

*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

Таблиця 2 – I_{CSD} та під-індекси сталості для економічної (I_{ECN}), екологічної (I_{ENV}) та соціальної (I_{SOC}) групи показників

П-ін	м. Київ «Енергія»				м. Тулуза «Гранд»				м. Ле Ман «Метрополь»			
	2007	2008	2009	2010	2007	2008	2009	2010	2007	2008	2009	2010
I_{ECN}	0,23	0,27	0,25	0,33	0,69	0,67	0,78	0,82	0,58	0,53	0,60	0,64
I_{ENV}	0,67	0,51	0,02	0,39	0,93	1,00	1,00	0,94	0,80	0,59	0,68	1,00
I_{SOC}	0,15	0,28	0,11	0,23	0,58	0,61	0,83	0,78	0,46	0,53	0,33	0,54
I_{CSD}	0,39	0,37	0,12	0,33	0,76	0,79	0,88	0,85	0,64	0,56	0,56	0,76

Важлива особливість I_{CSD} – можливість порівняння підприємств у визначеному секторі з точки зору сталого розвитку. Тому, I_{CSD} можливо використовувати в якості критеріїв, за якими підприємства можуть бути оцінені згідно їх сталої діяльності. Цей індекс, може підтримувати інвесторів, щоб вкладати капітал в розвиток підприємства.

ОЦІНКА ЕКОЛОГІЧНОГО АСПЕКТУ СТАЛОГО РОЗВИТКУ ПРОМИСЛОВИХ ОБ'ЄКТІВ

Бойко Т.В., Комариста Б.М., Бендюг В.І.

Національний технічний університет України «КПІ», Vladys77@gmail.com

Теорія і практика підходів щодо управління стратегією сталого розвитку на основі визначення фінансової стратегії відповідає практиці господарської діяльності більшості підприємств і поєднує у собі наступні риси:

- визначення економічного стану підприємства шляхом проведення фінансового аналізу;
- формування сценаріїв оперативних та стратегічних управлінських рішень з метою поліпшення економічної ситуації;
- визначення змін в економічному стані впродовж звітного періоду;
- виявлення й аналіз факторів, які впливають на формування незадовільного економічного стану підприємства;
- прогноз й оцінка загальних тенденцій зміни економічного стану;
- аналіз соціальної діяльності підприємства;
- аналіз екологічної діяльності підприємства.

Результатом такої діяльності є надання оцінки підприємству, як уособленню концепції сталого розвитку.

Таким чином, стратегічною метою сталого розвитку України є досягнення збалансованості співіснування природного середовища, держави, суспільства і підприємництва у соціальному, економічному та екологічному вимірах.

До оцінки екологічного аспекту діяльності промислового підприємства відноситься в першу чергу рівень забруднення ним навколишнього середовища через шкідливі викиди. Проте велика кількість промислових об'єктів також містить в собі потенційну загрозу позанормових разових викидів великої кількості шкідливих речовин, вибухів та пожеж внаслідок виникнення аварійних ситуацій, які можуть перетворитись на техногенні катастрофи в залежності від спричинених ними шкідливих наслідків [1]. Саме оцінці потенційної загрози таких негативних наслідків для навколишнього середовища та людини від промислових об'єктів і присвячена наша робота.

Нами розроблена методологія оцінки ризику діяльності промислових об'єктів [2]. За допомогою даної методології можна проводити кількісну оцінку рівня небезпеки промислового об'єкту на основі розробленого показника - індексу відносної небезпечності D_{RL} В залежності від отримано значення даного індексу виконується віднесення об'єкту до однієї з п'яти категорій небезпеки – від безпечного, до особливо небезпечного об'єкту.

Рівень небезпеки промислового підприємства в цілому може бути оцінений по максимально небезпечному його об'єкту.

За допомогою розробленої нами методології були проведені розрахунки потенційної небезпеки промислового об'єкту Газотурбінної Електростанції Комбінованого Циклу (ГТС КЦ) на стадії проектування. ГТС КЦ входить до складу ВАТ «Алчевський металургійний комбінат».

Аварійні ситуації на об'єкті можуть виникнути в разі стихійного лиха, вибуху, пожежі.

Згідно з даними фірми Mitsubishi при експлуатації технологічного обладнання ГТС КЦ можуть виникнути такі аварійні ситуації:

- аварійне відключення газової турбіни;
- відключення подачі паливного газу;
- відключення подачі охолоджуючої води, в тому числі в газоохолоджувачі;
- відключення котла-утилізатора;
- відключення парової турбіни;
- припинення подачі азоту.

При аварійних ситуаціях проводиться автоматичне відключення газової турбіни, при цьому весь потік газу, що проходить через газовий компресор, скидається в газоохолоджувач і потім прямує на всмоктувач електрофільтру.

Для визначення потенційної небезпеки проектного об'єкту, згідно з нашою методологією, розглядається максимально можливий негативний сценарій розвитку аварії [3]. В даному випадку це розрив трубопроводу з імовірною пожежею чи вибухом усього об'єму газової суміші в трубопроводі. Результати розрахунку потенційної небезпеки об'єкту зведені в табл. 1.

