$$L = d_{\Phi} / d_a$$

где d_{Φ} – диаметр форм для гелирования, мм; d_a – диаметр аэрогеля, мм.

Для анализа наличия макропор определялась доля пор, размером больше 300 нм:

$$\omega\% = \frac{V_{пор} - V_{ВН}}{V_{пор}}$$

Азотная порометрия и гелиевая пикнометрия выполнялись на оборудовании Центра коллективного пользования РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1(а) представлены изотермы адсорбции азота при -196 °С в аэрогелях на основе оксида алюминия и распределение пор по размерам (б).

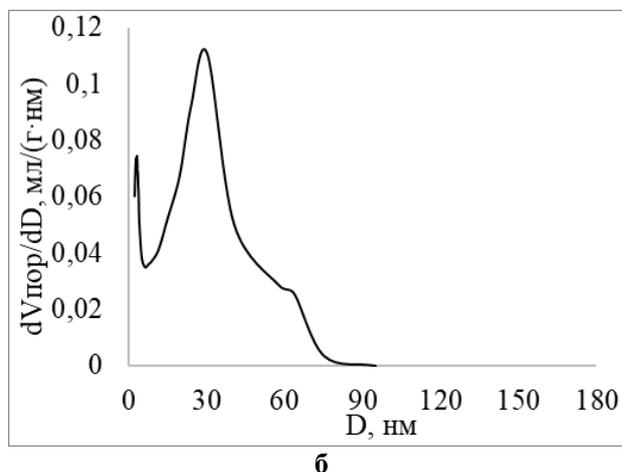
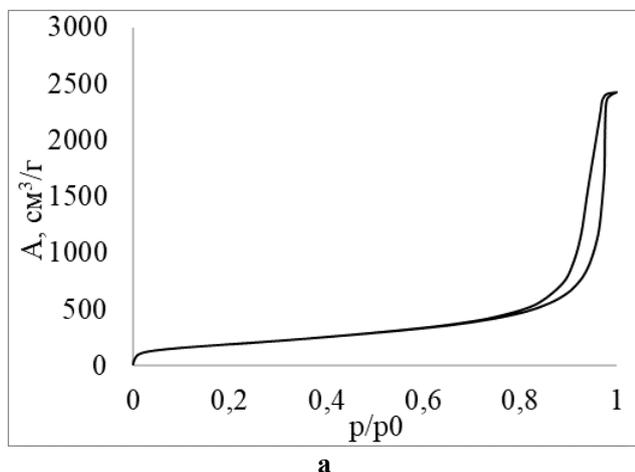


Рис. 1. Изотермы адсорбции азота при -196 °С (а) и распределение пор по размерам (б) в аэрогелях на основе оксида алюминия

Таблица 1. Характеристики полученных образцов

$\rho_{\text{каж}}$, г/см ³	L, %	S _{БЭТ} , м ² /г	D, nm	V _{пор} , см ³ /г	V _{ВН} , см ³ /г	ω , %	$\rho_{\text{ист}}$, г/см ³	ϕ
0.110	31.5	717	19	8.58	3.78	44	1.970	0.94

Изотерма относится к IV типу согласно классификации IUPAC [5]. Изотермы IV типа характерны для мезопористых материалов. Изотерма имеет петлю гистерезиса типа H1 согласно IUPAC, характеризующиеся параллельными и почти вертикальными ветвями. Петли гистерезиса типа H1 характерны для материалов состоящих из наночастиц, формирующих цилиндрические поры. На кривой распределения пор по размерам можно заметить два пика, один в диапазоне от 0 до 5 нм, а второй от 25 до 35 нм. Прочие характеристики полученного материала представлены в таблице 1.

Анализ полученных данных показал, что общий объем пор ($V_{\text{пор}}$) значительно больше объема пор рассчитанного по изотермам десорбции азота методом ВН ($V_{\text{ВН}}$). Такая разница результатов возникает в связи с тем, что для полученных образцов с помощью азотной порометрии и метода ВН возможно охарактеризовать только поры диаметром до 300 нм. Это свидетельствует о том, что полученные аэрогели сочетают в себе как мезо, так и макропоры. Причем доля пор размером больше 300 нм составляет до 44 %. Материал обладает развитой удельной поверхностью, высокой пористостью, низкой плотностью, он сочетает в себе как мезо, так и макропоры. Полученные свойства подтверждают возможность использования аэрогеля на основе оксида алюминия в качестве носителя люминесцентных веществ.

