

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

*УСПЕХИ*  
*В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ*  
*ТЕХНОЛОГИИ*

**Том XXXVII**

**№ 4**

Москва  
2023

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 XXXVII,  
У78 № 4 (266). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2023. – 166 с.

В сборнике «Успехи в химии и химической технологии» опубликованы статьи по актуальным вопросам в области цифровой технологии и химического инжиниринга. Представлены работы по направлениям: информационные технологии и компьютерное моделирование; анализ энергоресурсоэффективности и управление качеством; процессы, аппараты и инновационные материалы.

Материалы сборника были представлены для широкого обсуждения на конференции обучающихся факультета цифровых технологий и химического инжиниринга (ЦиТХИн), на которой студенты бакалавриата и магистратуры выступили с докладами о своей научной работе.

Сборник находится в открытом доступе, научные статьи включены в систему Российского индекса научного цитирования (РИНЦ) на платформе Elibrary.ru.

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

УДК 66.01-52  
ББК 24. 35



## Роль кафедры Логистики и экономической информатики в обеспечении устойчивого развития Российского химико-технологического Университета имени Д.И. Менделеева

Искренно поздравляю всех профессоров, преподавателей, научных сотрудников, студентов, аспирантов и докторантов кафедры Логистики и экономической информатики (ЛогЭКИ) с 25-летием кафедры, который отмечается в год 125-летнего юбилея со дня основания РХТУ имени Д.И. Менделеева.

25-летняя история кафедры ЛогЭКИ (организатор кафедры, заведующий кафедрой ЛогЭКИ с июня 1998 г. по декабрь 2021 г. – академик РАН В.П. Мешалкин) начинается с создания в июне 1998 года в РХТУ имени Д.И. Менделеева первого в России Учебно-методологического центра «Логистики, эконометрики и экономической информатики химических, нефтеперерабатывающих, нефтехимических и биохимических предприятий» (УМЦ Логистики). УМЦ Логистики создан при выполнении международного проекта Т-ЖЕР № 10301–97 «Разработка новых учебных планов и программ по

прикладной экономике химических производств и охране окружающей среды для обучения магистрантов и аспирантов в РХТУ» (04.1997-04.2001) по программе TEMPUS (Trans-European Mobility Program for University Studies).

Кафедра ЛогЭКИ создана по инициативе академика РАН Мешалкина В.П., под патронатом ректора РХТУ, академика РАН П.Д. Саркисова при организационно-финансовой поддержке транс-европейской программы оказания технической помощи России в области совершенствования высшего образования «TEMPUS-TACIS» Европейского Фонда профессионального обучения Европейского Союза. Кафедра ЛогЭКИ сформирована в 2001 г. на основе преобразования Учебно-методологического центра Логистики и экономической информатики, открытого в РХТУ в июне 1998 г. при организационно-финансовой поддержке программы TEMPUS

В декабре 2006 г. на основе кафедры ЛогЭКИ по предложению Президента РХТУ, академика РАН П.Д. Саркисова и ректора Университета, профессора В.А. Колесникова создан на правах факультета «Международный Институт Логистики Ресурсосбережения и Технологической Инноватики (МИ-ЛРТИ)» директор МИ-ЛРТИ Мешалкин В.П. В его состав вошли 3 кафедры: Логистики и экономической информатики (зав. каф. Мешалкин В.П), Управления технологическими инновациями (зав. каф. Меньшиков В.В) и компьютерного проектирования (зав. каф. Гартман Т.Н.).

Коллектив кафедры ЛогЭКИ многие годы успешно проводит научные исследования в области нового научного направления: «Теоретические основы инжиниринга и логистики энергоресурсоэффективных экологически безопасных химико-технологических систем глубокой переработки сырья и техногенных отходов», которое предложено и успешно развивается академиком РАН В.П. Мешалкиным.

Магистры-выпускники кафедры ЛогЭКИ, получая один диплом, приобретают уникальную совокупность трех профессиональных квалификаций: «технолог, логист и организатор-администратор».

Важнейшей движущей силой достигнутых за 25 лет кафедрой ЛогЭКИ успехов в учебно-методической, образовательной и научно-исследовательской деятельности является человеческий капитал дружного коллектива кафедры.

С января 2022 года по настоящее время заведующей кафедрой ЛогЭКИ является доцент, к.т.н. Юлия Михайловна Аверина – творческий ученый в области организации инновационных энергоресурсоэффективных систем водоснабжения промышленных предприятий; активный руководитель результативной учебной и научно-исследовательской работы коллектива кафедры ЛогЭКИ.

В заключение искренно желаю всему дружному творческому коллективу кафедры ЛогЭКИ оптимального здоровья, новых важных результатов в оригинальных научных исследованиях, успехов в подготовке высококвалифицированных кадров, специалистов, бакалавров, магистров, кандидатов и докторов наук, которые будут активно участвовать в обеспечении устойчивого социально-экономического развития, безопасности и технологического суверенитета Российской Федерации.

**И.о. ректора РХТУ им. Д.И.Менделеева, профессор, д.т.н. И.В. Воротынецв**



**Основные результаты научно-исследовательской и образовательной деятельности кафедры логистики и экономической информатики (к 25-летию кафедры ЛогЭКИ)**

Благодарю и.о. ректора РХТУ имени Д.И. Менделеева д.т.н., профессора И.В. Воротынцева за теплое поздравление и добрые пожелания коллективу профессоров, преподавателей, научных сотрудников, студентов, аспирантов и докторантов кафедры Логистики и экономической информатики (ЛогЭКИ) в связи с 25-летием кафедры.

Важнейшим начальным этапом научных исследований кафедры ЛогЭКИ совместно с Международным Институтом Логистики Ресурсосбережения и Технологической Инноватики (МИ-ЛРТИ) явилось успешное выполнение с июля 2001 г.

по июль 2004 г. транс-европейского научно-исследовательского проекта ICA2- СТ-2001-10005 «Разработка экспертных систем принятия решений по уменьшению выбросов и управлению качеством окружающей среды в промышленных регионах» программы INCOCOPERNICUS-2. В составе консорциума этого проекта: РХТУ им. Д.И. Менделеева (Россия), Харьковский политехнический институт (Украина), ОАО «Щекиноазот» (Россия), Отделение инженерной химии и технологических систем им. Ж.Б. Бонино Генуэзского университета (DICheP, Италия), Институт науки и технологий Манчестерского университета (UMIST, Великобритания), Компания Paragon Ltd. (Греция, г. Афины), Паннония Университет (г. Веспрем, Венгрия). Координатор проекта д-р, профессор Йржи Клемеш (UMIST); научный руководитель проекта—академик РАН В.П. Мешалкин.

**Результаты фундаментальных и прикладных научных исследований, выполненные на кафедре ЛогЭКИ, практически применены для разработки:** малоотходных энергосберегающих ХТС, систем оптимального управления, обеспечения надёжности и экологической безопасности ХТС производств карбамида, слабой азотной и серной кислот, аммиака, аммофоса, аммиачной селитры, хлора и каустической соды, хлорметанов и перхлоруглеродов, органических красителей, бензинов и минеральных масел;

– проектов рациональных бизнес–процессов и высокоэффективных систем организационного управления крупными компаниями химического, нефтехимического и топливно–энергетического комплекса.

Важнейшей движущей силой достигнутых за 25 лет кафедрой ЛогЭКИ успехов в образовательной и научной деятельности является человеческий капитал дружного коллектива кафедры, который представляет собой совокупность уникальных компетентностей и жизненной творческой энергии **профессоров, докторов наук** – Бутусова О.Б., Белозерского А.Ю., Кравченко К.А., Прокофьевой Т.А., Челнокова В.В.; **доцентов, кандидатов наук** – Меньшовой И.И., Савинкова С.В.; **доцента** Ходченко С.М.; **ведущих инженеров** – Олевинской Л.М. и Петуховой Е.В.; **старших преподавателей** – Галиевой Д.Д., Заходякина Г.В.; **докторантов** – Авериной Ю.М., Болдырева В.С., Глушкова И.В., Кантюкова Р.Р., Ленченкова Н.С., Остаха С.В., Петрова Д.Ю.; **аспирантов** –Котовой Д.М., Заболотной Е., Немкова А.Н., Раткина И.М.

Уверен, что дружный высококвалифицированный коллектив кафедры ЛогЭКИ совместно с профессорами ведущих кафедр РХТУ им. Д.И. Менделеева будет всегда активно участвовать в решении актуальных научно-исследовательских проблем в условиях цифровизации экономики по обеспечению экологической безопасности, устойчивого социально-экономического развития и технологической независимости Великой России.

**В. П. Мешалкин академик РАН, директор НОЦ  
Международного Института Логистики  
Ресурсосбережения и Технологической  
Инноватики, профессор кафедры ЛогЭКИ  
РХТУ им. Д.И.Менделеева**



В начале лета 2023 года состоялась 4-я конференция обучающихся факультета цифровых технологий и химического инжиниринга. Традиционно на конференции представляют свои научные работы студенты выпускных курсов, которым в скором времени выступать перед государственной экзаменационной комиссией и доказывать, что они достойны присвоения квалификации бакалавра или магистра. Однако, все больше мы видим и работ от студентов младших курсов, что не может не радовать. Для многих из них — это первый опыт обсуждения среди широкой аудитории.

Проведение научно-практической конференции, посвященной исследованиям новых цифровых платформ, технологий и решений, играет важную роль в жизни университета и имеет большое значение для развития молодежного научного сообщества. Подобные научные конференции — великолепная возможность для студентов,

преподавателей и ученых совместно обсуждать возникающие идеи, анализировать результаты, а также найти друг друга для сотрудничества над новыми проектами.

Желаю всем молодым ученым факультета ЦиТХИн и Менделеевского университета вдохновляющей, продуктивной и эффективной научной деятельности!

**Сергей Павлович Дударов**  
**Декан факультета ЦиТХИн**  
**РХТУ им. Д.И.Менделеева**



В 2023 году состоялась 4-я конференция обучающихся факультета цифровых технологий и химического инжиниринга. Она была посвящена 25-летию кафедры логистики и экономической информатики.

Объединение цифровых технологий, инноватики и логистики – это мощный инструмент для устойчивого развития экономики. Благодаря внедрению инновационных технологий в производство реального сектора экономики Российской Федерации значительно повышается эффективность производственных процессов, снижаются операционные и инвестиционные

затраты. Использование новейших технологий положительно сказывается на повышении качества опытных образцов и прототипов, снижении стоимости опытно-конструкторской работ. Переход к искусственному интеллекту, к технологиям, использующим машинное обучение, возлагает серьезную ответственность на образовательный блок. Поэтому так важно уже сегодня привлекать студентов к научной деятельности.

**Аверина Юлия Михайловна,**  
**заведующий кафедры логистики и экономической информатики**  
**РХТУ им. Д.И.Менделеева**

# Содержание

## Конференция обучающихся факультета цифровых технологий и химического инжиниринга

Колесников А.М., Митричев И.И.

Нейросетевой подход для предсказания вязкости и плотности смазочных масел при растворении в них газов ..... 10

Молин М.М., Савицкая Т.В.

Разработка программного приложения для расчета надежности комбинированных структур ..... 13

Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Л.Н. Хандожко, М.В. Шостаковский

Анализ и моделирование процесса очистки низших олефинов от ацетиленовых углеводородов на палладиевых нанокатализаторах..... 16

Лебедев М.Д., Бутусов О.Б., Колмаков А.Г.

Прогнозирование свойств композиционных материалов по микрофотографиям их структуры с помощью вейвлет-анализа..... 20

Артемьева У.В., Спешиллов И.О.

Спектрофотометрическое исследование состава бромсодержащего электролита ..... 26

Рыбакова А.Л., Спешиллов И.О.

Исследование состава броматного электролита методом циклической вольтамперометрии ..... 29

Павлов И.Р., Кулаков Д.Г., Егоров М.С., Иванов С.И.

Разработка веб-приложения интерпретатора натуральной речи на жестовый язык с конвейером анимации жестов ..... 32

Егоров М.С., Павлов И.Р., Кулаков Д.Г., Иванов С.И.

Разработка программного модуля обработки видеоданных нейронными сетями для получения ключевых точек положения тела человека в пространстве..... 36

Кулаков Д.Г., Егоров М.С., Павлов И.Р., Иванов С.И.

Внутреннее устройство кроссплатформенного конвейера анимации авто сгенерированных анимационных файлов ..... 39

Гайдамовичюте В.В., Никитин Е.В., Индейкина В.А., Шишканова К.И., Василенко В.А., Филиппова Е.Б., Бродский В.А., Колесников А.В., Кольцова Э.М.

Компьютерное проектирование и моделирование процесса очистки хромсодержащих промышленных отходов ..... 41

Никитин Е.В., Гайдамовичюте В.В., Индейкина В.А., Шишканова К.И., Василенко В.А., Филиппова Е.Б., Бродский В.А., Колесников А.В., Кольцова Э.М.

Компьютерное проектирование и моделирование процесса очистки циансодержащих промышленных отходов ..... 44

Бурцев В.Д., Митричев И.И. Отбор значимых признаков для создания эффективной модели классификации гепатотоксичных соединений с использованием методов машинного обучения при помощи комбинированного набора данных.....	48
Волкова М.А., Петухова Е.В. Гидравлический разрыв пласта - высокоэффективный метод интенсификации добычи нефти.....	52
Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Шевченко А.А. Русаков Д.А., Караулов Р.А. Моделирование процесса неокислительного дегидрирования пропана в реакторе со стационарным слоем катализатора.....	55
Гашенко В.И., Лебедев И.В. Моделирование структуры аэрогелей с помощью моделей на основе кривых безье и кластер-кластерной агрегации, ограниченной диффузией .....	59
Маслов М.С. Горбунов М.А., Сафронов О.А., Комарова С.Г., Кунилова И.В. Анализ элементного и гранулометрического состава золы уноса в процессах подготовки и выщелачивания ценных компонентов.....	62
Золина П.В., Семенов Г.Н., Шанева А.С. Проектирование базы данных отчетов научно-исследовательских работ кафедры вуза.	67
Сулханов Я.Д., Цыганков П.Ю., Абрамов А.А. Разработка конструкции установки для реализации процесса 3D-печати с использованием гетерофазной системы .....	70
Индейкина В.А., Шишканова К.И., Никитин Е.В., Гайдамовичюте В.В., Василенко В.А., Филиппова Е.Б., Бродский В.А., Колесников А.В., Кольцова Э.М. Трёхмерная визуализация процесса переработки опасных промышленных отходов.....	74
Шишканова К.И., Индейкина В.А., Гайдамовичюте В.В., Никитин Е.В., Василенко В.А., Филиппова Е.Б., Бродский В.А., Колесников А.В., Кольцова Э.М. Компьютерное моделирование утилизации кислотно-щелочных отходов I-II класса опасности .....	77
Гакиев А.Л., Алешин М.А., Василенко В.А. Интерактивная виртуальная химическая лаборатория: интеграция объектов, разработка 3D-моделей .....	80
Шишов Н.О., Василенко В.А. Разработка 3D-моделей вспомогательного оборудования для виртуальной лаборатории .....	83
Морякова А.Э., Сорокина П.Д., Писаренко Е.В., Пономарев А.Б. Модифицирование цеолитов ZSM-5 методом пропитки и исследование их активности и стабильности в реакции депарафинизации углеводородного сырья .....	86
Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Зайцева А.Р., Сомова Т.И. Моделирование процесса депарафинизации углеводородного сырья на нанокатализаторе Cu-ZSM-5, полученного методом ионного обмена.....	90

Ренжина В.И., Цакаева Л.И., Аверина Ю.М. Анализ китайского рынка нефтепродуктов и развитие каналов распределения в нем....	93
Цакаева Л.И., Ренжина В.И., Свистун М.С., Лебедев М.Д., Меньшова И.И. Обоснование создания Сибирского кластера на Приобском месторождении .....	96
Ренжина В.И., Аверина Ю.М. Особенности трансфера технологий с Китаем .....	99
Цакаева Л.И., Свистун М.С., Ренжина В.И., Манюкова И.И. Применения системы контроллинга для энерго- ресурсосбережение на производстве бензина .....	102
Куниевский В.В., Дударов С.П. Проектирование интерфейса пользователя программного обеспечения для нейросетевой кластеризации данных.....	105
Краснов Д.О., Сидоренко Н.В., Дьячков П.Н., Кольцова Э.М. Генерация электромагнитного поля в хиральных медных нанотрубках.....	109
Иванов А.А., Митричев И.И. Расчёт физико-химических свойств масел и хладагентов .....	112
Комарова Д.С., Мочалова М.С., Ловская Д.Д. Исследование процесса внедрения гидрохлорида лидокаина в частицы хитозанового аэрогеля для разработки местного гемостатического средства с анестезирующим эффектом.....	114
Купцова А.С., Михайлова П.Г. Разработка учебно-методических материалов для развития дисциплины «Универсальные программные средства решения математических задач» и реализация в Moodle.....	119
Казначеева А.А., Ставропольцева А.С., Меньшова И.И. Сорбенты на основе нетканых материалов в очистке промышленных стоков.....	123
Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Головань Е.Е., Балашова К.В. Исследование процесса депарафинизации углеводородного сырья на модифицированном цеолитсодержащем катализаторе в реакторе со стационарным слоем катализатора.....	126
Сакаллы А.С., Зубарев А.М. Анализ динамики малых инновационных предприятий России в период с 2011 года по 2022 .....	131
Фунтикова А.Р., Лебедев И.В. Использование метода QSPR для определения растворимости веществ в сверхкритических флюидах .....	134
Митрофанов С.А., Пашкин Е.А., Кислинская А.Ю., Цыганков П.Ю. Быстрое расширение сверхкритического раствора для микронизации рифабутина .....	137



Глушков И. В., Мешалкин В. П., Петухова Е. В. Разработка цифрового двойника ректификационных установок производства хлорбензола .....	141
Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Шумакова А.Д., Кочетова А.А. Анализ и моделирование процесса гидроизомеризации н-гексана на модифицированных цеолитах .....	145
Куниевский В.В., Дударов С.П., Матроскин А.Г. Влияние состава характеристических признаков на диагностику ухудшения слуха новорожденных в связи с перенесенным ковидом при нейросетевой кластеризации медицинских данных .....	148
Магеррамов Т.М., Митричев И.И. Прогнозирование растворимости хладагентов в смазочных маслах на основе уравнений состояния на языке Python .....	152
Осипов Г.А., Аверина Ю.М., Куценко А.С. Цифровизация жизненного цикла национального стандарта .....	155
Осипов Г.А., Аверина Ю.М., Куценко А.С. Актуальные проблемы обращения с отходами в Российской Федерации .....	158

УДК 004.032.26+532.13+531.75

Колесников А.М., Митричев И.И.

## Нейросетевой подход для предсказания вязкости и плотности смазочных масел при растворении в них газов

Колесников Артем Максимович – бакалавр 4-го года обучения кафедры информационных компьютерных технологий; artiom\_koliesnikov@mail.ru.

Митричев Иван Игоревич – кандидат технических наук, доцент кафедры информационных компьютерных технологий;

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

*Представлена нейросетевая модель для прогнозирования вязкости и плотности минерального масла ISO VG 32 при растворении в нем газов: HCFC-22, R-502. Описана архитектура нейронной сети и основные параметры её настройки. Выполнена оценка точности прогнозирования нейронной сети на тестовых данных с помощью различных метрик (MAE, MAPE).*

*Ключевые слова: ИНС, смазочные масла, прогнозирование, вязкость, плотность.*

## A neural network approach for predicting the viscosity and density of lubricating oils with dissolved gases

Kolesnikov A.M., Mitrichev I.I.

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

*We present a neural network model for predicting the viscosity and density of mineral oil ISO VG 32 when dissolving gases: HCFC-22, R-502. The architecture of the neural network and the main parameters of its adjustment are described. The estimation of neural network prediction accuracy on test data using different metrics (MAE, MAPE) is performed.*

*Key words: ANN, lubricating oils, prediction, viscosity, density.*

### Введение

Смазочные масла играют важную роль в поддержании эффективной работы различных механических систем. Они уменьшают трение и износ деталей, а также обеспечивают охлаждение и защиту поверхностей от коррозии. Однако, при растворении газов в смазочных маслах или изменении параметров (температуры, давления), свойства смазочного масла могут существенно изменяться, что может привести к снижению эффективности смазки и возникновению различных проблем. Точное определение вязкости и плотности смазочного масла имеет важное значение для инженеров и производителей, поскольку знание этих свойств позволяет выбрать наиболее подходящие смазочные материалы для оптимального и надежного функционирования систем [1].

Наиболее точным способом определения вязкости и плотности смазочного масла при растворении в нем газов, является их экспериментальное измерение при помощи таких приборов, как вискозиметр и ареометр, соответственно. Однако, такие замеры достаточно трудоемкие и занимают много времени и средств для подготовки образцов. Именно поэтому, для упрощения этого процесса, сокращения затрат времени и материальных ресурсов, разрабатывают и модифицируют различные математические методы расчета свойств газожидкостных смесей.

Для предсказания свойств смазочных масел при растворении в них газов часто используются традиционные методы, такие как уравнения состояния и корреляции [2], основанные на эмпирических моделях, которые требуют большого объема экспериментальных данных и сложных математических подходов. Однако, разработка и

калибровка таких моделей требуют значительных усилий и ресурсов. Кроме того, такие модели часто имеют ограничения в обобщении на новые составы смазочных масел и газов. В свете этих ограничений многие ученые и инженеры озадачены поиском альтернативных подходов для предсказания вязкости и плотности смазочных масел при растворении в них газов.

В последние годы модели, основанные на искусственных нейронных сетях, получили широкое распространение в различных областях, включая промышленность и науку [3]. Нейросетевой подход представляет собой альтернативный подход, основанный на машинном обучении. Он позволяет автоматически извлекать сложные зависимости из данных и строить модели, которые способны обобщаться на новые примеры.

В данной статье мы исследуем применение нейросетевого подхода для предсказания вязкости и плотности смазочных масел при растворении в них газов. Нейронные сети предоставляют гибкий и мощный инструмент, способный обрабатывать сложные зависимости между составом смазочных масел, газами и их физическими свойствами и предсказывать свойства смазочных материалов с высокой точностью [4]. Одним из основных преимуществ нейросетевого подхода является его способность работать с большим объемом данных. Кроме того, нейросетевой подход может быть применен для предсказания свойств на всем диапазоне значений, включая экстремальные условия, которые не учитываются в классических методах.

Важно отметить, что использование нейросетевого подхода требует наличия достаточного объема

качественных данных для обучения моделей. Это может включать данные о химическом составе смазочных масел, физических свойствах газов, а также результаты экспериментов и испытаний. Сбор и подготовка таких данных являются ключевыми шагами для успешной реализации нейросетевого подхода [5].

Использование нейросетевого подхода для предсказания свойств смазочных масел при растворении в них газов поможет сократить затраты на проведение дорогостоящих экспериментов. Вместо того, чтобы физически исследовать каждую комбинацию смазочного масла и газа, можно обучить нейросеть на доступных данных и использовать ее для предсказания свойств новых комбинаций. Это позволяет экономить время и ресурсы, а также ускорить процесс разработки и тестирования новых смазочных материалов.

### Практическая часть

Была разработана нейросетевая модель для прогнозирования вязкости и плотности минерального масла ISO VG 32 при растворении в нем газов: HCFC-22, R-502. Нейронная сеть была написана на языке Python, с помощью библиотеки Keras, которая предоставляет простой и интуитивно понятный интерфейс для создания и обучения искусственных нейронных сетей различной архитектуры [6].

В качестве обучающей и тестовой выборки были взяты экспериментальные значения вязкости, плотности и состава жидкой фазы, полученные Cavestri при различных условиях – температуре и давлении [7]. Были оцифрованы экспериментальные графики и представлены в виде таблиц Excel. Затем все данные были нормализованы в пределах [0; 1]. Нейросетевая модель обучалась на 80% от этой выборки, а оставшиеся 20% данных были использованы в качестве тестовой выборки.

Построенная нейросетевая модель представляет собой двухслойный перцептрон с 6 входами и 2 выходами. Входы ИНС: "Температура, °C", "Давление, бар", "Массовая доля R-22 (исх.газ)", "Массовая доля R-115 (исх.газ)", "Массовая доля R-22 (жидк.ф.)", "Массовая доля R-115 (жидк.ф.)". Выходы ИНС: "Вязкость, сП", "Плотность, г/мл". Скрытый слой содержит 4 нейрона.

В качестве активационной функции использовалась «ReLU» (Rectified Linear Unit). Она выдает нулевой выход для всех отрицательных значений входа и линейный выход для всех положительных значений входа (1). Функция очень проста и быстро вычисляется, что делает ее вычислительно эффективной и популярной в глубоких нейронных сетях:

$$f(s) = \max(0, s) \quad (1)$$

где  $s$  – это взвешенная сумма входных значений и соответствующих весов нейронов в предыдущем слое.

Для настройки параметров нейронной сети во время обучения был выбран оптимизатор «Adam» (Adaptive Moment Estimation). Это оптимизатор стохастического градиентного спуска, который

автоматически адаптирует скорость обучения для каждого параметра на основе оценок первого и второго моментов градиента. Adam является комбинацией двух других оптимизаторов – AdaGrad и RMSprop.

Чтобы измерить, насколько хорошо модель выполняет свою задачу, были использованы метрики оценки «MAE» и «MAPE».

MAE (Mean Absolute Error) – средняя абсолютная ошибка. Она вычисляется как среднее арифметическое абсолютных разниц между истинными значениями и предсказанными значениями (2). Иными словами, MAE показывает, как сильно отклоняются предсказанные значения от истинных значений в среднем. Чем меньше значение MAE, тем лучше качество модели.

$$MAE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=0}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (2)$$

где  $n$  – количество примеров в наборе данных,

$y_i$  – истинное значение,

$\hat{y}_i$  – предсказанное значение.

MAPE (Mean Absolute Percentage Error) – средняя абсолютная процентная ошибка. Она вычисляется как среднее арифметическое абсолютных разниц между истинными значениями и предсказанными значениями, деленное на истинное значение (3).

$$MAPE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=0}^n \left( \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{\max(y_i, \varepsilon)} \right| \cdot 100\% \right) \quad (3)$$

где  $n$  – количество примеров в наборе данных,

$y_i$  – истинное значение,

$\hat{y}_i$  – предсказанное значение,

$\varepsilon$  – заменяет  $y_i$  в знаменателе, когда  $y_i = 0$ .

Нейронная сеть обучалась 500 эпох со скоростью обучения 0.01. Используя возможности библиотеки Keras была сохранена модель с наименьшей погрешностью по метрике MAPE во время всего процесса обучения. Для общей визуализации процесс обучения был выведен на график с помощью библиотеки Matplotlib (рис. 1).

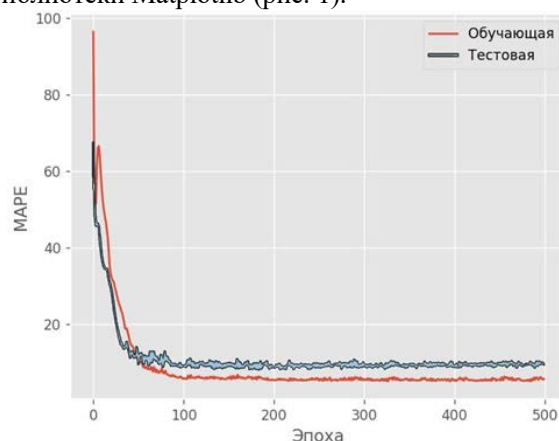


Рис. 1. Изменение метрики MAPE в процессе обучения нейронной сети

Обученная нейросетевая модель была протестирована на ранее неизвестных ей данных. С помощью обученной нейронной сети сделаны прогнозы вязкости и плотности при экспериментальных значениях температуры, а полученные результаты сопоставлены с экспериментальными (рис. 2).

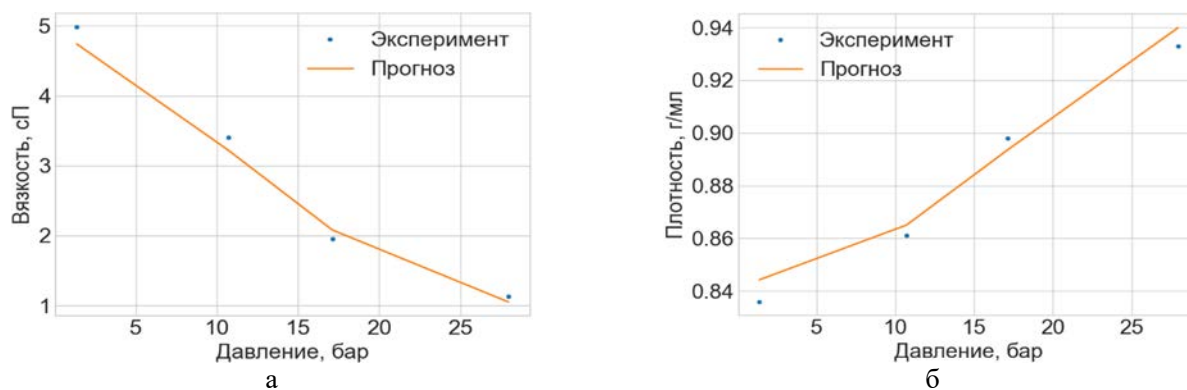


Рис. 2. Прогноз для масла ISO VG 32 / HCFC-22 при 80 °С; а – вязкость, б – плотность

Таким образом, погрешность прогноза данной нейросетевой модели по нормализованным значениям:  $MAPE(\text{Вязкость}) = 4.35\%$ ,  $MAPE(\text{Плотность}) = 5.13\%$ ; по денормализованным значениям:  $MAE(\text{Вязкость}) = 8.6874$  сП,  $MAE(\text{Плотность}) = 0.0064$  г/мл. Общая ошибка MAPE составляет 4.74 %, что является хорошим результатом.

#### Заключение

В данной работе сообщается о нейросетевом подходе для прогнозирования вязкости и плотности минерального масла ISO VG 32 при растворении в нем газов: HCFC-22, R-502. Средняя погрешность прогнозов моей модели составляет 4.74 % по метрике MAPE, что вполне подходит для решения реальных задач. Полученная модель может быть использована для предсказания изменения свойств смазочного масла ISO VG 32 в компрессорных установках при различных условиях работы, а именно: при температуре (-20; 125) °С и давлении (0.7; 33.7) бар, при использовании в качестве хладагента HCFC-22; при температуре (-10; 125) °С и давлении (1.7; 32.2) бар, при использовании в качестве хладагента R-502.

#### Список литературы

1. Youbi-Idrissi M. et al. Oil presence in an evaporator: experimental validation of a refrigerant/oil

mixture enthalpy calculation model // International Journal of Refrigeration – 2004. – V.27. – № 3 – P. 215-224.

2. Camporese R., Bigolaro G., Rebellato L. Calculation of thermodynamic properties of refrigerants by the Redlich-Kwong-Soave equation of state // International Journal of Refrigeration – 1985. – V. 8. – № 3 – P. 147-151.

3. Arcaklıoğlu E., Çavuşoğlu A., Erişen A. Thermodynamic analyses of refrigerant mixtures using artificial neural networks // Applied Energy. –2017. – V. 70. – P. 984-1001.

4. Şencan A., Köse I.I., Selbaş R. Prediction of thermophysical properties of mixed refrigerants using artificial neural network // Energy Conversion and Management – 2011. – V. 52. – № 2 – P. 958-974.

5. Дударов С. П., Папаев П. Л. Теоретические основы и практическое применение искусственных нейронных сетей. – 2014. – 104 с.

6. Официальный сайт библиотеки Keras [электронный ресурс]. URL: <https://ru-keras.com/home/> (дата обращения: 16.05.2023).

7. Cavestri R. C. Measurement of viscosity, density, and gas solubility of refrigerant blends in selected synthetic lubricants // The Air-Conditioning and Refrigeration Technology Institute. – 1995. — P. 196.

УДК 004.9-658.345

Молин М.М., Савицкая Т.В.

## Разработка программного приложения для расчета надежности комбинированных структур

Молин Марк Максимович – студент группы К-45; molinmark@mail.ru

Савицкая Татьяна Вадимовна - докт. техн. наук, профессор;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»,  
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрено созданное приложение с помощью языка Python. Функционал приложения позволяет рассчитывать показатели надёжности и производить отображение таких структур, как последовательно-параллельные, мостиковые, произвольные деревья отказов, а также позволяет провести анализ сигнатур.

Ключевые слова: надёжность, расчёт показателей надёжности, последовательно-параллельные структуры, мостиковые структуры, сигнатуры.

### Development of software applications for calculating the reliability of combined structures

Molin M.M., Savitskaya T. V.

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

The article discusses the created application using the Python language. The functionality of the application allows you to calculate reliability indicators and display structures such as series-parallel, bridge, arbitrary failure trees, and also allows you to analyze signatures.

Keywords: reliability, calculation of reliability indicators, series-parallel structures, bridge structures, signatures

### Введение

Python – это язык программирования, который широко используется в разработке программного обеспечения. Основными преимуществами Python являются его простота и большое количество встроенных и внешних библиотек. Данная статья посвящена разработке программного приложения, позволяющего рассчитывать надежность комбинированных структур. Для реализации использовались такие библиотеки, как itertools [1] – в качестве генератора различных комбинаций, graphviz [2] – для отрисовки заданных структур и сохранения в pdf формате, PyQt5 [3] – набор библиотек, с помощью которого создавался графический интерфейс приложения. Первое окно, открывающееся при запуске приложения, представляет собой главное меню, где выбирается схема расчёта: последовательно-параллельные структуры, мостиковые структуры, произвольное дерево отказов и анализ сигнатур.

### Последовательно-параллельные структуры

Для параллельно-последовательного соединения (рис.1) необходимо указать количество групп в структуре и количество элементов в каждой группе, а также задать вероятности безотказной работы.

В случае если нужно добавить ещё одну структуру необходимо нажать кнопку ‘Далее’, иначе ‘Расчёт’. Так же в нижнем левом углу находится линия ввода имени файла, от которой будет зависеть название создаваемого pdf файла. Кнопка ‘Назад’ позволяет вернуться на предыдущее окно. Кнопка ‘Меню’ возвращает на главное меню.

Рис.1 Интерфейс для последовательно-параллельных структур.

Для последовательного соединения вероятность безотказной работы вычисляется путём перемножения вероятностей безотказной работы всех элементов. Так для структуры 1, вероятность безотказной работы первой группы элементов расчёт будет вестись по формуле (1):

$$P(P1.1) = P(P1.1.1) \cdot P(P1.1.2) \dots P(P1.1.n) \quad (1)$$

где, n – это количество элементов в соединении.

В случае параллельного соединения расчёт ведётся через сумму вероятностей совместных событий их исправной работы по формуле (2):

$$P(\sum_{i=1}^n P1.i) = \sum_{i=1}^n (P(P1.i) - \sum_{i < j} (P(P1.i * P1.j)) + \sum_{i < j < k} (P(P1.i * P1.j * P1.k)) + \dots + (-1)^{n+1} * P(\prod_{i=1}^n P1.i)) \quad (2)$$

где, n – это количество элементов в соединении;  
i,j,k – индексы элементов.

В итоге после нажатия кнопки ‘Расчёт’, создается заданная структура и сохраняется в pdf файл (рис.2). В случае если последовательно-параллельных структур в системе несколько, то вероятность безотказной работы системы равна произведению их вероятностей безотказных работ.

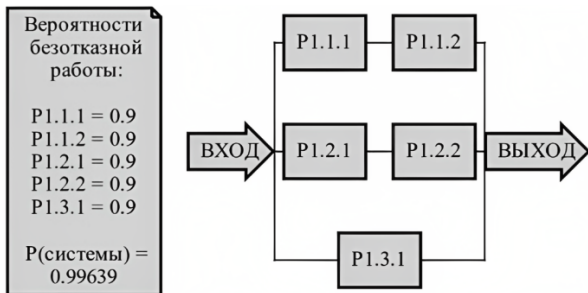


Рис.2 Последовательно-параллельная структура.

### Мостиковые структуры

Более сложной по структуре, чем параллельно-последовательные схемы является соединение элементов, при котором нарушение функционирования объекта наступает только при определенных сочетаниях одновременных отказов ее элементов [4]. Такая структура в теории надежности получила название «мостиковой» (рис.3).

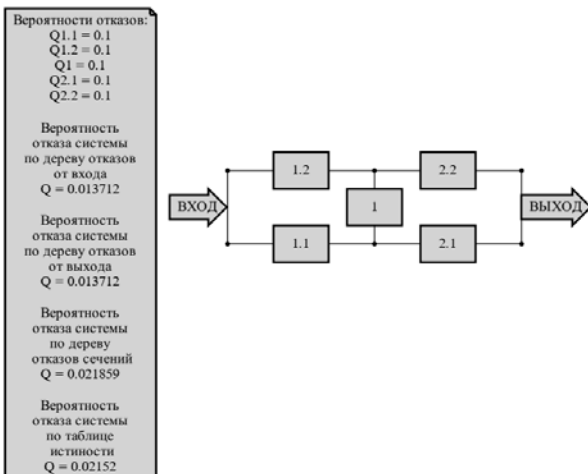


Рис.3 Пример мостиковой структуры.

«Мостиковая» структура не сводится к параллельному или последовательному типу соединения элементов, а представляет собой параллельное соединение последовательных цепочек элементов с помощью мостовых элементов, расположенных на диагоналях.

Для анализа надёжности таких систем можно использовать методологию деревьев отказов. Деревья отказов (Fault Tree) представляют собой визуализацию логико-вероятностных моделей теории надежности.

Так же подходит составление таблицы истинности - табличного построения функций, принимающих лишь два значения (0 или 1), при котором перечисляются всевозможные значения аргументов и указываются соответствующие им значения функции.

В программе исходными данными являются: количество мостовых элементов и вероятности отказов элементов ( $Q_i$  для мостовых элементов,  $Q_{i,j}$  для остальных). На основе чего, происходит построение деревьев отказов от входа к выходу (Рис.4), от выхода к входу, по сечениям, также производится расчёт на основе построения таблицы истинности. В случае деревьев отказов вычисление вероятности отказа системы происходит снизу от базовых событий вверх: элементы входящие в вершину ‘И’ рассчитываются, как при последовательном соединении, а в случае вершины ‘ИЛИ’ принимается параллельное соединение. Дерево отказов от выхода к входу строится по тем же принципам, меняется только порядок (справа налево). Для деревьев отказов по сечениям берутся различные комбинации элементов, приводящие к отказу системы (сечения).

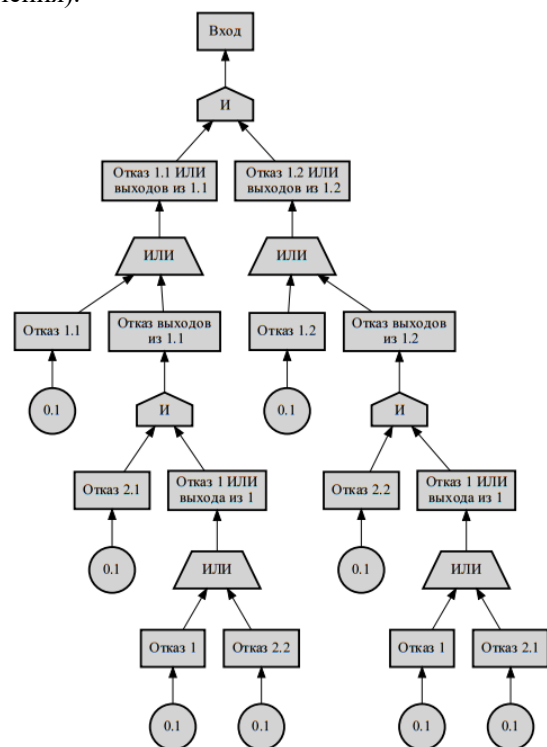


Рис.4 Дерево отказов от входа к выходу.

Также в приложение реализовано построение произвольного дерева отказов, предполагающего собой последовательный ввод событий, вершин и элементов, входящих в эти вершины.

### Анализ сигнатур

Теория сигнатур позволяет сравнивать структурную надежность сложных систем, состоящих из одинаковых компонентов с помощью определяемого по некоторому алгоритму числового вектора, называемого сигнатурой [5].

Если рассматривать последовательное соединение элементов, то сигнатура такой системы будет выглядеть следующим образом (3):

$$\bar{s} = (1, 0, \dots, 0) \quad (3)$$

где,  $\bar{s}$  – сигнатура последовательного соединения.

Откуда следует, что первый отказавший элемент системы с вероятностью  $s_1 = 1$  вызовет отказ системы.

Другими словами, первая по порядку наработка является фатальной для системы, т.е. приводящей к отказу.

В случае параллельного соединения элементов, система будет функционировать до тех пор, пока не откажет каждый ее элемент. То есть последняя наработка будет фатальной (4):

$$\bar{s} = (0, 0, \dots, 1) \quad (4)$$

где,  $\bar{s}$  – сигнатура параллельного соединения.

Для получения сигнатуры сложных структур, в частности, последовательно-параллельной технической системы потребуются формулы на основе сигнатур ее подсистем и комбинаторики.

Для L параллельных структур, количество элементов в каждой из которых n, элементы сигнатуры будут находиться по формуле (5):

$$s_k = \frac{L}{k \cdot C_N^k} \cdot \sum_k C_n^{i_1} \cdot \dots \cdot C_n^{i_L} * i_1 s_{i_1} \cdot \prod_{m=2}^L \bar{s}_{i,m} \quad (5)$$

где L – это количество параллельных структур;

N – количество элементов в системе;

n – количество элементов в параллельной структуре;

k – номер выбранного элемента;

$i_1$  – количество элементов в первой параллельной структуре;

$s_{i_1}$  – сигнатура первой параллельной структуры;

$C_N^k$  – число сочетаний из N по k, находящиеся по формуле (6);

$\bar{s}_{i,m}$  – вектор работоспособных состояний для  $i$ th параллельной структуры.

$$C_N^k = \frac{N!}{k!(N-k)!} \quad (6)$$

Свойство сигнатуры: сумма всех компонент сигнатуры ( $s_k$ ) равна 1.

В качестве примера рассмотрим расчёт системы из 2 идентичных структур, содержащих по 3 элемента (рис.5).

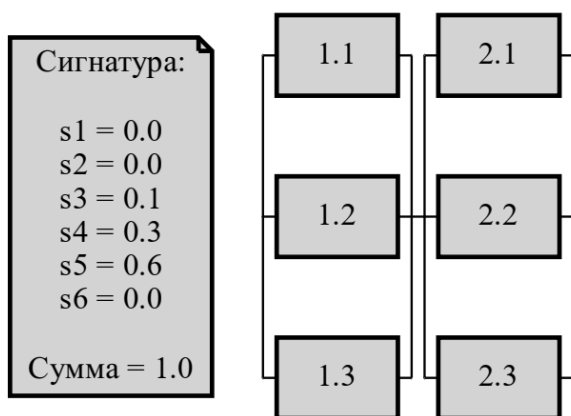


Рис.5 Пример сигнатуры.

Из данной сигнатуры следует, что отказ любого элемента или пары элементов не может привести к отказу системы. В случае, когда отказывают три элемента – вероятность отказа системы равна  $s_3 = 0.1$ , для четырех отказавших элементов  $s_4 = 0.3$  и пяти -  $s_5 = 0.6$ . Шестое значение сигнатуры ( $s_6 = 0$ ) не вносит вклад в сигнатуру системы, так как отказ любых пяти элементов переводит систему в неработоспособное состояние.

### Заключение

Показатели надежности являются одними из важных показателей, которые определяют качество продукта. От надёжности зависят такие параметры, как качество, эффективность, риск, безопасность и живучесть.

Данное приложение будет полезно при обучении специалистов по оценке надежности оборудования, а также при анализе показателей надёжности для различных структур. Приложение продолжает дорабатываться, в дальнейшем запланировано добавление новых схем и способов расчёта, а также реализация метода сигнатур для разного количества элементов в структурах.

### Список литературы

1. *itertools* — функции, создающие итераторы для эффективного выполнения цикла. URL: <https://docs.python.org/3/library/itertools.html> (дата обращения: 02.05.2023).
2. *Graphviz* — библиотека позволяющая работать с программным обеспечением для визуализации графиков. URL: <https://graphviz.org/> (дата обращения: 02.05.2023).
3. *PyQt5 5.15.9* - библиотека инструментов с графическим интерфейсом. URL: <https://pypi.org/project/PyQt5/> (дата обращения: 02.05.2023).
4. Викторова В.С., Степанянц А.С. Модели и методы расчета надежности технических систем. М.: ЛЕНАНД, 2016. 256 с
5. Чепурко В.А., Черняев А.Н. Анализ структурных схем с помощью сигнатур. Вычисление сигнатуры сложной структуры. Надежность. 2022. URL: [https://doi.org/10.21683/1729-264\\_6-2022-22-2-10-21](https://doi.org/10.21683/1729-264_6-2022-22-2-10-21) (дата обращения: 02.05.2023).

УДК 66.094.258.097

Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Л.Н. Хандожко, М.В. Шостаковский

**Анализ и моделирование процесса очистки низших олефинов от ацетиленовых углеводородов на палладиевых нанокатализаторах**

Писаренко Елена Витальевна – доктор технических наук, профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», 125480, Россия, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20.;

Пономарев Андрей Борисович – кандидат химических наук, старший научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН;

Хандожко Любовь Николаевна – студентка 1 курса магистратуры кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева, e-mail: [lkhandozhko24@gmail.com](mailto:lkhandozhko24@gmail.com);

Шостаковский Михаил Вячеславович – научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН.

ФГБУН «ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН», Россия, Москва, 119334, ул. Вавилова, д. 28.

*В статье синтезирован Pd нанокатализатор, промотированный металлами I, II, VI групп Периодической таблицы Д.И. Менделеева очистки низших олефинов этан-этиленовой (ЭЭФ) и пропан-пропиленовой фракций (ППФ) пирогаза от ацетиленовых углеводородов. Проведена серия экспериментов в проточном трубчатом реакторе при 20-30 атм, 333-393 К, расходе сырья 2000-4000 ч<sup>-1</sup>, мольном отношении H<sub>2</sub>:C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>=1.5-3.1 (сырье 1) и H<sub>2</sub>:C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>=1.5-3.1 (сырье 2). Проанализирована активность, селективность и стабильность работы нанокатализатора. Построены кинетические модели реакций селективного гидрирования ацетилена в ЭЭФ пирогаза и метилацетилена в ППФ пирогаза и оценены кинетические константы моделей методом наименьших квадратов. Определены оптимальные условия проведения процесса при которых наблюдается прирост этилена и пропилена в выходном потоке реагентов.*

*Ключевые слова:* селективное гидрирование, метилацетилен, ацетилен, катализатор, кинетика, моделирование.

**Analysis and simulation of the process of lower olefin purification from acetylene hydrocarbons over palladium nanocatalysts**

Pisarenko E.V.<sup>1</sup>, Ponomaryov A.B.<sup>2</sup>, Khandozhko L.N.<sup>1</sup>, Shostakovsky M.V.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation.

<sup>2</sup>Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russian Federation.

*The article discusses a Pd nanocatalyst promoted with metals of groups I, II, VI of the Periodic Table was synthesized for the purification of lower olefins of ethane-ethylene (EEP) and propane-propylene fractions (PPF) of pyrogas from acetylene hydrocarbons. A series of experiments was carried out in a tubular flow reactor at 20-30 atm, 333-393 K, feedstock flow rates 2000-4000 h<sup>-1</sup>, molar ratios H<sub>2</sub>:C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> = 1.5-3.1 (feedstock 1) and H<sub>2</sub>:C<sub>3</sub>H<sub>4</sub> = 1.5-3.1 (feedstock 2). The activity, selectivity and stability of the nanocatalyst have been analyzed. Kinetic models of reactions of selective hydrogenation of acetylene in the EEP of pyrogas and methylacetylene in PPF of pyrogas were developed and the kinetic constants of the models were estimated by the least squared method. The optimal conditions for carrying out the process were determined under which an increase in ethylene and propylene was observed in the product stream.*

*Key words:* selective hydrogenation, methylacetylene, acetylene, catalyst, kinetics, modeling.

**Введение**

В настоящее время в мире наблюдается рост производственных мощностей получения легких олефинов -этилена и пропилена. Традиционными промышленными процессами производства легких олефинов являются термический пиролиз, каталитический пиролиз, пиролиз в присутствии иницилирующих добавок и каталитический крекинг [1]. В 2019 году мировое производство пропилена достигло 130 млн. т/год, этилена 185 млн. т/год [2], а к 2025 году производственные мощности по пропилену по прогнозам составят 192 млн. т/год, этилена – 222 млн. т/год [3]. В производствах олефинов помимо традиционных также используются альтернативные технологии, такие как дегидрирование легких алканов, технология МТО на основе метанола (процесс «methanol to olefins» МТО), технология СТО из угля (процесс «coal to olefins»), технология ВМТР из биомассы (процесс «biomass to propylene»). Для получения этилена и пропилена полимеризационной

чистоты необходима очистка ЭЭФ газов пиролиза от ацетиленовых углеводородов и ППФ газов пиролиза от метилацетилена и пропадиена до 1-5 ppm, которая осуществляется проведением селективного гидрирования ацетиленовых и диеновых углеводородов на палладийсодержащих катализаторах [4-5]. Для промышленной очистки легких олефинов от ацетиленовых углеводородов в ЭЭФ и ППФ пирогаза необходимо использовать катализаторы, препятствующие протеканию реакций олигомеризации и полимеризации этилена/пропилена. Побочные реакции приводят к образованию зеленых и оранжевых масел, которые снижают активность промышленных катализаторов.

Эффективными катализаторами гидрирования ацетиленовых углеводородов в ЭЭФ и ППФ пирогаза являются катализаторы на основе Pd, промотированные металлами Ag, Ni, Co, Ti. Содержание активных компонентов в составе катализатора обычно находится в пределах 0.02-0.5

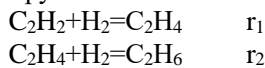


мас.%. В качестве носителей испытываются мезопористые материалы типа МСМ-41, оксиды  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , карбид кремния  $\text{SiC}$ , многослойные углеродные нанотрубки MWNTs, углеродные нановолокна, допированные азотом CNFs и др.

### Экспериментальная часть

Приготовлен палладиевый нанокатализатор, промотированный элементами I, II, VI групп Периодической таблицы Д.И. Менделеева. В качестве носителя используются сферические гранулы  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Эксперименты по изучению кинетики реакции селективного гидрирования ацетилена в этилен в ЭЭФ пирогаза проводились в проточном реакторе со стационарным слоем катализатора при варьировании температур в диапазоне 333-393 К, давлений 20-30 атм, расхода сырья 2000-4000 ч<sup>-1</sup>, мольного отношения  $\text{H}_2/\text{C}_2\text{H}_2$  от 1.5 : 1 до 3.1 : 1. Всего поставлено 80 опытов на лабораторной и стендовой установках при изучении активности, селективности и стабильности работы палладийсодержащего нанокатализатора в реакции селективного гидрирования ацетилена в ЭЭФ пирогаза. Каждый эксперимент завершался при достижении концентрации ацетилена в выходном продуктивном потоке менее 1 ppm. Определяли селективность и активность палладиевого нанокатализатора по целевому продукту этилену.

Предложен шестистадийный двухмаршрутный механизм реакции гидрирования ацетилена и этилена в этан-этиленовой фракции пирогаза, характеризующийся 2 итоговыми химическими реакциями по маршрутам:



Построение кинетической модели сложной многомаршрутной химической реакции селективного гидрирования ацетилена в ЭЭФ пирогаза проводили с использованием метода Хориути по следующей схеме:

1) матрица стехиометрических коэффициентов  $B$ , построенная на основании стадийного механизма реакции, разбивается на две подматрицы для боденштейновских ( $B_B$ ) и небоденштейновских веществ ( $B_{NB}$ )

$$B = [B_{NB} | B_B] \quad (1)$$

2) записывается основная система кинетических уравнений

$$\vec{R}^B = B^T \cdot \vec{W} \quad (2)$$

3) выводится уравнение химического инварианта для боденштейновских веществ

$$\sum_{i=1}^{N_B} X_i = 1 \quad (3)$$

где  $X_i$  – поверхностная концентрация  $i$ -го реагента.

4) определяется по правилу Хориути число итоговых маршрутов химических реакций

$$P = Q - r(B_B) \quad (4)$$

5) рассчитываются векторы стехиометрических чисел Хориути для соответствующих маршрутов реакций  $\vec{v}^1, \dots, \vec{v}^{(P)}$  в результате решения системы линейных алгебраических уравнений:

$$B_B^T \cdot \vec{v}^{(P)} = \vec{0} \quad (5)$$

6) рассчитывается вектор скоростей реакций по маршрутам  $\vec{r}$ :

$$\vec{W} = v \cdot \vec{r} \quad (6)$$

7) определяются элементы матрицы итоговых уравнений по маршрутам  $B_\Phi$ :

$$B_\Phi^T = B_{NB}^T \cdot v \quad (7)$$

8) записывается система кинетических уравнений в виде:

$$\vec{R}_{NB}^B = B_\Phi^T \cdot \vec{r} \quad (8)$$

Ранг  $B_\Phi$  равен двум, следовательно, система 4 дифференциальных уравнений для небоденштейновских веществ может быть преобразована к системе двух дифференциальных уравнений для ключевых небоденштейновских веществ (ацетилена и этилена) и двух линейных алгебраических уравнений химических инвариантов для неключевых небоденштейновских веществ (водорода и этана).

Скорости итоговых химических реакций по маршрутам представимы в виде:

$$r_1 = \frac{k_1 P_{\text{C}_2\text{H}_2} P_{\text{H}_2}}{(1 + K_1 P_{\text{H}_2}^{0.5} + K_2 P_{\text{C}_2\text{H}_2} + K_3 P_{\text{C}_2\text{H}_4} + K_4 P_{\text{C}_2\text{H}_6})^3} \quad (9)$$

$$r_2 = \frac{k_2 P_{\text{C}_2\text{H}_4} P_{\text{H}_2}}{(1 + K_1 P_{\text{H}_2}^{0.5} + K_2 P_{\text{C}_2\text{H}_2} + K_3 P_{\text{C}_2\text{H}_4} + K_4 P_{\text{C}_2\text{H}_6})^3} \quad (10)$$

где  $r_1, r_2$  – скорости реакций по маршрутам гидрирования ацетилена и этилена, соответственно ( $\text{атм} \cdot \text{с}^{-1}$ ),  $k_i$  – кинетические константы скоростей медленных стадий ( $\text{атм} \cdot \text{с}^{-1}$ ),  $K_i$  – константы адсорбционно-десорбционного равновесия.

Химические инварианты для неключевых веществ (водорода и этана) имеют вид:

$$P_{\text{H}_2} = P_{0,\text{H}_2} + 2(P_{\text{C}_2\text{H}_2} - P_{0,\text{C}_2\text{H}_2}) + (P_{\text{C}_2\text{H}_4} - P_{0,\text{C}_2\text{H}_4}) \quad (11)$$

$$P_{\text{C}_2\text{H}_6} = P_{0,\text{C}_2\text{H}_6} - (P_{\text{C}_2\text{H}_2} - P_{0,\text{C}_2\text{H}_2}) - (P_{\text{C}_2\text{H}_4} - P_{0,\text{C}_2\text{H}_4}) \quad (12)$$

По экспериментальным данным, методом наименьших квадратов оценены кинетические константы модели:

$$K_1 = e^{-10.173 + \frac{2507.49}{T}}, K_2 = e^{3.624 + \frac{46.27}{T}},$$

$$K_3 = e^{-2.5375 + \frac{827.9279}{T}}, K_4 = e^{-7.7588 + 5111.7948/T},$$

$$k_1 = e^{25.188 - 5155.0/T}, k_2 = e^{4.04 - 695.14/T}$$

В таблицах 1-3 приведены результаты испытания палладиевого нанокатализатора в проточном изотермическом лабораторном реакторе, в котором протекает реакция селективного гидрирования ацетилена в ЭЭФ пирогаза. Показано при этом, что при увеличении температуры реакционной зоны в реакторе от 333 К до 363 и 393 К скорость реакций гидрирования существенно возрастает, а концентрация ацетилена в продуктивном потоке не превышает 1 ppm. Таким образом имеет место глубокая очистка этилена. Найдены высокоинтенсивные режимы работы реакторного оборудования, при которых получен прирост производительности по этилену при содержании ацетилена менее 1 ppm в продуктивном потоке.

Таблица 1. Результаты кинетических исследований реакции селективного гидрирования ацетилена (333 К, 30 атм, 2000 ч<sup>-1</sup>, состав сырья: P<sub>C<sub>2</sub>H<sub>2</sub></sub>=0.94 атм, P<sub>H<sub>2</sub></sub>=2.34 атм, P<sub>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></sub>=26.8 атм, P<sub>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></sub>=0.037 атм).

Время контакта, с	Состав продуктового потока, атм (расчет по модели)				Состав продуктового потока, атм (эксперимент)	
	H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
0.05	2.335	9.357·10 <sup>-1</sup>	26.804	3.735·10 <sup>-2</sup>	9.342·10 <sup>-1</sup>	26.798
1.5	2.207	8.086·10 <sup>-1</sup>	26.928	3.871·10 <sup>-2</sup>	8.127·10 <sup>-1</sup>	26.957
15.0	1.357	1.036·10 <sup>-3</sup>	27.676	9.015·10 <sup>-2</sup>	1.068·10 <sup>-3</sup>	27.609
50.0	1.174	4.805·10 <sup>-9</sup>	27.514	2.627·10 <sup>-1</sup>	отсутствует	27.506

Таблица 2. Результаты кинетических исследований реакции селективного гидрирования ацетилена (363 К, 30 атм, 2000 ч<sup>-1</sup>, состав сырья: P<sub>C<sub>2</sub>H<sub>2</sub></sub>=0.94 атм, P<sub>H<sub>2</sub></sub>=2.34 атм, P<sub>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></sub>=26.8 атм, P<sub>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></sub>=0.037 атм).

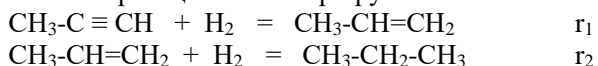
Время контакта, с	Состав продуктового потока, атм (расчет по модели)				Состав продуктового потока, атм (эксперимент)	
	H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
0.05	2.263	8.833·10 <sup>-1</sup>	26.876	3.738·10 <sup>-2</sup>	8.546·10 <sup>-1</sup>	26.846
2.00	1.429	6.002·10 <sup>-2</sup>	27.670	4.777·10 <sup>-2</sup>	6.001·10 <sup>-2</sup>	27.689
7.50	1.341	4.735·10 <sup>-5</sup>	27.721	7.584·10 <sup>-2</sup>	3.612·10 <sup>-5</sup>	27.718
15.0	1.306	6.050·10 <sup>-9</sup>	27.685	11.10·10 <sup>-2</sup>	отсутствует	27.682

Таблица 3. Результаты кинетических исследований реакции селективного гидрирования ацетилена (393 К, 30 атм, 2000 ч<sup>-1</sup>, состав сырья: P<sub>C<sub>2</sub>H<sub>2</sub></sub>=0.94 атм, P<sub>H<sub>2</sub></sub>=2.34 атм, P<sub>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></sub>=26.8 атм, P<sub>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></sub>=0.037 атм).

Время контакта, с	Состав продуктового потока, атм (расчет по модели)				Состав продуктового потока, атм (эксперимент)	
	H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
0.05	2.201	8.220·10 <sup>-1</sup>	26.937	3.740·10 <sup>-2</sup>	8.329·10 <sup>-1</sup>	27.031
1.00	1.449	7.363·10 <sup>-2</sup>	27.682	4.090·10 <sup>-2</sup>	7.214·10 <sup>-2</sup>	27.561
3.00	1.369	6.108·10 <sup>-3</sup>	27.748	4.827·10 <sup>-2</sup>	6.315·10 <sup>-3</sup>	27.726
7.50	1.353	1.538·10 <sup>-7</sup>	27.732	6.456·10 <sup>-2</sup>	5.100·10 <sup>-7</sup>	27.702

Эксперименты по изучению кинетики реакции селективного гидрирования метилацетилена в пропилен в ППФ пирогаза проводились при варьировании температур в диапазоне 333-393 К, давлений 20-30 атм, расхода сырья 2000-3000 ч<sup>-1</sup>, мольного отношения H<sub>2</sub>/C<sub>3</sub>H<sub>4</sub> от 1.5 : 1 до 3.1 : 1. Анализ продуктов реакции осуществляли газохроматографически. Всего поставлено 80 опытов на лабораторной и стендовой установках при изучении активности, селективности и стабильности работы палладийсодержащего нанокатализатора в реакции селективного гидрирования метилацетилена в ППФ пирогаза. Каждый эксперимент завершился при достижении концентрации метилацетилена в выходном продуктомом потоке < 1 ppm. Определяли селективность и активность палладиевого нанокатализатора по целевому продукту пропилену.

Предложен 6-стадийный, двухмаршрутный механизм реакций селективного гидрирования метилацетилена в пропилен на палладиевых нанокатализаторах, характеризующийся двумя итоговыми реакциями по маршрутам:



Скорости итоговых химических реакций по

маршрутам представимы в виде:

$$r_1 = \frac{k_1 P_{\text{C}_3\text{H}_4} P_{\text{H}_2}}{(1 + K_1 P_{\text{H}_2}^{0.5} + K_2 P_{\text{C}_3\text{H}_4} + K_3 P_{\text{C}_3\text{H}_6} + K_4 P_{\text{C}_3\text{H}_8})^3} \quad (13)$$

$$r_2 = \frac{k_2 P_{\text{C}_3\text{H}_6} P_{\text{H}_2}}{(1 + K_1 P_{\text{H}_2}^{0.5} + K_2 P_{\text{C}_3\text{H}_4} + K_3 P_{\text{C}_3\text{H}_6} + K_4 P_{\text{C}_3\text{H}_8})^3} \quad (14)$$

где  $r_1, r_2$  – скорости реакций по маршрутам гидрирования метилацетилена и пропилена, соответственно (атм·с<sup>-1</sup>),  $k_i$  – кинетические константы скоростей медленных стадий (атм·с<sup>-1</sup>),  $K_i$  – константы адсорбционно-десорбционного равновесия.

Химические инварианты для неключевых веществ (водорода и пропана) имеют вид:

$$P_{\text{H}_2} = P_{0,\text{H}_2} + 2(P_{\text{C}_3\text{H}_4} - P_{0,\text{C}_3\text{H}_4}) + (P_{\text{C}_3\text{H}_6} - P_{0,\text{C}_3\text{H}_6}) \quad (15)$$

$$P_{\text{C}_3\text{H}_8} = P_{0,\text{C}_3\text{H}_8} - (P_{\text{C}_3\text{H}_4} - P_{0,\text{C}_3\text{H}_4}) - (P_{\text{C}_3\text{H}_6} - P_{0,\text{C}_3\text{H}_6}) \quad (16)$$

По экспериментальным данным, методом наименьших квадратов оценены кинетические константы модели:

$$K_1 = e^{-10.173 + \frac{2507.49}{T}}, K_2 = e^{4.224 + \frac{46.47}{T}}, K_3 = e^{-2.5677 + \frac{887.9079}{T}},$$

$$K_4 = e^{-7.3889+1812.84/T},$$

$$k_1 = e^{24.33-5134.0/T}, k_2 = e^{3.94-755.14/T}$$

В таблице 4 приведены результаты испытания палладиевого нанокатализатора в проточном изотермическом лабораторном реакторе, в котором протекает реакция селективного гидрирования метилацетилен в ППФ пирогаза.

Таблица 4. Результаты кинетических исследований реакции селективного гидрирования метилацетилен (393 К, 30 атм, 2000 ч<sup>-1</sup>, состав сырья: P<sub>C<sub>3</sub>H<sub>4</sub></sub>=0.32 атм, P<sub>H<sub>2</sub></sub>=0.8 атм, P<sub>C<sub>3</sub>H<sub>6</sub></sub>=26.8 атм, P<sub>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub></sub>=0.037 атм).

Время контакта, с	Состав продуктового потока, атм (расчет по модели)				Состав продуктового потока, атм (эксперимент)	
	H <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>
0.05	7.970·10 <sup>-1</sup>	3.171·10 <sup>-1</sup>	26.802	3.702·10 <sup>-2</sup>	3.180·10 <sup>-1</sup>	26.802
1.5	7.157·10 <sup>-1</sup>	2.365·10 <sup>-1</sup>	26.883	3.778·10 <sup>-2</sup>	2.401·10 <sup>-1</sup>	26.871
10.0	4.834·10 <sup>-1</sup>	1.202·10 <sup>-2</sup>	27.399	4.554·10 <sup>-2</sup>	1.201·10 <sup>-2</sup>	27.148
40.0	4.376·10 <sup>-1</sup>	2.812·10 <sup>-8</sup>	27.077	6.543·10 <sup>-2</sup>	3.024·10 <sup>-8</sup>	27.078

При времени контакта 40 с достигается селективная очистка ППФ пирогаза от ацетиленовых углеводородов. Селективность по пропилену составляет 87.06 %. Максимальный состав олефинов в продуктовом потоке достигается при времени контакта 10 с.

#### Заключение

Разработаны кинетические модели реакции селективного гидрирования ацетилен в ЭЭФ пирогаза и метилацетилен в ППФ пирогаза. Показано хорошее соответствие результатов математического моделирования и экспериментальных данных. По критерию Бартлетта доказана адекватность разработанных моделей результатам эксперимента. Установлены условия оптимального проведения процесса селективного гидрирования ацетилен в ЭЭФ и метилацетилен в ППФ пирогаза при которых содержание ацетиленовых углеводородов в продуктовом потоке не превышает 1 ppm. Разработанные математические модели могут быть использованы при моделировании процесса в зерне катализатора и в каталитическом реакторе.

#### Список литературы

1. Pisarenko E.V., Ponomarev A.B., Smirnov A.V., Pisarenko V.N., Shevchenko A.A. Prospects for Progress in Developing Production Processes for the Synthesis of Olefins Based on Light Alkanes// Theoretical Foundations of Chemical Engineering. –2022. –V. 56. – N. 5. –P. 687-722.
2. Zhao Z., Jiang J., Wang F. An economic analysis of twenty light olefin production pathways // Journal of Energy Chemistry. –2021. –V. 56. – P.193.
3. Barrasa C. Light Olefins Market Trends [электронный ресурс] // 2020. Режим доступа: <https://ihsmarkit.com/topic/light-olefins-market-trends.html>
4. Pisarenko E.V., Ponomaryov A.B., Ilinova A.A., Pisarenko V.N. Modeling the Process of Purifying Ethylene from Acetylene Hydrocarbons over Palladium Nanocatalysts //Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2020. – V. 54. – № 3. – P. 446-455.
5. Pisarenko E.V., Ponomaryov A.B., and Pisarenko V.N. Studying the Selective Methylacetylene Hydrogenation Reaction in Methylacetylene–Propylene Mixtures on Palladium Oxide Nanocatalysts // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2021. – V. 55. – N. 3. – P. 380–389.

УДК 534-13

Лебедев М.Д., Бутусов О.Б., Колмаков А.Г.

## Прогнозирование свойств композиционных материалов по микрофотографиям их структуры с помощью вейвлет-анализа

Лебедев Михаил Дмитриевич – студент группы МТ-17, mixastik2011@mail.ru

Бутусов Олег Борисович – д. ф-м. н., профессор кафедры логистики и экономической информатики, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Колмаков Алексей Георгиевич – чл.-корр. РАН, д.т.н., заведующий лабораторией прочности и пластичности металлических и композиционных материалов и наноматериалов ИМЕТ РАН, ФГБУН Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук, Россия, Москва, 119334, Ленинский проспект, 49.

*В статье рассмотрены возможности применения вейвлет-анализа и его преимущества в сравнении с другими методами. Предложено использовать вейвлет – анализ в качестве многоуровневого системного подхода в изучении и прогнозировании свойств композитов. В качестве основы предложенного метода использованы непрерывное и дискретное вейвлет-преобразования. В качестве показателей корреляции между механическими свойствами образцов и микро-фотоизображениями предложено использовать коэффициенты аппроксимации и детализации дискретного вейвлет преобразования.*

*Ключевые слова: композиционные материалы, микрофотографии, вейвлет-преобразования, механические свойства.*

### **Prediction of composite material properties from microphotographs of their structure using wavelet analysis**

Lebedev M.D.<sup>1</sup>, Butusov O.B.<sup>1</sup>, Kolmakov A.G.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

<sup>2</sup> Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science, Moscow, Russian Federation

*The article discusses the possibilities of wavelet analysis application and its advantages in comparison with other methods. It is proposed to use wavelet analysis as a multilevel system approach in the study and prediction of the properties of composites. Continuous and discrete wavelet transforms are used as the basis of the proposed method. The approximation and detail coefficients of the discrete wavelet transform are proposed to be used as indicators of correlation between mechanical properties of samples and micropictures.*

*Key words: composite materials, micro-photographs, wavelet transforms, mechanical properties.*

### **Введение**

Статья посвящена разработке методов анализа механических свойств композитов с использованием вейвлет-преобразований и сегментации текстурных кластеров на микрофотоизображениях, полученных с помощью оптических и электронных микроскопов. В настоящее время проблема анализа свойств материалов с помощью компьютерной обработки микрофотоизображений (МФИ) широко используется в различных предметных областях [1 – 10]. Для исследования структуры композитов использованы средства непрерывного (CWT) и дискретного (DWT) вейвлет-преобразований.

Современные композиты составляют значительную долю рынка инженерных материалов. Композиты используются из-за того, что материалы, армированные синтетическими или натуральными волокнами, обладают высокой жесткостью и низким весом в сравнении с обычными материалами. Важно отметить, что в отличие от обычных материалов, например, стали, свойства композитного материала могут быть разработаны с учетом структурных аспектов и требуемых механических характеристик, в качестве инструментов анализа которых можно использовать компоненты DWT которые обладают

большой информативностью для их выбора в качестве рабочего показателя.

Механические свойства композитов хорошо коррелируют с тепловыми характеристиками. На сегодняшний день известно значительное количество теплопроводящих композиционных материалов. Ключевыми наполнителями для данных материалов являются углеродные волокна, изготовленные методом осаждения паровой фазы предшественников нефтяного и каменноугольного пека [2]. Исходя из вышесказанного, можно прийти к выводу, что исследование и прогнозирование свойств композиционных материалов на данный момент является важным объектом изучения, так как многообразие композитов и их высокая степень применения нуждается в новых методах их оценки и изучения.

### **Основные характеристики вейвлет-преобразований**

Вейвлет-анализ применяется во многих научных сферах, начиная с анализа текстур на изображениях и заканчивая анализом одномерных и многомерных временных рядов. Известно, что сигналы, полученные из реальных источников, часто являются нестационарными, а это значит, что происходит

изменение их содержания в пространстве и времени. Следовательно, для анализа таких сигналов необходимо получить пространственную информацию, которая позволит получить полноценное представление об анализируемом объекте [8]. Так представление во временной области показывает лишь амплитуды сигнала в тот момент времени, когда он был произведен [9]. В обработке сигналов (а изображения и являются сигналом) частотно – временной анализ включает в себя те методы, которые изучают сигнал как во временной, так и в частотной областях одновременно. В то время как классический Фурье - анализ предполагает, что сигналы бесконечны во времени или периодичны, вейвлеты способны отражать изменения во времени [10]. Одной из самых основных форм частотно – временного анализа является STFT, однако он тоже обладает серьезным недостатком. Данный способ не подходит для анализа неравномерно распределенных данных. При его вычислении применяются фиксированное окно, которое трудно адаптировать к каким-либо локальным свойствам сигнала [11].

Цифровая обработка изображений в отличие от дорогостоящих способов исследования поверхности, таких как атомно-силовая микроскопия, эллипсометрия или ультразвуковая спектроскопия не требует столь длительной подготовки. В работе [12] было предложено на основе вейвлет – преобразования проводить измерения структурных элементов поверхности керамики.

В работе [13] вейвлет-анализ применялся для обработки изображений полимерных композитов. В [14] вейвлет-анализ использован для описания разнообразных структур конструкционных материалов. При DWT преобразовании сигнала происходит его расщепление на аппроксимирующую и детализирующую части. Первую характеризуют, как сигнал, с достаточно медленной временной динамикой, вторую же, наоборот, как сигнал с быстрой и локальной динамикой, которую впоследствии расщепляют на другие частотные компоненты. Вейвлет-анализ широко использовался

для локализации и оценки повреждений конструкций и материалов. В работе [15] благодаря возможности декомпозиции сигнала DWT удалось выявить даже небольшие локальные изменения из глобальной структуры.

Также на основе вейвлет-анализа осуществляется классификация текстур с анализом признаков. В [16, 17] производилось сравнение методов вейвлет-преобразования с другими методами, используемыми для анализа текстур. Описаны результаты двухмерного DWT-анализа изображений.

#### Полученные результаты изучения механических свойств

Исходные микрофотоизображения (МФИ) представлены на рис.1 и рис.2.

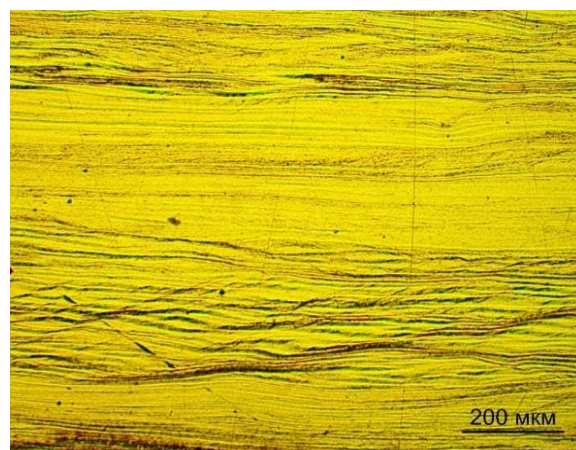


Рис. 1. Микроструктура пластин сплавов Ti-25Nb-5Ta после прокатки.

После прокатки, пластины сплавов Ti-25Nb-5Ta подвергали отжигу для определения влияние ТО на механические свойства, структуру и фазовый состав.

Для оценки механических свойств полученных сплавов и оценки влияния отжига, из прокатанных пластин были вырезаны образцы для испытаний на растяжение. Результаты механических испытаний представлены на рис.3 и таблице 1.

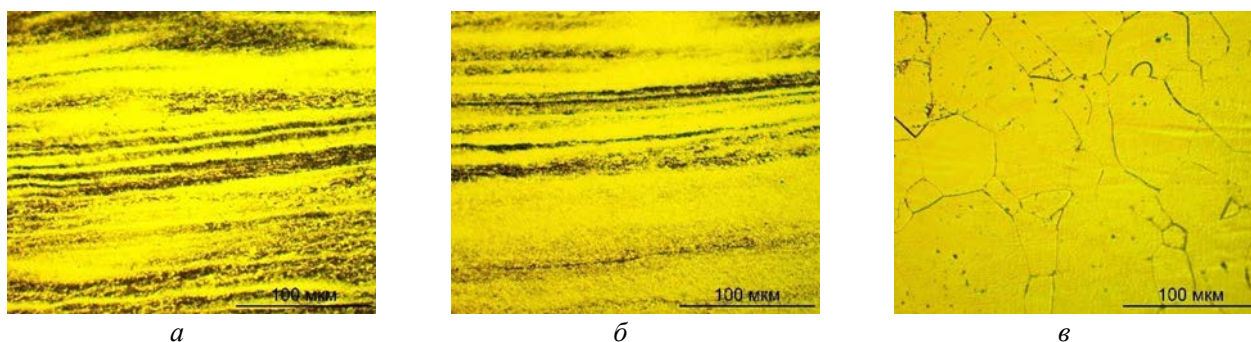


Рис. 2. Микроструктура пластины сплава Ti-25Nb-5Ta после отжига при 400°C (а), 600°C (б), 800°C (в).

Таблица 1. Влияние термической обработки на механические свойства пластин из сплавов Ti-25Nb-5Ta

Свойства	После прокатки	400°C, 3 ч	600°C, 3 ч	800°C, 3 ч
$\delta$ , %	13,6±1,2	6,9±0,6	13,4±1,1	13,6±1,2
$\sigma_{0,2}$ , МПа	298±7	463±7	450±8	432±6
$\sigma_B$ , МПа	472±8	659±5	546±9	526±8

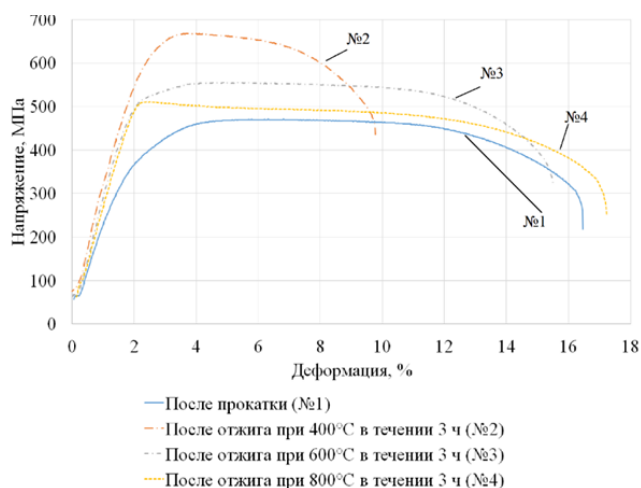


Рис. 3. Диаграммы растяжения пластин из сплавов Ti-25Nb-5Ta.

### Полученные результаты изучения МФИ

Методология обработки изображений является одним из направлений интеллектуального анализа

данных и средством извлечения дополнительной информации об изучаемых процессах. Существует большое многообразие методов, лежащих в основе обработки изображений. В частности, существуют методы предварительной обработки изображений (фильтры), методы когнитивной обработки, методы распознавания объектов на изображении и методы формализованного представления полученных образов для их последующей обработки. Для анализа изображений композиционных материалов в данной работе использованы методы предварительного анализа – сегментации (выделение объектов или границ изображения) с последующей бинаризацией. В данной работе для сегментации МФИ использованы вейвлет-преобразования.

Обработка и вейвлет-анализ МФИ проводились в среде MATLAB. На первом этапе осуществлялось SWT-преобразование. Далее на изображениях рандомизированным выбором выделялись 10 одномерных сечений, на которых выполнялись DWT.

Примеры результатов SWT-анализа для 400°C представлены на рис.4, рис.5 и рис.6.

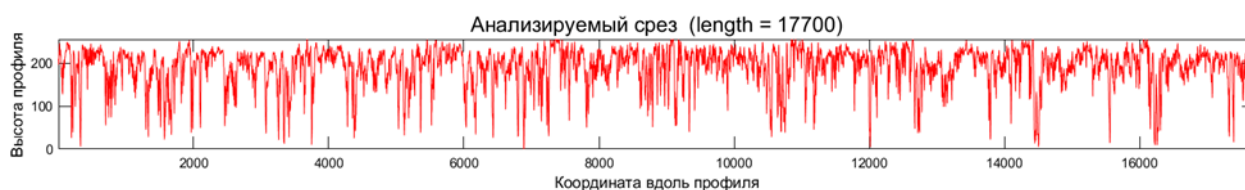


Рис. 4. Анализируемый срез пластины сплава Ti-25Nb-5Ta после отжига при 400°C.

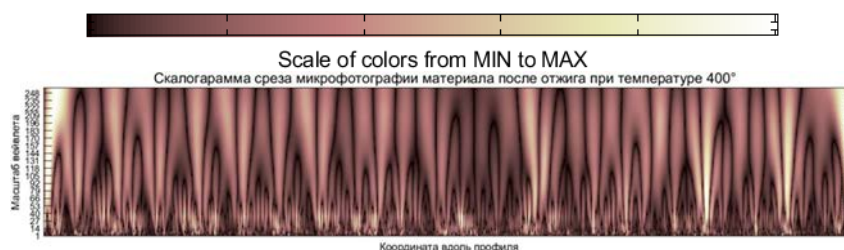


Рис. 5. Скалограмма среза пластины сплава Ti-25Nb-5Ta после отжига при 400°C.

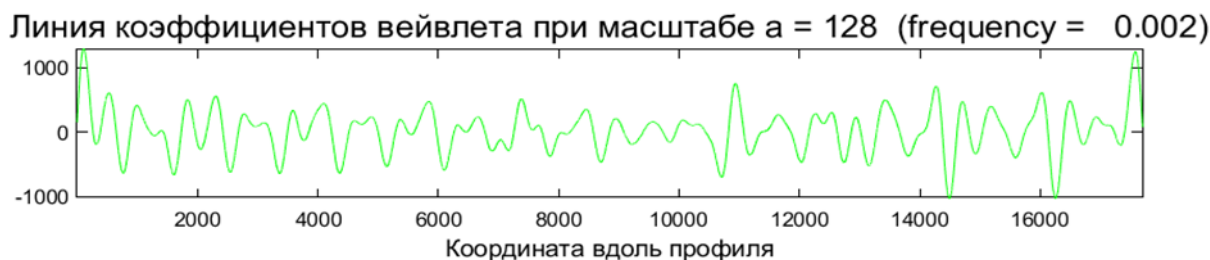


Рис. 6. Линия коэффициентов вейвлета МНАТ при масштабе  $a = 128$  среза МФИ сплава Ti-25Nb-5Ta после отжига при 400°C.

Следует отметить, что SWT-анализ позволяет оценить фрактальность МФИ и возможность дальнейшего преобразования. Как следует из SWT спектров (рис.5) в них содержится множество подобных фигур, что является признаком фрактального характера МФИ.

Для DWT анализа применялось семейство вейвлетов Добеши4. Для вейвлетов, связанных с анализом с несколькими разрешениями, можно вычислить как масштабирующую функцию, так и вейвлет. Результаты DWT анализа представлены ниже, для 400°C на рис. 7,8.

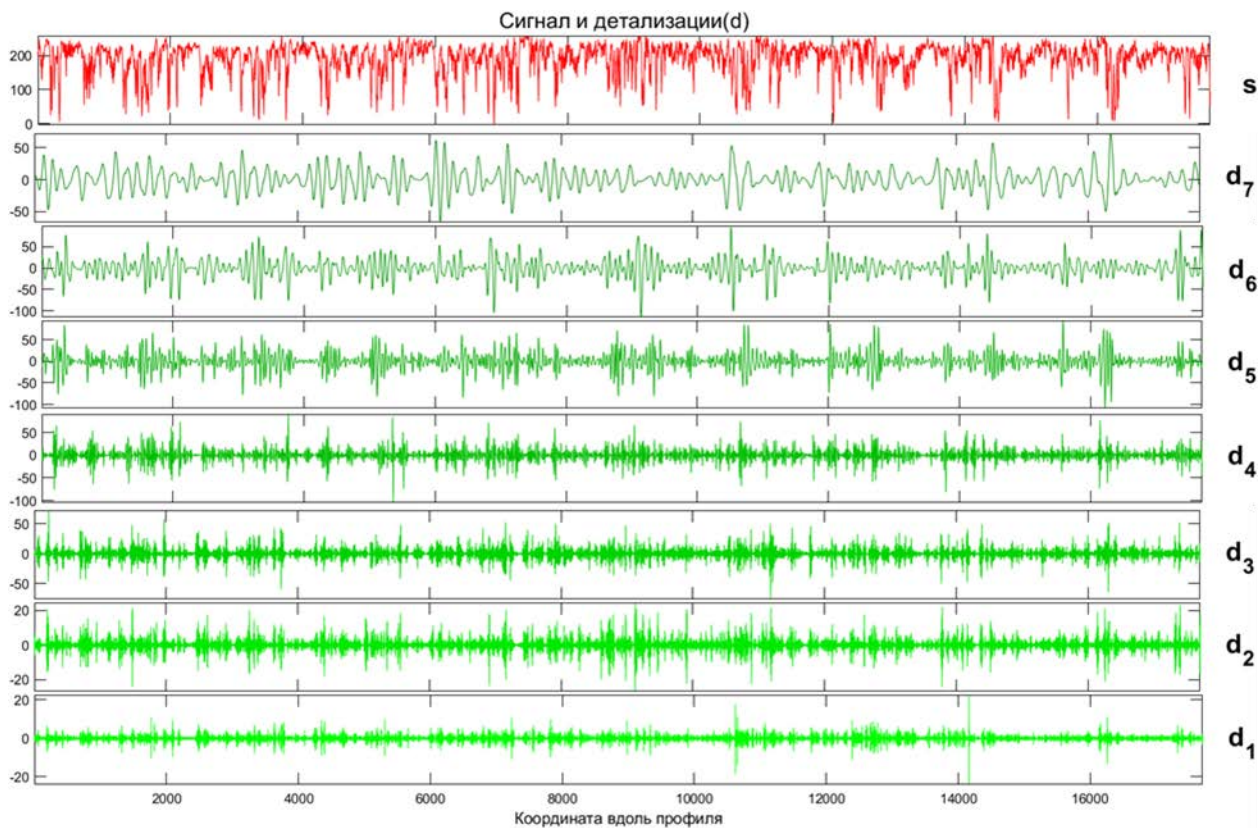


Рис. 7. Коэффициенты детализации среза пластины сплава Ti-25Nb-5Ta после отжига при 400°C.

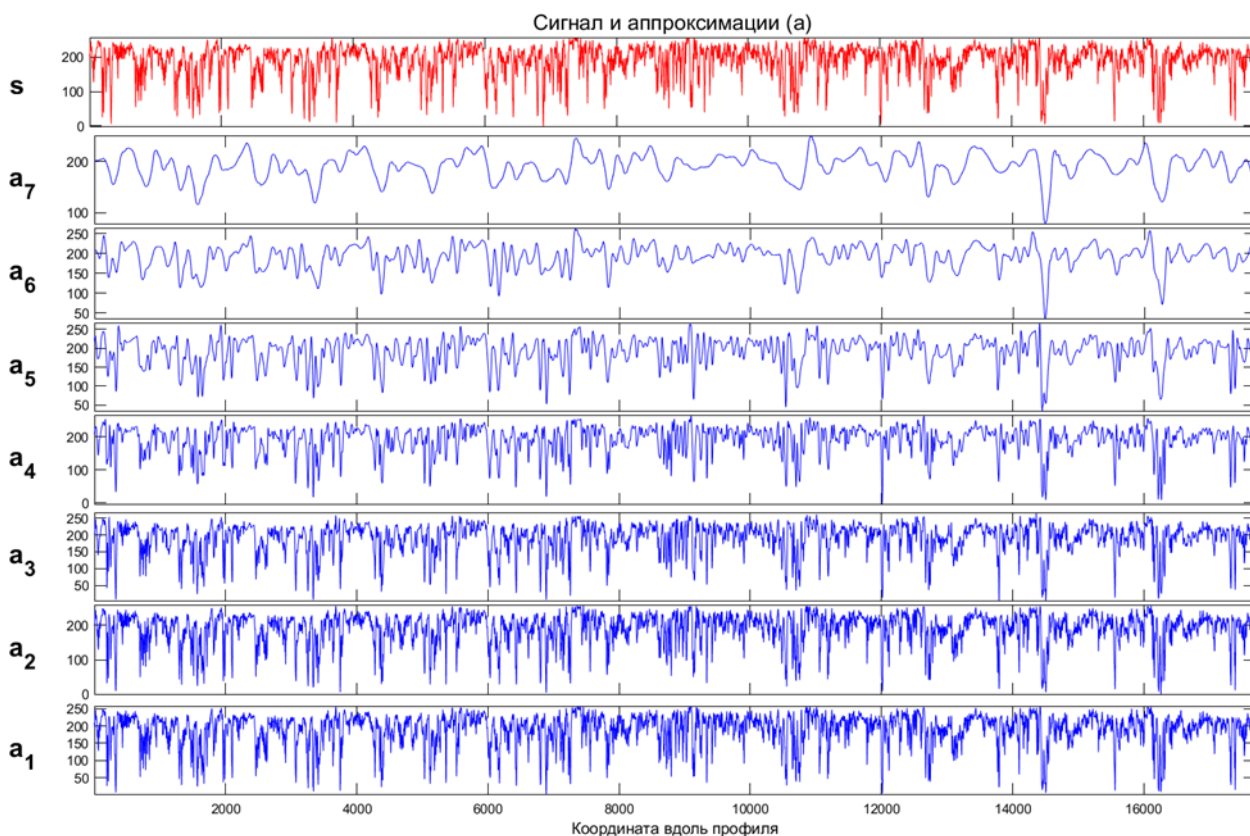


Рис. 8. Коэффициенты аппроксимации среза пластины сплава Ti-25Nb-5Ta после отжига при 400°C.

