

*Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України  
Національний технічний університет України «КПІ»  
Хіміко-технологічний факультет НТУУ «КПІ»  
Східноукраїнський національний університет ім. В. Даля  
Інститут хімічної технології (м. Рубіжне) СХУ ім. В. Даля  
Регіональний центр сприяння розвитку бізнесу, інвестиціям, інноваціям*

# **КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ, ТЕХНОЛОГІЯХ І СИСТЕМАХ СТАЛОГО РОЗВИТКУ**

Київ - Рубіжне, 10-12 травня 2012 року

## **ЗБІРНИК НАУКОВИХ СТАТЕЙ**

**Третьої міжнародної  
науково-практичної конференції**



*Київ – Рубіжне – 2012*

**Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку:** Збірник наукових статей Третьої міжнар. наук.-практ. конф. – Київ - Рубіжне: НТУУ «КПІ», 2012. – 284 с.

Збірка містить наукові статті міжнародної науково-практичної конференції «Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку» за такими напрямками: комп'ютерне моделювання в хімії та комп'ютерні методи синтезу нових речовин, комп'ютерне моделювання хіміко-технологічних та біохімічних процесів і систем, комп'ютерне моделювання природоохоронних процесів, комп'ютерне підтримування виробничих процесів, сталий розвиток регіонів, комп'ютерно-інформаційні технології в багаторівневій вищій освіті.

*Організатори конференції можуть не поділяти думку авторів публікацій.*

*Відповідальність за достовірність публікацій несуть автори, а за достовірність реклами – рекламодавці. Автори та рекламодавці несуть відповідальність за дотримання авторських прав і прав третіх осіб.*

*Матеріали конференції видано в авторській редакції.*

© Автори тез доповідей, 2012

© Національний технічний університет України «КПІ», укладання, оформлення, 2012

необмінне поглинання. Обидва типи поглинання протікають у три етапи, що відповідає наявності трьох типів активних центрів на поверхні.

Встановлено, що необмінна сорбція  $^{137}\text{Cs}$  ефективніше відбувається на бентоніті. Виявлено ефект ремобілізації  $^{137}\text{Cs}$  у фіксованій формі, тобто спостерігається зворотній перехід  $^{137}\text{Cs}$  із фіксованої форми в іонообмінну, яка є потенційно здатною до міграції. Процеси тимчасової ремобілізації характерні навіть для сорбції  $^{137}\text{Cs}$  бентонітом на тлі його потужної сорбційної здатності.

1. *Бревитц В.* Изоляция радиоактивных отходов в недрах Украины (проблемы и возможные решения) [Текст] / В.Бревитц, Ю.А.Шибецкий, Ю.Ф.Руденко, Н.Б.Кастельцева.- Киев, 2006. – 398 с.
2. *Кононенко Л.В.* Кинетика обменного и необменного поглощения цезия-137 дерново-подзолистой подвой [Текст] / Кононенко Л.В., Колябина И.Л., Маничев В.И., Коромысличенко Т.И / Збірник наукових праць Інституту геохімії навколишнього середовища. - К.,2007.-вип.14. – с. 48-55.
3. *Колябіна І* Мінеральні сорбенти для захисного шару при поверхневих сховищах радіоактивних відходів [Текст] / Колябіна І., Субботін А., Деревська К, Шумлянський В.-К.:Логос,2011 - 208с
4. *Фельдман Л.П.* Параллельные алгоритмы экстраполяции методов решения задачи Коши для компьютеров с распределенной памятью [Текст] / Л.П. Фельдман, И.А. Назарова. - Наукові праці ДонНТУ. 2010. – 180с.
5. *Koliabina I.* Kinetic parameters of elementary processes of Cs-137 sorption on clay minerals [Текст] / Book of Abstracts of European Clay Conference-EUROCLAY 2011, I.Koliabina, D.Koliabina, S.Dmitrieva, L.Kononenko.- June 26-July 1, 2011, Antalya, Turkey - p. 391.

### ДО ПИТАННЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ВПЛИВУ ХІМІЧНИХ ЧИННИКІВ НА ЗАБРУДНЕННЯ ҐРУНТІВ

Статюха Г.А., Бойко Т.В., Запорожець Ю.А.