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

Список литературы

1. Aerogels Handbook / ed. Aegerter M.A., Leventis N., Koebel M.M. New York: Springer-Verlag, 2011.
2. Solovieva A.B. et al. Photocatalytic Properties of Tetraphenylporphyrins Immobilized on Calcium Alginate Aerogels // Scientific Reports. 2017. Vol. 7, № 1.
3. Baumann T.F. et al. Synthesis of High-Surface-Area Alumina Aerogels without the Use of Alkoxide Precursors // Chem. Mater. American Chemical Society, 2005. Vol. 17, № 2. P. 395–401.
4. Menshutina N.V. et al. Production of Sodium Alginate-Based Aerogel Particles Using Supercritical Drying in Units with Different Volumes // Russ. J. Phys. Chem. B. 2017. Vol. 11, № 8. P. 1296–1305.
5. Thommes M. et al. Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report) // Pure and Applied Chemistry. De Gruyter, 2015. Vol. 87, № 9–10. P. 1051–1069.

УДК 544.015.4

Сулова Е.Н., Лебедев А.Е., Ловская Д.Д.

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМАХ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Сулова Екатерина Николаевна, аспирант 1 года обучения факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, старший лаборант международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий РХТУ им. Д. И. Менделеева; e-mail: 1345-katya@mail.ru;

Лебедев Артем Евгеньевич, к.т.н, старший научный сотрудник международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий РХТУ им. Д. И. Менделеева;

Ловская Дарья Дмитриевна, к.т.н, младший научный сотрудник международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий РХТУ им. Д. И. Менделеева;

Проведены экспериментальные исследования кинетики фазовых переходов двухкомпонентных систем под высоким давлением. Выполнен расчет коэффициентов массопередачи по известным экспериментальным данным.

Ключевые слова: субкритическое состояние, фазовые переходы, коэффициент массопередачи.

INVESTIGATION OF KINETIC PARAMETERS OF PHASE TRANSITIONS IN TWO-COMPONENT SYSTEMS UNDER HIGH PRESSURE

Suslova E.N., Lebedev A.E., Lovskaya D.D.

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

Experimental studies of the kinetics of phase transitions in two-component systems under high pressure have been carried out. The calculation of the mass transfer coefficients was carried out according to the known experimental data.

Keywords: subcritical state, phase transitions, mass transfer coefficient.

Исследование кинетики фазовых переходов в двухкомпонентной системе «изопропиловый спирт – диоксид углерода» необходимо для более глубокого понимания хода массообменных процессов в субкритических и критических условиях. Данные о фазовом поведении системы необходимы для проектирования, моделирования и оптимизации процессов, протекающих при повышенном давлении. К данным процессам можно отнести сверхкритическую сушку, сверхкритическую флюидную экстракцию, сверхкритическую флюидную хроматографию и т.д.

Многие вещества, такие как спирты, эфиры, кетоны, могут растворять в своем объеме диоксид углерода. Данный процесс возможен благодаря процессу физической сорбции, определяемой законом Генри – количество растворенного газа в жидкости прямо пропорционально его давлению над жидкостью.

Растворимость диоксида углерода в изопропиловом спирте уменьшается с повышением температуры при постоянном давлении. Это происходит главным образом из – за того, что с увеличением температуры увеличивается скорость движения частиц. Благодаря этого связь молекул диоксида углерода с сорбентом менее устойчива [1]. Также, растворимость диоксида углерода в жидкой фазе зависит от давления – с увеличением давления растворимость увеличивается [2]. Это связано с тем, что при увеличении парциального давления повышается движущая сила массопереноса из газовой фазы в жидкую. К тому же, с ростом давления увеличивается значения фактора сорбции. Это объясняется тем, что повышение давления

способствует переходу диоксида углерода в сверхкритическое состояние, что увеличивает его растворимость в жидкости. Следовательно, коэффициент массопередачи зависит от растворимости диоксида углерода в изопропиловом спирте, а значит, и от внешних параметров.

Экспериментальная часть

Экспериментальное исследование кинетики фазовых переходов проводилось с использованием установки для сверхкритической сушки. Принципиальная схема используемой установки представлена на рисунке 1.