В результате DWT и статистической обработке определенные коэффициенты оказываются чувствительными к некоторым свойствам, так детализация 3 и 6 оказываются чувствительными к предельной прочности. Так, из таблицы 1, мы

определили, что предел прочности понижается в зависимости от температуры отжига, при 400°C – 659±5 МПа, 600°C – 546±9 Мпа, 800°C – 526±8 МПа. Зависимости, которые мы получаем исходя из коэффициентов представлены на рис. 9.

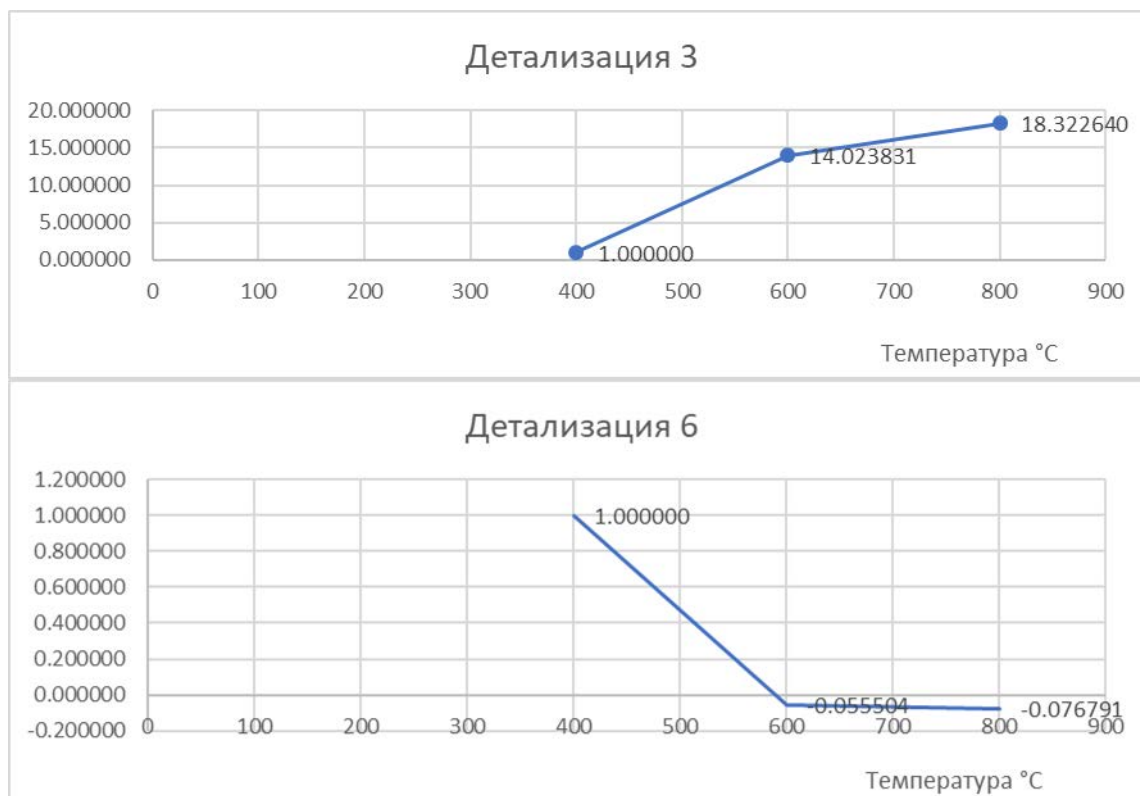


Рис. 9. Среднее арифметическое детализация 3 и 6 в зависимости от температуры.

Так как максимальное значение нормализованных данных равно единице, то, чем меньше яркость пикселя, тем меньше прогнозируемое значение прочности. Результаты, полученные по коэффициентам детализации 3 и 6 показывают, что предельная прочность материала может быть упорядочена с помощью проведенного вейвлет-анализа следующим образом  $400^{\circ}\text{C} > 600^{\circ}\text{C} > 800^{\circ}\text{C}$ . Также на основании полученных результатов может быть сделан вывод о перспективности создания в дальнейшем библиотек больших массивов вейвлет-коэффициентов МФИ различных структур материалов и последующих их оценок по определенным доверительными интервалами, что представляется перспективным для использования МФИ-анализа в задачах прогнозирования свойств материалов без их непосредственного физико-химического анализа.

### Заключение

Результаты SWT-анализа показали наличие в SWT-спектрах множества само-подобных фигур, которые являются следствием частично фрактального и частично хаотического характера текстуры пиксельных кластеров на МФИ. При этом количество уровней само-подобия может быть использовано в качестве численной оценки степени хаотичности случайной компоненты в структуре пикселей МФИ. На рис.5 визуально хорошо выделяются нескольких уровней пиксельной структуры случайной компоненты (четыре уровня) подобных фигур, что, как отмечено выше, является характеристикой величины случайной компоненты в структуре МФИ. Таким образом, количество уровней на SWT-

спектрограмме может быть использовано для количественной оценки степени хаотичности случайной компоненты в пиксельной структуре МФИ. Последнее свойство может иметь практическое применение для разделения регулярного сигнала и помехи в задачах интеллектуальной фильтрации зашумленных сигналов.

Коэффициенты DWT могут быть использованы для прогнозирования различных свойств материалов, в том числе такой важной характеристики как текстура с уже известными свойствами. Использование вейвлет-анализа в цифровом материаловедении является достаточно перспективным и должно быть продолжено. Основным конкурентом вейвлет анализа являются так называемые сети рассеяния вейвлетов. Это относительно новый тип вейвлет-нейронной сети, которая совмещает в себе SWT и DWT. Развитие данной технологии в металлургической области позволит идентифицировать и прогнозировать свойства материалов по МФИ на основе уже имеющихся данных, собранных в специальных библиотеках.

### Список литературы

1. Gupta G. et al. Application and future of composite materials: A review //Journal of Innovative Research in Science, Engineering and Technology. – 2016. – Т. 5. – №. 5. – С. 6907-6911.
2. Kutz M. (ed.). Mechanical engineers' handbook, volume 1: Materials and engineering mechanics. – John Wiley & Sons, 2015.
3. Khan M. K., Wang Q. Y., Fitzpatrick M. E. Atomic force microscopy (AFM) for materials



characterization //Materials Characterization Using Nondestructive Evaluation (NDE) Methods. – Woodhead Publishing, 2016. – С. 1-16.

4. Riss A. et al. Local electronic and chemical structure of oligo-acetylene derivatives formed through radical cyclizations at a surface //Nano letters. – 2014. – Т. 14. – №. 5. – С. 2251-2255.

5. Tilli M. et al. (ed.). Handbook of silicon based MEMS materials and technologies. – Elsevier, 2020.

6. Mochizuki Y. et al. Gasification of carbon/carbon composite prepared from pyrolyzed char of low-grade coke and low-rank coal //Powder Technology. – 2019. – Т. 355. – С. 782-792.

7. Gribble C. M. et al. Porometry, porosimetry, image analysis and void network modelling in the study of the pore-level properties of filters //Chemical engineering science. – 2011. – Т. 66. – №. 16. – С. 3701-3709.

8. Hilton M. et al. Wavelet denoising of functional MRI data //Wavelets in Medicine and Biology. – Routledge, 2017. – С. 93-114.

9. Wielgus M. et al. Continuous wavelet transform for d-space distribution analysis in nanocrystalline materials //Advanced Topics in Optoelectronics, Microelectronics, and Nanotechnologies VI. – SPIE, 2012. – Т. 8411. – С. 69-74.

10. Блаттер, К. Вейвлет-анализ. Основы теории / К. Блаттер. – М.: Техносфера, 2006.– 272 с.

11. Geri M. et al. Time-resolved mechanical spectroscopy of soft materials via optimally windowed chirps //Physical Review X. – 2018. – Т. 8. – №. 4. – С. 041042.

12. Филяк М. М. и др. Вейвлет-анализ изображений поверхности керамических материалов как метод измерения размеров её структурных элементов //Измерительная техника. – 2020. – №. 2. – С. 50.

13. Lyashenko V., Mohammad A., Kobylin O. Wavelet Analysis as a Learning Tool a Polymer Composites. – 2017.

14. Хейфец М. Л. и др. Применение вейвлет-анализа для изучения структур и свойств конструкционных материалов// Nonlinear Dynamics and Applications. Vol. 27 (2021)

15. Knitter-Piątkowska A., Dobrzycki A. Application of wavelet transform to damage identification in the steel structure elements //Applied Sciences. – 2020. – Т. 10. – №. 22. – С. 8198.

16. Sonawane M. R., Agrawal D. G. Texture classification with feature analysis using wavelet approach: a review. – 2013.

17. Sonawane M. R., Agrawal D. G. Texture classification with feature analysis using wavelet approach: a review. – 2013.

УДК 543.422.3

Артемьева У.В., Спешилов И.О.

**Спектрофотометрическое исследование состава бромсодержащего электролита**

Артемьева Ульяна Валерьевна – магистрант 1-го года обучения кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; uliyka00@mail.ru

Спешилов Иван Олегович – кандидат технических наук, научный сотрудник научно-образовательной лаборатории «Электроактивные материалы и химические источники тока»;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В статье рассмотрены составы бромсодержащих электролитов с помощью спектрофотометрического метода. На основании проведенных исследований было выявлено, что рост концентрации кислоты в броматном электролите ускоряет образование брома, который играет важную роль в определении мощности системы.*

*Ключевые слова: водородно-броматная проточная редокс-батарея, спектрофотометрический анализ, бром, химические источники тока.*

**Spectrophotometric study of the composition of a bromine electrolyte**

Artemyeva U.V., Speshilov I.O.

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

*The article considers the compositions of bromine electrolytes using the spectrophotometric method. Based on the conducted studies, it was revealed that with an increase in the concentration of acid in the bromine electrolyte, it catalyzes the formation of bromine, which plays an important role in determining the power of the system.*

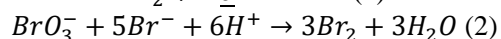
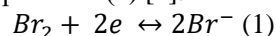
*Key words: hydrogen-bromate redox flow battery, spectrophotometric analysis, bromine, chemical current sources.*

**Введение**

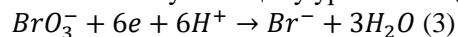
В настоящее время все большую популярность приобретают гибридные химические источники тока (ХИТ), среди которых проточные редокс-батареи (ПРБ) занимают особое место. Следует выделить наиболее распространенных батареи ванадиевые, цинк-бромные, литиевые, водород-галогенные, а также суспензионные и использующие редокс-медиаторы [1].

Проточные редокс-батареи могут стать ключевыми элементами продолжительного хранения электрической энергии в стационарных системах. Их принцип работы заключается в преобразовании электрической энергии в химическую форму, что позволяет оптимально расходовать доступные энергетические ресурсы. Более того, долговечность, гибкость конструкции и способность справляться с пиковыми нагрузками делают эти батареи очень привлекательными для различных групп потребителей. Наблюдаемые достижения в области проточных редокс-батарей свидетельствуют о многогранных научных и технологических исследованиях, необходимых для их создания. В результате, эти устройства приобретают все более высокую надежность и перспективность как средство для обеспечения устойчивого развития современных энергетических систем. Большинство ПРБ имеют маленькую удельную мощность (например, ванадиевые редокс-батареи выдают мощность менее 0,2 Вт/см<sup>2</sup>). Однако, с усовершенствованием водородно-бромных батарей было доказано, что удельная мощность может достигать 1 Вт/см<sup>2</sup> [2]. Но такие ПРБ имеют ряд недостатков, таких как низкая удельная энергоёмкость, токсичность и коррозионная

активность Br<sub>2</sub>. В связи с этим перспективным решением может стать применение водородно-броматных редокс-батарей. Ключевым преимуществом броматного аниона является высокий окислительно-восстановительный заряд и энергоёмкость благодаря высокой растворимости LiBrO<sub>3</sub> в водных растворах и шестиэлектродному процессу электровосстановления аниона [3]. Редокс-медиаторный механизм состоит из гетерогенной обратимой реакции (1) и необратимой реакции конпропорционирования (2) [4].



В процессе повторения реакционных циклов (1) и (2), бромат-анион постепенно превращается в бромид, что соответствует общему уравнению (3) [1].



Цель данного исследования – это определение содержания брома в процессе работы броматного электролита методом оптической спектрофотометрии.

**Экспериментальная часть**

Для проведения экспериментальных измерений были использованы следующие вещества: бромат лития, бромид лития марки «ч.д.а.», из которых были приготовлены 5 растворов в тридистиллированной воде в различных мольных соотношениях 1:0, 1:3, 1:1, 3:1, 0:1 соответственно.

В качестве установки был использован волоконно-оптический спектрофотометр Avantes StarLine AvaSpec2048. Данный прибор оснащен ячейкой оригинальной конструкции, обозначенной

цифрой 4 на рисунке 1 [5]; длина оптического пути 0,06 см, спектры регистрировались каждые 20 с.

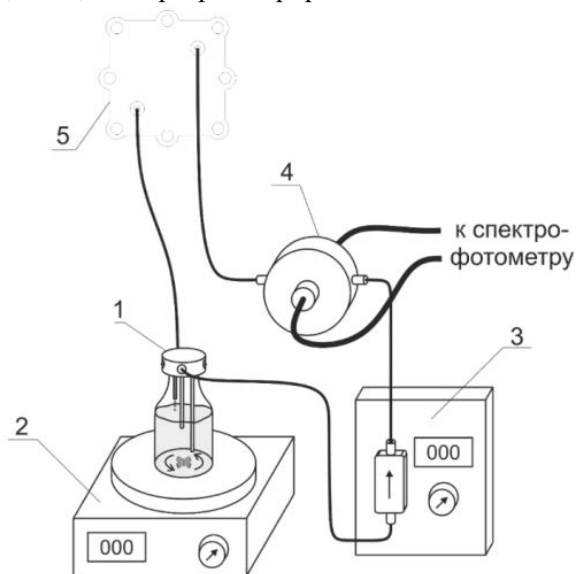


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для исследования эволюции бромсодержащего электролита водородно-броматной ПРБ: 1 – резервуар с двумя линиями для подключения к проточной оптической кювете и ПРБ; 2 – магнитная мешалка; 3 – насосный блок; 4 – проточная оптическая кювета с оптоволоконными кабелями; 5 – водородно-броматная батарея.

До начала эксперимента был снят референсный спектр фонового электролита 0,15 М  $\text{H}_2\text{SO}_4$ . Затем в резервуар налили 10 мл анализируемого раствора, подключили магнитную мешалку, после чего был включен насосный блок. С помощью дозиметра добавили 150 мкл 1М серной кислоты. Измерение проводили до прекращения изменения спектров.

При 100% содержании бромидов (рис. 2а) происходит рост поглощения на длине волны 260 нм, что соответствует трибромиду. При мольном соотношении бромидов к бромату 3:1, 1:1 и 1:3 соответственно (рис. 2б-г) происходит рост пика при длине волны 390 нм, что совпадает со спектром брома. При 100% содержании броматов (рис. 2д) изменений за время эксперимента не было выявлено, т.к. согласно реакции (2) для образования брома необходимо наличие в растворе бромидов-ионов [6].

С ростом концентрации брома растет мощность батареи, но при этом увеличивается его коррозионное воздействие. Для оптимизации содержания брома в электролите были измерены спектры в процессе разряда водородно-броматной батареи. Электролит состоял из 1М  $\text{LiBrO}_3$  и 1М серной кислоты в количестве: 30, 50, 150 и 300 мл. Батарею разряжали током 0,25 А/см<sup>2</sup>.

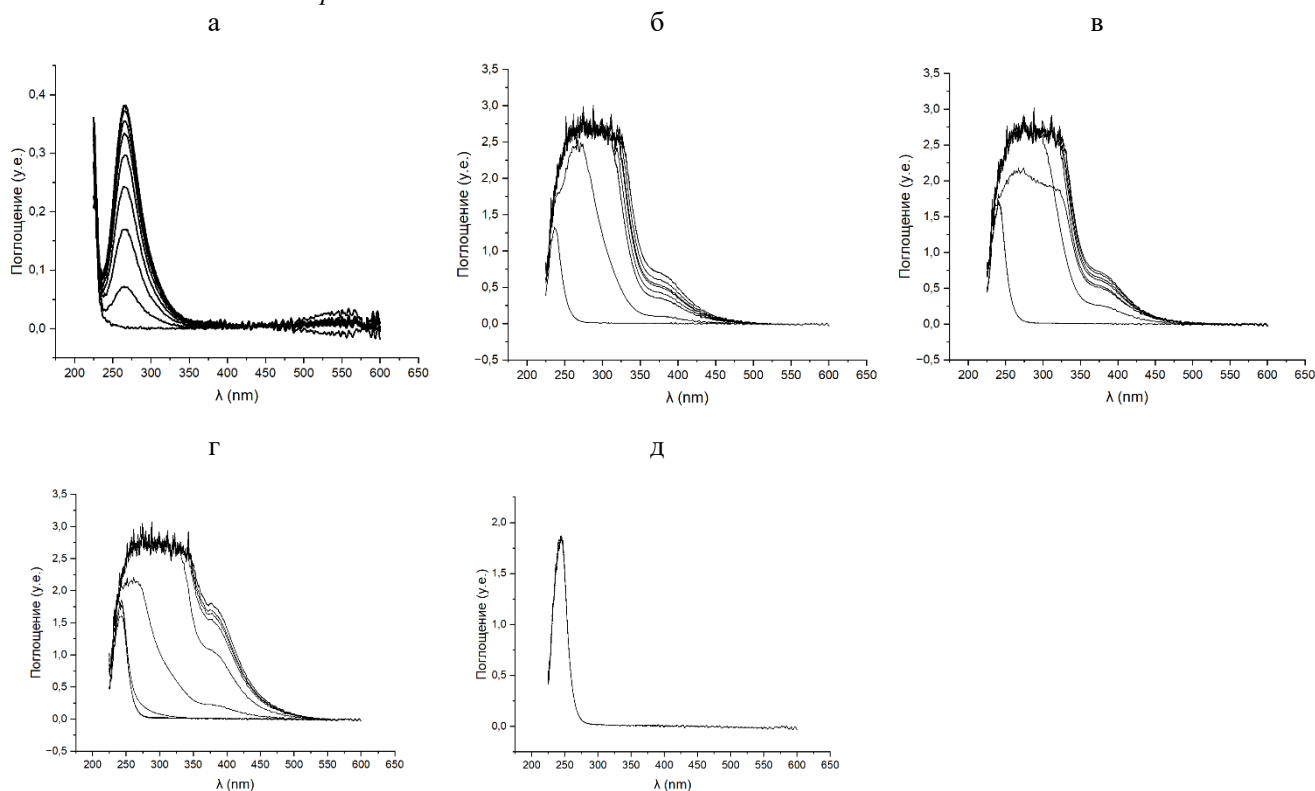


Рис. 2. Спектральные кривые бромсодержащих электролитов, в которых содержание бромидов составляло: (а) 100%; (б) 75%; (в) 50%; (г) 25%; (д) 0%.

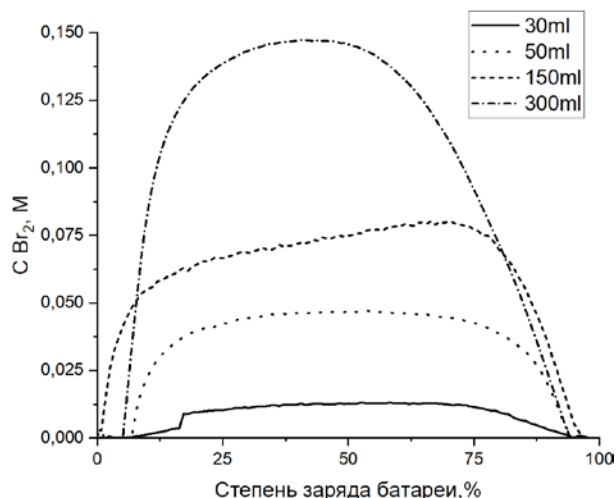


Рис. 3 Зависимость концентрации брома от степени заряда при различном содержании кислоты в электролите.

С увеличением содержания кислоты в электролите количество образующегося брома в процессе работы батареи растет, как показано на рисунке 3. Вместе с тем повышается удельная мощность, получаемая при разряде батареи рис. 4. При концентрации кислоты 0,3 М удельная мощность достигает значений 0,375 Вт/см<sup>2</sup> при содержании брома до 0,15 М. Дальнейшее увеличение концентрации позволит получить большую мощность.

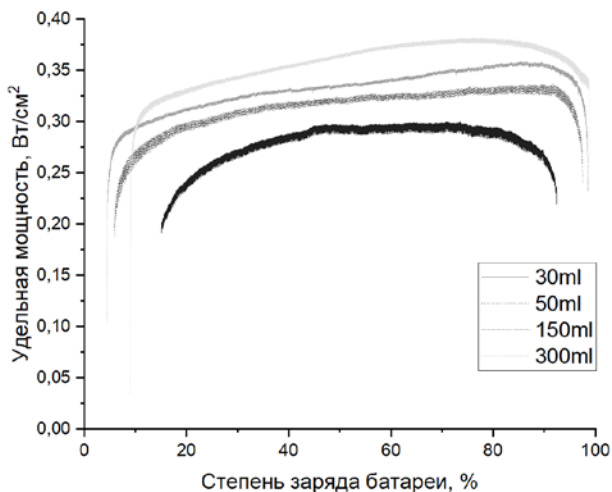


Рис. 4 Зависимость мощности от степени заряда при различном содержании кислоты в электролите.

### Заключение

Методом оптической фотометрии удалось определить содержание брома, образующегося в процессе работы водородно-броматной батареи. Установлено, что с ростом содержания кислоты в электролите увеличивается количество образующегося брома, который определяет мощность системы.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФ № 21-73-30029*

### Список литературы

1. Петров М. М., Модестов А. Д., Конев Д. В. [и др.] Проточные редокс-батареи: место в современной структуре электроэнергетики и сравнительные характеристики основных типов // Успехи химии. – Т.90. - № 6. – 2021. – с.677-702.
2. Cho K. T. et al. Optimization and analysis of high-power hydrogen/bromine-flow batteries for grid-scale energy storage // Energy Technology. – 2013. – 1(10) – P. 596-608.
3. Modestov A.D., Konev D.V., Antipov A.E., Petrov M.M., Pichugov R.D., Vorotyntsev M.A. Bromate electroreduction from sulfuric acid solution at rotating disk electrode: Experimental study // Electrochimica Acta. – V. 259. – 2018. – p. 655-663.
4. Антипов А. Е. Медиаторный редокс-автокатализ восстановления многоэлектронного окислителя для водородно-броматных проточных редокс-батарей: автореферат дис. ... д. х. н.: 02.00.05. / Антипов Анатолий Евгеньевич; ФГБОУ ВО Кубанский государственный университет. - Краснодар, 2019. - 34 с.
5. Патент РФ 190893, 16.07.2019.
6. Beckwith, R. C. Characteristics of aqueous bromine and hypobromous acid and the kinetics and mechanism of the reaction of bromine and hydroxylamine PhD / Richard Clare Beckwith; Purdue University. – 1997.

УДК: 541.138

Рыбакова А.Л., Спешилов И.О.

**Исследование состава броматного электролита методом циклической вольтамперометрии**

Рыбакова Александра Львовна – магистрант 1-го года обучения кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; [sashulia.com@gmail.com](mailto:sashulia.com@gmail.com)

Спешилов Иван Олегович – кандидат технических наук, научный сотрудник научно-образовательной лаборатории «Электроактивные материалы и химические источники тока»

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*Работа посвящена исследованию состава броматного электролита в процессе работы проточной редокс-батареи с использованием метода циклической вольтамперометрии. Показана возможность применимости данного метода для определения концентрации бромид ионов и определения степени заряда батареи.*

*Ключевые слова: водородно-броматная проточная редокс-батарея, in situ измерения, бромид-ион, циклическая вольтамперометрия.*

**The study of the composition of bromate electrolyte by cyclic voltammetry**

Rybakova A.L., Speshilov I.O.

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

*The work is devoted to the study of the composition of the bromate electrolyte during the operation of a redox flow battery using the method of cyclic voltammetry. The applicability of this method to determine the concentration of bromide ions and determine the degree of battery charge is shown.*

*Key words: hydrogen-bromate redox flow batteries, in situ measurements, bromide ion, cyclic voltammetry.*

**Введение**

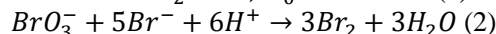
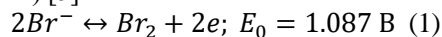
Расширение использования возобновляемых источников энергии в сочетании с усиленной электрификацией может оказаться решающим фактором для достижения миром ключевых целей в области климата. Возобновляемые источники энергии уже составляют более половины вновь установленных мощностей по выработке электроэнергии [1].

В настоящее время используются различные устройства энергонакопления, но, в совокупности со значительными на них капитальными затратами, предпочтение смещается в пользу различных химических источников тока (ХИТ), запасующих электроэнергию в форме редокс-активных соединений. Особенно актуальными в масштабе стационарного хранения электроэнергии являются проточные редокс-батареи (ПРБ). В них электроэнергия образуется путем окисления и восстановления соответствующих редокс-активных электролитов, хранящихся в отдельных емкостях и циркулирующих в электродных полупространствах мембранно-электродного блока (МЭБ), разделенных сепаратором [2]. Проточные редокс-батареи сочетают принципы топливных элементов и литий-ионных аккумуляторов, что дает им преимущество по сравнению с остальными видами ХИТ, а именно возможность независимого масштабирования мощностных и емкостных характеристик накопителя электроэнергии.

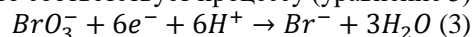
Типичным представителем ПРБ является ванадиевая редокс-батарея, в которой в качестве электролитов используются растворы солей ванадия [3]. Ванадиевые ПРБ – одни из самых изученных, демонстрируют хороший баланс ключевых характеристик, но имеют низкую удельную мощность энергии 0,2 Вт\*см<sup>-2</sup> [4]. Увеличение мощности может

быть достигнуто переходом к броматным ПРБ. Водные растворы броматов характеризуются высокой теоретической плотностью энергии за счет сочетания высокой растворимости и шестиэлектронного характера превращения бромат-аниона в бромид-анион. Следует отметить высокую химическую стабильность и низкую токсичность такого соединения в сравнении с молекулярным галогеном, а также дешевизну и доступность сырья для его производства. Все эти факторы в совокупности обеспечивают достаточно низкую стоимость вырабатываемой электроэнергии.

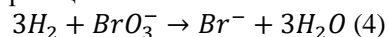
Бромат-анионы долгое время не рассматривались в электрохимической энергетике из-за их низкой электрохимической активности, хотя большие скорости восстановления бромат-ионов все-таки достижимы при сочетании редокс-реакции восстановления молекулярного брома (уравнение 1), проходящей на электродах без дополнительных катализаторов, с гомогенным процессом конпропорционирования, протекающим в растворе (уравнение 2) [5]:



В результате циклического повторения реакций 1 и 2 бромат-анион постепенно превращается в бромид-анион, что соответствует процессу (уравнение 3):



Общий механизм работы броматной батареи описывается реакцией:



На рис. 1 представлен общий принцип работы проточной броматной батареи на основе реакций 1-4 [6]:

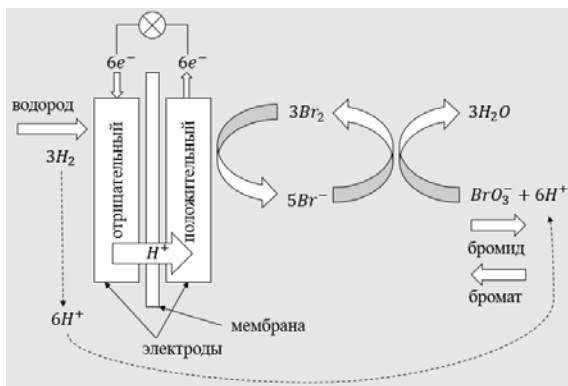


Рис. 1. Общий принцип работы броматной ПРБ

В данной статье рассматривается броматная ПРБ. Целью работы являлось определение бромид-ионов в составе броматного электролита с помощью метода циклической вольтамперометрии.

### Экспериментальная часть

Из 2М растворов LiBr и LiBrO<sub>3</sub> были приготовлены растворы с соотношением LiBr : LiBrO<sub>3</sub> = 1:0, 3:1, 1:1,

3:1, 0:1, с общим содержанием Li<sup>+</sup> 1М. Каждый раствор поочередно вливали в емкость и собирали 3-хэлектродную ячейку, состоящую из рабочего микроэлектрода с толщиной платины 10 мкм, противозэлектрода на основе платины с площадью поверхности во много раз больше поверхности микроэлектрода и хлоридсеребряного электрода сравнения, который подключали через солевой мостик с 1М раствором Li<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. После включали потенциостат Р-45Х (Черноголовка, Россия) и подключали электроды к соответствующим разъемам. Далее снимали циклическую развертку от 0.8 до 0 обратно до 1.5 В со скоростью развертки 10 и 50 мВ/с. Перед каждым экспериментом микроэлектрод полировали. Для полирования использовали алмазные пасты с размерами частиц 1.00, 0.25 и 0.05 мкм, нанесенными на полировальный войлок.

На рис. 2 изображены циклические вольтамперограммы (ЦВГ) для различных мольных соотношений концентраций LiBr:LiBrO<sub>3</sub> при скоростях развертки 10 мВ/с и 50 мВ/с.

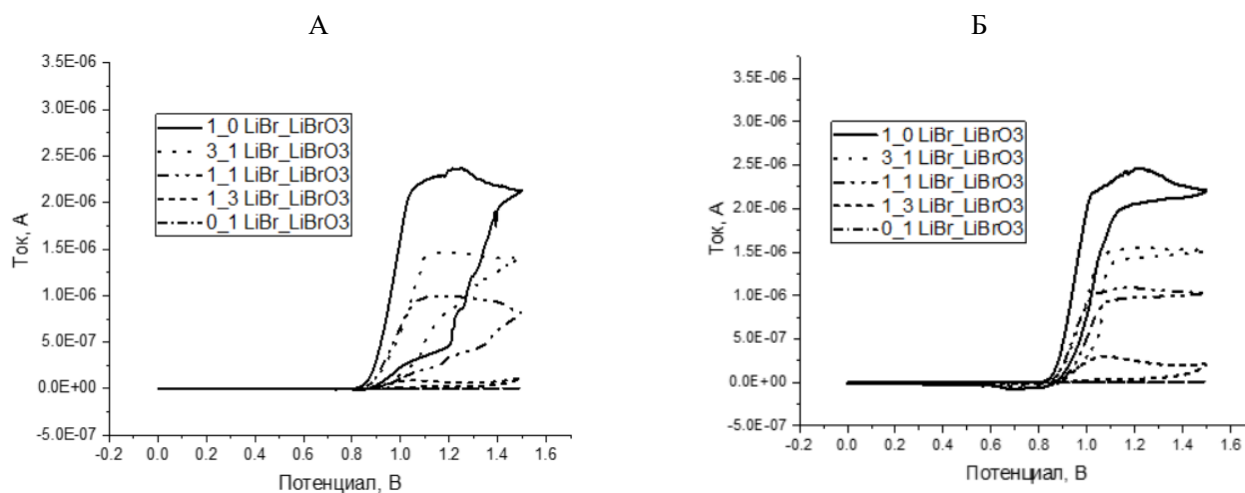


Рис. 2. ЦВГ растворов бромид:бромат с мольными соотношениями 1:0, 3:1, 1:1, 3:1, 0:1. Скорость развертки: А - 10 мВ/с. Б - 50 мВ/с.

Проанализировав полученные данные, пришли к выводу, что для дальнейшего исследования следует выбрать скорость развертки 50 мВ/с, так как при снятии кривых на скорости 10 мВ/с траектории движения точек при окислении и восстановлении не были сопоставимы. Далее при выбранной скорости развертки был построен график зависимости предельной плотности тока от содержания LiBr в растворе (рис. 3).

Далее проводили измерения в процессе разряда водородно-броматной проточной редокс-батареи. В процессе разряда батареи использовали раствор 1М бромата лития в объеме 10 мл с добавлением 30 мМ серной кислоты. Батарею разряжали током 0,25 А/см<sup>2</sup>. По полученным данным строили график зависимости концентрации бромата от степени заряда батареи (СЗБ). Экспериментальные данные сопоставили с результатами термодинамического моделирования (рис. 4).

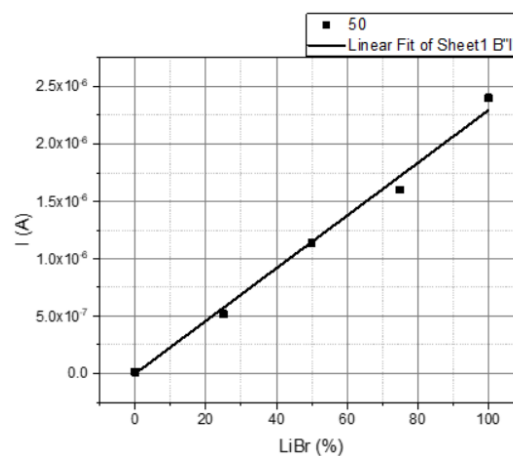


Рис. 3. Зависимость предельного тока на ЦВГ от содержания в растворе бромата лития при скорости развертки 50 мВ/с.

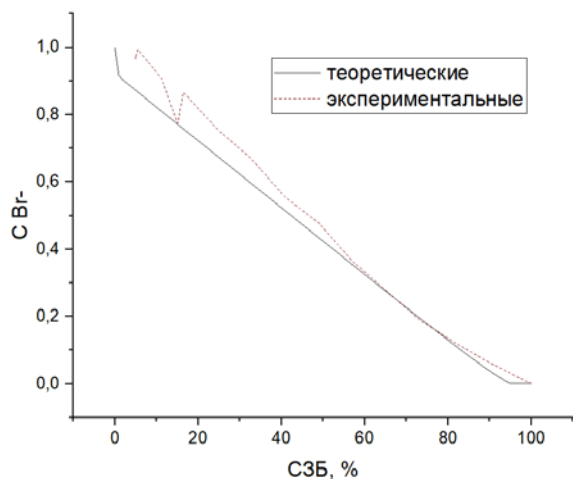


Рис. 4. Зависимость концентрации бромид-аниона от степени заряда батареи: Сплошная – теоретические, пунктирная – экспериментальные.

### Заключение

Были построены циклические вольтамперограммы растворов бромид:бромат с различными мольными соотношениями при скоростях развертки 10 и 50 мВ/с, график зависимости предельного тока на ЦВГ от содержания в растворе бромида лития при выбранной скорости развертки 50 мВ/с, используя который возможно определять концентрацию бромид-иона в электролите.

В ходе работы получены сопоставимые с результатами моделирования экспериментальные данные, поэтому метод циклической вольтамперометрии можно использовать в

дальнейшем для определения состава электролита и степени заряда батареи.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 21-73-30029*

### Список литературы

1. Глобальная трансформация энергетики: дорожная карта до 2050 г. [Электронный ресурс]. <https://www.irena.org/publications/2019/Apr/Global-energy-transformation-A-roadmap-to-2050-2019Edition> (дата обращения: 11.05.23)
2. Weber A.Z., MENCH M.M., Meyers J.P. et al. Redox flow batteries: a review // J Appl Electrochem. – V.41. – 2011. – p.1137–1164.
3. Skyllas-Kazacos M., Kazacos G., Poon G., Verseema H. Recent advances with UNSW vanadium-based redox flow batteries // Int. J. Energy Res. – V.34. – №2. – 2010. – p.182-189.
4. Cho K.T. et al. Optimization and analysis of high-power hydrogen/bromine-flow batteries for grid-scale energy storage // Energy Technology. – V.1. - №10. – 2013. – p.596-608.
5. Петров М. М., Модестов А. Д., Конев Д. В. [и др.] Проточные редокс-батареи: место в современной структуре электроэнергетики и сравнительные характеристики основных типов // Успехи химии. – Т.90. - № 6. – 2021. – с.677-702.
6. Modestov A., Kartashova N., Pichugov R., Petrov M., Antipov A., Abunaeva L. Bromine Crossover in Operando Analysis of Proton Exchange Membranes in Hydrogen-Bromate Flow Batteries // Membranes. – V.12. - №8. – 2022 – p.815.

УДК 004.418

Павлов И.Р., Кулаков Д.Г., Егоров М.С., Иванов С.И.

## Разработка веб-приложения интерпретатора натуральной речи на жестовый язык с конвейером анимации жестов

Павлов Илья Русланович, студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: [ilyapavlo667@gmail.com](mailto:ilyapavlo667@gmail.com);

Кулаков Дмитрий Геннадьевич, студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга e-mail: [dimacreator1998@gmail.com](mailto:dimacreator1998@gmail.com);

Егоров Матвей Сергеевич, студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: [m.voroge@bk.ru](mailto:m.voroge@bk.ru);

Иванов Святослав Игоревич, к.т.н., руководитель отдела разработки #3 ООО “КристалД”

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

*Данная работа описывает разработку веб-приложения с интеграцией конвейера анимации для перевода натуральной речи на жестовый язык. В статье рассматриваются принципы работы приложения, выбранные технологии, такие как ASP.NET, Blazor WebAssembly и Unity, а также процесс перевода и взаимодействие с базой данных через API. Описывается важность такого приложения в разрушении коммуникационных барьеров и его потенциальное применение в различных сферах.*

*Ключевые слова: жестовый язык, разработка, веб-приложение, интерпретатор*

## Development of a web application for a natural language to sign language interpreter with a gesture animation pipeline

Pavlov I.R., Kulakov D.G., Egorov M.S., Ivanov S.I.

Russian University of Chemical Technology named after D.I. Mendeleev, Moscow, Russia/

*This paper describes the development of a web application integrating an animation pipeline to translate natural speech into sign language. The paper discusses the principles of the application, the selected technologies such as ASP.NET, Blazor WebAssembly and Unity, as well as the translation process and interaction with the database via API. It describes the importance of such an application in breaking down communication barriers and its potential application in various fields.*

*Keywords: gesture language, development, web application, interpreter*

### Введение

Глухие люди имеют ограниченный доступ к информации, которая передается звуковыми сигналами, такими как речь. Более 5% населения мира страдает от инвалидизирующую потери слуха, что приводит к необходимости использования других способов коммуникации, таких как жестовый язык. Однако, не все глухие люди владеют жестовым языком на должном уровне, что может привести к проблемам в получении образования, коммуникации, потреблении контента и восприятия информации. Для решения этой проблемы необходимо создать переводчик, который бы переводил натуральную речь на жестовый язык.

### Термины

• Веб-приложение - приложение, которое работает в веб-браузере и доступно через интернет. В данной работе речь идет о разработке веб-приложения для перевода натуральной речи на жестовый язык.

• Конвейер анимации - механизм, используемый для создания и отображения анимации. В данной статье конвейер анимации используется для отображения жестов, соответствующих переведенным словам или фразам.

• Натуральная речь — естественный способ общения людей, основанный на голосе, интонации, жестах и мимике. В данной работе разработано веб-

приложение, которое переводит натуральную речь на жестовый язык.

• Жестовый язык - система коммуникации, использующая жесты и мимику для передачи сообщений. В данной статье фокусируется на переводе натуральной речи на жестовый язык с помощью веб-приложения.

• API (Application Programming Interface) — набор программных инструментов и протоколов, который позволяет различным приложениям взаимодействовать между собой. В данной статье API используется для связи между веб-приложением, базой данных и конвейером анимации.

• ASP.NET - кроссплатформенный фреймворк разработки веб-приложений, использующий язык программирования C# и различные инструменты для создания высокопроизводительных приложений. В данной работе используется ASP.NET для разработки серверной части веб-приложения.

• Blazor WebAssembly - фреймворк для создания интерактивных пользовательских интерфейсов на C# веб-приложениях. В данной работе Blazor WebAssembly выбран для разработки клиентской части веб-приложения.

### Описание проблем восприятия информации глухих людей и почему нужен переводчик

Начнем с того, что по данным Всемирной организации здравоохранения [1], более 5%



населения мира - 360 миллионов человек (328 миллионов взрослых людей и 32 миллиона детей) - страдают от инвалидизирующую потери слуха, которая определяется как потеря слуха в слышащем лучше ухе, превышающая 40 дБ у взрослых людей и 30 дБ у детей. Данные цифры говорят о том, что проблема глухоты является достаточно распространенной и требует поиска альтернативных средств коммуникации для глухих людей.

Для слышащих людей основным средством коммуникации является звук. Однако для глухих людей зрение является основным и единственным средством коммуникации. Глухие люди вынуждены использовать невербальные языки, в том числе жестовый язык, для общения.

Учитывая тот факт, что вербальные языки могут быть перенесены в текст, что является информацией, доступной для глухих людей, вопрос о ее восприятии может быть не столь явным. Тем не менее, данная интерпретация вербального языка подходит лишь для глухих, которые обладают достаточным уровнем владения им. В России большое количество глухих выпускников не владеют вербальным языком достаточно хорошо для того, чтобы понимать информацию в виде текста [2].

Следовательно, необходимость в создании новых методов и технологий для перевода вербального языка на жестовый является актуальной задачей, которая может значительно улучшить доступность и коммуникацию глухих людей в современном мире.

#### Существующие решения перевода жестового языка

В настоящее время проблема коммуникации глухих людей решается путем найма сурдопереводчиков, которые переводят жестовый язык на нужный вербальный язык. Несмотря на то, что в России существует всего один вуз, готовящий бакалавров переводчиков РЖЯ, это недостаточно, чтобы удовлетворить потребности глухих в переводе и обеспечить его качество. ВОГ сообщает о нехватке около 4 тысяч переводчиков с жестового языка глухих в России. Проблема остро ощущалась во время пандемии, когда слабослышащие люди не могли получать оперативную и достаточную информацию. Нехватка сурдопереводчиков связана с трудностью обучения квалифицированных специалистов и сложностью самого процесса перевода, который требует физической нагрузки для переводчика, что препятствует долгому и непрерывному процессу перевода.

Для решения проблемы человеческих ресурсов может быть использована вычислительная техника и компьютерные технологии, которые могут разрабатывать сервисы, помогающие жестоговорящему населению. Некоторые такие сервисы уже существуют, например, российский сервис «Адаптис», который связывает жестоговорящих людей и сурдопереводчиков, сокращая затраты времени сурдопереводчика на дорогу до клиента и время поиска нужного специалиста клиентом. Тем не менее, этот подход не

решает проблемы нехватки сурдопереводчиков, а только уменьшает её.

Другой сервис, бразильский «Hand Talk», предоставляет переводчик, который напоминает классические онлайн переводчики от компаний Яндекс или Google. Однако, у этого сервиса есть свои ограничения, такие как отсутствие большого количества языков и сложности добавления новых языков, которые требуют работы аниматора и процесса анимирования 3D анимации. Кроме того, этот сервис ограничен по количеству символов

#### Описание предлагаемого решения

Для решения проблем, связанных с существующими сервисами, предлагается создание системы, которая удовлетворяет ряду критериев:

- удобство использования;
- простоту добавления жестов новых языков;
- возможность работы с различными форматами данных (видео, аудио, текст);
- качество отображения;
- качество перевода;

Одним из ключевых критериев является удобство использования. Для достижения этой цели предлагается создание различных инструментов для перевода, таких как веб-приложение с внедрением конвейера анимации жестов. Такой подход позволит пользователям получать быстрый и точный перевод жестов на вербальный язык, сокращая время и усилия, затрачиваемые на поиск и общение с сурдопереводчиками.

В контексте создания такой системы важно обеспечить высокое качество перевода и отображения жестов, что можно достичь путем использования передовых технологий и методов машинного обучения. Также необходимо предусмотреть возможность перевода различных форматов данных, включая видео, аудио и текст.

Таким образом, создание системы с учетом всех вышеуказанных критериев может значительно упростить процесс перевода жестов на вербальный язык для людей с ограниченными возможностями слуха и речи.

#### Результаты разработки

Как было сказано выше, для сервиса необходимо, чтобы было обеспечено удобство в использовании. Одним из вариантов выполнения требования является разработка Web-приложения. Где приложение разделяется на клиентскую часть, то есть Single Page Application и серверную часть – REST API.

Почему именно Web-приложение? На текущий момент существует 3 типа приложений. (рис. 1)



Рисунок 1. Типы приложений

Разработка десктопных приложений подразумевает установку клиента на компьютере

пользователя, что может приводить к проблемам совместимости с различными характеристиками железа (тип операционной системы, процессора, видеокарты и прочее), а также к необходимости скачивания постоянных обновлений. Мобильные приложения, в свою очередь, ориентированы на определенную операционную систему (Android, iOS и т.д.), что также создает проблемы для разработчиков. В то же время, Web-приложения являются наиболее динамично развивающимся типом приложений, так как для их работы достаточно установленного браузера на устройстве пользователя. Это делает их практически независимыми от характеристик железа, что упрощает их разработку и сопровождение. Кроме того, по функционалу Web-приложения скоро смогут сравняться с десктопными аналогами.

Web-приложения функционируют на основе двух компонентов: серверной (backend) и клиентской (frontend) частей. Разработка клиентской части приложения требует создания HTML-разметки, таблиц стилей CSS и JavaScript-скриптов, а для упрощения процесса разработки используются специальные frontend-фреймворки, включая Angular, React, Vue и Blazor.

Разработка серверной части приложений связана с использованием ряда языков программирования, таких как Java, Python, C#, C++, а для упрощения процесса разработки серверной части часто применяются backend-фреймворки, такие как Django, Asp.Net и веб-серверы, например, Nginx.

При разработке серверной части приложения используют архитектурный стиль проектирования Application Programming Interface (API) и протокол передачи данных HyperText Transfer Protocol (HTTP), который известен как Representational State Transfer (REST). REST API используется для предоставления данных с сервера пользователю веб-приложения и отличается большой гибкостью.

Для реализации серверной части прототипа Web-приложения был выбран кросс-платформенный фреймворк ASP.NET[3], основанный на языке

программирования C#, который обеспечивает высокую производительность REST API[4] для различных клиентов и позволяет использовать микросервисную архитектуру.

Для хранения большого объема сгенерированных файлов анимации, представленных в формате JSON объектов, была выбрана NoSQL СУБД MongoDB.

Для реализации клиентской части был выбран UI-фреймворк Blazor WebAssembly от компании Microsoft, который позволяет создавать многофункциональные интерактивные пользовательские интерфейсы на C# вместо JavaScript, использовать совместно серверную и клиентскую логику приложений, отображать пользовательский интерфейс в виде HTML-страницы с CSS для широкой поддержки браузеров, а также интегрироваться с современными платформами размещения, такими как Docker. Благодаря Blazor также возможно создание гибридных классических и мобильных приложений с помощью .NET.

Для визуализации жестов в реальном времени, используемых в жестовом языке, в переводчике применяется конвейер анимации на основе движка Unity. Движок Unity использует фреймворк Mono для компиляции кода под различные платформы и задачи, что позволяет его легко адаптировать к различным условиям. Например, он, может быть, нативно скомпилирован для мобильных устройств или скомпилирован в формате WebGL для использования в веб-приложениях. Благодаря этому, конвейер анимации можно легко внедрить в переводчик.

В рамках разработки прототипа Web-приложения с использованием перечисленных технологий был разработан функционал, позволяющий пользователю посмотреть демо-фразы, а также ввести свой текст для перевода.

На странице переводчика есть демо фразы, которые можно посмотреть, как пример перевода, а также присутствует форма для ввода своего текста (рис 2.). Страница содержит словарь жестов, которые сейчас есть в базе данных сервиса.



Рисунок 2. Страница переводчика

На серверной части реализовано взаимодействие с базой данных, а именно:

- получение фразы для перевода
- получение жеста
- получение словаря жестов
- добавления фразы для перевода
- добавления SRT файла для перевода
- получение информации SRT файла

Документация для API можно посмотреть, через инструмент Swagger (рис. 3). В нем же можно отправить запрос и посмотреть результат обработки (рис. 4).

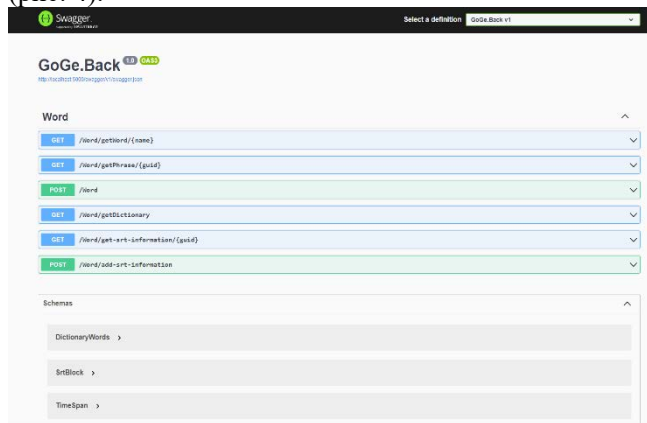


Рисунок 3. Swagger. Документация API

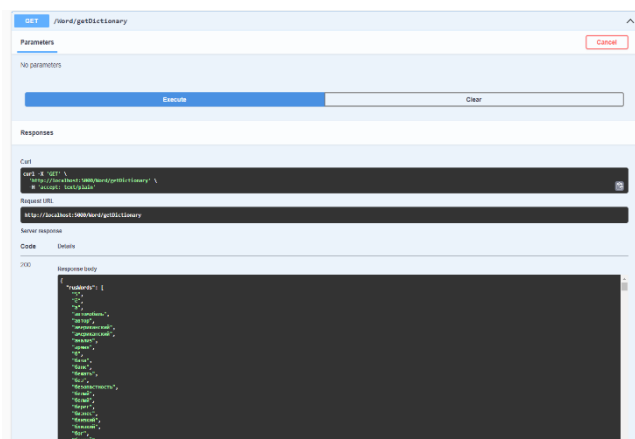


Рисунок 4. Swagger. Пример получения словаря жестов

Процесс перевода в веб-приложении инициируется вводом фразы пользователем. После

этого создается уникальный идентификатор запроса на перевод, который используется для сохранения фразы и ее идентификатора в базе данных через API. Затем пользователь перенаправляется на страницу перевода, где отображается идентификатор запроса. На этой странице интегрирован конвейер анимации, в котором происходит дальнейшая логика перевода. Конвейер использует идентификатор запроса для получения фразы для перевода и ее отображения из базы данных через API. Фраза разбивается на слова, и для каждого слова конвейер запрашивает соответствующий файл анимации. Затем пользователю предоставляется перевод с помощью анимации.

### Вывод

Разработка веб-приложения, оснащенного конвейером анимации для перевода натуральной речи на жестовый язык, представляет собой важный шаг в направлении преодоления коммуникативных препятствий в современном обществе. Разработанное приложение обладает потенциалом не только для облегчения коммуникации, но и для применения в образовательных, профессиональных и развлекательных целях.

### Список литературы

1. Всемирный доклад по проблемам слуха: резюме [World report on hearing: executive summary]. Женева: Всемирная организация здравоохранения; 2021 г. Лицензия: CC BY-NC-SA 3.0 IGO
2. Анна Комарова: Отсутствие переводчика жестов закрывает для глухих доступ к информации. // RDRU: сайт. — URL: <https://rg.ru/2012/05/12/komarova.html> (дата обращения: 05.03.2023).
3. Техническая документация .NET. — Текст: электронный // Техническая документация Microsoft Learn: [сайт]. — URL: <https://learn.microsoft.com/ru-ru/docs/> (дата обращения: 15.03.2023).
4. Арно, Л. Проектирование веб-API / Л. Арно. — ДМК Пресс, 2020. — 440 с. — Текст: непосредственный

УДК 004.8

Егоров М.С., Павлов И.Р., Кулаков Д.Г., Иванов С.И.

### **Разработка программного модуля обработки видеоданных нейронными сетями для получения ключевых точек положения тела человека в пространстве**

Егоров Матвей Сергеевич – студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; e-mail: m.voroge@bk.ru.

Павлов Илья Русланович – студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического Инжиниринга; e-mail: ilyaravlo667@gmail.com.

Кулаков Дмитрий Геннадьевич – студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; e-mail: dimacreator1998@gmail.com.

Иванов Святослав Игоревич – к.т.н., ассистент кафедры информационных компьютерных технологий, руководитель отдела разработки #3 ООО “КристалД”;

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

*В данной статье рассмотрено проектирование программного модуля обработки видеоданных нейронными сетями для получения ключевых точек положения тела человека в пространстве. Описаны инструменты, использованные для разработки модуля. Определены алгоритмы, используемые для получения наиболее подходящего для использования в 3D-моделировании формата.*

*Ключевые слова: искусственная нейронная сеть, MediaPipe, обработка видеоданных, жестовый язык.*

### **Development of a software module for processing video data by neural networks to obtain key points of the human body in space**

Egorov M. S., Pavlov I. R., Kulakov D. G., Ivanov S.I.

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

*This article discusses the design of a software module for processing video data by neural networks to obtain key points of the position of the human body in space. The tools used to develop the module are described. Algorithms used to obtain the most suitable format for use in 3D modeling are defined.*

*Keywords: artificial neural network, MediaPipe, video data processing, sign language.*

В современном мире одной из задач, которую ставят перед собой различные области науки и технологий, является создание компьютерных систем, способных эффективно обрабатывать видеоданные. В частности, в области разработки систем виртуальной и дополненной реальности, биомеханики, спортивного тренинга и медицинской диагностики необходимы инструменты для анализа и обработки видеоданных, полученных в реальном времени.

Нейросетевой подход к обработке видеозаписи движения человека, как было сказано выше, может применяться в медицине. Так, исследование, опубликованное в журнале «nature» [1], показало доступность и эффективность использования данного метода анализа движений человека в диагностировании, планировании лечения и мониторинга результатов при таких состояниях, как болезнь Паркинсона, остеоартрит, инсульт, церебральный паралич и др. Доступность обусловлена тем, что предыдущие методы анализа движения человека возможно применять лишь с использованием дорогостоящего оборудования и более долгим процессом сбора данных.

С развитием глубокого обучения и сверточных нейронных сетей (СНС) появились эффективные методы для определения ключевых точек тела. Одним из наиболее известных подходов является OpenPose, который использует многозадачное каскадное сетевое обучение для одновременного распознавания

2D ключевых точек частей тела, включая пальцы, кисть, предплечье, плечо, голову и тело.

Классические методы компьютерного зрения, такие как детекторы особых точек и дескрипторы (SIFT, SURF, HOG), также применяются для выделения ключевых точек тела. Они обычно основаны на анализе локальных особенностей изображения и могут быть менее эффективными по сравнению с методами глубокого обучения.

Основной задачей разрабатываемого программного модуля, так как он создавался в рамках проекта сервиса переводчика звукового языка на жестовый – это обеспечение возможности минимизировать время и затраты на добавление каждого анимационного файла жеста. Данное требование возможно выполнить с помощью использования технологий машинного обучения, способных распознавать положение ключевых точек человека в пространстве из видео.

Подходящий же для подобной задачи подход – повторение анимационной моделью движений реального человека. При условии, что записывающий жесты человек полноценно владеет требуемым жестовым языком и заранее знает список слов, которые ему необходимо воспроизвести, время, затрачиваемое на пополнение сервиса на одно слово равно времени воспроизведения жеста в жизни и незначительное время на обработку движения с помощью программного обеспечения для подготовки

анимационного файла.

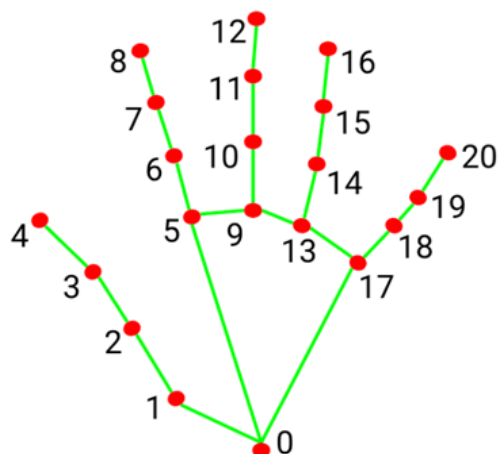
Целью модуля была разработка системы, которая могла бы точно идентифицировать и выделять ключевые точки человека из видео. Для выполнения вышеуказанных требований к системе был использован фреймворк MediaPipe, который известен своей точностью и надежностью при определении ключевых моментов в изображениях и видео. Платформа предоставляет набор инструментов и алгоритмов, позволяющих эффективно обрабатывать большие наборы данных и точно определять

ключевые точки.

У фреймворка есть следующие возможности, которые можно использовать для решаемой задачи:

1. MediaPipe Hands – это высокоточное решение для отслеживания рук и пальцев. Он использует машинное обучение, чтобы распознавать и отслеживать 21 ориентира руки в реальном времени (рис. 1). [2]

2. MediaPipe Pose – решение машинного обучения для высокоточного отслеживания позы тела, выведения 33 трехмерных ориентиров (рис. 2) [2].



- |                       |                       |
|-----------------------|-----------------------|
| 0. WRIST              | 11. MIDDLE_FINGER_DIP |
| 1. THUMB_CMC          | 12. MIDDLE_FINGER_TIP |
| 2. THUMB_MCP          | 13. RING_FINGER_MCP   |
| 3. THUMB_IP           | 14. RING_FINGER_PIP   |
| 4. THUMB_TIP          | 15. RING_FINGER_DIP   |
| 5. INDEX_FINGER_MCP   | 16. RING_FINGER_TIP   |
| 6. INDEX_FINGER_PIP   | 17. PINKY_MCP         |
| 7. INDEX_FINGER_DIP   | 18. PINKY_PIP         |
| 8. INDEX_FINGER_TIP   | 19. PINKY_DIP         |
| 9. MIDDLE_FINGER_MCP  | 20. PINKY_TIP         |
| 10. MIDDLE_FINGER_PIP |                       |

Рис. 1. 21 ориентир, распознаваемый на руке с помощью MediaPipe Hands.



Рис. 2. Пример работы распознавания MediaPipe Pose с реальными 3D координатами.

3. MediaPipe Holistic – решение, объединяющее три из вышеуказанных решений, а именно MediaPipe Pose, MediaPipe Hands и MediaPipe Face Mesh [2].

Для обработки видео использовался покадровый подход, при котором каждый кадр видео отправлялся на обработку нейросети. Фреймворк MediaPipe после обработки на выходе отдаёт массив координат по высоте, ширине и глубине, который разработанный модуль затем использует для определения положения

тела модели человека в пространстве.

Так как разработанный модуль предназначен для непосредственного использования вместе с 3D-движком Unity, то формат выходного файла анимации должен был быть совместимым с ним. Также, важной особенностью трёхмерной модели человека является то, что в ней должны быть так называемые кости, благодаря которым происходит управление моделью. И, наконец, кости не могут изменять свою длину и

места крепления, что в совокупности делает возможным управление движением этой модели зная лишь значения углов каждой кости модели, при условии, что какая-либо часть модели остаётся неподвижной, что, в свою очередь, подходит для анимации жестов.

Для выполнения совместимости формат данных с требуемым файлом, получаемый на выходе работы разработанного модуля, представлен в виде структуры json. В этом файле находится информация по анимации движения человека в виде момента времени и углам требуемых для анимации костей модели в этот момент времени.

Как указывалось выше, MediaPipe на выходе отдаёт массив координат по высоте, ширине и глубине, что не совпадает с требуемыми углами костей модели. Поэтому, одна из особенностей модуля состоит в том, что используя алгоритмы векторной алгебры и некоторых особенностей человеческой анатомии он конвертирует пространственные координаты в углы костей модели.

Следующим немаловажным фактором сервиса является плавное отображение жестов. Использование искусственных нейронных сетей не может гарантировать абсолютную точность, отсутствие погрешностей и ошибок при определении пространственных координат. Поэтому использование алгоритмов аппроксимации для сглаживания отображения – важное условие для модуля, ответственного за генерацию анимационного файла для сервиса перевода со звукового языка на жестовый.

По ряду факторов метод наименьших квадратов (МНК) оказался самым подходящим для борьбы с погрешностями работы фреймворка. Это один из наиболее распространенных и точных методов аппроксимации и часто применяется в научных и инженерных исследованиях, он позволяет учесть ошибки измерений и шумы, что делает его более устойчивым к выбросам и другим возможным искажениям данных. МНК заключается в поиске линейной функции, наилучшим образом

приближающей исходные данные. Данный метод аппроксимации применяется для нахождения коэффициентов приближающей функции, минимизируя сумму квадратов отклонений значений функции от соответствующих значений исходных данных [3].

Таким образом, разработанный модуль удовлетворил требованиям системы и его стало возможно использовать для обработки видео с жестами для выделения ключевых точек анимации. Помимо проекта, в рамках которого разрабатывался данный модуль, есть перспективы развития модуля в самостоятельный проект, который сделает возможность анимации трёхмерной модели человека более доступной и менее трудозатратной, что может помочь небольшим компаниям по разработке игр или по созданию анимаций.

В результате успешных исследований и тестирования, авторами был получен патент на данную программу, что подтверждает её уникальность и инновационность в области современных технологий [4].

#### Список литературы

1. Ł., Yang, B., Hicks, J.L. et al. Deep neural networks enable quantitative movement analysis using single-camera videos. *Nat Commun* 11, 4054 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41467-020-17807-z>.
2. Документация MediaPipe - URL: <https://google.github.io/mediapipe/> (дата обращения: 21.03.2023).
3. Демиденко Д.С. Гладкие и равномерные алгоритмы аппроксимации в компьютерной графике. — СПб.: Наука и техника, 2018. — 352 с.
4. Патент № 2022617055 Российская Федерация. Программный модуль обработки видеоданных нейронными сетями для получения контрольных точек положения частей тела человека в пространстве: № 2022610303 : заявл. 13.01.2022 : опубл. 18.04.2022 / Иванов С.И., Кулаков Д.Г., Егоров М.С., Павлов И.Р.

УДК 004.946

Кулаков Д.Г., Егоров М.С., Павлов И.Р., Иванов С.И.

## Внутреннее устройство кроссплатформенного конвейера анимации авто сгенерированных анимационных файлов

Кулаков Дмитрий Геннадьевич, студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга e-mail: dimacreator1998@gmail.com;

Павлов Илья Русланович, студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: ilyapavlo667@gmail.com;

Егоров Матвей Сергеевич, студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: m.voroge@bk.ru;

Иванов Святослав Игоревич, к.т.н., руководитель отдела разработки #3 ООО «КристалД»

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

*В данной работе описывается разработка и внутреннее устройство работы кроссплатформенного конвейера анимации авто сгенерированных анимационных файлов с использованием графического движка Unity в рамках проекта разработки интерпретатора жестового языка, рассматриваются другие графические движки, их недостатки.*

*Ключевые слова: жестовый язык, анимация, Unity, моделирование, визуализация*

## The internal structure of the cross-platform animation pipeline of auto-generated animation files

Kulakov D.G., Egorov M.S., Pavlov I.R., Ivanov S.I.

Russian University of Chemical Technology named after D.I. Mendeleev, Moscow, Russia.

*This paper describes the development and internal structure of the cross-platform animation pipeline of auto-generated animation files using the Unity graphics engine as part of the sign language interpreter development project, discusses other graphics engines and their shortcomings.*

*Keywords: sign language, animation, Unity, modeling, visualization*

### Введение

Интерпретация естественной речи — это технология, которая существует уже некоторое время и позволяет машинам понимать и интерпретировать человеческую речь. Однако эта технология не подходит для глухих и слабослышащих, которые полагаются на язык жестов. Чтобы восполнить этот пробел, был разработан кроссплатформенный конвейер для обработки автоматически сгенерированных анимационных файлов в язык жестов.

Задачу визуализации данных берет на себя графический движок Unity - кроссплатформенный движок от компании Unity Technologies [1], в качестве языка программирования в нем используется язык C#, также в более ранних доступных версиях есть поддержка языка JavaScript, это самый независимый от платформы графический движок среди всех существующих на рынке, способный запускаться на большинстве платформ, что очень критично при разработке программных продуктов для большой потенциальной аудитории, именно поэтому он был выбран в качестве технологии визуализации. Но на рынке довольно много графических движков.

На рынке довольно много графических движков, далее будут перечислены самые популярные:

Unreal Engine - кроссплатформенный игровой движок от компании Epic Games, имеет отличную визуальную точность и может создавать потрясающие визуальные эффекты, но требуется высокопроизводительный компьютер для запуска и разработки программ, а также имеет меньший спектр поддерживаемых платформ.

Source - игровой движок от компании Valve, в качестве языка программирования использует язык C++, имеет еще более меньший спектр запускаемых

платформ, меньше готовых решений и закрытый исходный код.

### Термины

- Сцена – Визуальное пространство, где расположены все объекты.

- Проект - представляет собой папку, в которой хранятся все файлы исходного кода и программные ресурсы, такие как модели, изображения и звуки.

- Vector3 — это структура данных, состоящая из 3 дробных чисел, описывающих положение объектов в сцене.

- Окно инспектора Unity - предоставляет соответствующую информацию о любом объекте сцены.

- Компонент — это фрагмент кода, описывающий логику поведения и присваиваемый объекту через окно инспектора.

- Класс GameObject - доступный в библиотеке UnityEngine, включает методы и свойства для управления объектами сцены с помощью кода. Он содержит свойство преобразования, которое отслеживает положение, поворот и масштаб объекта в сцене.

- Класс MonoBehaviour - предоставляется библиотекой UnityEngine, используется для построения логики объекта и должен быть унаследован нашим классом, чтобы использоваться в качестве компонента для объекта в сцене [2].

### Описание автоматически сгенерированного файла

Автоматически сгенерированные файлы анимации — это тип файлов, которые создаются с использованием компьютерных алгоритмов на основе заданных входных данных. Эти файлы содержат информацию о движении персонажей в сцене, и это движение можно использовать для создания анимации.

В рамках решаемой задачи файл анимации представляет из себя коллекцию, состоящую из наборов по 3 дробных числа, которые также являются сериализованной структурой Vector3, отвечающих за координаты положения точки в пространстве, количество таких наборов соответствует количеству анимируемых точек, и одного дробного числа, которое отвечает за время, которому соответствуют координаты.

### Основные алгоритмы

Для начала необходимо объяснить понятие ключевой точки в модели. Ключевая точка модели относится к определенной точке скелета 3D-модели, которая перемещается в пространстве, вызывая смещение или искажение модели. Это создает сложные движения 3D-модели, позволяя выполнять задачи анимации.

Для отображения жестов рук на модели гуманоида необходимо отметить 21 точку для каждой руки, в том числе 3 для самой руки и 18 для ладони и пальцев. Этого достаточно для плавного и четкого отображения жестов.

Конвейер анимации принимает данные файла анимации в виде массива координат для каждой ключевой точки модели. Скорость отображения определяет, насколько быстро координаты ключевых точек перемещаются при интерполяции, сдвигаясь от одной точки массива к следующей по каждой оси, пока точки не закончатся. Этот процесс обеспечивает плавное отображение анимации жестов с помощью гуманоидной 3D-модели, которая хорошо подходит для отображения перевода простого текста.

На рисунке 1 представлена блок-схема алгоритма обработки файла анимации.

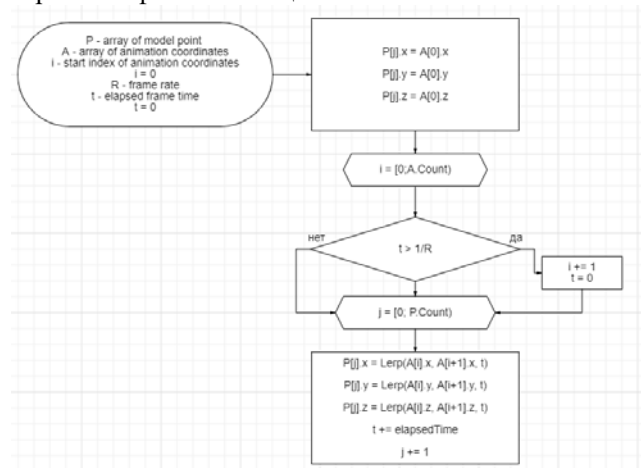


Рис. 1. Блок-схема алгоритма.

### Реализация решения

Для того чтобы реализовать конвейер в сцене, была расположена модель гуманоида с размеченными точками скелета. Именно эти точки будут перемещаться в пространстве сцены в соответствии с данными из анимационного файла. Для управления состоянием анимации, ее скоростью, воспроизведением и перемещением точек в пространстве сцены был написан класс AnimationHandler. Этот класс наследуется от класса MonoBehaviour и содержит поля, отвечающие за точки модели, они имеют тип Transform, который является описанием положения точки в пространстве, ее поворота и масштаба.

AnimationHandler также зависит от интерфейса IPhraseService, который отвечает за предоставление данных для анимации. В зависимости от реализации этого интерфейса, данные могут быть получены из интернета, с жесткого диска, пользовательского ввода и так далее. Например, в случае с использованием конвейера анимации в WEB браузере можно использовать клиент-серверный подход, храня в базе данных анимационные файлы и получая из Unity с помощью REST запросов через интерфейс WebClient, который представляет из себя классический HTTP клиент, как и в любых языках программирования.

Для того, чтобы интегрировать код в Unity движок, были использованы методы MonoBehaviour, такие как Update и Awake. Метод Awake выполняется при старте программы и инициализирует все изначальные данные для работы конвейера, такие как скорость воспроизведения и изначальные точки модели, соответственно первому элементу в коллекции данных для анимации. А в методе Update, который срабатывает каждый кадр, рассчитывается время, прошедшее с прошлого кадра и в случае, если произведение анимации не поставлено на паузу, относительно этого времени происходит интерполяция точек модели относительно последующих друг за другом точек из коллекции данных до тех пор, пока точки в коллекции не закончатся, или не будет инициировано обновление источника анимации.

Таким образом, вся система работает совместно, обеспечивая плавное перемещение точек модели в пространстве сцены в соответствии с данными из анимационного файла.

На рисунке 2 представлен пример отображения анимации жеста моделью.



Рис. 2. Пример отображения жеста 3D моделью.

### Вывод

Разработка кроссплатформенного конвейера для обработки автоматически сгенерированных анимационных файлов с использованием движка Unity — это значительный шаг вперед в производстве и обработке анимации. Использование этого конвейера может помочь сократить время и усилия, необходимые для создания анимации жестов, что критично в рамках разработки жестовых переводчиков, так как жестов очень много и делать анимацию вручную занимает много времени.

### Список литературы

1. Официальная документация Unity [Электронный ресурс]
2. URL: <https://docs.unity3d.com/ScriptReference/>



УДК 004.94:66.011:66.021

Гайдамовичюте В.В., Никитин Е.В., Индейкина В.А., Шишканова К.И., Василенко В.А., Филиппова Е.Б., Бродский В.А., Колесников А.В., Кольцова Э.М.

### Компьютерное проектирование и моделирование процесса очистки хромсодержащих промышленных отходов

Гайдамовичюте Виктория Владо – студент группы Кс-44; m gaiivik@yandex.ru;

Никитин Егор Владимирович – студент группы Кс-44;

Индейкина Виктория Александровна – студент группы Кс-44;

Шишканова Ксения Игоревна – студент группы Кс-44;

Василенко Виолетта Анатольевна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий;

Филиппова Елена Борисовна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий;

Бродский Владимир Александрович – к.х.н., старший научный сотрудник кафедры технологии неорганических веществ и электрохимических процессов;

Колесников Артем Владимирович – к.т.н., доцент, исполняющий обязанности заведующего кафедрой технологии неорганических веществ и электрохимических процессов;

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

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва.

*Проведены работы по созданию цифрового двойника линии очистки промышленных хромсодержащих отходов. В ходе работы создана 3D-модель, включающая в себя металлоконструкцию, основное оборудование, ёмкости, насосы и трубопровод. Выполнено построение и расчёт термодинамических свойств технологической схемы.*

*Ключевые слова: 3D-модель, технологическая схема, цифровой двойник, хромсодержащие отходы.*

### Computer-aided design and modeling of the process of purification of chromium-containing industrial waste

Gaidamavichute V.V., Nikitin E.V., Indeykina V.A., Shishkanova K.I., Vasilenko V.A., Filippova E.B., Brodskiy V.A., Kolesnikov V.A., Koltsova E.M.

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

*The work has been carried out to create a digital twin of the line for cleaning industrial chromium-containing waste. In the course of the work, a 3D model was created, including a metal structure, main equipment, tanks, pumps and a pipeline. The construction and calculation of the thermodynamic properties of the technological scheme is carried out.*

*Key words: 3D model, technological scheme, digital twin, chromium-containing waste.*

Быстрое развитие современной промышленности обычно сопровождается накоплением вредных загрязняющих веществ и тяжелых металлов, что вызывает серьезные проблемы для окружающей среды [1].

Особенно опасные загрязняющие компоненты сточных вод — растворимые соединения шестивалентного хрома, обладающие аллергическим, мутагенным и канцерогенным действиями. Около 40 % стоков гальванического производства составляют хромсодержащие сточные воды. Соединения хрома, кроме гальванических процессов, используют в деревообрабатывающей, металлургической, стекольной, лакокрасочной и других отраслях промышленности [2].

В настоящее время для очистки хромсодержащих отходов применяют различные промышленные и полупромышленные методы обезвреживания. Наиболее широкое распространение, как в нашей стране, так и за рубежом получил реагентный способ. Относительно низкая стоимость используемых реагентов, простота реализации и хорошая изученность технологии реагентной обработки и, главное, достаточно высокая эффективность обезвреживания высокотоксичных сточных вод обусловили приоритетность данного способа в очистке стоков производств [3].

Для решения задачи обезвреживания хромсодержащих промышленных отходов специалистами Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева разработана технологическая линия по нейтрализации таких веществ, работа которой основывается на реагентном методе очистки [4].

Для проектирования 3D модели линии очистки был выбран программный пакет AutoCAD Plant 3D. Выбор данного программного обеспечения обусловлен следующими преимуществами:

- трубопроводы и компоненты моделируются в полуавтоматическом или ручном режиме;
- имеется настраиваемая библиотека стандартного оборудования;
- возможность использовать внешние ссылки на чертежи конструкций.

Моделирование включало несколько этапов:

- создание металлоконструкции;
- моделирование аппаратов;
- построение трубопровода;
- расстановка насосов и вентиляей.

Металлоконструкция создавалась на основе сетки, которая помогает выравнивать объекты и оценивать расстояние между ними. В данной работе металлоконструкция играет роль площадки

обслуживания. Она состоит из таких конструктивных элементов как непосредственно площадка – пешеходный настил; перила – ограждения по всему периметру для безопасности людей; лестницы для подъема на площадку и перехода на другие площадки; опоры, поддерживающие площадку.

Необходимое для линии обработки хромосодержащих отходов оборудование отсутствует в базе данных программы, поэтому оно было смоделировано по имеющимся размерам. При создании модели оборудования задается его геометрическая информация (высота, диаметр), ориентация и негеометрическая информация (например, метка или описание оборудования).

Смоделированное оборудование было расставлено в соответствии с ранее спроектированным планом размещения. После чего было выполнено моделирование трубопровода, для наглядности трубы были выделены разными цветами в зависимости от протекающего в ней компонента. Линия включает в себя несколько видов труб, отличающихся диаметром: 50мм., 35мм., 25мм., 20мм.

Завершающим этапом 3D моделирования была расстановка насосов и вентилялей (рис. 1). Всего данная линия включает в себя 22 насоса.

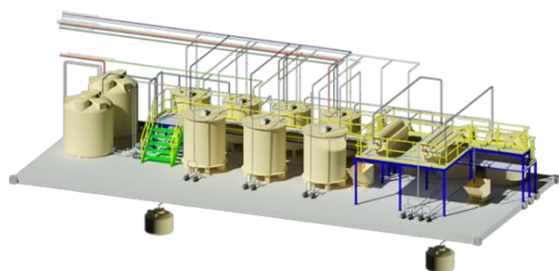


Рис. 1. Модель линии очистки хромосодержащих отходов.

Для построения и расчёта термодинамических свойств технологической схемы был выбран программный пакет Aspen Hysys. Среда Aspen Hysys представляет собой программный пакет, позволяющий моделировать различные технологические процессы в стационарном и динамическом режимах, которые широко применяется как в отечественной, так и в мировой науке для решения широкого спектра задач. Преимуществом Hysys являются термодинамические методы, которые лежат в основе всех технологических расчетов. Встроенные пакеты расчета свойств обеспечивают надежные результаты для расчетов химических сред.

Процесс моделирования состоит из ряда последовательно выполняющихся операций. Прежде всего, необходимо было выбрать компоненты, которые будут использоваться в процессе очистки. Из библиотеки Hysys были взяты 6 компонентов, остальные 12 компонентов были заданы как гипотетические. Для каждого гипотетического компонента в первую очередь выбиралось агрегатное состояние. Также вручную задавались свойства компонентов, такие как молекулярная масса, плотность и теплота образования, остальные параметры рассчитывались программой на основе этих данных. Далее был выполнен подбор термодинамического

пакета, с помощью которого среда Hysys производит полный комплекс расчетов. Каждый термодинамический пакет или их группа предназначены для расчета определенного класса веществ. В линии очистки используется большое количество разнообразных веществ, поэтому из набора термодинамических пакетов был выбран Extended NRTL (Расширенный NRTL). Математическая форма уравнений обеспечивает модели NRTL большую гибкость, способность описывать самые различные типы зависимости коэффициентов активности от состава. Сохраняя основные достоинства уравнений Вильсона, уравнения NRTL способны также описывать системы с расслаиванием, благодаря чему часто используются для расчета равновесий жидкость – жидкость и жидкость – жидкость – пар.

Используя компоненты, задействованные в линии очистки хромосодержащих отходов, были созданы 4 набора реакций. Для задания реакции указывались используемые в ней компоненты, а также стехиометрические коэффициенты для каждого из них. Реакции были взяты конверсионного типа, что позволило указывать, какая доля реагента вступило в реакцию.

Технологическая схема составлялась из предоставленного в Hysys набора аппаратов и потоков, после чего между ними устанавливалась взаимосвязь. Предлагаемый набор аппаратов содержит большинство используемых в химической промышленности устройств, в данной работе использовались 7 из них: ёмкость, конверсионный реактор, разделитель компонентов, сепаратор твердой фазы (он играл роль декантера), смеситель, разветвитель, теплообменник.

Линия очистки состоит из нескольких частей:

- линия приготовления, хранения и дозирования реагентов;
- линия переработки отходов.

На линии подготовки происходит приготовление 6 растворов: 20 масс % р-р  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ , 30 масс % р-р  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , 30 масс % р-р  $\text{NaOH}$ , 3 кг/м<sup>3</sup> р-р ПАА-ГС (Superfloc), 100 кг/м<sup>3</sup> р-р  $\text{FeCl}_3$ , 10 масс % р-р  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , используемые в дальнейшем для нейтрализации хромосодержащих отходов. В качестве аппарата, где происходит смешение компонентов, использовался смеситель. Для потоков, поступающих на вход в смеситель, задавались температура, давление и молярный состав. У выходного потока смесителя указывались массовый состав и массовый расход. Остальные данные рассчитывались автоматически. В ряде случаев дополнительно использовался теплообменник, играющий роль рубашки аппарата, т.к. при приготовлении некоторых растворов происходит выделение или поглощение теплоты (рис. 2). Охлаждение или нагрев смеси в теплообменнике выполнен за счёт потока воды (рис. 3), массовый расход которого рассчитывался с помощью операции Adjust в зависимости от заданной температуры итогового потока. После приготовления раствора она был разделён на необходимое для линии очистки количество потоков. Для удобства построения технологической схемы линия подготовки была оформлена как подсхема.

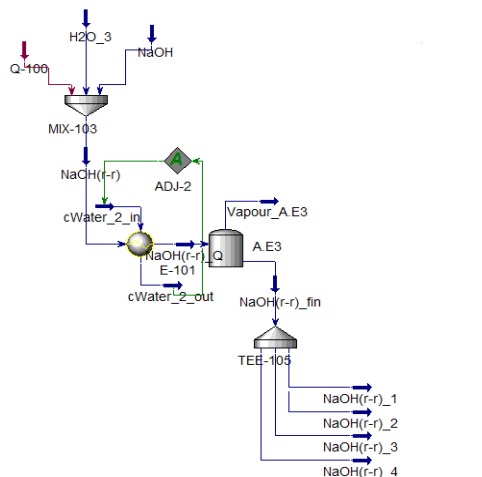


Рис.2. Спроектированный в Hysys участок приготовления 30 масс % р-р NaOH.

Рабочий лист	Производительность	Динамика	Кожухотруб (точно)	
Имя	NaOH(r-r)	NaOH(r-r)_Q	cWater_2_in	cWater_2_out
Пар	0,1745	0,0000	0,0000	0,0000
Температура [C]	106,2	25,00	25,00	89,91
Давление [кПа]	101,3	101,3	101,3	101,3
Мольный расход [kgmole/h]	26,89	26,89	78,35	78,35
Масс. расход [kg/h]	580,0	580,0	1411	1411
Станд. объем, раск. ид. жидк. [m3/h]	0,5044	0,5044	1,414	1,414
Молярная энтальпия [kJ/kgmole]	-3,087e+005	-3,230e+005	-2,849e+005	-2,800e+005
Молярная энтропия [kJ/kgmole-C]	42,86	-7,935	6,559	21,50
Тепловой поток [kJ/h]	-8,300e+006	-8,686e+006	-2,232e+007	-2,194e+007

Рис.3. Окно характеристик потоков, задействованных в теплообменнике.

Одной из частей линии переработки отходов являются реакторы. Всего на линии обезвреживания хромосодержащих отходов было установлено 7 реакторов, некоторые устанавливались параллельно. Для их настройки были заданы потоки, поступающие на вход, выходящий поток жидкости, выходящий поток пара и поток энергии. Также для реакторов задавались объём и уровень жидкости, выбирался пакет реакций. Для расчёта потока энергии у выходного потока указывалась температура. Все остальные значения потоков рассчитывались автоматически. Правильность работы реактора оценивалась по составу выходного потока.

Для моделирования работы декантерных центрифуг в программном обеспечении Aspen Hysys были рассмотрены различные варианты аппаратов для отделения твердых частиц. После сравнения результатов работы всех аппаратов для моделирования данного процесса была предложена система, состоящая из сепаратора твердой фазы и покомпонентного делителя. Сначала поток с пульпой поступает в сепаратор, в котором отделяются твердые частицы гидроксидов металлов (рис. 4), а затем основной поток попадает в разделитель компонентов, в котором выделяется необходимое количество воды на осадок для обеспечения 70% его влажности (рис. 5).

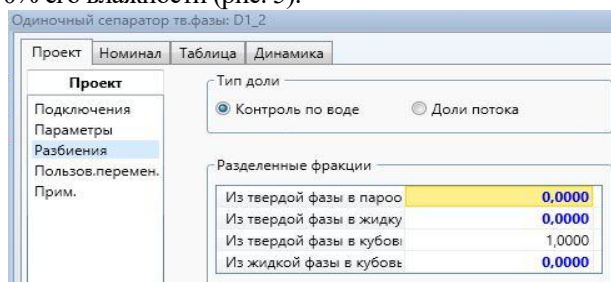


Рис.4. Окно настройки параметров работы сепаратора твёрдой фазы.

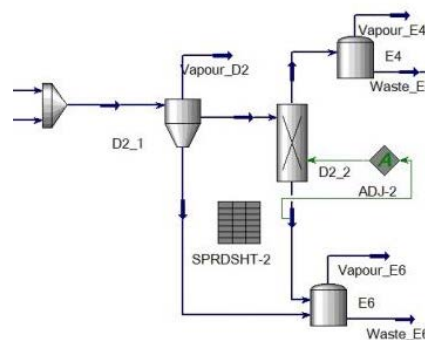


Рис.5. Спроектированный в Hysys участок для отделения твердых частиц.

В результате, после добавления и расчёта всех элементов схемы был получен выходной поток, очищенный от компонентов, содержащих хром (рис. 6). Итогом данной части работы является технологическая схема с полностью рассчитанными потоками и аппаратами.

	Массовые расходы
Superfloc*	0.0000
H2O	1439.4087
H2S2O3	0.0000
NaOH	2.3439
FeCl3	0.0000
NA2S2O3	0.0000
Ca(OH)2*	0.0000
CrO3*	0.0000
CaF2*	0.0000
Ni(OH)2*	0.0000
Fe(OH)3*	0.0000
Cr(OH)3*	0.0000
NiSO4*	0.0000
H2SO4	0.0000
NaF*	0.0000
H2Cr2O7*	0.0000
Cr2(SO4)3*	0.0000
Na2SO4*	390.1373

Рис.6. таблица состава итогового выходного потока.

Использование полученной 3D-модели, а также термодинамического расчёта технологической схемы поможет спрогнозировать с более высокой степенью достоверности состояние объекта. Также это увеличивает глубину понимания процессов, происходящих в объекте, помогает выявлять слабые звенья и улучшать конструктивные особенности.

### Список литературы

- Jiang B., Niu Q., Li C., Oturan N., Oturan M.A. Outstanding performance of electro-Fenton process for efficient decontamination of Cr(III) complexes via alkaline precipitation with no accumulation of Cr(VI): Important roles of iron species // Applied Catalysis B: Environmental. 2020..
- Бессонова В. П., Иванченко О. Е. Хром в окружающей среде. Вопросы биоиндикации и экологии. 2011. Т. 16. № 6. С. 13—29.
- Строшкова А.В. Технологии переработки токсичных хромосодержащих отходов промышленности // Научные исследования и разработки молодых ученых. 2016. с. 243-250.
- Проблемы обезвреживания и утилизации высокотоксичных техногенных промышленных отходов, их переработка с получением ценных компонентов / В. А. Бродский, Д. А. Сахаров, А. В. Колесников [и др.] // Теоретическая и прикладная экология. 2022. № 4. С. 88-95.