Національний технічний університет України «КПІ», kxtp@list.ru

Головною метою нашого суспільства має бути прагнення захисту навколишнього природного середовища від будь-яких забруднень, особливо хімічних. Мінімізація хімічних викидів в навколишнє природне середовище можливо на підґрунті концепцій сталого розвитку суспільства[1], який передбачає помірно і обмежене використання природних ресурсів, використання альтернативних джерел енергії з метою оптимізації життя майбутніх і сучасних поколінь.

З трьох основних складових природного середовища - ґрунтового шару, атмосфери та гідросфери, складніше за все піддається відновленню порушений забруднений ґрунт. Що є складною гетерогенною системою, при оцінці якості якої необхідне використання часто не визначеної інформації.

Особливо важливим є оцінювання внесення хімічних забруднювачів із водою, що виходять з промислового об'єкта. Одним з факторів забруднення ґрунтового шару є просочування поверхні ґрунту сумішами. Процес фільтрації компонентів речовин в ґрунті залежить від багатьох факторів: кліматичних умов, температури, в'язкості, пористості, складу ґрунту і т.п. Фільтраційна і/або сорбційна спроможність ґрунтів, є одним з головних факторів при оцінюванні змін гідрогеологічних умов під впливом людської діяльності. Для оцінювання впливу людської діяльності на порушення існуючого і формування нового гідродинамічного і гідро-геохімічного режимів підземних вод, потрібно дослідити основні характеристики будови територій [2].

Виділення зон з різними геофільтраційними умовами дозволить розділити території за типами і визначити стратегію гуртування вихідної інформації для побудови алгоритму.

Тип схеми геофільтрації відіграє вирішальну роль в формуванні тих або інших закономірностей режиму водонасичення ґрунту, ґрунтових вод та нижче розташованих водоносних горизонтів. В свою чергу основні елементи зони активного водообміну є визначальними факторами при типізації схеми фільтрації.

Володіючи даною інформацією, про типи ґрунтів України, можливо розрахувати ризик впливу промислового об'єкту на екологічну систему, і на сам перед ґрунту. Одним з методів вирішення геофільтраційної задачі є метод просторово-часової суперпозиції аналітичних рішень для свердловин, що працюють в необмеженому ізольованому пласті. Дана модель представлена у таблиці 1.

Таблиця 1 – Метод просторово-часової суперпозиції

Для однієї свердловини	Для декількох свердловин
$S = \frac{Q}{4\pi T} W\left(\frac{r^2}{4aT}\right)$	$S = \sum_{j=1}^J \frac{Q_j}{4\pi T} W\left(\frac{r_j^2}{4aT}\right)$
$V_x = \frac{\partial S}{\partial x} = \frac{Qx}{2\pi m r^2} e^{-u}$	$V_x = \sum_{j=1}^J \frac{Q_j(x-x_j)}{2\pi m r^2} e^{-\frac{r_j^2}{4at}}$
$V_y = \frac{\partial S}{\partial y} = \frac{Qy}{2\pi m r^2} e^{-u}$	$V_y = \sum_{j=1}^J \frac{Q_j(y-y_j)}{2\pi m r^2} e^{-\frac{r_j^2}{4at}}$
$r^2 = x^2 + y^2$	$r_j^2 = (x-x_j)^2 + (y-y_j)^2$

де  $V_{x,y}$  – швидкість фільтрації вздовж осі  $x$  та  $y$ ;  $S$  – підвищення натиску підземних вод, м;  $Q$  – дебіт закачування (об'ємні витрати рідини), м<sup>3</sup>/сут.;  $T$  – провідність, м<sup>2</sup>/сут.;  $r$  – відстань від свердловини, м;  $a$  – п'єзопровідність, м<sup>2</sup>/сут.;  $t$  – час, сут.;  $W(u)$  – функція колодязя або інтегральна показова функція;  $x_j, y_j$  – координати нагнітальних свердловин;  $m$  – потужність пласта, м;

$$Q = \frac{V}{t} = \frac{M}{\sum_{i=1}^n C_i \cdot t}$$

где  $V$  – об'єм рідини, м<sup>3</sup>;  $C_i$  – концентрація домішок в рідині, г/л;  $M$  – маса рідини, кг;  $i$  – йкомпонент домішок;  $n$  – кількість домішок.