Для определения соотношения между фазами аппарат снабжен устройством для регистрации фотографических изображений. Для получения изображений изменения объема проводятся следующие действия. Аппарат высокого давления 5 нагревается до заданной температуры с помощью системы терморегулирования 6. В аппарат, при необходимости, загружается гель альгината натрия, после чего аппарат герметизируется. Далее с помощью мембранного насоса 10 в аппарат подается изопропиловый спирт из емкости 9. Аппарат термостатируется в течение 20 минут. После этого, в аппарат с помощью поршневого насоса 3 через конденсатор 2 подается диоксид углерода из баллона 1. Нагрев подаваемого газа происходит с помощью термостата 4. После этого спирт из аппарата сбрасывается через пробоотборник 7, а давление сбрасывается в атмосферу. Объемный расход определяется по ротаметру 8. Указанная процедура повторяется с изменением параметров процесса (температуры и давления).

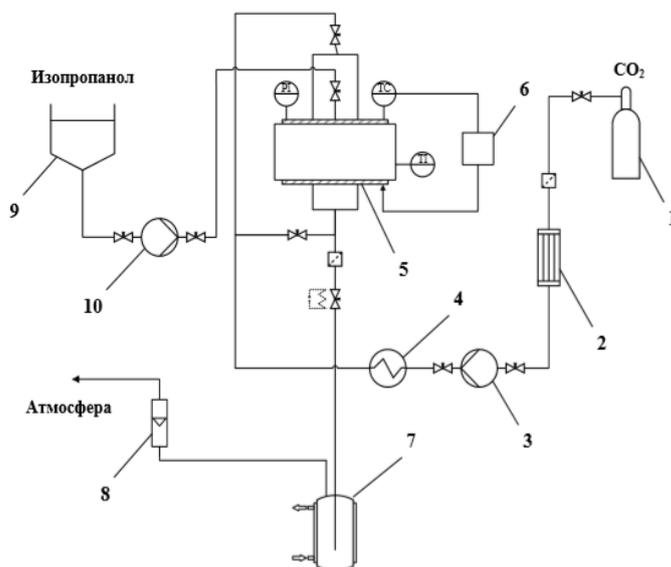


Рисунок 1. Схема экспериментальной установки для исследования кинетики фазовых переходов

Теоретическая часть

Более подробное описание экспериментального исследования кинетики фазовых переходов многокомпонентных систем под давлением и его результаты представлены в работе [3].

Для определения кинетических параметров изучаемой системы используется основное уравнение массопередачи (1), по которому может быть рассчитано количество вещества, перенесённое из одной фазы в другую через границу их раздела за единицу времени:

$$dM = K(x_p - x)dFdt, \quad (1)$$

где dM – количество вещества, переходящее из одной фазы в другую, кг/сек; K – коэффициент массопередачи, кг·м²; dF – поверхность фазового контакта, м²; dt – время, сек; $(x_p - x)$ – движущая сила процесса массопередачи, x_p – равновесная концентрация вещества в жидкой фазе; x – концентрация вещества в жидкой фазе на данном шаге.

Для нахождения объема жидкой фазы определяется плотность смеси с помощью уравнения состояния Пенга – Робинсона с правилами смешения Ван – дер – Ваальса для многокомпонентных систем. Для удобства уравнение состояния можно представить в виде полинома (2), в результате решения которого определяется коэффициент сжимаемости Z и объем V :

$$Z^3 - (1 - B) \cdot Z^2 + (A - 2B - 3B^2) \cdot Z - (AB - B^2 - B^3) = 0, \quad (2)$$

где

$$A = \frac{a \cdot P}{R^2 \cdot T^2}, \quad B = \frac{b \cdot P}{R \cdot T}, \quad Z = \frac{V \cdot P}{R \cdot T}$$

Далее находится площадь контакта фаз, который имеет форму прямоугольника:

$$F = AB \cdot L \quad (3)$$

где AB и L являются сторонами прямоугольника, AB – ширина контакта фаз, см; L – длина аппарата, см.

AB находится по формуле:

$$AB = \sqrt{4(R^2 - (R - H)^2)} \quad (4)$$

где R – радиус аппарата, см; H – высота уровня жидкой фазы в аппарате, см.

Высота уровня измеряется по экспериментальным фотографическим изображениям. Равновесная концентрация вещества в жидкой фазе берется из литературных данных при необходимых температуре и давлении. Зная начальный объем жидкой фазы и объем в каждый момент времени рассчитывается изменение объема жидкой фазы по уравнению (5) на данном шаге:

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \frac{V - V_0}{V_0} \cdot 100\% \quad (5)$$

где V – объем жидкой фазы, см³; V_0 – объем жидкой фазы в начальный момент времени, см³.

Далее находилась коэффициент массопередачи по уравнению (1) путем нахождения минимальной ошибки рассчитанных данных с экспериментальными точками методом перебора.

