

Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України «КПІ»
Хіміко-технологічний факультет НТУУ «КПІ»

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

Київ 13-15 травня 2014 року

ЗБІРНИК НАУКОВИХ СТАТЕЙ

Четвертої міжнародної
науково-практичної конференції



Київ – 2014

УДК 004.94(082)
ББК 32.97я43
К63

Друкується за рішенням Вченої Ради Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут» Міністерства освіти і науки України

Відповідальні за випуск

Т.В. Бойко
Ю.О. Безносик

Редакційна колегія

Кандидат технічних наук, доцент Бойко Т.В.
Кандидат технічних наук, доцент Безносик Ю.О.
Кандидат технічних наук, доцент Бугаєва Л.М.

Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2014: Збірник наукових статей Четвертої міжнар. наук.-практ. конф. – Київ: НТУУ «КПІ», 2014 – 326 с.

ISBN 978-617-696-221-2

Збірник містить наукові статті Четвертої міжнародної науково-практичної конференції «Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2014» за такими основними напрямками: комп'ютерна підтримка виробничих процесів, комп'ютерне моделювання хіміко-технологічних та біохімічних процесів і систем, комп'ютерне моделювання в хімії та комп'ютерні методи синтезу нових речовин, комп'ютерне моделювання природоохоронних процесів, сталий розвиток регіонів, комп'ютерно-інформаційні технології в багаторівневій вищій освіті.

Доповіді рецензовані і редаговані Програмним комітетом конференції КМХТ-2014.

ISBN 978-617-696-221-2

© Автори тез доповідей, 2014
© Національний технічний університет України
«КПІ», укладання, оформлення, 2014

УДК 504.7.064.3:614(083,74)

ЗВЕДЕНА МЕТОДОЛОГІЯ ОЦІНКИ ВПЛИВУ ЖИТТЄВОГО ЦИКЛУ ПРОДУКТУ

Бендюг В.І., Комариста Б.М., Бондаренко О.С.

СВОДНАЯ МЕТОДОЛОГИЯ ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА ПРОДУКТА

Бендюг В.И., Комаристая Б.Н., Бондаренко Е.С.

SUMMARY OF THE LIFECYCLE IMPACT ASSESSMENT OF PRODUCT SYSTEM METHODOLOGY

Bendyug V., Komarysta B., Bondarenko E.

Національний технічний університет України «КПІ», Київ
angel2nika@gmail.com

Робота присвячена оцінці впливу життєвого циклу продукційної системи на навколишнє природне середовище та здоров'я людини. Запропонована методологія оцінки впливу життєвого циклу продукту з урахуванням п'яти складових, які приведені до єдиної безрозмірної шкали оцінки від 0 до 1 за допомогою функції бажаності Харрінгтона.

Ключові слова: життєвий цикл, продукційна система, індексна оцінка, оцінка впливу життєвого циклу, сталий розвиток

Работа посвящена оценке влияния жизненного цикла производственной системы на окружающую среду и здоровье человека. Предложена методология оценки влияния жизненного цикла продукта с учетом пяти составляющих, которые приведены к единой безразмерной шкалы оценки от 0 до 1 с помощью функции желательности Харрингтона.

Ключевые слова: жизненный цикл, производственная система, индексная оценка, оценка влияния жизненного цикла, устойчивое развитие

The thesis is focused on assessing the impact of the life cycle of product system on the environment and human health. The methodology was proposed to assess the impact of the product life cycle based on five components. The components were converted to a single-dimensional rating scale from 0 to 1 using the Harrington desirability function.

Keywords: life cycle, product system, index score, life cycle impact assessment, sustainable development

Вступ

Розвиток виробництва і зростання масштабів господарської діяльності, в ході яких людина використовує дедалі більшу кількість природних ресурсів, зумовлюють тотальне посилення антропогенного тиску на довкілля та порушення рівноваги в навколишньому природному середовищі (НПС).