УДК 004.94: 66.011: 66.021

Никитин Е.В., Гайдамовичюте В.В., Индейкина В.А., Шишканова К.И., Василенко В.А., Филиппова Е.Б., Бродский В.А., Колесников А.В., Кольцова Э.М.

### **Компьютерное проектирование и моделирование процесса очистки цианосодержащих промышленных отходов**

Никитин Егор Владимирович – студент группы КС-44; egornikitin2222@gmail.com.

Гайдамовичюте Виктория Владо – студентка группы КС-44;

Индейкина Виктория Александровна – студентка группы КС-44;

Шишканова Ксения Игоревна – студентка группы КС-44;

Василенко Виолетта Анатольевна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий; vasilenko.v.an@muctr.ru

Филиппова Елена Борисовна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий;

Бродский Владимир Александрович – к.х.н., старший научный сотрудник кафедры технологии неорганических веществ и электрохимических процессов;

Колесников Артем Владимирович – к.т.н., доцент, исполняющий обязанности заведующего кафедрой технологии неорганических веществ и электрохимических процессов;

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

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*Проведены работы по компьютерному проектированию и моделированию технологической линии по обезвреживанию промышленных цианосодержащих отходов, разработанной в Российском химико-технологическом университете имени Д. И. Менделеева. Трехмерное проектирование выполнено при помощи инструментальной системы AutoCAD Plant 3D компании Autodesk, моделирование технологического процесса реализовано с использованием термодинамического программного пакета Aspen Hysys компании AspenTech.*

*Ключевые слова: жидкие техногенные отходы, промышленные технологии утилизации отходов, компьютерное проектирование, цианид.*

### **Computer-aided design and modeling of cyanide-containing industrial waste treatment process**

Nikitin E.V., Gaidamavichute V.V., Indekina V.A., Shishkanova K.I., Vasilenko V.A., Filippova E.B., Brodsky V.A., Kolesnikov A.V., Koltsova E.M.

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

*Computer-aided design and modelling of the process line for neutralisation of industrial cyanide-containing waste developed at the Russian University of Chemical Technology named after D.I. Mendeleev has been carried out. 3D design has been performed by means of AutoCAD Plant 3D tool system of Autodesk company, simulation of technological process has been implemented by means of Aspen Hysys thermodynamic software package of AspenTech company.*

*Key words: liquid technogenic waste, industrial waste disposal technologies, computer-aided design, cyanide.*

#### **Введение**

В настоящее время утилизация отходов является весьма актуальной проблемой. Утилизация токсичных отходов путем сжигания и захоронения уже не имеет смысла в современном мире, который ищет инновационные методы переработки отходов. Требования современной защиты окружающей среды требуют экологически безопасного продукта, который, благодаря своему качественному составу и свойствам, может быть переработан или повторно использован без ущерба для окружающей среды. Обеспечение экологической безопасности особенно важно, когда дело касается токсичных отходов, особенно отходов, содержащих цианид, который относится к I-II классам опасности и представляет еще большую потенциальную опасность для окружающей среды.

Наблюдение за концентрацией цианида в почве представляет интерес с начала 20-го века. По всему миру установлены нормативы предельно допустимой концентрации цианида в связи с его токсичностью. Поэтому детоксикация и утилизация цианидов вызывают все большее беспокойство со стороны исследователей и регулирующих органов горнодобывающей промышленности во всем мире [1]. Основными источниками появления цианидов в окружающей среде являются металлургическая и горнодобывающая (добыча золота, серебра и др.) промышленности. Цианид также является частью отходов в сточных водах таких отраслей, как коксохимическое производство, лакокрасочная промышленность, нефтепереработка, производство взрывчатых веществ, автомобилестроение, производство печатных плат, химическая

промышленность, производство пестицидов и производство синтетических волокон и т.д. [2].

Для обезвреживания цианосодержащих отходов используются общепринятые в мировой практике методы, а именно реагентная обработка и утилизация отходов с переводом загрязняющих веществ в форму малорастворимых соединений. Для отделения взвешенных веществ осадков используют методы фильтрации, декантации и флотации. С целью обессоливания воды и получения ценных компонентов используют выпарные и кристаллизационные установки [3]. Кроме этого, специалисты РХТУ имени Д.И. Менделеева разработали, испытали и внедрили целый ряд систем регенерации отработанных растворов травления чёрных и цветных металлов, высокотоксичных электролитов хромирования и кадмирования [4].

Целью данной работы является компьютерное проектирование трехмерной модели и создание термодинамической модели утилизации цианосодержащих отходов, расчет материального и теплового балансов технологической схемы.

### Практическая часть

#### 1. 3D проектирование технологической схемы

Первым шагом работы было 3D проектирование технологической схемы процесса утилизации, которое включало в себя несколько этапов:

- составление спецификации по необходимому технологическому оборудованию;
- проектирование структурной сетки и металлоконструкции;
- разработка трехмерных моделей технологических аппаратов и оборудования;

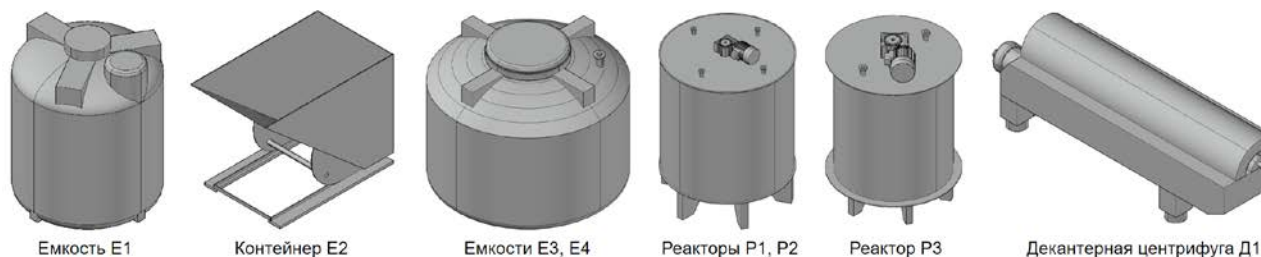


Рис.1. Модели технологического оборудования.

Для соединения аппараты между собой трубопроводами, на корпусе трехмерных моделей необходимо было сначала установить, согласно принципиальной схеме линии утилизации, штуцеры с соответствующими диаметрами 50 мм, 35 мм, 25 мм, 20 мм. Далее было произведено проектирование трубопровода, включая расстановку насосного оборудования и запорной арматуры. Для наглядности трубопроводы были выделены различными цветами в зависимости от протекающего в них вещества.

Итоговая трехмерная модель линии утилизации цианосодержащих отходов представлена на рис.2.

- построение трубопроводов различных диаметров между технологическим оборудованием;
- расположение насосного оборудования и запорной арматуры.

Для выполнения этой задачи была выбрана инструментальная система AutoCAD Plant 3D, так как ее функциональные возможности позволяют создавать схемы и трехмерные модели объектов различной сложности, а организация работы осуществлена таким образом, что при создании объекта происходит формирование документации, что, в свою очередь, позволяет обеспечить согласованность данных и связей системы.

До размещения структурных объектов необходимо было создать структурную сетку, которая упростила работу и ориентирование в трехмерном пространстве. На ее основе проектировалась металлоконструкция площадки обслуживания для персонала, которая состоит из нескольких конструктивных элементов: пешеходный настил; опоры, поддерживающие площадку; лестница для подъема на площадку и перила для безопасности персонала.

В соответствии с планом размещения и заказной спецификацией технологического оборудования были смоделированы следующие аппараты (рис.1): ёмкости E1, E3, E4; контейнер E2; реакторы P1, P2, P3 и декантерная центрифуга D1. При создании модели оборудования необходимо определить его геометрические параметры, местоположение, ориентацию и дополнительную атрибутивную информацию (например, метку или описание оборудования).

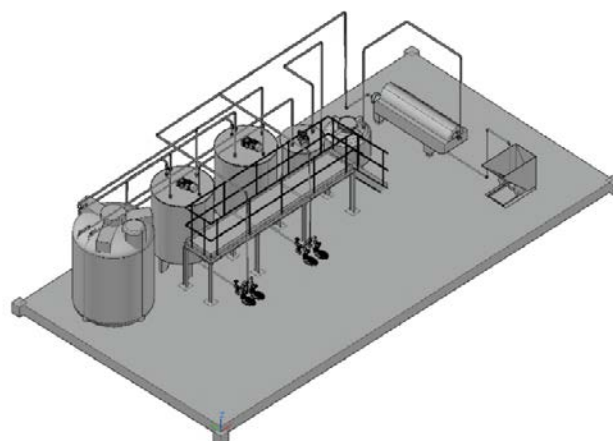


Рис.2. Трехмерная модель линии утилизации цианосодержащих отходов

## 2. Компьютерное моделирование технологической схемы

Компьютерное моделирование технологической схемы процесса утилизации было вторым шагом работы, которое также включало в себя несколько этапов:

- составление материального и теплового балансов технологической схемы;
- создание списка компонентов, набора реакций и вектора входных переменных линии утилизации;
- моделирование линии подготовки потоков технологической схемы;
- моделирование линии утилизации цианосодержащих отходов;
- расчет мощности насосов технологической схемы.

Для выполнения этой задачи был выбран программный пакет Aspen Hysys, который представляет собой программную среду, позволяющую моделировать различные технологические процессы в стационарном и динамическом режимах. Система представляет собой пакет модулей, предназначенный для расчета химико-технологических схем, содержащих массообменную и теплообменную аппаратуру, трубопроводы, реакторы и т.д. Встроенные термодинамические пакеты обеспечивают надежные результаты для расчетов химических сред.

При составлении материального баланса учитывались все производственные потери, вследствие чего количество реагентов, поступающих после линии подготовки, больше, чем это необходимо для получения заданного количества продукта. Тепловой баланс рассчитывался по закону Гесса по данным материального баланса с учетом тепловых эффектов химических реакций (экзотермических и эндотермических) с учетом подвода теплоты извне и отвода ее с продуктами реакции.

Прежде всего необходимо было выбрать компоненты, которые будут использоваться в системе. Из библиотеки Hysys были взяты 6 компонентов, остальные 11 компонентов были заданы как гипотетические. Для каждого гипотетического компонента вручную задавались свойства, такие как молекулярная масса, плотность и теплота образования, остальные параметры компонента рассчитывались программой на основе этих данных. Также был выбран термодинамический пакет – Extended NRTL, так как математическая форма уравнений обеспечивает модели Extended NRTL большую гибкость, способность описывать самые различные типы зависимости коэффициентов активности от состава.

Используя компоненты, задействованные в линии очистки цианосодержащих отходов, были созданы два набора реакций: первый для реакторов P1, P2, а второй для реактора P3. Для моделирования реакции необходимо было указать используемые в ней компоненты и их стехиометрические коэффициенты. Все реакции были выбраны конверсионного типа, что

позволило указывать долю прореагировавшего компонента.

В предлагаемой Hysys касе объектов отсутствуют некоторые необходимые в данной работе аппараты, но она содержит базовые объекты, благодаря комбинации которых была смоделирована работа отсутствующего стандартного оборудования. В данной работе использовались девять базовых объектов: материальный поток, энергетический поток, смеситель, разветвитель, ёмкость, конверсионный реактор, теплообменник, сепаратор твердой фазы, разделитель компонентов, насос и трубопровод.

На линии подготовки происходит приготовление трех растворов: 30 масс % р-р NaOH, 15 масс % р-р NaClO ГОСТ Р 57568-2017, 30 масс % р-р H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, используемые в дальнейшем для окисления цианосодержащих отходов. Так как растворение гидроксида натрия в воде является экзотермическим процессом, то необходимо установить теплообменник, моделирующий рубашку реактора, в которую подается обратная вода для охлаждения (рис. 3). Операция “Adjust” используется для подбора массового расхода обратной воды для обеспечения регулирования температуры раствора. У входных потоков задавались температура, давление и молярный состав, а у выходного потока из смесителя, представляющего собой реактор, указывались массовый состав и массовый расход. Для удобства построения технологической схемы линия подготовки была оформлена как подсхема.

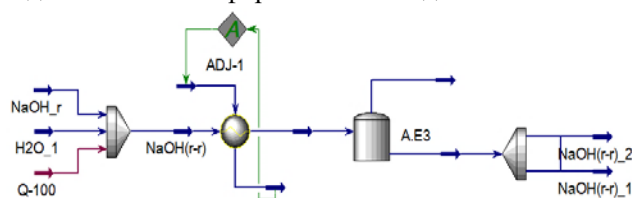


Рис.3. Линия приготовления, хранения и дозирования реагентов (на примере NaOH)

Всего на линии переработки цианосодержащих отходов находятся три реактора P1, P2 и P3. Реакторы P1 и P2 установлены параллельно и к ним в рубашку подается обратная вода для нагревания раствора, поэтому при моделировании такого процесса был добавлен теплообменник для регулирования температуры внутри реактора. Для реакторов задавались объём и уровень жидкости, выбирался заранее созданный пакет реакций, а также устанавливался тепловой поток, который был рассчитан ранее на этапе составления теплового баланса.

Помимо реакторов на схеме также установлена декантерная центрифуга D1. Для моделирования ее работы было апробировано множество аппаратов отделения твердых частиц. После сравнения результатов работы всех аппаратов была предложена система для моделирования данного процесса – сначала поток с пульпой поступает в сепаратор твердой фазы, в котором отделяются твердые частицы гидроксидов металлов, а затем основной поток попадает в разделитель компонентов, в котором

выделяется необходимое количество воды на осадок для обеспечения 70% его влажности.

Также на схеме установлены четыре насоса перед вертикальным подъемом трубопровода Н1, Н2, Н3 и Н4. Для моделирования такого участка трубы и регулирования перепада давления после подъема использовались объекты: трубопровод и операция "Adjust" (рис.4). В трубопроводе указывались: длина и наклон трубы, а также внешний и внутренний диаметры трубы. Операция "Adjust" использовалась для подбора такой мощности насоса, при которой давление после подъема трубопровода оставалось неизменным. Таким образом, были получены оптимальные мощности для каждого насоса, необходимые для поддержания стабильного уровня давления в системе.

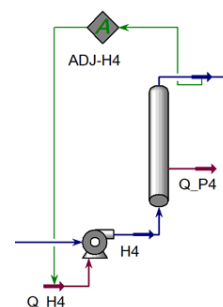


Рис.4. Пример моделирования расчета мощности насоса Н4

В результате, после добавления и расчёта всех элементов схемы был получен выходной поток, очищенный от компонентов, содержащих циан. Полностью смоделированная схема представлена на рис.5.

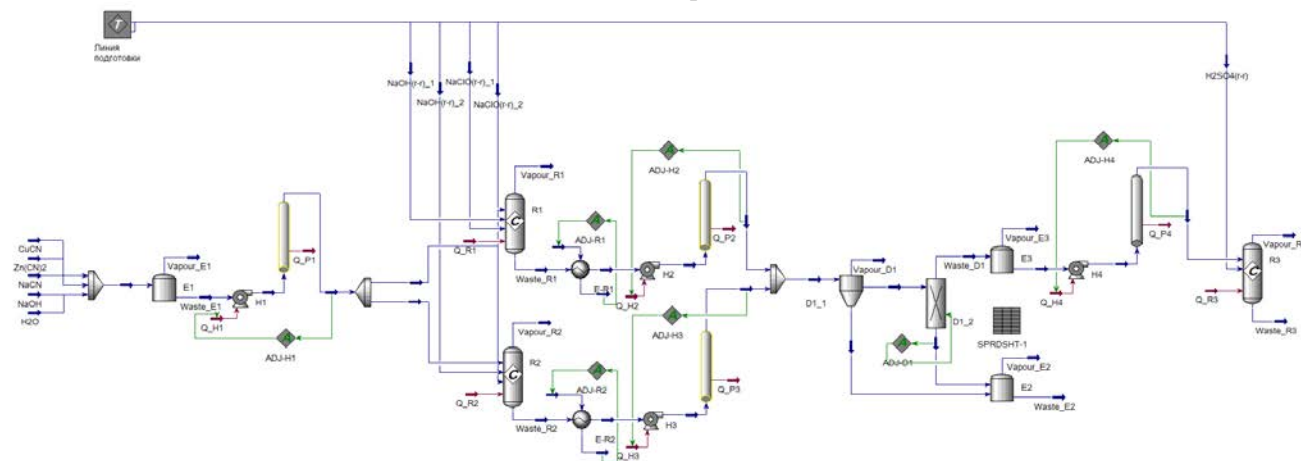


Рис.5. Термодинамическая модель линии утилизации цианосодержащих отходов

Использование полученной трехмерной модели, а также термодинамического расчёта технологической схемы поможет спрогнозировать в будущем состояние объекта с более высокой степенью достоверности. Также это увеличивает глубину понимания процессов, происходящих в объекте, помогает выявлять слабые звенья и улучшать его конструктивные особенности.

### Заключение

В статье представлены этапы 3D проектирования и компьютерного моделирования технологической схемы процесса утилизации цианосодержащих отходов при использовании инструментальной системы AutoCAD Plant 3D и программного пакета Aspen Hysys. Была получена трехмерная модель линии утилизации цианосодержащих отходов, в ее основе лежит составление спецификации оборудования, построение трубопроводов и расположение оборудования на структурной сетке. На основе материального и теплового балансов технологической схемы, соответствующего набора химических реакций и моделирования линии

подготовки потоков создана термодинамическая модель линии утилизации цианосодержащих отходов.

### Список литературы

1. The detoxification and utilization of cyanide tailings: A critical review. / Kaiwei Dong, Feng Xie, Wei Wang, Yongfeng Chang, Diankun Lu, Xiaowei Gu, Chunlin Chen // Journal of Cleaner Production. 2021.
2. Treatment of metal cyanide bearing wastewater by simultaneous adsorption and biodegradation (SAB). / Rajesh Roshan Dash, Chandrajit Balomajumder, Arvind Kumar // Journal of Hazardous Materials. 2008. pp. 387-396
3. Техногенные отходы I-II классов опасности - ресурс для получения вторичных продуктов / А.Г. Мажуга, В.А. Колесников, Д.А. Сахаров, М.В. Корольков // Теоретическая и прикладная экология. – 2020. – № 4. – С. 61-67.
4. Проблемы обезвреживания и утилизации высокотоксичных техногенных промышленных отходов, их переработка с получением ценных компонентов / В. А. Бродский, Д. А. Сахаров, А. В. Колесников [и др.] // Теоретическая и прикладная экология. 2022. № 4. С. 88-95.

УДК 544.169

Бурцев В.Д., Митричев И.И.

## Отбор значимых признаков для создания эффективной модели классификации гепатотоксичных соединений с использованием методов машинного обучения при помощи комбинированного набора данных

Бурцев Валентин Дмитриевич – магистр 2-го года обучения кафедры информационных компьютерных технологий; [golovkin\\_valentin@mail.ru](mailto:golovkin_valentin@mail.ru).

Митричев Иван Игоревич – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва.

*В данной работе рассмотрен процесс отбора значимых признаков для создания эффективной модели бинарной классификации гепатотоксичности химических соединений с помощью методов машинного обучения при использовании комбинированного набора данных, собранного из различных источников. Также был проведён анализ найденных значимых признаков для сбора информации о том, как ключевые признаки влияют на классификацию гепатотоксичных соединений.*

*Ключевые слова:* машинное обучение, гепатотоксичность, DILI.

## Selection of relevant features to create an effective model for classification of hepatotoxic compounds using machine learning methods with a combined dataset

Burtsev V.D., Mitrichev I.I.

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

*This paper considers the process of selecting relevant features to create an effective model for binary classification of hepatotoxicity of chemical compounds using machine learning methods with a combined set of data collected from various sources. An analysis of the relevant features found was also performed to gather information on how key features influence the classification of hepatotoxic compounds.*

*Key words:* machine learning, hepatotoxicity, DILI.

### Введение

Печень как орган, который первым вступает в контакт с большинством продуктов пищеварения, играет решающую роль в обмене энергией и биотрансформации ксенобиотиков. А, как правило, страдающая от повреждений печень часто нарушает нормальный обмен веществ, что может приводить к печеночной недостаточности [1]. В течение последних десятилетий одним из основных видов повреждения печени является лекарственное повреждение печени (DILI), которое также является наиболее частой причиной прекращения программ разработки различных лекарств. Кроме того, за последние полвека сотни лекарств были изъяты с рынка и отклонены как кандидаты в лекарства из-за разрушающего воздействия на печень [2].

Современные методы оценки риска для здоровья, связанного с химическими веществами, требуют проведения исследований по тестированию *in vivo* [3] (на животных) и *in vitro* [4] (на культурах), которые довольно затратны по количеству требуемого времени, ресурсов, а также непрактичны для оценки тысяч химических веществ [5]. Кроме того, DILI, вызванный большинством лекарств, имеет специфическую природу и обычно плохо коррелирует с данными нормативных экспериментов по токсичности на животных или клетках [6]. Химические соединения, вызывающие тяжелую форму DILI у людей, обычно не проявляют явной гепатотоксичности у животных, а также не имеют явной зависимости гепатотоксичности от концентрации [7]. Механизмы, лежащие в основе

DILI, сложны и разнообразны, и до конца не выяснены, что затрудняет токсикологические исследования DILI.

Таким образом, разработка новых инструментов и подходов для лучшего прогнозирования риска DILI у человека стала важной проблемой. Вычислительные методы имеют ряд преимуществ, таких как дешевизна и скорость получения результатов, поэтому большие усилия были направлены на разработку *in silico* подходов для прогнозирования DILI с помощью моделей количественных соотношений структура-свойство (QSAR – Quantitative structure-activity relationship), которые строятся с помощью машинного обучения (ML – Machine learning).

### Сбор и подготовка данных

Для того чтобы использовать методы машинного обучения для прогнозирования гепатотоксичности химических соединений, необходимо подготовить набор данных, на котором смог бы обучаться алгоритм ML. Подготовка набора данных в данной работе происходила поэтапно:

1. Поиск работ, посвящённых классификации гепатотоксичности химических соединений, и извлечение из найденных работ наборов данных.

2. Объединение наборов в единый комбинированный набор данных и обработка комбинированного набора.

3. Расчёт молекулярных дескрипторов (признаков).

На первом этапе подготовки комбинированного набора данных всего было собрано 13 наборов данных из 9 источников [8-16], наборы данных суммарно



состоят из 4589 соединений (2369 DILI-положительных, 2220 DILI-отрицательных). Под DILI-положительными соединениями понимаются соединения, для которых экспериментально подтверждено что данные соединения могут вызывать повреждения печени. Данные в результирующем наборе представлены в виде пар: формула соединения в формате SMILES и метка класса гепатотоксичности (pos – DILI-положительно, neg – DILI-отрицательно)

На втором этапе производилось объединение найденных наборов в единый комбинированный набор данных, а также обработка данных, в ходе которой удалялись дубликаты формул соединений и соединения с неопределённой гепатотоксичностью, т.е. такие соединения, которые присутствуют в разных наборах данных, но при этом имеют разные классы гепатотоксичности, т.к. нельзя с достаточной долей вероятности отнести эти соединения к одному из классов. Всего в итоге обработки комбинированного набора данных осталось 3069 соединений (1508 DILI-положительных, 1561 DILI-отрицательных).

На третьем этапе проводился расчёт молекулярных дескрипторов и молекулярных структурных отпечатков, которые выступают в качестве признаков, характеризующих каждую отдельно взятую молекулу. Для расчёта дескрипторов использовалась программа PaDEL-descriptor. PaDEL-descriptor – это open source программное обеспечение, которое позволяет рассчитывать 1875 дескрипторов и 12 типов молекулярных отпечатков (суммарно 2756 признаков). Молекулярные дескрипторы – параметры, характеризующие структуру органического соединения, численно выражающие уникальные особенности этой структуры, например, дескриптором может быть молекулярная масса или число атомов азота. Молекулярные отпечатки – бинарные признаки, которые содержат информацию о присутствии в молекуле соединения определённых структурных элементов, например, бензольных колец.

В итоге был получен набор данных, состоящий из 3010 соединений (1479 DILI-положительных, 1531 DILI-отрицательных) и 2756 признаков (молекулярных дескрипторов и структурных отпечатков). Часть соединений (59 соединений) было исключено из набора данных т.к. для них из-за структурных особенностей не удалось рассчитать часть дескрипторов, что считается оправданным т.к. было исключено лишь 2% данных от общего числа. Процесс формирования комбинированного набора данных показан на рис. 1.

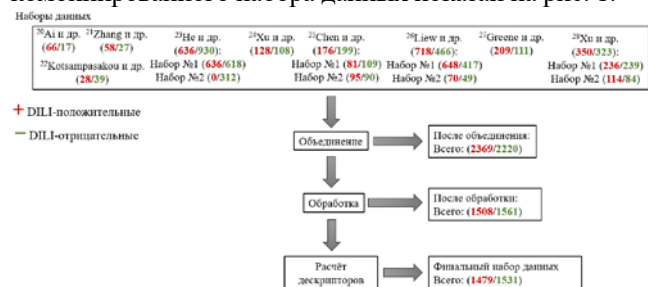


Рис. 1. Схема формирования комбинированного набора данных.

## Модель

Для предсказания гепатотоксичности в данной работе использована искусственная нейронная сеть – перцептрон – с одним скрытым слоем, состоящим из 110 нейронов. Входами модели являются значения дескрипторов, а выходом – бинарная оценка, токсично ли вещество для печени или нет. Валидация моделей проводилась с помощью 10-кратной перекрёстной проверки. Основным инструментом в данной работе являлся язык программирования python 3 (версия 3.9.5), для работы с машинным обучением использовалась библиотека scikit-learn (версия 1.1.3), а также библиотека LIME (0.2.0.1) для интерпретации моделей ML.

## Отбор признаков

После подготовки комбинированного набора данных проводился отбор значимых признаков. Отбор признаков позволяет значительно сократить размерность классификационной модели, что положительно сказывается на точности классификации и приводит к снижению сложности модели, а также упрощает анализ влияния дескрипторов на поведение модели. Но, к сожалению, отбор признаков также является крайне ресурсозатратной процедурой. В данной работе отбор дескрипторов проводился в 2 этапа:

1. Применение методов фильтрации.
2. Применение модифицированного алгоритма жадного обратного исключения.

На первом этапе к текущему набору признаков был применен метод фильтрации, основанный на отсеке неинформативных признаков, т.е. происходило удаление признаков, принимавших единственное значение для всего набора данных, иными словами, были удалены невариативные признаки. Благодаря фильтрации начальное количество дескрипторов равно 2756 снизилось до 2291, что позволило снизить размерность на 17% от изначального количества признаков. Но число признаков равно 2291 при текущем размере набора данных (3010 соединений) все ещё является неудовлетворительным, т.к. отношение количества химических соединений к числу дескрипторов менее 100, что можно считать нехваткой химических соединений или избытком признаков.

На втором этапе для продолжения процесса отбора признаков применялся модифицированный алгоритм жадного обратного исключения. Жадное обратное исключение – это алгоритм на каждой итерации которого происходит удаление определённого количества нерелевантных признаков из начального множества признаков. Суть алгоритма заключается в использовании выбранной модели классификации на каждой итерации алгоритма отбора с различными подмножествами признаков для определения и удаления признаков, без которых модель показывает лучшие характеристики. Модификация алгоритма жадного обратного исключения заключалась в разделении изначального множества признаков на определённое число подмножеств признаков, из которых затем с помощью классического обратного

исключения удалялся один признак, после этого происходило объединение подмножеств и повторение процедуры. Схема, описывающая принцип действия модифицированного алгоритма жадного обратного исключения представлена на рис. 2.

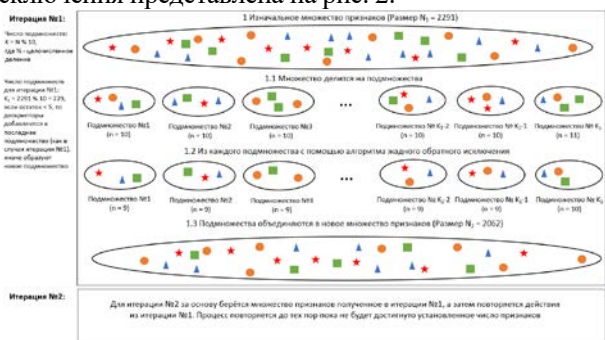


Рис. 2. Схема принципа действия модифицированного алгоритма жадного обратного исключения.

Для отбора признаков в этой работе было выбрано использовать подмножества, состоящие из 10 признаков, что означает что на каждой итерации алгоритм исключал 10% от количества признаков, полученного на прошлой итерации. Такой подход был выбран для снижения временных затрат на отбор признаков, т.к. удаление одного признака из 10 занимает значительно меньше времени чем постепенное удаление признаков из набора с 2291 признаками. К минусам описанного выше подхода можно отнести возможность удаления признаков значимых для большей доли множества признаков при неудачном делении на подмножества.

В итоге были получены данные об изменении точности модели классификации в зависимости от множеств признаков, выбранных модифицированным алгоритмом жадного обратного исключения на каждой из итераций, которые представлены на рис. 3.



Рис. 3. График изменения точности классификации при снижении размерности с максимумом точности и точкой, при которой достигается минимальное число дескрипторов достаточное для достижения 80% точности.

Таблица №1. Топ 5 DILI-положительных и DILI-отрицательных дескрипторов для набора, состоящего из 251 дескриптора.

№	Топ-5: DILI-отрицательные дескрипторы		Топ-5: DILI-положительные дескрипторы	
	Дескриптор (с диапазоном значений)	Важность	Дескриптор (с диапазоном значений)	Важность
1	RDF20s > 0.14	0,0932	SpMin6_Bhm > 0.66	0,1161
2	ndO > 0.33	0,0922	PubchemFP488 <= -0.13	0,1115
3	SpMin3_Bhs > 0.74	0,0916	nsOH > 0.23	0,0963
4	SpMax7_Bhs > 0.56	0,0889	ATSC3s <= -0.40	0,0913
5	ATSC1e <= -0.16	0,0855	ZMIC4 > 0.29	0,0901

По рис. 3 можно заметить, что максимум точности классификационной модели достигается при числе признаков равном 251. Также можно наблюдать, что при снижении размерности с числа дескрипторов равному 2291, наблюдается положительный тренд роста точности, который достигает максимума точности при множестве дескрипторов, состоящем из 251 (11% от числа дескрипторов полученных во время первого этапа отбора) дескриптора, после прохождения максимума точность классификации снижается, но остаётся выше 80% вплоть до снижения числа дескрипторов до количества равному 18, т.е. иными словами для достижения точности чуть более 80% достаточно 18 дескрипторов (0.8% от числа дескрипторов полученных во время первого этапа отбора). Более подробно максимум точности при 251 дескрипторе, а также точка достижения минимального набора дескрипторов достаточного для достижения точности в 80% показаны на рис. 4.

В итоге был получен набор признаков, обеспечивающий точность классификации равную 84%, а также минимальный набор дескрипторов достаточный для достижения точности в 80%.

#### Анализ влияния дескрипторов на поведение модели

В заключительной части данной работы проводился анализ влияния дескрипторов на поведение модели, что дало информацию о том, как значения дескрипторов влияют на то, к какому классу гепатотоксичности будет отнесено соединение при классификации. Для интерпретации процесса классификации использовалась библиотека языка python – LIME, которая позволяет получить локально интерпретируемое объяснение классификации, не зависящее от устройства используемой модели. В итоге было составлено две таблицы:

1. Таблица №1, в которой описаны топ 5 DILI-положительных и топ 5 DILI-отрицательных дескрипторов для набора, состоящего из 251 дескриптора, при котором модель достигла максимума точности классификации (84%).

2. Таблица №2, в которой описаны топ 5 DILI-положительных и топ 5 DILI-отрицательных дескрипторов для набора, состоящего из 18 дескрипторов, при котором модель достигла достаточной точности классификации (80%).

Таблица №2. Топ 5 DILI-положительных и DILI-отрицательных дескрипторов для набора, состоящего из 18 дескрипторов.

№	Топ-5: DILI-отрицательные дескрипторы		Топ-5: DILI-положительные дескрипторы	
	Дескриптор (с диапазоном значений)	Важность	Дескриптор (с диапазоном значений)	Важность
1	SpMin1_Bhs > 0.65	0,1073	nsssCH > 0.16	0,1049
2	SpMax2_Bhe > 0.60	0,0834	ETA_Epsilon_3 > 0.60	0,0865
3	ALogP <= -0.50	0,0730	-0.56 < MATS4m <= -0.03	0,0502
4	-0.62 < ETA_Epsilon_5 <= -0.06	0,0578	ATSC4s > 0.35	0,0277
5	SssNH <= -0.53	0,0481	-0.70 < CIC2 <= -0.15	0,0116

### Заключение

В данной работе был проведён сбор и подготовка комбинированного набора данных для создания модели классификации гепатотоксичности методами машинного обучения. На основе собранного набора данных был проведён отбор дескрипторов гепатотоксичности, что позволило довольно сильно сократить размерность модели, а также повысить точность классификации. Был найденный набор дескрипторов, при котором достигается наименьшее число дескрипторов, по при этом сохраняется достаточная точность. После отбора признаков был проведён анализ влияния дескрипторов на модель, а также получена информация о том, как каждый конкретный дескриптор способен влиять на оценку гепатотоксичности соединения.

### Список литературы

1. Real M. et al. Drug-induced liver injury: highlights of the recent literature //Drug safety. – 2019. – Т. 42. – С. 365-387.
2. Regev A. Drug-induced liver injury and drug development: industry perspective //Seminars in liver disease. – Thieme Medical Publishers, 2014. – Т. 34. – №. 02. – С. 227-239.
3. Mattes W. et al. Detection of hepatotoxicity potential with metabolite profiling (metabolomics) of rat plasma //Toxicology letters. – 2014. – Т. 230. – №. 3. – С. 467-478.
4. Tomida T. et al. Multiparametric assay using HepaRG cells for predicting drug-induced liver injury //Toxicology letters. – 2015. – Т. 236. – №. 1. – С. 16-24.
5. Anastas P., Teichman K., Hubal E. C. Ensuring the safety of chemicals //Journal of exposure science & environmental epidemiology. – 2010. – Т. 20. – №. 5. – С. 395-396.
6. Chen M., Borlak J., Tong W. Predicting idiosyncratic drug-induced liver injury—some recent advances //Expert Review of Gastroenterology & Hepatology. – 2014. – Т. 8. – №. 7. – С. 721-723.
7. Guidance for industry drug-induced liver injury: premarketing clinical evaluation : сайт. – URL: <https://www.fda.gov/media/116737/> (дата обращения: 23.05.2023)
8. Ai H. et al. Predicting drug-induced liver injury using ensemble learning methods and molecular fingerprints //Toxicological Sciences. – 2018. – Т. 165. – №. 1. – С. 100-107.
9. Zhang C. et al. In silico prediction of drug induced liver toxicity using substructure pattern recognition method //Molecular informatics. – 2016. – Т. 35. – №. 3-4. – С. 136-144.
10. Kotsampasakou E., Montanari F., Ecker G. F. Predicting drug-induced liver injury: The importance of data curation //Toxicology. – 2017. – Т. 389. – С. 139-145.
11. He S. et al. An in silico model for predicting drug-induced hepatotoxicity //International journal of molecular sciences. – 2019. – Т. 20. – №. 8. – С. 1897.
12. Xu Y. et al. Deep learning for drug-induced liver injury //Journal of chemical information and modeling. – 2015. – Т. 55. – №. 10. – С. 2085-2093.
13. Chen M. et al. Quantitative structure-activity relationship models for predicting drug-induced liver injury based on FDA-approved drug labeling annotation and using a large collection of drugs //toxicological sciences. – 2013. – Т. 136. – №. 1. – С. 242-249.
14. Liew C. Y., Lim Y. C., Yap C. W. Mixed learning algorithms and features ensemble in hepatotoxicity prediction //Journal of computer-aided molecular design. – 2011. – Т. 25. – С. 855-871.
15. Greene N. et al. Developing structure– activity relationships for the prediction of hepatotoxicity //Chemical research in toxicology. – 2010. – Т. 23. – №. 7. – С. 1215-1222.
16. Xu J. J. et al. Cellular imaging predictions of clinical drug-induced liver injury //Toxicological sciences. – 2008. – Т. 105. – №. 1. – С. 97-105.

УДК 622.276.66

Волкова М.А., Петухова Е.В.

**Гидравлический разрыв пласта - высокоэффективный метод интенсификации добычи нефти**Волкова Мария Александровна – магистрант группы МТ-27; [mwolfdoo@gmail.com](mailto:mwolfdoo@gmail.com).

Петухова Евгения Валерьевна – магистрант группы МТ-18; заведующий лабораторией кафедры логистики и экономической информатики;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,  
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В статье рассмотрен метод интенсификации добычи нефти – гидравлический разрыв пласта. Исследованы различные параметры и свойства жидкостей для проведения разрыва. Среди них выбрана наиболее эффективная с точки зрения проведения гидравлического разрыва и с точки зрения экономической дешевизны. Произведено сравнение различных видов проппантов по различным параметрам из государственного стандарта. Был произведён расчёт затрат на проведение данного метода – заработная плата персонала и аренда оборудования, а также проектирование всего проекта.*

*Ключевые слова: гидравлический разрыв пласта, нефтедобыча, проппант, углеводород, гель*

**Formation hydraulic fracturing - high-efficient method of oil production intensification**Volkova Maria Alexandrovna<sup>1</sup>, Petukhova Evgenia Valerievna<sup>1</sup><sup>1</sup> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

*The article discuss a method for intensifying oil production - hydraulic fracturing. Various parameters and properties of fracturing fluids have been studied. Among them, the most effective one was chosen from the point of view of hydraulic fracturing and from the point of view of economic cheapness. A comparison of various types of proppants was made according to various parameters from the state standard. The cost of implementing this method was calculated - staff salaries and equipment rental, as well as the design of the entire project.*

*Key words: hydraulic fracturing, oil production, proppant, hydrocarbon, gel*

**Введение**

В настоящее время добыча нефти вносит существенный вклад в ВВП порядка одной шестой среди всех источников. Столь большой вклад обусловлен огромными запасами, которые таит наша страна. Наиболее крупные месторождения нефти в России расположены в Западной Сибири, Поволжье, Северном Кавказе и других регионах.

Использование традиционных технологий на нефтяных месторождениях приводит к тому, что существенный процент объема минеральной нефти остается в пласте.

В условиях цифровизации экономики и необходимости повышения энергоэффективности добывающей и обрабатывающей промышленности [1] важная роль принадлежит интенсификации технологий извлечения нефти из пласта с использованием метода гидравлического разрыва пласта.

**Экспериментальная часть**

На рисунке 1 представлена карта месторождений Западной Сибири. Глубина залегания месторождений может достигать до 3200 метров.

Месторождения Ноябрьского региона Западной Сибири отличаются повышенной пластовой температурой, достигающей 85 °С. Средняя глубина залегания месторождений данного региона равна 2400 м, с пористостью пласта до 19%, также его проницаемостью до 0,05 мкм<sup>2</sup>. Показатель средней нефтенасыщенности лежит в интервале 0,44-0,64 ед.

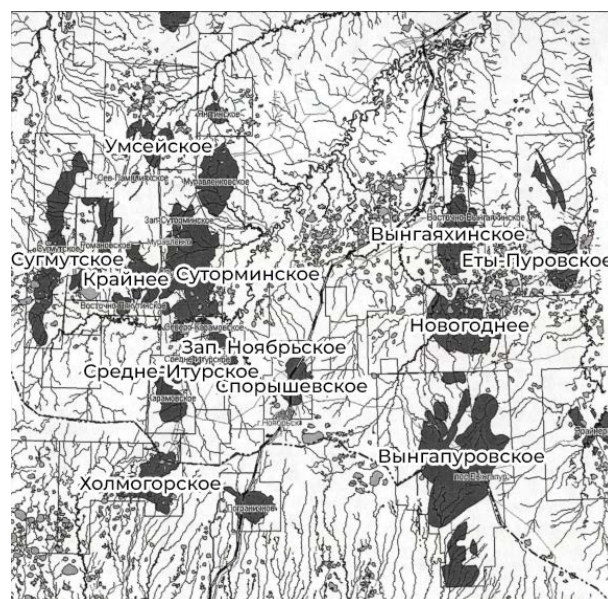


Рис. 1. Карта месторождений Западной Сибири.

Пласты Ноябрьского региона неоднородны: их коэффициент песчаности равен 0,05-1, а коэффициент расчленённости равен 1-39.

Терригенно-поровый коллектор представлен 4 типами горных пород: алевритистый песчаник, песчаный алевролит, глинистый алевролит и алевритистый аргиллит. Самой частой породой-коллектором является полимиктовый алевритистый песчаник. Его текстура полого- и косоволнистая, часто можно увидеть прослой темных глин.

Несмотря на карбонатные включения, в терригенных коллекторах Западной Сибири практически не применяется кислотный ГРП.

По анализу эффективности ГРП в скважинах Ноябрьского региона основными критериями выбора объектов под ГРП являются [1]:

- дебит жидкости до 10 м<sup>3</sup>/сут;
- перфорированная толщина пласта не менее 3 м; обводненность продукции менее 30% [2];
- остаточные извлекаемые запасы не менее 70 % от начальных.

Для выбора жидкости для ГРП и проппанта были проведены их исследования. Среди выбираемых жидкостей были: жидкость на водной основе, на основе вязкоупругих ПАВ, углеводородный гель и жидкость для соляно-кислотного ГРП.

Жидкости на водной основе испытывают на ротационном вискозиметре, определяя их вязкость при разных значениях скорости сдвига, концентрации геля и температуры. Чем выше вязкость, тем лучше жидкость транспортирует расклинивающий материал (проппант) в пласт. Помимо этого, оцениваются вторичные параметры: концентрация катионов кальция, магния в используемой воде, совместимость с нефтью (наличие осадка или образование эмульсии при смешивании), способность к деструкции, термостабильность и прочие параметры.

Для углеводородных гелей также проводится исследование температуры вспышки, плотности и давления насыщенных паров.

Среди составов гелей на водной основе самым дешёвым и эффективным оказался полисахаридный гель на основе борной кислоты с деструктором персульфатом аммония и добавлением различных ПАВ, а также «Сликвотер» на основе полиакриламида.

Для соляно-кислотного ГРП был предложен состав на основе гуарового, ксантанового геля на основе метилцеллюлозы, деструкторов и деэмульгатора Нефтенала К марки СК. Вся смесь на основе 12% HCl с ПАВ обрабатывается также ингибитором коррозии ИКУ-118 и стабилизатором железа «Ферикс».

Состав на основе вязкоупругих ПАВ готовится с учётом оптимальной простой формулы: амфолитный ПАВ, растворённый в специально подготовленной воде с добавлением различных минеральных солей, таких как хлориды калия, натрия, кальция и магния.

Углеводородный гель основан на товарной нефти с добавлением специального углеводородного гелеобразователя, активатора и деструктора. В качестве активаторов подобран мицеллярный раствор солей многовалентных металлов.

Исследование проппантов проводят по российскому ГОСТ Р 51761-2005 и международному ИСО 13503-2006. Определяют массовую долю оксидов алюминия и железа, насыпную плотность, сопротивление раздавливанию, растворимость в кислотах, сферичность и округлость, гранулометрический состав, массовую долю гранул

основной фракции и эффективную удельную активность естественных радионуклидов.

Были исследованы [3] 6 марок проппантов – три зарубежных (HAIHUA, CarboProp и CarboLite) и три отечественных (BORPROP, ForeLWP и ForeProp). Графики анализа представлены на рисунке 2.

Помимо этого были получены данные о том, что содержание примесей не превышает 10%, установленные ГОСТ, а сферичность и округлость по Крумбейну и Слоссу составила 0,87-0,9. Проппанты ForeLWP и ForeProp имеют форстеритовую основу (2MgO·SiO<sub>2</sub>) и химически неустойчивы к действию смеси кислот, несмотря на их органическое покрытие; прочность проппантов убывает в ряду: CarboProp>BORPROP>ForeLWP>ForeProp>CarboLite >HAIHUA. Проппант HAIHUA отличается повышенной радиоактивностью.

Расчёт экономической модели реализации ГРП производился на систему, состоящую из геля «Сликвотер» на основе полиакриламида и проппанта ForeProp.

Для проведения ГРП на сегодняшний день используется в среднем 300 м<sup>3</sup> геля. В нём содержится 300 кг суспензионного гелеобразователя ценой 1200 \$/тонна. А проппанта используется 200 тонн со стоимостью 280 \$/тонна. Итого это 57080 \$. Проектирование ГРП стоит 7575\$.

Помимо этого, для проведения ГРП нужно оборудование и квалифицированный персонал, способный работать на этих установках. Для стабильности цен они были переведены в доллары по курсу 81,58 руб/\$ [4]. Все найденные в интернете суммы представлены в таблице 1.

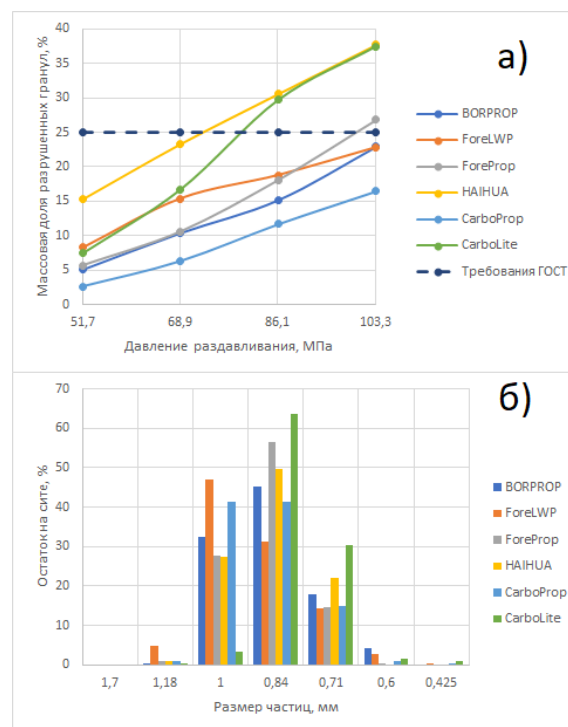


Рис. 2. Графическое представление некоторых данных анализа для каждого из шести проппантов: а) зависимость сопротивления раздавливания от давления; б) распределение частиц по их размеру в ходе ситового анализа после раздавливания.

Таблица 1. Стоимость оборудования и заработные платы специалистов.

Оборудование или транспорт	Стоимость аренды, \$	Специалист	Заработные платы, \$/сут
Насос с подачей 360 м <sup>3</sup> /час, 3 шт.	886	Бурильщик 6 разряда	117,9
Установка смесительная, на базе Mercedes-Benz	9903	Помощник бурильщика 5 разряда	57,4
Установка для сбора данных, контроля и управления	3261	Помощник бурильщика 4 разряда	81,9
Самосвал	631	Специалист для каждой машины	1007,8
Манифольд на шасси автомобиля	4855	Бурильщик КРС	83,4
Установка автоматизированной подачи химреагентов	6461	Помощник бурильщика КРС	71,6
Установка для подогрева, в комплекте с моющим аппаратом высокого давления	25	Машинист подъёмника	93,4
Километр труб (прокладка, окраска, грунтовка, теплоизоляция)	13271	Фрак-мастер	40,9

Итоговые затраты на оборудование равны 39293 \$, а сумма зарплат в день - 1554,3 \$.

В компании «РН- Северная нефть» (Республика Коми) проводили БОПЗ в карбонатных пластах – интенсификацию с использованием больших объемов геля и кислоты, можно сказать, что это аналог кислотного ГРП, при котором давление не превышает давление разрыва, при этом добыча выросла в 3,3 раза, что увеличило чистую прибыль с учётом расходов на 368 \$/день. Эти данные получены по четырём месторождениям с учётом того, что стоимость нефти на апрель 2023 года равнялась 11,18 \$/тонна [5].

#### Заключение

За полтора года эксплуатации четырёх скважин средний прирост дебита составил по расчётам 28,1 м<sup>3</sup>/сут, а средняя прибыль 172 тыс \$. Таким образом, проведение ГРП на скважинах оправдано с экономической точки зрения.

Данная технология находит применение во всём мире и уже используется много лет в РФ, однако всё ещё не все скважины подвергнуты ГРП, что даёт простор для новых исследований, с целью оптимизации проведения и дальнейшего увеличения прибыли от добычи нефти.

Авторы выражают благодарность академику РАН В.П. Мешалкину и профессору Л.А. Магадовой

за научные консультации и методические советы при написании данной статьи.

#### Список литературы

1. Мешалкин В.П. Основы интенсификации и ресурсоэнергоэффективности химико-технологических систем. – Смоленск: ООО «Принт-экспресс», 2021. – 442 с.: ил.
2. Курамшин Р.М., Иванов С.В., Кузьмичев Н.Д. Эффективность проведения гидраразрывов пласта на месторождениях Ноябрьского региона // Нефтяное хозяйство.- 1997.- № 12.- с. 58-60.
3. Магадова Л.А., Силин М.А., Глуценко В.Н. Нефтепромысловая химия. Технологические аспекты и материалы для гидроразрыва пласта: Учебное пособие для вузов. – М.: РГУ нефти и газа имени И.М.Губкина, 2012. – 423 с.
4. Динамика курса Доллара США // ООО ИА Банки.ру : сайт. – URL: <https://www.banki.ru/products/currency/usd/> (дата обращения: 25.04.2023).
5. Фьючерс на нефть Brent // Fusion Media Limited : сайт. – URL: <https://ru.investing.com/commodities/brent-oil> (дата обращения: 25.04.2023).

УДК 66.094.258.097

Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Шевченко А.А. Русаков Д.А., Караулов Р.А.

**Моделирование процесса неокислительного дегидрирования пропана в реакторе со стационарным слоем катализатора**

Писаренко Елена Витальевна – доктор технических наук, профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева, e-mail: evpisarenko@mail.ru;

Пономарев Андрей Борисович – кандидат химических наук, старший научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН;

Шевченко Анна Анатольевна – аспирантка 2 года обучения кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева;

Русаков Денис Андреевич – студент 1 курса магистратуры кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева;

Караулов Роман Андреевич – студент 1 курса магистратуры кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

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

ФГБУН «ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН»,

Россия, Москва, 119334, ул. Вавилова, д. 28.

*Исследована активность, селективность и стабильность работы катализаторов Pt-Zn-Cu/MFI, Pt-Zn/MFI, Pt-Cu/MFI, полученных методом пропитки, в реакции неокислительного дегидрирования пропана. Построена кинетическая модель реакции и оценены методом МНК кинетические константы модели. Разработаны модель зерна катализатора, модель каталитического реактора, оценены макрокинетические параметры моделей, выведены уравнения диффузионной и реакторной стехиометрии. Определены оптимальные размеры гранулы катализатора, факторы эффективности его работы, оптимальные условия проведения процесса. Для демонстрационных целей в CoDeSys разработана программа автоматического регулирования переключения режимов работы реакторов со стационарными слоями катализатора в процессе Catofin.*

*Ключевые слова:* дегидрирование пропана, цеолиты MFI, кинетика, моделирование, автоматическое регулирование.

**Simulation of the nonoxidative propane dehydrogenation process in a reactor with a stationary catalyst bed**

Pisarenko E.V.<sup>1</sup>, Ponomarev A.B.<sup>2</sup>, Shevchenko A.A.<sup>1</sup>, Rusakov D.A.<sup>1</sup>, Karaulov R.A.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

<sup>2</sup> Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia.

*The activity, selectivity and stability of Pt-Zn-Cu/MFI, Pt-Zn/MFI, Pt-Cu/MFI catalysts obtained by impregnation in the reaction of non-oxidative propane dehydrogenation have been studied. A kinetic model of the reaction was constructed and the kinetic constants of the model were estimated by the least squares method. A model of a catalyst grain and a model of a catalytic reactor have been developed, the macrokinetic parameters of the models have been estimated, and diffusion and reactor stoichiometry equations have been derived. The optimal dimensions of the catalyst granule, the factors of its efficiency, and the optimal conditions for the process were determined. For demonstration purposes, a program has been developed in CoDeSys to automatically control the switching of operating modes of reactors with fixed catalyst beds in the Catofin process.*

*Keywords:* propane dehydrogenation, MFI zeolites, kinetics, modeling, automatic regulation.

**Введение**

Легкие олефины производятся по традиционным технологиям

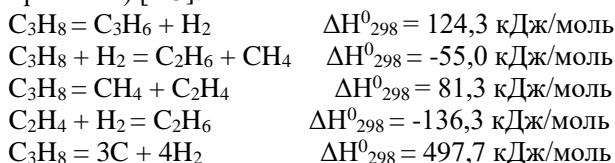
термического/парового/пароводородного/каталитического пиролиза или каталитического крекинга углеводородного сырья, а также по альтернативным технологиям, таким как метанол в олефины/метанол в пропилен, дегидрирование легких алканов, уголь в олефины, получение олефинов по Фишеру-Тропшу, биомасса в олефины. Дегидрирование легких алканов C<sub>3</sub>-C<sub>4</sub> является перспективной альтернативной промышленной технологией получения пропилена и бутилена. К настоящему времени коммерциализованы 8 новых промышленных технологий дегидрирования легких алканов: Catofin (ABB Lummus), Oleflex (UOP), STAR

(Uhde), FBD-4 (Snamprogetti и Yarsintez), PDH (Linde-BASF), ADHO (China University of Petroleum), FCDh (Dow Chemical), K-PRO (KBR). Промышленные процессы дегидрирования легких алканов проводятся при температурах 550-750°C, давлениях 0,1-8 атм, объемных скоростях 0,4-16 ч<sup>-1</sup> в каталитических реакторах со стационарными/псевдооживленными/движущимися слоями катализатора. Основные проблемы при проведении реакций дегидрирования легких алканов заключаются в невысокой активности и селективности работы катализаторов, быстрой дезактивации катализаторов и необходимости их частых регенераций [1].

Перспективными новыми катализаторами дегидрирования легких алканов являются

катализаторы на основе Pt, промотированные такими металлами как Sn, Zn, Cu, Co, Ce, Ge, Ga, In, Fe, Mn [2-3]. В качестве носителей катализаторов могут применяться оксиды кремния, алюминия, цеолиты различных типов Beta, ZSM-5, MOR, Y, мезопористые материалы MCM-22, MCM-41, нанотрубчатые материалы, и т.д.

При проведении процесса дегидрирования легких алканов C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub> в каталитических реакторах, протекают химические реакции дегидрирования и крекинга алканов, гидрирования алкенов и коксообразования (на примере процесса дегидрирования пропана в пропилен) [4-5]:



Равновесная конверсия легких алканов возрастает с увеличением числа атомов углерода в молекуле и разветвленности алканов и не превышает 50 % при селективности по алкенам 90 % при 550-650 °С и 1 атм. На рис. 1 представлены зависимости равновесной конверсии пропана от температуры при различных давлениях.

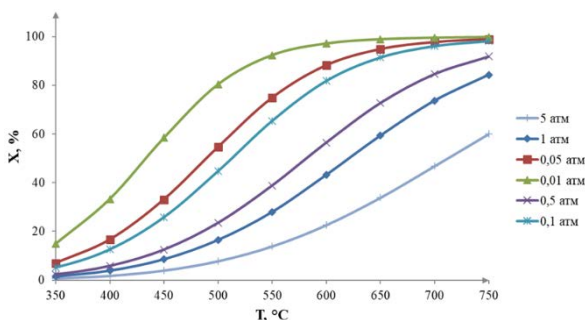


Рис.1 Зависимость равновесной конверсии пропана от температуры при различных давлениях

### Экспериментальная часть

Методом влажной пропитки получены Pt-содержащие катализаторы типа MFI, модифицированные медью и цинком различного состава: (0,5%Pt)Na/MFI; (0,5%Pt-2%Zn)Na/MFI; (0,5%Pt-2%Cu)Na/MFI; (0,5%Pt-2%Cu-1%Zn)Na/MFI; (0,5%Pt-1%Cu-1%Zn)Na/MFI. Установлено, что катализаторы (0,5%Pt-2%Cu-1%Zn)Na/MFI (0,5%Pt-1%Cu-1%Zn)Na/MFI показали наилучшие результаты по активности, селективности и стабильности работы в реакции дегидрирования пропана, численные значения констант дезактивации  $k_d$  составили 0,00599 и 0,01069 ч<sup>-1</sup> соответственно при отсутствии водорода и газов разбавителей в сырьевом потоке [3].

Кинетические эксперименты по изучению реакции неокислительного дегидрирования пропана в пропилен проводились в проточном реакторе непрерывного действия со стационарным слоем катализатора. Схема экспериментальной установки представлена на рис. 2.

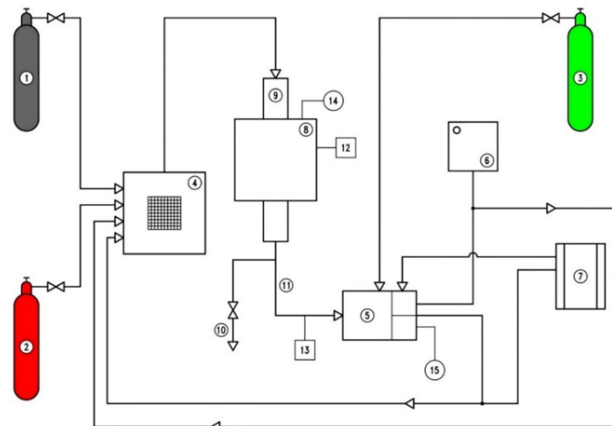


Рис.2 Схема каталитической установки дегидрирования пропана

1 – баллон с азотом; 2 – баллон с пропаном; 3 – баллон с водородом; 4 – формирователь газовых потоков; 5 – хроматограф; 6 – компрессор; 7 – генератор водорода; 8 – печь; 9 – реактор; 10 – выход газа; 11 – линия обогрева; 12, 13 – термодат; 14 – термомпара; 15 – манометр.

Реакцию неокислительного дегидрирования пропана в пропилен проводили в диапазоне температура 520-580 °С, давлений 0,1-1,0 атм, расхода сырья 1,0-5,0 ч<sup>-1</sup>, мольного отношения H<sub>2</sub>/C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> 0-0,5. Анализ продуктов реакции осуществляли газохроматографически (Кристалл 5000.2). Построена кинетическая модель реакции дегидрирования пропана и методом наименьших квадратов оценены параметры модели.

Для моделирования процесса в зерне катализатора и оценки оптимальных геометрических размеров гранул, а также факторов эффективности работы зерна в отношении ключевого реагента (пропана) и реакции по маршруту выбрана квазигомогенная модель зерна катализатора с граничными условиями Дирихле и выведены уравнения диффузионной стехиометрии для расчета парциальных давлений неключевых веществ пропилена и водорода и температуры реакционной смеси:

$$\begin{cases} D_{eff,C_3H_8} \left( \frac{d^2 p_{C_3H_8}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dp_{C_3H_8}}{dr} \right) = \frac{k_1 \cdot \left( p_{C_3H_8} - \frac{p_{C_3H_6} \cdot p_{H_2}}{K_P} \right)}{(1 + K_2 \cdot p_{C_3H_6} + K_3^{0,5} \cdot p_{H_2}^{0,5})^2} \\ p_{C_3H_6}(r) = \frac{D_{eff,C_3H_8}}{D_{eff,C_3H_6}} \cdot (p_{C_3H_6,S} - p_{C_3H_6}(r)) + p_{C_3H_6,S} \\ p_{H_2}(r) = \frac{D_{eff,C_3H_8}}{D_{eff,H_2}} \cdot (p_{C_3H_8,S} - p_{C_3H_8}(r)) + p_{H_2,S} \\ T(r) = \frac{\Delta H_T}{\lambda_{eff}} \cdot D_{eff,C_3H_8} \cdot (p_{C_3H_8}(r) - p_{C_3H_8,S}) + T_S \end{cases} \quad (1)$$

Граничные условия Дирихле:

$$1. \quad r = 0; \quad \frac{dp_{C_3H_8}}{dr} = 0; \quad \frac{dp_{C_3H_6}}{dr} = 0; \quad \frac{dp_{H_2}}{dr} = 0; \quad \frac{dT}{dr} = 0;$$

$$2. \quad r = R; \quad p_{C_3H_8}(R) = p_{C_3H_8,S}; \quad p_{C_3H_6}(R) = p_{C_3H_6,S}; \quad p_{H_2}(R) = p_{H_2,S}; \quad T(R) = T_S$$

где  $r$  – текущий радиус;

$D_{eff,i}$  – эффективный коэффициент диффузии  $i$ -го



компонента;

$p_i$  – парциальное давление  $i$ -го компонента;

$\lambda_{eff}$  – эффективный коэффициент

теплопроводности;

$\Delta H_T$  – изменение энтальпии;

$T$  – температура, К;

$K_p$  – константа равновесия реакции.

Макрокинетические параметры модели зерна катализатора были оценены на основании экспериментальных данных.

Для моделирования процесса в проточном каталитическом реакторе выбрана квазигомогенная модель реактора идеального вытеснения:

$$\frac{d\vec{F}}{dt} = \vec{R}^B(\vec{F}, \vec{k}, T) \cdot \rho_H \cdot S \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^N F_i \cdot c_{p,i} \cdot \frac{dT}{dt} = \left( \sum_{u=1}^p (-\Delta H_u(T) \cdot r_u(\vec{F}, \vec{k}, T)) \right) \cdot \rho_H \quad (3)$$

Начальные условия:

$$l = 0; F_i(0) = F_{i,0}; T(0) = T_0; i = 1, \dots, N.$$

где,  $\vec{F}$  – вектор мольных потоков реагентов;

$l$  – текущая длина каталитического реактора, м;

$\vec{R}^B$  – вектор скоростей превращения веществ;

$\vec{k}$  – вектор кинетических констант модели;

$T, T_0$  – температура в реакторе и на входе в реактор;

$\rho_H$  – насыпная плотность катализатора;

$S$  – площадь поперечного сечения каталитического реактора;

$N$  – число реагентов;  $c_{p,i}$  – молярная теплоемкость  $i$ -го реагента;

$p$  – общее число маршрутов реакций;

$r_u$  – скорость реакции по  $u$ -тому маршруту.

Установлено, что оптимальными условиями проведения процесса неокислительного дегидрирования пропана на нанокатализаторах 0,5%Pt-2%Cu-1%Zn-MFI и 0,5%Pt-1%Cu-1%Zn-MFI являются  $T = 550^\circ\text{C}$ ,  $P = 1$  атм,  $WHSV = 3$  ч<sup>-1</sup>. Оптимальный размер гранулы катализатора 3 мм.

Реакторный блок процесса Catofin состоит из 4-8 параллельно работающих адиабатических реакторов со стационарными слоями катализатора, в которых протекают процессы дегидрирования / регенерации / очистки, причем для завершения одного полного цикла требуется 30 минут. Режим работы реактора: дегидрирование (12 мин), очистка (3 мин), регенерация (12 мин), очистка (3 мин) [1]. Условия проведения процесса: 560-650 °С, 0,2-0,5 атм, расход сырья менее 1 ч<sup>-1</sup>. Преимуществом процесса Catofin являются высокая селективность по олефинам >88% для пропана и >89 % для изобутана, высокая конверсия алканов > 45 % для пропана и > 53% для изобутана; отсутствие рециркуляции водорода или пара; использование недорогого катализатора; низкие расходные нормы по сырью; щелочная очистка. К недостаткам относится

цикличный режим процесса и необходимость дополнительных затрат для обеспечения непрерывной работы

Установка получения легких олефинов Catofin (рис. 3) включает реакторный блок и блок разделения продуктов реакции. Непрерывность работы установки достигается за счет параллельно работающих реакторов.

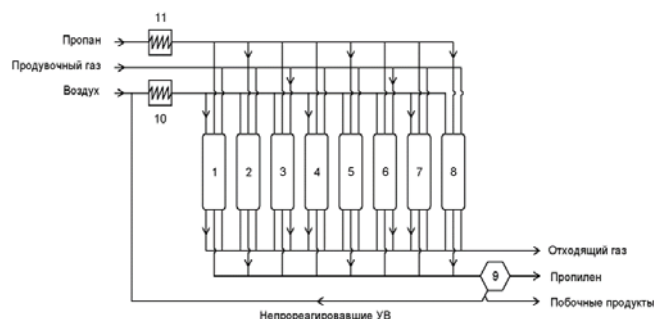


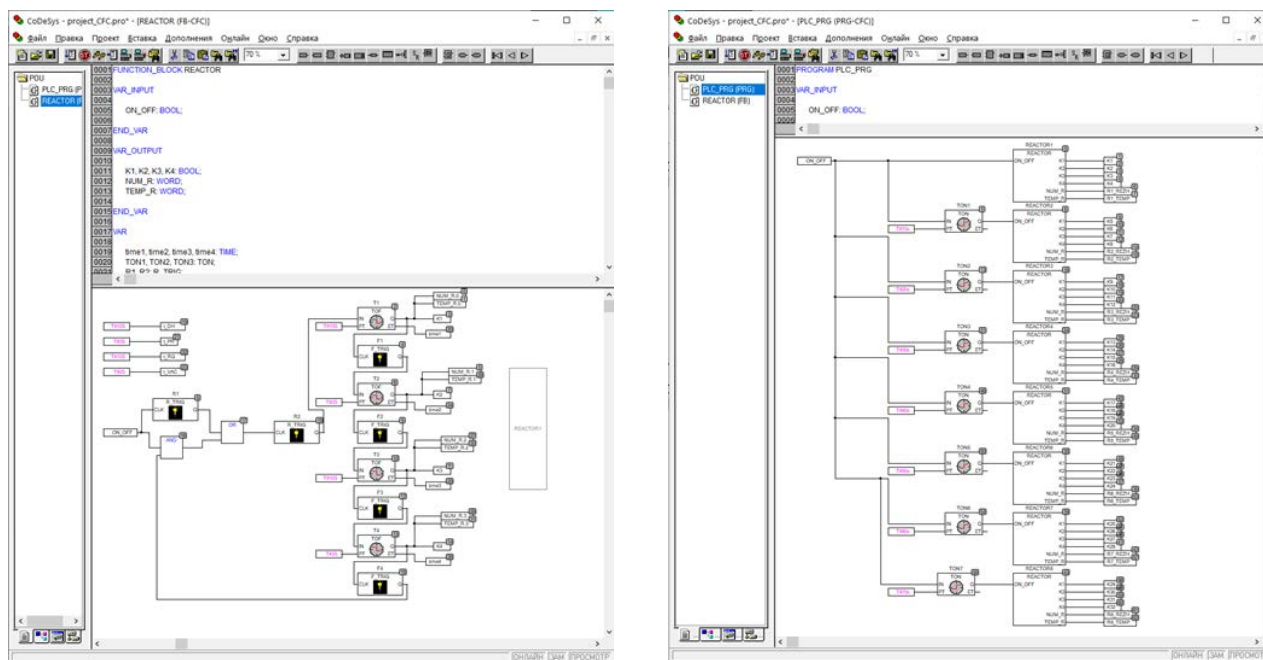
Рис.3 Схематическое изображение установки дегидрирования Catofin.

1,5 – реакторы с неподвижным слоем; 2,6 – реакторы в режиме синтеза; 3,7 – реакторы в режиме продувки; 4,8 – реакторы в режиме регенерации катализатора; 9 – сепаратор, разделяющий непрореагировавшие УВ от продуктов; 10,11 – теплообменники.

Для демонстрационных целей и использования в учебном процессе в CoDeSys разработана программа автоматического регулирования переключения режимов работы реакторов со стационарными слоями катализатора. Бесперебойный поток продукта обеспечивается за счет параллельной работы нескольких реакторов в режиме дегидрирования, в то время как другие реакторы проходят стадии продувки, регенерации и вакуумирования. Данный механизм работы реакторной секции происходит, благодаря последовательному введению в работу каждого реактора при запуске всей установки.

Управляющая программа (рис. 4, б) построена из таймеров с задержкой включения реакторов, запускающих их последовательно, из нескольких экземпляров функционального блока (рис. 4, а), который включает в себя детекторы фронта и таймеры с задержкой выключения. Детекторы фронта расположены между таймерами для последовательного переключения режимов работы реактора.

По истечении времени таймера выключения реактора, работающего в режиме дегидрирования, значение на выходе данного таймера принимает значение FALSE и детектор фронта передает значение TRUE на вход следующего таймера с задержкой выключения, который отвечает за работу реактора в режиме продувки (2 мин).



а

б

Рис.4 Интерфейс разработанной программы в CoDeSys 2.3 и ее код.  
 а – функциональный блок, отвечающий за переключение режимов одного реактора;  
 б – управляющая программа реакторной секции.

Таким образом реактор переходит из одного режима работы в другой. Между последним и первым таймером происходит проверка условия, на случай выключения установки. Если во время работы установку выключают, реактор проходит все режимы до конца и завершает работу.

Алгоритм предложенной программы автоматического регулирования обеспечивает работу реакторной секции с последовательным включением реакторов и циклическим переключением режимов их работы, что удовлетворяет требованию непрерывного химико-технологического процесса Catofin.

### Заключение

Исследование процесса дегидрирования легких алканов имеет большое значение для промышленности, так как позволяет получать ценные олефины из доступного сырья. Новые катализаторы на основе Pt, промотированные различными металлами, позволяют повысить производительность и стабильность процессов дегидрирования алканов C<sub>3</sub>-C<sub>4</sub>. Разработанные кинетические модели, модели зерна катализатора и реактора могут быть использованы для оптимизации процессов в промышленности.

Разработанная программа автоматического регулирования переключения режимов работы реакторов позволяет обеспечить непрерывность работы установки производства олефинов. Параллельная работа нескольких реакторов и последовательное переключение режимов работы реакторов, загруженных модифицированными Pt-содержащими катализаторами на основе цеолитов MFI, обеспечивают высокую селективность по олефинам и конверсию алканов. Дальнейшие

исследования в области дегидрирования легких алканов могут привести к разработке еще более эффективных и экономически выгодных технологий производства олефинов.

### Список литературы

1. E.V. Pisarenko, A.B. Ponomarev, A.V. Smirnov, V.N. Pisarenko, A.A. Shevchenko Prospects for Progress in Developing Production Processes for the Synthesis of Olefins Based on Light Alkanes// Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2022. V. 56. N. 5. P. 687-722.
2. A.B. Ponomaryov, A.V. Smirnov, E.V. Pisarenko, M.V. Shostakovskiy Enhanced Pt dispersion and catalytic properties of NaCl-promoted Pt/MFI zeolite catalysts for propane dehydrogenation //Microporous and Mesoporous Materials. 2022. V. 339. P. 112010.
3. Е.В. Писаренко, А.Б. Пономарев, А.А. Шевченко Изучение кинетики реакции неокислительного дегидрирования пропана в пропилен на катализаторах Pt-Cu-Zn/ZSM-5 // Математические методы в технологиях и технике. 2023. №1. С. 1-7.
4. Патент РФ 2751701 Пономарев А.Б., Смирнов А.В., Шостаковский М.В., Писаренко Е.В. Катализатор дегидрирования пропана и способ получения пропилена с его использованием. Заявл. 2020138961 от 27.11.2020, Опубл. 15.07.2021, бюл № 20.
5. Патент РФ 2751703 Пономарев А.Б., Смирнов А.В., Шостаковский М.В., Писаренко Е.В. Цеолитный катализатор дегидрирования пропана и способ получения пропилена с использованием этого катализатора Заявл. 2020137003 от 11.11.2020, Опубл. 15.07.2021, бюл № 20.

УДК 519.876.5: 004.942

Гашенко В.И., Лебедев И.В.

## Моделирование структуры аэрогелей с помощью моделей на основе кривых Безье и кластер-кластерной агрегации, ограниченной диффузией

Гашенко Владислав Ильич, студент 3 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга РХТУ им. Д.И. Менделеева, Россия, Москва, e-mail: Vladislav5750@yandex.ru

Лебедев Игорь Витальевич, к.т.н., научный сотрудник, доцент кафедры ХФИ РХТУ им. Д.И. Менделеева, Россия, Москва, e-mail: igor170491@yandex.ru

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

*В данном исследовании описываются клеточно-автоматные модели для генерации пористых и волокнистых структур аэрогелей и расчета их свойств с использованием сгенерированных структур. Рассматриваются и сравниваются модель, основанная на использовании кривых Безье, а также модель кластер-кластерной агрегации, ограниченной диффузией. Разработанные модели позволяют сгенерировать структуру пористого вещества, а также рассчитать его характеристики.*

*Ключевые слова: аэрогель, клеточные автоматы, кривые Безье, DLCA, мезопористая структура, моделирование.*

### Modeling the structure of aerogels using models based on bezier curves and diffusion-limited cluster aggregation

Gashenko V.I., Lebedev I.V.

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

*This article describes cellular automata models for generating porous and fibrous structures of aerogels and calculating their properties using generated structures. The model based on the use of Bezier curves and the diffusion-limited cluster aggregation model are considered and compared. The developed models allow generating the structure of a porous substance, as well as calculating its characteristics.*

*Key words: aerogel, cellular automata, Bezier curves, DLCA, mesoporous structure, modeling.*

Аэрогели — инновационные высокопористые наноструктурированные материалы, уже активно используемые во многих сферах, в частности в науке. Аэрогели имеют уникальные свойства за счёт высокой пористости (до 99%) такие как высокая удельная поверхность и низкая теплопроводность. Однако создание новых материалов — трудозатратная и дорогостоящая задача. Применение компьютерных и математических моделей даёт возможность решить ее, сократив производственные затраты.

Предлагаемые в данном исследовании дискретные модели генерации структур реализованы с применением клеточно-автоматного подхода. Клеточно-автоматный подход сейчас – один из широко распространенных подходов моделирования, основанный на упрощении и дискретизации исследуемой системы. В настоящее время данный подход применяется в экологии, гидро- и термодинамике, биологии (как на микро-, так и на макроуровне), химии, химической технологии, экономике, при моделировании структур пористых волокнистых материалов на наноуровне [1-5].

Суть клеточно-автоматного подхода состоит в том, что исследуемая система разбивается на одинаковые клетки – элементарные объёмы (или площади для двухмерного случая). В каждый момент времени каждая клетка имеет одно конкретное состояние из множества. Состояние каждой клетки зависит от состояния соседних клеток (окрестности). Клетка меняет свое состояние каждый дискретный шаг по

времени на основании локальных правил перехода. Локальность правил позволяет учитывать неоднородность структуры, когда состав и геометрия материала оказывает существенное влияние на его свойства. Правила перехода могут быть основаны на теоретических или статистических зависимостях [6].

Преимуществами клеточно-автоматного подхода являются простота и локальность правил эволюции исследуемой системы во времени. Локальные правила позволяют моделировать сложное поведение системы, требуя относительно мало вычислительной мощности. Также локальность правил позволяет создавать клеточные автоматы с использованием высокопроизводительных параллельных вычислений, что позволяет существенно ускорить проведение расчетов при моделировании.

Мезопористая структура аэрогеля оказывает сильное влияние на его свойства, поэтому целесообразно осуществлять моделирование именно на мезоуровне. Особенность мезоуровня состоит в том, что система уже слишком большая, чтобы рассматривать ее на молекулярном уровне, но все ещё слишком мала, чтобы рассматривать структуру как нечто однородное. В случае аэрогелей необходимо учитывать гетерогенность структуры аэрогеля на мезоуровне, которая состоит из твердого каркаса и пор, заполненных воздухом.

В данном исследовании приведено сравнение моделей кластер-кластерной агрегации, ограниченной диффузией (Diffusion Limited Cluster Aggregation,

DLCA) и модели, основанной на кривых Безье. Сравнение осуществляется по виду структур, распределению пор структур по размерам, а также по скорости генерации структур. DLCA — модель кластер-кластерной агрегации. Суть ее работы состоит в том, что стохастично двигающиеся по полю частицы вещества сначала агрегируют в более крупные кластеры, а затем — в единую структуру [6].

В модели, основанной на кривых Безье, выбираются несколько опорных точек, проходя через которые, строится кривая. Кривая утолщается до заданного диаметра. Входными параметрами моделей являются диаметр движущихся частиц и диаметр поперечного сечения волокна для модели DLCA и модели, основанной на кривых Безье, соответственно, а также целевая пористость структуры.

В обеих моделях агрегация или построение кривых происходит до достижения заданной пористости.

Для обеих изучаемых моделей были проведены вычислительные эксперименты по генерации цифровых пористых структур аэрогелей. Обе модели реализованы в рамках разработанного информационно-аналитического комплекса (ИАК). С помощью каждой модели были сгенерированы структуры с пористостью 90%. Для трёхмерных структур использовались размеры по координатам  $x, y, z$ : 70, 70, 70 клеток в масштабе 1 клетка = 10 нм. Для двумерных — 500x500 в масштабе 1 клетка = 1 нм. На рисунке 1 приведено изображение трёхмерной структуры, сгенерированной моделью, основанной на кривых Безье.

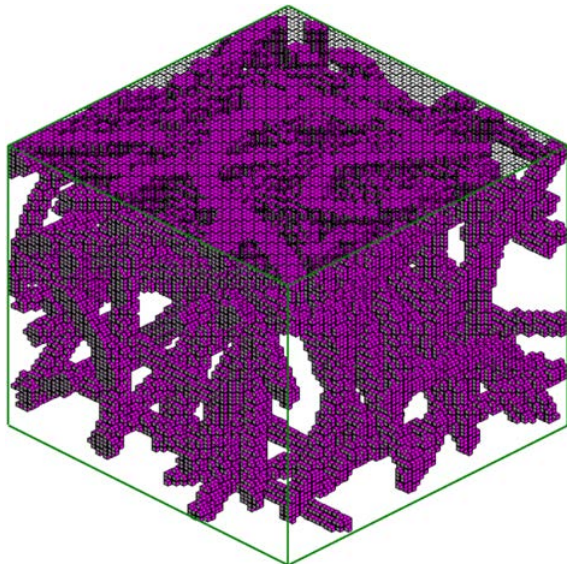


Рисунок 1. Модель, основанная на кривых Безье: 3D-структура с пористостью 90%.

На рисунке 2 приведено изображение двумерной структуры, сгенерированной моделью, основанной на кривых Безье.

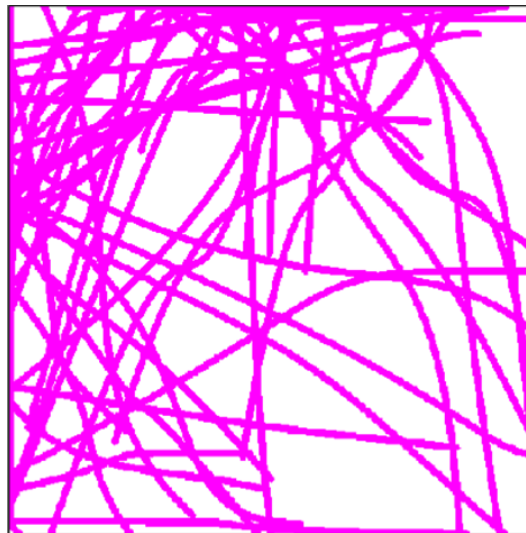


Рисунок 2. Модель, основанная на кривых Безье: 2D-структура с пористостью 90%.

На рисунках 3-4 приведены структуры, сгенерированные с помощью модели DLCA, трёхмерная и двумерная соответственно.

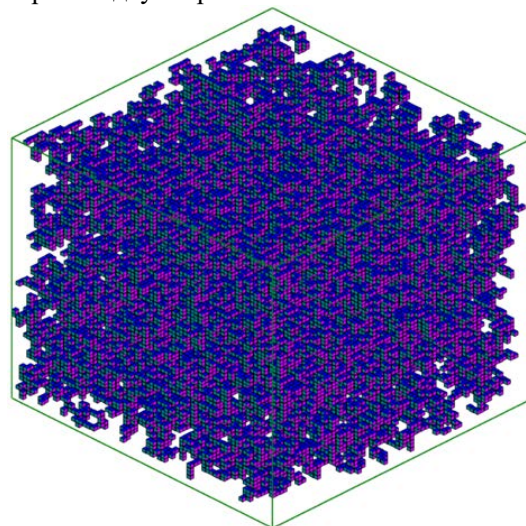


Рисунок 3. Трёхмерная цифровая структура DLCA: пористость 90%.

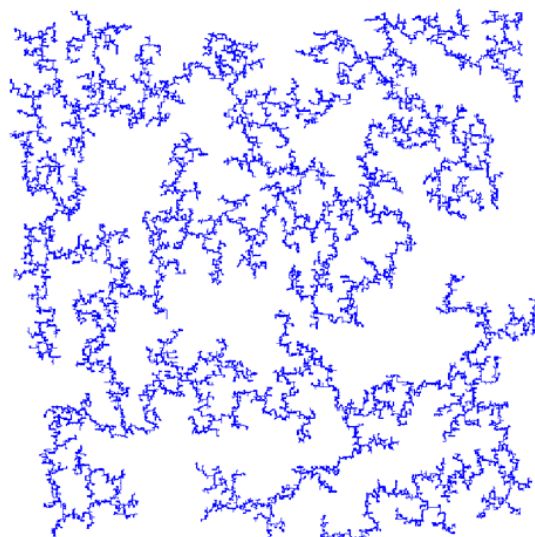


Рисунок 4. Двумерная цифровая структуры DLCA: пористость 90%.

Из визуальных изображений видно, что оба типа цифровых структур достаточно пористые и имеют разветвленную структуру скелета. Для более детальной оценки различия полученных структур

было проведено сравнение их распределения пор по размерам и времени генерации.

На основании времени расчета каждой структуры можно составить таблицу сравнения скорости генерации структур: Таблица 1.

Таблица 1. Сравнение скорости генерации структур моделью, основанной на кривых Безье, и DLCA

2D или 3D	Пористость структуры, %	Время генерации модели, основанной на кривых Безье, мс	Время генерации DLCA, мс
2D	90	152	55289
3D	90	98	5351

Также было рассчитано распределение пор по размерам для каждой сгенерированной структуры (рисунки 5-6). На графиках модель, основанная на кривых Безье, обозначена BezierModel.

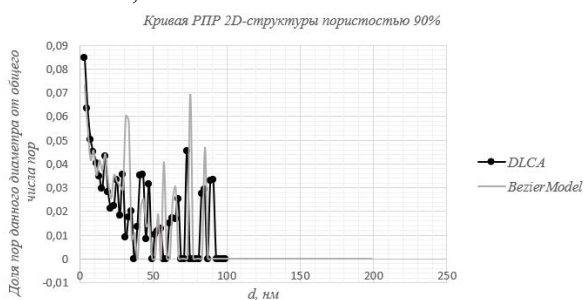


Рисунок 5. Кривая РПП двумерной структуры пористостью 90%.

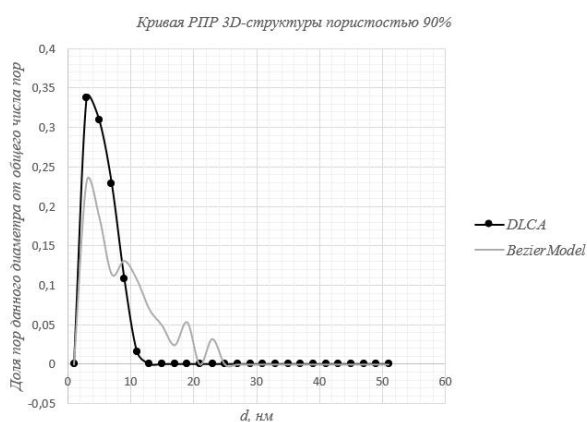


Рисунок 6. Кривая РПП трёхмерной структуры пористостью 90%.

Из приведенных графиков распределения пор по размерам видно, что цифровые структуры, полученные с помощью модели кривых Безье, имеют более плавную кривую, а также смещены, что говорит о наличии более крупных пор при одинаковых с DLCA входных параметрах. Таким образом, цифровые структуры существенно различаются и могут быть применены для различных типов аэрогелей – имеющих глобулярную и волокнистую структуры.

Кроме того, модель на основе кривых Безье работает существенно быстрее за счет отсутствия необходимости расчета движения и столкновения большого количества движущихся частиц, что существенно повысит скорость проведения вычислительных экспериментов при разработке новых материалов на основе органических аэрогелей, имеющих волокнистую структуру – таких, как аэрогели на основе целлюлозы и хитозана.

### Список литературы

- Liao J., Shao G., Wang C., Tang L., Huang Q., Qiu Q. Urban sprawl scenario simulations based on cellular automata and ordered weighted averaging ecological constraints // Ecological Indicators. 2019. Vol. 107. P. 105572.
- Clavin P., d'Humières D., Lallemand P., Pomeau Y. Cellular Automata for Hydrodynamics with Free Boundaries in Two and Three Dimensions // Lattice Gas Methods For Partial Differential Equations. CRC Press, 2019. P. 415-422.
- Lehotzky D., Zupanc G. K. H. Cellular automata modeling of stem-cell-driven development of tissue in the nervous system // Developmental neurobiology. 2019. Vol. 79(5). P. 497-517.
- Menshutina N. V., Kolnoochenko A. V., Lebedev E. A. Cellular automata in chemistry and chemical engineering // Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering. 2020. Vol. 11. P. 87-108.
- Liang X., Liu X., Chen G., Leng J., Wen Y., Chen G. Coupling fuzzy clustering and cellular automata based on local maxima of development potential to model urban emergence and expansion in economic development zones // International Journal of Geographical Information Science. 2020. Vol. 34(10). P. 1930-1952.
- Цифровые двойники новых материалов: клеточно-автоматное моделирование структуры и свойств: учеб. пособие / Н. В. Меньшутина, И. В. Лебедев, Е. В. Гусева, А. В. Колнооченко. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2020. 104 с. ISBN 978-5-7237-1779-4

УДК 662.613.136

Маслов М.С. Горбунов М.А., Сафронов О.А., Комарова С.Г., Кунилова И.В.

### **Анализ элементного и гранулометрического состава золы уноса в процессах подготовки и выщелачивания ценных компонентов**

Маслов Михаил Сергеевич – студент группы МТ-12; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9; [xxkdskfm@bk.ru](mailto:xxkdskfm@bk.ru).

Горбунов Максим Александрович – студент группы МП-22Е; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Сафронов Олег Андреевич – студент группы МЭ-11; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Комарова Светлана Григорьевна – кандидат технических наук, доцент кафедры инновационных материалов и защиты от коррозии; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Кунилова Ирина Валерьевна – кандидат технических наук, старший научный сотрудник; Институт проблем комплексного освоения недр им. Н.В. Мельникова Российской академии наук (ИПКОН РАН), Россия, Москва, 111020, туп. Крюковский, д. 4.