Вирішення даної моделі дасть можливість візуально, на графіку, і кількісно представити забруднення ґрунту, а саме отримати об'єктивне уявлення про процеси розповсюдження забруднень, стічних вод, в глибокозалягаючих горизонтах. Результат розрахунку зміни швидкості фільтрації стічних вод, за даною моделлю, представлено на рис. 1.

Таким чином виникають наступні задачі для побудови автоматизованої системи проектування стану ґрунтів під впливом техногенного об'єкта.

Використовуючи математичні методи вирішення геофільтраційної задачі можливо розрахувати зміну швидкості фільтраційного процесу для різних типів ґрунту, використовуючи такий коефіцієнт фільтрації, який характерний для складу шару ґрунту певної території України. Також розраховується можливість зміни складу ґрунту під впливом шкідливих домішок стічних вод небезпечних промислових об'єктів.

Математичні моделі дають можливість проаналізувати вплив техногенного інфільтраційного навантаження, а також кількісно оцінити ризик впливу стічних вод на зміну складу ґрунту, по різній його глибині, а також ґрунтових вод, використовуючи метод «індекс-ризик» [3].



Рис. 1 – Роз оділення води у ґрунтовому шарі при моделюванні

Отже вплив небезпечних промислових об'єктів призводить до небезпечних геологічних процесів і явищ, таких як підтоплення, засолення, заболочення та ін.

1. Дырда, В. Устойчивое развитие и проблемы глобальной безопасности [Текст] /Дырда В., Осипенко В.// Проблемы безопасности при чрезвычай. ситуациях. — 1995. — № 12. — С. 3—22.
2. Абрамов И.Б. Оценка воздействия на подземные воды промышленно-городских агломераций[Текст] /И.Б.Абрамов – Харьков, 2007. – 285с.
3. БойкоТ.В. Особливостівикористанняметода «індекс-ризик» для оцінки техногенної безпеки об'єктів [Текст]/ Бойко Т.В. // Восточно-европейский журнал передовыхтехнологий. Информационные технологии.-2009.- №6/5 (42).- с.44-47.

### РОЗРОБКА ЗАСОБІВ ОПТИМІЗАЦІЇ СХЕМ ВОДОСПОЖИВАННЯ НА ОСНОВІ МОДЕЛЕЙ У НЕЯВНОМУ ВИГЛЯДІ

Квітка О. О., Шахновський А. М., Семенюта О. М.

Національний технічний університет України «КПІ», kxtp@list.ru

Представлена робота присвячена дослідженню шляхів збільшення ефективності процедур автоматизованого проектування та модернізації схем водоспоживання (СВС) промислових підприємств на основі методів структурної оптимізації. Структурна оптимізація (СО) схем водоспоживання, водовідведення та водоочищення спрямована на максимально повне використання ресурсу СВС без заміни основного обладнання, за рахунок організації системи рециклів і полягає у раціональному перерозподіленні потоків між процесами СВС [1]. Такий підхід є поширеним внаслідок відносно низької вартості впровадження пропонуваніх на його основі технічних рішень.

Переважає більшість поширених нині процедур СО СВС передбачає досягнення задачі проектування шляхом формулювання, параметричної ідентифікації та вирішення числовими методами задачі математичного програмування певного вигляду. При цьому задача оптимізації зазвичай включає цільову функцію, що має технологічний або економічний зміст і забезпечує рушійну силу процесу оптимізації та систему обмежень технологічного характеру, які надають результатам оптимізації належного фізичного сенсу.

Зазначена система обмежень формулюється на основі математичних моделей елементів СВС (моделей процесів-водоспоживачів, процесів водоочищення, змішувачів та дільників потоків, тощо). Специфіка числових методів, що застосовуються для розв'язання задач оптимізації, вимагає формулювати обмеження у вигляді системи алгебраїчних рівнянь та нерівностей явного вигляду. Під час пошуку оптимуму на кожній з ітерацій цієї процедури реалізується підстановка даних в математичну модель із отриманням результуючих модельних величин (зокрема, концентрацій забруднювачів на виході з