Відповідно до концепції сталого розвитку (СР) і ролі кожного підприємства в життєдіяльності країни, підприємства повинні прагнути до впровадження стійко

функціонуючих високотехнічних, екологічно безпечних технологій, здатних забезпечувати випуск продукції, яка задовольняє вимогам міжнародних стандартів шляхом врахування всіх стадій життєвого циклу (ЖЦ) продукції, в тому числі стадії використання ресурсів, стадії споживання та стадії утилізації. Важливість проблеми охорони навколишнього середовища та можливих впливів, пов'язаних з виготовленням і споживанням продукції, підвищує інтерес до розробки методів, спрямованих на зниження цих впливів. Одним з методів, що розробляються для цієї мети, є оцінка життєвого циклу (ОЖЦ).

Оцінка сталості ресурсоспоживання життєвого циклу продукту

Оцінювання природно-відновлювальної характеристики продукційної системи (ПС) пропонується проводити за допомогою порівняння витрат на «вироблення – споживання – видалення» продукту протягом його ЖЦ і витрат на відновлення використаних ресурсів, природних систем й здоров'я людини [1]:

$$J_{STU} = \frac{C_{RCS} + C_{PRD}}{C_{NRG} + C_{HLZ} + C_{EST}}, \quad (1)$$

де J_{STU} – матеріальний індекс сталого ресурсоспоживання; C_{RCS} – витрати на сировину, у.о.; C_{PRD} – витрати з вироблення, споживання і видалення продукту, у.о.; C_{NRG} – витрати з відновлення енергоресурсів, мінеральних ресурсів і т.п., додаткова енергія необхідна в майбутньому на видобування ресурсів, у.о.; C_{HLZ} – витрати з відновлення здоров'я людини, у.о.; C_{EST} – витрати з відновлення екосистем, у.о.

Екологічно сталою є така система з точки зору збереження природно-відновлювального потенціалу, для якої $J_{STU} < 1$ для розглядуваної ПС. Запропонований індекс сталого ресурсоспоживання є оцінкою необхідних витрат на підтримування екологічної сталості ПС, і може бути використаний для порівнювання варіантів ПС, прийняття рішень для розроблення нових продуктів та вдосконалення існуючих.

Для приведення до єдиної безрозмірної шкали оцінювання запроваджено унітарний індекс сталого ресурсоспоживання I_{SUR} (табл. 1):

$$I_{SUR} = \exp(-\exp(-2,452 - 1,976 \cdot J_{STU})). \quad (2)$$

Оцінка шкідливого впливу життєвого циклу продукту

Для оцінки шкідливого впливу ЖЦ продукту ми пропонуємо врахувати набір індикаторів категорій захисту компонентів НПС та здоров'я людини, які в подальшому зводяться до індексу шкідливості продукту протягом його ЖЦ [2].

Визначення індикаторів категорій впливу пропонується здійснювати з нормалізацією індикаторів підкатегорій та рівноцінним зважуванням згідно (4):

$$J_{IMP_k} = \sum_i (J_{SIM_i}) / k_{NRM_i}, \quad (4)$$

де J_{IMP_k} – значення індикатору для k -ї категорії впливу; J_{SIM_i} – значення індикатору для i -ї підкатегорії впливу; k_{NRM_i} – коефіцієнт нормалізації для i -ї підкатегорії впливу.

Для отримання індикаторів категорій захисту компонентів НПС використана процедура групування:

$$J_{PTC_l} = \sum_k J_{IMP_k} \cdot K_{WCF_k}, \quad (5)$$

де J_{PTC_l} – значення індикатору для l -ї категорії захисту; J_{IMP_k} – значення індикатору для k -ї категорії впливу; K_{WCF_k} – коефіцієнт зважування для k -ї категорії впливу.

Для визначення коефіцієнтів зважування користуються принципом «близькість до цілі». Цільові значення відповідають екологічним задачам Кіотського протоколу, Декларації тисячоліття, національним стратегіям ЄР або екологічної політики країни / групи країн.

Індекс шкідливості продукту J_{HSD} дорівнює сумі індикаторів категорій захисту:

$$J_{HSD} = \sum_l J_{PTC_l} = J_{HLT} + J_{ECS} + J_{CLT} + J_{RCS}, \quad (6)$$

де J_{PTC_l} – значення індикатору віднесене для l -ї категорії захисту; J_{HLT} – індекс шкоди здоров'ю людини; J_{ECS} – індекс шкоди екосистемам; J_{CLT} – індекс шкоди клімату; J_{RCS} – індекс шкоди природним ресурсам.