*В настоящей работе для технологической схемы подготовки и выщелачивания редкоземельных элементов из золы уноса, образующейся при сжигании углей, рассмотрены методы анализа элементного и гранулометрического составов золы и продуктов её переработки. Показано, что целесообразно применение методов: для определения содержания редкоземельных элементов – рентгенофлуоресцентного анализа; гранулометрического состава – лазерной дифракции.*

*Ключевые слова: зола сжигания углей, редкоземельные элементы, элементный состав, гранулометрический состав.*

### **Analysis of the elemental composition and particles sizes distribution of flying ash during the leaching of valuable components**

Maslov M.S.<sup>1</sup>, Gorbunov M.A.<sup>1</sup>, Safronov O.A.<sup>1,2</sup>, Komarova S.G.<sup>1</sup>, Kunilova I.V.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

<sup>2</sup> Institute of Comprehensive Exploitation of Mineral Resources Russian Academy of Sciences, Moscow.

*The article methods of analysis of particles sizes distribution and elemental composition for the process of preparation and leaching of valuable components from coal combustion ash are proposed.*

*Key words: coal flying ash; rare earth elements; elemental composition; particles sizes distribution.*

#### **Введение**

В настоящее время для развития различных отраслей промышленности (электротехники, электроники, металлургии, химической промышленности и т.д.) необходимы редкоземельные элементы (РЗЭ) [1], причём потребность в них возрастает. Это, в свою очередь, обуславливает необходимость расширения сырьевой базы РЗЭ [2]. Вовлечение в переработку не только природного, но и техногенного сырья позволит одновременно решить экологические проблемы, связанные с утилизацией отходов. С этой точки зрения, в качестве техногенного минерального сырья может быть перспективной зола уноса, образующаяся при сжигании углей. По зарубежным данным [3], для рентабельного извлечения РЗЭ из этого сырья минимальное суммарное содержание этих элементов должно составлять порядка 300 г/т. Известно, что в золе уноса присутствуют в различных количествах практически все известные РЗЭ, но наибольшее значение имеют Се, Y, La, Nd, а также рассеянный элемент Zr [4,5]. Предлагаемые в настоящее время технологии извлечения РЗЭ из золы характеризуются многообразием, но при этом центральное место занимает операция извлечения РЗЭ в раствор –

выщелачивание для последующего концентрирования и переработки металлургическими способами [6-8]. Для подготовки золы уноса к выщелачиванию представляется целесообразным выполнение ряда операций с целью удаления компонентов, которые могут оказать неблагоприятное влияние на процесс выщелачивания, в частности, несгоревшего углерода [9-10] и оксидов железа [11]. Для увеличения извлечения ценных компонентов в раствор выщелачивания предложены различные способы, в частности, предварительное спекание с различными реагентами [12]. Очевидно, что для эффективной разработки и реализации названных процессов необходимо контролировать содержание основных и ценных компонентов, в т.ч. РЗЭ, и гранулометрический состав как исходной золы, так и продуктов на отдельных стадиях её переработки, поскольку эти данные позволяют определять параметры режимов, обеспечивающих наиболее эффективное выщелачивание РЗЭ.

Цель настоящей работы: выбор способов анализа элементного и гранулометрического составов золы уноса в процессе её подготовки и выщелачивания РЗЭ.

### Характеристика элементного и гранулометрического состава золы уноса

Золы уноса в качестве главных элементов содержат кремний и алюминий, а также примеси железа, углерода, серы, фосфора, титана, кальция и иных щелочноземельных и щелочных элементов. Микропримесями в золах являются, прежде всего, цветные и редкие металлы (Mn, V, Co, Zr, Sc, Zn, Pb, Cu, Ni, Cr, As, Sb, Ce, Y, La, Nd, Ta, Nb, Ga), в некоторых случаях – благородные металлы (Ag, Au, Pt). Так, образец золы сухого отбора Рефтинской ГРЭС содержит, в пересчете на оксиды, 58% SiO<sub>2</sub>, 21% Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 3,7% Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 2% CaO, 1,3% SO<sub>3</sub>, 0,6% MgO, 0,5% K<sub>2</sub>O, 0,25% Na<sub>2</sub>O, а также 2,4% углерода. Содержания цветных металлов и циркония имеют порядок 10-100 г/т, редкоземельных и благородных металлов – 10 г/т. При выборе метода анализа с необходимой точностью необходимо учитывать низкие содержания ценных микроэлементов и неоднородность их распределения в золе.

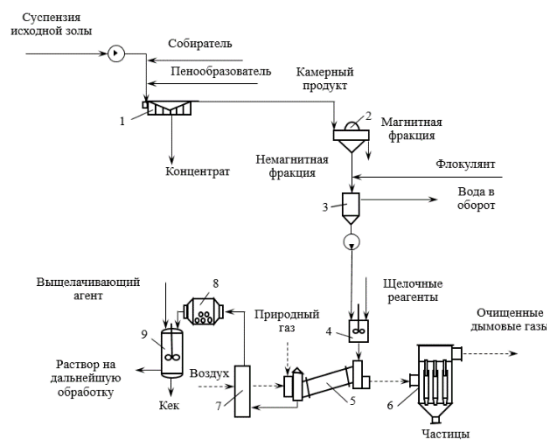
По гранулометрическому составу зола уноса является тонкодисперсным материалом. Среднеобъемный размер частиц в образце золы сухого отбора Рефтинской ГРЭС 16 мкм. Более половины (58%) золы является фракцией с размером частиц менее 40 мкм

### Технологическая схема подготовки и выщелачивания золы

Для комплексной переработки золы уноса в настоящей работе предложена технологическая схема подготовки золы и выщелачивания из неё РЗЭ (рис. 1).

Исходная зола в виде суспензии из золоотвала подаётся на флотацию в механическую флотационную машину. С применением в качестве собирателей аполярных органических жидкостей, а также пенообразователя получают концентрат, содержащий в основном недожог, и отходы флотации, содержащие минеральные частицы. Последний продукт поступает в мокрый магнитный сепаратор. Под действием магнитного поля выделяют оксиды железа. Отходы магнитной сепарации перемешивают со щелочным реагентом. Для эффективной реализации этой операции целесообразно сгустить отходы магнитной сепарации (при необходимости, с применением флокулянта), и полученную концентрированную суспензию перемешать с концентрированным раствором, содержащим щелочные реагенты. Названные операции осуществляют последовательно в сгустителе и в смесителе с вращающейся мешалкой. Полученную суспензию направляют во вращающуюся барабанную печь. В качестве топлива целесообразно применение природного газа. В печи происходит подсушивание золы и реакции взаимодействия силикатов с щелочным реагентом (при температуре около 350-450 °С). Дымовые газы из печи направляют для очистки от пыли в батарейный пылеуловитель, а выгружаемый из печи твёрдый материал, представляющий собой продукт реакций золы с щелочными реагентами, после охлаждения

воздухом поступает на измельчение в барабанную мельницу, и далее – на выщелачивание. В качестве выщелачивающего агента применяется смесь минеральных кислот и окислителя. Предусмотрена возможность циркуляции выщелачивающего раствора, его подкрепление и направление полученного продуктивного раствора на дальнейшую гидрометаллургическую обработку.



1 – механическая флотационная машина; 2 – мокрый магнитный сепаратор; 3 – сгуститель; 4 – смеситель;

5 – барабанная печь для спекания; 6 – батарейный пылеуловитель; 7 – воздушный холодильник;

8 – барабанная мельница; 9 – реактор

Рис. 1 Принципиальная технологическая схема подготовки золы к выщелачиванию

### Выбор методов контроля содержания РЗЭ и гранулометрического состава золы и продуктов её переработки

Анализ представленной схемы позволяет сделать вывод о том, что для оперативного контроля технологических процессов наиболее важны данные по элементному и гранулометрическому составам твёрдой фазы исходной золы; концентратов флотации и магнитной сепарации; материала, поступающего в реактор на выщелачивание и кека после выщелачивания. Ниже рассмотрены современные методы определения содержания РЗЭ в твёрдой фазе порядка единиц и десятков г/т, а также гранулометрического состава твёрдой фазы, содержащей частицы крупностью от сотен нм до сотен мкм.

Метод рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) основан на анализе спектра, возникающего при облучении исследуемого материала рентгеновским излучением [13]. При взаимодействии с высокоэнергетичными фотонами атомы вещества переходят в возбуждённое состояние, в результате происходит переход электронов с нижних орбиталей на более высокие энергетические уровни вплоть до ионизации атома. В возбуждённом состоянии атом пребывает в течение весьма малого времени, порядка одной микросекунды, после чего возвращается в основное состояние. При этом электроны с внешних

оболочек заполняют образовавшиеся вакантные места, а излишек энергии либо испускается в виде фотона, либо энергия передается другому электрону из внешних оболочек. При этом каждый атом испускает квант с энергией строго определённого значения. По энергии и количеству квантов судят о строении вещества.

Существует следующие разновидности этого метода:

- волновая дисперсия применяется для определения концентраций примесных элементов; характеризуется сравнительно высокой чувствительностью;

- энергодисперсионный метод менее чувствителен, но более пригоден для экспресс-анализа.

Чувствительность метода при определении концентрации РЗЭ в твёрдых материалах находится на уровне кларкового содержания элемента [14]. Погрешность метода зависит от природы элемента и его концентрации. Так, по данным [14], при определении Y, La, Ce, Pr и Nd погрешность находилась в пределах от 18 до 28 %. Воспроизводимость – порядка нескольких процентов. Согласно [15], точность и воспроизводимость результатов возрастает за счёт прессования исследуемого порошкообразного материала, а также сплавления с тетраборатом лития. В целом, метод характеризуется относительной простотой, малой трудоёмкостью, но в то же время его точность невелика.

Масс-спектрометрия (МС). Этот метод основан на ионизации образца исследуемого вещества в магнитном поле. При этом на ионы действует сила Лоренца, величина которой зависит от массы и заряда иона. По разнице траекторий различных ионов возможно определение содержания в исследуемом образце атомов веществ. Для выполнения измерений пробу исследуемого твёрдого вещества необходимо разложить с целью устранения факторов, искажающих данные анализа, и перевести в раствор, что является трудоёмким и требует определённых затрат времени.

Чувствительность этого метода существенно зависит от способа ионизации и применяемых детекторов. Согласно [16,17], при использовании масс-спектрометра с индукционно связанной плазмой (ИСП) для определения концентрации РЗЭ в растворе чувствительность составляет порядка 10-12 мг/л. Точность метода зависит от концентрации определяемого элемента (С) в исследуемом образце; также вносят погрешность полиатомные интерференции и матричный эффект [18]. Мешающими примесями являются ионы, имеющие такое же отношение массы к заряду, как и определяемый атом, а также определенные изотопы; например, для La это  $LaO^+$ ,  $LaOH^+$  и  $155Gd^+$  [19]. По данным [20], с уменьшением значения С от 1000 г/т до 0,01 г/т погрешность измерений возрастает от 8 % до 32 %. Воспроизводимость метода считается хорошей [20], но также, возможно, снижается с

уменьшением значения С. Поэтому рассматриваемый метод целесообразно применять для определения сравнительно высоких (десятки и сотни г/т) концентраций элементов в золе и при относительно небольших колебаниях по времени элементного состава анализируемой золы. Этот метод характеризуется сравнительно высокой трудоёмкостью.

Атомно-эмиссионная спектрометрия (АЭС). Метод основан на испускании электромагнитного излучения возбужденными атомами или ионами исследуемого образца, нагретого до высокой температуры. По эмиссионному спектру определяют количество атомов, и, следовательно, концентрации элементов. Для проведения измерений, как и для метода МС, пробу твёрдого вещества переводят в раствор и нагревают с тем, чтобы испарить растворитель и перевести атомы исследуемого вещества в возбужденное состояние. Концентрацию элементов определяют с помощью предварительно построенных градуировочных графиков. Согласно [21], стандартное отклонение (RSD) при анализе геоматериалов находится в пределах от 5 % (Y, Eu) до 10 % (Pr). Воспроизводимость и повторяемость АЭС при содержании элемента свыше 100 г/т – не более 5 %, менее 100 г/т – не свыше 10 % [22]. Пределы обнаружения некоторых РЗЭ, в г/т: Y – 2; Zr – 4; La – 2000; Ce – 4000; Pr – 30; Nd – 20; Eu – 1; Dy – 5; Er – 8 [23]. Метод является сравнительно точным, но трудоёмким.

Атомно-абсорбционная спектрометрия (ААС). Атомная абсорбция – процесс поглощения электромагнитного излучения специфической длины волны атомом в основном состоянии с переходом в возбужденное состояние. Атомы в основном состоянии поглощают энергию с резонансной частотой, и вследствие такого резонансного поглощения электромагнитное излучение ослабляется. Поглощенная энергия фактически прямо пропорциональна количеству присутствующих атомов.

Так же, как и для АЭС, пробу твёрдого вещества для проведения анализа предварительно растворяют и выполняют построение градуировочных графиков. Способы нагревания растворов: пламенный и электротермический.

Метрологические характеристики метода приведены в работе [24] применительно к измерению концентрации Nd, Eu и Lu в морской воде. Значения относительного стандартного отклонения для этих элементов составили соответственно 2,5; 1,8 и 2,4 %. Пределы обнаружения – соответственно 40; 200 и 4,0 мкг/л. Воспроизводимость считается хорошей: среднеквадратичное отклонение составляет порядка 2-3 % для пламенного варианта и порядка 10-15 % для электротермического.

Достоинства: селективность; сравнительная быстрота анализа. Недостаток: невозможность определения некоторых элементов, резонансные линии которых лежат за пределами диапазона длин волн 190-900 нм, например, галогены, С, S, N, O и H.



Метод лазерной дифракции применяется для контроля гранулометрического состава. Он заключается в том, что проба анализируемой суспензии твёрдого материала облучается лазером. Угол отклонения луча зависит от диаметра частиц [25]. Это позволяет выполнять измерения диаметра частиц в диапазоне от 10 нм до 3500 мкм, что соответствует крупности частиц золы. Точность метода, согласно [26], составляет от 1 до 4 %.

Достоинства: широкий диапазон измерений, высокая точность измерений, быстрота и простота, возможность измерений в проточном режиме, хорошая воспроизводимость.

Недостатки: трудность обнаружения частиц при низкой концентрации, необходимость диспергирования частиц в жидкости.

Метод ситового анализа получил широкое распространение в лабораторной практике. Этот метод заключается в последовательном рассеивании пробы тонкодисперсного материала на ситах с определёнными размерами отверстий. Трудоёмкость этого способа уменьшается применением устройств, обеспечивающих колебания пакета сит. Погрешность обусловлена в основном застреванием частиц в ячейках сита. В водной среде точность метода возрастает. Погрешность метода, согласно [27], зависит от выхода класса крупности и находится в пределах от 0,8 до 3,5 %.

С учётом вышеизложенного, представляется целесообразным осуществлять периодический контроль элементного состава РЗЭ (по Се, Y, La, Nd, Zr) для исходной золы, материала, направляемого в реактор, и кека после выщелачивания: методом РФА, как сравнительно недорогим и быстрым [28], ориентировочно 1-2 раза в сутки. Для более точного контроля элементного состава исходной золы и раствора после выщелачивания возможно использование АЭС или ААС, примерно раз в 1-2 месяца. Гранулометрический состав исходной золы, материала, направляемого в реактор, и кека после выщелачивания целесообразно контролировать методом лазерной дифракции ориентировочно 1-2 раза в сутки, и методом ситового анализа примерно 1 раз в месяц.

Таким образом, в настоящей работе определены методы анализа элементного и гранулометрического составов золы уноса и продуктов её переработки в процессах её подготовки и выщелачивания редкоземельных элементов.

### Заключение

Таким образом, в настоящей работе предложено применение следующих методов определения состава золы уноса и продуктов её переработки в процессах подготовки и выщелачивания редкоземельных элементов: элементного состава – рентгенофлуоресцентного анализа; гранулометрического состава – лазерной дифракции.

### Список литературы

1. Крюков В. А. Редкоземельная промышленность – реализовать имеющиеся возможности / В.А. Крюков
2. Thesis / D.A. Laudal; Univ. of North Dakota. – Grand Forks, North Dakota, 2017. – 440 p.
3. Шпирт М. Я. Использование твердых отходов добычи и переработки углей. Т. 5 / М.Я. Шпирт, В.Б. Артемьев, С.А. Силютин. – Москва: Горное дело, 2013. – 431 с. – ISBN 978-5-905450-29-7.
4. Charalampides G. Earth Elements: Industrial Applications and Economic Dependency of Europe / G. Charalampides, K.I. Vatalis, B. Apostoplos, B. Ploutarch-Nikolas // Procedia Economics and Finance. 2015, V. 24. – P. 126-135.
5. Taggart R. K. Recovery of Rare Earth Elements from Coal Combustion Ash: Survey, Extraction, and Speciation: PhD Thesis / R.K. Taggart; Duke University. – Durham, North Carolina, 2017.
6. Chanturia V. A. Combined chemical-beneficiation processes of valuable components extraction from coal burning wastes / V.A. Chanturia, A.A. Lavrinenko, A.P. Sorokin / XVIII International Coal Preparation Congress, 28 June-01 July 2016, Saint-Petersburg Mining University. – Saint-Petersburg, Russia: Springer International Publishing Switzerland, 2016. – P. 29-34.
7. Кунилова И. В. Комплексная переработка золошлаковых отходов от сжигания углей Кузнецкого бассейна / И.В. Кунилова, А.А. Лавриненко, О.Г. Лусинян, В.Н. Кравченко, Я.М. Шимкунас // Решение экологических и технологических проблем горных производств на территории России, ближнего и дальнего зарубежья: Материалы конференции / ред. Т.Ю. Лебедева. – М.: Винпресс, 2019. – С. 236-246.
8. Рябов Ю. В. Флотационное извлечение углерода из золы угольных ТЭС с использованием смеси керосина и газойля / Ю.В. Рябов, Л.М. Делицын, Н.Н. Ежова // Обогащение руд. – 2016, № 5. – С. 48-54.
9. Zhiping Wen. Grinding activation effect on the flotation recovery of unburned carbon and leachability of rare earth elements in coal fly ash / Zhiping Wen, Hangchao Chen, Jinhe Pan, Ruibo Jia, Fan Yang, Hangtao Liu, Lei Zhang, Ningning Zhang, Changchun Zhou // Powder technology. – 2022. – V. 398, № 1. – 7 P.
10. Abaka-Wood G. B. The concentration of rare earth elements from coal fly ash / G.B. Abaka-Wood, J. Addai-Mensah, W. Skinner // Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy. – 2022. – V. 122, № 1. – P. 21-27.
11. Pan J. Recovery of rare earth elements from coal fly ash through sequential chemical roasting, water leaching, and acid leaching processes / J. Pan, B. V. Hassas, M. Rezaee, C. Zhou, S. V. Pisupati // Journal of Cleaner Production. – 2021. – V. 284. – № 124725.
12. ГОСТ Р 55879-2013. Топливо твердое минеральное. Определение химического состава

- золы методом рентгенофлуоресцентной спектрометрии. Дата введения: 2013-11-22. – Изд. официальное. – М.: Стандартинформ, 2014. – 11 с.
13. Силачев И. Ю. Комплексообразование инструментального нейтронно-активационного и рентгенофлуоресцентного анализа для определения содержания редкоземельных элементов в геологических образцах / И.Ю. Силачев // Журнал аналитической химии. – 2020. – Т. 75, № 7. – С. 616-628.
  14. Schramm R. Use of X-ray Fluorescence Analysis for the Determination of Rare Earth Elements / R. Schramm // Physical Sciences Reviews. – 2016. – V. 1, № 9.
  15. Базарова Е. А. Определение редких и редкоземельных элементов в бадделеитовом концентрате методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой / Е.А. Базарова, А.И. Новиков, С.В. Дрогобужская // Труды КНЦ РАН. Химия и материаловедение. Вып. 1. – 2017, № 5 (8). – С.27-34.
  16. Николаева И. В. Определение основных и примесных элементов в силикатных породах методом масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой после сплавления с LiBO<sub>2</sub> / И.В. Николаева, С.В. Палесский, О.С. Чирко, С.М. Черноножкин // Аналитика и контроль. – 2012. – Т. 16, № 2. – С. 134-142.
  17. Жерноклеева К. В. Анализ редкоземельных металлов и их оксидов атомно-эмиссионным и масс-спектральными методами с индуктивно-связанной плазмой: Автореф. Дис...кандидата технических наук / К.В. Жерноклеева. – М., 2011. – 34 с.
  18. Nguyen Xuan Chien. The determination of rare earth elements in geological and environmental samples by inductively coupled plasma mass spectrometry / Nguyen Xuan Chien, Pham Ngoc Khai, Tran Duc Hien, Dao Nguyen, Dinh Cong Bot, Thinh Van Trung, Nguyen Thi Cuc, Le Hong Minh, Nguyen Viet Thuc, Bui Thi Ngan, Van Thuan. The Annual Report for 2006, VAEC. – 9 P.
  19. Пантеева С. В. Особенности определения содержания ряда элементов в горных породах различного состава методами масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой и рентгенофлуоресцентного анализа / С.В. Пантеева // Аналитика и контроль – 2009. – Т. 13, № 4. – С. 184-192.
  20. Krishnakumar M., Kumar M. Determination of Rare Earth Elements and Yttrium in Geological Materials by Inductively Coupled Plasma Atomic Emission Spectrometry Using Cu-DDTC as Coprecipitative Carrier // Atomic Spectroscopy. – 2011. – Т. 32. – №. 6. – С. 223-227.
  21. Mnculwane H. T. Rare Earth Elements Determination by Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry after Alkaline Fusion Preparation // Analytica. – 2022. – Т. 3. – №. 1. – С. 135-143.
  22. Зыбинский А. М. и др. Определение редкоземельных и сопутствующих элементов в ниобий-редкоземельных рудах методом атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно связанной плазмой с использованием моделирующей градуировки и математического учета интерференций // Журнал аналитической химии. – 2019. – Т. 74. – №. 3. – С. 173-185.
  23. Biju V. M. FAAS determination of selected rare earth elements coupled with multielement solid phase extractive preconcentration / V.M. Biju, T.P. Rao // Chemia Analityczna. – 2005. – V. 50, № 5. – P. 935-944.
  24. ГОСТ Р 57923-2017 (ИСО 24235:2007). Композиты керамические. Определение гранулометрического состава керамических порошков методом лазерной дифракции: дата введения 2017-11-08. – Изд официальное. – М.: Стандартинформ, 2017. – 11 с.
  25. Miller B.A., Schaetzel R.J. Precision of Soil Particle Size Analysis using Laser Diffractometry / B.A. Miller, R.J. Schaetzel // Soil Science Society of America Journal. – 2012. – V. 76, № 5. – P. 1719-1727.
  26. ГОСТ 2093-82. Топливо твердое. Ситовый метод определения гранулометрического состава: Национальный стандарт Российской Федерации: дата введения 1983-01-01. – Изд официальное. – М.: ИПК Издательство стандартов, 2001. – 20 с.
  27. Чупарина Е.В., Парадина Л.Ф. Определение элементного состава продуктов сжигания углей рентгенофлуоресцентным методом // Аналитика и контроль. – 2017. - Т. 21, № 3. - С. 216-224.

УДК 004.623

Золина П.В., Семенов Г.Н., Шанева А.С.

## Проектирование базы данных отчетов научно-исследовательских работ кафедры вуза

Золина Полина Владимировна, студентка 4 курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: polina.zolina@bk.ru;

Семенов Геннадий Николаевич, к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий;

Шанева Анна Сергеевна, ассистент кафедры информационных компьютерных технологий;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

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

*Спроектирована база данных для хранения и обработки данных о выполненных и незавершенных научно-исследовательских работах на кафедре вуза. Разработанная в свободно-распространяемой системе управления базами данных PostgreSQL, база данных позволяет хранить результаты работ поэтапно и выполнять различные пользовательские запросы и полнотекстовый поиск.*

*Ключевые слова: инфологическая модель, проект базы данных, отчеты научно-исследовательских работ, PostgreSQL*

## Development of a database of reports of scientific research works for the university department

Zolina P.V., Semenov G.N., Shaneva A.S.

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

*A database has been designed to store and process data on completed and incomplete research work at the university department. Developed in the free-distributed database management system PostgreSQL, the database allows to store the results of work in stages and perform various user queries and full-text search.*

*Keywords: infological model, database project, research paper reports, PostgreSQL*

### Введение

Одним из наиболее важных составляющих современного мира является процесс информатизации. Благодаря современным технологиям, появилась возможность осуществлять перевод информации из бумажного способа хранения в электронный вид, а также создавать новые информационные ресурсы сразу в электронной форме, причем, при этом хранение информации можно сделать удобным, что будет заметно упрощать поиск необходимых данных и работу с ними.

Если рассматривать системы документооборота, то здесь информатизация и автоматизация будут играть особо важную роль. Так как документы являются основным ресурсом любой организации, возможность удобной работы с ними и быстрого доступа к нужной информации является довольно важной [1-2].

Многие электронные хранилища научно-исследовательских работ (НИР) по сути, представляют собой электронный архив отчетов, выполненных НИР. Структура базы данных в таких системах достаточно тривиальна – каждая сущность здесь представлена стандартным набором атрибутов. В подобных системах решаемые задачи несложны – в основном это поиск отчетов по определенному набору атрибутов.

Если рассматривать уже существующие подобные системы и базы данных (БД), можно отметить такую как «База данных ВИНТИ РАН» – федеральная база отечественных и зарубежных публикаций по естественным, точным и техническим наукам, которая генерируется с 1981 г. и обновляется ежемесячно. Она включает 26 тематических фрагментов, состоит более чем из 190 разделов и формируется по материалам: периодических изданий, книг, фирменных изданий,

материалов конференций, патентов, нормативных документов, депонированных научных работ. Однако, из особенностей можно отметить, что доступ к данной БД является платным, выполнение поиска осуществляется специалистом ВИНТИ по запросу заказчика и передача файлов с результатами поиска по электронной почте заказчику [3].

Создание цифровых систем ведения документации и поиска информации по НИР кафедры вуза является нетривиальной задачей, поскольку необходимо рассматривать данные не только по завершенным НИР, но и по отдельным этапам текущих НИР. Кроме того, при подаче заявок на конкурс часто приходится искать информацию и по неподтвержденным заявкам на НИР, которые необходимо хранить в БД.

Целью данной же работы является создание базы данных для информационной системы, которая являлась бы удобной в работе конкретного университета и обеспечивала бы доступ к документам проектов НИР на различных этапах разработки, в том числе к документам неподтвержденных заявок.

В данной работе была спроектирована база данных, которая обеспечивает:

- упрощение и эффективность работы с документами;
- увеличение оперативности доступа к нужным данным;
- систематизация, а также поддержание актуальности информации;
- исключение дублирования данных;
- снижение рисков повреждения и потери информации;
- возможность разграничения прав доступа сотрудников к информации;

– сокращение материальных издержек на хранение библиотеки бумажных документов.

Таким образом, обеспечивается хранение документов, быстрая и качественная обработка информации, защита данных от внешнего доступа или утраты, а также существует возможность администрирования и беспрепятственного управления и модификации базы данных и любой информации, содержащейся в ней, на протяжении длительного времени.

В связи с этим в данной работе предлагается проект базы данных (БД) отчетов НИР.

Процесс разработки БД представляется следующими этапами:

- системный анализ предметной области;
- определение требований пользователей БД;
- анализ структуры документов отчетов НИР;
- разработка инфологической модели БД;
- разработка даталогической модели БД в PostgreSQL;

– ввод данных в БД, создание запросов, представлений, функций, тестирование БД.

### Инфологическая модель

В результате анализа предметной области и требований пользователей, особенностей документов была разработана следующая инфологическая модель БД, которая представляет собой ключевую модель в третьей нормальной форме (рис. 1).

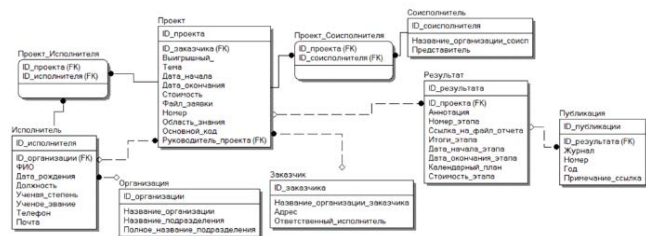


Рис. 1. Инфологическая модель базы данных отчетов НИР.

Инфологическая модель представляет набор сущностей с атрибутами и связей между сущностями. Выделены следующие сущности:

1. основная информация проекта НИР (сущность «Проект»);
2. результаты проекта поэтапно (сущность «Результат»), по каждому из этапов при наличии публикации имеется ссылка и информация на публикацию (сущность «Публикация»);
3. проект имеет заказчика, соответственно есть возможность получить о нем информацию (сущность «Заказчик»);
4. исполнители (сотрудников) которые реализовывали проект (сущность «Исполнитель»);
5. исполнители могут относиться к разным организациям или подразделениям в рамках одной организации (сущность «Организация»);
6. реализована возможность хранения информации о соисполнителях проекта, т.е.

организациях, совместно с которыми производились исследования (сущность «Соисполнитель»).

Сущности «Исполнитель» и «Соисполнитель» связаны с таблицей «Проект» через дополнительные таблицы для обеспечения связи многие-ко-многим.

### Средства разработки

Для разработки инфологической модели было выбрано средство Erwin Data Modeler – компьютерная программа для проектирования и документирования баз данных.

Для разработки даталогической модели базы данных была выбрана свободно-распространяемая СУБД PostgreSQL, удовлетворяющая требованиям высокоэффективных информационных систем. PostgreSQL является самой развитой (и продолжает развиваться) СУБД с открытым исходным кодом и глобальным сообществом, разработанная на её основе СУБД Postgres Pro входит в реестр российского программного обеспечения и поставляется для операционных систем как Linux, так и Windows, macOS. Основные преимущества данной СУБД по сравнению с другими – PostgreSQL не только не уступает лучшим коммерческим СУБД, но и превосходит их в плане продвинутой функциональности, расширяемости, безопасности и стабильности, а также кроссплатформенности, возможности полнотекстового поиска [4].

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

### Результаты работы базы данных

В спроектированной базе данных протестировано выполнение запросов различного типа, как для поиска документов по НИР, так и для проектирования сложных аналитических запросов. Типовые пользовательские запросы были реализованы в виде представлений, которые являются объектами базы данных и обеспечивают доступ к данным, ограниченному кругу пользователей. Возможности СУБД PostgreSQL позволили создать хранимые процедуры и функции для обработки и выдачи данных по произвольным параметрам.

Для демонстрации работы приведен результат запроса на поиск проектов, осуществленных по заказу РФФИ – российского фонда фундаментальных исследований (рис.2).

number_of_project character varying (30)	title_of_project text
1	19-37-90149 Исследование фундаментальных закономерностей, математическое моделирование и оптимизация процесса конверсии
2	20-07-00996 Предсказательное моделирование агрегативной устойчивости гидроксидных оксидов SnO <sub>2</sub> -ZnO
3	15-03-08183 Экспериментальное и компьютерное исследование, математическое моделирование эффективности конверсии метана
4	14-29-04026 Создание высокоактивных и стабильных катализаторов на основе нанотрубок и модифицированной платины для токс
5	14-07-00990 Создание высокопроизводительного программного обеспечения для суперкомпьютерного моделирования новых мат
6	16-08-01140 Исследование и математическое моделирование процессов функционирования биотопливного элемента на основе гла

Рис. 2. Запрос на вывод проектов РФФИ.

Основной особенностью данной БД является возможность вывода результатов проекта по каждому этапу (рис.3), а также вывода заявок на проекты, если они не были подтверждены (рис.4).

	number_of_project character varying (80)	stage_number integer	stage_result text
1	14-29-04026		Поставленные на данном этапе задачи полностью выполнены
2	14-29-04026		Основные задачи проекта на 2015 год выполнены полностью.
3	14-29-04026		Работы, запланированные в проекте, выполнены полностью.

Рис.3 Вывод результатов проекта поэтапно.

	number_of_project character varying (80)	winnable boolean	title text
2	20-04-60113	false	Математическое моделирование распространения коронавируса
3	19-29-14220	false	Исследование влияния цифровых технологий в области изучения
4	19-11-30151	false	Обзор современных подходов к моделированию явлений биологич
5	18-55-53034	false	Развитие термодинамического метода повышения производи
6	18-29-19104	false	Междисциплинарный подход, сочетающий вычислительные мето
7	17-03-01085	false	Разработка фундаментальных основ получения новых функцио
8	14-08-92600	false	Многоосное покрытие драже, лекарств и порошков – многоори

Рис.4 Вывод неподтвержденных заявок на проекты.

В заключительном этапе проектирования БД важным было проверка на согласованность и целостность данных, что было реализовано тестированием с помощью специально разработанных запросов к БД.

### Выводы

Разработанная база данных отчетов по научно-исследовательским работам в свободно распространяемой СУБД PostgreSQL обеспечивает все

возможные требования пользователей для эффективного поиска и обработки данных и может быть использована в системах документооборота кафедры и университета.

### Список литературы

1. Завражнова М.В., Родкина Э. А., Шошина А. В. Разработка базы данных и веб-интерфейса научной электронной библиотеки // «Colloquium-journal». – 2019, – № 19-1(43). С 31-34.
2. Бессогонова П.Э., Васецкий А.М. Создание хранилища информации для учебного расписания университета // Успехи в химии и химической технологии. – 2022. – Т. XXXVI. – № 11. С 14-17.
3. База данных ВИНТИ [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.viniti.ru/products/viniti-database/>. – Дата доступа: 28.04.2023.
4. PostgreSQL: The World's Most Advanced Open Source Relational Database [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.postgresql.org/about/press/presskit15/ru/> – Дата доступа: 28.04.2023.

УДК 004.925.8

Сулханов Я.Д., Цыганков П.Ю., Абрамов А.А.

## Разработка конструкции установки для реализации процесса 3D-печати с использованием гетерофазной системы

Сулханов Ян Дмитриевич – студент группы К-45, [yan.sulkhanov.dmi@gmail.com](mailto:yan.sulkhanov.dmi@gmail.com).

Цыганков Павел Юрьевич – к.т.н., доцент кафедры химического и фармацевтического инжиниринга; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Абрамов Андрей Александрович – аспирант, м.н.с. кафедры Химического и фармацевтического инжиниринга; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В настоящий момент актуальным и перспективным является разработка методов и технологий 3D-печати для расширения областей применения аддитивных технологий. Наиболее востребованным подходом является печать с использованием вязких материалов, которая позволяет получать новые материалы с заданным свойствами. В качестве перспективного подхода рассматривается технология прямой гелевой печати. Несмотря на это, данная технология имеет ряд ограничений, которые не позволяют получать изделия с нависающими частями. Для устранения данных недостатков может быть использована технология 3D-печати с использованием гетерофазной системы. Однако, не существует установок для реализации данной технологии. В статье рассматривается модификация конструкции 3D-принтера для реализации процесса 3D-печати с использованием гетерофазной системы.*

*Ключевые слова: 3D-печать с использованием гетерофазной системы, разработка конструкции.*

## Development of an installation design for implementing the 3D printing process using a heterophase system

Sulkhanov Y.D., Tsygankov P.Yu., Abramov A.A.

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

*At present, the development of methods and technologies for 3D printing to expand the application areas of additive manufacturing is both relevant and promising. Printing with viscous materials is the most sought-after approach, as it enables the production of new materials with specific properties. Among the prospective approaches, direct gel printing technology is considered. However, this technology has certain limitations that prevent the creation of overhanging parts. To overcome these limitations, 3D printing technology using a heterophase system can be employed. However, there are currently no existing setups to implement this technology. This article explores the modification of a 3D printer design to enable the implementation of the 3D printing process using a heterophase system.*

*Keywords: 3D printing using a heterophase system, design development.*

### Введение

3D-печать является революционной технологией, которая позволяет получать трехмерные объекты заданной формы. Данная технология, также известная как аддитивное производство, использует послойное нанесение материала для формирования геометрии конечного изделия, в отличие от традиционных методов производства, основанных на его удалении [1]. Одним из основных преимуществ 3D-печати является возможность формирования изделий любой формы и сложности, которые было бы невозможно достичь с использованием традиционных методов, таких как литье или фрезерование [2].

Однако, у существующих методов 3D-печати имеются свои ограничения. Одним из главных недостатков является ограниченный выбор материалов, который можно использовать для реализации процесса. В настоящее время основными материалами, используемыми в 3D-печати, являются термопластичные полимеры, светочувствительные смолы и порошки металлов. Расширение областей применения технологий 3D-печати в том числе для медицины, фармацевтики, гибкой электроники

возможно при использовании технологий 3D-печати вязкими «чернилами».

Наиболее распространенной технологией 3D-печати с использованием вязких «чернил» является прямая гелевая печать [3]. Реализация процесса трёхмерной печати с использованием данной технологии основывается на экструзии псевдопластичных, тиксотропных жидкостей на поверхность рабочей области с последующим гелеобразованием за счет различных физико-химических процессов. Благодаря правильно подобранному реологическим свойствам «чернил», отсутствует растекание материала по поверхности рабочей области до его отверждения. Однако, предъявляемые реологические требования усложняют процесс разработки требуемого состава «чернил», а также существенно ограничивают спектр используемых материалов. Помимо этого, процесс печати происходит в воздушной среде, из-за чего геометрия конечного изделия может быть нарушена за счет воздействия силы тяжести.

С целью устранения недостатков технологии прямой гелевой печати может быть рассмотрена технология 3D-печати с использованием

гетерофазной системы [4]. При реализации данного подхода процесс печати осуществляется в систему, заполненную микрочастицами. Использование гетерофазной системы позволяет снять ограничения по геометрии модели, что позволяет получать изделия с нависающими частями без необходимости поддерживающих конструкций. Кроме того, использование гетерофазной системы позволяет значительно снизить требования к реологическим характеристикам. Это позволяет реализовывать процесс 3D-печати с использованием «чернил» с внедренными компонентами, например, наноматериалами. Однако, в настоящий момент не существует конструкций устройств для реализации данной технологии, поэтому необходимо разработка новых установок для расширения областей применения аддитивных технологий.

В данной работе рассмотрен процесс разработки конструкции установки для реализации процесса 3D-печати с использованием гетерофазной системы. Представлены экспериментальные исследования процесса 3D-печати с использованием разработанной конструкции установки и материалов на основе альгината натрия.

#### Экспериментальная часть

В работе [5] была предложена конструкция установки для реализации процесса прямой гелевой печати. Однако, предложенный вариант исполнения установки не может быть использован при реализации разрабатываемой технологии. Это обусловлено наличием оптического датчика, который выступает в качестве концевого переключателя, неправильным расположением сопла экструдера и трудностью контроля подачи материалов с низкой вязкостью (от 0,8 Па·с) (рис. 1).

С целью устранения недостатков данного варианта расположения подвижных элементов установки в системе автоматизированного проектирования был разработан ряд моделей для

изменения ориентации каретки экструдера. Для увеличения точности позиционирования экструдированного устройства и увеличения точности подачи «чернил» с низкой вязкостью было принято решение повернуть плоскость каретки перпендикулярно рабочей платформе.

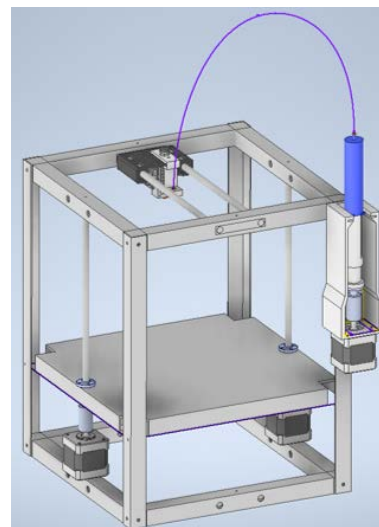


Рис. 1 Виртуальная модель конструкции установки для реализации процесса прямой гелевой печати [5]

Несмотря на симметричность расположения двух держателей, элемент разные по своей структуре. Модель включает в себя два элемента: основная часть, к которому прикрепляется шаговый двигатель, и ответная часть. Было разработано 3 варианта исполнения основной и ответной части держателя экструдера (рис.2)

В качестве продавливающего устройства был выбран экструдер вязких «чернил», предложенный в работе [5]. Разработанные конструкции держателя каретки экструдера, продавливающее устройство и шаговый двигатель были совмещены в одну сборку для оценки расположения элементов (рис. 3).

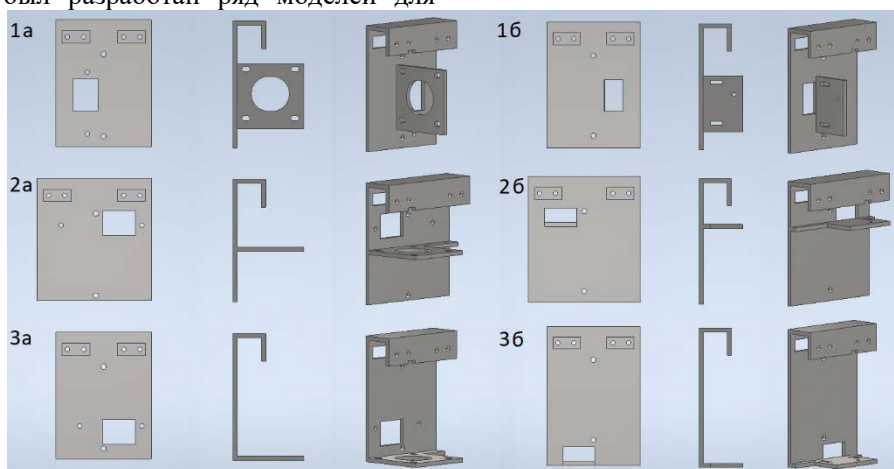


Рис.2 Варианты исполнения конструкции держателей каретки экструдера: а - основная часть; б - ответная часть

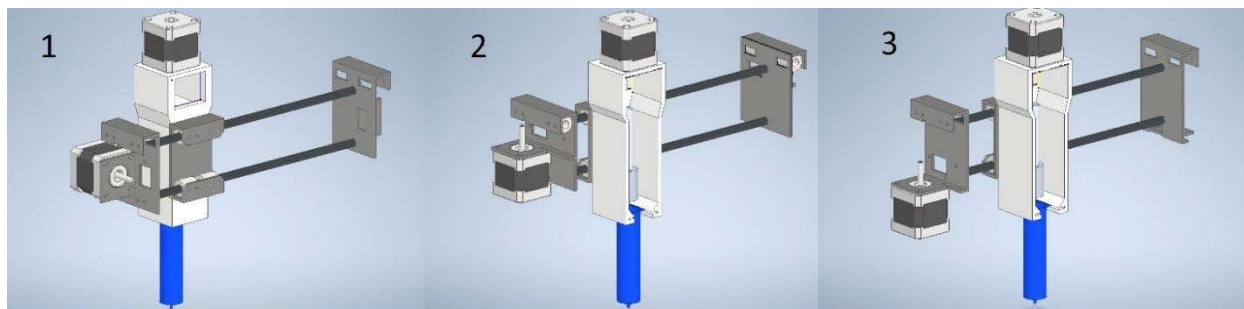


Рис. 3 Варианты исполнения конструктивных элементов и расположения шагового двигателя на них

Определяющим фактором при выборе варианта исполнения конструктивных элементов, обеспечивающих перемещение продавливающего устройства, является расположение шагового двигателя. При выборе ориентации шагового двигателя необходимо добиться отсутствия колебаний в процессе печати и снижения нагрузки на ремennую передачу при перемещении. При расположении шагового двигателя перпендикулярно валам, по которым происходит перемещение продавливающего устройства (вариант 1), возникают колебания из-за смещения центра тяжести. Это приводит к снижению качества конечного изделия. При расположении шагового двигателя в нижней части конструктивного элемента (вариант 3) наблюдаются высокие нагрузки на нижний вал и смещение соосности двух параллельных

направляющих, по которым происходит перемещение. Таким образом, наиболее предпочтительным вариантом исполнения конструктивных элементов и расположения шагового двигателя представлен в варианте 3.

Разработанные модели конструктивных элементов были напечатаны с использованием процесса жидкокристаллической стереолитографии (LCD). Были установлены следующие параметры проведения процесса печати: толщина слоя 100 мкм, количество базовых слоев 4, время отверждения базовых слоев 120 секунд, время отверждения основных слоев 12 секунд. Общее время печати 5 часов. Полученные конструктивные элементы были интегрированы в установку для проведения процесса 3D-печати (рис.4).

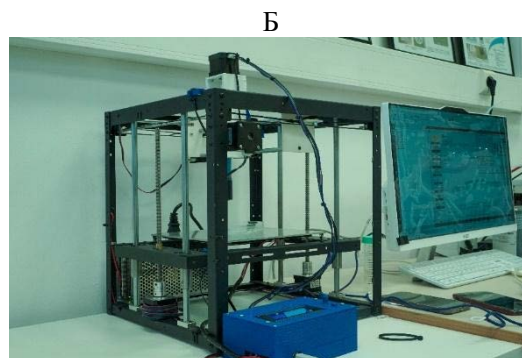
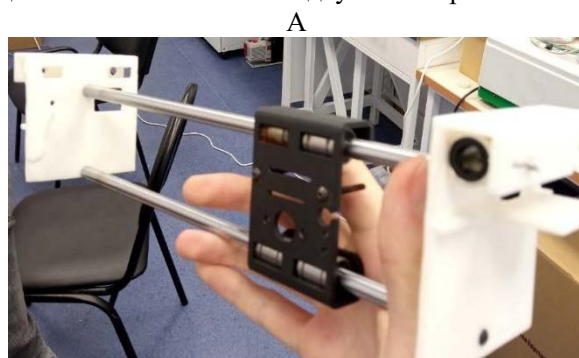


Рис.4 Разработанные конструктивные элементы (А), внешний вид установки для проведения процесса 3D-печати с использованием гетерофазной системы(Б)

Модернизированная установка трехмерной печати была использована для реализации процесса 3Dпечати с использованием гетерофазной системы (Рис.5).

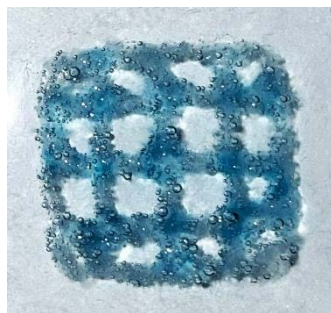


Рис.5 Результат процесса 3D-печати с использованием разработанной конструкции установки

В качестве «чернил» для реализации процесса использовался альгинат натрия с концентрацией 2 масс.%. Данный раствор обладает вязкостью 0,8 Па\*с и позволяет оценить эффективность процесса печати с использованием разработанной установки. В свою очередь в качестве гетерофазной системы была суспензия микрочастиц желатина. Реализация процесса трехмерно печати с использованием разработанной конструкции установки позволяет получать изделия с погрешностью 5%. Для снижения погрешности в процессе печати необходимо разработать новую экструзионную систему, обеспечивающую высокую степень дозирования материалов для реализации процесса печати.

#### Заключение

В данной работе предложен ряд моделей конструкции держателя экструдера для реализации



процесса 3D-печати с использованием гетерофазной системы. На основании проведенных экспериментальных исследований выбран вариант 3, который позволяет реализовать процесс печати с высокой точностью за счет отсутствия колебаний при перемещении экструдера. С использованием разработанной конструкции установки и материалов на основе альгината натрия проведена тестовая печать изделия. В качестве гетерофазной системы в данной работе была использована суспензия микрочастиц желатина. Полученные результаты свидетельствуют о возможности реализации процесса трехмерной печати с использованием гетерофазной системы с использованием разработанной установки.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РХТУ им. Д.И. Менделеева в рамках программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» № ВИГ\_2022\_006.*

#### Список литературы

1. Wong K. V., Hernandez A. A Review of Additive Manufacturing // ISRN Mechanical Engineering. Hindawi Limited, 2012. Vol. 2012. P. 1–10.
2. Li N. et al. Progress in additive manufacturing on new materials: A review // J Mater Sci Technol. Elsevier, 2019. Vol. 35, № 2. P. 242–269.
3. S R Saadi M.A. et al. Direct Ink Writing: A 3D Printing Technology for Diverse Materials // Advanced Materials. John Wiley & Sons, Ltd, 2022. Vol. 34, № 28. P. 2108855.
4. Shiwarski D.J. et al. Emergence of FRESH 3D printing as a platform for advanced tissue biofabrication // APL Bioeng. AIP Publishing LLC AIP Publishing , 2021. Vol. 5, № 1. P. 010904.
5. Цыганков П. Ю., Абрамов А. А., Меньшутина Н. В. 3D-печать гелевыми материалами с целью получения аэрогелей на основе альгината натрия // Химическая промышленность сегодня. 2020. № 6. P. 52–57.

УДК 004.94:66.087.4

Индейкина В.А., Шишканова К.И., Никитин Е.В., Гайдамавичюте В.В., Василенко В.А., Филиппова Е.Б., Бродский В.А., Колесников А.В., Кольцова Э.М.

### Трёхмерная визуализация процесса переработки опасных промышленных отходов

Индейкина Виктория Александровна – студент группы КС-44 кафедры информационных компьютерных технологий; viktoriaindeykina@gmail.com

Шишканова Ксения Игоревна – студент группы КС-44 кафедры информационных компьютерных технологий; Никитин Егор Владимирович – студент группы КС-44; egornikitin2222@gmail.com.

Гайдамавичюте Виктория Владо – студентка группы КС-44; mgaivik@yandex.ru.

Василенко Виолетта Анатольевна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий;

Филиппова Елена Борисовна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий;

Бродский Владимир Александрович – к.х.н., старший научный сотрудник кафедры технологии неорганических веществ и электрохимических процессов;

Колесников Артем Владимирович – к.т.н., доцент, исполняющий обязанности заведующего кафедрой технологии неорганических веществ и электрохимических процессов;

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

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*Работа посвящена анализу и созданию 3D-модели технологической схемы переработки кислотно-щелочных промышленных отходов I-II класса опасности. Изучены процессы очистки и спецификации соответствующего оборудования, спроектированы 3D-модели аппаратов, приборов и производственная линия в целом с помощью программного обеспечения для технологического проектирования AutoCAD Plant 3D компании Autodesk.*

*Ключевые слова: кислотно-щелочные отходы, утилизация, компьютерное проектирование, трёхмерное моделирование.*

#### **Three-dimensional visualization of the process of processing hazardous industrial waste**

Indykina V.A., Shishkanova K.I., Nikitin E.V., Gaydamavichute V.V., Vasilenko V.A., Filippova E.B., Brodsky V.A., Kolesnikov A.V., Koltsova E.M.

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

*The work is devoted to the analysis and creation of a 3D model of the technological scheme for processing acid-base industrial waste of hazard class I-II. Cleaning processes and specifications of the corresponding equipment were studied, 3D models of apparatuses, devices and the production line as a whole were designed using Autodesk's AutoCAD Plant 3D.*

*Key words: analytical chemistry acid-base waste, recycling, computer design, three-dimensional modeling.*

Неотъемлемой частью любого производства являются остатки материалов и сырья, которые утратили начальные свойства. Такие материалы принято называть техногенными отходами. Эти отходы содержат токсичные вещества, повышенные концентрации которых в организме человека могут вызвать серьезные проблемы со здоровьем и принести непоправимый урон окружающей среде. Анализ показал необходимость переработки следующих жидких отходов: отработанные кислоты; остатки щелочных реагентов; растворимые соединения шестивалентного хрома, обладающие аллергическим, мутагенным и канцерогенным действиями; цианосодержащие сточные воды с высокой токсичностью вследствие наличия свободного циана, синильной кислоты и цианистых комплексов металлов. Данные отходы являются близкими к тем, которые образуются в гальванических производствах и в производствах неорганических материалов [1]. Жидкие кислотно-щелочные отходы – наиболее распространённый тип отходов предприятий машиностроительной и металлообрабатывающих

отраслей промышленности.

Наиболее часто используемые методы – методы очистки, совмещающие реагентные, электрохимические, мембранные и сорбционные методы [2]. Электрохимические технологии считаются более компактными, результативными и соизмеримы по стоимости с другими технологиями. В определенных случаях электрохимические технологии могут быть незаменимы в очистке отходов. Одним из наиболее актуальных и перспективных методов электрохимической очистки сточных вод является электрофлотация [3].

Для решения задачи обезвреживания отходов I-II класса опасности специалистами Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева разработана технологическая линия по нейтрализации кислотно-щелочных отходов, работа которой основывается на реагентном методе очистки. Для проектирования данной технологической линии были внедрены установки по извлечению ионов металлов, нефтепродуктов, масел и ПАВ из водных растворов [4]. Установки представляют собой

комплекс основного и вспомогательного оборудования.

Предложенная технологическая схема включает три основные стадии: две стадии реагентной обработки I и II и стадию доочистки III.

Данная работа является частью проекта по разработке цифрового двойника технологического процесса утилизации кислотно-щелочных отходов, его первый этап, включающий в себя анализ и создание 3D модели технологических линий по переработке кислотно-щелочных отходов. При разработке цифрового двойника можно придерживаться следующих этапов:

- 1) разработка концепции и технологии производства;
- 2) выбор оборудования;
- 3) двумерное проектирование технологических линий;
- 4) разработка трёхмерных моделей технологических линий;
- 5) разработка компьютерных моделей технологических схем;
- 6) оптимизация этих схем, разработка автоматизированной системы управления технологическим процессом (АСУТП);
- 7) перенос трёхмерных моделей технологических линий в виртуальное пространство;
- 8) разработка программного обеспечения, связывающего все модули в единую систему.

Для выполнения данной задачи был использован программный пакет AutoCAD Plant 3D. Выбор данного программного обеспечения обусловлен следующими преимуществами:

- 1) содержится библиотека стандартного оборудования;
- 2) трассировка трубопроводов производится в полуавтоматическом или ручном режиме;
- 3) использование готовых файлов DWG, которые были созданы в других продуктах;
- 4) возможность использования внешних ссылок на чертежи конструкций.

Создание трёхмерной модели технологической линии включало несколько этапов:

- 1) создание сетки, фундамента и металлоконструкции (площадки обслуживания, лестницы, ограждения);
- 2) моделирование оборудования, как с использованием параметрических шаблонов, стандартной библиотеки, так и созданием нового пользовательского в других cad приложениях, с последующим экспортом в проект AutoCAD Plant 3D;
- 3) построение трубопроводных обвязок;
- 4) расстановка насосов, вентиля и контрольно-измерительных приборов.

В первую очередь была создана сетка с геометрическими размерами моделируемого объекта с указанием уровня высот (рис. 1).

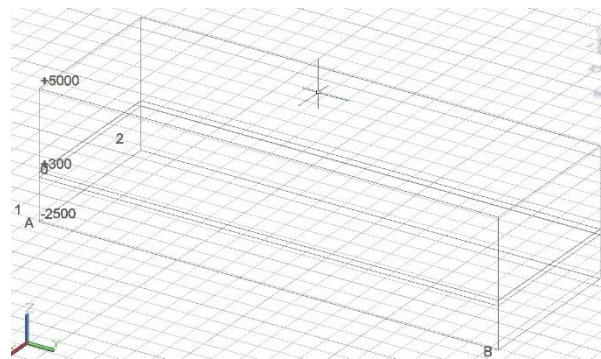


Рис. 1. Сетка.

Далее на сетке конструируется фундамент и металлоконструкция, являющаяся площадкой обслуживания. Для начала был спроектирован пешеходный настил, балки и фундамент для поддержания платформы (рис. 2).

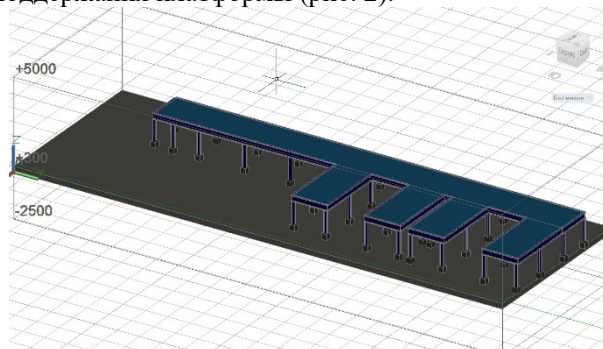


Рис. 2. Фундамент и металлоконструкция.

Затем были спроектированы лестница для подъема на платформу с целью обслуживания оборудования и перила по периметру платформы (рис. 3).

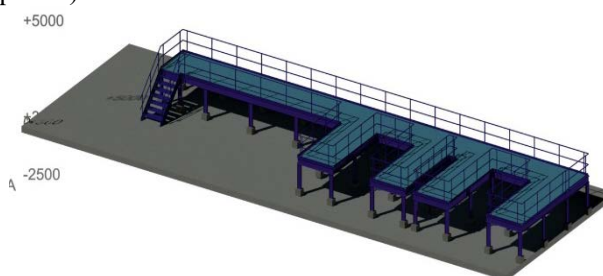


Рис. 3. Лестница и перила.

Так же были сконструированы следующие виды оборудования: 1) емкость; 2) реактор; 3) декантерная центрифуга; 4) контейнер саморазгружающийся; 5) электрофлотатор; 6) вытяжной зонт; 7) фильтрационная колонна; 8) фильтр-пресс. Общее количество аппаратов составило 24 единицы.

Одним из видов оборудования является вертикальный реактор с коническим днищем, который изображен на рис. 4. Для начала был спроектирован корпус, представляющий собой соединенные цилиндр и конус. Далее была создана крышка, на которой располагаются двигатель и штуцеры. И наконец, были построены опоры под реактор. Аппарат был спроектирован в соответствии с заданной спецификацией и с заданными размерами.

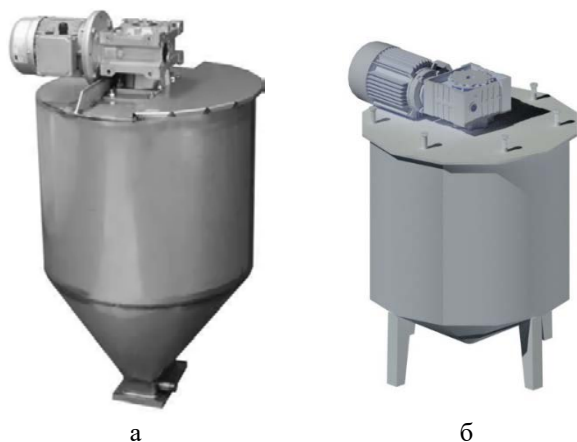


Рис. 4. Реактор с коническим днищем: а – промышленный аналог, б – смоделированный объект. Остальные аппараты были построены аналогичным образом.

Далее всё сконструированное ранее оборудование было расставлено на площадке обслуживания согласно разработанной ранее конструкторской документации (рис. 5).

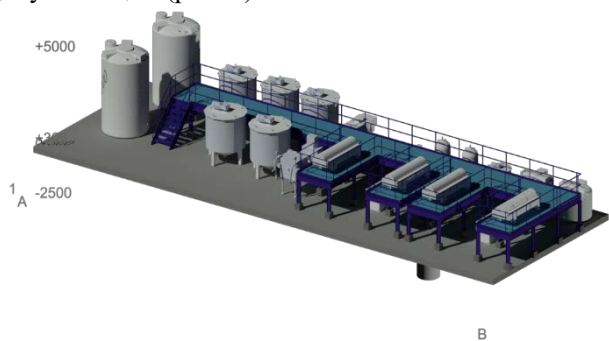


Рис. 5. Расставленные аппараты на площадке обслуживания.

Следующим этапом стала трассировка труб. Цвет труб зависит от потока, который идет в данной трубе. Желтым цветом обозначен флокулянт, темно-синим – едкий натр, коричневым – серная кислота, зеленым – коагулянт, голубым – оборотная вода, синим – щелочные растворы, красным – кислые растворы (рис. 6). А после в соответствии с заданным расположением были добавлены насосы и вентили.

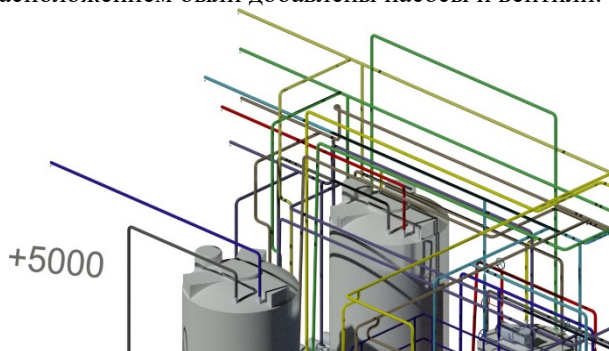


Рис. 6. Трассировка труб линии переработки кислотно-щелочных отходов.

Также на технологической схеме были установлены контрольно-измерительные приборы, которые включают в себя расходомеры и уровнемеры. На рис. 7 представлен пример одного из приборов – расходомера, предназначенного для

регулирования расхода жидкости, которая подается при помощи насосов из емкостей в реакторы.

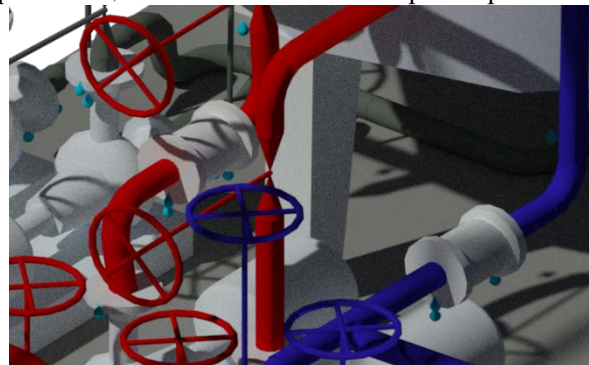


Рис. 7. Контрольно-измерительные приборы.

Итоговая спроектированная трёхмерная модель всей технологической линии переработки кислотно-щелочных отходов изображена на рис. 8.

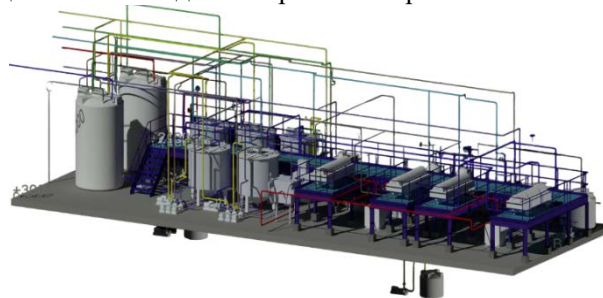


Рис. 8. 3D-модель технологической линии переработки кислотно-щелочных отходов.

В результате выполнения всех этапов проектирования была создана трёхмерная модель, визуализирующая производственную линию переработки кислотно-щелочных отходов, в соответствии с технологией, разработанной в РХТУ им. Д.И. Менделеева. После завершения всех остальных этапов разработки цифрового двойника данная трёхмерная модель, как отдельный его модуль, будет инсталлирована на платформу Unity с целью представления технологической схемы по переработке кислотно-щелочных отходов в виртуальной реальности.

#### Список литературы

1. Бродский В.А., Колесников А.В., Малькова Ю.О., Кисиленко П.Н., Перфильева А.В. Технологические решения и опыт промышленной переработки жидких кислотно-щелочных отходов // Теоретическая и прикладная экология. 2021. № 4. С. 34 – 42.
2. Chen G., Hung Y.T. Electrochemical wastewater treatment processes // Handbook of Environmental Engineering. 2007. V. 5. P. 27–33.
3. Mohtashami R., Shang J.Q. Electroflotation for treatment of industrial wastewaters: A focused review // Environmental Processes. V. 6. Springer Nature, Switzerland, 2019. P. 325–353.
4. Бродский В.А., Сахаров Д.А., Колесников А.В., Ашихмина Т.Я., Иванов К.Н. Проблемы обезвреживания и утилизации высокотоксичных техногенных промышленных отходов, их переработка с получением ценных компонентов // Теоретическая и прикладная экология. 2022. № 4. С. 88-95.

УДК 004.94:66.087.4

Шишканова К.И., Индейкина В.А., Гайдамовичюте В.В., Никитин Е.В., Василенко В.А., Филиппова Е.Б., Бродский В.А., Колесников А.В., Кольцова Э.М.

### Компьютерное моделирование утилизации кислотно-щелочных отходов I-II класса опасности

Шишканова Ксения Игоревна – студентка группы КС-44 кафедры информационных компьютерных технологий; ksenia52296sh@mail.ru.

Индейкина Виктория Александровна – студентка группы КС-44 кафедры информационных компьютерных технологий; viktoriaindeykina@gmail.com.

Гайдамовичюте Виктория Владо – студентка группы КС-44; mgaivik@yandex.ru.

Никитин Егор Владимирович – студент группы КС-44; egornikitin2222@gmail.com.

Василенко Виолетта Анатольевна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий; vasilenko.v.an@muctr.ru.

Филиппова Елена Борисовна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий; silvaf@mail.ru.

Бродский Владимир Александрович – к.х.н., старший научный сотрудник кафедры технологии неорганических веществ и электрохимических процессов;

Колесников Артем Владимирович – к.т.н., доцент, исполняющий обязанности заведующего кафедрой технологии неорганических веществ и электрохимических процессов;

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

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*Работа посвящена анализу и созданию компьютерной модели технологической схемы линии переработки кислотно-щелочных промышленных отходов I-II класса опасности. Изучены технологии очистки, смоделирован процесс утилизации отходов в статическом режиме с помощью программного обеспечения для компьютерного моделирования Aspen Hysys компании AspenTech.*

*Ключевые слова: кислотно-щелочные отходы, утилизация, компьютерное моделирование, электрофлотация.*

### Computer simulation of acid-base waste disposal of hazard class I-II

Shishkanova K.I., Indykina V.A., Gaydamavichute V.V., Nikitin E.V., Vasilenko V.A., Filippova E.B., Brodsky V.A., Kolesnikov A.V., Koltsova E.M.

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

*The work is devoted to the analysis and creation of a computer model of the technological scheme of the processing line of acid-base industrial waste of hazard class I-II. The cleaning processes were studied the process of waste disposal in static mode was modeled using Aspen Hysys computer modeling software from AspenTech.*

*Key words: analytical chemistry acid-base waste, recycling, computer modeling, electroflotation.*

Любое производство так или иначе сопровождается появлением техногенных отходов. Техногенные отходы – это материалы и сырье, которые утратили начальные свойства. Они содержат токсичные вещества, повышенные концентрации которых в организме человека, могут вызвать серьезные проблемы со здоровьем и нанести непоправимый урон окружающей среде. Анализ показал необходимость переработки таких жидких отходов, как отработанные кислоты (серная, соляная, азотная, фосфорная), остатки щелочных реагентов (гидроксидов калия и натрия). Данные отходы являются близкими к тем, которые образуются в гальванических производствах и в производствах неорганических материалов [1].

Жидкие кислотно-щелочные отходы – это самый распространённый тип отходов предприятий машиностроительной и металлообрабатывающих отраслей промышленности. В кислой части отходов в основном содержатся серная и соляная кислоты, с

наиболее высоким содержанием серной кислоты. В составе щелочной части преобладает содержание гидроксида натрия [1].

Наиболее известными методами очистки являются методы, которые совмещают реагентные, электрохимические, мембранные и сорбционные методы [2]. Одним из наиболее современных методов электрохимической очистки отходов является электрофлотация [3]. Электрофлотация – это процесс очистки сточных вод, при котором отделяются взвешенные частицы от воды с использованием пузырьков газа, образующихся в процессе электролиза воды. Для проведения процесса электрофлотации используется электрофлотомембранное устройство, которое представляет собой корпус, разделенный на секции предварительной электрообработки в виде анодной и катодной камер диафрагменного электролизера и электрофлотационной очистки, отличающееся тем, что устройство снабжено катионообменной

мембраной, расположенной в анодной камере диафрагменного электролизера между анодом и анионообменной мембраной и образующей камеру концентрирования со стороны анионообменной мембраны[4].

Для решения задачи очистки отработанных кислотно-щелочных технологических растворов и сточных вод от загрязнений неорганической и органической природы специалистами Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева разработаны технологические решения, внедрены установки по извлечению ионов металлов, нефтепродуктов, масел и ПАВ из водных растворов [5].

Технологическая линия очистки кислотно-щелочных отходов была смоделирована в программе Aspen Hysys. Компьютерное моделирование технологической схемы процесса утилизации включало в себя несколько этапов:

- 1) создание базы данных компонентов и набора реакций;
- 2) моделирование линии подготовки технологической схемы;
- 3) составление материального и теплового балансов технологической схемы;
- 4) моделирование линии утилизации кислотно-щелочных отходов.

В первую очередь была создана база данных компонентов, которые участвуют в процессе переработки кислотно-щелочных отходов, в которую вошли как уже имеющиеся в программе компоненты, так и созданные вручную гипотетические компоненты. Некоторые из этих компонентов задавались в виде твердых веществ. Для создания гипотетических компонентов также потребовалось найти такие свойства веществ, как молекулярная масса и плотность вещества, а далее ввести их в базу данных компонентов.

Следующим этапом было создание пакета реакций, который включает в себя реакции, протекающие в аппаратах в ходе переработки кислотно-щелочных отходов. Все реакции задавались в программе как конверсионные.

Далее была смоделирована линия подготовки реагентов, которые будут участвовать в дальнейшем процессе. К ним относятся: гексагидрат железа, 30% раствор серной кислоты, 30% раствор гидроксида натрия и раствор флокулянта «Superfloc» (-CH<sub>2</sub>-CH-CO-NH<sub>2</sub>-), представляющий собой технический продукт, состоящий из смеси полиакриламида с сульфатом аммония.

Данная технологическая схема предназначена для очистки кислых и щелочных отходов. Кислые отходы состоят из ионов: Fe<sup>3+</sup> (эти ионы образуются при диссоциации хлорида железа, FeCl<sub>3</sub>), Cu<sup>2+</sup> (образуются при диссоциации сульфата меди, CuSO<sub>4</sub>), Ni<sup>2+</sup> (образуются при диссоциации сульфата никеля, NiSO<sub>4</sub>), H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O, щелочные отходы – NaAlO<sub>2</sub>, Na<sub>2</sub>ZnO<sub>2</sub>, NaOH, H<sub>2</sub>O.

Линия утилизации кислотно-щелочных отходов содержит шесть реакторов P1–P6. Для них были

заданы объемы и заранее созданные соответствующие пакеты реакций. Также по данным материальных балансов для каждого из реакторов был рассчитан тепловой баланс по закону Гесса с учетом тепловых эффектов химических реакций. Это позволило установить для каждого реактора тепловую нагрузку, изменяющую температуру раствора в нем. Для регулирования температуры продуктов на выходе из оборудования были установлены теплообменники. Пример одного из смоделированных реакторов представлен на рис. 1.

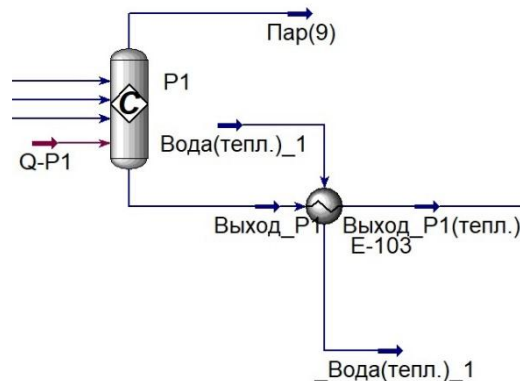


Рис. 1. Реактор P1.

Также были смоделированы декантерные центрифуги D1–D4, которые используются для отделения твердых частиц от жидкой фазы. Так как в кассе объектов отсутствуют декантерные центрифуги, была произведена работа по подбору наиболее эффективной системы из имеющихся моделей технологического оборудования для воспроизведения процесса отделения осадка. Самой подходящей оказалась система, состоящая из одиночного сепаратора твердой фазы и двух разделителей компонентов (рис. 2). Далее в одиночном сепараторе были заданы разделенные фракции, которые представлены на рис. 3.

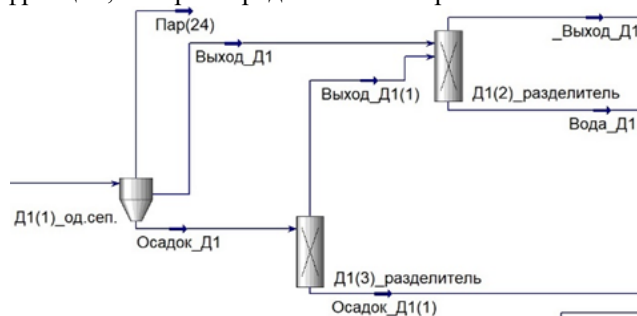


Рис. 2. Система, имитирующая декантерную центрифугу.

Разделенные фракции	
Из твердой фазы в парео	0,0000
Из твердой фазы в жидку	0,0000
Из твердой фазы в кубовы	1,0000
Из жидкой фазы в кубовы	0,0000

Рис. 3. Настройка разделения фракции в одиночном сепараторе.

Следующим этапом стало моделирование электрофлотатора для дальнейшей очистки потоков от дисперсных веществ. Ввиду отсутствия электрофлотатора в программе Aspen Hysys был создан его аналог, в котором происходит идентичный процесс. Он состоит из конверсионного реактора, одиночного сепаратора твердой фазы и разделителя компонентов (рис. 4).

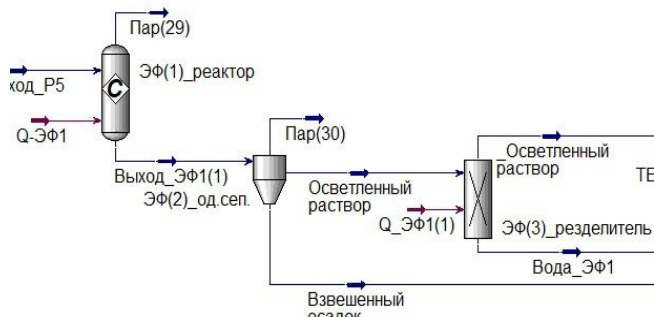
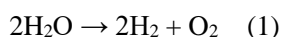


Рис. 4. Аналог для описания электрофлотационного процесса.

В реакторе была задана реакция электролиза воды (1):



Для отделения воды от взвешенного осадка, образовавшегося в результате электрофлотационного процесса, был установлен фильтр-пресс. Данный аппарат также отсутствует в базе объектов, поэтому он был заменён на одиночный сепаратор твердой фазы (рис. 5).

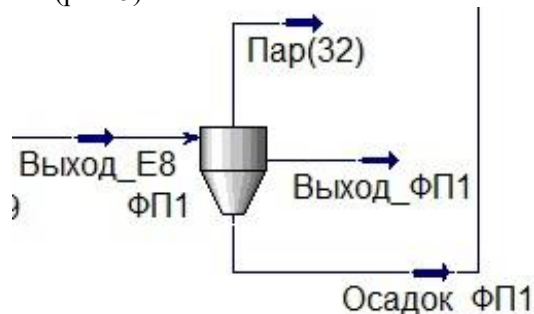


Рис. 5. Замена фильтр-пресса.

Результатом работы стали компьютерная модель линии переработки кислотно-щелочных отходов в статическом режиме при использовании программы Aspen Hysys. По окончании разработки и расчёта всей технологической схемы были получены выходные потоки, очищенные от компонентов, содержащих кислоты и щелочь. Данная термодинамическая модель была создана на основе материального и теплового балансов технологической схемы и соответствующего набора химических реакций. Созданная модель позволяет регулировать и оптимизировать технологический процесс очистки промышленных стоков и прогнозировать возможные аварийные – сбои в системе.

#### Список литературы

1. Бродский В.А., Колесников А.В., Ю. О. Малькова, Кисиленко П.Н., Перфильева А.В. Технологические решения и опыт промышленной переработки жидких кислотно-щелочных отходов // Теоретическая и прикладная экология. 2021. № 4. С. 34 – 42.
2. Chen G., Hung Y.T. Electrochemical wastewater treatment processes // Handbook of Environmental Engineering. 2007. V. 5. P. 27–33.
3. Mohtashami R., Shang J.Q. Electroflotation for treatment of industrial wastewaters: A focused review // Environmental Processes. V. 6. Springer Nature, Switzerland, 2019. P. 325–353.
4. Ильин В.И., Бродский В.А. Электрофлотомембранное устройство // Патент RU 136035 U1. Дата публикации: 27.12.2013.
5. Бродский В.А., Сахаров Д.А., Колесников А.В., Ашихмина Т.Я., Иванов К.Н. Проблемы обезвреживания и утилизации высокотоксичных техногенных промышленных отходов, их переработка с получением ценных компонентов // Теоретическая и прикладная экология. 2022. № 4. С. 88-95.

УДК 004.94: 661.124: 681.518

Гакиев А.Л., Алешин М.А., Василенко В.А.

## **Интерактивная виртуальная химическая лаборатория: интеграция объектов, разработка 3D-моделей**

Гакиев Артур Лечиевич – студент группы КС-46; gakiev.artur1337@gmail.com

Алешин Михаил Алексеевич – студент группы КС-46; alyoshinmihail@gmail.com

Василенко Виолетта Анатольевна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий; vasilenko.v.an@muctr.ru

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*Данная статья посвящена разработке виртуального пространства для цифрового двойника химической лаборатории. С помощью для программного обеспечения Blender создана трехмерная модель химического изоляционного шкафа. Проведена её интеграции в виртуальном пространстве, разрабатываемом в среде Unreal Engine 5.*

*Ключевые слова: цифровой двойник, виртуальное пространство, химическая лаборатория, специализированное оборудование, 3D-модель*

### **Interactive Virtual Chemical Laboratory: Object Integration and 3D Model Development**

Gakiev A.L., Alyoshin M.A., Vasilenko V.A.

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

*Given work is devoted to the development of a virtual space for a digital twin of a chemical laboratory. With the help of the Blender software, a three-dimensional model of a chemical fume hood was created. Its integration in the virtual space developed in the Unreal Engine 5 environment was carried out.*

*Key words: digital twin, virtual space, chemical laboratory, specialized equipment, 3D model*

#### **Введение**

В последние годы наблюдается стремительное развитие виртуальной реальности (VR) и ее применения в различных областях. Одной из таких областей является химия, где интерактивная виртуальная химическая лаборатория стала неотъемлемой частью образования и исследований [1].

На кафедре информационных компьютерных технологий РХТУ им. Д.И. Менделеева с 2011 года ведутся работы по разработке виртуальных лабораторий [2-3].

Технология виртуальной и дополненной реальности позволяет интегрировать объекты и разрабатывать трехмерные модели, предоставляя пользователям уникальную возможность взаимодействия с химическими процессами и веществами в виртуальной среде.

Одним из ключевых элементов виртуальной химической лаборатории является химический изоляционный шкаф. Это оборудование используется для защиты операторов лаборатории и окружающей среды от опасных химических веществ, которые могут испаряться при проведении экспериментов.

Разработка 3D-модели химического изоляционного шкафа является важным шагом в создании полноценной виртуальной химической лаборатории. Модель должна быть реалистичной и точно отражать функциональность изоляционного шкафа, включая его конструкцию, размеры, материалы и технологии, используемые для очистки воздуха.

Ключевым фактором в создании 3D-модели является интеграция объектов. Это означает, что модель должна быть разработана с учетом всех объектов, которые будут использоваться в химических экспериментах, включая химические реагенты, лабораторное стекло, приборы и инструменты. Все объекты должны быть представлены в формате 3D-модели, чтобы пользователи могли взаимодействовать с ними в виртуальной среде.

Интеграция объектов в 3D-модель химического изоляционного шкафа позволяет обучающимся проводить различные действия, имитирующие реальные. Например, можно открывать и закрывать дверцу шкафа, регулировать вентиляцию, размещать и перемещать химические реагенты и приборы внутри шкафа, а также наблюдать за химическими реакциями, происходящими внутри.

Одним из ключевых преимуществ виртуальной химической лаборатории с 3D-моделью изоляционного шкафа является возможность проведения виртуальных экспериментов без риска контаминации или опасности для здоровья обучающихся. Это особенно полезно для начинающих химиков, которые могут получить ценный опыт и знания, избегая возможных ошибок или аварийных ситуаций, которые могут возникнуть в реальной лаборатории.

Кроме того, виртуальная химическая лаборатория с 3D-моделью изоляционного шкафа (рис. 1) позволяет студентам углубить свои знания и навыки в области химии. Они могут экспериментировать с



различными сочетаниями химических реагентов, изменять условия эксперимента и наблюдать за результатами. Такой интерактивный подход способствует более глубокому пониманию химических процессов и позволяет студентам исследовать различные аспекты химии в контролируемой среде.

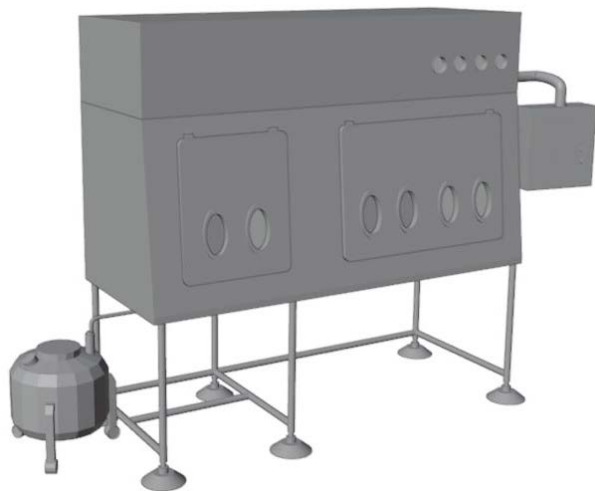


Рис 1. 3D-модель химического изоляционного шкафа

### Экспериментальная часть

Разработка 3D-модели химического изоляционного шкафа в Blender включает несколько шагов:

1) планирование и исследование: вначале проводится исследование и сбор информации о химических изоляционных шкафах, их размерах, форме и основных характеристиках. Затем определяются основные требования к модели;

2) создание геометрии: в программном обеспечении Blender создается основная геометрия модели. Этапы построения могут включать в себя создание прямоугольной коробки, которая будет представлять основу шкафа, а также полку и других внутренних деталей

3) детализация и текстурирование: после создания основной геометрии модели проводится детализация, добавление дверцей, стекол, ручек и других элементов шкафа.

Затем применяются текстуры и материалы для создания реалистичного внешнего вида. Это может включать в себя добавление текстур дерева, металла или пластика, а также настройку отражений и прозрачности.

После завершения процесса моделирования изоляционного шкафа в программе Blender, необходимо экспортировать полученную 3D-модель в используемую для разработки виртуального пространства среду - Unreal Engine. Перед экспортом модели важно осуществить проверку на наличие вывернутых граней и поверхностей [4], которые могут вызвать искажения и некорректное отображение модели в Unreal Engine. Вывернутые грани необходимо правильно ориентировать, чтобы избежать возможных проблем при визуализации и

использовании модели пользователем. При корректном импорте, цвет модели - синий. При некорректном - проблемные участки окрашиваются красным.

Далее следует экспорт модели в файл формата \*.fbx. FBX (FilmBox) является популярным форматом файлов, используемым в области трехмерной графики и визуализации. Разработанный компанией Autodesk, FBX представляет собой универсальный формат, который позволяет обмениваться данными между различными программами и платформами.

FBX обладает широким спектром возможностей и предназначен для сохранения, импорта и экспорта трехмерных моделей, анимации, текстур, камер, освещения и других элементов сцены. Он поддерживает различные типы геометрии, включая полигональные сетки, B-сплайны (NURBS), патчи и скелетную анимацию. Благодаря этому FBX стал одним из наиболее распространенных форматов в индустрии компьютерной графики.

Важным аспектом формата FBX является его расширяемость. FBX поддерживает пользовательские атрибуты и метаданные, что позволяет разработчикам добавлять собственные данные и функциональность к файлам FBX. Это открывает дополнительные возможности для интеграции формата в собственные процессы и рабочие потоки.

При импорте модели в Unreal Engine важно учесть различные настройки импорта модели (рис. 2). Одной из настроек, на которую стоит обратить внимание, является опция "Combine Meshes", которая позволяет объединить все компоненты 3D модели в один монолитный объект. Это полезно, поскольку позволяет перемещать и работать с моделью в целом вместо того, чтобы оперировать с отдельными элементами модели.

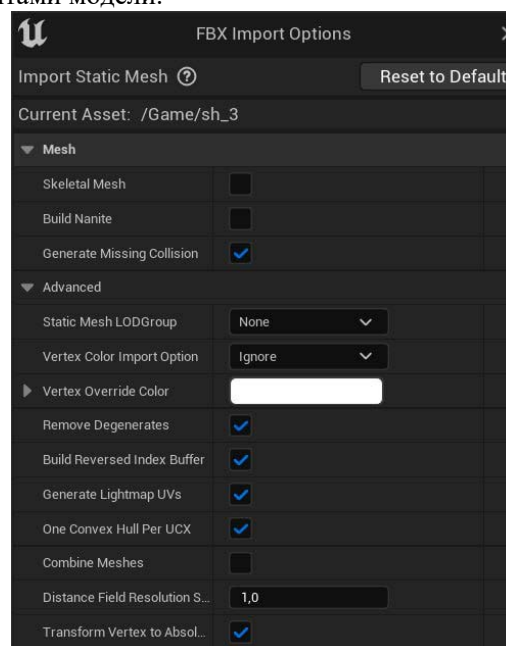


Рис. 2 Настройки импорта FBX модели

Для визуализации и организации последовательности операций импорта 3D-модели в программу разработки, часто используется блок-

схема (рис. 3). Блок-схема представляет собой графическое представление шагов, необходимых для успешного импорта модели.

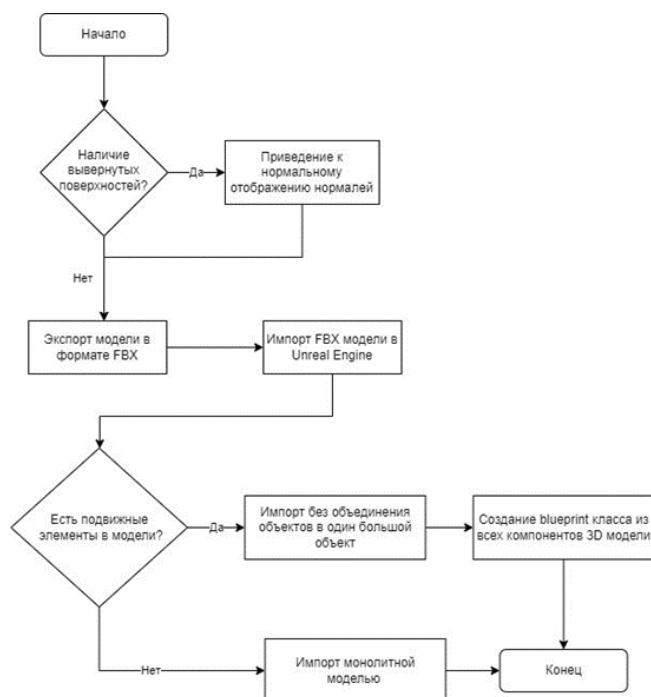


Рис. 3 Блок-схема импортирования 3D-модели в Unreal Engine 5

### Заключение

Разработка 3D-модели химического изоляционного шкафа позволяет усилить меры безопасности и предотвратить возможные аварии или отравления при работе с химическими веществами.

Пользователи могут осуществлять виртуальное открытие и закрытие шкафа, правильно хранить химические реагенты, применять необходимые меры предосторожности и обучаться основам лабораторной безопасности.