Таблиця 1 – Показники небезпеки промислового об'єкту

Індекси небезпеки зовнішніх факторів	
Індекс урахування небезпеки виникнення землетрусів:	0,5
Індекс урахування небезпеки розчинення карсту:	0,8
Індекс урахування небезпеки знаходження на лесових ґрунтах:	0,5
Індекс урахування небезпеки вітрового навантаження:	0,531
Індекс урахування пожежовибухонебезпеки приміщення:	0,9
Характеристика небезпеки об'єкту	
Індекс ризику виникнення аварії:	0,19
Індекс потенційного збитку:	0,132
Індекс відносної небезпеки:	0,0845
Індекс регіональної небезпеки:	0,165
Категорія небезпеки:	Малонебезпечний об'єкт
Масштаб небезпеки:	Об'єктний

Згідно з отриманими результатами газотурбінна електростанція комбінованого циклу може бути віднесена до другої категорії небезпеки - мало небезпечний об'єкт з об'єктним масштабом потенційної небезпеки. У відповідності з цим спорудження ГТС КЦ можна проводити згідно з розробленим проектом на обраному промисловому майданчику і дотриманням меж санітарно-захисної зони.

Проектована ГТС КЦ потужністю 454,5 МВт в якості палива при виробленні електроенергії буде використовувати доменний, коксовий та конвертерний гази, спалювання яких буде проводитися на більш ефективних пальниках, ніж спалювання на факелі, що дає значне зниження викидів діоксиду азоту і відповідно зниження фонових концентрацій.

Згідно з зазначеним вище та отриманими результатами проєктований промисловий об'єкт за екологічною складовою відповідає основним принципам сталого розвитку, тому що

проектований об'єкт має припустимий рівень потенційної аварійної небезпеки, а також його впровадження призведе до значного зниження рівня викидів NO₂.

Проектований об'єкт відповідає принципам економічної складової сталого розвитку, бо побудова даного промислового об'єкту була викликана економічною необхідністю, внаслідок отриманих проектних розрахунків і призведе до збільшення виробництва власної електроенергії ВАТ «Алчевський металургійний комбінат» на 454,5 МВт, що дозволить зменшити закупівлю електроенергії для виробничих цілей.

1. *Бендюг В.І.* Оцінка техногенної безпеки як важлива ланка сталого розвитку [Текст] / В.І. Бендюг, Б.М. Комариста, В.І. Годзевич // Зб. тез XIII Міжнар. науково-практич. конф. студентів, аспірантів та молодих вчених «Екологія. Людина. Суспільство». 19-23 травня 2010 р.– Київ, 2009. – С. 296-297.
2. *Sustainable Development In Quantity Indicators Of The Assessment Of Technogenic Safety* (англ. мовою) [Текст] / Gennady Statyukha, Tatyana Wojko, Vladyslav Bendyug, Arcady Shakhnovsky // *Chemistry & Chemical Technology*, Львів, 2010, Vol. 4, №1– P. 69-72.
3. *Назаренко, М.В.* Особливості визначення техногенного ризику хіміко – технологічних об'єктів на стадії проектування [Текст] / М.В. Назаренко, Т.В. Бойко, В.І. Бендюг // Східно-європейський журнал передових технологій, 2011, №3/11 (51) – С. 13-17.

ПРОЦЕС ПЛАЗМОХІМІЧНОГО ОЧИЩЕННЯ ВОДИ

Петров С.В., *Бондаренко С.Г., *Саванчук О.В., *Янюк В.А.

Інститут газу НАН України, vizana@voliacable.com

* Національний технічний університет України «КПІ», sgb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

З екологічного погляду сталий розвиток повинен забезпечувати цілісність біологічних і фізичних природних систем. Деградація природних ресурсів, забруднення навколишнього середовища скорочують здатність екологічних систем до самовідновлення. Вода як частина природи і одночасно як природний ресурс є одним з найважливіших об'єктів стосовно економічних і соціальних аспектів сталого розвитку. На свої потреби людство використовує головним чином прісні води. Їх об'єм складає трохи більше 2% гідросфери, причому розподіл водних ресурсів по земній кулі надто нерівномірний. Недолік води посилюється погіршенням її якості. Щорічно у всьому світі, а також і в Україні мільярди тонн твердих, пастоподібних, рідких, газоподібних відходів надходить в біосферу, наносячи тим самим не виправну втрату як живій, так і неживій природі. До 50% річкової води щороку піддається техногенній дії, у тому числі і в результаті скидання великої кількості стічних вод. У глобальних масштабах змінюється кругообіг води і газовий баланс в атмосфері. Небезпечні речовини впливають на живі організми, зокрема на генетичному рівні, що призводить до ураження цілого ряду поколінь організмів. За даними Всесвітньої організації охорони здоров'я від використання неякісної питної води щороку в світі страждає кожна десята людина. За прогнозами вчених, через 15 - 20 років найважливішим ресурсом на планеті стане питна вода. І ефективність економіки майбутнього визначиться не тільки запасами її джерел, але і технологічним рівнем їх використання.

Вибір кращих і доступних технологій очищення води для проектувальників є досить складною задачею, що обумовлена різноманітністю забруднюючих речовин в стічній воді і високими вимогами, що пред'являються до якості її очистки. На сьогоднішній день існує декілька основних методів очищення. Їх застосування залежить від ступеня забруднення води, наявності шкідливих домішок, а також від кожної конкретної ситуації, в якій вони використовуються. Кожному типу стічних вод відповідає метод або група методів, що придатні для їх очистки. В той же час, багато методів очистки стічних вод дозволяють видаляти один або декілька типів забруднень, що і застосовується при проектуванні і будівництві установок очистки води. У багатьох випадках стічні води промислових