З метою приведення до єдиної безрозмірної шкали оцінювання запропонований унітарний індекс шкідливого впливу продукту I_{HIP} (табл. 1):

$$I_{HIP} = \exp(-\exp(1,135 - 3,293 \cdot 10^{-2} \cdot J_{HSD})). \quad (7)$$

Таким чином, унітарний індекс I_{HIP} дозволяє провести однозначне порівнювання декількох ПС за рівнем їх шкідливого впливу протягом ЖЦ.

Оцінка виробничої енергоємності життєвого циклу продукту

Для оцінки енергоємності охорони НПС, енергоресурсів та ВПСМ (вихідна продукція, сировина, матеріал) на стадії виробництва продукту ми пропонуємо відповідні безрозмірні індексні показники:

$$J_{ECE} = \frac{e_e}{e - e_e}, \quad J_{ECG} = \frac{e_r}{e - e_r}, \quad J_{ECP} = \frac{e_m}{e - e_m}, \quad (9)$$

де J_{ECE} – індекс енергоємності охорони НПС під час виробництва продукту; J_{ECG} – індекс енергоємності енергоресурсів, необхідних для виробництва продукту; J_{ECP} – індекс енергоємності ВПСМ, необхідних для виробництва продукту; e – повна енергоємність продукції у МДж/НО (натуральні одиниці) виміру продукту; e_r – повна енергоємність енергоресурсів, необхідних для виробництва продукту, МДж/НО продукту; e_m – повна енергоємність вихідної продукції, сировини та матеріалів, необхідних для виробництва продукту, МДж/НО продукту; e_e – повна енергоємність охорони НПС під час виробництва продукту, МДж/НО продукту.

На основі вище наведених індексних показників розрахуємо загальний індекс енергоємності ПС J_{ENT} :

$$J_{ENT} = \sqrt[3]{J_{ECE} \cdot J_{ECG} \cdot J_{ECP}}. \quad (10)$$

Отримане значення індексу енергоємності J_{ENT} за допомогою функції бажаності Харінгтона переводимо до стандартної безрозмірної шкали бажаності і отримуємо унітарний індекс виробничої енергоємності ПС (табл. 1):

$$I_{NRG} = \exp(-\exp(1,135 - 3,293 \cdot J_{ENT})). \quad (11)$$

Оцінка виробничого забруднення життєвого циклу продукту

Для оцінки виробничого забруднення як стадії життєвого циклу продукту нами запропоновано розділити його на три складові: забруднення поверхневих вод,

атмосфери та ґрунтів.

Скиди за одиницю часу (рік, доба) на одиницю продукту в поверхневій воді встановлюють за індексом забруднення поверхневих вод J_{PSW} :

$$J_{PSW} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{E_{WTR_i}}{\Gamma DC_i} \right) + \frac{1}{12} \sum_{j=1}^{12} \left(\frac{T_{WSW_j}}{T_{AWB_j}} \right), \quad (12)$$

де E_{WTR_i} – маса i -ї небезпечної речовини, що потрапляє в стічні води, т/рік; ΓDC_i – максимальна маса i -ої забруднюючої речовини, що дозволена до надходження у водний об'єкт із стічними водами, т/рік; T_{WSW_j} – фактична середньомісячна температура стоків за j -й місяць року, °C; T_{AWB_j} – допустима середньомісячна температура стоків за j -й місяць року, °C; n – кількість забруднюючих речовин у стічних водах.