Интерактивная виртуальная химическая лаборатория является инновационным инструментом, который способствует более эффективному и интересному обучению химии, позволяет расширить доступность образования и повысить уровень безопасности при проведении химических экспериментов. Такой подход открывает новые возможности для исследований и развития в области химии и является важным шагом в прогрессе науки и образования.

### Список литературы

1. Virtual laboratories in (bio)chemical engineering education // Education for Chemical Engineers. Т. 10. 2010. №. 22, с. e22-e27.
2. Егоркина А.А., Васецкий А.М., Филиппова Е.Б. Разработка динамических элементов виртуального лабораторного практикума// Успехи в химии и химической технологии. Т. 33. 2019. № 11, с. 32-34.
3. Лобанов А.В., Филиппова Е.Б. Разработка виртуального пространства для цифрового двойника производства метанола// Успехи в химии и химической технологии. Т. 34. 2020. № 6. С. 127-129
4. Blender 3.5 Reference Manual [Электронный ресурс] // Normals — URL: <https://docs.blender.org/manual/en/latest/modeling/meshes/editing/mesh/normals.html> (дата обращения 16.05.2023)

УДК 004.94: 661.124: 681.518

Шишов Н.О., Василенко В.А.

### Разработка 3D-моделей вспомогательного оборудования для виртуальной лаборатории

Шишов Никита Олегович – бакалавр 4 курса кафедры информационных компьютерных технологий  
Василенко Виолетта Анатольевна – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий  
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,  
Россия, Москва, 125047, Миусская пл., д. 9.

*Данная работа является составной частью проекта по созданию цифрового двойника химической лаборатории. С помощью профессионального свободного и открытого программного обеспечения для создания трёхмерной компьютерной графики Blender создана 3D-модель лабораторного помещения, включающая множество 3D-моделей специализированного вспомогательного оборудования (шейкер инкубатор, лабораторная посуда, мебель).*

*Ключевые слова: цифровой двойник, виртуальная химическая лаборатория, специализированное оборудование, 3D-модель, трёхмерная графика*

### Development of 3d Models of Auxiliary Equipment for Virtual Laboratory

Shishov N.O., Vasilenko V.A.

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

*This work is an integral part of the project on creation of a digital twin of a chemical laboratory. 3D model of a laboratory, including a set of 3D models of specialized auxiliary equipment (shaker-incubator, laboratory glassware, furniture) were created with the help of professional free and open source software for creating three-dimensional computer graphics Blender.*

*Keywords: digital twin, virtual chemical laboratory, specialized equipment, 3D model, 3D graphics*

#### Введение

В настоящее время практические реализации цифровых двойников все чаще используются в самых разных областях, включая, образование, строительство, здравоохранение, промышленное производство, судостроение, автомобилестроение, аэрокосмическая промышленность, в энергетическом секторе и т.д.

Трёхмерное моделирование является одним из первых этапов для создания цифровых двойников. Оно позволяет создавать точные и реалистичные модели различных объектов и систем. Это может быть полезно во многих областях, включая:

1. проектирование и производство: 3D моделирование позволяет создавать точные модели оборудования, машин и других объектов, что помогает ускорить процесс проектирования и снизить количество ошибок в производстве;
2. архитектура и строительство;
3. медицина, в том числе судебная [1];
4. игровая индустрия: 3D моделирование используется для создания реалистичных персонажей, мира и объектов в компьютерных играх.
5. образование: 3D моделирование может быть использовано в образовании для создания интерактивных учебных материалов и визуализации сложных концепций.

В целом, 3D моделирование имеет огромный потенциал во многих областях и может помочь ускорить процессы проектирования, улучшить качество продукции и улучшить понимание сложных концепций [2].

3D моделирование оборудования в химии также имеет большую актуальность, так как позволяет

проектировать и оптимизировать химические процессы и установки. С помощью 3D моделирования можно создавать виртуальные прототипы оборудования, проводить тестирование и анализировать его работу в различных условиях. Это позволяет сократить время и затраты на разработку и производство оборудования, а также повысить его эффективность и безопасность. Кроме того, 3D моделирование позволяет визуализировать и анализировать сложные процессы, которые невозможно наблюдать невооруженным глазом, что помогает улучшить понимание и оптимизировать работу химических установок.

Одним из перспективных примеров решения этой задачи является создание виртуальной химической лаборатории. Она имеет ряд преимуществ:

1. безопасность: виртуальная лаборатория позволяет изучать опасные химические реакции без риска для здоровья и жизни;
2. экономия времени и ресурсов: виртуальная лаборатория позволяет экономить время и ресурсы, которые могут быть затрачены на подготовку и проведение реальных экспериментов;
3. Доступность: виртуальная лаборатория доступна в любое время и из любого места, где есть доступ в Интернет;
4. удобство: виртуальная лаборатория позволяет изучать химические реакции в удобной форме, без необходимости перемещаться в реальную лабораторию;
5. возможность повторения: виртуальная лаборатория позволяет повторять эксперименты неограниченное количество раз, что позволяет лучше

понять процессы, происходящие в химических реакциях.

6. Возможность обучения студентов: виртуальная лаборатория позволяет студентам проходить обучение или стажировку без каких-либо трудностей, а главное эта возможность включает в себя пункт безопасности [3].

### Экспериментальная часть

В настоящее время проводятся работы по созданию цифрового двойника химической лаборатории. Цифровое дублирование является важной и новой тенденцией во многих приложениях. Согласно международным стандартам цифровая модель изделия – это системы математических и компьютерных моделей, а также электронных документов изделия, описывающая структуру, функциональность и поведение вновь разрабатываемого или эксплуатируемого изделия на различных стадиях жизненного цикла. Системой компьютерной поддержки было выбрано программное обеспечение Blender и Unreal Engine (UE5). Blender включает в себя в себя средства моделирования, скульптинга, анимации, симуляции, рендеринга, постобработки и монтажа видео со звуком, компоновки с помощью «узлов» (Node Compositing), а также создания 2D-анимаций. В настоящее время пользуется большой популярностью среди бесплатных 3D-редакторов в связи с его быстрым стабильным развитием и технической поддержкой [4].

Первоначальной задачей было создание 3D-модели шейкера инкубатора (рис. 1). Это биохимический прибор с регулируемой температурой, совмещающий функцию инкубации и перемешивания, широко используемый при работах с клетками, ферментации, гибридизации, биохимии; исследованиях ферментов и клеточных тканей и т. д. Данное устройство совмещает в себе два прибора: инкубатор и шейкер. Обладает компактным дизайном, низким уровнем шума, имеет простой и удобный сенсорный светодиодный дисплей для отображения скорости, температуры и таймер. Крышка открывается под широким углом, что обеспечивает удобство при работе с исследуемыми образцами. При открытии крышки циркуляция воздуха, нагрев и перемешивание автоматически прекращаются. Скорость вращения циркуляционного вентилятора можно регулировать для избежания высокой скорости вращения циркуляционного вентилятора, вызывающего улечивание образца. Уникальная схема управления скоростью обеспечивает плавный запуск шейкера во избежание проливания жидкости. Бесщеточный двигатель постоянного тока имеет длительный срок службы и не требует технического обслуживания [5].

3D-модель шейкера инкубатора была создана с помощью программного обеспечения Blender и его стандартных модификаторов.

Следующая задача заключалась в создании 3D-модели помещения виртуальной лаборатории (рис. 2).



Рис. 1 Фото и 3D-модель шейкера инкубатора.

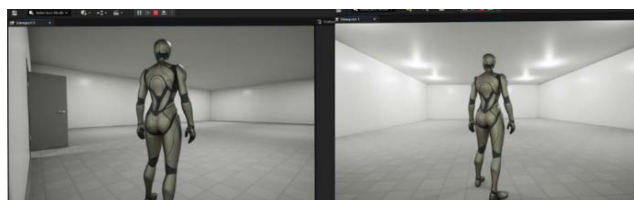


Рис. 2 3D-модель помещения виртуальной лаборатории.

Для создания 3D лабораторного помещения в среде разработки виртуальной реальности UE5 использовались стандартные инструменты Resize (изменение размера), Rotate (поворот), Move (перемещение). Так же использовались стандартные 3D объекты, такие как куб. Для текстурирования были применены базовые текстуры UE 5, для пола была наложена текстура плитки, для стен и потолка применялись стандартные в UE5 текстуры красок. Следующим этапом было создание плинтуса и применение к нему стандартной текстуры, также добавление света, эти компоненты создавались с помощью стандартных фигур и функций, лампочки размещались равномерно по помещению и настраивалась их мощность и площадь освещения.

Созданные 3D модели рамы и двери экспортированы в файлы формата \*.fbx и импортированы в лабораторное помещение, так же была применена стандартная текстура UE5.

Для создания 3D моделей вспомогательного оборудования виртуальной лаборатории (колбы, бутылки, баночки и стола для шейкера инкубатора) (рис. 3) использовались стандартные инструменты Blender, такие как: Resize (изменение размера), Rotate (поворот), Extrude (выдавливание), Bevel (скругление граней), Move (перемещение). Так же использовались модификаторы Subdivision Surface (скругление и смягчение всех граней и округлостей),

Модификатор Screw использовался для создания резьбы, которая выдавливается из заданных рёбер вокруг выбранного объекта, параметром Iterations определяется количество витков, а Angle расстояние между ними, Solidify использовался для придания модели толщины, которую можно настроить в данном модификаторе параметром Thickness.



Рис. 3 3D модели вспомогательного оборудования виртуальной лаборатории.

#### Заключение

Разработанные 3D-модели виртуальной химической лаборатории имеет большую перспективу в дальнейшей разработке, следующим этапом будет интеграция моделей в среду разработки

UE5, который обладает широкими возможностями визуализации и графики. На его основе будет производиться создание анимаций и обеспечения динамики объектов для виртуальной реальности.

Разрабатываемый проект виртуальной лаборатории может выступать в качестве тренажера для обучения студентов или персонала для работы с дорогостоящим оборудованием или в дистанционном, заочном образовании.

#### Список литературы

1. Леонов С.В., Шакирьянова Ю.П., Пинчук П.В. Перспективы развития трехмерного моделирования для решения судебно-медицинских экспертных задач: BIM-технология и 4D-моделирование // Судебная медицина. 2020. Т. 6. № 1. С. 4-13.

2. Сайт CadMaster, раздел Magazin/articles, [Электронный ресурс]. Режим доступа:

[https://www.cadmaster.ru/magazin/articles/cm\\_54\\_info\\_model\\_build.html](https://www.cadmaster.ru/magazin/articles/cm_54_info_model_build.html) (дата обращения: 16.05.2023).

3. Егоркина А.А., Васецкий А.М., Филиппова Е.Б. Разработка динамических элементов виртуального лабораторного практикума// Успехи в химии и химической технологии. Т. 33. 2019. № 11, с. 32-34.

4. Ковалев А.Д., Киселев Д.А. Использование виртуальных средств 3d графики в программе 3d моделирования blender. // 3D технологии в решении научно-практических задач. Сборник статей Всероссийской научно-практической конференции. Красноярск, 2021. С. 63-66

5. Сайт компании Элтемикс, раздел Каталог, [Электронный ресурс]. Режим доступа:

<https://eltemiks-lab.ru/product/shejker-inkubator-es-60c-orbita-20-mm-s-oxlzhdeniem>(дата обращения: 17.05.2023).

УДК 66.094.258.097

Морякова А.Э., Сорокина П.Д., Писаренко Е.В., Пономарев А.Б.

**Модифицирование цеолитов ZSM-5 методом пропитки и исследование их активности и стабильности в реакции депарафинизации углеводородного сырья**

Морякова Арина Эдуардовна – студентка группы К – 41; 190906@muctr.ru.

Сорокина Полина Дмитриевна – студентка группы К – 41; 190911@muctr.ru.

Писаренко Елена Витальевна – д. т. н., профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов; eypisarenko@mail.ru;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

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

Пономарев Андрей Борисович – к. х. н., старший научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН;

ФГБУН «ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН»,

Россия, Москва, 119334, ул. Вавилова, д. 28.

*Методом пропитки получен модифицированный цеолитсодержащий нанокатализатор безводородной депарафинизации углеводородного сырья (образец 1). Изучена его активность и стабильность в реакции депарафинизации сырья с установки вакуумной перегонки масла. Проведено сравнение эффективности работы катализатора (образец 1) с катализатором, полученным методом многостадийного кластерного синтеза (образец 2). Каталитические эксперименты проведены в проточном трубчатом реакторе со стационарным слоем катализатора при 1 атм и 300 °С. Рассчитаны константы скоростей дезактивации катализаторов. Построены регрессионные модели для расчета конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата от времени реакции и методом наименьших квадратов оценены параметры моделей. Предложена формализованная схема превращений в процессе депарафинизации.*

*Ключевые слова:* депарафинизация, модифицирование, метод пропитки, цеолиты MFI, кинетика дезактивации.

**Modification of ZSM-5 zeolites by the impregnation method and investigation of their activity and stability in the reaction of dewaxing of hydrocarbon raw materials**Moryakova A.E.<sup>1</sup>, Sorokina P.D.<sup>1</sup>, Pisarenko E.V.<sup>1</sup>, Ponomaryov A.B.<sup>2</sup><sup>1</sup> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.<sup>2</sup> Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia.

*A modified zeolite-containing nanocatalyst for hydrogen-free dewaxing of hydrocarbon feedstock was obtained by impregnation method (sample 1). Its activity and stability in the reaction of dewaxing of raw materials from an oil vacuum distillation unit was studied. The efficiency of the catalyst (sample 1) was compared with the catalyst obtained by the method of multistage cluster synthesis (sample 2). Catalytic experiments were carried out in a tubular flow reactor with a fixed catalyst bed at 1 atm and 300 °C. The rate constants for the deactivation of catalysts were calculated. Regression models were developed to calculate the conversion of n-paraffins, the yield of the product and the liquid fraction of the catalysate versus the reaction time, and the parameters of the models were estimated using the least squares method. A formalized scheme of transformations in the dewaxing process was proposed.*

*Keywords:* dewaxing, modification, impregnation method, MFI zeolites, deactivation kinetics.

**Введение**

Каталитическая депарафинизация углеводородного сырья является перспективной технологией улучшения низкотемпературных свойств дизельных топлив и масел [1-2]. Также могут использоваться и другие способы понижения температуры застывания/помутнения дизельных топлив, включающие снижение конца кипения дизельной фракции, смешивание с керосиновой фракцией, удаление n-парафинов экстрактивной кристаллизацией, добавление депрессорно-диспергирующих присадок, которые имеют ряд недостатков, в частности, снижение конца кипения дизельной фракции приводит к уменьшению выхода продукта, смешение с керосиновой фракцией требует ее дополнительной гидроочистки, процесс экстрактивной кристаллизации является периодическим процессом, а использование присадок

малоэффективно для снижения температуры помутнения дизельных топлив [3-5]. Фирма «Mobil» внедрила процесс каталитической депарафинизации дизельного топлива в 1978 г. В РФ первая установка гидродепарафинизации дизельного топлива построена в Ухте в 2003 г., вторая на Сургутском заводе стабилизации конденсата в 2004 г. В настоящее время промышленные катализаторы гидродепарафинизации углеводородного сырья производятся на отечественных предприятиях «Ангарский завод катализаторов и органического синтеза» (СГК-1, СГК-5, КДМ-10, ДЕП-3, ДЕП-9, ДЕП-16), на Новосибирском заводе химконцентратов (КН-30-БИМТ).

Проведен анализ активности, селективности и стабильности работы различных каталитических систем в реакции гидродепарафинизации углеводородного сырья (Таблица 1).

Таблица 1. Анализ дезактивации катализаторов гидродепарафинизации углеводородного сырья.

№	Состав катализатора	Условия проведения процесса	Исходная/конечная конверсия, %	Исходная/конечная селективность, %	Время работы, ч	Образование кокса/параметр дезактивации катализатора, ч <sup>-1</sup>
[2]	Pt-Pd/H-beta nSi/nAl = 25 V <sub>mic</sub> = 0,128 см <sup>3</sup> /г СБЭТ = 212 м <sup>2</sup> /г	T=220°C; P=50 атм.; Расход: 0.5 ч-1; Состав сырья: nH <sub>2</sub> /нув = 750:1	59,7 (2,8 ч) / 52,6 (45 ч)	59,7 (2,8 ч) / 51,4 (45 ч)	45	Образование кокса: C=5,41%
[3]	Pt-Pd-Mg/ZSM-23 Pt/Pd/Mg=0,3/0,6/1,0 V <sub>mic</sub> = 0,42 см <sup>3</sup> /г СБЭТ = 191 м <sup>2</sup> /г	T=280°C; P=3 МПа; Расход: 1 ч-1; Состав сырья: nH <sub>2</sub> /нув = 6:1	62,2 / 10,9 (96,2 ч)	94,1 / -	100	Параметр дезактивации: A, % = 0,026
[4]	Pt/HY SiO <sub>2</sub> /Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> =100; Pt=0,5 масс. %; V <sub>mic</sub> = 0,44 см <sup>3</sup> /г СБЭТ = 612 м <sup>2</sup> /г	T=290-320°C; P=3,1 МПа; Расход: 4 ч-1; Состав сырья: nH <sub>2</sub> /нув = 30:1	52,0 (8 ч) / 45,3 (160 ч)	58,1 (8 ч) / 64,5 (160 ч)	160	Образование кокса: C=9,3%

Как видно из данных (Таблица 1) цеолитсодержащие катализаторы гидродепарафинизации углеводородного сырья быстро закоксовываются.

#### Экспериментальная часть

Методом пропитки получен модифицированный катализатор (образец 1) безводородной депарафинизации углеводородного сырья на основе цеолита типа MFI. Он сравнивался с катализатором, синтезированным с помощью метода многостадийного кластерного синтеза МКС (образец 2). Элементный состав образцов катализаторов определяли с помощью рентгенофлуоресцентного анализа на приборе ThermoScientific ARL PERFORM'X с родиевой трубкой и мощностью 3.5 кВт.

Эксперименты по изучению активности и стабильности нанокатализаторов безводородной депарафинизации углеводородного сырья (образец 1 и образец 2) проводились в проточном реакторе со стационарным слоем катализатора при следующих условиях проведения процесса: температуре 300 °С, давлении 1 атм., расходе сырья 10 ч<sup>-1</sup>. В реактор было загружено 1,2 г катализатора. Анализ фракционного состава исходного сырья и продуктов реакции осуществляли хроматографически (Кристалл 5000.2) с помощью программы «Хроматэк Дистилляция» методом ASTM D2887. По окончании каталитического эксперимента определяли содержание кокса в катализаторах. Термогравиметрический анализ проводили на приборе STA-200 компании JINAN SYEEO INSTRUMENTS CO.,LTD. (Китай).

Графики зависимости конверсии n-парафинов и выхода продукта и жидкой фракции катализата от

времени проведения реакции для катализаторов, полученных различными методами представлена на рис.1.

В течение реакции происходит дезактивация катализаторов из-за образования кокса: для образца, полученного методом влажной пропитки - 5,63 % за 6 ч, методом многостадийного кластерного синтеза - 5,56 % за 6 ч.

Константа дезактивации катализатора рассчитывается по уравнению:

$$\frac{(1-X_f)/X_f}{(1-X_{in})/X_{in}} = e^{k_d t} \quad (1)$$

где  $k_d$  – константа дезактивации, ч<sup>-1</sup>,

$X_{in}$  – конверсия начальная, %,

$X_f$  – конверсия конечная, %,

$t$  – время, ч.

Рассчитанные по (1) константы дезактивации катализаторов составили 0,092 ч<sup>-1</sup> (для метода пропитки) и 0,080 ч<sup>-1</sup> (для метода МКС). Таким образом, установлено, что катализаторы, полученные методом многостадийного кластерного синтеза (МКС), показывают более стабильную работу в реакции депарафинизации углеводородного сырья.

В общем виде конверсия n-парафинов (X), выхода продукта (Yп) и жидкой фракции катализата (Yжф) описываются следующими уравнениями:

$$X = b_0 + b_1 t + b_2 t^2 + b_3 t^3 \quad (2)$$

$$YП = b_0 + b_1 t_1 + b_2 t^2 + b_3 t^3 \quad (3)$$

$$YЖФ = b_0 + b_1 t + b_2 t^2 + b_3 t^3 \quad (4)$$

где,  $t$  – время,

$b_0, b_1, b_2, b_3$  – коэффициенты уравнения регрессии.

Методом наименьших квадратов оценены значения коэффициентов уравнений регрессии (Таблица 2).

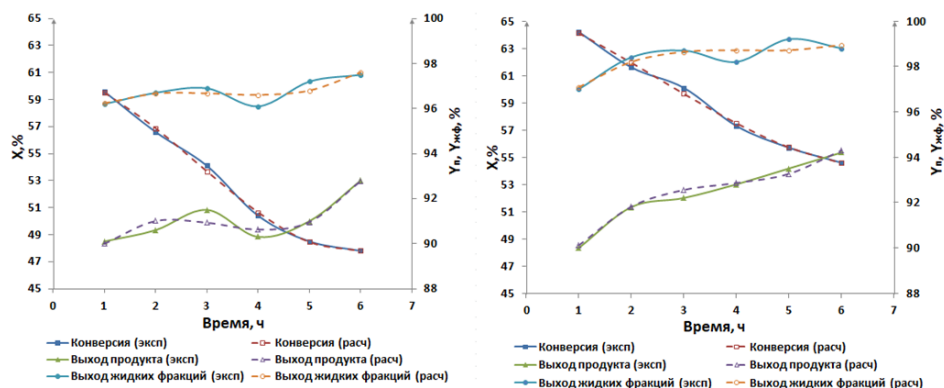


Рис.1. Зависимость конверсии n-алканов, выхода продукта и жидких фракций катализатора, полученных методами пропитки (а) и МКС (б), от времени реакции

Таблица 2. Значения коэффициентов в уравнениях регрессии для расчета конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализатора для катализаторов, полученных методами пропитки и МКС

Параметр	Конверсия n-парафинов, %		Выход продукта, %		Выход жидкой фракции катализатора, %	
	Пропитка	МКС	Пропитка	МКС	Пропитка	МКС
b0	60,933	65,9	87,033	86,933	95,033	95,0
b1	-0,554232804	-1,523809524	4,222751323	4,104497354	1,700529101	2,671428571
b2	-0,967063492	-0,310714286	-1,40515873	-1,007539683	-0,556349206	-0,635714286
b3	0,115740741	0,041666667	0,143518519	0,087962963	0,057407407	0,05

Тогда уравнения регрессии для расчета конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализатора принимают вид (5)-(7) для катализаторов, полученных методом многостадийного кластерного синтеза (МКС) и (8)-(10) методом пропитки:

$$X_1 = 65,9 - 1,524t - 0,311t^2 + 0,042t^3 \quad (5)$$

$$Y_{П1} = 86,93 + 4,104t - 1,007t^2 + 0,088t^3 \quad (6)$$

$$Y_{ЖФ1} = 95,0 + 2,671t - 0,635t^2 + 0,05t^3 \quad (7)$$

$$X_2 = 60,933 - 0,554t - 0,967t^2 + 0,115t^3 \quad (8)$$

$$Y_{П2} = 87,033 + 4,222t - 1,405t^2 + 0,143t^3 \quad (9)$$

$$Y_{ЖФ2} = 95,033 + 1,70t - 0,556t^2 + 0,057t^3 \quad (10)$$

Анализ результатов моделирования представлен в таблице 3. Абсолютная и относительная ошибки рассчитываются по уравнениям (11) и (12).

$$\Delta x_{абс} = |x_{\text{практ}} - x_{\text{теор}}| \quad (11)$$

$$\Delta x_{отн} = \frac{\Delta x_{абс}}{x_{\text{практ}}} \times 100\% \quad (12)$$

Таблица 3. Сравнение абсолютной и относительной ошибок для конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализатора для методов МКС и пропитки

Время, ч	Конверсия n-парафинов, %				Выход продукта, %				Выход жидкой фракции катализатора, %			
	Абсолютная ошибка		Относительная ошибка, %		Абсолютная ошибка		Относительная ошибка, %		Абсолютная ошибка		Относительная ошибка, %	
	МКС	Пропит	МКС	Пропит	МКС	Пропит	МКС	Пропит	МКС	Пропит	МКС	Пропит
1	0,093	0,072	0,145	0,121	0,118	0,106	0,131	0,117	0,086	0,035	0,088	0,036
2	0,343	0,283	0,557	0,499	0,384	0,406	0,417	0,449	0,200	0,032	0,203	0,033
3	0,443	0,408	0,737	0,754	0,354	0,570	0,384	0,623	0,057	0,222	0,058	0,229
4	0,200	0,251	0,349	0,498	0,060	0,327	0,065	0,362	0,514	0,508	0,524	0,529
5	0,021	0,047	0,038	0,097	0,237	0,042	0,254	0,046	0,486	0,397	0,490	0,408
6	0,029	0,072	0,052	0,121	0,089	0,016	0,094	0,017	0,143	0,108	0,145	0,111

В ходе регрессионного анализа установлено, что рассогласование между экспериментальными данными конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализатора и значениями, найденными с помощью регрессионных моделей незначительно (относительная ошибка не превысила 0,7% по обоим методам). Это свидетельствует о том, что предложенные модели хорошо описывает

реальный процесс депарафинизации углеводородного сырья.

На основании литературных данных и предварительно проведенных экспериментов по безводородной депарафинизации углеводородного сырья, предложена формализованная схема превращений (рис. 2).



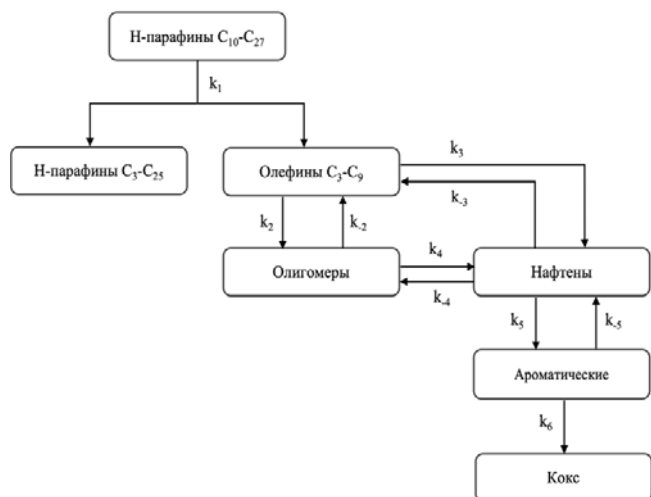


Рис.2. Формализованная схема превращений в процессе безводородной депарафинизации углеводородного сырья

### Заключение

В результате реакции депарафинизации углеводородного сырья, проведенной на катализаторе, полученном методом пропитки (образец 1) содержание н-парафинов в сырье снизилось с 20,70 % до 15,82 %, а температуры застывания и помутнения - с -5; -4°C до -28; -17 °С, а на катализаторе полученном методом многостадийного кластерного синтеза (образец 2) содержание н-парафинов в сырье снизилось с 20,70 % до 16,42 %, а температуры застывания и помутнения с -5; -4°C до -28°C и -18; соответственно.

### Список литературы

1. Камешков А.В., Гайле А.А. Получение дизельных топлив с улучшенными низкотемпературными свойствами (обзор). // Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). – 2015. – Т. 55. – №29. –С. 49-60
2. Frank Bauer, Karsten Ficht, Marko Bertmer, Wolf-Dietrich Einicke, Thomas Kuchlingb and Roger Gläser. Hydroisomerization of long-chain paraffins over nano-sized bimetallic Pt–Pd/H-beta catalysts//The Royal Society of Chemistry. 2014.
3. Seung-Woo Lee, Son-Ki Ihm. Hydroisomerization and hydrocracking over platinum loaded ZSM-23 catalysts in the presence of sulfur and nitrogen compounds for the dewaxing of diesel fuel// Fuel. 2014.
4. Tepin Hengsawad, Chayasari Srimingkwanchai, Suchada Butnark, Daniel E. Resasco and Siriporn Jongpatiwut. Effect of Metal–Acid Balance on Hydroprocessed Renewable Jet Fuel Synthesis from Hydrocracking and Hydroisomerization of Biohydrogenated Diesel over Pt-Supported Catalysts // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2018. – V. 57. – P. 1429-1440.
5. Патент РФ 2642058 Пономарев А.Б., Косолапова А.П., Шостаковский М.В., Писаренко Е.В., Пашлов А.В. Катализатор, способ его использования и установка для безводородной депарафинизации углеводородного сырья. Заявл. 2016137813 от 22.09.2016, Оpubл. 24.01.2018, бюл №3.

УДК 66.094.258.097

Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Зайцева А.Р., Сомова Т.И.

**Моделирование процесса депарафинизации углеводородного сырья на нанокатализаторе Cu-ZSM-5, полученного методом ионного обмена**

Писаренко Елена Витальевна – доктор технических наук, профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева, e-mail: [evpisarenko@mail.ru](mailto:evpisarenko@mail.ru);

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва.

Пономарев Андрей Борисович – кандидат химических наук, старший научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН;

ФГБУН «ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН», Россия, Москва, 119334, ул. Вавилова, д. 28.

Зайцева Александра Романовна – студентка 4 курса бакалавриата кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Сомова Татьяна Ильинична – студентка 4 курса бакалавриата кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева.

*Синтезированы цеолитсодержащие нанокатализаторы Cu-ZSM-5 безводородной депарафинизации углеводородного сырья методом трехэтапного ионного обмена (образец 1) и методом трехэтапного ионного обмена с последующей пропаркой (образец 2). Проведены каталитические эксперименты в проточном трубчатом реакторе со стационарным слоем катализатора при давлении 1 атм, температуре 300 °С, расходе сырья с установки вакуумной перегонки масла 10 ч<sup>-1</sup>. Проанализирована активность, селективность и стабильность работы нанокатализаторов Cu-ZSM-5. Рассчитаны константы дезактивации нанокатализаторов Cu-ZSM-5. Построены регрессионные модели для расчета конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата от времени реакции. Методом наименьших квадратов оценены параметры моделей.*

*Ключевые слова: безводородная депарафинизация, цеолиты MFI, модифицирование, метод ионного обмена, дезактивация, моделирование, катализаторы.*

**Simulation of the process of dewaxing of hydrocarbons on the Cu-ZSM-5 nanocatalyst produced by the ion exchange method**

Pisarenko E.V.<sup>1</sup>, Ponomarev A.B.<sup>2</sup>, Zaitseva A.R.<sup>1</sup>, Somova T.I.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

<sup>2</sup> Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia.

*Zeolite-containing nanocatalysts Cu-ZSM-5 for hydrogen-free dewaxing of hydrocarbon feedstock were synthesized by the three-stage ion exchange method (sample 1) and by the three-stage ion exchange method followed by steaming (sample 2). Catalytic experiments were carried out in a tubular flow reactor with a stationary catalyst bed at a pressure of 1 atm, a temperature of 300 °C, and a feedstock flow rate from an oil vacuum distillation unit of 10 h<sup>-1</sup>. The activity, selectivity, and stability of Cu-ZSM-5 nanocatalysts were analyzed. The deactivation constants of Cu-ZSM-5 nanocatalysts were calculated. Regression models were developed to calculate the conversion of n-paraffins, the yield of the product, and the liquid fraction of the catalysate versus the reaction time. The parameters of the models were estimated by the least squares method.*

*Keywords: hydrogen-free dewaxing, MFI zeolites, modification, ion exchange method, deactivation, modeling, catalysts.*

**Введение**

Процесс депарафинизации углеводородного сырья является крупнотоннажным промышленным процессом производства низкозастывающих нефтепродуктов, в частности дизельного топлива для транспорта, эксплуатируемого в условиях арктического климата. Повышение требований к низкотемпературным свойствам дизельного топлива обусловлено экстремально низкими температурами в некоторых регионах России, таких как Якутия и Сибирь, где они могут достигать -50°C [1-2]. Каталитическая депарафинизация направлена на повышение текучести различных типов углеводородного сырья при низких температурах вследствие снижения температуры застывания (помутнения) компонентов смазочных масел, средних дистиллятных фракций, дизельных топлив. Ухудшение низкотемпературных свойств

связано с присутствием в нефтяных фракциях нормальных и слаборазветвленных длинноцепочечных парафинов. В процессе каталитической депарафинизации протекают реакции селективного гидрокрекинга и гидроизомеризации длинноцепочечных n-парафинов при этом образуются легкие парафины, нафтены, ароматические углеводороды. Обычно, каталитическую депарафинизацию проводят в среде водорода, который снижает образование кокса и гидрирует образующиеся олефины, ароматические и полиароматические углеводороды. Процесс гидродепарафинизации протекает при температурах 280-450°C, давлении 2-8 МПа, объемной скорости подачи сырья 0.1-5 ч<sup>-1</sup>, мольном отношении H<sub>2</sub>/углеводороды=90-900. Модифицированные цеолиты на основе эрионита, MOR, BETA, ZSM-5, ZSM-11, ZSM-12, ZSM-22, ZSM-23, ZSM-35, ZSM-48 эффективно используются в

качестве катализаторов депарафинизации дизельных и масляных фракций. Недостатком подобных каталитических систем является присутствие благородных металлов Pt или Pd в составе катализатора. Металлы (Pt, Pd) способствуют изомеризации нормальных углеводородов, в то время как кислотные центры цеолитов приводят к протеканию реакций крекинга и к снижению цетанового числа углеводородных смесей. Однако, Pt и Pd чувствительны к наличию серы в сырье, поэтому необходимо проводить предварительную сероочистку.

В РФ на ОАО «Ангарский завод катализаторов и органического синтеза» налажено производство промышленных катализаторов гидрокрекинга СГК-1, СГК-5, КДМ-10, ДЕП-3, ДЕП-9, ДЕП-16, а на Новосибирском заводе химконцентратов производство КН-30-БИМТ. Катализаторы депарафинизации содержат кислотный компонент для крекинга и изомеризации (цеолит, алюмосиликаты, оксид алюминия), активный дегидрирующий/гидрирующий компонент (Ni, Co, Pt, Mo, W) для гидрирования олефинов и связующее.

#### Экспериментальная часть

Сравниваются нанокатализаторы депарафинизации углеводородного сырья, полученные методом 3-х этапного ионного обмена, один из которых дополнительно подвергался пропарке (образец 1 и 2 соответственно). На приборе ThermoScientific ARL PERFORM'X с родиевой трубкой и мощностью 3.5 кВт был проведен рентгенофлуоресцентный анализ, с помощью которого определен элементный состав каждого катализатора.

Эксперименты по изучению активности и стабильности полученных модифицированных катализаторов типа MFI (образец 1 и 2) проводились в проточном реакторе со стационарным слоем катализатора. Условия проведения процесса: температура 300 °С, давление 1 атм, расход сырья 10 ч<sup>-1</sup>. Анализ фракционного состава исходного сырья и продуктов реакции осуществляли хроматографически (Кристалл 5000.2) в программе «Хроматэк Дистилляция» методом ASTM D2887.

После проведения каталитического эксперимента рассчитывали содержание кокса в нанокатализаторах. Термогравиметрический анализ проводили на приборе STA-200 компании JINAN CYEEO INSTRUMENTS CO.,LTD. (Китай). В течение реакции происходит дезактивация катализаторов из-за образования кокса: для образца, полученного методом трехэтапного ионного обмена - 5,97 % за 6 ч, методом трехэтапного ионного обмена с последующей пропаркой - 5,25 % за 6 ч.

Константа дезактивации катализатора рассчитывается по уравнению:

$$[(1-X_f)/X_f][(1-X_{in})/X_{in}] = e^{K_d \cdot t} \quad (1)$$

где,  $K_d$  – константа дезактивации, ч<sup>-1</sup>;  $X_{in}$  – конверсия начальная, %;  $X_f$  – конверсия конечная, %;  $t$  – время, ч,

Рассчитанные по (1) константы дезактивации катализаторов составили 0,0996 ч<sup>-1</sup> (для метода трехэтапного ионного обмена) и 0,0905 ч<sup>-1</sup> (для метода трехэтапного ионного обмена с последующей пропаркой). Таким образом, установлено, что катализаторы, полученные методом трехэтапного ионного обмена с последующей пропаркой, показывают более стабильную работу в реакции депарафинизации углеводородного сырья.

Графики зависимости конверсии n-парафинов и выхода продукта и жидкой фракции катализата от времени проведения реакции для катализаторов, полученных различными методами представлена на рис.1.

В общем виде конверсия n-парафинов (X), выхода продукта (Yп) и жидкой фракции катализата (Yжф) описываются следующими уравнениями:

$$X = b_0 + b_1 t + b_2 t^2 + b_3 t^3 \quad (2)$$

$$Y_{п} = b_0 + b_1 t_1 + b_2 t^2 + b_3 t^3 \quad (3)$$

$$Y_{жф} = b_0 + b_1 t + b_2 t^2 + b_3 t^3 \quad (4)$$

где  $t$  – время, а  $b_0, b_1$  и т.д. – коэффициенты уравнения регрессии.

Методом нелинейных наименьших квадратов оценены значения коэффициентов уравнений регрессии, представленные в таблице 1.

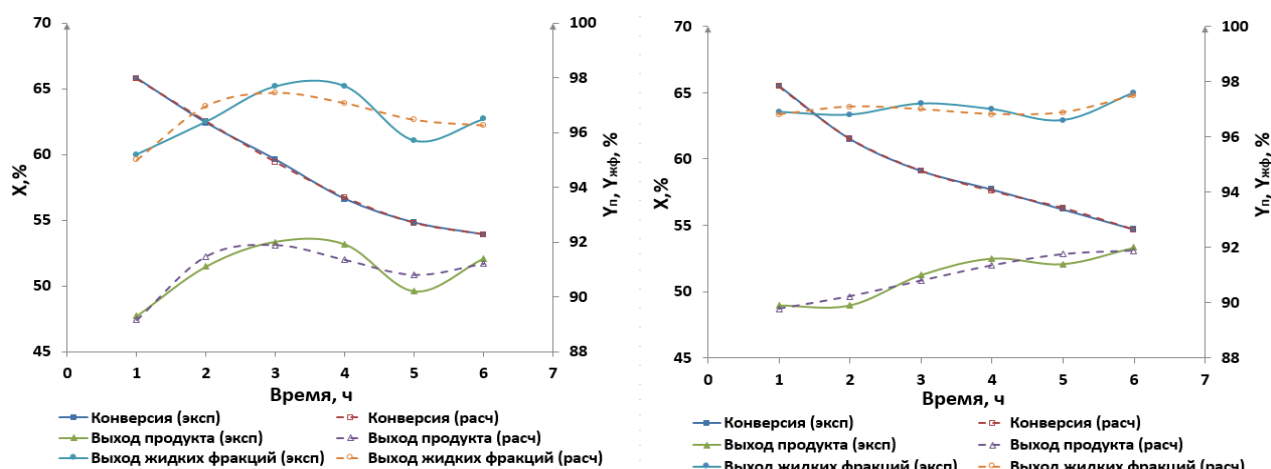


Рис. 1. Зависимость конверсии n-алканов, выхода продукта и жидких фракций катализата, полученных методами трехэтапного ионного обмена (а) и трехэтапного ионного обмена с последующей пропаркой (б), от времени реакции

Таблица 1. Значения коэффициентов в уравнениях регрессии для расчета конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата для катализаторов, полученных методами трехэтапного ионного обмена и трехэтапного ионного обмена с последующей пропаркой

Параметр	Конверсия n-парафинов, %		Выход продукта, %		Выход жидкой фракции катализата, %	
	Трехэтапный ионный обмен	Трехэтапный ионный обмен с последующей пропаркой	Трехэтапный ионный обмен	Трехэтапный ионный обмен с последующей пропаркой	Трехэтапный ионный обмен	Трехэтапный ионный обмен с последующей пропаркой
b0	68.8	71,566666667	83.966666667	89,6	90.9	95,8
b1	-2.826587302	-7,366402116	6.943518518	0.016269841	5.371825397	1,462698413
b2	-0.25952381	1,386111111	-1.911507937	0.194047619	-1.379761905	-0,513095238
b3	0.052777778	-0,10462963	0.159259259	-0,022222222	0.105555556	0,052777778

Тогда уравнения регрессии для расчета конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата принимают вид (5)-(7) для катализаторов, полученных методом трехэтапного ионного обмена и (8)-(10) методом трехэтапного ионного обмена с последующей пропаркой:

$$X_1 = 68,8 - 2,83t - 0,26t^2 + 0,053t^3 \quad (5)$$

$$УП_1 = 83,97 + 6,94t - 1,91t^2 + 0,16t^3 \quad (6)$$

$$УЖФ_1 = 90,9 + 5,37t - 1,38t^2 + 0,105t^3 \quad (7)$$

$$X_2 = 71,567 - 7,366t + 1,386t^2 - 0,105t^3 \quad (8)$$

$$УП_2 = 89,60 + 0,016t + 0,194t^2 - 0,022t^3 \quad (9)$$

$$УЖФ_2 = 95,80 + 1,463t - 0,513t^2 + 0,053t^3 \quad (10)$$

Анализ результатов моделирования представлен в таблице 2. Абсолютная и относительная ошибки рассчитываются по уравнениям (11) и (12).

$$\Delta x_{абс} = |x_{\text{практ}} - x_{\text{теор}}| \quad (11)$$

$$\Delta x_{\text{отн}} = \frac{\Delta x_{абс}}{x_{\text{практ}}} \times 100\% \quad (12)$$

Таблица 2

Сравнение абсолютной и относительной ошибок для конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата для методов трехэтапного ионного обмена и трехэтапного ионного обмена с последующей пропаркой

Время, ч	Конверсия n-парафинов, %				Выход продукта, %				Выход жидкой фракции катализата, %			
	Абсолютная ошибка		Относительная ошибка, %		Абсолютная ошибка		Относительная ошибка, %		Абсолютная ошибка		Относительная ошибка, %	
	ИО	ИО с пропаркой	ИО	ИО с пропаркой	ИО	ИО с пропаркой	ИО	ИО с пропаркой	ИО	ИО с пропаркой	ИО	ИО с пропаркой
1	0,033	0,018	0,051	0,028	0,142	0,112	0,159	0,124	0,202	0,098	0,213	0,101
2	0,131	0,041	0,210	0,067	0,382	0,331	0,419	0,368	0,569	0,295	0,590	0,305
3	0,19	0,017	0,320	0,030	0,106	0,205	0,116	0,225	0,252	0,205	0,258	0,211
4	0,119	0,117	0,210	0,204	0,551	0,252	0,599	0,276	0,633	0,181	0,648	0,187
5	0,024	0,109	0,043	0,193	0,604	0,355	0,670	0,388	0,760	0,283	0,794	0,293
6	2,381·10 <sup>-3</sup>	0,032	4,41·10 <sup>-3</sup>	0,058	0,187	0,117	0,204	0,127	0,240	0,095	0,249	0,098

В ходе регрессионного анализа установлено, что рассогласование между экспериментальными и расчетными данными незначительно, при этом абсолютная ошибка не превысила 0,760, а относительная – 0,794 % по методу трехэтапного ионного обмена и 0,355; 0,388% соответственно по методу трехэтапного ионного обмена с последующей пропаркой.

#### Заключение

В результате реакции депарафинизации углеводородного сырья, проведенной на катализаторе, полученном методом трехэтапного ионного обмена (образец 1) содержание n-парафинов в сырье снизилось с 20,70% до 16,89%, а температуры помутнения и застывания - с -4; -5 °С до -16; -27 °С, а на катализаторе полученном методом трехэтапного ионного обмена с последующей пропаркой (образец 2)

содержание n-парафинов в сырье снизилось с 20,70 % до 16,49 %, а температуры помутнения и застывания с -4; -5 °С до -20; -31 °С.

#### Список литературы

1. Патент РФ 2642058 Пономарев А.Б., Косолапова А.П., Шостаковский М.В., Писаренко Е.В., Пашлов А.В. Катализатор, способ его использования и установка для безводородной депарафинизации углеводородного сырья. Заявл. 2016137813 от 22.09.2016, Опубл. 24.01.2018, бюл №3.

2. Патент РФ 2648046 Пономарев А.Б., Шостаковский М.В., Вахмистров В.Е., Моисеев С.К., Косолапова А.П., Писаренко В.Н., Писаренко Е.В. Цеолитный катализатор и способ безводородной депарафинизации углеводородного сырья с его использованием. Заявл. 2017107255 от 06.03.2017, Опубл. 22.03.2018, бюл №9.

УДК 656; 665.6

Ренжина В.И., Цакаева Л.И., Аверина Ю.М.

### Анализ китайского рынка нефтепродуктов и развитие каналов распределения в нем

Ренжина Валерия Игоревна, студентка 1 курса магистратуры, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: valeriarenzhina@gmail.com;

Цакаева Ламара Исламовна, студентка 1 курса магистратуры, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: tsli1108@gmail.com;

Аверина Юлия Михайловна, к.т.н., доцент, заведующая кафедрой логистики и экономической информатики ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9

*В данной статье рассмотрены перспективы развития рынка и транспорта нефти и нефтепродуктов между Российской Федерацией и Китайской Народной Республикой. Рассмотрены преимущества и возможные риски развития данного направления и предложены возможные стадии расширения каналов распределения.*

*Ключевые слова: Китай, Россия, транспорт нефти и нефтепродуктов, развитие инфраструктуры.*

### The controlling system application for energy and resource saving in the production of gasoline

Renzhina V.I., Tsakaeva L.I., Averina Y.M.

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

*This article discusses the prospects for the development of the market and transport of oil and oil products between the Russian Federation and the People's Republic of China. The advantages and possible risks of the development of this direction are considered and possible stages of expansion of distribution channels are proposed.*

*Keywords: China, Russia, transportation of oil and oil products, infrastructure development.*

#### Введение

В настоящее время все больше внимания уделяется транспорту различной продукции, в частности нефтепродуктов в азиатском направлении. Данная тенденция позволит восстановить прежние объемы экспорта после перекрытия каналов поставок в европейском направлении.

#### Транспорт бензина в Китай

Ситуация на рынке бензина в Китае на данный момент относительно стабильна. В конце 2020 года и в начале 2021 года наблюдался небольшой дефицит топлива, вызванный увеличением общего объема экспорта нефти из Китая и падением объемов импорта нефтепродуктов из-за пандемии COVID-19. Однако ситуация быстро улучшилась, и на данный момент дефицит топлива отсутствует.

Производство нефтепродуктов в Китае возобновилось после того, как правительство приняло меры по стимулированию спроса на местном уровне и обеспечению стабильности цен на топливо в стране. Кроме того, Китай активно закупает нефть на мировом рынке, а также ведет деловые переговоры о заключении долгосрочных контрактов на поставку нефтепродуктов с другими государствами, что способствует снижению дефицита топлива. Правительство Китая готово принимать меры для поддержания стабильности цен на топливо и обеспечения его достаточного количества на внутреннем рынке.

Помимо расширения деловых контактов с Китайской Народной Республикой, развитие транспорта нефтепродуктов в данном направлении позволит достигнуть следующих преимуществ:

– Увеличение объемов экспорта. Развитие транспортировки нефти и нефтепродуктов в

Китай позволит расширить рынок сбыта и увеличить объемы экспорта.

– Диверсификация экспортных направлений. Ранее Россия осуществляла транспортировку нефти и нефтепродуктов в основном в Европу. Перенос части экспорта в Китай позволит уменьшить зависимость России от европейских рынков и диверсифицировать экспортные направления.

– Расширение сотрудничества с Китаем. Увеличение экспорта в Китай позволит укрепить экономические отношения между Россией и Китаем.

Вышеуказанные преимущества можно достигнуть благодаря развитию транспортной системы в азиатском направлении. Это многоэтапный процесс, требующий финансирования со стороны обоих государств. Существуют следующие пути развития транспортной системы между Российской Федерацией и Китайской Народной Республикой:

– Развитие железнодорожной инфраструктуры.

– Увеличение производительности и эффективности транспорта.

– Сотрудничество с Китаем на международном уровне

– Развитие инфраструктуры в Китае.

Россия уже работает над модернизацией железнодорожных магистралей, необходимых для транспортировки нефти и нефтепродуктов в Китай, а для эффективного распределения продукции на территории Китая необходимо создать удобные условия для транспортировки нефти и нефтепродуктов, расширить сеть терминалов и складов.

### **Федеральные законы, регулирующие транспорт нефти и нефтепродуктов**

В России федеральные законы, которые могут помочь в развитии транспорта нефти и нефтепродуктов между Россией и Китаем, включают в себя:

1. Федеральный закон "О транспорте", который регулирует организацию и функционирование транспорта в России, включая транспорт нефти и нефтепродуктов;

2. Федеральный закон "О базовых принципах государственного регулирования внешнеторговой деятельности", который определяет правовые основы внешнеторговой деятельности России, в том числе в области транспорта нефти и нефтепродуктов;

3. Федеральный закон "О таможенном регулировании в Российской Федерации", который определяет правовые основы таможенного регулирования в России, включая транспорт нефти и нефтепродуктов.

В Китае федеральные законы, которые могут помочь в развитии транспорта нефти и нефтепродуктов между Россией и Китаем, включают в себя:

1. Закон КНР "О транспорте", который регулирует организацию и функционирование транспорта в Китае, включая транспорт нефти и нефтепродуктов;

2. Закон КНР "О внешней экономической деятельности" определяет правовые основы внешнеторговой деятельности Китая, в том числе в области транспорта нефти и нефтепродуктов;

3. Закон КНР "О таможенном регулировании" определяет правовые основы таможенного регулирования в Китае, включая транспорт нефти и нефтепродуктов.

### **Анализ преимуществ и недостатков транспорта нефти между Россией и Китаем**

При транспортировке нефти и нефтепродуктов между Россией и Китаем могут возникнуть следующие проблемы:

1. Технические проблемы в работе нефтепроводов и железнодорожных путей, которые могут привести к задержкам или остановке поставок;

2. Проблемы с качеством нефти и нефтепродуктов, которые могут повлиять на их транспортабельность и использование в производственных процессах;

3. Нарушения правил таможенного регулирования и неправильное оформление документов, что может привести к задержкам грузов на таможне;

4. Геополитические и экономические противоречия между Россией и Китаем, которые могут повлиять на стабильность поставок нефти и нефтепродуктов.

Причинами этих проблем могут быть различные факторы, такие как:

1. Недостаточное финансирование инфраструктуры транспорта нефти и нефтепродуктов;

2. Неэффективное управление и эксплуатация нефтепроводов и железнодорожных путей;

3. Локальные конфликты и напряжения в регионах, где проходят нефтепроводы и железнодорожные пути;

4. Нарушение правил и стандартов в области экологии и безопасности при транспортировке нефти и нефтепродуктов;

5. Политические и экономические особенности взаимоотношений между Россией и Китаем, такие как санкции и торговые ограничения.

### **Разработка новых каналов распределения нефтепродуктов в азиатском направлении**

В начале 2022 года мир столкнулся с острым геополитическим кризисом, который может привести к перебоям с поставками нефти и шокам мирового предложения. На фоне санкционного давления в отношении РФ традиционные каналы реализации сырья оказались ограничены. Несмотря на отсутствие прямых ограничений по закупке нефти и нефтепродуктов со стороны Европы, контрагенты стараются избегать связей с поставками российского сырья, опасаясь вторичных санкций. Дополнительное давление на предложение нефти оказывали отставание добычи ОПЕК+ от целевых объемов, а также авария на новороссийском терминале КТК. При этом спрос на углеводороды вырос вслед за восстановлением мировой экономики, достигнув уровня начала 2019 г. Однако дальнейший рост, вероятно, будет прерван надвигающейся рецессией, вызванной эскалацией геополитических конфликтов.

Начали разрываться логистические цепочки, поэтому России нужно искать новых потребителей. Такими потребителями могут стать азиатские компании, и в первую очередь китайские компании.

Разработка новых каналов распределения нефтепродуктов — это важная проблема для нефтяных компаний, так как это помогает им достичь более широкой аудитории и повысить продажи. Однако, несмотря на большое количество исследований в области маркетинга и продажи нефтепродуктов, научная новизна в разработке каналов распределения нефтепродуктов в настоящее время ограничена.

Разработка азиатского канала распределения нефтепродуктов включает следующие стадии технологического процесса:

1. *Анализ рынка.* Необходимо проанализировать рынок и определить целевую аудиторию для будущего канала распределения. Это позволит установить потребности и предпочтения потенциальных клиентов и определить оптимальный транспортный маршрут для доставки продукции.

2. *Исследование конкурентов.* На этой стадии необходимо проанализировать конкурентов на рынке, выявить особенности их каналов распределения и оценить их техническую оснащенность и эффективность. Это поможет выработать стратегию, лучше приспособленную к текущей конкурентной ситуации.

3. *Проектирование.* На этой стадии нужно разработать концепцию будущего канала распределения, которая будет определять основные этапы его создания. Важно определить используемые технологии, выбрать поставщиков и определить структуру канала распределения.

4. *Разработка и прототипирование.* На этой стадии создается первоначальный прототип канала распределения для тестирования его функциональности и эффективности. В этом случае вся система будет протестирована, чтобы увидеть, насколько все процессы работают надлежащим образом.

5. *Тестирование и отладка.* На этой стадии тестируется работа прототипа на практике, чтобы убедиться в его эффективности и надежности. Если обнаружены ошибки, их необходимо устранять. Кроме того, необходимо осуществлять мониторинг канала распределения и вносить изменения, чтобы улучшить его функциональность.

6. *Запуск и мониторинг.* После завершения тестирования и отладки канал распределения готов к запуску. На этой стадии необходимо произвести все необходимые настройки для стабильной работы канала распределения и осуществлять его мониторинг с целью отслеживания эффективности и корректировки стратегии в зависимости от изменения рыночной ситуации.

#### **Заключение:**

На основании всего вышесказанного можно сделать вывод о перспективности развития каналов распределения продуктов между Россией и Китаем. Интересы стран в данном направлении совпадают,

что позволяет говорить о возможном крупномасштабном расширении транспортной и логистической инфраструктуры.

#### **Список литературы:**

1. Романенко Е.Г., Кокшаров Л.А. Анализ рынка нефтепродуктов Китая // Нефть, Газ и Бизнес. - 2019. - Т. 10, №4. - С. 24-29.

2. Гуськова О.И., Линь Т. Особенности китайского рынка нефтепродуктов // Азия и Африка сегодня. - 2018. - №6. - С. 42-47.

3. Кекелева Е.В., Цзин Л. Оценка динамики торговли нефтью и нефтепродуктами между РФ и Китаем // Экономика и управление. - 2017, №2. - С. 85-91.

4. Кузнецов В.В., Ши Я. Проблемы и перспективы развития рынка нефтепродуктов в Китае // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия "Экономика". - 2019. - Т. 29, №2. - С. 262-277.

5. Федорова М.С., Ли Ш. Проблемы логистики нефтепродуктов на китайском рынке // Логистика и управление цепями поставок. - 2018. - №4. - С. 138-144.

6. Qiu, Y., Hong, X., Gao, W., Akhtar, A. Analyzing the performance of China's oil product distribution system using the distribution efficiency method // Journal of Cleaner Production. - 2019. - Vol. 225. - P. 514-523.

7. Чжан Л., Ли Х., Чжан А., Ян Х. Система и моделирование управления распределительными каналами нефтепродуктов // Современная энергетика и управление электрическими системами. - 2020, №3. - С. 94-102.

УДК 332.1; 334.02; 665.6

Цакаева Л.И., Ренжина В.И., Свистун М.С., Лебедев М.Д., Меньшова И.И.

## Обоснование создания Сибирского кластера на Приобском месторождении

Цакаева Ламара Исламовна, студентка 1 курса магистратуры, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: tsi1108@gmail.com;

Ренжина Валерия Игоревна, студентка 1 курса магистратуры, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: valeriarenzhina@gmail.com;

Свистун Мария Сергеевна, студентка 1 курса магистратуры, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: svistun.mary@gmail.com;

Лебедев Михаил, студент 1 курса магистратуры, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: mixastik2011@mail.ru;

Меньшова Ирина Игоревна, доцент кафедры Логистики и Экономической Информатики, e-mail: imenshova2022@gmail.com;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,  
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9

*Обоснование создания Сибирского кластера на основании документов по развитию нефтяной промышленности, экологии, географии и опыта других моделей кластеризации.*

*Ключевые слова: нефтеперерабатывающий завод, кластер, Газпромнефть, вторичная переработка нефти.*

## RATIONALE FOR THE CREATION OF THE SIBERIAN CLUSTER AT THE PRIOBSCOYE FIELD

Tsakaeva L.I., Renzhina V.I., Svistun M.S., Lebedev M.D., Menshova I.I.

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

Justification of the creation of the Siberian cluster on the basis of documents on the development of the oil industry, ecology, geography and the experience of other clustering models.

*Key word: oil refinery, cluster, Gazpromneft, secondary oil refining.*

### Основной текст:

*Документы, направленные на развития нефтяной промышленности в России и ХМАО:*

На основании анализа документации по развитию нефтяной промышленности в Российской Федерации и Ханты-Мансийском автономном округе можно сделать вывод о высокой актуальности развития данной отрасли в настоящий момент, так как несмотря на активную добычу нефти в Ханты-Мансийском автономном округе – Югре, а именно на Приобском месторождении, там нет развитой инфраструктуры. Основными методами стимулирования являются:

- Повышение инвестиционной привлекательности данной отрасли;
- Выдача налоговых и таможенных преференций;
- Выдача субсидий, покрывающих часть расходов на лизинг и техническое перевооружение нефтегазоперерабатывающих заводов;
- Требования к снижению количество выбросов в окружающую среду [1-6];

На основании вышеприведенных пунктов можно говорить о высокой возможности в данный момент времени эффективно улучшить положение на Приобском месторождении, улучшить инфраструктуры и произвести замену аппаратного обеспечения на более современное и эффективное. Эти данные позволяют говорить о кластеризации.

**Факторы, повлиявшие на стоимости нефти в России**

Из-за операции на Украине многие западные страны отказались от российской нефти и нефтепродуктов, что привело к снижению добычи на 350 тыс. барр./сут. В декабре Европейский Союз введет эмбарго на морские поставки нефти, а в феврале — на морские поставки нефтепродуктов. Вслед за этим может начать действовать механизм ограничения цен на российскую нефть, но пока его детали не известны. Все это может привести к снижению добычи на 1,2 млн барр./сут. относительно текущего уровня в 10,5 млн барр./сут. Альянс ОПЕК+ решил сократить добычу на 2 млн барр./сут. с ноября, чтобы защитить цену на баррель нефти на уровне \$90. По причине последствий коронавируса мировая нефтяная отрасль оказалась в состоянии недоинвестирования [7].

Большинство компаний использовали повышенные цены для снижения долга, увеличения выплат акционерам и инвестициям в ВИЭ. На фоне этого в мире сейчас практически нет возможностей для повышения роста добычи в краткосрочной перспективе.

### Обоснование выбора модели кластеризации

Модель Сибирского кластера обладает следующими признаками:

- Симбиоз 3 компаний, работающих на Приобском месторождении;
- Ориентирование не только на внутренний рынок, полное обеспечение близлежащих городов этого региона, а также на экспорт по азиатскому направлению;



- Объединение химического кластера с социальным, развитие городов и полная поддержка государства (льготы, пенсии, гранты, субсидии и т.д.);

- Строительство со строгим соответствием международным законам об охране окружающей среды;

- Существование в условиях рыночной экономики.

Рассмотрев и проанализировав существующие модели кластеров, такие как Северно-американская, Финская, Советская, Японская, Индийская и т.д., пришли к выводу, что ни одна из них не подходит.

### **Обоснование создания новейшего НПЗ в Сибирском кластере**

В «Энергетической стратегии Российской Федерации на период до 2035 года» (утверждена Распоряжением Правительства РФ от 09.06.2020 № 1523-р) перед нефтеперерабатывающей отраслью России стоит задача завершения модернизации НПЗ с целью увеличения глубины переработки нефти и выхода светлых нефтепродуктов, повышения их качества при максимальном использовании отечественных технологий и оборудования. Также отмечено, что необходима «разработка и совершенствование отечественных технологий глубокой переработки “тяжелой” нефти, стимулирование увеличения числа процессов глубокой переработки нефтяных остатков на отечественных НПЗ» [8].

Одной из важнейших проблем, связанных с отечественной нефтепереработкой, является высокий уровень износа основных фондов, достигающий 80% на нефтеперерабатывающих заводах, а также невысокая обеспеченность отечественными катализаторами процессов переработки нефти (на данный момент до 50% катализаторов закупаются у зарубежных поставщиков).

Основными технологическими направлениями российской нефтепереработки являются:

- Максимизация глубины переработки нефтеперерабатывающих заводов путем внедрения новых углубляющих процессов, таких как каталитический крекинг, гидрокрекинг, замедленное коксование, гидроконверсия тяжелых остатков и частичный висбрекинг, что позволяет отказаться от производства или максимально снизить производство мазута [9].

- Интеграция непосредственно с нефтехимическими производствами, позволяющая использовать продукцию нефтеперерабатывающих заводов в цепочках переработки нефтехимических заводов.

- Управление рисками глобального перепроизводства нефтепродуктов, в том числе с помощью интегрированных решений автоматизации производства, календарного планирования и управления цепями поставок;

- Консолидация отрасли и вертикальная интеграция за счет снижения маржинальности производства нефтепродуктов.

Изучив и проанализировав, всю вышеперечисленную информацию, единственным логическим решением будет создать собственный новейший НПЗ как часть Сибирского кластера. С учетом нынешней геополитической ситуации необходимо думать об полном импортозамещении, развитии собственных технологий и применении их на практике. «Газпромнефть» последние 12 лет занимается развитием своих технологий, как пример КУПН «ЕВРО+», Комплекс «Биосфера», СУУТП, ЦМиД, АСМВ, новая система ЭЛОУ-АВТ, завод по производству катализаторов каталитического крекинга, гидроочистки и гидрокрекинга. Все эти технологии являются нашими и уже окупили себя, если продолжить развитие в данном направлении, то больше не будет необходимости в зарубежных ресурсах [10-11].

### **География**

На основании географического положения «Сибирский кластер» предлагается разместить в Ханты-Мансийском автономном округе – Югра. Данное местоположение привлекательно большой минерально-сырьевой базой. Югра занимает первое место среди регионов РФ по добыче нефти и третье место по объему инвестиций в основной капитал.

ХМАО расположен в центральной части Уральского федерального округа, который граничит с Северо-Западным, Сибирским и Приволжским округами, данная локализация является привлекательной с точки зрения охвата не только внутреннего рынка РФ, но и зарубежных рынков. Также рядом расположено множество предприятий-потребителей продуктов НПЗ.

### **Геология**

На основании геологических исследований месторождения, доказано, что приобское месторождение крупное и многопластовое. Запасы нефти оцениваются в 5 млрд тонн, из которых извлекаемыми являются 2,4 млрд тонн.

Территория месторождения находится в пойме реки Обь, ввиду чего, во время паводков, примерно 80% территории месторождения подвергается затоплению, поэтому данное месторождение классифицируется как труднодоступное. Строение песчаных тел по площади и разрезу также относится к классу сложных, что указывает на то, что без использования методов интенсификации добычи и активного вмешательства в продуктивные пласты коллектора добыча будет невозможна [12].

Исходя из вышесказанного, можно прийти к выводу, что предлагаемое НПЗ необходимо размещать вдали от впадин (котловин), чтобы минимизировать вероятность затопления и/или частичного разрушения конструкций.

### **Заключение**

В заключение всего вышеизложенного, документация, географическое положение Приобского месторождения, а также присутствие на его территории крупных нефтедобывающих компаний можно говорить о допустимости

возникновения Сибирского кластера на данной территории.

#### Список литературы:

1. Распоряжение Правительства Российской Федерации от 28 февраля 2019 г. № 348-р «План мероприятий («Дорожная карта») по развитию нефтегазохимического комплекса в Российской Федерации на период до 2025 года»
2. Государственная программа Российской Федерации от 15 апреля 2014 г. №328 «Развитие промышленности и повышение ее конкурентоспособности»
3. Приказ Минэнерго России от 6 июня 2011 г. №212 «Генеральная схема развития газовой и нефтяной отрасли на период до 2035 г.»
4. Подписано инвестиционное соглашение о стимулировании добычи нефти на Приобском месторождении [Электронный ресурс] // Минфин России. URL: [https://minfin.gov.ru/ru/press-center/?id\\_4=37370-podpisano\\_investitsionnoe\\_soglashenie\\_o\\_stimulirovanii\\_dobychi\\_nefti\\_na\\_priobskom\\_mestorozhdenii](https://minfin.gov.ru/ru/press-center/?id_4=37370-podpisano_investitsionnoe_soglashenie_o_stimulirovanii_dobychi_nefti_na_priobskom_mestorozhdenii)
5. Государственная программа Ханты-Мансийского автономного округа - Югры от 31 октября 2021г. №475-п «Воспроизводство и использование природных ресурсов»,
6. Публичная декларация государственной программы Ханты-Мансийского автономного округа - Югры от 31 октября 2021г. «Воспроизводство и использование природных ресурсов Югры» на 2022 год»
7. Голубева И.А., Родина Е.В. Газоперерабатывающие предприятия России. Статья 5. Сургутский завод стабилизации конденсата (ООО «Газпром переработка») // Нефтепереработка и нефтехимия. — 2015. — № 4. — С. 37—42.
8. Информационно-технический справочник по наилучшим доступным технологиям ИТС 30 – 2021 «Переработка нефти», Москва Бюро НДТ 2021
9. Электронный ресурс [https://gasforum.ru/ru/participants/gazpromneft-kataliticheskie-sistemy-ooo/] Дата обращения: 25.11.2022
10. Электронный ресурс [https://pronpz.ru/neftepererabatyvayushchie-zavody/mnpz.html]. Дата обращения: 12.04.2022
11. Пресс центр «Газпромнефть – МНПЗ»//Новости//Технологии «Биосферы» помогают беречь воду на НПЗ «Газпром нефти»// 25.11.2022
12. Альтемиров Д. В. Характеристика Приобского нефтяного месторождения //Молодой ученый. – 2017. – №. 3. – С. 204-207.

УДК 338

Ренжина В.И., Аверина Ю.М.

## Особенности трансфера технологий с Китаем

Ренжина Валерия Игоревна, студентка 1 курса магистратуры, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: valeriarenzhina@gmail.com;

Аверина Юлия Михайловна, к.т.н., доцент, заведующая кафедрой логистики и экономической информатики ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9

*В данной статье рассмотрены особенности технологического трансфера между Россией и Китаем, приведены федеральные законы, регулирующие технологический трансфер, а также описаны случаи успешного трансфера технологий между этими двумя странами.*

*Ключевые слова: трансфер технологий; Россия; Китай; нормативные документы; анализ областей для трансфера.*

## Features of technology transfer with China

Renzhina V.I., Averina Y.M.

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

*This article discusses the features of technology transfer between Russia and China, provides federal laws governing technology transfer, and describes cases of successful technology transfer between these two countries.*

*Keywords: technology transfer; Russia; China; regulations; analysis of areas for transfer.*

### Введение

Трансфер технологий является важным элементом экономического развития и сотрудничества между странами. С каждым годом и Россия, и Китай активно работают над технологическим развитием, внедрением новых технологий и укреплением экономических связей, что способствует повышению эффективности производства и улучшению качества жизни населения в обеих странах.

### Особенности технологического трансфера

Технологический трансфер представляет собой передачу знаний, ноу-хау и интеллектуальной собственности от одного субъекта к другому с целью создания, развития и продвижения новых технических и инновационных проектов, а также повышения эффективности производства. Особенности трансфера технологий России и Китая имеют свои преимущества и недостатки, а также определяются федеральными законодательными актами и ограничениями на использование патентов в конкретных отраслях промышленности [1].

Одной из отличительных особенностей трансфера технологий России является ограниченность во времени соглашений об интеллектуальной собственности. В России законодателем установлен срок действия права на изобретение - 20 лет с момента подачи заявки на патент. На конец 2020 года существовало ограничение на трансфер определенных патентов для защиты национальных интересов России в сфере высокотехнологичных отраслей, таких как производство оружия, космическая и ядерная промышленность. Патенты по таким отраслям требуют специального разрешения министерств, что может затруднить процесс технологического трансфера [2].

Китай является одним из крупнейших потребителей технологических новшеств, и китайские компании активно вступают в партнерства с иностранными предприятиями для технологического трансфера. Одной из целей китайских компаний при трансфере технологий является повышение качества своей продукции и конкурентоспособности на мировых рынках. Однако, в связи с этим, существует проблема нарушения интеллектуальной собственности, поскольку китайские компании часто не признают авторские права и свободно копируют технологии. В Китае существует ограничение на трансфер иностранных инвестиций в сферу высокотехнологичной промышленности. Примеры подобных ограничений могут быть связаны со следующими компаниями и их патентами:

1. Технологии связи и сетевые технологии, такие как 5G (Huawei);
2. Криптографические технологии и системы безопасности (Tencent и Alibaba);
3. Технологии искусственного интеллекта (Baidu и SenseTime);
4. Технологии производства и обработки материалов (Foxconn и BYD).

А также:

1. Военная техника и оборудование;
2. Ядерные технологии;
3. Медицинские технологии [3].

### Возможные области для трансфера технологий

При сохранении высокого уровня трансфера технологий между Россией и Китаем можно ожидать значительных научных достижений. Рассмотрим несколько областей, которые могут получить новые и значимые научные результаты:

1. Энергетика. В области энергетики Россия и Китай могут усилить сотрудничество в области

использования атомной энергии. Обмен научными достижениями может привести к созданию новых технологий для производства электрической энергии, которые могут быть использованы для снабжения городов и промышленных предприятий. Кроме того, Россия и Китай могут продолжить совместные исследования в области возобновляемых источников энергии, таких как солнечная и ветровая энергия.

2. Промышленность и производство. Сектор машиностроения и продуктов питания также имеют потенциал для использования совместных исследований и технологического трансфера между Россией и Китаем. Компании из этих стран могут сотрудничать в области проектирования и производства автомобилей, летательных аппаратов и других сложных механизмов.

3. Медицина. Россия и Китай могут продолжить сотрудничество в области исследований болезней и разработки новых лекарств. Технологический трансфер между этими странами может помочь ускорить процессы разработки, производства и тестирования новых лекарств [4].

Отдельно стоит упомянуть о предприятиях нефтегазохимического комплекса. В этой области Россия и Китай могут укрепить сотрудничество в области производства и поставки нефтепродуктов, газа и продуктов переработки. Кроме того, компании этих стран могут работать вместе над новыми технологиями, связанными с производством нефтехимических продуктов и сокращением вредных выбросов в атмосферу [5-6].

Таким образом, сохранение высокого уровня трансфера технологий между Россией и Китаем может привести к значительным научным достижениям в нескольких областях, включая энергетику, производство, медицину и нефтегазохимический комплекс.

#### **Примеры успешного трансфера технологий между Россией и Китаем**

В настоящее время сотрудничество между Российской Федерацией и Китайской Народной Республикой в области трансфера технологий активно развивается и приводит к конкретным достижениям в различных сферах.

Одним из ярких примеров такого сотрудничества является создание крупнейшей в России экспериментальной зоны сверхвысоких давлений в городе Южно-Сахалинск. Эта зона была создана при поддержке китайских партнеров и позволила проводить научные исследования в области энергетики и материаловедения. Успешным трансфером технологий из России в Китай является сотрудничество между российской компанией «Ростех» и китайским Сахуа. Компания Сахуа (Huawei) — это китайский технологический гигант, который занимается производством и продажей телекоммуникационного оборудования, смартфонов, планшетов, ноутбуков и других устройств. Российская компания передала свои технологии по созданию полупроводниковых материалов, что позволяет более эффективно использовать мощности

и повышать производительность технологических линий [7].

Россия и Китай активно сотрудничают в области космических технологий. В 2016 году Китай запустил первый свой космический спутник с российскими приборами, а также приобрел акции в проекте российского космического корабля «Восток», который должен стать конкурентом SpaceX.

Также следует отметить развитие транспортного сотрудничества между Россией и Китаем. В 2020 году была подписана сделка о строительстве железной дороги между Европой и Китаем через территорию России, которая упростит транспортировку грузов между континентами и сократит время доставки [8].

Кроме этого, Россией и Китаем было создано множество совместных предприятий, работающих в различных отраслях, включая тяжелую промышленность, энергетику, производство автомобилей и другие сферы.

Таким образом, сотрудничество между Россией и Китаем в области технологического трансфера активно развивается и приводит к реальным результатам, которые способствуют развитию экономики, науки и технологий в обеих странах.

#### **Регулирование трансфера технологий**

В Российской Федерации трансфер технологий регулируется несколькими законодательными и нормативно-правовыми актами, среди которых можно выделить:

1. Закон Российской Федерации «Об охране прав на селекционные достижения» от 14 июля 1993 года № 4595-1, который устанавливает правила охраны прав на селекционные достижения и обеспечивает защиту авторских прав селекционера.

2. Закон РФ «Об интеллектуальной собственности» от 29 декабря 2020 года № 552-ФЗ, который устанавливает правовые основы в области защиты и использования интеллектуальной собственности.

3. Постановление Правительства РФ от 28 июля 2014 года № 692 «Об утверждении Правил ведения Реестра ограничений на передачу иностранным юридическим и физическим лицам прав на пользование результатами интеллектуальной деятельности, подлежащими государственной секретности».

4. Постановление Правительства РФ от 29 сентября 2014 года № 971 «Об утверждении Правил оценки условий трансфера технологий и продукции, которые могут быть использованы при возникновении угрозы обороноспособности страны» [9-10].

В Китайской Народной Республике трансфер технологий регулируется несколькими законодательными и нормативно-правовыми актами, среди которых можно выделить:

1. Основные положения гражданского права КНР, которые включают разделы о владении и использовании прав на интеллектуальную собственность.

2. Закон Китайской Народной Республики «О науке и технологии».

3. Закон Китайской Народной Республики «Об охране прав на интеллектуальную собственность».

4. Национальная программа внедрения высоких технологий в Китае (Made in China 2025), которая определяет основные направления развития китайской экономики и научно-технических достижений.

5. Соглашение между правительством Китая и правительством России по сотрудничеству в области технологического трансфера.

Эти законы и нормативно-правовые акты регулируют трансфер технологий и интеллектуальной собственности, устанавливают правила оценки условий трансфера технологий и защиты интеллектуальной собственности.

### Заключение

Таким образом при изучении и соблюдении законов обеих стран и создании новых соглашений можно достичь высоких успехов в развитии различных отраслей, в том числе химической промышленности и транспорте нефти и нефтепродуктов. Это может быть достигнуто благодаря активному трансферу технологий и тесному сотрудничеству стран. Побочным эффектом данного сотрудничества будет являться улучшение отношений между Российской Федерацией и Китайской Народной Республикой.

### Список литературы:

1. Морозов А.Л., Юн Ю. Трансфер технологий в России и Китае: сравнительный анализ // Проблемы

теории и практики управления. - 2018. - №1(7). - С. 68–77.

2. Зарецкий А.П., Климов М.Ю. Проблемы и особенности трансфера технологий на китайский рынок // Экономика и управление. - 2019. - №6(156). - С. 34–39.

3. Ю Чэнь. Трансфер технологий в Китае и задачи российской науки и промышленности // Национальная безопасность и стратегическое планирование. - 2017. - №2. - С. 16–20.

4. Мяло И.М. Российское законодательство о трансфере технологий: обзор, оценка, перспективы развития // Корпоративное управление и инновационное развитие экономики Севера: материалы Международной научно-практической конференции. - 2019. - С. 108–111.

5. Островская Н.В., Тюкина Г.В. Законодательство Китая о трансфере технологий: особенности и применение // Современное право. - 2020. - №2. - С. 35–40.

6. Liu, Q., Shi, M., Du, J. Technology transfer or technological innovation? The efficiency of Chinese firms in absorbing foreign technology // Asia Pacific Journal of Management. - 2018. - Vol. 35, Issue 4. - P. 931-957.

7. Wang, Z., Wang, X. Analysis of China's foreign technology import and innovation ability during 13th Five-year Plan period // Journal of Chinese Economic and Business Studies. - 2018. - Vol. 16, Issue 4. - P. 369-385.

8. Федеральный закон от 29.07.2017 № 216-ФЗ "О технологическом оснащении производства и внедрении новой техники". - Статьи 5–7.

9. Федеральный закон от 23.07.1999 № 157-ФЗ "О технологическом оснащении и трансфере технологий". - Статьи 1–4.

УДК 658.5; 65.5

Цакаева Л.И., Свистун М.С., Ренжина В.И., Манюкова И.И.

## Применения системы контроллинга для энерго- ресурсосбережение на производстве бензина

Цакаева Ламара Исламовна, студентка 1 курса магистратуры, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: tsli1108@gmail.com;

Свистун Мария Сергеевна, студентка 1 курса магистратуры, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: svistun.mary@gmail.com

Ренжина Валерия Игоревна, студентка 1 курса магистратуры, факультета цифровых технологий и химического инжиниринга, e-mail: valeriarenzhina@gmail.com;

Манюкова Ирина Игоревна, к.т.н., доцент кафедры логистики и экономической информатики.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва.

В данной статье рассматривается применение системы контроллинга на производстве, а также приводятся преимущества данной системы на примере производства высококачественного бензина, соответствующего экологическому стандарту Евро-5. Производится сравнительный анализ эффективности предприятия до и после введения системы контроллинга.

Ключевые слова: контроллинг, KPI, производство бензина, энергосбережение, ресурсосбережение.

### The controlling system application for energy and resource saving in the production of gasoline

Tsakaeva L.I., Svistun M.S., Renzhina V.I., Manyukova I.I.

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

This article discusses the use of a controlling system in production, and also provides the advantages of this system on the example of the production of high-quality gasoline that meets the Euro-5 environmental standard. A comparative analysis of the efficiency of the enterprise before and after the introduction of the controlling system is carried out.

Key words: controlling, KPI indicators, gasoline production, energy saving, resource saving.

### Введение

Контроллинг – технология управления различными областями деятельности компании, включающая в себя:

1. определение целей деятельности;
2. отражение этих целей в системе показателей;
3. установление целевых значений показателей на определенный период (планирование);
4. регулярный контроль (измерение) фактических значений показателей;
5. анализ и выявление причин отклонений фактических значений показателей от плановых;
6. принятие на этой основе управленческих решений по минимизации отклонений.

Целевая задача контроллинга – построение на предприятии эффективной системы принятия, реализации, контроля и анализа управленческих решений [1].

### Технология получения бензина

Компаундирование бензинов — это производство товарных бензинов из сырья (нетоварных бензинов), методом вовлечения в его состав добавок и компонентов в заданных объемах [2]; повышение октанового числа товарных бензинов.

Высокооктановый компонент из установки каталитического крекинга после гидроочистки попадает на станцию смешивания, куда поступают и лёгкие бензиновые фракции, такие как изомеризат с установки изомеризация, риформат с установки риформинга, пентаны и бутаны с ГФУ и высокооктановые эфиры с ТАМЭ\*/МТБЭ\*\*. Здесь их снова соединяют, добавляют присадки и получают

бензины с разным октановым числом, которое зависит от пропорций всех компонентов (рис. 1).

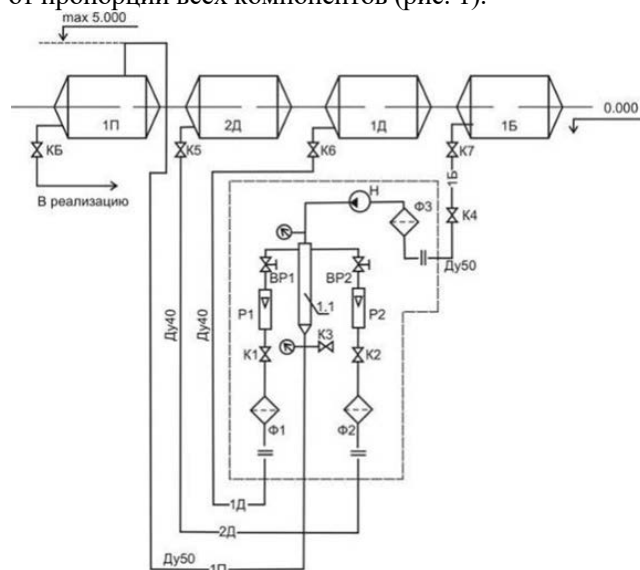


Рис. 1. Технологическая схема комплекса по изготовлению компаундированного бензина

### EURO+ стандарт

Евро-5 — это экологический стандарт, который регулирует содержание вредных веществ в выхлопных газах. С октября 2008 года использование только топлива стандарта Евро-5 для грузовых автомобилей стало обязательным, для легковых с 01.09.2009 года. 1 января 2016 года данный стандарт стал обязательным в России.

Нормы по выбросам: СН — до 0,05 г/км, СО — до 0,8 г/км и NO<sub>y</sub> — до 0,06 г/км.

МНПЗ смог полностью перейти на выпуск бензинов и дизельного топлива по стандарту Евро-5 еще в 2013 году, на три года раньше установленного срока. После того как автомобили перешли на топливо по стандарту Евро-5 выбросы загрязняющих веществ в атмосферу Москвы от автомобильного транспорта сократились на 23%.

#### **Показатели KPI в контроллинге**

KPI (*Key Performance Indicators*) являются важной частью контроллинга, поскольку они помогают измерять эффективность производственного процесса и оценивать результаты деятельности компании [3]. Процесс использования KPI в контроллинге обычно включает в себя следующие шаги:

1. Установление KPI. На этом этапе выбираются KPI, которые наиболее точно отражают цели и стратегию компании. Например, если компании важны быстрота выполнения заказов и время, затрачиваемое на производство, то могут быть установлены такие KPI, как Время производства, Сроки доставки и т.д.

2. Сбор данных. После установления KPI необходимо начать сбор данных, которые позволят измерять и анализировать их состояние. Для этого можно использовать различные инструменты и системы учета, такие как Конвейер, ERP, MES и т.д.

3. Анализ данных. Полученные данные анализируются и интерпретируются для определения тенденций и причин возможных изменений. Это позволяет идентифицировать проблемы и улучшать производственные процессы.

4. Корректировка производственных процессов. Анализ данных может привести к выявлению необходимости изменения производственных процессов. Корректировка производственных процессов позволяет улучшить KPI и достичь большей эффективности.

5. Отчетность. После анализа данных и корректировки производственных процессов генерируются отчеты, которые позволяют представить информацию о KPI на различных уровнях руководства. Эти отчеты могут включать в себя графики, таблицы и другие визуализации данных [4].

#### **Важность KPI на производстве**

Далее представлены несколько преимуществ использования KPI и контроллинга в производстве [5]:

1. *Оптимизация производственного процесса:* KPI позволяют оценить эффективность производственного процесса и идентифицировать слабые места, где можно улучшить производительность. Контроллинг дает возможность следить за выполнением планов и принимать управленческие решения, если происходят отклонения от стандартов.

2. *Улучшение качества продукта:* показатели KPI и методы контроллинга позволяют отслеживать качество продукции и идентифицировать проблемы, связанные с некачественной продукцией. Так, при производстве бензина стандарта EURO+ контроллинг позволяет отслеживать процесс соблюдения стандартов, а KPI - определять технологические

параметры, гарантирующие выпуск качественного топлива.

3. *Сокращение затрат:* KPI и контроллинг могут помочь выявить области, где можно сократить расходы и ресурсы. Например, показатели KPI могут помочь идентифицировать для производства бензина EURO+ процессы, которые нуждаются в оптимизации, чтобы снизить издержки на соответствие стандартам.

4. *Улучшение планирования:* методы KPI и контроллинга могут быть использованы для получения данных о производственном процессе, которые помогут улучшить бизнес-планы и стратегии развития компании, в том числе для производства бензина EURO+, которое требует высокой точности планирования.

5. *Определение и управление рисками:* KPI и контроллинг предоставляют информацию о рисках, связанных с производственным процессом, и помогают принимать меры для их предотвращения или управления, чтобы защитить бизнес и его заинтересованные стороны [6].

#### **Пример из прошлого**

В 2010 году компания BP стала участником крупнейшей экологической катастрофы на нефтяном секторе в США, когда нефтяная вышка Deepwater Horizon была разрушена, что привело к выбросу миллионов баррелей нефти в Мексиканский залив. Эта трагедия показала, что без контроля и надзора производственной деятельности на местах, необходимый уровень безопасности не может быть обеспечен.

В связи с этим событием было принято множество мер по улучшению системы контроля и управления рисками в производстве нефти, включая более тщательный контроль за выполнением стандартов, более частое обновление и проверку оборудования, повышение уровня обучения персонала и создание специальных мероприятий для улучшения безопасности.

#### **Текущая ситуация:**

Контроль качества и безопасности на нефтяных предприятиях по-прежнему является одной из наиболее важных задач в производстве [7]. В частности, при производстве нефти высшего качества, такой как нефть с низким содержанием серы, необходимо строго контролировать технологические параметры для получения продукта, соответствующего требованиям потребителей и стандартам.

KPI и контроллинг могут помочь в этом процессе, позволяя отслеживать результативность производства, снижение издержек и оптимизацию производственных процессов. Примером может служить использование KPI и контроллинга для оптимизации производства нефти с низким содержанием серы в Норвегии. В этой стране меры контроля включают в себя измерение качества нефти по нескольким параметрам, таким как сульфатный и кислотный числа, плотности нефти, содержания воды и серы, а также поддержание строгого контроля за процессами, такими как добыча, переработка и транспортировка [8].

Эти меры позволяют соблюдать стандарты качества и безопасности, улучшить качество продукции и сократить издержки на производство нефти с низким содержанием серы в производственной

среде, где качество и безопасность являются первоочередными приоритетами.

При проведении анализа производства до и после применения системы контроллинга получены следующие данные (Таблица 1).

Таблица 1. Сравнение качества без KPI и контроллинга и с использованием системы контроллинга и KPI

Показатели и улучшения	Без KPI и контроллинга	С KPI и контроллингом
Оптимизация производства	Нет контроля за эффективностью производства, нет оценки потенциала улучшений	Анализ и оценка текущей эффективности производства, выявление узких мест и слабых мест, определение потенциала для улучшения эффективности производства.
Контроль качества продукции	Нет контроля качества продукции, низкое качество и надежность	Надежный контроль качества продукции, обнаружение проблем в производстве и устранение их.
Сокращение затрат	Высокие затраты на производство, несвоевременная оптимизация производственных процессов	Повышение эффективности производства, сокращение издержек на производство, отслеживание расходов и нахождение способов их сокращения.
Определение планов и стратегий	Отсутствует планирование на долгосрочную перспективу, несвоевременное развитие производства	Анализ рынка, разработка бизнес-стратегии, управление рисками, выявление возможностей для введения новых технологий.
Управление рисками	Низкий уровень безопасности и отсутствие эффективных мер по риск-менеджменту	Управление рисками и контроль за выполнением стандартов, защита бизнеса и заинтересованных сторон.

Как можно видеть, использование KPI и контроллинга имеет ряд преимуществ в производстве нефти, таких как оптимизация производства, контроль качества продукции, сокращение затрат, определение стратегии развития бизнеса и управление рисками. Без KPI и контроллинга производственные процессы могут быть неэффективными, ненадежными и небезопасными, что может привести к серьезным последствиям для бизнеса и окружающей среды.