Результаты

В результате расчетов были получены коэффициенты массопередачи для полученных экспериментальных кривых кинетики фазовых переходов двухкомпонентной системы «изопропиловый спирт – диоксид углерода». Теоретические и экспериментальные кривые представлены на рисунке 2.

Из полученных графиков видно, что расчетные данные хорошо согласуются с экспериментальными. Средняя ошибка расчетов составила 4,7% для систем «изопропиловый спирт – вода – диоксид углерода» без геля альгината натрия и 3,4% для системы с добавлением геля.

В результате расчетов были определены коэффициенты массопередачи из газовой фазы в жидкую, представленные в таблице 1.

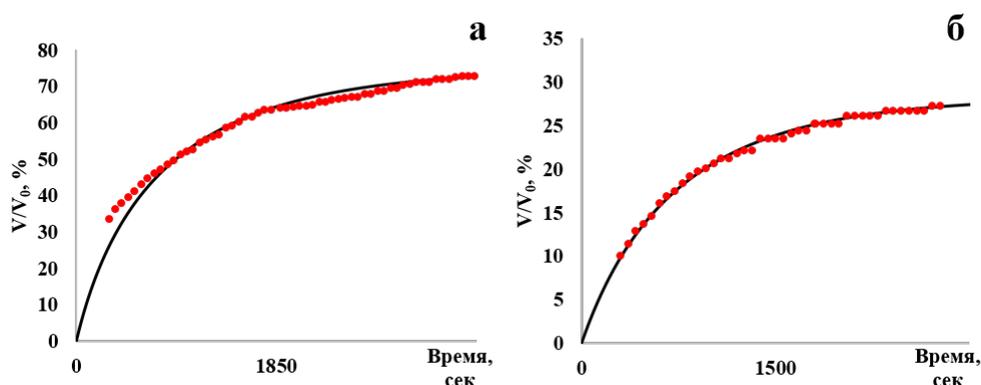


Рисунок 2. Экспериментальные (•) и расчетные (—) данные изменения объема жидкой фазы системы «изопропиловый спирт – диоксид углерода» при: а) температуре 313 К и давлении 63 бар, б) температуре 313 К и давлении 78 бар

Таблица 1. Рассчитанные коэффициенты массопередачи

	Температура, К	Давление, бар	Рассчитанный коэффициент массопередачи из ГФ в ЖФ, кг/м ³ ·с		Температура, К	Давление, бар	Рассчитанный коэффициент массопередачи из ГФ в ЖФ, кг/м ³ ·с
Без геля	313.83	61.26	0.0060	С гелем	313.93	63.57	0.0033
	312.99	63.36	0.0040		314.03	62.89	0.0019
	314.35	64.84	0.0067		312.80	62.91	0.0047
	312.68	79.76	0.0300		314.48	77.45	0.0033
	312.66	77.58	0.0053		313.19	78.64	0.0033
	314.98	79.81	0.0900		314.01	77.75	0.0025
	332.95	65.05	0.0350		333.34	63.21	0.0024
	333.38	63.38	0.0027		333.79	62.77	0.0015
	325.28	66.73	0.0100		333.52	62.81	0.0013
	333.05	76.58	0.0070		333.72	78.03	0.0023
	333.83	79.55	0.0100		332.26	77.88	0.0019
	333.25	76.45	0.0070		—	—	—

При изотермическом увеличении давления коэффициент в среднем возрастает, а при изобарном увеличении температуры, наоборот, уменьшается, что подтверждает экспериментальные данные. В присутствии геля коэффициент массопередачи уменьшается в среднем для всех данных в 7 раз, что доказывает замедление процесса массопередачи в присутствии материала с высокопористой структурой.

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

Список литературы

1. Secuianu C., Feroiu V., Geană D. High – Pressure Vapor – Liquid Equilibria in the System Carbon Dioxide and 2 – Propanol at Temperatures from 293.25 K to 323.15 K // J. Chem. Eng. Data. – 2003. – vol. 48(6). – pp. 1384 – 1386.
2. Gui X., Tang Z., Fei W. Solubility of CO₂ in Alcohols, Glycols, Ethers, and Ketones at High Pressures from (288.15 to 318.15) K // Journal of Chemical & Engineering Data. – 2011. – vol. 56(5). – pp. 2420 – 2429.
3. Сулова Е.Н., Лебедев А.Е., Ловская Д.Д., Худеев И.И. Исследование кинетики фазовых переходов многокомпонентных систем в субкритическом состоянии // Успехи в химии и химической технологии. – 2019. – Т. 33, № 11. – с. 86 – 88.

**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 XXXIV

№ 6 (229)

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