Для зведення до єдиної шкали оцінювання розраховуємо унітарний індекс забруднення поверхневих вод I_{SRW} ($0 \leq I_{SRW} \leq 1$):

$$I_{SRW} = \exp(-\exp(0,8712 - 0,3952 \cdot J_{PSW})). \quad (15)$$

Для оцінки рівня забруднення атмосфери при виробництві одиниці продукції запропоновано індекс забруднення атмосфери J_{APL} :

$$J_{APL} = \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{E_{ATM_i}}{\Gamma DB_i} \cdot \sum_{j=1}^m IZA_j}, \quad (16)$$

де E_{ATM_i} – кількість i -ї забруднюючої речовини, що потрапляє в атмосферу, кг/доба; ΓDB_i – гранично допустимий викид в атмосферу, кг/доба; n – кількість забруднюючих речовин; IZA_j – парціальний індекс забрудненості атмосфери j -ю речовиною; m – кількість забруднюючих речовин з найбільшим значенням IZA ($m = 5$).

Для єдиної шкали оцінки надано унітарний індекс забруднення атмосфери I_{ARP} :

$$I_{ARP} = \exp(-\exp(0,5748 - 3,952 \cdot 10^{-2} \cdot J_{APL})). \quad (17)$$

При оцінюванні рівня забруднення ґрунтів запропоновано індекс забруднення ґрунтів J_{SPL} :

$$J_{SPL} = \sum_{i=1}^n \frac{C_i}{\Gamma DK_i}, \quad (18)$$

де C_i – фактична концентрація i -го хімічного компонента в ґрунті; ΓDK_i – гранично допустима концентрація i -ого хімічного компонента в ґрунті; n – кількість забруднюючих речовин.

Для зведення до єдиної шкали оцінювання розраховують унітарний індекс забруднення ґрунтів I_{SCT} ($0 \leq I_{SCT} \leq 1$):

$$I_{SCT} = \exp(-\exp(0,8712 - 0,3952 \cdot J_{SPL})). \quad (19)$$

Вплив продукту на стадії виготовлення на НПС оцінюють за допомогою унітарного індексу виробничого забруднення НПС I_{PLT} (табл. 1):

$$I_{PLT} = \sqrt[3]{I_{SRW} \cdot I_{ARP} \cdot I_{SCT}}. \quad (20)$$

Оцінка ефективності використання природних ресурсів протягом життєвого циклу продукту

Для оцінки ресурсоефективності етапу виробництва продукту пропонується враховувати кількість сировинних ресурсів, необхідних для виробництва одиниці продукції за допомогою індексу ресурсоефективності J_{REF} :

$$J_{REF} = \frac{\sum_{i=1}^n M_{RWM_i}}{m_{PRD} \cdot n}, \quad (21)$$

де m_{PRD} – маса одиниці продукції, кг; M_{RWM_i} – маса сировини i -го виду, що була витрачена на виготовлення одиниці продукції, за одиницю часу, кг/доба; n – кількість одиниць продукції, які виготовлені за одиницю часу, доба⁻¹.

Для приведення індексу J_{REF} до єдиної шкали оцінювання з межами від 0 до 1, запропоновано використати унітарний індекс ресурсоефективності I_{RSE} :

$$I_{RSE} = \exp(-\exp(0,97 - 0,247 \cdot J_{REF})), \quad (22)$$

Час розкладу в природі складових продукту та час корисного використання продукту визначають за індексом часу корисного використання продукту J_{ULF} :

$$J_{ULF} = \frac{\sum_{i=1}^n t_{DCM_i}}{t_{LFT} \cdot n}, \quad (23)$$

де t_{LFT} – час служби продукції, років; t_{DCM_i} – час повного розкладу в природі i -го складового компоненту продукту, років; n – кількість складових з тривалим часом розкладу в природі.

На основі індексу часу корисного використання продукту отримують унітарний індекс часу корисного використання продукту I_{USF} ($0 \leq I_{USF} \leq 1$):

$$I_{USF} = \exp(-\exp(0,97 - 0,247 \cdot J_{ULF})). \quad (24)$$

Для оцінки рівня утворення відходів на стадії ЖЦ як при виробництві продукту, так і на стадії його утилізації з урахуванням можливості вторинної переробки, повторного використання чи захоронення, застосовано індекс утворення відходів:

$$J_{WSG} = \frac{2 + k_{RCL}}{1 + 2 \cdot k_{RCL}} \cdot (2 \cdot k_{WST} \cdot k_{DSP} + 0,5 \cdot k_{WST} \cdot (1 - k_{DSP})), \quad (26)$$

де k_{WST} – коефіцієнт утворення відходів; k_{RCL} – коефіцієнт (доля) вторинної переробки; k_{DSP} – коефіцієнт (доля) захоронення або спалювання відходів.