#### Заключение

После анализа вышесказанного можно сделать вывод, что показатели KPI и контроллинг являются полезными инструментами для управления и оптимизации производственных процессов и производства в целом, помогают повысить качество продукции и снизить затраты, а также поддерживают принятие эффективных решений. В случае производства бензина стандарта EURO+, их использование помогает соблюдать высокие стандарты качества и безопасности, а также сокращать финансовые издержки.

#### Список литературы:

1. Роберт С. Каплан, Дэвид П. Нортон. Сбалансированная система показателей: воплощение стратегии в действие. Harvard Business Review Press, 1996. 342 стр.
2. Синтия Антуан, Жан-Батист Леонар, Северин Салей. Система измерения эффективности и выбор показателей в низкоуглеродной проектно-

ориентированной нефтяной компании. Журнал чистого производства, 2014, Vol. 64, стр. 583–594.

3. Марк Грант. Ключевые показатели эффективности (KPI): Получение верховного преимущества от своего бизнес-плана. Альпина Паблишер, 2013. 320 с.

4. С. А. Шамех, Х. М. Элхенави, М. А. Алаа. Разработка ключевых показателей эффективности нефтехимических проектов: обзор литературы и предлагаемая методология. Всемирная академия наук, техники и технологий, 2018, т. 1, с. 12, № 7, стр. 1059–1069.

5. Кристина Шнитка, Манфред Райхерт. Включение аспектов контроля в мониторинг процессов для управления бизнес-процессами на основе KPI. Конспект лекций по обработке деловой информации, 2018, Vol. 313, стр. 19-34.

6. Ричард Миа, Стэнли Чемб. Применение сбалансированной оценочной карты в мониторинге деятельности нефтегазовых компаний. Дж. Аккаунт. Автобус. Финансовые рез., 2019, т. 1, с. 3, № 4, стр. 317-330.

7. Саад Альджохани, Ричард Китченхэм. Определение ключевых показателей эффективности проектов по бурению нефтяных и газовых скважин с использованием систематического обзора литературы и мнений экспертов. Энергии, 2020, Т. 1, с. 13, № 9, стр. 1-27.

8. Мешалкин В.П. Ресурсоэнергоэффективные методы энергообеспечения и минимизации отходов нефтеперерабатывающих производств: основы теории и наилучшие практические результаты. – М. – Гелуа: Химия, 2009. – 393 с.



УДК 004.8

Куниевский В.В., Дударов С.П.

### **Проектирование интерфейса пользователя программного обеспечения для нейросетевой кластеризации данных**

Куниевский Валерий Владимирович, студент 3 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Дударов Сергей Павлович, к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий;

dudarov@muctr.ru,

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва.

*С каждым годом нейросетевые методы набирают все большую популярность в области анализа данных и машинного обучения. Однако, процесс кластеризации данных с использованием нейросетевых алгоритмов может быть сложным для пользователя без опыта работы с программным обеспечением. Для решения этой проблемы необходимо разработать удобный и интуитивно понятный интерфейс, который позволит пользователям без специальных знаний в области программирования эффективно использовать нейросетевую кластеризацию данных. В этой статье рассматривается проектирование такого интерфейса пользователя программного обеспечения для нейросетевой кластеризации данных.*

*Ключевые слова: нейронные сети, методы кластеризации, нейронная сеть Кохонена, программное обеспечение, интеллектуальный анализ данных.*

### **Designing a software user interface for neural network clustering of data**

Kunievskiy V.V., Dudarov S.P.

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

*Every year neural network methods are gaining more and more popularity in the field of data analysis and machine learning. However, the process of clustering data using neural network algorithms can be difficult for a user without experience with software. To solve this problem, it is necessary to develop a convenient and intuitive interface that will allow users without special programming knowledge to effectively use neural network clustering of data. This article discusses the design of such a software user interface for neural network clustering of data.*

*Keywords: neural networks, clustering methods, Kohonen neural network, software, data mining.*

Задача проектирования интерфейса пользователя программного обеспечения всегда остается актуальной, так как при ее решении следует учитывать все современные требования к воспроизведению рабочего программного инструмента на новых платформах. Мультидисциплинарное и многоотраслевое использование искусственных нейронных сетей, в свою очередь, вынуждают сосредоточиться на решении соответствующих проблем и при разработке средств интеллектуального анализа данных. Рассмотрим особенности проектирования пользовательского интерфейса современного программного обеспечения для нейросетевой кластеризации данных.

Перед проектированием программного обеспечения необходимо определиться с использованием нейронной сети в зависимости от требуемых результатов, целей кластеризации. В данной статье в примерах будет использована нейронная сеть Кохонена, обучающаяся без учителя, которая используется для кластеризации данных. Она состоит из вектора входных переменных и слоя Кохонена [1]. На входы сети подаются данные для кластеризации, а слой Кохонена выполняет распределение объектов по кластерам путем сравнения входных данных с прототипами, формирующими каждый кластер. Формирование кластера зависит как от случайного порядка примеров, предъявляемых сети в процессе обучения,

так и от архитектуры нейронной сети с соответствующим алгоритмом обучения. Так для нейронной сети адаптивного резонанса ART-2, решающей аналогичную задачу, используется не только другой состав этапов алгоритма с расчетными соотношениями, но и иные методы предварительной обработки данных [2].

Для пользователей программного обеспечения, решающего задачи кластеризации данных, важно понимать, как работает выбранная нейронная сеть и какой тип обучения следует использовать в конкретной ситуации. Это поможет эффективно использовать программное обеспечение для достижения желаемых результатов кластеризации данных.

После выбора нейронной сети следует продумать функциональное наполнение программного обеспечения, чтобы дать пользователю максимальные возможности для достижения требуемых целей. При всем этом следует учитывать, что интерфейс программного инструмента должен быть интуитивно понятным, а также защищенным от некорректной работы с ним, то есть необходимо предусмотреть весь спектр ошибок и исключительных ситуаций, которые могут возникать в ходе работы.

Для программного обеспечения нейросетевой кластеризации характерна функциональная структура, представленная на рис. 1.

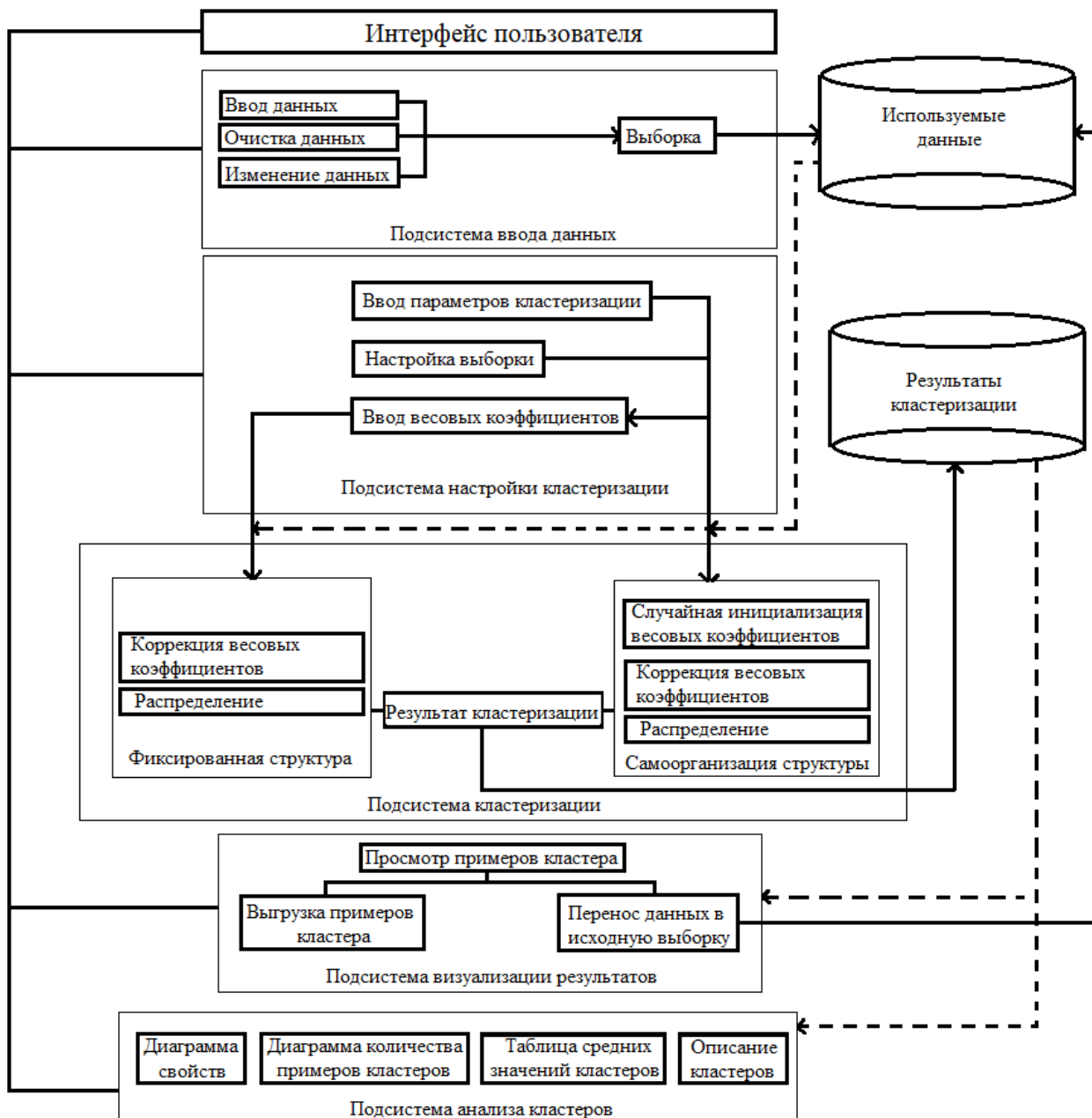


Рис.1. Функциональная структура программного обеспечения для нейросетевой кластеризации данных

Как мы можем видеть на рис.1, функциональная структура включает в себя 5 основных подсистем. При этом следует учитывать, что одна из них, а именно подсистема кластеризации, не связана напрямую с визуализацией исходных данных или результатов.

Рассмотрим подробнее подсистемы данной схемы.

В подсистеме ввода данных происходит внесение выборки и ее редактирование с возможностью считывания данных из нескольких файлов, после чего, в случае если среди выбранных признаков кластеризации в обучающем примере имеются пробелы, он не будет использован в процессе кластеризации, а также кластерного анализа.

Подсистема настройки кластеризации имеет в себе возможности для определения варианта кластеризации, который будет использован, путем

заполнения определенных в данной подсистеме параметров.

По значениям параметров, полученным из ранее описанной подсистемы настройки кластеризации, происходит выбор вида обучения нейронной сети. Данную часть программного обеспечения мы можем видеть в подсистеме кластеризации, которая не видна пользователю во избежание ошибок в работе программы.

Полученные данные записываются в программу для последующего дообучения и анализа кластеров. В данной схеме подсистема визуализации результатов дает возможность просмотра примеров с последующим переносом данных конкретного кластера в качестве исходной выборки либо же выгрузки информации о них в файл.

В приведенной на рис. 1 функциональной структуре присутствует подсистема анализа кластеров, необходимая для удобства работы

пользователя при выделении закономерностей и зависимостей в данных. Она включает различные диаграммы для графической интерпретации результатов, а также таблицы с подробным описанием кластеров.

После определения функциональной структуры можно приступить к программной составляющей приложения, при этом не забывая о том, что интерфейс программы должен быть интуитивно понятен и удобен для работы с ней. Один из способов повышения удобства работы пользования с программным инструментом – выделение нескольких функционально обособленных страниц, привязанных, как правило, к рассмотренным выше подсистемам.

На рис. 2 представлен один из вариантов реализации подсистемы ввода данных с использованием таблицы для демонстрации примеров, добавленных в исходную выборку, а также кнопки для редактирования сделанной выборки.

Среди параметров кластеризации следует по возможности выделить группы для интуитивно понятной настройки алгоритма. На рис. 3 приведен пример реализации подсистемы настройки кластеризации с учётом указанной выше рекомендации.

На рис. 4 показан пример реализации интерфейса подсистемы визуализации результатов нейросетевой кластеризации. Для удобства просмотра примеров, попавших в какой-либо из кластеров, аналогично странице исходных данных, используется табличное представление данных.

Реализация подсистемы анализа полученных кластеров приведена на рис. 5. Как можно увидеть на изображении, данный вариант реализации предусматривает возможность просмотра значений в кластерах с помощью диаграмм и в таблице с содержанием средних значений по каждому свойству.

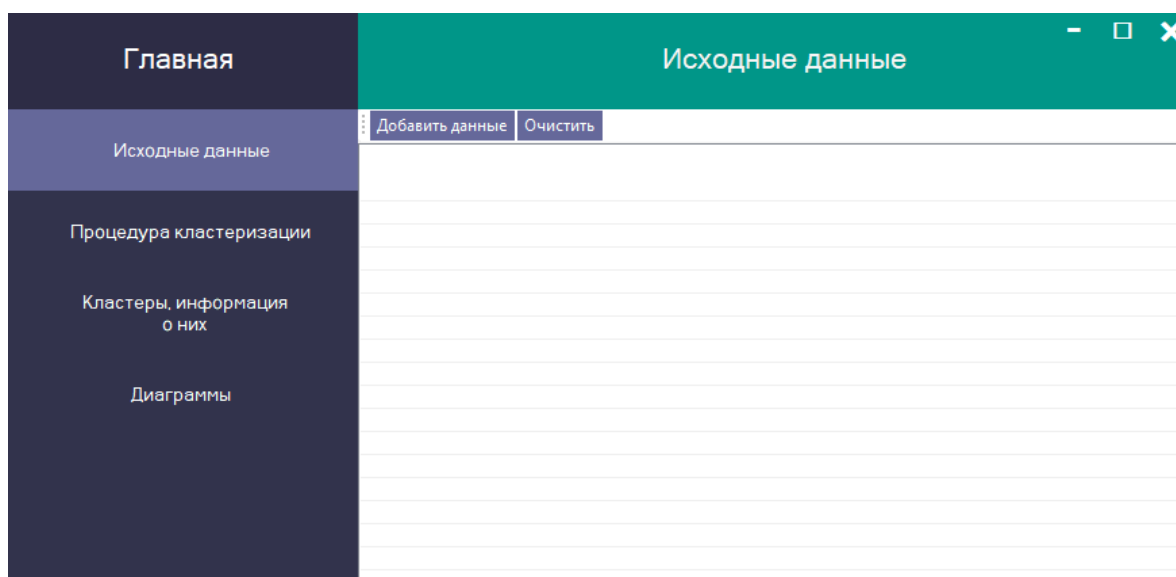


Рис.2. Интерфейс подсистемы ввода данных

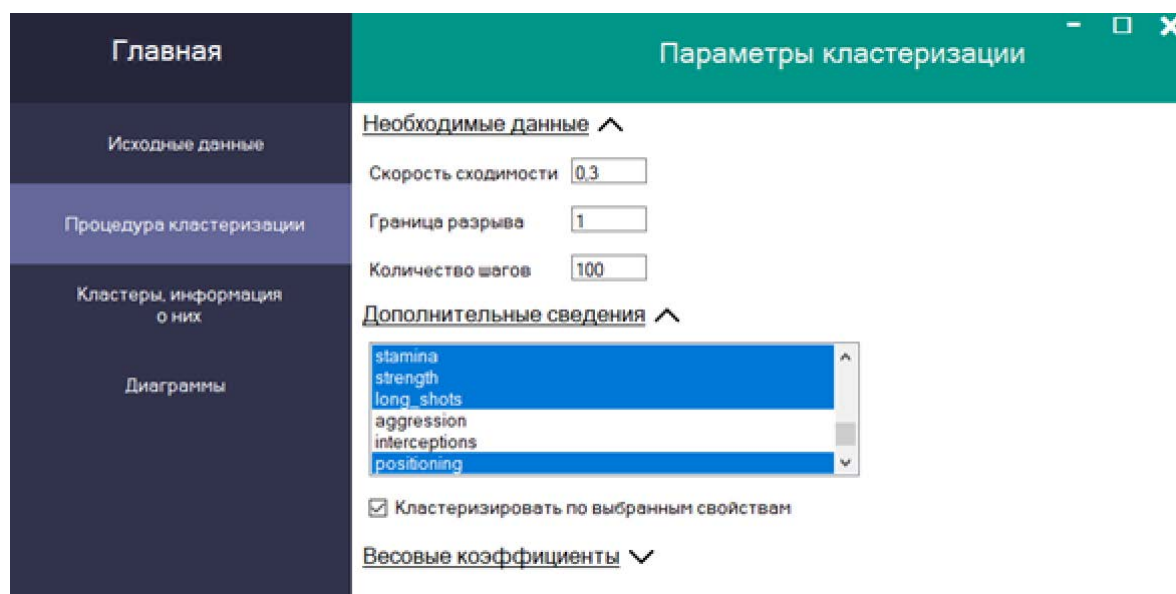


Рис.3. Интерфейс подсистемы настройки кластеризации

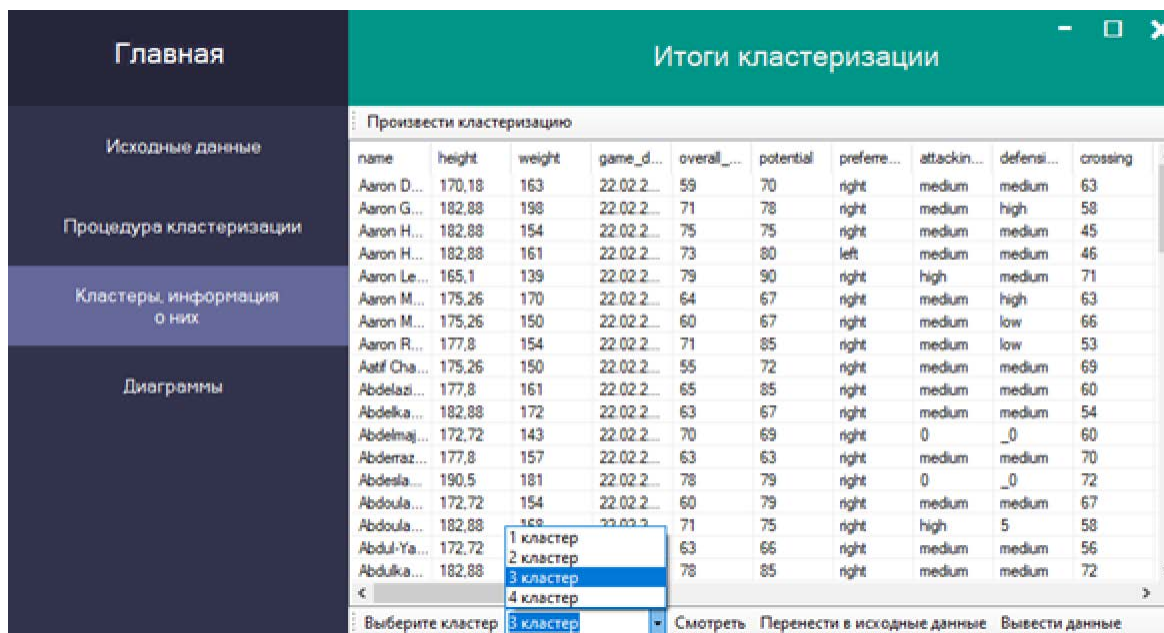


Рис.4. Интерфейс подсистемы визуализации результатов

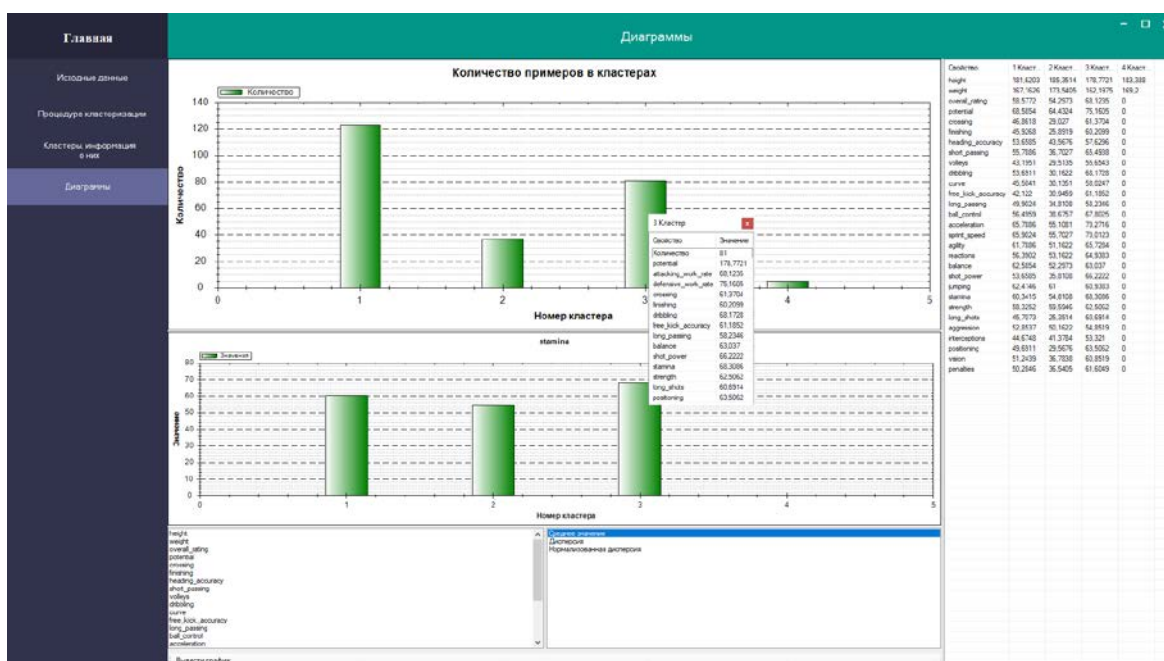


Рис.5. Интерфейс подсистемы анализа кластеров

С помощью реализованных диаграмм и таблиц пользователь может получить представление о том, какие значения свойств были определены в каждом кластере и как они отличаются от значений в других кластерах. Это помогает лучше понять, какие характеристики объединяют объекты в каждом кластере, и может представлять собой важную информацию для принятия решений.

Таким образом, проектирование удобного интерфейса для нейросетевой кластеризации данных с последующим анализом результатов является важной составляющей процесса исследования данных.

В заключение следует отметить, что нейросетевая кластеризация данных – это важный аналитический инструмент, который позволяет исследовать большие массивы данных. Применение методов нейросетевой кластеризации особенно полезно в областях, где необходимо анализировать большие объемы

информации: при медицинской диагностике, финансовом анализе, в маркетинговых исследованиях и т. д. Целесообразность использования нейронных сетей для анализа данных заключается в их способности работать с данными высокой размерности и извлекать из них скрытые закономерности, обычно незаметные специалисту.

### Список литературы

1. Kohonen T. Self-Organizing Maps. – Berlin; Heidelberg; New York; Barcelona, Hong Kong, London, Milan, Paris, Singapore, Tokyo: Springer, 2001. – 501 p.
2. Дударов С. П. Модели самоорганизующихся искусственных нейронных сетей для идентификации стационарных промышленных источников загрязнения воздуха. – Математическое моделирование, 2017, Т. 29, № 1. – С. 33–44.

УДК 004.942

Краснов Д.О., Сидоренко Н.В., Дьячков П.Н., Кольцова Э.М.

**Генерация электромагнитного поля в хиральных медных нанотрубках**Краснов Дмитрий Олегович – главный специалист отдела разработки и внедрения АИС; krasnov.d.o@muctr.ru  
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Сидоренко Никита Викторович – студент 3 курса бакалавриата кафедры информационных компьютерных технологий; sidorenko.n.v@muctr.ru

Дьячков Павел Николаевич – д. х. н., профессор, главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии; p\_dyachkov@rambler.ru

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Россия, Москва, 119991, Ленинский пр-т, дом 31.

Кольцова Элеонора Моисеевна – д. т. н., профессор, заведующий кафедрой информационных компьютерных технологий; koltsova.e.m@muctr.ru

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*Рассчитаны электромагнитные поля в хиральных медных нанотрубках. Показано, что очень большие поля могут быть реализованы в нанобъемах с помощью наноантенн из хиральных нанотрубок. Собственные частоты компонентов поля лежат в рентгеновском диапазоне. Хиральные нанотрубки из меди являются перспективными материалами для создания наносоленоидов с сильными магнитными полями.**Ключевые слова: моделирование, магнитные свойства, нанотрубки, квантовая химия***Generation of electromagnetic field in chiral copper nanotubes**Krasnov D.O.<sup>1</sup>, Sidorenko N.V.<sup>1</sup>, Dyachkov P.N.<sup>2</sup>, Kol'tsova E.M.<sup>1</sup><sup>1</sup> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation<sup>2</sup> Institute of General and Inorganic Chemistry. N.S. Kurnakov RAS, Moscow, Russian Federation*Electromagnetic fields in chiral copper nanotubes are calculated. It is shown that very high fields can be realized in nanovolumes using nanoantennas made of chiral nanotubes. The eigenfrequencies of the field components lie in the X-ray range. Chiral copper nanotubes are promising materials for creating nanosolenoids with strong magnetic fields.**Key words: modeling, magnetic properties, nanotubes, quantum chemicals***Введение**

Наноструктуры и нанотрубки из различных материалов в последние десятилетия вызывают все больший интерес у ученых. Это связано с их малыми размерами и уникальными физико-химическими и электронными свойствами, которые отличаются от свойств объемных материалов. По этой причине нанотрубки используются во многих областях химии, физики и нанoeлектроники [1-5]. Достижения в области нанoeлектроники привели к тому, что сильно вырос интерес ученых к разработке наноразмерных соленоидов, в которых электромагнитные поля генерируются винтовыми потоками электронов. Предыдущие расчеты показали, что хиральные одностенные нанотрубки с металлическим типом электронного строения могут стать идеальными наносоленоидами [6-10]. Среди металлических нанотрубок большое внимание привлекают медные трубки, которые обладают высокой коррозионной стойкостью, тепло- и электропроводностью, и низким удельным сопротивлением.

Цель данной работы – расчет электромагнитного поля в хиральных медных нанотрубках.

**Метод расчета**

Для расчета электронной структуры хиральных нанотрубок из меди был использован метод

линеаризованных присоединенных цилиндрических волн (ЛПЦВ) [11]. Метод основан на одноэлектронной модели, и задача расчета электронных уровней сводится к решению одноэлектронного уравнения Шрёдингера. Электронный потенциал строится с использованием приближения локальной плотности для обменного взаимодействия. Каждый атом в системе окружен сферой, где потенциал предполагается сферически симметричным и постоянным в пространстве между ними. В нанотрубках движение электронов ограничено цилиндрическим слоем, примерно вдвое превышающим ван-дер-ваальсовский радиус элемента, что учитывается введением двух не пропускающих электроны цилиндрических барьеров (внешнего и внутреннего). Электронный спектр этой системы определяется свободным движением электронов в межатомном пространстве между цилиндрическими барьерами и рассеянием электронов на атомном центре.

В хиральных нанотрубках переменный электрический ток генерирует образование электромагнитного поля  $B_z(r)\exp(-i\omega t)$ , индуцирующее, в соответствии с законом Фарадея, образование азимутального электрического поля  $E_\phi(r)\exp(-i\omega t)$ , которое находится следующим образом:

$$\frac{\partial B_z(r)}{\partial r} = i\mu_0 \varepsilon_0 \omega E_\varphi(r) \quad (1)$$

где,  $\mu_0$  - магнитная постоянная, равная  $4\pi \times 10^{-7}$  Гн/м;

$\varepsilon_0$  - электрическая постоянная, равная  $c^2/\mu_0$ ;

$c$  - скорость света, равная 299 792 458 м/с или  $299\,792\,458 \cdot 10^{10}$  Å/с. Аксиальное электрическое поле  $E_z(r)$  и азимутальное магнитное поле  $B_\varphi(r)$  на порядок слабее, и ими можно пренебречь.

Подставляя  $E_\varphi$  в уравнение (1) для  $B_z$ , получаем дифференциальное уравнение второго порядка для расчета магнитного поля:

$$\frac{\partial^2 B_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial B_z}{\partial r} + k^2 B_z = 0, \quad (2)$$

где,  $k^2 = \mu_0 \varepsilon_0 \omega^2$ .

Это уравнение Бесселя, решение которого:

$$B_z(r) = A_1 J_0(kr),$$

выражается через функцию Бесселя нулевого порядка  $J_0(kr)$ . Теперь электрическое поле  $E_\varphi$  из уравнения (1) соленоида может быть рассчитано в виде:

$$E_\varphi(r) = \frac{i\omega A_1}{k} J_1(kr), \quad (4)$$

где,  $J_1(kr)$  - функция Бесселя первого порядка  $J_1(z) = -J_1'(z)$ .

Идеальная проводимость нанотрубки подразумевает равенство нулю электрического поля на нанотрубке и магнитного поля за ее пределами.

$$E_\varphi(R) = J_1(kR) = 0, \quad (5)$$

$$B_z(R) = A_1 J_0(kR) = \mu_0 I_0 \nu, \quad (6)$$

Собственные значения волнового вектора  $k$  для полей  $B_z$  и  $E_\varphi$  с минимальной собственной частотой  $f$  и энергией определяются из условия: произведение  $kR$  совпадает с первым корнем  $\delta = 3.832$  функции Бесселя первого порядка  $k = \delta/R$ . При этом

$$A_1 = \frac{\mu_0 \nu (n_1 + n_2) G_0 U_0}{J_0(kR)}, \quad (7)$$

Подставив значение из уравнений (5-7) в уравнения (3, 4) получим:

$$B_z(r) = \frac{J_0(kr) \mu_0 \nu (n_1 + n_2) G_0 U_0}{J_0(kR)}, \quad (8)$$

$$E_\varphi(r) = \frac{c J_1(kr) \mu_0 \nu (n_1 + n_2) G_0 U_0}{J_0(kR)}, \quad (9)$$

$$f(B_z) = f(E_\varphi) = \frac{\delta c}{2\pi R'} \quad (10)$$

### Результаты расчетов

Осудим результаты расчетов электромагнитных полей медных нанотрубок, полученных путем подставления параметров электронной структуры трубок, уравнения для расчета которых приведены в предыдущих публикациях [10, 12], представленных в табл. 1 в уравнения 8-10.

На рис. 1 приведены частоты низкоэнергетических собственных колебаний электромагнитного поля в зависимости от радиуса нанотрубок. Видно, что медные трубки излучают в рентгеновском диапазоне  $f = (1-9) \times 10^{17}$  Гц, и уменьшение радиуса трубки сопровождается ростом частоты поля. Собственные частоты (5,  $n_2$ ) нанотрубок смещены в высокочастотную область относительно частот трубок ряда (10,  $n_2$ ) и (20,  $n_2$ ).

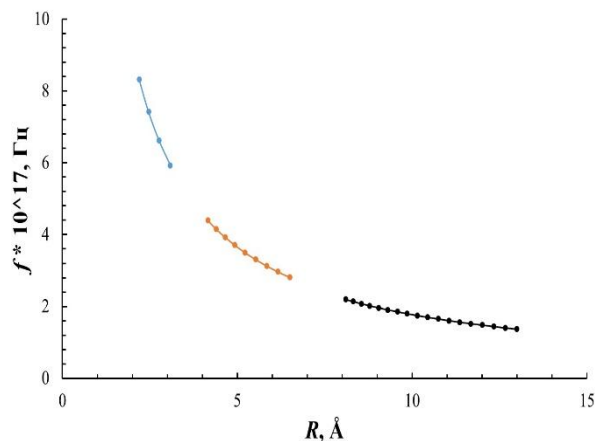


Рис. 1. Собственные частоты колебаний электромагнитного поля в медных нанотрубках. Результаты для трубок ряда (5,  $n_2$ ) обозначены синим цветом, (10,  $n_2$ ) - оранжевым и (20,  $n_2$ ) - черным.

На рис. 2 изображены радиальные зависимости компонент магнитного и электрического полей для нанотрубок ряда (5,  $n_2$ ). На границе нанотрубок магнитное поле  $B_z$  совпадает с полем  $B_0$ , возникающим при прохождении постоянного тока. Максимальное по абсолютной величине магнитное поле - в центре трубки при  $r = 0$ . С увеличением  $r$  магнитное поле ослабевает, принимает нулевое значение, меняет знак и возрастает, как это следует из оценки  $B_z(r) \sim J_0(kr)$  и изменения функции Бесселя нулевого порядка  $J_0(kr)$  в зависимости от  $r$ .

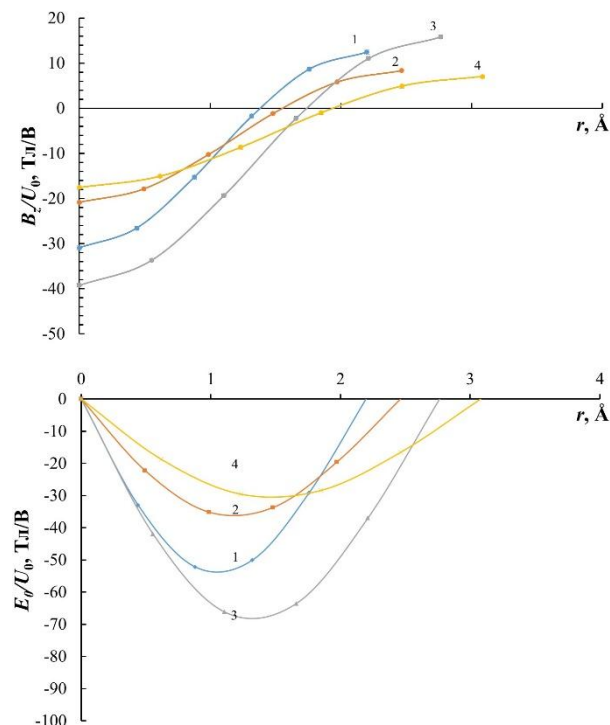


Рис. 2. Радиальные зависимости компонент магнитного и электрического полей медных (5,  $n_2$ ) трубок. Номера у кривых соответствуют значениям  $n_2$ .

Электрическое поле  $E_\varphi(r)$  обнуляется в центре нанотрубки и на ее поверхности. При переходе от центра трубки к поверхности поле по абсолютной величине сначала возрастает, а затем падает.

Радиальные вариации электрического поля  $E_\varphi(r)$  отражают изменения функции Бесселя первого порядка, так как  $E_\varphi(r) \sim J_1(kr)$ . Наиболее сильное поле у нанотрубки (5, 3), так как она обладает наибольшим количеством витков тока на единицу длины трубки в ряду (5,  $n_2$ ).

Таблица 1. Структурные параметры некоторых хиральных медных нанотрубок.

$n_1, n_2$	R, Å	$v, 1/\text{Å}$
(5, 1)	2,20	2,132
(5, 2)	2,46	1,230
(5, 3)	2,76	2,029
(5, 4)	3,08	0,805
(10, 1)	4,16	4,441
(10, 2)	4,40	1,066
(10, 3)	4,65	1,678
(10, 4)	4,93	0,615
(10, 5)	5,22	0,158
(10, 6)	5,53	1,014
(10, 7)	5,84	4,861
(10, 8)	6,17	0,402
(10, 9)	6,50	0,806

### Заключение

Рассчитаны электромагнитные поля в хиральных медных нанотрубках. Показано, что очень большие поля могут быть реализованы в нанобъемах с помощью нанополос из хиральных нанотрубок. Собственные частоты компонентов поля лежат в рентгеновском диапазоне. Хиральные нанотрубки из меди являются перспективными материалами для создания наносоленоидов с сильными магнитными полями.

### Список литературы

1. Manno D. et al. Synthesis and characterization of starch-stabilized Ag nanostructures for sensors applications // Journal of Non-Crystalline Solids. 2008. V. 354. №. 52-54. P. 5515-5520.

2. Abou El-Nour K. M. M. et al. Synthesis and applications of silver nanoparticles // Arabian journal of chemistry. 2010. V. 3. №. 3. P. 135-140.

3. Thompson D. T. Using gold nanoparticles for catalysis // Nano Today. 2007. V. 2. №. 4. P. 40-43.

4. Huang D. et al. Plastic-compatible low resistance printable gold nanoparticle conductors for flexible electronics // Journal of the electrochemical society. 2003. V. 150. №. 7. P. G412.

5. Shamraiz U. et al. Gold nanotubes and nanorings: Promising candidates for multidisciplinary fields // International Materials Reviews. 2019. V. 64. №. 8. P. 478-512.

6. Zhang Z. Y., Miao C., Guo W. Nano-solenoid: helicoid carbon-boron nitride hetero-nanotube // Nanoscale. – 2013. V. 5. №. 23. P. 11902-11909.

7. Xu F. et al. XTRANS: An electron transport package for current distribution and magnetic field in helical nanostructures // Computational materials science. 2014. V. 83. P. 426-433.

8. Khoroshavin L. O. et al. Electronic properties of achiral and chiral gold nanotubes // Russian Journal of Inorganic Chemistry. 2017. V. 62. №. 6. P. 783-789.

9. Дьячков П. Н., Дьячков Е. П. Взаимодействие хиральных золотых нанотрубок с переменным магнитным полем // Журнал неорганической химии. 2022. Т. 67. №. 2. С. 203-207.

10. Краснов Д. О., Женса А. В., Кольцова Э. М. Магнитные свойства хиральных медных нанотрубок // Computational nanotechnology. 2022. Т. 9. №. 3. С. 68-72.

11. D'yachkov P. N., Makaev D. V. Account of helical and rotational symmetries in the linear augmented cylindrical wave method for calculating the electronic structure of nanotubes: Towards the ab initio determination of the band structure of a (100, 99) tubule // Physical Review B. 2007. V. 76. №. 19. P. 195411.

12. Краснов Д. О., Кольцова Э. М. Изучение генерации магнитного поля в хиральных медных нанотрубках // Computational nanotechnology. 2022. Т. 9. №. 4. С. 17-21.

УДК 532.13+531.75

Иванов А.А., Митричев И.И.

**Расчёт физико-химических свойств масел и хладагентов**

Иванов Артемий Андреевич – бакалавр 4-го года обучения кафедры информационных компьютерных технологий; 191017@muctr.ru.

Митричев Иван Игоревич – к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва.

В статье рассмотрены различные методы для расчёта таких физико-химических свойств масел и хладагентов, как динамическая и кинематическая вязкости и плотность как функции температуры и давления, и результаты этих расчётов.

Ключевые слова: расчёт вязкости, расчёт плотности, R22, R115, PEC6

**Calculation of physicochemical properties of oils and refrigerants**

Ivanov A. A., Mitrichev I.I.

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

The article discusses various methods for calculation of such physicochemical properties of oils and refrigerants as kinematic and dynamic viscosities and density as functions of temperature and pressure and results of such calculations.

Key words: calculation of viscosity, calculation of density, R22, R115, PEC6

**Введение**

При работе компрессора происходит диффузия масла, используемого для смазывания внутренних компонентов, и газов, используемых для охлаждения механизма компрессора. Смазывающие качества получившейся смеси существенно отличаются от смазывающих качеств масла, в соответствии с чем появляется необходимость по заданным параметрам температуры, давления и долей примесей в смеси рассчитать вязкость смеси, чтобы сделать вывод о смазывающих качествах и возможной замене масла. Для расчёта вязкости смеси требуется знать вязкость индивидуальных компонентов вне смеси. Расчету этих свойств и посвящена данная работа.

**Теоретическая часть**

Во последующие расчёты производились на языке Python3 путём реализации метода расчета в качестве функции и минимизации значения функции AAD (1) с помощью метода minimize библиотеки SciPy [1]

$$AAD(x_{exp}, x_{calc}) = \frac{\sum_{i=0}^N \frac{|x_{exp} - x_{calc}|}{x_{exp}}}{N} * 100\% \quad (1)$$

где  $x_{exp}$  – данные, полученные в ходе эксперимента, а  $x_{calc}$  – рассчитанные значения в тех же точках.

В качестве модели для расчёта динамической вязкости была выбрана модель VFT, так как она показала абсолютное среднее отклонение (далее AAD) в 0,003% при расчёте вязкости масла PAG3 [2]. Уравнение этой модели имеет вид

$$\mu(p, T) = D \left( \frac{p + G_0 + G_1 T + G_2 T^2}{p_{ref} + G_0 + G_1 T + G_2 T^2} \right)^H \exp \exp \left( \frac{E}{T - F} \right) \quad (2)$$

где  $\mu$  – динамическая вязкость вещества при температуре  $T$  [К] и давлении  $P$  [Па\*с],

$p_{ref}$  – давление, при котором производится минимизация параметров  $D$ ,  $E$  и  $F$ ,

$D$ ,  $E$ ,  $F$ ,  $G_{0-2}$  и  $H$  – параметры модели.

Расчёт параметров происходит в 2 этапа:

1) Расчёт параметров  $D$ ,  $E$  и  $F$  при постоянном давлении  $p_{ref}$ . При этом множитель с параметрами  $G_{0-2}$  и  $H$  сокращается, упрощая модель до вида (3).

2) Расчёт параметров  $G_{0-2}$  и  $H$  при  $P \neq P_{ref}$ .

Таблица 1. Параметры для уравнения (2) различных веществ

	R22	R115	PEC6 32 ISO VG
$D$	0,0186	9,0340e-05	0,0543
$E$	674,46	-1848,5	940,01
$F$ , К	391,24	1174,4	152,78
$G_0$	9946,4	-36,787	-
$G_1$	197,76	-2,4475	-
$G_2$	-0,0278	-0,0344	-
$H$	-52,598	-0,0002	-
AAD, %	2,6777	0,0241	-
AAD DEF, %	3,5583	0,0281	0,62723

В таблице 1 приведены параметры, необходимые для расчёта вязкости по уравнению VFT для хладагентов R22 и R115 (экспериментальные данные взяты из [3]) и масла PEC6 32 ISO VG (экспериментальные данные взяты из [4]). В связи с тем, что по маслу данные были взяты при одном давлении, параметры  $G_{0-2}$  и  $H$  не рассчитывались.

Графики рассчитанной динамической вязкости для масла одного из хладагентов приведены на рис. 1-2

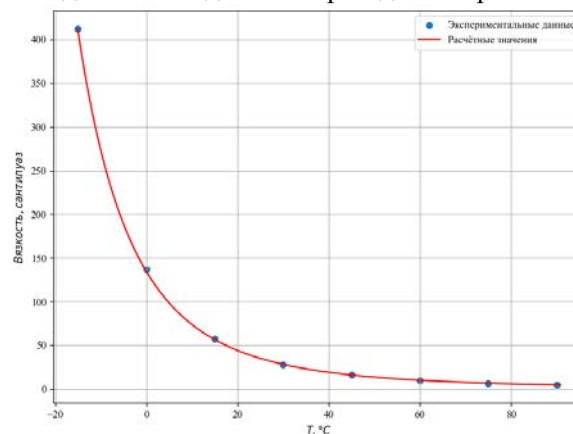


Рис. 1. График динамической вязкости для масла PEC6 32 ISO VG.



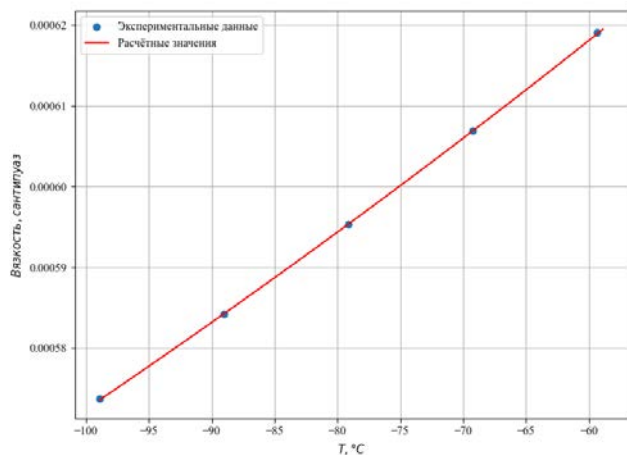


Рис.2. График динамической вязкости для хладагента R22.

Как мы можем заметить, при использовании упрощённой версии модели без учёта давления ошибка существенно не изменяется (0,8806% для R22 и 0,0406% для R115). В связи с этим, далее в этой статье для расчёта динамической вязкости будет использоваться следующее уравнение:

$$\mu(T) = D \exp \exp \left( \frac{E}{T - F} \right) \quad (3)$$

Для расчёта плотности использовалось уравнение

$$\rho(t, p) = \frac{\rho_0 * \left( 1 - \frac{(p - p_0)}{E} \right)}{\left( 1 + \beta(t - t_0) \right)} \quad (4)$$

и модифицированная формула Тейта

$$\rho(t, p) = \frac{A_0 + A_1 T + A_2 T^2}{1 - C \ln \ln \left( \frac{B_0 + B_1 T + B_2 T^2 + p}{B_0 + B_1 T + B_2 T^2 + p_{ref}} \right)} \quad (5)$$

Таблица 2. Параметры для уравнения (4) для хладагентов R22 и R115

	R22	R115
E	6,089*10 <sup>13</sup>	1,2189*10 <sup>13</sup>
$\beta$	0,00174	0,00189
AAD, %	0,09322	0,11776

Таблица 3. Параметры для уравнения (5) для хладагентов R22 и R115

	R22	R115
A <sub>0</sub>	1151,5	1294,4
A <sub>1</sub>	-6,5362	-6,5587
A <sub>2</sub>	-0,02406	-0,02103
C	0,0005	2,6337
B <sub>0</sub>	452,15	452,16
B <sub>1</sub>	-1,51	-1,5737
B <sub>2</sub>	0,13301	10,508
AAD, %	0,3089	0,2735

График рассчитанной плотности для одного из хладагентов приведён на рис. 3.

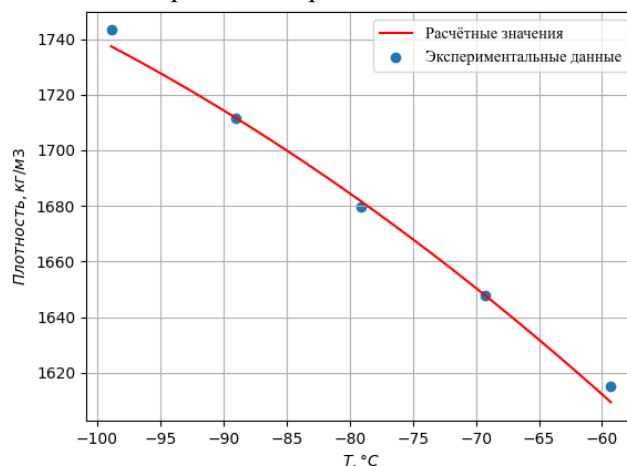


Рис.3. График плотности для хладагента R115.

Как можно заметить, при расчёте большую точность показала модель (5) с величиной ~0,15% для среднего абсолютного отклонения от расчетных данных.

Зная динамическую вязкость и плотность, мы можем легко рассчитать кинематическую вязкость по уравнению (6)

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (6)$$

где  $\nu$  – кинематическая вязкость,  $\mu$  – динамическая вязкость и  $\rho$  – плотность.

### Заключение

Модель VFT показала хорошие результаты при использовании для расчёта вязкости как масла 32 ISO VG, так и хладагентов R22 и R115. В частности, модификация без использования параметров, зависящих от давления, не показала существенных отклонений от экспериментальных данных.

Из моделей расчёта плотности модифицированная формула Тейта показала себя хуже, вследствие чего для расчёта вязкости смеси использоваться не будет.

### Список литературы

1. SciPy: сайт. – URL: <https://scipy.org/> (дата обращения 16.05.2023)
2. Paredes X. et al. Pressure–viscosity coefficients for polyalkylene glycol oils and other ester or ionic lubricants //Tribology Letters. 2012. – Т. 45. – С. 89-100.
3. eThermo, Thermodynamics&Transport Properties: сайт. – URL: [ethermo.us](http://ethermo.us) (дата обращения 16.05.2023)
4. Lin L., Kedzierski M. A. Density and viscosity of a polyol ester lubricant: Measurement and molecular dynamics simulation //International Journal of Refrigeration. – 2020. – Т. 118. – С. 188-201.

УДК 544.774.2

Комарова Д.С., Мочалова М.С., Ловская Д.Д.

## Исследование процесса внедрения гидрохлорида лидокаина в частицы хитозанового аэрогеля для разработки местного гемостатического средства с анестезирующим эффектом

Комарова Дарья Сергеевна – студент группы МК-16; darya.komarowa2000@yandex.ru.

Мочалова Мария Сергеевна – младший научный сотрудник кафедры химического и фармацевтического инжиниринга;

Ловская Дарья Дмитриевна – к.т.н., старший научный сотрудник кафедры химического и фармацевтического инжиниринга;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, 123514, Москва, ул. Героев Панфиловцев, дом 20.

*В представленной статье исследован процесс внедрения гидрохлорида лидокаина на этапе замены растворителя для получения частиц хитозанового аэрогеля с внедренным анестетиком. Внедрение анестетика в частицы хитозанового геля (1% масс.) было проведено с варьированием концентрации раствора гидрохлорида лидокаина. С применением метода высокоэффективной жидкостной хроматографии была определена величина массовой загрузки анестетика в полученных частицах аэрогеля. Полученные экспериментальные данные были использованы для определения констант уравнений Ленгмюра, Дубинина-Радушкевича.*

*Ключевые слова: аэрогель, хитозан, гидрохлорид лидокаина, местное гемостатическое средство*

## Investigation of the process of impregnating lidocaine hydrochloride into chitosan-based aerogel particles for the development of a local hemostatic agent with an anesthetic effect

Komarova D.S., Mochalova M.S., Lovskaya D.D.

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

*In the present article, the process of impregnating lidocaine hydrochloride at the solvent replacement stage to obtain chitosan-based aerogel particles with an impregnated anesthetic is investigated. The impregnation of an anesthetic into chitosan-based gel particles (1% by weight) was carried out with varying concentrations of lidocaine hydrochloride solution. Using the method of high-performance liquid chromatography, the value of the mass loading of the anesthetic in the obtained aerogel particles was determined. The experimental data obtained were used to determine the constants of the Langmuir, Dubinin-Radushkevich equations.*

*Key words: aerogel, chitosan, lidocaine hydrochloride, local hemostatic agent*

### Введение

Применение хитозана в качестве сырья позволяет получить аэрогель со следующими характеристиками: высокая пористость (до 99%); высокая удельная поверхность (до 600 м<sup>2</sup>/г); микро-, мезо- и макропористая структура; большой объем пор (до 1,3 см<sup>3</sup>/г); низкая плотность (от 0,05 г/см<sup>3</sup>); высокая сорбционная емкость по воде (сорбция до 60 г воды на грамм биополимера); гемостатическая активность; антибактериальная и антиоксидантная активности; отсутствие токсичности; биосовместимость; биоразлагаемость; регенеративная активность [1, 2].

Одной из наиболее перспективных областей применения аэрогеля на основе хитозана является применение в качестве гемостатического средства [2]. На настоящий момент на рынке не представлено гемостатическое средство, удовлетворяющее всем требованиям (остановка кровотечения в течение 2-5 минут из крупной артерии и вены, простота применения раненым, высокая длительность хранения, дешевизна и т.д.) [3]. К непосредственным плюсам применения аэрогелей на основе хитозана в качестве гемостатического средства можно отнести возможность внедрения активных фармацевтических субстанций (АФС) в аэрогель для придания терапевтических свойств, которые особенно

актуальны при повреждении тканей [4]. В частности, купирование болевого синдрома является одной из приоритетных задач, т.к. имеется риск возникновения болевого шока, при котором повышается вероятность летального исхода [5]. В данной работе представлены исследования, посвященные процессу внедрения гидрохлорида лидокаина в структуру частиц хитозанового аэрогеля на этапе замены растворителя для разработки местного гемостатического средства с анестезирующим эффектом.

Внедрение АФС на этапе замены растворителя реализуется посредством заполнения пор частиц гидрогеля раствором АФС (АФС растворено в применяемом для подготовки к сверхкритической сушке растворителе) и последующей сверхкритической сушки. В ходе процесса сушки сверхкритический флюид (в данной работе применяется сверхкритический диоксид углерода) выступает в роли антирастворителя. Вследствие большой разницы растворимости АФС в растворителе и, к примеру, в сверхкритическом диоксиде углерода, происходит осаждение АФС в аэрогеле. Для успешной реализации метода необходимо, чтобы внедряемая АФС растворялась в растворителе, применяемом для подготовки геля к сверхкритической сушке, и являлась нерастворимой (малорастворимой) в

сверхкритическом флюиде. Гидрохлорид лидокаина удовлетворяет данным требованиям, растворимость АФС в изопропиловом спирте (в данной работе применяется в качестве растворителя для подготовки геля к сверхкритической сушке) составляет 943 г/л, в сверхкритическом диоксиде углерода при температуре 45°C и диапазоне давлений 100-148 бар растворимость гидрохлорида лидокаина составляет 0,099 г/л – 0,184 г/л [6, 7].

Процесс адсорбции АФС в поры хитозанового аэрогеля на этапе замены растворителя может быть описан с применением уравнений адсорбции: Ленгмюра, Дубинина-Радушкевича и др. [8, 9]. Данные уравнения применяются для отражения зависимости величины адсорбции от равновесной концентрации раствора/отношения равновесной концентрации раствора к концентрации предельной. Каждое уравнение имеет свои допущения, в частности, некоторые уравнения могут быть использованы для описания только мономолекулярной адсорбции [8, 9]. Одним из способов определения заполненности адсорбционного слоя/адсорбционных слоев является расчет с применением Ван-дер-Ваальсовой поверхности молекулы.

Возможность описания процесса адсорбции АФС в хитозановый аэрогель с применением уравнений мономолекулярной/полимолекулярной адсорбции позволяет использовать полученные уравнения для прогнозирования требуемых параметров проведения процесса внедрения для достижения заданных дозировок гидрохлорида лидокаина, следовательно, расширяются возможности применения гемостатического средства для купирования болевых синдромов различной интенсивности. В данной работе были получены частицы хитозанового аэрогеля с внедренным гидрохлоридом лидокаина. На основе полученных экспериментальных данных был осуществлен расчет заполненности адсорбционного слоя/адсорбционных слоев АФС. На основании полученных данных были определены константы уравнений Ленгмюра и Дубинина-Радушкевича и построены зависимости между равновесной концентраций и величиной адсорбции и определены относительные ошибки расчета в процентах.

### Экспериментальная часть

В ходе данного исследования были получены частицы хитозанового геля (1% масс.) капельным методом, проведено внедрение гидрохлорида лидокаина в частицы геля на этапе замены растворителя и осуществлена сверхкритическая сушка. Методики получения частиц геля и проведения сверхкритической сушки описаны в данной статье [2]. Процесс получения частиц аэрогеля на основе хитозана можно разделить на следующие этапы: приготовление исходных растворов, гелеобразование частиц, отмывка частиц до нейтрального pH, ступенчатая замена растворителя, внедрение АФС, сверхкритическая сушка.

Для приготовления 1% раствора хитозана был подготовлен 0,1М раствор уксусной кислоты в

который порционно был внесен порошок хитозана заданной массы, растворение проводилось при постоянном перемешивании раствора. Для процесса гелеобразования и формирования частиц, в раствор 1М гидроксида натрия поступал раствор хитозана со скоростью 1мл/мин, подача осуществлялась с применением шприцевого насоса Sono-Tek 12-05126 Dual Syringe Pump. На этапе ступенчатой замены растворителя применялись водные растворы изопропилового спирта со следующими концентрациями: 10%-30%-50%-70%-90%-100%-100%-100% (% масс.). Частицы геля выдерживались в каждом растворе изопропилового спирта не менее 2 часов.

Для осуществления внедрения гидрохлорида лидокаина были приготовлены растворы со следующими концентрациям АФС в изопропиловом спирте (Таблица 1).

Таблица 1. Концентрации растворов гидрохлорида лидокаина в изопропиловом спирте применяемые при внедрении на этапе замены растворителя

Образец	C, г/мл
O-1	0,011
O-2	0,022
O-3	0,054
O-4	0,081

Подготовленные частицы хитозанового геля выдерживались в растворе гидрохлорида лидокаина на протяжении 24 часов при постоянном перемешивании лабораторным шейкером Elmi Sky Line Shaker S-3. Далее частицы упаковывались в пакеты из фильтровальной бумаги, проводилась сверхкритическая сушка, были получены частицы хитозанового аэрогеля с внедренным гидрохлоридом лидокаина.

Одним из основных показателей успешного внедрения АФС в материал является массовая загрузка АФС, которая рассчитывается по следующей формуле (1):

$$w = \frac{m_{\text{АФС}}}{m_{\text{АФС}} + m_{\text{аэрогель}}} * 100\% \quad (1)$$

где,  $m_{\text{АФС}}$  – масса гидрохлорида лидокаина, г;  $m_{\text{аэрогель}}$  – масса аэрогеля, г.

Для определения массовой загрузки гидрохлорида лидокаина была проведена высокоэффективная жидкостная хроматография по следующей методике: колонка C18; подвижная фаза – метанол/вода/триэтиламин (58/42/0,4 об.), pH которой был скорректирован до 3 ортофосфорной кислотой; скорость потока – 1,0 мл/мин; объем закола – 20 мкл; УФ детектор – 240 нм; температура – 25°C [10]. Процесс осуществлялся на жидкостном хроматографе Agilent 1220 Infinity LC. Для определения концентрации АФС в растворе были заранее подготовлены растворы гидрохлорида лидокаина с известными концентрациями, на основании хроматограмм данных растворов была построена калибровочная прямая зависимости концентрации

раствора от площади пика соответствующего АФС. Для проведения аналитического исследования навеска заданной массы полученного образца выдерживалась в дистиллированной воде на протяжении 24 ч., анализу подвергалась проба полученного раствора. Путем пересчета с использованием данных о массе навески частиц и объеме дистиллированной воды вычисляли массовую загрузку, полученные результаты массовой загрузки гидрохлорида лидокаина в частицах аэрогеля представлены в виде таблицы (Таблица 2).

Таблица 2. Массовые загрузки частиц с внедренным гидрохлоридом лидокаина

Образец	w, %
О-1	4,56
О-2	7,35
О-3	16,63
О-4	19,17

Наблюдается повышение массовой загрузки при возрастании концентрации раствора гидрохлорида лидокаина в изопропиловом спирте. Полученный диапазон массовых загрузок частиц аэрогелей позволяет говорить о возможности получения гемостатического средства с заданным содержанием АФС и, как следствие, соблюдение дозирующего режима пациента.

Для определения заполненности адсорбционного слоя/адсорбционных слоев АФС использовался Ван-дер-Ваальсовый объем молекулы гидрохлорида лидокаина ( $212 \text{ \AA}^3$ ) [11]. Данный объем принимался равным объему эквивалентной сферы. Далее находилась площадь сферы, которая является проекцией молекулы АФС на поверхность аэрогеля. Суммарную удельную площадь поверхности ( $\text{м}^2/\text{г}$ ), которую занимают молекулы АФС на поверхности аэрогеля, рассчитывали по следующей формуле (2).

$$S_{\text{мол}} = S_{1\text{мол}} \cdot N_A \cdot A_{\text{АФС}} \quad (2)$$

где,  $S_{1\text{мол}}$  – площадь проекции одной молекулы АФС,  $\text{м}^2$ ;  $N_A = 6.02 \cdot 10^{23}$  ( $\text{моль}^{-1}$ ) – число Авогадро;  $A_{\text{АФС}}$  – загрузка активной субстанции в аэрогель,  $\text{моль}/\text{г}$ .

Доля заполненности адсорбционного слоя/числа заполненных адсорбционных слоев высчитывается как отношение площади проекции одной молекулы АФС к удельной поверхности аэрогеля. В данной работе удельная поверхность аэрогеля равна  $177 \text{ м}^2/\text{г}$ . Результаты расчета доли заполненности адсорбционного слоя/числа заполненных адсорбционных слоев для всех полученных образцов представлены в виде таблицы (Таблица 3).

Таблица 3. Результаты расчета доли заполненности адсорбционного слоя/числа заполненных адсорбционных слоев

Образец	$S_{\text{мол}}, \text{м}^2/\text{г}$	n
О-1	43,88	0,248
О-2	69,90	0,395
О-3	158,96	0,898
О-4	183,30	1,036

На основании полученных данных о заполненности адсорбционного слоя можно сделать вывод, что для описания процесса внедрения на этапе замены растворителя могут быть применимы уравнения адсорбции описывающие мономолекулярную адсорбцию. К таким уравнениям относятся уравнение Ленгмюра и Дубинина-Радушкевича [8, 9].

Для определения констант данных уравнений были использованы равновесные концентрации раствора АФС, которые были получены путем определения концентрации растворов после выдерживания частиц методом высокоэффективной жидкостной хроматографии (Таблица 4).

Таблица 4. Равновесные концентрации растворов гидрохлорида лидокаина в изопропиловом спирте полученные при осуществлении внедрения на этапе замены растворителя

Образец	Сравн, г/мл
О-1	0,0062
О-2	0,0123
О-3	0,0427
О-4	0,0655

Для определения константы уравнения Ленгмюра и константы уравнения Дубинина-Радушкевича используется графический метод и линейная форма уравнений. В данной работе была построена зависимость отношения концентрации к величине адсорбции от концентрации. С применением метода наименьших квадратов была получена линия тренда и описывающее её уравнение (рис. 1).

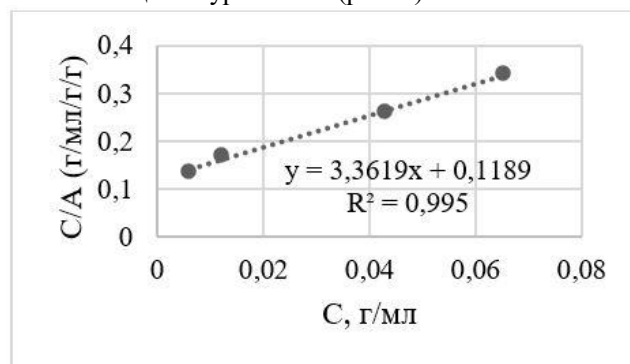


Рис. 1. Графический метод определения константы уравнения Ленгмюра

При использовании полученных данных была вычислена константа уравнения Ленгмюра, как отношение углового коэффициента линии тренда к свободному коэффициенту линии тренда (28,3).

Был построен график зависимости логарифма величины адсорбции от логарифма отношения концентрации равновесной к концентрации предельной во второй степени. На основании метода наименьших квадратов была проведена линия тренда (рис. 2). По оси ординат линия отсекает значение  $-k(RT)^2$  ( $T = 298 \text{ K}$ ).

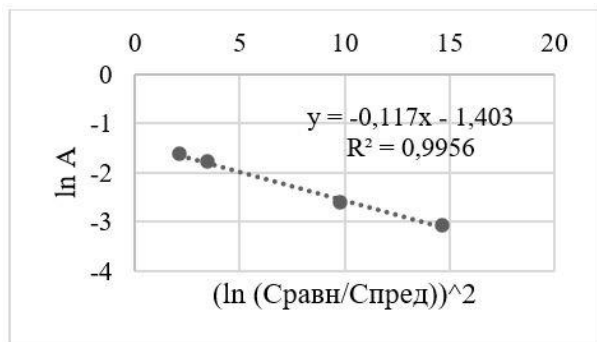


Рис.2. Графический метод определения константы уравнения Дубинина-Радушкевича

На основании полученного уравнения линии тренда была определена константа уравнения Дубинина-Радушкевича (0,017).

С применением рассчитанных констант уравнение Ленгмюра и уравнение Дубинина-Радушкевича принимают вид (3, 4):

$$A_{\text{расч}} = A_{\infty} \frac{28,3 \cdot C_{\text{равн}}}{1 + 28,3 \cdot C_{\text{равн}}} \quad (3)$$

$$\ln \ln A_{\text{расч}} = \ln A_{\infty} - 0,017 \cdot (8,314 \cdot 10^{-3} \cdot 298)^2 \cdot \left( \ln \frac{C_{\text{равн}}}{C_{\text{пред}}} \right)^2 \quad (4)$$

где,  $A_{\text{расч}}$  – величина адсорбции, полученная при использовании уравнения, г/г;

$A_{\infty}$  – предельная величина адсорбции г/г;

$C_{\text{равн}}$  – равновесная концентрация, г/мл.

На основании полученных уравнений построена зависимость между концентрацией/отношением концентрации равновесной к концентрации предельной и величиной адсорбции (рис. 3, рис. 4).

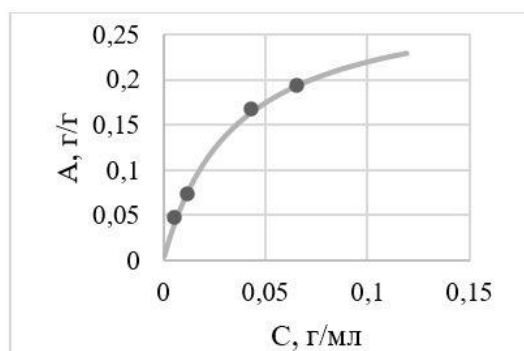


Рис.3. Зависимость величины адсорбции от концентрации на основании уравнения Ленгмюра

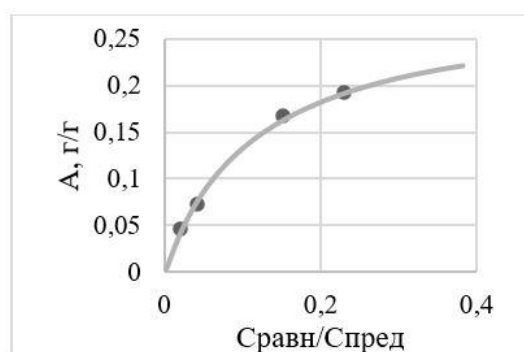


Рис.4. Зависимость величины адсорбции от  $C_{\text{равн}}/C_{\text{пред}}$  на основании уравнения Дубинина-Радушкевича

Для каждой расчетной точки было определена относительная ошибка в процентах от экспериментально полученной величины адсорбции (5).

$$\delta = \frac{|A_{\text{расч}} - A| \cdot 100\%}{A} \quad (5)$$

где,  $A_{\text{расч}}$  – величина адсорбции, полученная при использовании уравнения, г/г;

$A$  – величина адсорбции полученная экспериментально, г/г.

Полученная средняя относительная ошибка составила 2,9% при применении уравнения Ленгмюра, средняя относительная ошибка от экспериментальных данных при использовании полученного уравнения Дубинина-Радушкевича составила 3,2%. По полученным данным можно сделать вывод о описании экспериментальных точек (которые соответствуют долям заполнения мономолекулярного адсорбционного слоя) с отклонением <10%, следовательно, уравнения позволяют получить значения адсорбции, приближенные к экспериментальным.

### Заключение

На основании полученных экспериментальных данных было установлено, что внедрение на этапе замены растворителя позволяет получать частицы хитозанового аэрогеля с внедренным гидрохлоридом лидокаина. Повышение концентрации раствора гидрохлорида лидокаина в изопропиловом спирте для проведения внедрения позволяет получить частицы с большей массовой загрузкой. В ходе исследования были получены образцы с различной массовой загрузкой, поэтому существует возможность разработки местных гемостатических средств с различным содержанием гидрохлорида лидокаина для применения в случае болевых синдромов различной силы. На основании экспериментальных данных были получены уравнения адсорбции Ленгмюра и Дубинина-Радушкевича, которые описывают экспериментальные данные с относительной ошибкой 2,9% и 3,2% соответственно. Полученные уравнения в перспективе могут быть использованы для прогнозирования параметров внедрения гидрохлорида лидокаина в частицы для получения частиц хитозанового аэрогеля с требуемой дозировкой гидрохлорида лидокаина.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РХТУ им. Д.И. Менделеева, прикладной научно-исследовательский проект молодых штатных работников РХТУ им. Д.И. Менделеева в рамках программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» № ВИГ-2022-007.*

### Список литературы

1. Menshutina N. et al. Chitosan Aerogel Particles as Nasal Drug Delivery Systems // Gels. – 2022. – Т. 8. – №. 12. – С. 796-812.
2. Lovskaya D. et al. Chitosan-based aerogel particles as highly effective local hemostatic agents. production

- process and in vivo evaluations // *Polymers*. – 2020. – Т. 12. – №. 9. – С. 2055-2066.
3. Гоменюк Д. Т., Куперин А. С., Трусов В. А. Проблема выбора оптимального местного гемостатического средства для оказания первой помощи на поле боя // *Вестник Совета молодых учёных и специалистов Челябинской области*. – 2018. – Т. 4. – №. 3 (22). – С. 56-59.
4. López-Iglesias C. et al. Vancomycin-loaded chitosan aerogel particles for chronic wound applications // *Carbohydrate polymers*. – 2019. – Т. 204. – С. 223-231.
5. Марусанов В. Е., Семкичев В. А. Травматический шок (догоспитальный этап) // *Скорая медицинская помощь*. – 2009. – Т. 10. – №. 1. – С. 39-45.
6. Zhou G. et al. Determination and correlation of solubility with thermodynamic analysis of lidocaine hydrochloride in pure and binary solvents // *Journal of Molecular Liquids*. – 2018. – Т. 265. – С. 442-449.
7. Weinstein R. D. et al. The solubility of benzocaine, lidocaine, and procaine in liquid and supercritical carbon dioxide // *Journal of Chemical & Engineering Data*. – 2004. – Т. 49. – №. 3. – С. 547-552.
8. Травин С. О. и др. Кинетическое моделирование изотерм адсорбции // *Химическая физика*. – 2019. – Т. 38. – №. 11. – С. 5-15.
9. Nandiyanto A. B. D. et al. Isotherm adsorption characteristics of carbon microparticles prepared from pineapple peel waste // *Communications in Science and Technology*. – 2020. – Т. 5. – №. 1. – С. 31-39.
10. Xu Y., Wong G. Y. Simultaneous determination of lignocaine hydrochloride, chlorhexidine gluconate, and triamcinolone acetonide in suspension by reversed-phase HPLC // *Journal of liquid chromatography & related technologies*. – 1999. – Т. 22. – №. 13. – С. 2071-2091.
11. McNulty M. M. et al. Charge at the lidocaine binding site residue Phe-1759 affects permeation in human cardiac voltage-gated sodium channels // *The Journal of physiology*. – 2007. – Т. 581. – №. 2. – С. 741-755.

УДК 66.012-52.001.2:004.42(75)

Купцова А.С., Михайлова П.Г.

## Разработка учебно-методических материалов для развития дисциплины «Универсальные программные средства решения математических задач» и реализация в Moodle

Купцова Ангелина Сергеевна – студентка группы К-42; angelinachkaa.k.ss@gmail.com.

Михайлова Павла Геннадьевна – к.т.н., доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов; mikhailova.p.g.@muctr.ru.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В статье рассмотрены универсальные программные средства для решения задач химии и химической технологии, приведены результаты разработки учебно-методических материалов для дисциплины «Универсальные программные средства решения математических задач» и реализации контрольных тестов в соответствующем курсе на учебном портале РХТУ им. Д.И. Менделеева, созданном на основе LMS Moodle.*

*Ключевые слова: химическая технология, компьютерные технологии, Moodle, язык программирования R, Scilab.*

## Development of educational and methodological materials to improve the discipline «Universal software tools for solving mathematical tasks» and implementation in Moodle

Kuptsova A.A., Mikhailova P.G.

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

*The article deals with universal software tools for solving problems in chemistry and chemical technology, the results of the development of educational and methodological materials for the discipline «Universal software tools for solving mathematical tasks» and implementation of the control tests in the corresponding course on the educational portal of D.I. Mendeleev University of Chemical Technology, created on the basis of LMS Moodle.*

*Key words: chemical technology, computer technology, Moodle, R programming language, Scilab.*

### Введение

В современном мире во многих сферах деятельности человека информационные технологии играют важную роль.

Благодаря использованию электронных вычислительных машин (ЭВМ) становится возможным распознавание различных химических структур с помощью химических и физико-химических баз данных, а также генерация наборов этих структур с заданными параметрами, такими как состав, наличие функциональных групп и т.д., что позволяет решать задачи по поиску зависимостей структуры от свойства веществ. При автоматизации измерений, управлении измерительными приборами и обработке полученных данных компьютеры также очень важны. Именно поэтому информационные технологии играют в химии особую роль [1].

При решении химико-технологических задач, особенно связанных с термодинамикой и химической кинетикой, теоретические расчеты, связанные с обработкой экспериментальных данных, очень часто предполагают решение нелинейных уравнений для получения того или иного параметра.

Функциональный анализ и теория групп широко используются в квантовой химии, теория вероятностей является основой статистической термодинамики, теория графов применяется в органической химии для предсказания свойств сложных органических молекул, дифференциальные уравнения являются основным инструментом химической кинетики, а методы топологии и дифференциальной геометрии используются в

химической термодинамике.

Таким образом, подавляющее большинство математических задач может быть решено только численными методами с использованием компьютерных вычислений. Для решения перечисленных выше задач может использоваться как специализированное, так и универсальное программное обеспечение (Mathcad, Matlab и т.п.).

### Актуальность программ

В РХТУ им. Д.И. Менделеева в рамках профиля подготовки «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика» направления подготовки бакалавров 18.03.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии изучается дисциплина «Универсальные программные средства решения математических задач».

Цель дисциплины – научить студентов теоретическим основам, практическим умениям и навыкам эффективного использования современных универсальных программных средств для проведения численных, аналитических расчётов, обработки и визуализации данных, планирования и моделирования эксперимента, а так же для решения широкого круга вычислительных задач учебного, прикладного, инженерного и научного характера.

Изначально в ходе изучения указанной дисциплины использовались три программы:

– Mathcad (MAThematica (математика) и CAD (Computer Aided Design) – системы автоматического проектирования) – программа для автоматизации решения математических задач в различных областях

науки [3].

– MATLAB (матричная лаборатория (Matrix Laboratory)) – программа для вычислений, визуализации и программирования для работы в различных областях науки [2].

– Язык программирования R – это скриптовый язык с открытым исходным кодом для аналитики и визуализации данных [3].

Однако современное состояние в области использования зарубежного программного обеспечения диктует необходимость применения отечественных аналогов либо свободно распространяемых программ.

Scilab – один из двух основных аналогов MATLAB с открытым исходным кодом, второй – GNU Octave. Scilab предназначен для научных вычислений, что очень важно в химической технологии [4], [5].

#### Реализация задач с использованием программ

Для модернизации курса разрабатывались различные химические задачи такие как:

- линейное моделирование;
- анализ экспериментальных данных;
- классическая статистика;
- задачи оптимизации;
- дифференцирование и интегрирование.

Далее представлены решения некоторых задач с использованием программных средств.

Модернизации подверглись две лабораторные работы: «Использование пакета прикладных программ MATLAB для решения математических и общинженерных задач» и «Язык программирования R-Language для решения математических задач».

Для лабораторной работы «Язык программирования R-Language для решения математических задач» было разработано 10 задач:

Задача 1. Критерии Бартлета и Кохрена (сравнение нескольких дисперсий нормальных генеральных совокупностей по выборкам).

Задача 2. Определение квантового выхода.

Задача 3. Капиллярная конденсация паров бензола.

Задача 4. Адсорбция.

Задача 5. Расчет парциальных давлений.

Задача 6. Сравнение нескольких дисперсий.

Задача 7. Линейная регрессия.

Задача 8. Сравнение дисперсий двух генеральных совокупностей.

Задача 9. Сравнение двух средних нормальных генеральных совокупностей, дисперсии которых неизвестны и одинаковы.

Задача 10. Дисперсионный анализ.

Для лабораторной работы «Использование пакета прикладных программ MATLAB для решения математических и общинженерных задач» были разработаны следующие задачи в среде Scilab:

Задача 1. Операции с матрицами.

Задача 2. Решение систем неравенств.

Задача 3. Запись данных в текстовый файл.

Задача 4. Поиск корней функции.

Задача 5. Метод наименьших квадратов.

Задача 6. Линейная регрессия.

Для всех перечисленных задач приведены исходные данные, постановка задачи, затем решение с использованием языка R и пакета Scilab. Кроме того, используемые теоретические положения (формулы).

#### Задача 1. Критерии Бартлета и Кохрена (Сравнение нескольких дисперсий нормальных генеральных совокупностей по выборкам)

Определение содержания нефтепродуктов в питьевой воде методом ИК-спектрии проводилось четырьмя лабораториями с получением следующих результатов:

- 1) лаборатория 1: 0.06; 0.07; 0.06; 0.05; 0.07;
- 2) лаборатория 2: 0.06; 0.08; 0.04; 0.09; 0.05; 0.06;
- 3) лаборатория 3: 0.05; 0.07; 0.05; 0.06;
- 4) лаборатория 4: 0.06; 0.07; 0.06; 0.10; 0.08.

Необходимо с доверительной вероятностью  $p=0,95$  установить, можно ли считать равными оценки случайных погрешностей результатов анализа разных лабораторий [6].

Описание задачи:

При определении оценки дисперсии по текущим измерениям по формуле:

$$s_y^2 = \frac{f_1 * s_1^2 + f_2 * s_2^2 + \dots + f_n * s_n^2}{f_1 + f_2 + \dots + f_n} = \frac{\sum_{i=1}^j f_i * s_i^2}{f} \quad (1)$$

где  $f_i = n_i - 1$  – число степеней свободы для  $i$ -й выборки объема  $n_i$ ,  $S_i^2$  – выборочная дисперсия  $i$ -й выборки,  $f = \sum_i f_i$  – общее число степеней свободы,  $k$  – число выборок.

Была принята нулевая гипотеза равенства соответствующих генеральных дисперсий. Проверить эту гипотезу для выборок разного объема можно по критерию Бартлета. Бартлет показал, что в условиях нулевой гипотезы отношение  $B/C$ , где:

$$B = 2,303(f * lgs_y^2 - \sum_{i=1}^n f_i * lgs_i^2) \quad (2)$$

$$C = 1 + \frac{1}{3*(n-1)} (\sum_{i=1}^n \frac{1}{f_i} - \frac{1}{f}) \quad (3)$$

Гипотеза равенства генеральных дисперсий принимается, если:

$$\frac{B}{C} \leq \chi_{1-p}^2 \quad (4)$$

при выбранном уровне значимости  $p$ . Различие между выборочными дисперсиями можно считать незначимым, а сами выборочные дисперсии – однородными. Так как всегда  $C > 1$ , если окажется  $B \leq \chi_{1-p}^2$ , нулевую гипотезу следует принять; если  $B > \chi_{1-p}^2$ , критерий Бартлета вычисляются полностью.

В R функция `bartlett.test()` осуществляет проверку данного критерия [7].

Так же если объем выборок примерно одинаковый, то можем использовать тест экстремальных значений Кохрена (Cochran) `cochran.test()` из пакета `outliers`.

Кохрен исследовал распределение максимальной выборочной дисперсии к сумме всех дисперсий:

$$G = \frac{s_{max}^2}{\sum_{i=1}^n s_i^2} \quad (5)$$

где  $S_i^2$  – выборочная дисперсия  $i$ -й выборки.

Если найденное значение критерия Кохрена окажется меньше табличного, то расхождение между дисперсиями нужно считать случайным при



выбранном уровне значимости  $p$ :

$$G < G_{1-p}(n, f) \quad (6)$$

где  $n$  – объем выборок,  $f$  – степени свободы.

Описание функции *bartlett.test* ( $x, g...$ ):

$x$  – числовой вектор значений;

$g$  – вектор или фактор, дающий группу для соответствующих элементов  $x$ . Пренебрегаем, если  $x$  – список и можно использовать *bartlett.test(x)*. Если выборки еще не содержатся в списке, используют *bartlett.test(list(x...))*.

Описание функции *cochran.test(x,y)* (для её работы необходимо установить пакет *outliers*):

$x$  – числовой вектор, содержащий значения дисперсий для каждой выборки  $s_i^2$ ;

$y$  – числовой вектор, содержащий объем каждой выборки.

Результат решения данной задачи на языке R представлен на рис. 1.

```
> #запишем результаты ИК-спектрии
> x1<-c(0.06,0.07,0.06,0.05,0.07)
> x2<-c(0.06,0.08,0.04,0.09,0.05,0.07)
> x3<-c(0.05,0.07,0.05,0.06)
> x4<-c(0.06,0.07,0.06,0.1,0.08)
> #проверим гипотезу по критерию Бартлета:
> bartlett.test(list(x1,x2,x3,x4))

Bartlett test of homogeneity of variances

data: list(x1, x2, x3, x4)
Bartlett's K-squared = 3.1439, df = 3, p-value = 0.37
```

Рис.1. Выполнение кода в командном окне.

Объяснение результатов вывода:

Barlett's K-squared=3,1439 (значение критериальной статистики теста Бартлета), число степеней свободы 3,  $p$ -value=0,37, т.е. отвергнуть гипотезу  $H_0$  можно только при допустимой ошибке в 37%. Следовательно, гипотеза об однородности дисперсий принимается на 5% уровне значимости.

Для проверки (4) применяется функция *qchisq(p,df)*, где  $p$  – доверительная вероятность,  $df$  – число степеней свободы (рис. 2). Исходя из проверки гипотезы равенства генеральных дисперсий (рис. 2), выборочные дисперсии могут быть признаны однородными, а оценки случайных погрешностей результатов ИК-спектрии, проведенной четырьмя лабораториями, – равными.

```
> p<-0.95
> df<-3
> qchisq(p,df)
[1] 7.814728
> v<-3.1439
> v<=qchisq(p,df)
[1] TRUE
```

Рис.2. Проверка гипотезы равенства генеральных дисперсий в командном окне.

Далее проверяется гипотеза Кохрена (рис. 3) с указанием объема выборок (5, 6, 4, 5) элементов, *var()* содержит значения дисперсий для каждой выборки.

Объяснение результата:

Cochran C = 0,44211 (значение критериальной статистики теста Кохрена), число степеней свободы

(средний объем выборки) 5, число групп 4,  $p$ -value 0,4405. Альтернативная гипотеза – дисперсия второй выборки значительно больше остальных (является «выбросом»). Поскольку  $p$ -value = 0,4405, то отвергнуть гипотезу  $H_0$  можно только при допустимой ошибке в 44,05%. Следовательно, гипотеза об однородности дисперсий принимается на 5% уровне значимости.

```
> cochran.test(object=c(var(x1),var(x2),var(x3),var(x4)),
data=c(5,6,4,5))

Cochran test for outlying variance

data: c(var(x1), var(x2), var(x3), var(x4))
C = 0.44211, df = 5, k = 4, p-value = 0.4405
alternative hypothesis: Group 2 has outlying variance
sample estimates:
 1          2          3          4
7.000000e-05 3.500000e-04 9.166667e-05 2.800000e-04
```

Рис.3. Проверка гипотезы Кохрена.

Так же можно проверить (6), используя функцию *qcochran(p, n, k)* из того же пакета, где  $p$  – доверительная вероятность,  $n$  – объем одной выборки (если объемы различаются, то берется среднее значение),  $k$  – число выборок (рис. 4).

```
> n<-5
> p<-0.95
> k<-4
> qcochran(p,n,k)
[1] 0.6287245
> c<-0.44211
> c<=qcochran(p,n,k)
[1] TRUE
```

Рис.4. Проверка критерия Кохрена.

Таким образом, исходя из данных ИК-спектрии, с использованием критерия Кохрена с доверительной вероятностью  $p=0,95$  установили, что оценки случайных погрешностей результатов анализа разных лабораторий можно считать равными, так как (4) и (6) выполняются.

### Реализация в Moodle

Изменения, вызванные появлением и развитием Интернета, сильно отразились в науке и на способах обучения и преподавания в учебных учреждениях. Применение систем управления обучением позволяет в течение короткого времени создать электронные ресурсы и курсы и управлять ими. Выбор подходящей обучающей среды сильно облегчает внедрение и использование электронного обучения. Широко практику применения нашла система управления обучением LMS Moodle. Moodle – Modular Object-Oriented Dynamic Learning Environment (модульная объектно-ориентированная динамическая среда обучения) – это система управления обучением, которая дает возможность устроить среду дистанционного электронного обучения, включающую подготовку и доставку образовательных ресурсов [8]. Так же через Moodle можно управлять протеканием учебного процесса.

В РХТУ им. Д.И. Менделеева для онлайн-поддержки курсов, которые преподаются в

университете, существует учебный портал <https://study.muotr.ru/>, построенный на базе LMS Moodle.

Разработанные учебно-методические материалы для лабораторных работ размещены в соответствующих разделах курса «Универсальные программные средства решения математических задач».

В Moodle было разработано и реализовано 147 контрольных вопросов, разбитых на категории:

- Общие сведения о программном обеспечении (ПО) для решения математических задач;
- MathCAD;
- Язык R;
- MATLAB;
- Scilab.

А также 3 теста для текущего и 1 тест для промежуточного контроля по дисциплине.

В банке тестовых заданий реализованы следующие типы вопросов: (рис. 5): короткий ответ; на соответствие; верно/неверно (альтернативный вопрос); множественный выбор; выбор пропущенных слов; на соответствие (с перетаскиванием); перетаскивание в текст.

Scilab. Установите соответствие между функцией и её назначением.

Графики зависимостей зеленого и синего цветов

Точечный график

График зависимости  $y=f(x)$  красного цвета

Перетащите ответ сюда

Перетащите ответ сюда

Plot2d(x,y,style=[color("red")])

plot(x,y)

plot(x,y,'g','x,z','b')

Plot2d(x,y,-1)

plot2d(x,y,'g','x,z','b')

plot2d(x,y,'red')

Plot2d(x,y,style=[color("red")])

plot2d(x,y,'b')

a)

Scilab. Заполните пропуски в коде для нахождения коэффициентов полиномов 2-й степени:  $y = b_0 + b_1x + b_2x^2$  методом наименьших квадратов (МНК), с указанием вектора начальных приближений, если даны экспериментальные данные  $x$  и  $y$ .

```
function [zr]=G(c, z)
    _____
endfunction
z=[xy];
_____
_____
zr=z(2)-c(1)-c(2)*z(1)-c(3)*z(1)^2
zr=z(2)-c(1)-c(2)*z(1)-c(3)*z(1)^2+c(5)*z(1)
c=[0;0;0]; c=[0;0;0]; c=[0;0;0];
datafit(N,z,c); polyfit(G,z,c); datafit(G,z,c);
```

б)

Язык R. Запишите команду для выбора элементов с 1 по 3 из заданного вектора L:

```
L <- c(0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34)
```

Ответ укажите без пробелов.

Ответ:

в)

Рис.5. Примеры вопросов в Moodle: а) на соответствие (с перетаскиванием), б) перетаскивание в текст, в) короткий ответ.

### Заключение

В настоящее время невозможно представить учебный процесс без использования информационных технологий, особенно это стало актуально в период пандемии, когда активно стали развиваться системы дистанционного обучения. С развитием химии и химической технологии возникают все новые и новые задачи, для решения которых необходимо применять программные средства. Поэтому разработка учебно-методических материалов для модернизации курса «Универсальные программные средства решения математических задач» является актуальной.

### Список литературы

1. Чупахина Е.А., Бедняк С.Г. Информационные технологии в различных сферах деятельности // Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук. – 2018. – № 3 – С. 6.
2. Горанский А.В., Егоров А.Ф., Захарова А.Ю. Программные средства решения математических задач. Лабораторный практикум: учеб. пособие. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2017. – 72 с.
3. Статистический анализ данных в системе R: учеб. пособие / А.Г. Буховец, П.В. Москалев, В.П. Богатова, Т.Я. Бирючинская; Под ред. проф. Буховца А.Г. – Воронеж: ВГАУ, 2010. – 124 с.
4. Анисимова Э.С., Ибатуллин Р.Р. Использование программной системы Scilab в обучении решению задач вычислительной математики // Современные наукоемкие технологии. – 2016. – №8-1. – С. 91-95.
5. Дохтаева И.А., Рожина Е.Н. Определение достоинств среды программирования Scilab путем сравнительного анализа языков программирования MatLab и Scilab: Сборник научных статей Международной молодежной научно-практической конференции: Курск, в 2-х томах. – 2014. – С. 204-207.
6. Гринфельд Г.М., Моисеев А.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии: учеб. пособие – Комсомольск-на-Амуре: ФГБОУ ВПО «КнАГТУ», 2014. – 76 с.
7. Савельев А.А., Мухарамова С.С., Пилюгин А.Г. Использование языка R для статистической обработки данных: учеб.-метод. пособие. – Казань: Казанский государственный университет, 2007 – 28 с.
8. Сулайманова М.А. Методы организации электронных учебных ресурсов в образовательном процессе через платформу дистанционного обучения Moodle // Academy. – 2020. – № 13. – С. 40-42.

УДК 544.7

Казначеева А.А., Ставропольцева А.С., Меньшова И.И.

**Сорбенты на основе нетканых материалов в очистке промышленных стоков**

Казначеева Алена Анатольевна – студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга.

Ставропольцева Александра Сергеевна – студент 4 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; e-mail: [asstavr3345@yandex.ru](mailto:asstavr3345@yandex.ru).

Меньшова Ирина Игоревна, к.т.н., доцент кафедры логистики и экономической информатики.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В статье рассмотрена очистка сточных вод, содержащих красители, сорбентами на основе нетканых материалов. В ходе проведения экспериментов были определены оптимальные условия проведения процесса адсорбции красителей. Также были определены сорбционная емкость и эффективность очистки воды от красителей исследуемыми неткаными материалами. Показано, что исследуемые нетканые фильтр-пакеты не позволяют полностью извлекать красители из сточных вод.*

*Ключевые слова: очистка вод, нетканые материалы, сорбент, органические красители, степень извлечения.*

**Nonwoven-based sorbents in industrial wastewater treatment**

Stavropoltseva A.S., Kaznacheeva A.A., Menshova I.I.

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

*The article examines the purification of wastewater containing dyes using nonwoven-based sorbents. During the experiments, optimal conditions for the dye adsorption process were determined. The adsorption capacity and efficiency of non-woven materials in purifying water from dyes were also determined. It is shown that the investigated nonwoven filter bags do not allow for complete extraction of dyes from wastewater.*

*Keywords: water purification, non-woven materials, sorbent, organic dyes, extraction efficiency.*

**Введение**

Большинство технологических операций по применению синтетических красителей образуют загрязненные сточные воды, характерной особенностью которых является их интенсивная окраска. Анализируя современное состояние методов очистки сточных вод от красителей, следует отметить их разнообразие, при этом сохраняется актуальность оптимизации существующих и поиск новых методов очистки, а также создание новых высокоэффективных и экономически рациональных технологий обезвреживания сточных вод от красителей [1]. Фильтровальные нетканые материалы, широко применяются в металлургической промышленности, автомобилестроении и ряде других отраслей.

Нетканые фильтр-пакеты, хорошо сорбируют нефтепродукты и взвешенные вещества. Эти материалы изготавливаются без применения тканевого переплетения, что позволяет им обладать рядом преимуществ, таких как высокая прочность, хорошая фильтрационная способность и возможность многократного использования. Согласно работам Kim D., Lim H. [2], использование нетканых материалов на основе активированного угля позволяет удалить более 90% красителей из сточных вод. Были также проведены исследования [3] с применением нетканых материалов на основе гидрогелей, что обеспечило высокую эффективность удаления красителей из стоков.

**Экспериментальная часть**

Нетканый сорбент представляет собой сорбционно-удерживающую многослойную структуру, в которой состав и плотность слоев

подобраны таким образом, чтобы обеспечивать высокую скорость проникновения сорбата внутрь сорбента [4, 5, 6, 7]. Объемно-пористая структура способна многократно восстанавливаться до первоначального состояния. [5, 6].

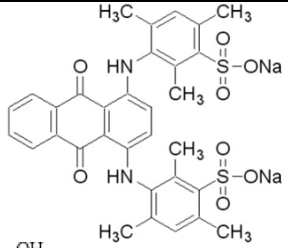
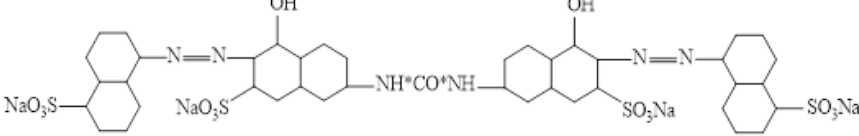
В работе были исследованы нетканые материалы из волокон различной природы в качестве сорбентов в адсорбционном способе очистки. Характеристика исследуемых нетканых фильтр-пакетов представлена в таблице 1.

*Таблица 1. Характеристика нетканых сорбентов*

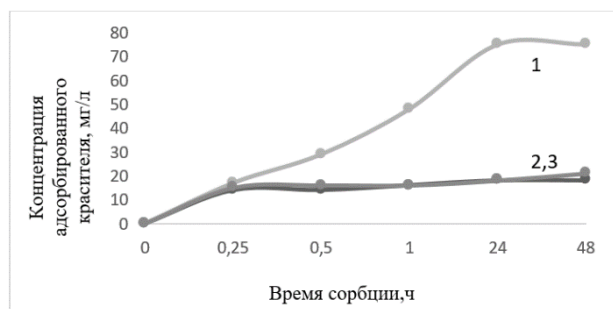
№	Химический состав нетканых фильтр-пакетов	Марка
I	Полипропиленовое волокно	Петролин
II	Полипропиленовое волокно	ПНСН-Г
III	Термообработанное полипропиленовое волокно	Петролин-Т
IV	Полипропиленовое волокно	ПНСН-С
V	Полиамидное волокно	СУ 1
VI	Полиакрилонитрильное волокно	ПИ
VII	Льносодержащее волокно	ПНЛС
VIII	Термообработанное льносодержащее волокно	ПНЛС-Т
IX	Полиэфирное волокно	ПЭ

В работе исследовали процесс извлечения красителей: Прямой красный 2С [8], Кислотный синий [8] из модельных растворов. В таблице 2 представлены структурные формулы и молекулярная масса данных красителей.

Таблица 2. Характеристики исследуемых красителей

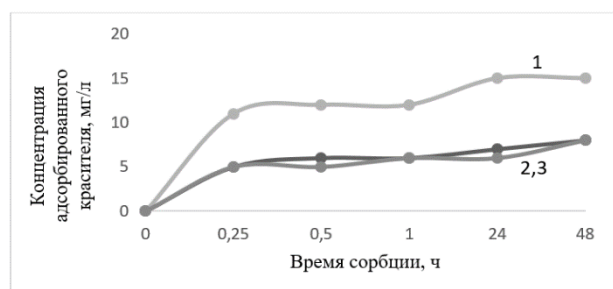
Название красителя	Молекулярная масса, г/моль	Структурная формула
Кислотный синий	1060	
Прямой красный 2С	678	

Полученные предварительные исследования в очистке стоков, содержащих красители Прямой красный 2С и Кислотный синий, показали, что образцы: III, V, VI, VIII не обладают сорбционными свойствами для модельных растворов красителей Прямой красный 2С и Кислотного синего; а образцы: I, II имеют очень низкую сорбционную способность; образцы: IV, VII, IX будут в дальнейшем использованы в качестве сорбентов. Определение оптимальной массы сорбента для эффективной сорбции модельных растворов красителей Кислотного синего и Прямой красный показал, что оптимальная масса составила 1,5 г – 2,0 г. Были построены кинетические кривые сорбции красителей Кислотного синего и Прямой красный 2С. Кинетические кривые представлены на рисунках 1 и 2.



1 – IV; 2 – VII; 3 – IX.

Рис. 1. Кинетические кривые сорбции красителя Прямой красный 2С.



1 – IV; 2 – VII; 3 – IX

Рис. 2. Кинетические кривые сорбции красителя Кислотного синего.

Как видно из графиков равновесие в системе сорбат – сорбент для Прямой красный наступает в течение 24 ч, а для красителя Кислотного синего – 0,25 ч. Что, вероятнее всего, связано с особенностями строения красителей. Исследование зависимости процесса сорбции от температуры показало, что максимальная сорбционная активность сорбентов IV и IX относительно Прямой красный наблюдается при температуре 20°C, а активность сорбента VII в интервале температур от 20°C до 80°C очень низка и остается неизменной в указанных пределах. Сорбция модельного раствора красителя Кислотного синего сорбентом VII также низка в интервале температур от 20°C до 80°C, сорбционная активность сорбентов: IX и IV достигает максимума в области температур до 80°C. Установлено, что сорбент на основе полиэфирного волокна с модельными растворами красителей проявляет сорбционную активность при температуре свыше 60 °С.

Сорбция красителей Прямой красный 2С и Кислотного синего практически одинакова и не зависит от pH среды. Таким образом, можно сделать вывод о том, что значение pH не оказывает влияние на адсорбцию органических веществ из водных растворов на пористых неполярных сорбентах.

Была определена сорбционная емкость исследуемых нетканых сорбентов. Сорбционную емкость –  $\Gamma_i$  (мг/мг) – рассчитывают по формуле (1). [9]

$$\Gamma_i = \frac{C_{oi} - C_i \times V}{M_c}, \quad (1)$$

Сорбционная емкость нетканых фильтр-пакетов представлена в таблице 3.

Таблица 3. Сорбционная емкость исследуемых нетканых фильтр-пакетов

Фильтр-пакет	IV	VII	IX
краситель Прямой красный 2С			
$\Gamma_i \times 10^{-4}$ , мг/мг	32,6	14,6	11,6
краситель Кислотный			
$\Gamma_i \times 10^{-4}$ , мг/мг	15,3	9,6	9,3

Определение адсорбционной емкости сорбентов и эффективности извлечения красителей из модельных растворов показало низкие результаты. Таким образом применение сорбентов на основе нетканых материалов успешно работает при сорбции малорастворимых нефтяных стоках и не работает для очистки растворимых органических соединений, таких как органические красители.

#### Заключение

Нетканые фильтр-пакеты, хорошо сорбирующие нефтепродукты и взвешенные вещества, позволяют предупредить попадание нефтепродуктов с ливневыми сточными водами в окружающую среду на объектах, производственная деятельность которых связана с применением нефти, масел. Но для растворимых органических стоков нетканые фильтр-пакеты требуют дополнительного изучения о возможности их модификации для повышения сорбционных свойств и улучшения качества очистки воды. Также необходимо проводить более глубокие исследования в области взаимодействия нетканых материалов с различными типами загрязнений, чтобы оптимизировать процесс очистки и повысить эффективность использования нетканых фильтров в будущем.

#### Список литературы

1. Садова С.Ф., Кривцова Г.Е., Коновалова М.В. Экологические проблемы отделочного производства. М.: РИО МГТУ, 2002. – 284 с.  
2. Kim, D., Lim, H., Choi, W., & Kim, J. (2019). A study on the characteristics of non-woven activated carbon fiber for the removal of dye from textile

wastewater. Journal of Industrial and Engineering Chemistry, 79, 343-349.

3. Kumar, A., Kumar, V., & Kumar, R. (2020). Hydrogel-based non-woven fabric for the efficient removal of dye from wastewater. Journal of Environmental Chemical Engineering, 8(1), 103655.

4. Антонова, М.В. Нетканые текстильные материалы: учеб. пособие / И.В. Красина; Казан. нац. исслед. технол. ун-т; М.В. Антонова. — Казань : КНИТУ, 2016. — 80 с.

5. Котлярова Е.Ф., Горчакова В.М., Курочкина Т.А. Фильтры для очистки нефтепродуктов от загрязнений // Современные технологии текстильной промышленности (Текстиль-97): Тез. докл. Всерос. Научн.-техн. конф. 25-26 ноября 1997г. - М., 1997 - с.69.

6. Котлярова Е.Ф., Волков В.А., Овчинникова С.А., Горчакова В.М. Влияние технологических параметров термообработки на капиллярно-пористую структуру и свойства нетканых фильтровальных материалов // Известия Вузов. Технология текстильной промышленности. - 2000г. - № 5.

7. Аниськова В.А. Нетканые многослойные фильтровальные материалы. Евразийский Союз Ученых (ЕСУ) 8 (53), 2018, с 4-6.

8. Colorindex 80. Volume I. Synthetic dyes for the textile industry. Publisher "Interchem".

9. Меньшова И.И., Сафонов В.В., Булулукова И.И., Применение шунгитового сорбента в адсорбционном способе очистки сточных вод, содержащих водорастворимые красители // Известия ВУЗов. Технология текст. промышленности: статья. 2013 – с.82.

УДК 665.6:665.637.7

Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Головань Е.Е., Балашова К.В.

## Исследование процесса депарафинизации углеводородного сырья на модифицированном цеолитсодержащем катализаторе в реакторе со стационарным слоем катализатора

Головань Екатерина Евгеньевна – студент группы К-45.

Балашова Ксения Валерьевна – студент группы К-45.

Писаренко Елена Витальевна – д.т.н., профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125480, ул. Героев Панфиловцев, д. 20; [evpisarenko@mail.ru](mailto:evpisarenko@mail.ru).

Пономарев Андрей Борисович – к.х.н., старший научный сотрудник;

ФГБУН «ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН»,

Россия, Москва, 119334, ул. Вавилова, д. 28.

*Образцы катализаторов безводородной депарафинизации были приготовлены на основе цеолита типа ZSM-5 методом пропарки, а также пропитки нитратом меди. Депарафинизацию осуществляли в проточном реакторе, работающем при заданной температуре 300 °С с расходом сырья 0,23 мл/мин. Для анализа сырья и продуктов реакции использовали хроматограф Хроматэк-Кристалл 5000.2. Построены регрессионные модели для расчета конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата от времени проведения реакции. В результате эксперимента температуры застывания сырья снизились с -5 °С до -22 и -24 °С, что свидетельствует о том, что низкотемпературные свойства углеводородной фракции улучшились.*

*Ключевые слова: нефтепереработка, депарафинизация, цеолит, n-парафины, катализатор, медь, пропитка.*

## Investigation of the process of hydrocarbon raw material dewaxing over a modified zeolite-containing catalyst in a reactor with a stationary catalyst layer

Pisarenko E.V.<sup>1</sup>, Ponomaryov A.B.<sup>2</sup>, Golovan E.E.<sup>1</sup>, Balashova K.V.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

<sup>2</sup> Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia.

*Samples of the anhydrous dewaxing catalyst were prepared on the basis of zeolite type ZSM-5 by steaming, as well as impregnation with copper nitrate. Dewaxing was carried out in a flow reactor operating at a set temperature of 300 °C with a raw material consumption of 0.23 ml/min. Chromatograph Chromatek-Crystal 5000.2 was used to analyze the raw materials and reaction products. Regression models were developed to calculate the conversion of n-paraffins, the yield of the product and the liquid fraction of the catalysate versus the reaction time. As a result of the experiment, the solidification temperatures of the raw materials decreased from -5 °C to -22 and -24 °C, which indicates that the low-temperature properties of the hydrocarbon fraction have improved.*

*Keywords: oil refining, dewaxing, zeolite, n-paraffins, catalyst, copper, impregnation.*

В настоящее время в России особое внимание уделяется северным территориям, их освоению и развитию. Однако строительство портов и транспортных узлов, реконструкция важных объектов, разработка месторождений нефти и газа требует особого топлива для используемой техники [1]. Это арктическое дизельное топливо, способное сохранять текучесть даже в условиях сильных холодов северных территорий.

В первую очередь на температуру застывания дизельного топлива влияет наличие в нём линейных углеводородов. Для их удаления проводится процесс депарафинизации, который положительно сказывается на низкотемпературных свойствах сырья. На современных нефтеперерабатывающих заводах (НПЗ) депарафинизацию осуществляют с помощью водородсодержащего газа при высоком давлении с использованием дорогостоящих катализаторов, что делает процесс довольно затратным. Кроме того, производство арктического топлива имеет сезонный характер и занимает лишь малую долю выпуска по сравнению со стандартным летним. Из-за сложности используемой технологии организация производства

на мало-и среднетоннажном НПЗ из местного сырья в условиях Севера практически невозможна. Все вышеперечисленные факторы делают выпуск арктического топлива экономически неэффективным, что приводит к сильному удорожанию продукта для потребителя. Решением данной проблемы является разработка и внедрение альтернативных технологий вторичных процессов переработки углеводородов.

Благодаря началу использования цеолитных катализаторов в середине XX в. произошёл прорыв в нефтепереработке. Данные катализаторы обладают рядом преимуществ, таких как разнообразие форм и структур, инертность, высокая стабильность, экологичность использования, возможность модифицирования, длительность рабочего цикла и возможность регенерации [2-3]. Таким образом, сегодня цеолиты играют важную роль в повышении эффективности и создании новейших технологий производства нефтепродуктов.

Сравнение проведения каталитической безводородной депарафинизации с использованием различных цеолитных катализаторов представлено в таблице 1:

Таблица 1.

Анализ состава катализаторов, условий проведения процесса и результатов безводородной депарафинизации

№	Состав катализатора	Условия проведения процесса	Активность катализатора, г/(г*ч) / выход, температура застывания продукта, °С	Время работы, ч
[4]	Цеолит ZSM-5 Состав: $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 = 43.4$ Размер частиц катализатора: 1,0-1,5 мкм Объём пор: 0,23 см <sup>3</sup> /г	$T = 300-380 \text{ }^\circ\text{C}$ $P_{\text{H}_2} = 7 \text{ атм}$ $Q_{\text{H}_2} = 9 \text{ л/ч}$ $m_{\text{кат}} = 0,7-0,8 \text{ г}$	Активность катализатора: 21.6 г/(г*ч) А, % = 90,0	10
	Цеолит Beta Состав: $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 = 41.5$ Размер частиц катализатора: 1,0-1,5 мкм Объём пор: 0,62 см <sup>3</sup> /г	$T = 300-380 \text{ }^\circ\text{C}$ $P_{\text{H}_2} = 7 \text{ атм}$ $Q_{\text{H}_2} = 9 \text{ л/ч}$ $m_{\text{кат}} = 0,7-0,8 \text{ г}$	Активность катализатора: 7.9 г/(г*ч) А, % = 90,0	10
	Цеолит Y Состав: $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 = 53.7$ Размер частиц катализатора: 1,0-1,5 мкм Объём пор: 0,38 см <sup>3</sup> /г	$T = 300-380 \text{ }^\circ\text{C}$ $P_{\text{H}_2} = 7 \text{ атм}$ $Q_{\text{H}_2} = 9 \text{ л/ч}$ $m_{\text{кат}} = 0,7-0,8 \text{ г}$	Активность катализатора: 0.1 г/(г*ч) А, % = 45,0	10
[5]	Цеолит ZSM-11 Состав: $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 = 30/60$ Размер частиц катализатора: 0,2-0,8 мм	$T = 340^\circ\text{C}$ $P = 0,3 \text{ МПа}$ $m_{\text{кат}} = 10 \text{ г}$ $\text{WHSV} = 5 \text{ ч}^{-1}$	Выход: А, % = 97,0 Температура застывания: $T_3 = -49^\circ\text{C}$	7
[6]	Цеолит NH <sub>4</sub> -ZSM-5 Состав: $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 = 50/30$ Размер частиц катализатора: 0,1-1,8 мм	$T = 310^\circ\text{C}$ $P = 0,1 \text{ МПа}$ $m_{\text{кат}} = 1,5 \text{ г}$ $\text{WHSV} = 20 \text{ ч}^{-1}$	Выход: А, % = 82,8 Температура помутнения: $T_{\text{п}} = -52^\circ\text{C}$	30

Описан процесс каталитической безводородной депарафинизации на цеолитном катализаторе структуры ZSM-5. Для исследования использовали сырьё, полученное на установке вакуумной перегонки масла.

Катализатор готовили 2-мя способами. Для получения 1-ого катализатора (К1) исходный образец цеолита типа ZSM-5 марки К-38 прокаливали при 500°C на протяжении 1 часа. Получение 2-ого катализатора (К2) проводили в 2 этапа: сначала проводили пропарку в течение 2-х часов при 550°C, затем трехэтапный ионный обмен с  $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ . Гранулы высушивали, а затем прокаливали при температуре 500°C в течение 1,5 часов. Полученные образцы использовали для последующего проведения эксперимента.

Эксперимент проводили в проточном реакторе со стационарным слоем катализатора, схема которого представлена на рисунке 1. Подачу сырья в реактор осуществляли с расходом 0,23 мл/мин (10 ч<sup>-1</sup>) при температуре 300°C. Получили 2 продукта: продукт 1 (П1) при использовании К1, и продукт 2 (П2) при использовании К2.

Элементный состав образцов определяли с

помощью рентгенофлуоресцентного анализа на приборе ThermoScientific ARL PERFORM'X с родиевой трубкой и мощностью 3.5 кВт. По результатам содержание кремния и алюминия в образцах практически не отличалось, для К1 оно составило 31.9% и 16.5%, для К2 31.4% и 16.8% соответственно. Т.к. образец К2 был обогорожен медью, её содержание в нём составило 0.57%.

С помощью программы «Хроматэк Дистилляция» методом ASTM D2887 был проведён расчет фракционного состава исходного сырья и продукта реакции. Для П1 10% продукта отогналось при температуре 272.7°C для сырья и 281.3 °C для продукта, а 95% - при 360.6°C для сырья и 362.2°C для продукта. Для П2 10% продукта отогналось при температуре 272.7°C для сырья и 277.6°C для продукта, а 95% - при 360.6°C для сырья и 359.0°C для продукта.

После 6 часов реакции катализатор был испытан на содержание кокса. Термогравиметрический анализ проводили на приборе STA-200 компании JINAN SYEEYO INSTRUMENTS CO.,LTD. (Китай). Для К1 по результатам анализа после 6 часов реакции образовалось 6,54% кокса, для К2 - 6,27%.

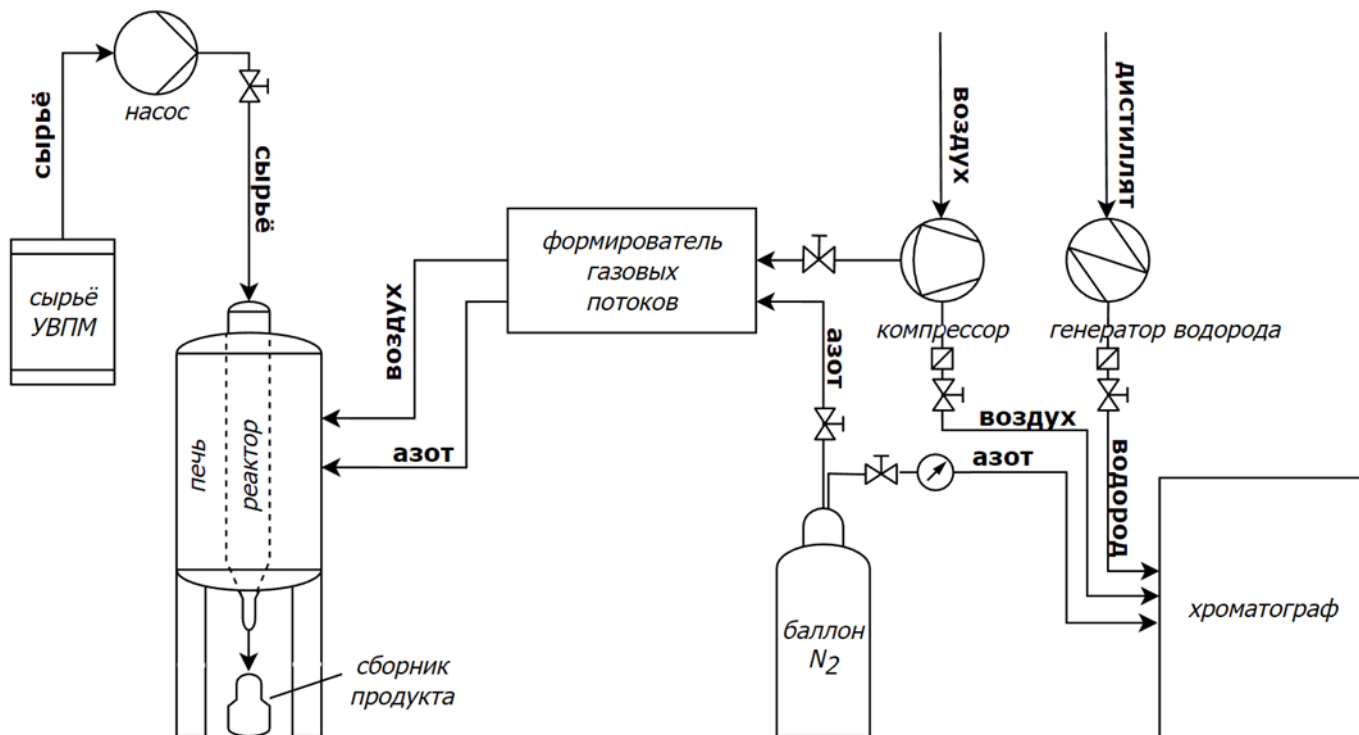


Рис. 1. Схема лабораторной установки депарафинизации углеводородного сырья

Для расчета конверсии *n*-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата от времени были построены регрессионные модели. Конверсия *n*-парафинов (*X*), выхода продукта (*УП*) и жидкой фракции катализата (*УЖФ*) описываются для *K1* и *K2* следующими уравнениями (1)-(3):

$$X = b_0 + b_1t + b_2t^2 + b_3t^3 \quad (1)$$

$$УП = b_0 + b_1t + b_2t^2 + b_3t^3 \quad (2)$$

$$УЖФ = b_0 + b_1t + b_2t^2 + b_3t^3 \quad (3)$$

где *t* – время, а *b*<sub>0</sub>, *b*<sub>1</sub>, *b*<sub>2</sub>, *b*<sub>3</sub> – коэффициенты уравнения регрессии.

Методом нелинейных наименьших квадратов оценены значения коэффициентов уравнений регрессии, представленные в таблице 2.

Получили уравнения регрессии для расчета конверсии *n*-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата для *K1* (4)-(6) и для *K2* (7)-(9):

$$X_1 = 78,8 - 13,112t + 2,521t^2 - 0,195t^3 \quad (4)$$

$$УП_1 = 87,0 + 4,222t - 1,405t^2 + 0,143t^3 \quad (5)$$

$$УЖФ_1 = 95,03 + 1,70t - 0,556t^2 + 0,0574t^3 \quad (6)$$

$$X_2 = 73,1 - 13,320t + 2,734t^2 - 0,203t^3 \quad (7)$$

$$УП_2 = 87,7 + 2,979t - 0,570t^2 + 0,036t^3 \quad (8)$$

$$УЖФ_2 = 94,0 + 3,095t - 0,709t^2 + 0,0527t^3 \quad (9)$$

Анализ результатов моделирования представлен в таблице 3. Абсолютная и относительная ошибки рассчитываются по уравнениям (10) и (11):

$$\Delta x_{абс} = |x_{\text{практ}} - x_{\text{теор}}| \quad (10)$$

$$\Delta x_{отн} = \frac{\Delta x_{абс}}{x_{\text{практ}}} \times 100\% \quad (11)$$

Провели сравнение абсолютной и относительной ошибок для конверсии *n*-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата для катализаторов *K1* и *K2* в таблице 3.

Таблица 1.

Значения коэффициентов в уравнениях регрессии для расчета конверсии *n*-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата для катализаторов *K1* и *K2*

Параметр	Конверсия <i>n</i> -парафинов, %		Выход продукта, %		Выход жидкой фракции катализата, %	
	<i>K1</i>	<i>K2</i>	<i>K1</i>	<i>K2</i>	<i>K1</i>	<i>K2</i>
<i>b</i> <sub>0</sub>	78.833333333	73,1	87.033333333	87,7	95.033333333	94,0
<i>b</i> <sub>1</sub>	-13.112169312	-13,31984127	4.222751323	2,979365079	1.700529101	3,0948412
<i>b</i> <sub>2</sub>	2.521031746	2,73452381	-1.40515873	-0,570238095	-0.556349206	-0,70952381
<i>b</i> <sub>3</sub>	-0.19537037	-0,202777778	0.143518519	0,036111111	0.057407407	0,052777778



Таблица 3.

Сравнение абсолютной и относительной ошибок для конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата для катализаторов K1 и K2

Время, ч	Конверсия n-парафинов, %				Выход продукта, %				Выход жидкой фракции катализата, %			
	Абсолютная ошибка		Относительная ошибка, %		Абсолютная ошибка		Относительная ошибка, %		Абсолютная ошибка		Относительная ошибка, %	
	K1	K2	K1	K2	K1	K2	K1	K2	K1	K2	K1	K2
1	0,153	0,088	0,225	0,141	0,794	0,145	0,890	0,161	0,535	0,138	0,559	0,143
2	0,430	0,276	0,709	0,498	0,406	0,533	0,448	0,578	0,698	0,526	0,725	0,535
3	0,189	0,224	0,331	0,426	0,470	0,681	0,514	0,742	0,322	0,724	0,332	0,742
4	0,482	0,105	0,882	0,207	0,026	0,295	0,029	0,317	0,508	0,395	0,529	0,400
5	0,577	0,217	1,125	0,439	0,157	0,045	0,173	0,049	0,397	0,033	0,408	0,034
6	0,183	0,076	0,373	0,159	0,384	0,048	0,416	0,051	0,208	0,026	0,214	0,027

Данные, полученные при расчёте регрессионных уравнений были сопоставлены с экспериментальными данными конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата.

Для П1 экспериментальное среднее значение выхода жидкой фракции катализата составило 96,6%, а выхода продукта – 90,8%, средняя конверсия – 56,8%. Для П2 экспериментальное среднее значение выхода жидкой фракции катализата составило 97,9%, а выхода продукта – 92,1%, средняя конверсия – 53,1%. Сравнительный график экспериментальных и расчётных показателей представлен на рисунке 2.

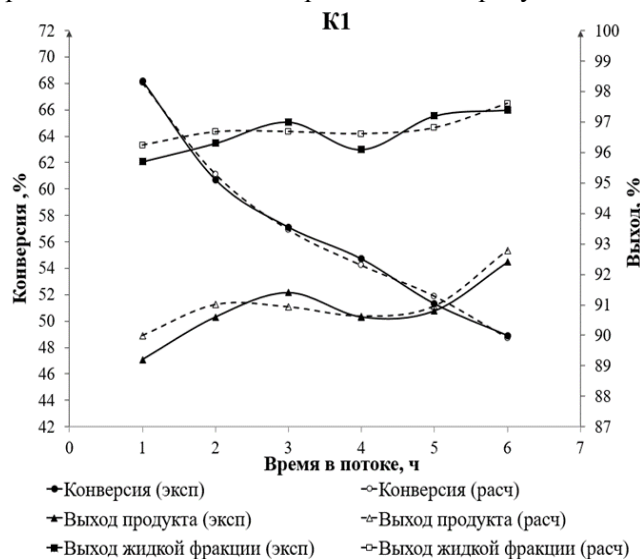


Рис.2. График зависимости конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата от времени проведения реакции для П1 (K1).

Для П2 экспериментальное среднее значение выхода жидкой фракции катализата составило 97,9%, а выхода продукта - 92,1%, средняя конверсия – 53,1%.

Сравнительный график экспериментальных и расчётных показателей представлен на рисунке 3.

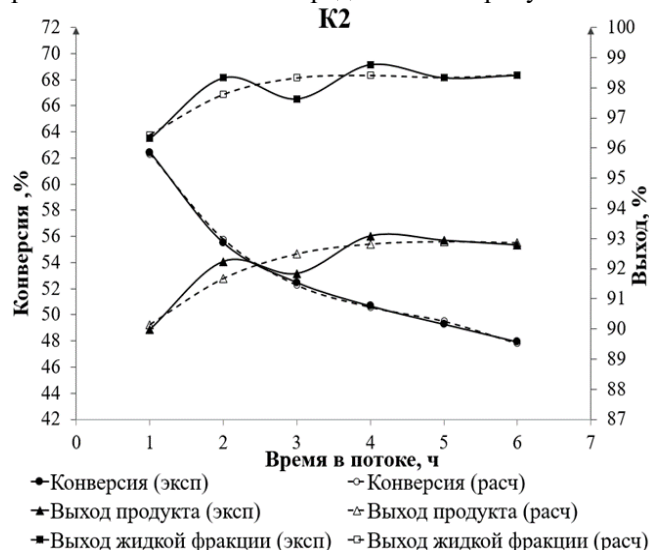


Рис.3. График зависимости конверсии n-парафинов, выхода продукта и жидкой фракции катализата от времени проведения реакции для П2 (K2).

Константа дезактивации, вычисленная по формуле (12):

$$\frac{(1-X_f)/X_f}{X_f(1-X_{in})/X_{in}} = e^{K_d \cdot t} \quad (12)$$

где  $K_d$  – константа,  $ч^{-1}$ ;  $X_{in}$  – конверсия начальная, %;  $X_f$  – конверсия конечная, %;  $t$  – время, ч, составляет 0.134  $ч^{-1}$  для K1 и 0.098  $ч^{-1}$  для K2.

В ходе регрессионного анализа установлено, что абсолютная ошибка не превысила 0,79%, а относительная – 0,89% для K1 и 0,72; 0,74% для K2 соответственно.

Результаты измерения температур помутнения и застывания представлены в таблице 4:

Таблица 4.

Результаты измерения температур помутнения и застывания для П1 и П2

Образец катализатора	Пропарка и пропитка	Прокаливание	Темп-ра помутнения сырья, °С	Темп-ра застывания сырья, °С	Тем-ра помутнения продукта, °С	Темп-ра застывания продукта, °С
К1	-	+	-4	-5	-16	-24
К2	+	+			-15	-22

В обоих случаях низкотемпературные свойства углеводородной фракции улучшились.

Компонентный состав сырья и продукта был рассчитан с помощью программы «Хроматэк Дистилляция». Для П1 содержание в сырье н-парафинов составило 20.70 мас.%, а в продукте – 16.53 мас.%. Для П2 содержание в сырье н-парафинов составило 20.70 мас.%, а в продукте – 17.17 мас.%.

#### Список литературы

1. "Прогноз научно-технического развития отраслей топливно-энергетического комплекса России на период до 2035 года" от 14.10.2016 // Министерство энергетики РФ. - 2016
2. Masalska, K. Jaroszewskaa, J. R. Grzechowiaka. Physicochemical and Catalytic Properties of Ni,H/ZSM-5 and Ni,H/ZSM-5–Binder Catalysts Prepared in the Absence and in the Presence of Binder// Kinetics and Catalysis, 2019, Vol. 60, No. 6, pp. 851–861. 2019.
3. Jianbing Dai, Junyang Wang, Zhao Liu. Preparation of ZSM-22 zeolite and its application in hydroisomerization dewaxing of lubricating oils// Journal of Physics: Conference Series, 2023.
4. Дементьев К. И., Паланкоев Т. А., Абрамова Д. С., Кузнецов П. С., А. В. Золотухина, Максимов А. Л. Активность цеолитов различных типов в реакции крекинга н-алканов в трехфазном реакторе. Нефтехимия — 2019
5. Патент РФ 2 681 949 С1 Способ приготовления катализатора и способ получения дизельного топлива с использованием этого катализатора. Заявл. 2018144208 от 2018.12.13, Опубл. 2019.03.14
6. Патент РФ 2 648 046 С1 Цеолитный катализатор и способ безводородной депарафинизации углеводородного сырья с его использованием. Заявл. 2017107255 от 2017.03.06, Опубл. 2018.03.22

УДК 311.42:65

Сакаллы А.С., Зубарев А.М.

**Анализ динамики малых инновационных предприятий России в период с 2011 года по 2022**

Сакаллы Алёна Степановна – студент группы ТМ-46; aliona.sakalli@mail.ru .

Зубарев Андрей Михайлович – старший преподаватель кафедры логистики и экономической информатики. ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*Основной целью статьи является анализ динамики предприятий в период с 2011 года по 2022, который можно использовать для прогнозирования развития инновационной деятельности в стране и влияния предприятий на эффективность импортозамещения. Были рассмотрены основные положения федерального закона № 217 2009 года, приведён анализ данных из реестра уведомлений о создании малых инновационных предприятий. В статье приведены количественные показатели созданных и ликвидированных предприятий.*

*Ключевые слова: малые инновационные предприятия, результат интеллектуальной деятельности, динамика создания, динамика ликвидации.*

**Analysis of dynamics of small innovative enterprises in Russia in the period from 2011 to 2022**

Sakalli A.S., Zubarev A. M.

<sup>1</sup> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

*The main purpose of the article is to analyze the dynamics of enterprises in the period from 2011 to 2022, which can be used to predict the development of innovation activity in the country and the impact of enterprises on the effectiveness of import substitution. The main provisions of Federal Law No. 217 of 2009 were reviewed, and data from the register of notifications on the establishment of small innovative enterprises were analyzed. The article presents quantitative indicators of established and liquidated enterprises.*

*Key words: small innovative enterprises, the result of intellectual activity, dynamics of creation, dynamics of liquidation.*

**Введение**

В 2009 году в августе вышел федеральный закон №217 «О внесении изменений в отдельные законодательные акты Российской Федерации по вопросам создания бюджетными научными и образовательными учреждениями хозяйственных обществ в целях практического применения (внедрения) результатов интеллектуальной деятельности» [1].

Как следствие, вузы Российской Федерации начали активно открывать малые инновационные предприятия, так как это имеет ряд преимуществ:

- коммерциализация научных разработок;
- привлечение внебюджетных инвестиций;
- использование малого инновационного предприятия как центра для прохождения практики для студентов;
- трудоустройство студентов и выпускников;
- повышение престижа вуза.

**Аналитическая часть**

После принятия закона № 217 впервые по данной программе малые инновационные предприятия начали открывать в 2011 году. По данным Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в период с 2011 года по 2022 было создано 3112 организации, а ликвидировано – 1719 организаций. Динамика малых инновационных предприятий показана на графиках 1 и 2 (Рис.1.; Рис.2) [2].

В период с 2011 года по 2022 пик приходится на 2014 год и составляет 1059 единиц малых инновационных предприятий, что в среднем на 700 единиц больше, чем в остальные годы (Рис.1).

После 2014 года наблюдается спад в динамике открытия предприятий, к 2021 году количество открывающихся предприятий уменьшилась в 9,2 раза по сравнению с 2011 годом. Минимум приходится на 2021 год, после 2021 наблюдается рост в динамике. В 2022 году было открыто в два раза больше предприятий по сравнению с 2021 годом.

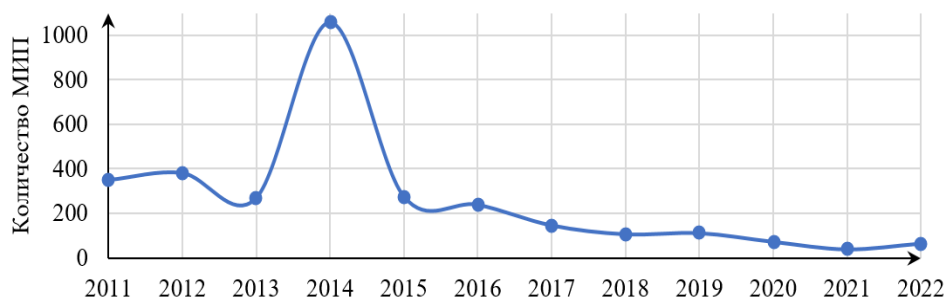


Рис.1. Численность созданных малых инновационных предприятий.

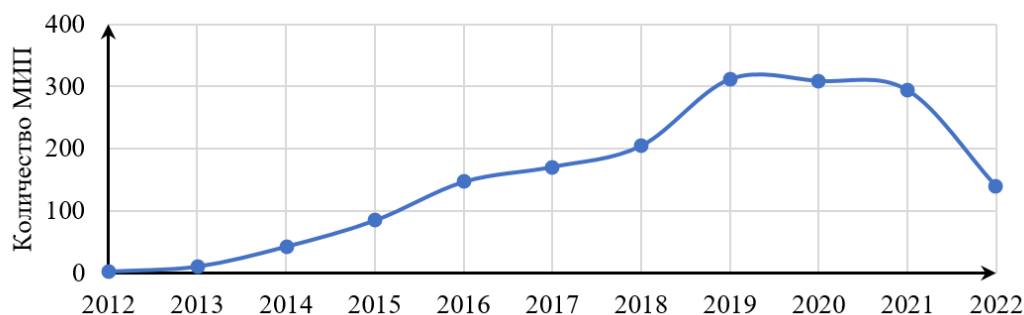


Рис.2. Численность ликвидированных малых инновационных предприятий.

Противоположная картина наблюдается в динамике ликвидации предприятий. С 2012 по 2019 годы число закрывающихся предприятий изменялось практически пропорционально (Рис.2). К 2019 году включительно было закрыто 977 предприятий. После 2019 года наблюдается спад в динамике и в 2022 году количество закрытых предприятий практически в два раза меньше по сравнению с 2019.

В период с 2011 по 2017 год преимущественно открывались предприятия. В 2017 году впервые количество ликвидированных предприятий превысило количество созданных. В период с 2017 по 2021 год предприятия чаще закрывались, чем открывались. К 2022 году наблюдается улучшение сложившейся ситуации, так как закрытие предприятий уменьшилось в два раза, а открытие увеличилось практически в два раза (Рис.3.).

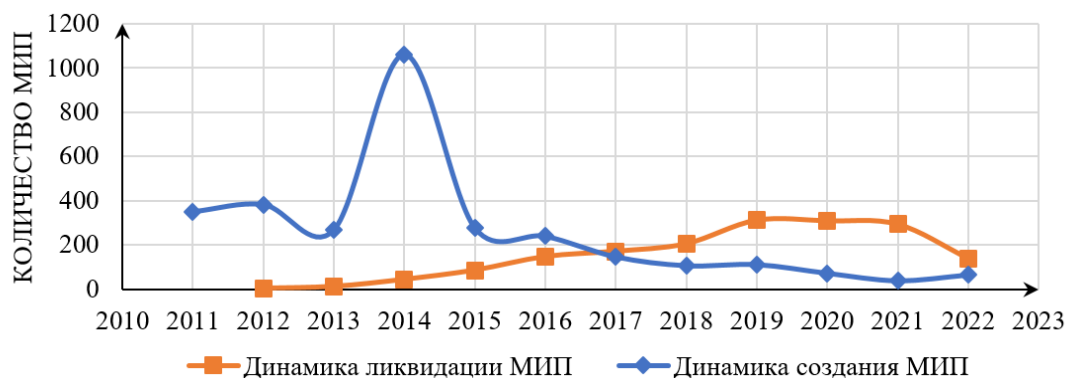


Рис.3. Соотношение динамики создания и ликвидации МИП.

Таблица 1. Сводная таблица создания и ликвидации МИП.

№	Год	Количество созданных малых инновационных предприятий	Количество прекративших работу малых инновационных предприятий
1	2011	350	0
2	2012	382	3
3	2013	268	11
4	2014	1059	43
5	2015	277	85
6	2016	239	147
7	2017	146	171
8	2018	106	205
9	2019	111	312
10	2020	72	309
11	2021	38	294
12	2022	64	139
Итого:		3112	1719

В таблице 1 приведены данные по количеству созданных и ликвидированных предприятий. Данные иллюстрируют сложившуюся ситуацию в период с

2011 по 2022 год. Количество открытых предприятий резко уменьшается после 2014 года. На протяжении практически всего периода количество закрывающихся увеличивается с каждым годом, переломным годом в этой динамике является 2020 год.

Пик в 2014 году и переломный момент в этот период может объясняться некоторыми событиями, которые происходили на тот момент в России и в мире. В 2014 году были введены санкции против России в ответ на события в Крыму. В связи с этим Россия ввела ответные санкции в отношении ряда политиков и чиновников и наметила курс на импортозамещение во всех отраслях. Это могло стать импульсом для активного создания малых инновационных предприятий, способствующих реализации планов государства.

Однако события в тот год могли повлиять на дальнейшее функционирование малых инновационных предприятий. Из-за сложившейся трудной экономической ситуации в 2014 году проводилась зачистка банковского сектора в России. В 2014 году у малых банков отзывались лицензии и крупные и мелкие вкладчики стремились забрать свои

активы из банков. Ряд этих событий могли на резких спад в динамике открытия предприятий, что мы и наблюдаем в 2015 году по сравнению с 2014.

Также в 2012 году был введен закон о контроле за расходами чиновников, в 2013 году его доработали и всем госслужащим необходимо было избавиться от счетов в иностранных банках. Это событие могло стать причиной вложения денег некоторых лиц в малые инновационные предприятия.

В 2015 году наблюдается резкий спад в динамике создания предприятий по сравнению с 2014 годом. Это может объясняться тем, что основная часть предприятий, созданных в 2014 году, функционировали больше 5 лет, поэтому не было необходимости открывать новые предприятия в 2015 году.

Причиной нестабильного функционирования некоторых предприятий, которая относится ко всему периоду с 2011 по 2022 вне зависимости от событий в экономических и промышленных секторах, является цель создания. Довольно часто предприятие создается под грант и после достижения намеченных целей закрывается.

#### **Заключение**

Период с 2011 года по 2022 стал довольно плодотворным по части функционирования малых инновационных предприятий, с учетом того, что количество переживших данный период предприятий составляет 1393, хоть и количество закрытых предприятий составляет больше половины от количества созданных. Невозможно судить об эффективности того или иного предприятия только по его продолжительности существования, для этого необходимо проводить более углубленный анализ, которому может способствовать данная статья.

Данные, структурированные и анализируемые в статье, могут стать основой для углубленного анализа развития инновационного сектора страны, а также помогут сделать выводы о возможности реализации глобального импортозамещения.

Анализ динамики позволяет делать выводы о проделанной работе бюджетных организаций за 10 лет, позволяет определить, какое количество предприятий стабильно функционирует, с какой частотой они создаются и ликвидируются.

#### **Список литературы**

1. О внесении изменений в отдельные законодательные акты Российской Федерации по вопросам создания бюджетными научными и образовательными учреждениями хозяйственных обществ в целях практического применения (внедрения) результатов интеллектуальной деятельности: постановление Правительства Рос. Федерации от 2 авг. 2009 г. № 217: [ред. от 29 декабря 2012 г.] // Собрание законодательства Российской Федерации. – 2009. – № 7. – Ст. 786.

2. Научно-исследовательский институт – Республиканский исследовательский научно-консультационный центр экспертизы: официальный сайт. – 2023. – URL: <https://www.extech.ru> (дата обращения: 02.05.2023). – Текст: электронный.

3. Губаева Л. Как прошло десятилетие: 2014-й. Основные события в России и мире [Электронный ресурс] // Общество: сайт. – URL: <https://realnoevremya.ru>. (дата обращения: 12.05.2023).

4. Технологический маркетинг, коммерциализация и принципы реализации инноваций: учеб. Пособие // Меньшиков В. В., Аверина Ю. М., Зубарев А. М. – Москва: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2017. – 140 с.

УДК 66.061.1

Фунтикова А.Р., Лебедев И.В.

## Использование метода QSPR для определения растворимости веществ в сверхкритических флюидах

Фунтикова Анна Романовна – студентка группы К-35; [ann.funtikova06@mail.ru](mailto:ann.funtikova06@mail.ru)

Лебедев Игорь Витальевич – к.т.н., ведущий инженер Международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В статье рассматривается разработанный программно-аналитический комплекс для автоматизированного создания уравнений растворимости веществ в сверхкритических флюидах (СКФ) с использованием метода количественного соотношения "структура-свойство" (quantitative structure-property relationship, QSPR). Предлагаемый программный комплекс позволяет работать с базой данных молекулярных дескрипторов веществ и экспериментальных значений растворимости веществ в СКФ, а также создавать модели растворимости групп веществ в СКФ по их молекулярной структуре.*

*Ключевые слова: сверхкритические флюиды, растворимость, количественное соотношение "структура-свойство" (QSPR), молекулярные дескрипторы, генетический алгоритм*

### Using data mining methods to predict solubility in supercritical fluids

Funtikova A.R., Lebedev I.V.

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

*The article discusses the developed software and analytical complex for the automated creation of solubility equations of substances in supercritical fluids (GFR) using the quantitative structure-property relationship (QSPR) method. The proposed software package allows you to work with a database of molecular descriptors of substances and experimental values of solubility of substances in the GFR, as well as to create models of solubility of groups of substances in the GFR by their molecular structure.*

*Key words: supercritical fluids, solubility, quantitative structure-property ratio (QSPR), molecular descriptors, genetic algorithm*

### Введение

Сверхкритические флюиды – это вещества, которые находятся в состоянии, называемом сверхкритическим состоянием. В этом состоянии вещества обладают свойствами как газов, так и жидкостей. Сверхкритическое состояние возникает, когда вещество находится при температуре и давлении выше критических значений. При этом состоянии свойства, такие как плотность, вязкость и диффузия, сильно меняются.

Одно из наиболее известных применений сверхкритических флюидов – экстракция различных веществ из сырья. Например, сверхкритический диоксид углерода (СКДУ) широко применяется в процессах экстракции кофеина из зерен кофе и для извлечения растительных масел из семян и орехов.

Сверхкритические флюиды также используются в химическом и фармацевтическом производстве, где они могут служить в качестве растворителей. Благодаря своим уникальным свойствам, сверхкритические флюиды могут проникать в поры твердых материалов и извлекать ценные вещества, такие как лекарственные препараты или полезные химические соединения.

Для уменьшения затрат и повышения эффективности технологических процессов важно предварительно оценить растворимость различных веществ в сверхкритических флюидах (СКФ). Растворимость сильно зависит от структурных свойств растворяемого вещества, таких как его

молекулярная структура, размеры и форма молекулы, а также от условий, при которых происходит процесс, включая давление и температуру.

Для понимания и прогнозирования растворимости в СКФ используется методика, известная как количественное соотношение "структура-свойство" (quantitative structure-property relationship, QSPR). Она основана на поиске математической зависимости между физико-химическими свойствами вещества и его структурой. Для этого используются молекулярные дескрипторы – числовые характеристики, которые описывают различные параметры молекулярной структуры, такие как масса, форма, распределение заряда и функциональные группы.

QSPR позволяет определить корреляции между структурой вещества и его растворимостью в СКФ. Это может быть полезным для разработки новых процессов экстракции или разделения, выбора оптимальных условий процесса и выбора наиболее подходящих флюидов для конкретных задач.

Понимание взаимосвязи между структурой и свойствами веществ позволяет улучшить процессы разработки и проектирования в различных отраслях, включая химическую, фармацевтическую и энергетическую промышленность. Это также помогает сократить время и затраты на эксперименты, предлагая альтернативный путь для предсказания свойств веществ и оптимизации технологических процессов.

В связи с этим был разработан программно-аналитический комплекс, который автоматизирует создание уравнений для расчета растворимости веществ в сверхкритических флюидах с использованием метода QSPR, а также методов интеллектуального анализа данных.

В состав программно-аналитического комплекса входит база данных, разработанная Павлом Гуриковым [1]. Она содержит информацию о растворимости веществ в сверхкритических флюидах, а также данные о молекулярных дескрипторах, которые характеризуют исследуемые вещества. Кроме того, программный комплекс позволяет создавать уравнения зависимости растворимости веществ от их молекулярных дескрипторов. Суть метода QSPR состоит в том, что вещества, обладающие схожими характеристиками, относят к одной группе веществ с подобной структурой. Предполагается, что вещества с похожей структурой обладают схожими свойствами, поэтому целевое свойство (растворимость) для веществ одной группы может быть рассчитано с использованием одной модели. При этом в будущем возможно прогнозирование растворимости вещества, которое может быть отнесено к группе веществ, но для которого отсутствуют экспериментальные данные по растворимости.

Основными задачами при этом становятся задача определения структурных характеристик, влияющих на целевое свойство и по которым возможно отнесение веществ к одной группе, а также создание математической модели растворимости веществ в группе в зависимости от их структурных

характеристик (значений молекулярных дескрипторов). Для поиска зависимости "структура-свойство" был использован генетический алгоритм. Этот алгоритм позволяет определить наиболее значимые структурные характеристики, которые влияют на растворимость группы веществ в сверхкритических флюидах.

В рамках работы была исследована одна группа соединений, для которой были подобраны молекулярные дескрипторы, оказывающие наиболее сильное влияние на растворимость веществ в СКФ, и была найдена зависимость растворимости от молекулярных дескрипторов веществ.

#### Экспериментальная часть

В качестве исследуемых веществ были выбраны полициклические ароматические углеводороды: антрацен, фенантрен, пирен и хризен. Дескрипторы подобраны по схожести значений для всех исследуемых веществ. Таким образом, были выбраны следующие дескрипторы:

- 1) Индекс Винера для взвешенной по электроотрицательности матрицы расстояний (WienerNumbers) – d1;
- 2) Число ароматических связей (Aromatic Bounds Count) – d2;
- 3) Сумма абсолютного значения разности между атомными поляризуемостями всех связанных атомов в молекуле (включая неявные атомы водорода) (bPol) – d3 [2].

В ходе расчета были получены промежуточные уравнения растворимости для индивидуальных веществ, представленные ниже (Таблица 1).

Таблица 1. Уравнения растворимости индивидуальных веществ

Anthracene	$4,68734652022242E-06 * d1 + 2,76742503175858E-06 * d2 + 2,67894938712891E-06 * d3 + 2,74041667708215E-06 * p + 2,13924795488792E-06 * 1/T$
Phenanthrene	$6,69155270172821E-07 * d1 + 1,20634213146118E-05 * d2 + 1,0002404456028E-06 * d3 + 0,08900222558947E-06 * p + 0,000444901641665446 * 1/T$
Pyrene	$6,3711777359113E-06 * d1 + 2,54204496859668E-06 * d2 + 4,26545739372515E-07 * d3 + 5,18234446886105E-06 * p + 2,84053385389994E-08 * 1/T$
Chrysene	$1,77882611834389E-06 * d1 + 4,88944351900809E-08 * d2 + 3,43611464064387E-06 * d3 + 5,14788553358423E-06 * p + 2,85403803123815E-06 * 1/T$

где p – давление, T – температура.

Финальное усредненное уравнение растворимости полициклических ароматических углеводородов имеет вид:

$$S = 3,37662641116261E-06 * d1 + 4,35544643753928E-06 * d2 + 1,88546255318702E-06 * d3 + 5,28991222627923E-06 * p + 0,000112480833247528 * 1/T$$

где S – растворимость (solubility)

На рисунке 1 представлено оконное приложение для работы по созданию уравнений растворимости с содержанием окончательного уравнения растворимости полициклических ароматических углеводородов.

Программный комплекс позволяет выбирать требуемые дескрипторы из базы данных и составлять уравнение растворимости для выбранного вещества.

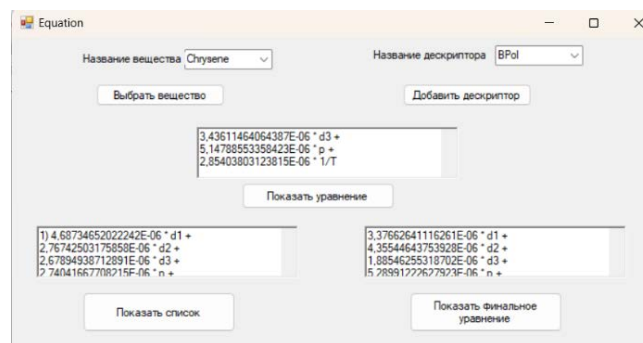


Рисунок 1. Оконное приложение для работы по созданию уравнений растворимости.

При сравнении расчетных и экспериментальных значений растворимости было измерено 10 экспериментальных точек (Таблица 2).

Таблица 2. Расчетные и экспериментальные точки

Расчет	0,00109	0,0011	0,0011	0,00114	0,00148	0,00156	0,00154	0,00212	0,00214	0,00219
Эксперимент	0,00109	0,00117	0,0013	0,00168	0,00135	0,00156	0,00332	0,00146	0,00229	0,00361

На рисунке 2 представлено графическое сравнение значений растворимости.

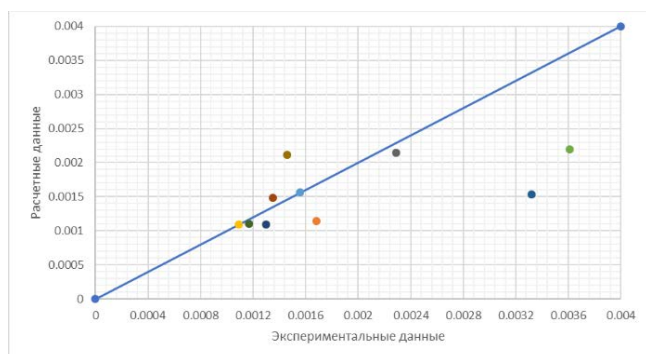


Рисунок 2. Сравнение полученных и экспериментальных значений растворимости полициклических ароматических углеводов.

Среднее отклонение расчетных данных от экспериментальных не превышает 20%, что говорит о том, что найденная зависимость позволяет определять растворимость с достаточной точностью. Также наблюдается падение точности результатов при увеличении растворимости.

#### Заключение

Был разработан программно-аналитический комплекс, который представляет собой инструмент для автоматизации процесса создания уравнений для расчета растворимости веществ в сверхкритических флюидах на основе метода QSPR. Он использует базу данных и генетический алгоритм для определения зависимости между структурными свойствами веществ и их растворимостью, что может быть полезно для разработки новых технологических

процессов и оптимизации условий экстракции и разделения в сверхкритических условиях.

В дальнейшем программный комплекс будет дополнен модулем подбора дескрипторов с использованием интеллектуального анализа данных, которые описывают растворимость веществ, а также группировкой веществ по их свойствам. Этот подход может быть реализован с использованием генетического алгоритма. Такое расширение функциональности существенно упростит процесс расчета растворимости, что может быть полезно во многих химических отраслях и лабораторных условиях.

Интеллектуальный выбор дескрипторов позволит системе автоматически определить наиболее релевантные характеристики молекулярной структуры, которые имеют наибольшее влияние на растворимость в конкретных сверхкритических флюидах. Это существенно ускорит разработку моделей растворимости веществ в СКФ, позволяя автоматизировать процесс подбора дескрипторов, влияющих на растворимость.

#### Список литературы

1. Гуриков П. А. Информационно-аналитический комплекс в области химии и технологии сверхкритических флюидов. – 2010.
2. Ouassaf M. et al. Quantitative Structure Activity Relationship (QSAR) Investigations and Molecular Docking Analysis of Plasmodium Protein Farnesyltransferase Inhibitors as Potent Antimalarial Agents //Jordan Journal of Pharmaceutical Sciences. – 2022. – Т. 15. – №. 3. – С. 315-340.



УДК 62-911, 544.015.4

Митрофанов С.А., Пашкин Е.А., Кислинская А.Ю., Цыганков П.Ю.

**Быстрое расширение сверхкритического раствора для микронизации рифабутина**

Митрофанов Сергей Александрович – бакалавр 4-го года обучения кафедры кибернетики химико-технологических процессов; mitrofanov-2001@list.ru.

Пашкин Евгений Алексеевич – бакалавр 4-го года обучения кафедры кибернетики химико-технологических процессов; pashkin.ea2001@mail.ru.

Кислинская Алина Юрьевна – аспирант 2-го года обучения кафедры химического и фармацевтического инжиниринга.

Цыганков Павел Юрьевич – кандидат технических наук, доцент, научный сотрудник кафедры химического и фармацевтического инжиниринга;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*Разработан подход к микронизации активной фармацевтической субстанции (АФС) – рифабутина – с использованием быстрого расширения сверхкритического раствора (RESS). Продемонстрировано решение одной из проблем технологии – эффекта Джоуля-Томсона, который возникает в ходе быстрого расширения сверхкритического раствора, путём модификации геометрии камеры расширения и внедрения в её конструкцию нагревательных элементов, управляемых при помощи системы автоматического регулирования. Представлены результаты экспериментов по микронизации рифабутина, в ходе которых были определены параметры температуры и давления внутри ёмкости высокого давления ( $T=60\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $P=180\text{ бар}$ ) для достижения наилучшего растворения АФС, получены изображения СЭМ частиц, микронизированных при данных условиях. Полученные частицы имели узкое распределение по размерам в нанометровом диапазоне (50 – 110 нм) и обладали однородной аморфной структурой, вместе с тем проявляя склонность к агрегации.*

*Ключевые слова: быстрое расширение сверхкритического раствора, эффект Джоуля-Томсона, рифабутин.*

**RAPID EXPANSION OF SUPERCRITICAL SOLUTION FOR MICRONIZATION OF RIFABUTIN**

Mitrofanov S.A., Pashkin E.A., Kislinkskaya A.U., Tsygankov P.U.

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

*An approach to micronization of an active pharmaceutical substance (APS) – rifabutin – using rapid expansion of a supercritical solution (RESS) has been developed. The solution of one of the problems of the technology – the Joule-Thomson effect, which occurs during the rapid expansion of a supercritical solution, is demonstrated by modifying the geometry of the expansion chamber and introducing heating elements controlled by an automatic control system into its design. The results of experiments on the micronization of rifabutin are presented, during which the parameters of temperature and pressure inside a high-pressure vessel ( $T=60\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $P=180\text{ бар}$ ) were determined to achieve the best dissolution of APS, images of SEM particles micronized under these conditions were obtained. The resulting particles had a narrow size distribution in the nanometer range (50 – 110 nm) and had a homogeneous amorphous structure, at the same time showing a tendency to agglomeration.*

*Keywords: rapid expansion of supercritical solution, Joule-Thomson effect, rifabutin.*

**Введение**

Значительная часть реализуемых лекарственных средств и новых химических соединений в соответствии с биофармацевтической классификационной системой (БКС) соответствуют классу II [1]. К данному классу относятся препараты, имеющие высокую проницаемость, однако низкую растворимость, что существенно понижает их биодоступность [2]. Одним из вариантов доставки до органа-мишени подобных активных фармацевтических субстанций (АФС) является их внедрение в матрицу-носитель, растворимую *in vivo*, например, в целлюлозу. Также используется метод переведения лекарственного вещества в солевую форму. Однако первый способ не обеспечивает максимальную эффективность высвобождения целевого компонента, а реализация второго осложняется тем, что не все активные фармацевтические субстанции поддаются ионизации.

В этой связи перспективным решением проблемы низкой растворимости является уменьшение размера (микронизация) частиц АФС до нескольких микрон [1]. При его реализации происходит многократное уменьшение размера частиц, приводящее к росту их растворимости в соответствии с уравнением Фрейндлиха-Оствальда:

$$C_r = C_{\infty} \cdot e^{\frac{2 \cdot \sigma \cdot M}{R \cdot T \cdot \rho \cdot r}}, \quad (1)$$

где  $C_r$  – растворимость частиц, имеющих данный радиус [г/л],

$C_{\infty}$  – растворимость частицы, имеющей бесконечный радиус [г/л],

$\sigma$  – поверхностное натяжение на границе частицы и растворителя (межфазное натяжение) [Дж/м<sup>2</sup>],

$M$  – молярная масса вещества частицы [г/моль],

$R$  – универсальная газовая постоянная ( $R = 8,314$  [Дж/моль·К]),

$T$  – температура [K];

$\rho$  – плотность вещества частицы [г/м<sup>3</sup>],

$r$  – радиус частицы [м].

Существует два различных подхода к микронизации АФС: первый из них – «сверху-вниз», второй – «снизу-вверх». Метод «сверху-вниз» заключается в уменьшении размера субстанции с помощью механической обработки, а именно путём дробления, измельчения, истирания [3], а также гомогенизации [4]. Подход «снизу-вверх» основывается на том, что сборка получаемой структуры осуществляется непосредственно из атомов, молекул, структурных фрагментов биологических клеток. По данному принципу, например, происходит формирование частиц в ходе процессов распылительной сушки [5] и распылительно-сублимационной сушки [6].

На сегодняшний день для микронизации АФС перспективным является применение методов сверхкритических флюидных технологий. Одним из таких является процесс быстрого расширения сверхкритического раствора (RESS) [7]. В данном процессе в качестве сверхкритического флюида чаще всего выступает диоксид углерода, так как он обладает низкими критическими параметрами ( $T_{кр}=31,1$  °C и  $P_{кр}=73,8$  бар), после преодоления которых он переходит в сверхкритическое состояние. Также диоксид углерода не токсичен и не горюч.

Свойства вещества в сверхкритическом состоянии занимают промежуточные положения между свойствами жидкости и газа. Так, диоксид углерода в сверхкритическом состоянии имеет высокие плотность и коэффициент диффузии, но в то же время низкую вязкость, что в итоге обеспечивает высокую растворяющую способность по отношению к неполярным веществам [8]. Процесс микронизации с использованием RESS осуществляется на основе следующего механизма: вначале в ёмкости высокого давления происходит растворение АФС в сверхкритическом CO<sub>2</sub>, далее полученный раствор подаётся на форсунку и распыляется в камеру расширения, которая имеет давление и температуру окружающей среды. Из-за резкого перепада давления сверхкритический диоксид углерода переходит в газообразное состояние, приводя к быстрому перенасыщению раствора и, как следствие, высокой скорости образования большого количества аморфных частиц растворённой АФС, радиус которых определяется в соответствии с уравнением (1).

Главными преимуществами технологии RESS являются отсутствие токсичных органических растворителей в ходе процесса микронизации, возможность получения частиц, обладающих однородной аморфной структурой и узким распределением по размерам в микро- и нанодиапазонах. Так, в работах [9] и [10] сообщается об успешном получении микрочастиц лоратадина и левофлоксацина при использовании данного метода.

К недостаткам технологии RESS относится низкая растворяющая способность диоксида углерода по отношению к полярным веществам, какими являются многие АФС; эффект Джоуля-Томсона, результатом которого является охлаждение форсунки, что усложняет процесс микронизации, а также склонность получаемых частиц к агломерации.

### Экспериментальная часть

Начальная конструкция установки для проведения процесса RESS была разработана в лаборатории кафедры химического и фармацевтического инжиниринга (рис.1, А). В ней поток диоксида углерода из баллона (1) через запорный вентиль (2) подаётся в конденсатор (3), где CO<sub>2</sub> полностью переходит в жидкую фазу ( $T_{конд.}=22$  °C при 60 атм [11]).

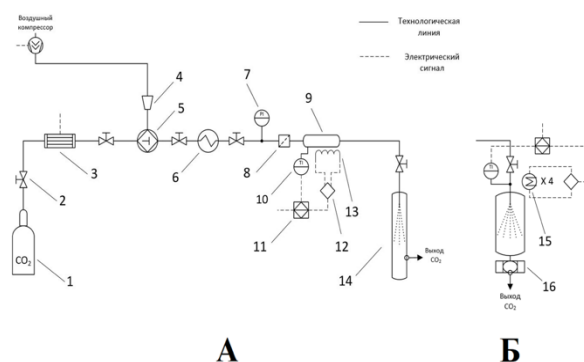


Рис.1. Технологическая схема оборудования: А – исходная установка для проведения процесса RESS, Б – аппаратный узел с модифицированной камерой расширения. 1 – баллон с CO<sub>2</sub>, 2 – запорный вентиль, 3 – конденсатор; 4 – редуктор; 5 – пневматический насос; 6 – нагревательный теплообменник; 7 – манометр; 8 – микронный фильтр; 9 – ёмкость высокого давления; 10 – терморпара; 11 – терморегулятор; 12 – твердотельное реле; 13 – нагревательная лента; 14 – камера расширения; 15 – патронный нагреватель; 16 – фильтр для частиц.

Далее CO<sub>2</sub> подаётся на линию всасывания, где за счёт жидкостного пневматического насоса (5) создаётся необходимое давление, величина которого регулируется с помощью редуктора (4) (отношение давления на редукторе к давлению на линии нагнетания – 1:40). Из насоса диоксид углерода поступает в нагревательный теплообменник (6), в котором происходит его переход в сверхкритическое состояние. Давление сверхкритического CO<sub>2</sub> регистрируется манометром (7) на выходе из теплообменника. Далее по технологической линии диоксид углерода проходит через микронный фильтр (8) и подаётся в ёмкость высокого давления объёмом 22 мл (9), куда предварительно перед началом эксперимента загружается активная фармацевтическая субстанция, подлежащая микронизации. В целях повышения растворимости АФС в сверхкритическом диоксиде углерода, для ёмкости высокого давления создаётся определённый температурный режим. Он регулируется и

поддерживается постоянным за счёт терморегулятора (11), который получает значения температуры от термопары (10), находящейся у входа потока в ёмкость высокого давления, и подаёт соответствующее регулирующее воздействие через твердотельное реле (12) на нагревательную ленту (13), контактирующую непосредственно с самой ёмкостью. Далее при открывании запорного вентиля раствор распыляется через форсунку (Schlick,  $d_{\text{отв.}} = 300$  мкм, угол распыла –  $30^\circ$ ) в камеру расширения (14). В результате газообразный диоксид углерода выходит через боковое отверстие в камере, а частицы оседают внутри.

Однако в данной лабораторной установке не был устранён эффект Джоуля-Томсона. Суть его заключается в том, что при быстром сбросе давления сверхкритический  $\text{CO}_2$ , переходя в газообразное состояние, резко охлаждается. В свою очередь, из переохлаждённого потока выделяется твёрдый диоксид углерода, скапливающийся внутри сопла форсунки и блокирующий дальнейшее распыление раствора. Для решения данной проблемы была произведена модификация камеры расширения, а именно изменена её геометрия, в которую были внедрены 4 патронных нагревателя. На рис.2 А изображена камера расширения до модификации, а на рис.2 Б – после. На рис.1 Б представлена принципиальная схема аппаратного узла, включающего в себя модифицированную камеру расширения.

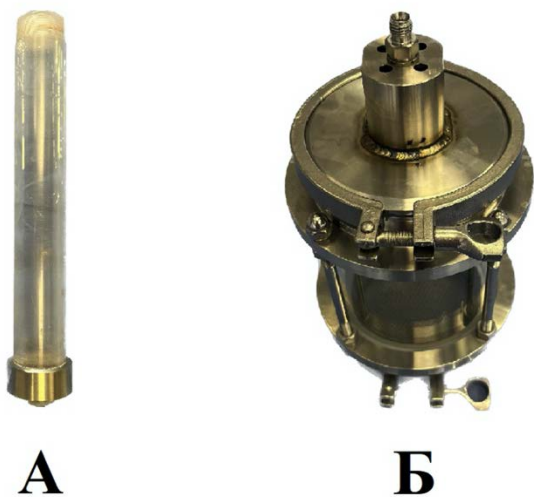


Рис.2. Изображения камеры расширения: А – камера расширения до модификации, Б – после модификации.

Верхняя металлическая крышка, в которую встраивается форсунка, на входе в ёмкость разогревается с помощью 4-х патронных нагревателей, мощностью по 200 Вт каждый. В целях автоматизации процесса регулирования температуры была сформирована система, включающая в себя параллельно соединённые патронные нагреватели, подключённые через твердотельное реле к терморегулятору ТРМ501. Таким образом, с помощью данного аппаратного узла можно разогреть

форсунку до необходимой температуры, чтобы предотвратить образование твёрдой фазы в ходе проведения процесса. В нижней части камеры расширения установлен фильтр, на котором осаждаются полученные частицы при прохождении потока газообразного  $\text{CO}_2$ .

В качестве АФС для исследования процесса быстрого расширения сверхкритического раствора был выбран рифабутин (рис.3). Он является препаратом первого ряда для лечения туберкулёза. Применяется перорально в форме капсул, где имеет низкую биодоступность (20%) [12]. Рифабутин хорошо растворим в хлороформе и метиловом эфире, слабее – в этиловом спирте и сверхкритическом диоксиде углерода, практически нерастворим в воде.

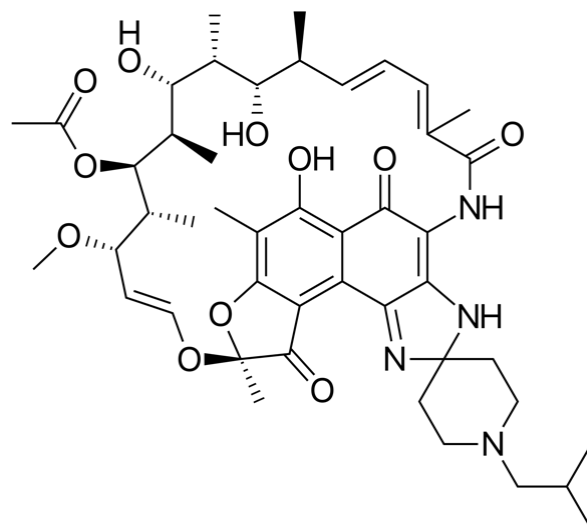


Рис.3. Структурная формула рифабутина.

На модифицированной установке был проведён ряд экспериментов по микронизации рифабутина. Наибольшее количество АФС растворилось в сверхкритическом  $\text{CO}_2$  при следующих параметрах внутри ёмкости высокого давления:  $P=180$  бар,  $T=60$  °С. Для оценки эффективности микронизации с помощью сканирующего электронного микроскопа были сделаны снимки образца рифабутина до (рис.4, А) и после процесса RESS (рис.4, Б).

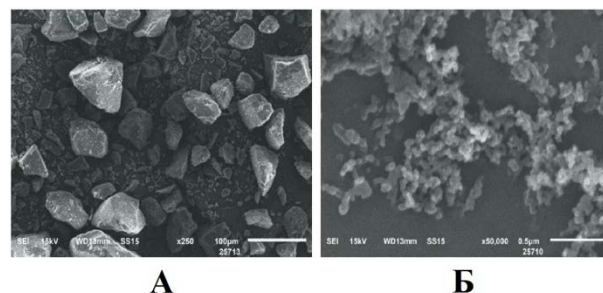


Рис.4. СЭМ-изображения рифабутина: А – образец до микронизации, Б – после микронизации.

Исходные частицы рифабутина имеют размеры от 10 до 100 мкм, обладая при этом кристаллической структурой. В свою очередь, на рис.4, Б частицы, полученные с помощью технологии RESS, представлены в форме агломератов, однако размер

отдельных частиц лежит в диапазоне от 50 до 110 нм. Кроме того, заметна аморфная структура рифабутина. В дальнейшем будут проводиться исследования растворимости и биодоступности данной АФС.

### Заключение

Результатом исследования процесса микронизации с использованием быстрого расширения сверхкритического раствора стало устранение эффекта Джоуля-Томсона путём модификации конструкции лабораторной установки. Были подобраны параметры температуры (60 °С) и давления (180 бар) для растворения рифабутина в сверхкритическом диоксиде углерода. В результате процесса RESS были получены частицы рифабутина размером от 50 до 110 нм. Они имеют аморфную структуру, однако, проявляют склонность к агломерации. В ходе дальнейших работ будет изучена растворимость и биодоступность микронизированных частиц рифабутина, а также разработан способ, предотвращающий образование агломератов.

*Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научной тематики FSSM-2022-0004.*

### Список литературы

1. Olusanmi Dolapo, Jayawickrama Dimuthu; Bu Dongsheng, McGeorge Gary, Sailes Helen, Kelleher Joanne, Gamble John F., Shah Umang V., Tobyn Mike. A control strategy for bioavailability enhancement by size reduction: Effect of micronization conditions on the bulk, surface and blending characteristics of an active pharmaceutical ingredient // Powder Technology. – 2014. – V.258. – P. 222-233.
2. Prakash Khadka, Jieun Ro, Hyeongmin Kim, Iksoo Kim, Jae Min Cho, Gyiae Yun, Jaehwi Lee. Pharmaceutical particle technologies: An approach to improve drug solubility, dissolution and bioactivity // Asian Journal of Pharmaceutical Sciences. – 2014. – V.9. – I.6. – P. 304-316.
3. Stefan Mende. Micronization and Nanonization of Active Pharmaceutical ingredients // Journal of Physical Science and Application. – 2018. – V.8, №3. – P.1-9.
4. Khushwant S. Yadav, Ketaki Kale. High Pressure Homogenizer in Pharmaceuticals: Understanding Its Critical Processes Parameters and Applications // Journal of Pharmaceutical Applications. – 2019. – V.15. – P.690-701.
5. Ohtake S., Izutsu K., Lechuga-Ballesteros D. Drying Technologies for Biotechnology and Pharmaceutical Applications. – 2020.
6. Vishali D.A., Monisha J., Sundari S.S.K., Moses J.A., Anandharamakrishnan C. Spray freeze drying: Emerging applications in drug delivery. – 2019.
7. Rahul Kumar, Amit K. Thakur, Nilanjana Banerjee, Pranava Chaudhari. A critical review of the particle generation and other applications of rapid expansion of supercritical solution // International Journal of Pharmaceuticals. – 2021. – V.608.
8. Polikhronidi Nikolai, Batyrova Rabiya, Aliev Aslan, Abdulagatov Ilmutdin. Supercritical CO<sub>2</sub>: Properties and Technological Applications – A Review // Journal of Thermal Science. – 2018. – V.28. – P.394-430.
9. Gholamhossein Sodeifian, Seyed Ali Sajadian, Nadasadat Saadati Ardestani, Fariba Razmimanesh. Production of Loratadine drug nanoparticles using ultrasonic-assisted rapid expansion of supercritical solution into aqueous solution (US-RESSAS) // The Journal of supercritical Fluids. – 2019. – V.147. – P.241-253.
10. Е.Н. Антонов, Л.И. Кротова, Г.В. Мишаков, В.К. Попов. Микронизация левофлоксацина методом RESS // Сверхкритические флюиды: Теория и Практика. – 2019. – Том 14. - №3.
11. Poling В.Е., Prausnitz J.M., O'Connell J. The Properties of gases and liquids. 5<sup>th</sup> ed. – New York: McGraw-Hill, 2001.
12. Blaschke T.F., Skinner M.H. The clinical pharmacokinetics of rifabutin // Clin. Infect. Dis.: journal. – 1996. – April (vol.22. Suppl.1) – P.S15-21; discussion S21-2. – PMID 8785251.

УДК 004.942

Глушков И. В., Мешалкин В. П., Петухова Е. В.

**Разработка цифрового двойника ректификационных установок производства хлорбензола**

Глушков Игорь Владимирович – магистрант группы МТ-28, докторант; modteh@mail.ru;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9;

ООО «Волга-инновация», Россия, Новочебоксарск, 429950, улица Винокурова, здание 10 помещение 21.

Мешалкин Валерий Павлович – академик РАН, директор Международного Института Логистики

Ресурсосбережения и Технологической Инноватики (НОЦ) Российского химико-технологического

университета им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Петухова Евгения Валерьевна – Магистрант группы МТ-18; заведующий лабораторией кафедры Логистики и

экономической информатики Российского химико-технологического университета им. Д. И. Менделеева,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В статье рассмотрены аспекты разработки математической и компьютерной модели химико-энерготехнологических процессов (ХЭТП) ректификационных установок производства хлорбензола-цифровой двойник, и на ее основе математическая постановка задачи оптимизации энергоресурсоэффективности химико-энерготехнологической системы (ХЭС) посредством интенсификации теплообменных процессов ректификационных установок, что позволяет повышать энергоресурсоэффективность ХЭС, оптимизировать расход сырья и повысить безопасность производства хлорбензола. Разработан быстродействующий вычислительный алгоритм в режиме реального времени, система управления, позволяющая проводить оптимизацию и улучшать энергоресурсоэффективность локальных переменных ХЭТП ректификационных установок. С применением разработанного алгоритма и реализующегося комплекса программ определены научно обоснованные оптимальные энергозатраты, технологические режимы функционирования ХЭС – ректификационных установок производства хлорбензола, что позволяет снижать риски данной ХЭС.*

*Ключевые слова:* Цифровой двойник, производство хлорбензола, ректификационные установки, математическое моделирование, инжиниринг, программно-информационные инструменты.

**Development of a digital twin of rectification plants for the production of chlorobenzene**Glushkov I. V<sup>1,2</sup>., Meshalkin V. P<sup>1</sup>., Petukhova E. V<sup>1</sup>.<sup>1</sup> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation<sup>2</sup> Volga-Innovation LLC, Novocheboksarsk, Russia

*The article considers aspects of the development of a mathematical and computer model of chemical and energy technological processes (HETP) of rectification plants for the production of chlorobenzene—a digital twin, and on its basis the mathematical formulation of the problem of optimizing the energy resource efficiency of the chemical and energy technological system (HTS) by intensifying heat exchange processes of rectification plants, which allows to increase the energy resource efficiency of HTS, optimize the consumption of raw materials and increase production safety chlorobenzene. A high-speed computational algorithm in real time, a control system that allows optimizing and improving the energy resource efficiency of local variables of HETP rectification plants has been developed. Using the developed algorithm and the implemented set of programs, scientifically justified optimal energy consumption, technological modes of operation of HTS – rectification plants for the production of chlorobenzene have been determined, which allows reducing the risks of this HTS.*

*Key words:* Digital twin, production of chlorobenzene, distillation plants, mathematical modeling, engineering, software and information tools

**Введение**

Современное развитие промышленных предприятий невозможно без внедрения в процесс их функционирования информационных технологий (ИТ) управления промышленным процессом и систем АСУТП. Внедрение ИТ позволяет повысить конкурентоспособность промышленных предприятий. В условиях рыночной экономики управление технологическими процессами сопряжены с целым спектром различных рисков.

Информационные технологии позволяют смоделировать ситуацию и выбрать оптимальный вариант автоматизации и управления.

Цифровизированные методы моделирования и принятие на основе их анализа обоснованных решений по управлению промышленными процессами предприятия является преимуществом по отношению к предприятиям, где они не используются. Отечественные промышленные предприятия постепенно приходят к осознанию и выработки стратегии внедрения информационных систем и программных продуктов. Рассматривают ИТ, как средство решения проблем снижения издержек производства и повышения рентабельности труда [1,2].

В данной статье проведено исследование и разработана методика и программно-информационные инструменты инжиниринга цифровых двойников энергоресурсоэффективных ректификационных установок производства хлорбензола ПАО "Химпром".

Разработан цифровой двойник ректификационных установок производства хлорбензола. Исходными данными для разработки был технологический регламент производства хлорбензола и система автоматизации данного промышленного процесса.

### Экспериментальная часть

Цифровой двойник (ЦД), разработанный в соответствии с современными принципами информационных технологий, должен удовлетворять следующим требованиям:

- построение виртуального представления физического продукта;
- обработка данных для облегчения принятия решений по проектированию;
- средства обучения операторов;
- средства контроля и анализа процесса обучения;
- средства поддержки обучаемых и инструктора;
- модель объекта (симуляция поведения продукта осуществляется с помощью технологий имитационного моделирования);
- служебные средства;
- средства адаптации.

Рассмотрим основные подходы к созданию подобного класса компьютерных программ, их инструментальные средства, накопленный методический и практический опыт [3-6].

### Назначение и функциональность ЦД

- выработка у обучаемых интеллектуальных навыков управления технологическим оборудованием как в регламентных, так и во внештатных режимах его работы (предаварийном, аварийном);
- использование инженерными службами для глубокого анализа самых сложных режимов работы оборудования и совершенствования на этой основе режимных карт и эксплуатационных инструкций;
- опережающее обучение персонала; анализ режимов для нового технологического оборудования, которые еще не введены в действие и не освоены в эксплуатации, а также для реконструируемого оборудования;
- совершенствование оперативной квалификации технического персонала предприятий.

Необходимо также отметить, что программное обеспечение ЦД содержит все необходимые средства

для построения верхнего уровня SCADA (в том числе управления реальным оборудованием). Поддерживаются различные интерфейсы связи с рядом промышленных контроллеров, а также с СУБД (например, MySQL).

### Технические характеристики ЦД

Программный комплекс функционирует на IBM PC в однопользовательском или многопользовательском режиме (в локальной сети). ЦД включает: АРМ инструктора; АРМ операторов (до 32 рабочих мест); программно-аппаратные средства связи.

В многопользовательском режиме АРМ инструктора выступает в качестве сервера приложения – на этом компьютере работает математическая модель, что предъявляет повышенные требования к быстродействию данного ПК. Кроме того, возможна организация распределенных систем моделирования и управления.

### Интерфейс пользователя

Программное обеспечение выполнено по объектно-ориентированной технологии и обеспечивает удобный графический интерфейс как для обучаемого, так и для разработчика.

Графический интерфейс пользователя (оператора) ЦД:

- отображает окна необходимых мнемосхем с переходами между ними по ссылкам;
- отображает изменение в РВ (обычно 1 раз в секунду) показаний приборов и элементов сигнализации на мнемосхемах;
- позволяет оператору управлять арматурой и механизмами на мнемосхемах.

Примеры интерфейса разработанного ЦД производства хлорбензола приведены на рис.1 и рис.2.

### Рабочие места ЦД

Операторское АРМ предназначено для управления ТО, получения информации о состоянии оборудования, значениях технологических параметров и выходе их за допустимые пределы, срабатывании технологических защит и блокировок.

АРМ обучаемых на тренажере в соответствии с техзаданием выполняются максимально соответствующими реальным рабочим местам операторов ТО (вплоть до программной эмуляции интерфейса АСУТП ТО при необходимости). Интерфейс операторов ТО на рабочих местах реализуется в виде мнемосхем с элементами управления, приборами контроля (цифровые, стрелочные) и сигнализацией. Мнемосхемы размещаются в ряде взаимосвязанных окон.