Оцінка ступеню утворення відходів під час ЖЦ продукту за єдиною безрозмірною шкалою визначена унітарним індексом утворення відходів I_{WST} ($0 \leq I_{WST} \leq 1$):

$$I_{WST} = \exp(-\exp(0,7583 - 0,2823 \cdot J_{WSG})). \quad (27)$$

Загальний рівень витрат на утилізацію та переробку продукту та відходів, які утворені на етапі його виробництва, встановлюється за унітарним індексом ефективності використання природних ресурсів I_{ENR} (табл. 1).

$$I_{ENR} = \sqrt[3]{I_{RSE} \cdot I_{USF} \cdot I_{WST}}. \quad (28)$$

Зведена оцінка впливу життєвого циклу продукту

З використанням запропонованих індексних показників оцінки впливу стадій ЖЦ продукту нами створено унітарний індекс оцінки впливу життєвого циклу

СТАЛИЙ РОЗВИТОК РЕГІОНІВ

(ОВЖЦ) продукту I_{LCLIA} , який розраховується на основі наступної залежності (табл. 1).

$$I_{LCLIA} = \sqrt[5]{I_{SUR} \cdot I_{NRG} \cdot I_{PLT} \cdot I_{ENR} \cdot I_{HIP}} \quad (29)$$

Висновки

Запропонована зведена методологія ОВЖЦ продукційної системи дозволить оцінювати загальний вплив продукту протягом всього його ЖЦ на навколишнє середовище та здоров'я людини. За допомогою даної методології можна проводити порівняльний аналіз різних продуктів чи ПС на рівні їх загального впливу на НПС протягом усього ЖЦ. Це в свою чергу дозволить удосконалювати як технологічні системи так і продукційні системи з метою отримання продукту з більшим рівнем сталості та ощадним відношенням до НПС та людини.

Література

1. Статюха Г.О. Оцінювання сталості ресурсоспоживання продукційних систем на прикладі виробництва рулонних покрівельних матеріалів / Г.О. Статюха, І.М. Джигирей, Б.М. Комариста // Вісник Одеської держ. акад. будівництва і архітектури. - Вип. 36. - 2009. - С. 377-386.
2. Статюха Г.О. Зведена методика оцінювання шкідливого впливу продукції на довкілля / Г.О. Статюха, І.М. Джигирей, Б.М. Комариста // Східно-Європ. журнал передових технологій. Математика та кібернетика – фундаментальні і прикладні аспекти. – 2009. – № 1/6 (37). – С. 8-20.

Таблиця 1

Відповідність значень унітарних індексів рівню впливу ЖЦ продукту на НС та здоров'я людини

Значення унітарного індексу	$0 \leq I_i < 0,2$	$0,2 \leq I_i < 0,37$	$0,37 \leq I_i < 0,63$	$0,63 \leq I_i < 0,8$	$0,8 \leq I_i < 1$
I_{SUR}	<i>Рівень сталості ресурсоспоживання продукційної системи</i>				
	еталонний стан	стан добрий	стан задовільний	стан незадовільний	критичний стан
I_{NRG}	<i>Рівень виробничої енергоємності продукту</i>				
	дуже низький	низький	середній	високий	дуже високий
I_{PLT}	<i>Рівень виробничого забруднення НПС</i>				
	незабруднене	слабо забруднене	середньо забруднене	сильно забруднене	дуже сильно забруднене
I_{ENR}	<i>Рівень ефективності використання природних ресурсів</i>				
	дуже високий	високий	середній	низький	дуже низький
I_{HIP}	<i>Рівень шкідливого впливу продукту</i>				
	дуже низький	низький	середній	високий	дуже високий
I_{LCLIA}	<i>Рівень впливу життєвого циклу продукту</i>				
	дуже низький	низький	середній	високий	дуже високий