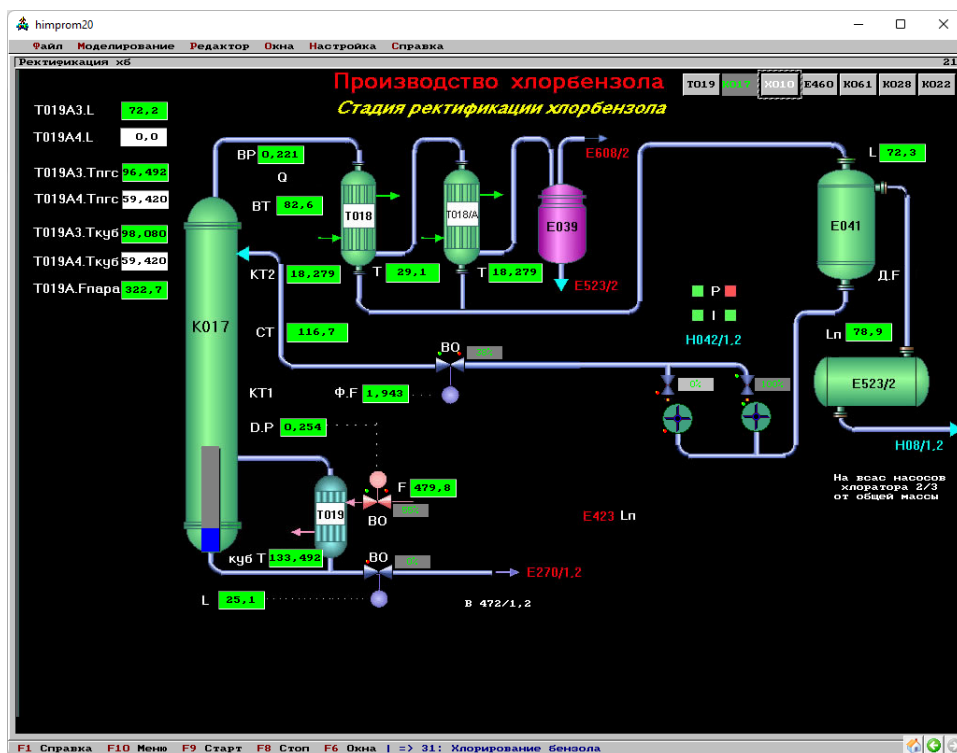


Рис. 1 Пример интерфейса ЦД ректификационной установки хлорбензола

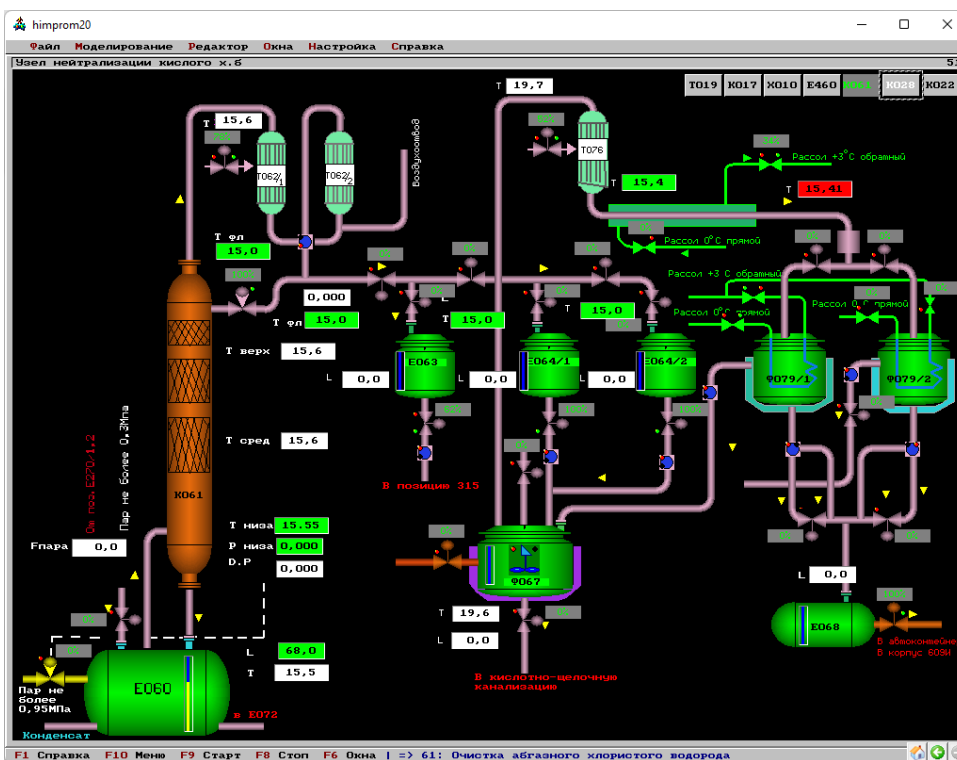


Рис. 2 Пример интерфейса ЦД фракционной ректификации хлорбензола

АРМ инструктора предназначено для подготовки аварийных сценариев, управления моделью в ходе тренировки и экзамена, постановки задач обучаемым, контроля результатов. Инструктору доступно управление любым оборудованием, включенным в состав тренажера, а также оперативное задание различных состояний и неисправностей управляемых элементов (задвижек, вентилей, насосов и т.д.).

#### Динамическая модель и типовые функциональные блоки

В отдельных, недоступных для обучаемого окнах разработчик собирает динамическую модель, имея для этого богатый набор стандартных элементов (узлы, связи, формулы, специальные функции). В отличие от других конструкторов, здесь упрощено составление моделей сложных сетей трубопроводов и

арматуры. Для этого достаточно описать эту сеть в виде графа из узлов и связей с определенной проводимостью. Динамическую ошибку моделирования быстропротекающих процессов можно компенсировать рядом дополнительных механизмов и специальных приемов моделирования [5,6,7].

Набор типовых функциональных элементов достаточен для решения широкого комплекса задач, в том числе:

- построения интерактивного графического интерфейса (то, что обучаемый видит перед собой на экране и чем управляет);
- конструирования математической модели;
- построения распределенных моделей (связь отдельных модулей и передача данных между ними);
- работы с БД (в том числе импорт измерений и экспорт результатов расчетов);
- связи с промышленными контроллерами (для построения систем управления – SCADA);
- регистрации и т.д.

Ниже приведен краткий перечень типовых элементов графического интерфейса пользователя:

- окно (с возможностью одновременно гипертекстовой и иерархической навигации между окнами);
- панель сигнализации;
- кнопка (как тумблер для переключения переменных состояния модели; для гипертекстовой навигации между окнами; для подачи команд управления на другие объекты; для управления симуляцией и просмотра отчетов);
- специфические элементы сигнализации (табло, всплывающие сообщения и др.);

### Заключение

Проведено исследование и разработана методика и программно-информационные инструменты инжиниринга цифровых двойников энергоресурсоэффективных ректификационных установок производства хлорбензола ПАО "Химпром".

Разработан цифровой двойник ректификационных установок производства хлорбензола. Построенный программный алгоритм вычислений позволяет оптимизировать расход сырья,

энергоресурсов и повысить безопасность производства хлорбензола.

Качественные компьютерные модели могут оказать неоценимую помощь при анализе и стратегического прогнозировании работы предприятия – как с точки зрения накопления статистики, так и путем проведения машинного эксперимента по воспроизведению различных ситуаций.

Инструментальные средства данных программ позволяют моделировать сложные объекты и динамические процессы в них. Методы имитационного моделирования, применяемые в таких программах, позволяют максимально приблизить поведение модели к действующему технологическому оборудованию.

### Список литературы

1. Методология алгоритмического и программно-информационного обеспечения тренажеров для повышения энергоэффективности производств. XXX Международная научно-практическая конференция «Приоритетные направления развития науки и технологий», Тула 2022г.
2. Цифровизированные тренажерные программы для подготовки специалистов промышленных предприятий. Журнал "Успехи химии и химической технологии", Том XXXVI №1, Москва, 2022г.
3. Конструктор динамического моделирования. Свидетельство о регистрации программ для ЭВМ №2017614948. Глушков И.В., Ярославцев А.Г., 2017 г.
4. Mittal S., Khan M. A., Romero D., Wuest T. Smart manufacturing: Characteristics, technologies and enabling factors // Proc. of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture. 2019. Vol. 233(5). P. 1342—1361. DOI:10.1177/0954405417736547.
5. Garfinkel J. Gartner Identifies the Top 10 Strategic Technology Trends for 2019 // Gartner Tech. Rep. 2018, Oct.
6. Grieves M., Vickers J. Digital Twin: Mitigating Unpredictable, Undesirable Emergent Behavior in Complex Systems // Kahlen F. J., Flumerfelt S., Alves A. (Eds). Transdisciplinary Perspectives on Complex Systems. Cham: Springer, 2017. P. 85-113. DOI:10.1007/978-3-319-38756-7\_4.



УДК 661.715:66.097.3:665.644

Писаренко Е.В., Пономарев А.Б., Шумакова А.Д., Кочетова А.А.

**Анализ и моделирование процесса гидроизомеризации n-гексана на модифицированных цеолитах**

Писаренко Елена Витальевна – доктор технических наук, профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева, e-mail: evpisarenko@mail.ru;

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

Пономарев Андрей Борисович – кандидат химических наук, старший научный сотрудник ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН;

ФГБУН «ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН»,  
Россия, Москва, 119334, ул. Вавилова, д. 28.

Шумакова Анастасия Дмитриевна – соискатель ученой степени, кафедра кибернетики химико-технологических процессов, РХТУ им. Д. И. Менделеева

Кочетова Анна Александровна – студентка 3 курса бакалавриата кафедры кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И. Менделеева.

*Проанализирована активность, селективность и стабильность нанокатализаторов на основе модифицированных цеолитов в реакции гидроизомеризации n-гексана. Показано, что Pt-содержащие катализаторы типа BEA, модифицированные одним или несколькими металлами промоторами Zn, Cu, Co, Cr, Fe, Ni являются высокоэффективными катализаторами в данной реакции. Экспериментальные исследования проведены в проточном реакторе в диапазоне температур 180-300 °C, давлений 1-15 атм, расходе сырья 0.5-3.0 ч<sup>-1</sup>, соотношений водород : n-гексан 2.0-15.0. Предложен механизм реакции гидроизомеризации n-гексана и построена соответствующая ему кинетическая модель реакции. Оценены кинетические константы модели и показана адекватность модели экспериментальным данным.*

*Ключевые слова: моделирование, кинетика, оценка параметров, цеолиты, гидроизомеризация, n-гексан*

**Analysis and modeling of n-hexane hydroisomerization process over modified zeolites**

Pisarenko E. V.<sup>1</sup>, Ponomaryov A. B.<sup>2</sup>, Shumakova A.D.<sup>1</sup>, Kochetova A.A.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

<sup>2</sup>Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia

*The activity, selectivity, and stability of nanocatalysts based on modified zeolites in the n-hexane hydroisomerization reaction were analyzed. It was shown that Pt-containing catalysts of the BEA type modified with one or several metal promoters Zn, Cu, Co, Cr, Fe, Ni are highly efficient catalysts in this reaction. Experimental studies were carried out in a plug flow reactor in the temperature range of 180-300 °C, pressures of 1–15 atm, feed flow rates of 0.5–3.0 h<sup>-1</sup>, hydrogen : n-hexane molar ratios of 2.0–15.0. A mechanism for the n-hexane hydroisomerization reaction was proposed and a corresponding kinetic model of the reaction was developed. The kinetic constants of the model were estimated and the adequacy of the model to the experimental data was proved.*

*Keywords: modeling, reaction mechanism, kinetics, parameter estimation, zeolites, hydroisomerization reaction, n-hexane.*

**Введение**

В настоящее время наблюдается увеличение потребности в производстве экологически чистых моторных топлив с октановыми числами 93-98 при неуклонном сокращении в составе топлив доли алкилароматических углеводородов (<20 мас. %). Поэтому в топливах должны присутствовать в значительных количествах высокооктановые изоалкановые углеводороды. Каталитический процесс изомеризации пентан-гексановой фракции нефти или газового конденсата является крупнотоннажным промышленным процессом производства бензина-изомеризата [1-2].

Разработанные Pt или Pd-содержащие катализаторы на основе цеолитов MFI или BEA являются эффективными катализаторами гидроизомеризации n-алканов C<sub>5</sub>-C<sub>8</sub> в изомерные алканы [3-5]. В основном для гидроизомеризации n-

гексана применяют различные бифункциональные катализаторы, состоящие из двух типов активных центров. Реакции дегидрирования происходят на металлических центрах (например, Pt, Pd), а реакции изомеризации или гидрокрекинга протекают на кислотных участках цеолитов. Эффективность цеолитсодержащих катализаторов гидроизомеризации зависит от таких факторов как структура цеолита, концентрация и сила кислотных центров, концентрация металлов платиновой группы и способа введения металлов, а также наличия промоторов. В качестве промоторов Pt или Pd-содержащих катализаторов используются Zn, Cu, Co, Cr, Fe, Ni. Проведен анализ активности, селективности и стабильности работы различных каталитических систем в реакции гидроизомеризации n-алканов C<sub>5</sub>-C<sub>6</sub>. Результаты проведенного анализа представлены в таблице 1.

Таблица 1. Анализ активности и селективности работы катализаторов гидроизомеризации n-гексана

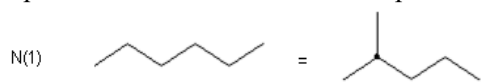
№	Состав катализатора	Условия проведения процесса	Конверсия, %	Селективность, %
[3]	ZrO <sub>2</sub> -Pt (0,3%)- WO <sub>3</sub> (15%)	T = 260 °C P = 6,8 атм WHSV = 1,61 ч <sup>-1</sup> H <sub>2</sub> :C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> = 0,004:1	Xi, % = 44	S <sub>2-мп</sub> , % = 55 S <sub>3-мп</sub> , % = 31 S <sub>2,2- дмб</sub> , % = 4 S <sub>2,3- дмб</sub> , % = 10
[4]	Pt(0,46 %)/H- ZSM-12-at-C Si/Al=43	T = 240°C P = 1 атм WHSV = 4,0 ч <sup>-1</sup> H <sub>2</sub> :C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> = 3:1	Xi, % = 22,74 Xf, % = 21,3 Время работы 11 ч	S <sub>2-мп</sub> , % = 56 S <sub>3-мп</sub> , % = 33 S <sub>2,2- дмб</sub> , % = 2 S <sub>2,3- дмб</sub> , % = 8
[5]	Pt(0,3%)/S@F	T = 340–380°C P = 19,7 атм WHSV = 1,0 ч <sup>-1</sup> H <sub>2</sub> :C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> = 6,5:1	Xi, % = 72,4 при 340°C Xf, % = 81,6 при 380°C	S <sub>2-мп</sub> , % = 53,1 S <sub>3-мп</sub> , % = 37,7 S <sub>2,2- дмб</sub> , % = 0,3 S <sub>2,3- дмб</sub> , % = 2,3

где S<sub>2-мп</sub>, S<sub>3-мп</sub>, S<sub>2,2- дмб</sub>, S<sub>2,3- дмб</sub> – селективность по 2-метилпентану, 3-метилпентану, 2,2-диметилбутану, 2,3-диметилбутану, X<sub>i</sub>, X<sub>f</sub> – исходная и конечная конверсия n-гексана, S@F – SAPO-11 с ионами фтора

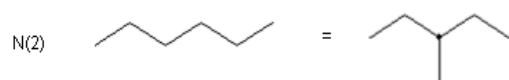
### Экспериментальная часть

Предложен механизм реакции гидроизомеризации n-гексана [4]. На основании предложенного механизма реакции построена

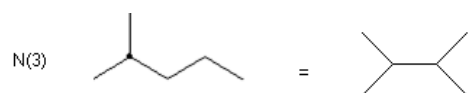
кинетическая модель реакции по методу Хориути. Представлены итоговые реакции по маршрутам и скорости итоговых реакций по маршрутам:



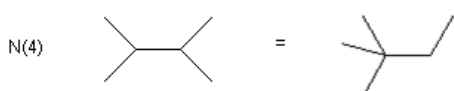
$$r_1 = k_1 \left( \frac{P_{НГ}}{P_{H_2}} - \frac{P_{2мп}}{K_1^{eq} \cdot P_{H_2}} \right) / \left( 1 + K_2 \frac{P_{НГ}}{P_{H_2}} + K_3 \frac{P_{2мп}}{P_{H_2}} \right), (1)$$



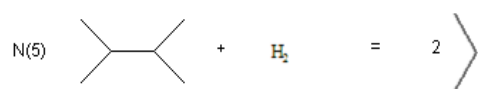
$$r_2 = k_4 \left( \frac{P_{НГ}}{P_{H_2}} - \frac{P_{3мп}}{K_2^{eq} \cdot P_{H_2}} \right) / \left( 1 + K_5 \frac{P_{НГ}}{P_{H_2}} + K_6 \frac{P_{3мп}}{P_{H_2}} \right), (2)$$



$$r_3 = k_7 \left( \frac{P_{2мп}}{P_{H_2}} - \frac{P_{2,3дмб}}{K_3^{eq} \cdot P_{H_2}} \right) / \left( 1 + K_8 \frac{P_{2мп}}{P_{H_2}} + K_9 \frac{P_{2,3дмб}}{P_{H_2}} \right), (3)$$



$$r_4 = k_{10} \left( \frac{P_{2,3дмб}}{P_{H_2}} - \frac{P_{2,2дмб}}{K_4^{eq} \cdot P_{H_2}} \right) / \left( 1 + K_{11} \frac{P_{2,3дмб}}{P_{H_2}} + K_{12} \frac{P_{2,2дмб}}{P_{H_2}} \right), (4)$$



$$r_5 = k_{13} \left( \frac{P_{2,3дмб}}{P_{H_2}} - \frac{(P_{С3Н8})^2}{K_5^{eq} \cdot P_{H_2}} \right) / \left( 1 + K_{14} \frac{P_{2,3дмб}}{P_{H_2}} + K_{15} \frac{P_{С3Н8}}{P_{H_2}} \right), (5)$$

где  $k_i$  – константа скорости  $i$ -ой стадии механизма;  $K_i^{eq}$  – константа равновесия  $i$ -го маршрута реакции;  $P_{НГ}$ ,  $P_{2мп}$ ,  $P_{3мп}$ ,  $P_{H_2}$ ,  $P_{2,3дмб}$ ,  $P_{2,2дмб}$ ,  $P_{С3Н8}$  – парциальные давления n-гексана, 2-метилпентана, 3-метилпентана, водорода, 2,3-диметилбутана, 2,2 – диметилбутана, пропана;  $r_i$  – скорость реакции по  $i$ -му маршруту.

Изучение кинетики реакции гидроизомеризации n-гексана на модифицированных цеолитах типа BEA проводилось в проточном реакторе в диапазоне температур 180-300 °C, давлений 1-15 атм, расходе сырья 0.5-3.0 ч<sup>-1</sup>, соотношений водород : n-гексан 2.0-15.0. Результаты кинетических исследований представлены в таблице 2. На основе

экспериментальных данных методом наименьших квадратов оценены кинетические константы модели. При  $T=300$  °C численные значения констант модели:  $k_1 = 140.0$  атм/ч,  $K_2 = 7.8$ ,  $K_3 = 20.2$ ,  $K_1^{eq} = 1.541$ ,  $k_4 = 39.0$  атм/ч,  $K_5 = 7.8$ ,  $K_6 = 22.8$ ,  $K_2^{eq} = 0.8507$ ,  $k_7 = 49.0$  атм/ч,  $K_8 = 9.6$ ,  $K_9 = 24.2$ ,  $K_3^{eq} = 0.3997$ ,  $k_{10} = 12.0$  атм/ч,  $K_{11} = 12.2$ ,  $K_{12} = 28.1$ ,  $K_4^{eq} = 0.3050$ ,  $k_{13} = 1.5 \cdot 10^{-5}$  1/ч,  $k_{14} = 13.2$ ,  $k_{15} = 30.2$ ,  $K_5^{eq} = 2.314 \cdot 10^{-7}$ .

Таблица 2. Результаты каталитических экспериментов и математического моделирования процесса гидроизомеризации *n*-гексана на катализаторе Pt/BEA

Показатели процесса	P, атм	WHSV, ч <sup>-1</sup>	H <sub>2</sub> /гексан	T, °C			
				240	260	280	300
Конверсия, % (эксп.)	1	1,4	4,2	57,7	79,3	81,9	85,4
(расчет)				57,9	79,1	81,5	85,2
Селективность, %				100,0	96,3	87,5	69,6
Выход 2,2+2,3-ДМБ, %				9,67	25,13	23,48	18,21
Конверсия, % (эксп.)	1	1	3,6	67,9	74,6	78,4	81,2
(расчет)				68,5	75,0	78,7	81,0
Селективность, %				98,9	96	85,5	66,7
Выход 2,2+2,3-ДМБ, %				15,57	22,8	22,03	16,59
Конверсия, % (эксп.)	1	2,8	2,7	38	72,5	78,7	83,6
(расчет)				38,2	73,2	78,3	83,1
Селективность, %				99,4	97,9	90,1	66,5
Выход 2,2+2,3-ДМБ, %				5,495	15,85	21,03	16,1
Конверсия, % (эксп.)	10	0,7	14,6	-	25,9	74,2	79,2
(расчет)				-	25,5	73,9	79,7
Селективность, %				-	100	97,9	92,1
Выход 2,2+2,3-ДМБ, %				-	3,759	19,39	23,6

При проведении кинетических исследований первая задача заключалась в построении кинетической модели, отражающей результаты эксперимента в интервале температур от 180-300 °C и давлений от 1 до 15 атм, а второй задачей было установление оптимальных режимов работы реакторов, обеспечивающих максимальную конверсию *n*-гексана в 2,3-диметилбутан и в 2,2-диметилбутан, которые имеют высокие октановые числа. По модели рассчитаны области протекания каталитической реакции гидроизомеризации *n*-гексана в которых суммарные концентрации 2,2-диметилбутана и 2,3-диметилбутана находятся в интервале от 20 до 25.5 мас.%, что подтверждено результатами эксперимента.

Показано, что в первой серии экспериментов, проведенных при атмосферном давлении, расходе сырья 1,4 ч<sup>-1</sup> и мольном отношении H<sub>2</sub>/гексан = 4,2 максимальный выход 2,2- и 2,3-диметилбутана наблюдается при температуре 260 °C и составляет 25,1 %, при этом конверсия *n*-гексана 79,3 %, а селективность процесса 96,3 % (таблица 2). Во второй серии экспериментов при 1 атм, 1 ч<sup>-1</sup>, H<sub>2</sub>/гексан 3,6 максимальный выход 2,2- и 2,3-диметилбутана при температуре 260 °C составляет 22,8 %, при конверсии *n*-гексана 74,6 % и селективность процесса – 96,0 %. В третьей серии экспериментов при 1 атм, 2,8 ч<sup>-1</sup>, H<sub>2</sub>/гексан = 2,7 максимальный выход 2,2- и 2,3-диметилбутана при температуре 280 °C составляет 21,0 %, при конверсии *n*-гексана 78,7 % и селективности процесса 90,1 %. В четвертой серии экспериментов, проводимых при давлении 10 атм, расходе сырья

Кинетическая модель реакции гидроизомеризации *n*-гексана имеет вид:

$$\begin{aligned}
 R_{\text{HГ}}^B &= -r_1 - r_2 \\
 R_{2\text{МП}}^B &= r_1 - r_3 \\
 R_{3\text{МП}}^B &= r_2 \\
 R_{2,3\text{ДМБ}}^B &= r_3 - r_4 - r_5 \quad (6) \\
 R_{2,2\text{ДМБ}}^B &= r_4 \\
 R_{\text{C}_3\text{H}_8}^B &= 2r_5 \\
 R_{\text{H}_2}^B &= -r_5
 \end{aligned}$$

WHSV=0,7 ч<sup>-1</sup>, H<sub>2</sub>/гексан = 14,6 максимальный выход 2,2- и 2,3-диметилбутана наблюдается при температуре 300 °C и составляет 23,6 %, при этом конверсия *n*-гексана составляет 79,2 %, а селективность процесса – 92,1 %.

#### Заключение

Найдены оптимальные условия проведения процесса гидроизомеризации *n*-гексана при которых достигается максимальный выход дизамещенных углеводородов в продуктах реакции, что позволит получать бензин-изомеризат высокого качества.

#### Список литературы

1. Патент РФ 2658018 Катализатор и способ гидроизомеризации нормальных углеводородов C<sub>5</sub>-C<sub>8</sub> с его использованием
2. Pisarenko E.V. Analysis and modeling of the hydroisomerization process for *n*-hexane / E.V. Pisarenko, A.B. Ponomarev, V.N. Pisarenko // Theor. Found. Chem. Eng. – 2018. – Vol. 52. – I.1. – P. 24-34.
3. Vera-Iturriaga J. et al. Hydroisomerization of *n*-hexane over Pt/WO<sub>x</sub>-ZrO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> catalysts // Catalysis Today. – 2021. – V. 360. – P. 12–19.
4. Lu X. et al. Enhanced catalytic activity of Pt/H-ZSM-12 via alkaline post-treatment for the hydroisomerization of *n*-hexane // Microporous and Mesoporous Materials. – 2020. – V. 306. P. 110459.
5. Liu Y. et al. Eco-friendly synthesis of hierarchical SAPO-11 with fluoride ions for hydroisomerization of *n*-hexane // Microporous and Mesoporous Materials. – 2021. – V. 323. – P. 111229.

УДК 004.8

Куниевский В.В., Дударов С.П., Матроскин А.Г.

### **Влияние состава характеристических признаков на диагностику ухудшения слуха новорожденных в связи с перенесенным ковидом при нейросетевой кластеризации медицинских данных**

Куниевский Валерий Владимирович, студент 3 курса бакалавриата факультета цифровых технологий и химического инжиниринга;

Дударов Сергей Павлович, к.т.н., доцент кафедры информационных компьютерных технологий; dudarov@muctr.ru;

Матроскин Александр Геннадьевич, к.м.н., старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории клинической и экспериментальной детской оториноларингологии

<sup>1</sup> ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

<sup>2</sup> ФГАОУ ВО «Российский национальный исследовательский медицинский университет им. Н.И. Пирогова», Россия, Москва, 117997, ул. Островитянова, дом 1.

*В данной статье исследуется влияние состава характеристических признаков на диагностику ухудшения слуха у новорожденных, связанного с перенесенным ковидом. Для анализа медицинских данных используется нейросетевая кластеризация, позволяющая выявить скрытые зависимости между различными показателями здоровья. Рассматриваются различные варианты кластеризации с целью выявления зависимостей от определенных показателей. Результаты исследования могут быть полезны для дальнейшего изучения и применения в клинической практике.*

*Ключевые слова:* ковид, медицина, нейросети, кластеризация данных, интеллектуальный анализ данных, слух

### **The influence of the composition of characteristic features on the diagnosis of hearing impairment of newborns in connection with the transferred covid during neural network clustering of medical data**

Kunievskiy V.V.<sup>1</sup>, Dudarov S.P.<sup>1</sup>, Matroskin A.G.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

<sup>2</sup> Pirogov Russian National Research Medical University

*In this article, the influence of the composition of characteristic features on the diagnosis of hearing impairment in newborns associated with the transferred covid is investigated. For the analysis of medical data, neural network clustering is used to identify hidden dependencies between various health indicators. Various clustering options are considered in order to identify dependencies on certain indicators. The results of the study may be useful for further study and application in clinical practice.*

*Keywords:* covid, medicine, neural networks, data clustering, data mining, hearing

Новая коронавирусная инфекция (COVID-19, ковид) – острое вирусное заболевание с аэрозольно-капельным и контактно-бытовым механизмом передачи. Заболевание вызывается вирусом Sars-COV-2, поражающим преимущественно легкие и сосуды, однако возможны поражения других органов и систем в том числе и слуха [1]. Работы в основном посвящены взрослым, данных о влиянии на слуховую функцию детей крайне мало и нет достоверной информации о внутриутробном влиянии вируса на органы слуха.

Использование искусственных нейронных сетей для анализа медицинских данных имеет огромный потенциал для выявления скрытых закономерностей и связей между различными показателями здоровья [2]. В случае исследования связи между заболеванием ковидом и ухудшением слуха у новорожденных нейросетевая кластеризация позволяет обрабатывать большие объемы данных и выявлять вероятные скрытые зависимости между различными медицинскими показателями.

Одно из возможных применений нейронных сетей – автоматическое выделение группы новорожденных детей с нарушением слуховой функции, которые ранее были неочевидны или незаметны для медицинских

специалистов. При этом в процессе анализа данных можно увидеть, какие черты являются общими для детей, попавших в тот или иной кластер, и какие имеются отличительные признаки у кластеров. Следует заметить, что можно выбирать различные параметры и ограничения для кластеризации, тем самым находя различные зависимости, связанные с возрастом, показателями по определенным видам обследований, по времени заболевания и т.д. Также нейросеть может помочь в быстром и точном анализе данных, что позволяет сократить время на исследования, диагностику и принятии решения о плане лечения.

В данной работе рассматривается задача прогнозирования риска возможного развития тугоухости или глухоты у детей первых полутора лет жизни, у которых был выявлен ковид вскоре после рождения или мамы которых перенесли данное заболевание в период беременности. При установлении повышенного риска ухудшения слуховой функции своевременно выполненный нейросетевой анализ медицинских данных может помочь в лечении и профилактике соответствующих состояний.

Необходимо учитывать, что использование нейронных сетей в медицинских исследованиях требует

тщательной валидации результатов, а также соблюдения этических принципов и конфиденциальности данных пациентов. Также важно учитывать, что нейросетевой анализ не должен заменять медицинскую экспертизу и диагностику, а должен служить инструментом для более точного и эффективного исследования медицинских данных.

Исследование выполнялось с использованием математического аппарата нейронной сети Кохонена. Принцип ее работы заключается в том, что она создает систему нейронов, каждый из которых связан со входами. Связи нейрона характеризуются вектором весовых коэффициентов, каждый из которых соответствует определенному входному признаку. В процессе самообучения веса нейронов настраиваются на схожие наборы входных данных. При этом каждый нейрон сети – это определенный кластер объектов (в нашем случае – пациентов), обладающих близкими по величине признаками.

В начале работы алгоритма самообучения веса нейронов выбираются случайно, в зависимости от поданных примеров, а затем на каждой итерации находится ближайший нейрон (нейрон-победитель), соответствующий новому входному вектору [3]. По значениям входных переменных обновляются веса самого нейрона-победителя, а также (в случае включения в настройках алгоритма соответствующей опции) с меньшим коэффициентом значимости – веса других, ближайших к входному вектору нейронов. Критерий близости входов к кластеру – евклидово расстояние между ними и координатами его центра.

Для решения поставленной задачи использована выборка данных по результатам исследования слуховой функции детей, переболевших ковидом, а также детей, чьи матери перенесли данное вирусное заболевание во время беременности, что предположительно могло повлиять на внутриутробное развитие органов слуха у плода, и в дальнейшем привести к развитию тугоухости или глухоты у ребенка в течение первых полутора лет жизни. По каждому ребенку помимо показателей обследований имеется информация о возрасте на момент обследования, сроке гестации, времени болезни (самого ребенка или матери соответственно), а также о других характеристиках, установленных в процессе исследования слуховой функции.

В ходе процедуры жесткой кластеризации по одному единственному признаку – возрасту на момент обследования – задавались количество кластеров, коэффициент скорости самообучения, количество эпох. По результатам распределения по кластерам выполнялся кластерный анализ, позволивший получить обобщенную характеристику кластеров, которую можно распространить на детей, попавших в них и, как следствие, сделать в их отношении общие выводы.

Рассмотрим результаты распределения слуховых показателей детей по возрасту на момент прохождения обследования, разделив их на следующие группы: от 0 до 3 мес. (1 кластер, 16 детей), от 3 до 6 мес. (2 кластер, 60 детей), от 6 до 9 мес. (3 кластер, 48 детей), от 9 до 12 мес. (4 кластер, 43 ребенка), от 12 мес. и старше (5 кластер, 91 ребенок).

На рис. 1 представлены все 5 кластеров с соответствующими им средними значениями характеристических признаков.

В настоящее обследование входили дети, как рожденные в срок физиологических родов, так и недоношенные. Учитывая критерии кластеризации, а именно возраст, распределение детей относительно сроков гестации, получилось, что в первый и второй кластеры вошли в основном дети, рожденные на сроке 29 недель, в третий кластер – 36 недель, а в четвертый и пятый кластеры – 32 недели.

Распределение показывает, что выборка представлена в основном детьми недоношенными, с незрелым органом слуха при рождении, что очень важно учитывать в дальнейшем при диагностике, в связи со склонностью этого контингента детей к развитию транзиторной (приходящей) тугоухости или аудиторной нейропатии.

Дополнительно к этому для сравнения была произведена стандартная, полная кластеризация на основе алгоритма нейронной сети Кохонена также по 5 кластерам, формируемым случайным образом с учетом всех характеристических признаков. Результаты данной кластеризации можно увидеть детально на рис. 2. Здесь в полном объеме раскрываются особенности результатов исследования слуховой функции у детей методами отоакустической эмиссии и в особенности слухового ответа на постоянный сигнал (ASSR – Auditory Steady State Response) и коротколатентных слуховых вызванных потенциалов (КСВП) в первые 18 мес. жизни, что является важным в своевременной диагностике тугоухости и глухоты, особенно у недоношенных детей.

Для сравнения результатов кластеризации по одному и по всем признакам возьмем более-менее похожие группы из получившихся в каждом случае по соотношению детей, переболевших самостоятельно и детей, чьи матери переболели ковидом (кластеры под номерами 4 в обоих случаях).

При кластеризации по ограниченному набору признаков возраст детей, прошедших обследование, составил зафиксированное значение 9 мес. Одновременно во втором случае – чуть более 6 мес., что уже говорит о разном составе исследуемых пациентов в этих кластерах.

При сравнении четвертых кластеров отмечается одинаковый средний показатель срока гестации. В части исследования слуховой функции имеет место схожая общая картина показателей отоакустической эмиссии на частоте продукта искажения (первые 8 строк). Значения амплитуды ответа соответствуют низкоамплитудным сигналам, что может говорить о сохраняющейся незрелости улитки, однако есть положительная возрастная динамика.

Показатели ASSR соответствуют норме как в 6, так и в 9 месяцев.

При сравнении общей картины соответствия данных КСВП другим показателям внутри каждой таблицы следует отметить несоответствие картины КСВП данным, полученным при других методах обследования. Однако, если сопоставлять КСВП в

кластере 4 детей в возрастах 6 и 9 месяцев, отмечается отрицательная динамика при сравнении показателей латентности акустического ответа на правое ухо при стимуляции на 40 и 60 дБ и стабильно низких показателей при всех стимуляциях на левое, что может говорить как об ухудшении слуховой функции, так и незрелости, и требует дальнейшего наблюдения за недоношенными детьми. При сохранении в дальнейшем таких данных или прогрессирующем увеличении показателей ASSR детям будет рекомендовано обращение в сурдологический центр для реабилитации.

Предварительный анализ результатов показывает, что существуют различия в показателях слуховой функции у детей, переболевших ковидом

самостоятельно или чьи матери перенесли заболевание во время беременности. В первом случае (когда болели дети) это может быть связано с воздействием вируса на отделы слухового анализатора, который является во многих случаях еще не сформированным до конца, а во втором (когда болели мамы) – с повышенным риском преждевременных родов, гипоксии плода, возможным нарушением внутриутробного органогенеза или внутриутробным воздействием на нейроны периферического или центрального отделов слухового анализатора. Данные различия подтверждаются результатами обследований как по отоакустической эмиссии, так и по ASSR и КСВП.

Свойство	1 Кластер	2 Кластер	3 Кластер	4 Кластер	5 Кластер
Мать	0,3125	0,2333	0,9375	0,5116	0,3407
Срок беременности на момент болезни	4,75	5,6	21,2083	9,9767	6,8571
Ребенок	0,6875	0,15	0,0625	0,3488	0,1648
Возраст на момент болезни	6,3125	1,1	0,3333	1,6047	0,6813
срок гестации на момент обследования(нед)	29,45	29,275	35,9583	32,0744	29,9495
возраст на момент обследования	16	12	3	9	6
отоакустическая эмиссия Пр.уха 1кГц	0,1062	2,86	1,275	1,9791	1,1099
отоакустическая эмиссия Пр.уха 2кГц	8,3563	10,7617	6,1835	7,6605	8,2396
отоакустическая эмиссия Пр.уха 4кГц	10,4625	8,4067	4,1917	6,9	6,0066
отоакустическая эмиссия Пр.уха 6кГц	5,8813	4,0683	2,6838	4,5349	4,0846
отоакустическая эмиссия Лев.уха 1кГц	6,0625	1,245	1,3854	2,4	1,4176
отоакустическая эмиссия Лев.уха 2кГц	13,8688	11,95	6,2396	8,1767	8,0791
отоакустическая эмиссия Лев.уха 4кГц	9,3188	7,8867	3,9771	6,693	5,6593
отоакустическая эмиссия Лев.уха 6кГц	6,3438	3,8333	2,2396	2,2442	2,0956
отоакустическая эмиссия Пр.уха 0,5-1,5кГц	2,375	0,5	0,6042	1,8605	0,4286
отоакустическая эмиссия Пр.уха 1,5-2,5кГц	14,2312	3,9333	7,2083	10,0233	4,1868
отоакустическая эмиссия Пр.уха 2,5-3,5кГц	11,875	3,0833	6,875	8,6744	4,3077
отоакустическая эмиссия Пр.уха 3,5-4,5кГц	9,0625	0,95	6,0208	6,2558	3,3956
отоакустическая эмиссия Пр.уха 4,5-5,5кГц	1,4375	0,15	0,5833	1,4186	0,6264
отоакустическая эмиссия Лев.уха 0,5-1,5кГц	4	1,1167	2	1,3488	0,2747
отоакустическая эмиссия Лев.уха 1,5-2,5кГц	15,25	3,2	7,2292	10,5581	3,8791
отоакустическая эмиссия Лев.уха 2,5-3,5кГц	12,3125	2,3167	7,2292	10,3953	3,7582
отоакустическая эмиссия Лев.уха 3,5-4,5кГц	9,125	1,3833	5,9583	6,186	2,8901
отоакустическая эмиссия Лев.уха 4,5-5,5кГц	2,4375	0,3667	0,4583	0,7209	0,3846
ASSR Пр.уха 500Гц	16,5625	29,4167	15,9375	27,6047	28,8462
ASSR Пр.уха 1000Гц	12,8125	18,5	13,3333	21,3953	20,989
ASSR Пр.уха 2000Гц	7,1875	15,8333	12,5	18,7209	20,2198
ASSR Пр.уха 4000Гц	13,125	15,8333	11,3542	20	19,3407
ASSR Лев.уха 500Гц	21,875	29,75	16,6667	30,1163	29,4505
ASSR Лев.уха 1000Гц	17,5	20	15,3125	23,1395	20,0549
ASSR Лев.уха 2000Гц	13,125	20,5833	13,4375	20	18,0769
ASSR Лев.уха 4000Гц	11,875	18,5	11,5625	21,0465	16,7033
КСВП латентность Пр.уха 20	4,2081	3,068	1,389	4,0686	2,8938
КСВП латентность Пр.уха 40	3,6162	3,1275	1,6571	3,6444	2,9701
КСВП латентность Пр.уха 60	3,2088	4,3713	1,3808	3,044	3,1587
КСВП латентность Лев.уха 20	4,2875	3,0565	1,3862	3,4919	2,6179
КСВП латентность Лев.уха 40	3,6075	3,05	1,5148	3,0067	8,7215
КСВП латентность Лев.уха 60	2,8538	4,3163	1,3165	2,86	2,74

Рис. 1. Вывод средних значений при кластеризации по возрасту на момент обследования

Свойство	1 Кластер	2 Кластер	3 Кластер	4 Кластер	5 Кластер
Мать	0,3333	0,6	0,4615	0,6	0,3714
Срок беременности на момент болезни	8,463	17,8	8,8462	13,2667	7,7714
Ребенок	0,3148	0,4	0,2308	0,2667	0,0857
Возраст на момент болезни	2,3148	2,4	1	1,4	0,4286
срок гестации на момент обследования(нед)	30,6148	35,4	33,5769	32	29,6914
возраст на момент обследования	9,9074	9,2	7,8462	6,4	8,6571
отоакустическая эмиссия Пр.уха 1кГц	2,3648	0	0	1,9733	-0,9286
отоакустическая эмиссия Пр.уха 2кГц	14,6611	11,18	0	6,9267	1,8371
отоакустическая эмиссия Пр.уха 4кГц	12,3556	6,12	-0,3077	4,9267	0,4914
отоакустическая эмиссия Пр.уха 6кГц	6,0278	2,16	0	2,5147	0,9686
отоакустическая эмиссия Лев.уха 1кГц	2,137	0	0	3,3933	0,3229
отоакустическая эмиссия Лев.уха 2кГц	14,1111	0	0,5769	8,4867	5,0486
отоакустическая эмиссия Лев.уха 4кГц	11,2778	0	1,1	8,1267	1,4543
отоакустическая эмиссия Лев.уха 6кГц	4,7222	0	1,1692	-0,2	0,1143
отоакустическая эмиссия Пр.уха 0,5-1,5кГц	2,2037	0	0	0	1
отоакустическая эмиссия Пр.уха 1,5-2,5кГц	10,9019	8,4	0	10	2,0286
отоакустическая эмиссия Пр.уха 2,5-3,5кГц	9,6111	8	0	9,7333	1,5143
отоакустическая эмиссия Пр.уха 3,5-4,5кГц	6,4259	0	0	6,7333	0,6857
отоакустическая эмиссия Пр.уха 4,5-5,5кГц	1,2037	0	0	0	0,2857
отоакустическая эмиссия Лев.уха 0,5-1,5кГц	2,5185	0	0	1,4667	0,6857
отоакустическая эмиссия Лев.уха 1,5-2,5кГц	10,0185	3	2	8,8667	3,0857
отоакустическая эмиссия Лев.уха 2,5-3,5кГц	8,8704	0,8	1,2308	10	2,3143
отоакустическая эмиссия Лев.уха 3,5-4,5кГц	6	0	0,3077	6,3333	1,6571
отоакустическая эмиссия Лев.уха 4,5-5,5кГц	0,7222	0	0	0	0,6
ASSR Пр.уха 500Гц	25,5556	13	58,4615	27,3333	32,5714
ASSR Пр.уха 1000Гц	16,7593	12	61,9231	16,6667	22,2857
ASSR Пр.уха 2000Гц	15	8	61,5385	13,6667	20,2857
ASSR Пр.уха 4000Гц	14,2593	42	65	16	18,5714
ASSR Лев.уха 500Гц	26,7593	83	60	29,3333	32,1429
ASSR Лев.уха 1000Гц	17,2222	86	52,6923	22	20,8571
ASSR Лев.уха 2000Гц	15,1852	77	62,3077	14,6667	18,5714
ASSR Лев.уха 4000Гц	14,0741	82	57,3077	19	18,1429
КСВП латентность Пр.уха 20	6,6313	3,6	0	2,7773	5,3794
КСВП латентность Пр.уха 40	5,8613	3,078	0,4308	5,0753	5,0509
КСВП латентность Пр.уха 60	4,9689	0	2,0615	4,6047	5,3677
КСВП латентность Лев.уха 20	6,693	0	1,0923	0	6,3117
КСВП латентность Лев.уха 40	5,8246	0	2,02	2,7053	5,99
КСВП латентность Лев.уха 60	4,588	1,266	3,4562	4,266	4,4083

Рис. 2. Вывод средних значений при кластеризации по всем характеристикам

Оба варианта кластеризации интересны с точки зрения результатов и могут помочь при диагностике проблем развития слуха ребенка и их своевременной коррекции. Так, например, по первому способу кластеризации можно более детально изучить развитие заболевания, а также осложнений после болезни, в то время как по второму способу кластеризации можно лучше выявить группы детей, поддающиеся влиянию вируса в большей степени чем остальные.

#### Список литературы

1. Русецкий Ю.Ю. и др. Оториноларингологические аспекты течения заболевания у детей, инфицированных вирусом

SARS-CoV-2/ Ю.Ю. Русецкий, И.Ю. Мейтель, А.Р. Бабаян, У.С. Малявина. – Вестник оториноларингологии, 2020, т. 85, №2. – С. 63–66.

2. Матвеев Д.И., Дударов С.П. Классификация медицинских данных с использованием многослойных перцептронов/ Д.И. Матвеев, С.П. Дударов. – Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXXIII, № 11. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2019. – с. 65–67.

3. Дударов С.П., Папаев П.Л. Теоретические основы и практическое применение искусственных нейронных сетей. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2014. – 104 с.

УДК 004.94+536.71

Магеррамов Т.М., Митричев И.И.

**Прогнозирование растворимости хладагентов в смазочных маслах на основе уравнений состояния на языке Python**

Магеррамов Тимур Магомедович – бакалавр 4-го года обучения кафедры информационных компьютерных технологий; temik711k@gmail.com.

Митричев Иван Игоревич – кандидат технических наук, доцент кафедры информационных компьютерных технологий;

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

*Представлена программа на основе уравнений состояния, способная рассчитывать парожидкостное равновесие для смесей нескольких хладагентов с маслом при различных давлениях и температурах. При наличии критических параметров компонентов смеси, пользователь получает рассчитанные мольные доли компонентов в жидкой фазе.*

*Ключевые слова: программа, уравнения состояния, парожидкостное равновесие, система хладагент-масло, давление, температура, критические параметры, мольные доли.*

**Prediction of the solubility of refrigerants in lubricating oils using equations of state in Python**

Magerramov T.M., Mitrichev I.I.

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

*A program based on equations of state is presented, which is capable of calculating vapor-liquid equilibrium for several refrigerant-oil systems at different pressures and temperatures. In the presence of critical parameters of the mixture components, the user obtains calculated molar fractions in the liquid phase.*

*Key words: program, equations of state, vapor-liquid equilibrium, refrigerant-oil system, pressure, temperature, critical parameters, molar fractions.*

**Введение**

На данный момент существует множество механизмов, осуществляющих работу технологических систем и установок. Для обеспечения нормального и стабильного функционирования этих систем необходимо использование различных типов масел – сложных смесей химических веществ. Кроме масел, в системе присутствуют газы, которые под воздействием температуры и давления могут переходить из растворенного состояния в свободное, изменяя тем самым свойства системы. Это приводит к образованию газомасляной смеси, которая имеет другие свойства по сравнению с первоначальным состоянием.

Расчет парожидкостного равновесия системы хладагент/масло с помощью специализированной программы может иметь широкое применение в различных областях, связанных с технологическими системами и установками.

В области кондиционирования и охлаждения, например, используются системы хладагент/масло для создания оптимальных температурных условий в помещениях и на оборудовании. Зная доли каждого элемента при определенной температуре и давлении, можно выбирать наиболее эффективный и экономичный вариант системы для конкретной задачи.

В области химической промышленности программа может быть полезна для проектирования и оптимизации процессов смешения различных

химических веществ и контроля их парожидкостного равновесия.

Также, данная программа может быть востребована в научных исследованиях, связанных с изучением парожидкостного равновесия систем и разработке новых материалов и технологических процессов на его основе.

**Модели и методы исследования**

Рассматривалась система, состоящая из хладагента (HCFC-22, R-115 или R-502 – азеотропной смеси газов R-22 и R-115 в процентном массовом соотношении 48,8/51,2) – и минерального масла. В данной работе мы рассматривали только минеральное масло ISO класса вязкости 32, так как по нему имелись экспериментальные значения составов фаз при взаимодействии масла и указанных газов [1].

За основу расчетных моделей были взяты классы PRMIX и SRKMIX из термодинамической библиотеки thermo на языке Python [2]. Эти классы основаны на кубических уравнениях состояния Пенга-Робинсона (PR) и Соаве-Редлиха-Квонга (SRK) соответственно, что используются для расчета параметров состояния газов и жидкостей.

Основное уравнение PR для смесей (PRMIX) определяется следующей формулой (1)

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a\alpha(T)}{v(v + b) + b(v - b)} \quad (1)$$

Уравнение SRK для смесей (SRKMIX) определяется формулой (2)

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a\alpha(T)}{V(V + b)} \quad (2)$$

где  $P$  – давление,



$R$  – универсальная газовая постоянная,  
 $T$  – температура,  
 $V(v)$  – мольный объем,  
 $aa(T)$  и  $b$  – параметры кубического уравнения.

Уравнение состояния SRK, реализованное классом SRKMIX, более точно описывает поведение реальных жидкостей при высоких давлениях и близких к критическим точкам условиях. Это связано с использованием уравнения состояния, которое учитывает взаимодействие между молекулами, их размерами и формой. Однако, в некоторых случаях, SRK может быть менее точным для описания поведения жидкостей при низких давлениях и более низких температурах.

Уравнение состояния PR, реализованное классом PRMIX, имеет преимущество в более точном описании поведения смесей жидкостей при более низких давлениях и температурах. Однако, при более высоких давлениях и близких к критическим условиям, PR может быть менее точным.

Таким образом, выбор между SRKMIX и PRMIX будет зависеть от конкретной задачи и условий, в которых будет происходить расчет свойств смесей жидкостей.

В данной задаче диапазон температур был от  $-10^{\circ}\text{C}$  до  $125^{\circ}\text{C}$ , и использовался широкий диапазон значений давления в докритической области, поэтому было решено реализовать и сравнить две модели по качеству прогнозирования растворимости хладагентов в системе хладагент/масло.

Для расчета равновесного состояния жидкости и пара использовался класс FlashVL из модуля thermo.flash. При заданных термодинамических условиях, таких как температура, давление и состав смеси, определяется равновесное состояние в соответствии с термодинамическими условиями равновесия, такими как условие равенства химических потенциалов компонентов в двух фазах.

Точность кубических уравнений состояния сильно зависит от используемых коэффициентов бинарного взаимодействия. Yokozeki [3] было показано, что для предсказания растворимости газов в смесях со смазочными маслами необходимо дополнительная параметризация и усложнение моделей. Поэтому было принято решение аппроксимировать коэффициенты бинарного взаимодействия  $k_{ij}$  линейной зависимостью от температуры, как использовано в [3]:

$$k_{ij} = x_0 + (T[i] - T[0]) * b, \quad (3)$$

где  $x_0$  – значение коэффициента при опорной температуре,

$T[i]$  – температура эксперимента, К,

$T[0]$  – опорная температура, К,

$b$  – угловой коэффициент.

Значения  $x_0$  и  $b$  оптимизируются в программе на основе данных эксперимента. Для этого используется библиотека оптимизации Scipy. В качестве начальных приближений используются значения  $k_{ij}$ , подобранные вручную.

Пользователю предлагается два варианта программы для

двухкомпонентной/трехкомпонентной системы на основе уравнений состояния Пенга-Робинсона/Соаве-Редлиха-Квонга. Во входных данных необходимо указать файлы, содержащие экспериментальные значения давления, мольных долей компонентов в исходной смеси, мольные доли компонентов в жидкой фазе при различных значениях температуры. Далее необходимо задать критические параметры (температура, давление), ацентрический фактор и молярную массу компонентов. После этого происходит оптимизация бинарных коэффициентов взаимодействия до достижения наилучшего совпадения результатов расчета с данными эксперимента по составу жидкой фазы, за которой следует построение графиков и вывод необходимой информации в файл. Программой предусмотрен перевод в мольные доли, если исходные составы представлены в массовых долях.

### Результаты расчетов

Ниже приведены результаты расчетов мольных долей компонентов в жидкой фазе для некоторых значений температуры и давления с помощью описанной программы (Рис.1, Рис.2). На графиках они представлены в сравнении с экспериментальными данными из отчета [1].

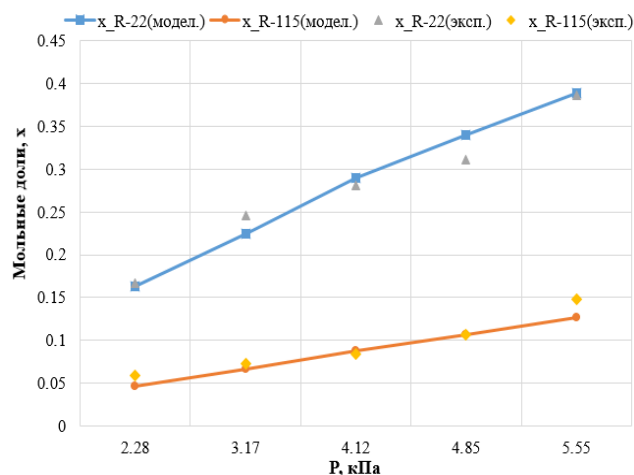


Рис. 1. Мольные доли R-115 и R-22 при  $T=0^{\circ}\text{C}$ . Модель Пенга-Робинсона

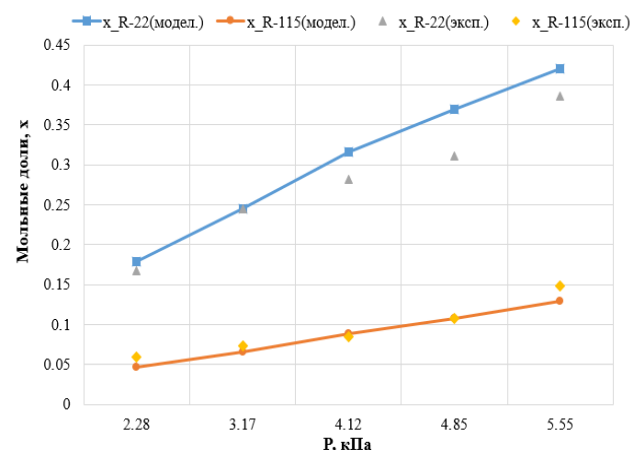


Рис. 2. Мольные доли R-115 и R-22 при  $T=0^{\circ}\text{C}$ . Модель Соаве-Редлиха-Квонга

Средняя абсолютная погрешность прогнозирования мольной доли хладагентов в смеси со смазочным маслом для трехкомпонентной системы модели Пенга-Робинсона составила 3,23% и 1,42% для HCFC-22 и R-115 соответственно. Для модели Соаве-Редлиха-Квонга погрешности по R-22 и R-115 составили 3,14% и 1,41%. Таким образом, обе модели имеют сравнительно одинаковую и высокую точность для решаемой задачи.

#### **Заключение**

В данной работе сообщается о программе, способной рассчитывать парожидкостное равновесие на основе уравнений состояния для систем хладагент/масло. Она может быть использована для предсказания изменения свойств смазочного масла ISO 32 в различных установках в рабочих диапазонах температуры и давления: [-20; 125] °C, [1,7; 32,2] бар. Она обеспечивает высокую точность предсказания растворимости хладагентов в указанном масле (3,2% и 1,4% по мольной доли в жидкой фазе для HCFC-22

и R-115 соответственно). При использовании других экспериментальных данных возможно моделировать и предсказывать растворимость хладагентов HCFC-22, R-115 и их смеси R-502 в других маслах и/или при других условиях. Возможно дальнейшее расширение программы на другие хладагенты с минимальными изменениями.

#### **Список литературы**

1. Cavestri R.C. Measurement of viscosity, density, and gas solubility of refrigerant blends in selected synthetic lubricants // Imagination Resources, Inc., Dublin, OH (United States), 1995. P. 85-102.
2. Официальный сайт библиотеки thermo: сайт. URL: <https://thermo.readthedocs.io/> (дата обращения: 17.05.2023).
3. Yokozeki A. Solubility correlation and phase behaviors of carbon dioxide and lubricant oil mixtures // DuPont Fluoroproducts Laboratory, Chestnut Run Plaza 771, Wilmington, DE 19880, USA, 2006. P. 159-175.

УДК 006.05

Осипов Г.А., Аверина Ю.М., Куценко А.С.

## Цифровизация жизненного цикла национального стандарта

Осипов Георгий Андреевич – студент группы Тм-42; [osipov.g.a@muctr.ru](mailto:osipov.g.a@muctr.ru);

Куценко Андрей Сергеевич – студент группы МТ-28; [kutsenko.a.s@muctr.ru](mailto:kutsenko.a.s@muctr.ru);

Аверина Юлия Михайловна – к.т.н., заведующий кафедрой логистики и экономической информатики; [averina.i.m@muctr.ru](mailto:averina.i.m@muctr.ru);

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,  
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В статье рассмотрены предложения по цифровизации работ по стандартизации*

*Ключевые слова: цифровизация, стандартизация, работы по стандартизации*

### Digitalization of the life cycle of the national standard

Osipov G.A., Averina I.M., Kutsenko A.S.

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

*The article discusses proposals for digitalization of standardization work*

*Key words: digitalization, standardization, standardization work*

В настоящее время цифровизация является одним из наиболее актуальных и важных направлений развития в различных сферах деятельности. В частности, в области разработки стандартов цифровые технологии могут значительно ускорить и улучшить процесс создания и внедрения стандартов. Согласно исследованию, проведенному Центром экономических исследований при Российской академии наук, внедрение цифровых технологий в стандартизацию может привести к сокращению времени на создание стандартов на 30-50% и уменьшению затрат на 20-30% [1]. Это особенно важно, учитывая то, что стандарты доказали свою эффективность в различных отраслях [2].

На сегодняшний день для участников стандартизации разработана и действует подсистема «Береста» Федеральной государственной информационной системы (ФГИС) Росстандарта, облегчающая документооборот в части работ по стандартизации [3, 4].

На сегодняшний день подсистема «Береста» ФГИС Росстандарта имеет следующий функционал:

1. В части разработки стандартов:

Подсистема дает возможность ознакомить заинтересованные лица с текстом первой редакции проекта стандарта и направлять отзывы на него;

Голосования по проектам стандартов проводятся в подсистеме;

ТК направляет предложения об утверждении стандартов в электронном виде;

Отслеживание текущего состояния разработки стандарта;

В случае нарушения сроков разработки стандарта подсистема дает возможность направить соответствующее уведомление;

Хранение всех редакций проектов стандартов и сопроводительной документации.

2. В части возможностей Технических комитетов:

Ведение актуальной информации о членах ТК;

Направление уведомлений ТК по вопросам, связанным с деятельностью ТК, которые требуют оперативного решения;

Назначение заседаний ТК, размещение протоколов заседаний;

Обеспечение обмена документами между членами ТК, а также организация их обсуждений;

Проведение электронного голосования;

Направление предложений о создании ТК;

Направление апелляций на действие или бездействие ТК, а также отслеживание результатов их рассмотрения;

Оценка эффективности работы ТК, формирование отчетов о работе ТК.

3. В части формирования Программы национальной стандартизации [5]:

Директивные указания о формировании ПНС формируются и направляются в ТК посредством ФГИС;

Предложения по разработке документов национальной системы стандартизации, в т.ч. наименование документа, обоснование целесообразности его разработки, вид работ, классификацию объекта стандартизации и т.д., также вносятся в систему;

Проведение экспертизы предложений ТК Российским институтом стандартизации;

Исключение или согласование предложений, вынесенных ТК, по результатам экспертизы;

Направление Программы национальной стандартизации на рассмотрение в Совет по стандартизации про Росстандарте.

Как сообщают авторы статьи, формирование ПНС уже на протяжении многих лет происходит исключительно в подсистеме «Береста» ФГИС Росстандарта.

Стоит отметить, что весь функционал системы построен чаще всего на скан-копиях бумажных экземпляров документов. Более того, правки, например, в проект национального стандарта после

нормоконтроля, также вносятся в бумажный экземпляр, а затем скан-копия данной версии проекта загружается в ФГИС

Исходя из перечисленного выше, можем сделать вывод, что система, по сути, является базой данных. Система функционирует по принципу СЭДа: готовый документ в формате doc, docx или pdf загружается пользователем в систему, но никакие работы по стандартизации в системе не проводятся, т.е. ФГИС используется, как способ передачи документов.

Внедрение цифровых технологий в разработку стандартов может значительно улучшить качество и доступность стандартов, а также сократить время и затраты на их создание и внедрение.

Ожидаемые положительные результаты цифровизации ЖЦ стандарта:

1. Скорость и эффективность работы.

Оптимизированные и автоматизированные этапы работ по стандартизации позволят ускорить все этапы ЖЦ стандарта: от его разработки до внедрения. Это позволит увеличить скорость и эффективность работы организаций и государственных структур, участвующих в работах по стандартизации.

2. Повышение качества стандартов.

Поскольку все процессы будут автоматизированы, то процент ошибок в стандартах будет уменьшен, а возможные дубликаты стандартов будут исключены.

3. Повышение прозрачности работ по стандартизации.

Автоматизация работ по стандартизации позволит повысить качество контроля за соблюдением срока проведения работ на всех этапах жизненного цикла стандарта. Результаты работ по стандартизации станут общедоступными для всех заинтересованных лиц в режиме реального времени.

4. Повышение коммуникативных возможностей.

Цифровизация улучшит процесс взаимодействия частных организаций, госорганов и населения.

5. Сокращение затрат.

Цифровизация всех этапов жизненного цикла стандарта поможет сократить затраты на его разработку, утверждение и внедрение за счет сокращения фонда оплаты труда, поскольку функционал сотрудников будет уменьшен, а также за счет отсутствия канцелярских затрат.

6. Повышение конкурентоспособности.

Ускорение процедуры разработки, утверждения и внедрения позволит в кратчайшие сроки начать использовать актуальные стандарты, что позволит повысить конкурентоспособность как отдельных производителей, так и экономики страны в целом.

7. Содействие устойчивому развитию.

Цифровизация работ по стандартизации поможет содействовать политике устойчивого развития Российской Федерации в соответствии с Распоряжением Правительства РФ от 14.07.2021 г. №1912-р «Об утверждении целей и основных направлений устойчивого (в том числе зеленого)

развития РФ» за счет стимулирования и поддержки инновационных технологий.

Цифровизация жизненного цикла стандарта, а также внедрение его в другие информационные системы откроет новые горизонты в части работ по стандартизации. В дополнение к этому она создаст задел к реализации новых функций, которые бы и упростили работы по стандартизации и их применение, и приблизили бы нас к реализации SMART-стандартов. Ниже приведен перечень функций, возможность реализации которых дала бы цифровизация всех этапов жизненного цикла стандарта.

Рассылка уведомлений.

Технические комитеты рассылают официальные уведомления, например, уведомления о разработке стандарта [6]. На сегодняшний день все виды уведомлений от Технических комитетов печатаются на бумаге на официальном бланке организации и их скан-копии с физическими подписями рассылаются на электронные почты технических комитетов или посредством ФГИС. Цифровизация ЖЦ стандарта позволило бы формировать такие письма за электронной подписью должностного лица прямо в системе. Рассылка данных писем адресатам также осуществлялась бы при помощи ФГИС.

Проведение нормоконтроля.

На сегодняшний день нормоконтроль проходят бумажные экземпляры стандартов. Правки в стандарты, соответственно, вносятся на этой печатной версии. В случае цифровизации жизненного цикла стандарта нормоконтроль или проводится бы прямо в системе, или был бы нивелирован как этап работ по стандартизации, поскольку цифровизированные работы по стандартизации позволили бы проводить нормоконтроль в автоматическом режиме путем использования машиночитаемых форматов документов.

Бланки сопроводительных документов.

В подсистему «Береста» ФГИС Росстандарта необходимо добавить бланки сопроводительных документов к национальному стандарту, таких как, например, пояснительная записка к проекту национального стандарта. Предлагается следующий способ реализации бланков сопроводительных документов на примере отзыва на проект национального стандарта. Типовая форма представлена в Приложении Б ГОСТ Р 1.2-2020. Для формирования отзыва на проект национального стандарта уполномоченным лицам будет необходимо заполнить такие поля, как «структурный элемент стандарта», «замечание, предложения», «предлагаемая редакция», «обоснование предлагаемой редакции». Оставшиеся поля будут заполняться автоматически, а подписываться отзыв будет посредством ЭЦП. Сводка отзывов на проект национального стандарта будет заполняться полностью в автоматическом режиме. От уполномоченных лиц потребуются только подпись при помощи ЭЦП. Аналогично будет заполняться и

мотивированное предложение об утверждении национального стандарта.

Публикация статуса стандарта.

На официальном сайте Росстандарта в сети Интернет существует раздел «Каталог национальных стандартов». На сегодняшний день сведения (стандарты, статусы стандартов, даты принятия) в этом разделе обновляются вручную. Цифровизация жизненного цикла стандарта позволит обновлять эти сведения в автоматическом режиме. Предлагается добавить в этот раздел, помимо статуса и даты введения, дату последней поправки и область применения. Статус стандарта будет меняться сразу после регистрации изменений в данном стандарте. Отмененные стандарты будут автоматически удаляться из раздела.

Форма обратной связи

На официальном сайте Росстандарта в сети интернет имеется раздел «Обратная связь», который, по сути, не имеет способа связаться с Росстандартом. Исключение составляет раздел «Форум», но, поскольку раздел достаточно долгое время пустует, он не пользуется популярностью и не является удобным средством коммуникации. Дополнительно это требует кадрового расширения для мониторинга и ответов на вопросы на форуме. Предлагается интегрировать форму обратной связи в подсистему «Береста» ФГИС Росстандарта. В таком случае, это даст возможность собирать отзывы и предложения по национальным стандартам. Это будет удобно как для посетителей сайта, поскольку он сможет контролировать статус его предложения, и обязательно получит ответ, так и для Росстандарта, поскольку ответами гражданам не будет заниматься отдельный человек, а они будут делегироваться между сотрудниками Росстандарта соответствующего направления или профиля. Все предложения будут поступать во ФГИС, а затем в автоматическом режиме рассылаться профильным техническим комитетам. Которые будут в свою очередь давать официальные ответы на обращение. Также в форме обратной связи необходимо реализовать обращения в части обнаружения двойных стандартов. Они также будут направляться в профильный Технический комитет для оценки данного обращения. Для того, чтобы оставить обращение через форму обратной связи, будет необходима регистрация через портал Госуслуги. На данный момент это один из способов входа в личный кабинет Росстандарта.

Рассылка редакций проекта национального стандарта.

Как и в случае с официальными уведомлениями, рассылка редакций проектов национальных стандартов членам Технического комитета осуществляется в формате рассылки скан-копий проекта на электронные почты. Цифровизация жизненного цикла стандарта будет способствовать автоматизированной рассылки проектов национальных стандартов для заинтересованных сторон.

Автоматическая генерация отчетной документации.

В современном мире любая деятельность требует отчетности, в том числе работы по стандартизации. Зачастую, составление отчетной документации занимает крайне много времени и сил как на его оформление, так и на структуризацию информации, необходимой в отчете. Цифровизация жизненного цикла документов национальной системы стандартизации позволила бы автоматически формировать отчетную документацию в части работ по стандартизации по утвержденным формам и шаблонам, которые предварительно могут быть загружены систему. Это сократило бы как жизненную энергию сотрудников, так и освободила бы большое количество времени, которое можно было бы потратить на решение более важных и срочных рабочих моментов, а также улучшила бы качество составления отчетной документации ввиду.

Цифровизация жизненного цикла национального стандарта, а также устранение барьеров для цифровизации и развитая инфраструктуры в части стандартизации значительно упростит все этапы работ по стандартизации, а также применение стандартов, что позволит достигать цели и задачи стандартизации еще более продуктивно.

#### Список литературы

1. «Центр экономических исследований при Российской академии наук. Цифровая экономика: технологии, рынки, регулирование» [Электронный ресурс]. – URL: [https://inecon.org/docs/2018/Lenchuk\\_paper\\_20181220.pdf](https://inecon.org/docs/2018/Lenchuk_paper_20181220.pdf) (Дата обращения: 03.05.2023)
2. «Роль стандартизации в цифровой экономике впервые попала в итоговый документ «Большой двадцатки» [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.rst.gov.ru/newsRST/redirect/news/1//8403> (Дата обращения: 01.06.2023).
3. Информатизация [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.rst.gov.ru/portal/gost/home/activity/informationfacility> (Дата обращения: 01.07.2023).
4. Приказ Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии №1402 от 05.07.2018 [Электронный ресурс]. - URL: <https://www.rst.gov.ru/portal/gost/home/activity/informationfacility> (Дата обращения: 01.05.2022).
5. Программа национальной стандартизации как ключевой инструмент кратко- и среднесрочного планирования работ по стандартизации / А. Шалаев, Е. Вельможина, М. Калашникова // Стандарты и качество. – 2020. – № 12. – С. 10-15.
6. ГОСТ Р 1.2-2020 Стандартизация в Российской Федерации Стандарты национальные Российской Федерации. Правила разработки, утверждения, обновления, внесения поправок и отмены [Текст]. – Введ. 2020-09-01. – М. : ФГУП «СТАНДАРТИНФОРМ», 2020.

УДК 006.05

Осипов Г.А., Аверина Ю.М., Куценко А.С.

**Актуальные проблемы обращения с отходами в Российской Федерации**Осипов Георгий Андреевич – студент группы Тм-42; [osipov.g.a@muctr.ru](mailto:osipov.g.a@muctr.ru);Куценко Андрей Сергеевич – студент группы МТ-28; [kutsenko.a.s@muctr.ru](mailto:kutsenko.a.s@muctr.ru);

Аверина Юлия Михайловна – к.т.н., заведующий кафедрой логистики и экономической информатики; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В статье рассмотрены основные аспекты управления отходами в Российской Федерации, а также ведущие мировые практики в области обращения с твердыми коммунальными отходами**Ключевые слова: раздельный сбор отходов, управление отходами, твердые коммунальные отходы***Digitalization of the life cycle of the national standard**

Osipov G.A., Averina I.M., Kutsenko A.S.

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

*The article discusses the main aspects of waste management in the Russian Federation, as well as the world's leading practices in the field of solid municipal waste management**Key words: separate waste collection, waste management, solid municipal waste*

Проблема обращения с бытовыми отходами в России представляет собой сложную систему, включающую экологические, социальные и экономические аспекты. Несмотря на значительные усилия властей и общественности, эта проблема остается актуальной и требует комплексного подхода к решению.

Одной из основных причин затруднений в обращении с бытовыми отходами является недостаточная осведомленность населения о правильных методах утилизации. Исследования показывают, что многие граждане не имеют достаточной информации о возможностях переработки и восстановления отходов, а также о мероприятиях и процессах, которые обеспечивают ее [1]. Это приводит к их выбрасыванию в обычные мусорные контейнеры и дальнейшему смешению с другими видами отходов. Отсутствие сортировки усложняет дальнейшую утилизацию и приводит к размещению отходов на полигонах, многие из которых были спроектированы без учета современных экологических стандартов и имеют трудности с модернизацией. Образовательные программы, направленные на повышение экологической грамотности населения, играют важную роль в решении данной проблемы. В соответствии с законодательством, определенным Федеральным законом Российской Федерации от 10.01.2002 № Ф3-7 "Об охране окружающей среды", экологическое образование включает в себя деятельность, направленную на повышение осведомленности и понимания экологических проблем, формирование здорового образа жизни, распространение информации об окружающей среде и пропаганду ответственного использования природных ресурсов. Его основная цель - воспитание экологически сознательной культуры в обществе и обеспечение экологической безопасности [2]. На данный момент эко-просветительская работа является важным структурным компонентом реализации Федеральной программы «Экономика замкнутого цикла» [3].

Кроме того, эффективная система сбора и переработки бытовых отходов требует значительных инвестиций в инфраструктуру. На данный момент многие регионы России не обладают достаточными возможностями для сортировки, переработки и утилизации отходов. Развитие перерабатывающих предприятий и совершенствование системы транспортировки отходов являются неотъемлемыми компонентами решения данной проблемы. В текущий момент формализацией роли государства в обеспечении экологической безопасности страны представлена в национальном проекте «Экология», благодаря которому осуществляют инвестиции (рис. 1) в развитие и создание инфраструктуры по обращению с отходами.

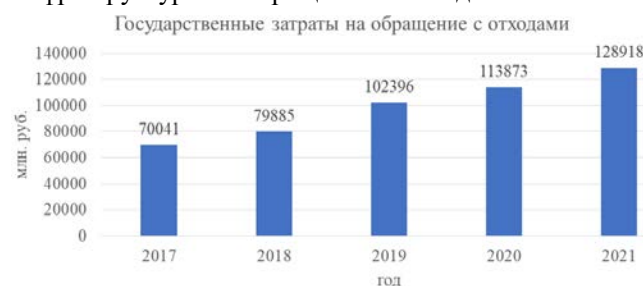


Рисунок 1. Объем государственных расходов на обращение с отходами с 2017 по 2021 г. [4].

Социальное измерение играет решающую роль в решении проблем, связанных с утилизацией бытовых отходов. В некоторых регионах России, где альтернативные источники дохода скудны, отсутствие жизнеспособных вариантов часто приводит к незаконной практике в секторе обращения с отходами, всего на 2022 г. выявлено 12 795 несанкционированных свалок отходов на территориях субъектов Российской Федерации [5]. Нераздельный сбор отходов, нелегальные свалки и неправомерная переработка создают неблагоприятные условия для жизни населения и оказывают негативное влияние на экологическую обстановку.

В целом, решение проблемы обращения с бытовыми отходами требует комплексного подхода, включающего образование и информирование населения, развитие инфраструктуры и создание эффективной системы управления отходами. Необходима совместная работа государства, бизнеса и гражданского общества для достижения устойчивого развития, и сохранения окружающей среды для будущих поколений. Обращение с бытовыми отходами является важной проблемой, с которой сталкиваются все страны в мире. Эффективное управление бытовыми отходами не только помогает сократить загрязнение окружающей среды, но и способствует устойчивому развитию и сохранению природных ресурсов. Ниже приведены некоторые мировые практики и стратегии обращения с бытовыми отходами.

Иерархия обращения с отходами: многие страны используют иерархию обращения с отходами, которая включает следующие этапы: предотвращение образования отходов, подготовка к повторному использованию, переработка, сжигание с энергополучением и захоронение. Основная цель иерархии - сократить объем отходов, направляя их на более приоритетные методы обработки, такие как переработка и повторное использование.

Раздельный сбор и переработка: многие страны активно пропагандируют раздельный сбор отходов по типам материалов (например, пластик, стекло, бумага, металлы и т.д.) для последующей переработки. Это позволяет повысить эффективность переработки, уменьшить нагрузку на свалки и сократить потребление новых природных ресурсов.

Продвижение переработки: многие страны стимулируют переработку отходов, предоставляя различные меры поддержки, такие как финансовые поощрения, налоговые льготы и субсидии для компаний, занимающихся переработкой. Также проводятся информационные кампании, направленные на осознание важности переработки среди населения.

Сжигание отходов с энергополучением: в некоторых странах использование сжигания отходов с последующим получением энергии является одним из методов обращения с отходами. Это позволяет утилизировать отходы и генерировать электричество или тепло для нужд города или региона.

Продуктовая ответственность: некоторые страны внедряют принцип продуктовой ответственности, согласно которому производители несут ответственность за утилизацию и переработку своих продуктов после их использования. Это может включать оплату за утилизацию или обязательное предоставление систем раздельного сбора отходов для своих товаров.

Образование и информирование: все более популярной становится практика осведомления общественности о проблемах обращения с отходами и обучение населения навыкам раздельного сбора и экологических практиках. Образовательные программы и информационные кампании играют важную роль в повышении осведомленности и мотивации людей

принимать активное участие в устранении проблемы бытовых отходов.

Германия является одной из ведущих стран в мире по обращению с отходами и известна своими высокими стандартами в этой области. Вот основные практики обращения с отходами, применяемые в Германии:

Раздельный сбор: раздельный сбор отходов является обязательным и широко распространенным в Германии. Жители активно участвуют в раздельной сортировке отходов по типам материалов, таким как пластик, стекло, бумага, металлы и биологически разлагаемые отходы. Для этого в каждом доме предусмотрены специальные контейнеры или системы сбора.

Контейнеры и пункты приема: в каждом городе и поселке в Германии есть специальные контейнеры и пункты приема для разных типов отходов. Например, есть контейнеры для стекла разных цветов, контейнеры для пластиковых бутылок и упаковки, а также пункты приема для определенных типов отходов, таких как электроника, опасные химические вещества и строительные материалы.

Система залоговых бутылок: в Германии существует система залоговых бутылок (Pfandsystem), где на некоторые типы пластиковых и стеклянных бутылок взимается залог. Покупатель может вернуть бутылки в специальные автоматы или магазины и получить свой залог обратно. Это поощряет людей к возврату и повторному использованию упаковки, сокращая объемы отходов.

Переработка и использование отходов: Германия активно инвестирует в переработку отходов. Отходы подвергаются переработке, чтобы извлечь ценные ресурсы или использовать их для производства энергии. Например, пластиковые отходы могут быть переработаны в новые продукты, а биологически разлагаемые отходы могут быть использованы для производства биогаза.

Запрет на сжигание отходов: в Германии действует строгий запрет на сжигание большинства бытовых отходов, что служит стимулом для практики вторичной переработки и эффективно смягчает негативные экологические последствия, связанные с выбросами от процессов сжигания.

Образование и информирование: в Германии проводятся широкие образовательные программы и информационные кампании, направленные на повышение осведомленности об обращении с отходами. Это включает разъяснение правил раздельного сбора, стимулирование экологических практик и акцент на важности устойчивого обращения с отходами. Германия имеет эффективную и развитую систему обращения с отходами, которая формировалась в течение долгого времени (рис. 2), которая содействует экологической устойчивости и уменьшению негативного влияния на окружающую среду. Эти практики служат примером для многих стран в мире, стремящихся к более эффективному управлению отходами.

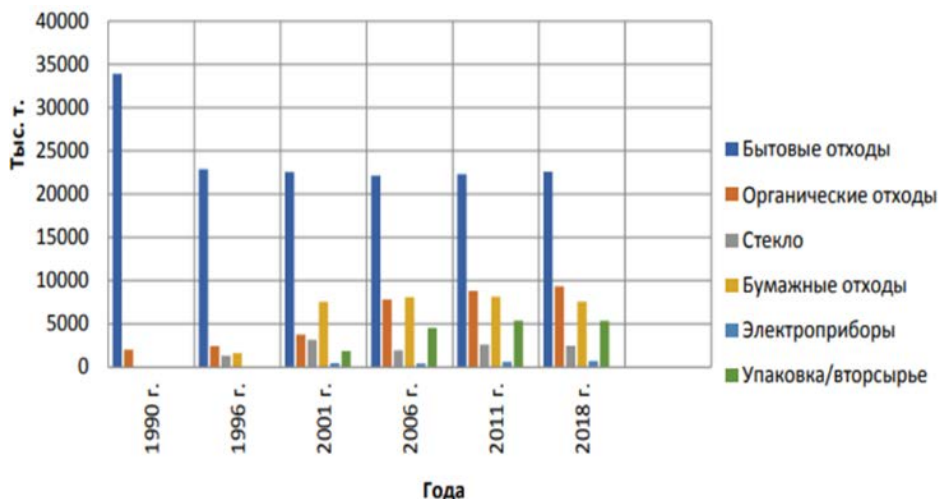


Рисунок 2. Динамика формирования системы раздельного сбора отходов с учетом объемов и фракций в Германии [6].

Южная Корея является одной из лидирующих стран в мире по обращению с отходами. В стране применяются разнообразные практики и стратегии, направленные на эффективное управление отходами. Вот некоторые из них:

**Раздельный сбор:** Южная Корея активно пропагандирует раздельный сбор отходов. Жители участвуют в системе разделения отходов на категории, включая пластик, бумагу, стекло, металлы и органические отходы. Для этого используются специальные контейнеры и мусорные пакеты, а также проводятся образовательные программы для населения.

**Система оплаты за сбор мусора:** в некоторых районах Южной Кореи введена система оплаты за сбор мусора, которая основана на весе или объеме отходов. Это стимулирует жителей сокращать объем отходов, раздельно собирать их и выбирать более экологические варианты потребления.

**Продвижение переработки и вторичного использования:** Южная Корея активно инвестирует в инфраструктуру переработки и вторичного использования отходов. Отходы подвергаются переработке для производства новых продуктов, а также используются в качестве сырья для производства энергии, например, через процессы газификации и биогазовые установки.

**Инновации в технологиях утилизации отходов:** Южная Корея активно разрабатывает и внедряет новые технологии для утилизации отходов. Это включает процессы газификации, пиролиза и биогазовых установок, которые позволяют получать энергию из отходов или использовать их в качестве сырья для производства химических продуктов.

**Регулирование и контроль:** власти Южной Кореи активно контролируют и регулируют обращение с отходами. Они внедряют строгие нормативы и стандарты, а также осуществляют регулярные проверки и наказания для тех, кто нарушает правила обращения с отходами.

**Образование и информирование:** В Южной Корее проводятся широкие образовательные кампании и программы, направленные на повышение осведомленности населения о проблемах и практиках

обращения с отходами. Это включает распространение информации о правилах раздельного сбора, значимости переработки и рационального потребления.

Южная Корея считается успешным примером страны, где эффективное управление отходами является приоритетом и занимает лидирующую позицию в последнем рейтинге Global Waste Index 2022, согласно которому из 400 кг отходов на душу населения: 243 кг перерабатывается, 88 кг сжигается, 46 захоранивается [7]. Благодаря использованию раздельного сбора, переработке и инновационным технологиям, страна снижает объемы отходов, сокращает загрязнение окружающей среды и привлекает новые возможности для использования ресурсов.

Израиль активно работает над разработкой и внедрением инновационных практик обращения с бытовыми отходами. Вот некоторые особенности системы обращения с отходами в Израиле:

**Раздельный сбор:** раздельный сбор отходов является распространенной практикой в Израиле. Жители разделяют отходы по типам, таким как пластик, стекло, металлы, бумага и органические отходы. Для этого в каждом доме предусмотрены специальные контейнеры или мусорные пакеты, а также размещены контейнеры для раздельного сбора в общественных местах.

**Технологии переработки:** Израиль активно инвестирует в разработку и внедрение технологий переработки отходов. Например, в стране используется передовая технология переработки органических отходов под названием "анаэробное биологическое разложение". Она позволяет получать биогаз, который используется для производства электричества и тепла.

**Вторичное использование:** в Израиле существуют программы по вторичному использованию отходов. Например, пластиковые бутылки могут быть переработаны в новые изделия, а стекло и металл могут быть переплавлены для производства новых материалов.

**Строгие нормативы и контроль:** власти Израиля устанавливают строгие нормативы и стандарты для обращения с отходами. Проводятся регулярные проверки и контроль за выполнением правил и норм,



чтобы обеспечить эффективность системы обращения с отходами.

Образование и информирование: проводятся образовательные программы и информационные кампании, направленные на повышение осведомленности населения о важности раздельного сбора, переработки отходов и экологической ответственности.

Израиль стремится к развитию устойчивой системы обращения с бытовыми отходами, минимизации негативного влияния на окружающую среду и созданию ресурсоэффективного общества. Это включает использование инновационных технологий, раздельный сбор отходов и повышение осведомленности населения о проблемах и практиках устойчивого обращения с отходами, так в 2012 году там началось внедрение программы раздельного сбора, результаты которого показали эффективность осведомления населения о важности осознанного отношения к обращению с отходами [8]. Однако, несмотря на это, в Израиле формируется и развивается экологически чистая экономика. Что касается структуры отходов, то львиную долю в структуре отходов составляют пластик, электронные отходы, отходы строительной промышленности. В целом, бумага, металл и пластик составляют 45% отходов Израиля по весу. На долю органических материалов, таких как пищевые отходы, приходится 34%. Местные эксперты и правительственные чиновники отдают приоритет концепции «vision», которая предусматривает, что к 2030 году половина отходов в стране будет перерабатываться, еще четверть сжигаться для получения энергии и только четверть отправляться на свалки [9].

Мировые практики решения проблемы бытовых отходов указывают на комплексный подход к ее решению, который предусматривает слаженную работу государства, бизнеса, научного сообщества и некоммерческих организаций. Важная роль отводится формированию понятийной базы у населения, а также внедрению инноваций в данную сферу. Также мировой опыт показывает длительность данного процесса, но в условиях быстрого трансфера информации и новых способов внедрения продуктов и идей в общественные массы, путь, проделанный из конца предыдущего столетия, можно сократить в разы.

С 2019 года в России началась реализация важной инициативы, известной как "мусорная реформа", целью которой является создание в каждом регионе уполномоченного оператора, ответственного за развитие необходимой инфраструктуры для обеспечения бесперебойной работы предприятий по переработке отходов, именуемых ВПО (мусороперерабатывающие организации). Помимо административных и организационных мер, связанных с этой реформой, важнейшим аспектом является внедрение эффективного механизма управления твердыми коммунальными отходами (ТКО), что предполагает модернизацию производственных мощностей на различных этапах организационно-технологической структуры переработки ТКО.

Федеральный проект «Комплексная система обращения с твердыми коммунальными отходами» направлен на формирование комплексной системы обращения с твердыми коммунальными отходами (ТКО), предотвращение вредного воздействия таких отходов на здоровье человека и окружающую среду, вовлечение их в хозяйственный оборот в качестве сырья, материалов, изделий и превращение во вторичные ресурсы для изготовления новой продукции и получения энергии. В рамках проекта было создано учреждение региональных операторов, значительные усилия были направлены на разработку нормативно-правовой базы. Федеральный проект "Комплексная система управления твердыми коммунальными отходами" получил существенную финансовую поддержку из федерального бюджета, бюджетные ассигнования составили 101 114,8 млн. рублей (по состоянию на 13.09.2022).

Долгосрочный план обращения с твердыми отходами в Российской Федерации до 2030 года, наряду с реализацией Федерального закона от 24.06.1998 № 89-ФЗ "Об отходах производства и потребления", направлен на создание регионального оператора в каждом субъекте страны. Эти операторы будут отвечать за эффективное обращение с твердыми бытовыми отходами по всей организационно-технологической цепочке. В настоящее время около 82% регионов перешли на эту новую систему, а ее полное внедрение охватывает 81% всей территории этих регионов [10].

Стратегия развития отрасли обращения с отходами в России, изложенная в "Стратегии развития отрасли переработки, утилизации и захоронения отходов производства и потребления до 2030 года", включает в себя различные реформы. Эти реформы направлены на создание предприятий по обезвреживанию отходов, включение отходов производства и потребления в экономический цикл в качестве дополнительных источников сырья, а также создание экологических технопарков по производству товаров из таких отходов. Этот комплексный подход направлен не только на утилизацию отходов, но и на использование их потенциала для устойчивого использования ресурсов и продвижения экологически безопасных практик. [11].

Рисунок 3 иллюстрирует организационно-технологическую цепочку системы управления твердыми отходами, соответствующую глобальной концепции управления твердыми отходами (ТБО). Диаграмма основана на известной "лестнице Лансинка", которая представляет собой иерархический порядок методов обработки по убыванию приоритета. Эта лестница служит руководством для выбора соответствующих стратегий управления отходами, отдавая предпочтение тем из них, которые являются более экологичными и устойчивыми. Эта цепочка включает в себя различные этапы, такие как предотвращение, повторное использование, переработка, восстановление энергии и утилизация, с акцентом на содействие сокращению отходов, сбережению ресурсов и минимизации воздействия методов обращения с отходами на окружающую среду.

Основные усилия государства направлены на создание инфраструктуры по обработке, обезвреживанию, утилизацию и захоронение, но важным фактором в эффективности использования отходов потребления в качестве вторичных материальных ресурсов, а также возможности для из обезвреживания является правильный сбор. С юридической точки зрения, Федеральный закон № 89 от 24.06.1998, известный как "Об отходах производства и потребления", устанавливает прогрессивную основу для решения проблемы ненадлежащей практики утилизации отходов производителями. Он включает в себя системный подход к постепенному ужесточению

санкций и введению запретов на утилизацию определенных классов опасных отходов, пригодных для вторичной переработки. Признанные эксперты Международной финансовой корпорации подчеркивают значительные преимущества внедрения системы раздельного сбора отходов для их дальнейшей утилизации. Такой подход не только повышает качество окружающей среды, но и смягчает негативное воздействие на здоровье населения. Он играет решающую роль в снижении нагрузки на свалки, уменьшении загрязнения окружающей природы и улучшении условий жизни населения, проживающего вблизи мест захоронения отходов [13].

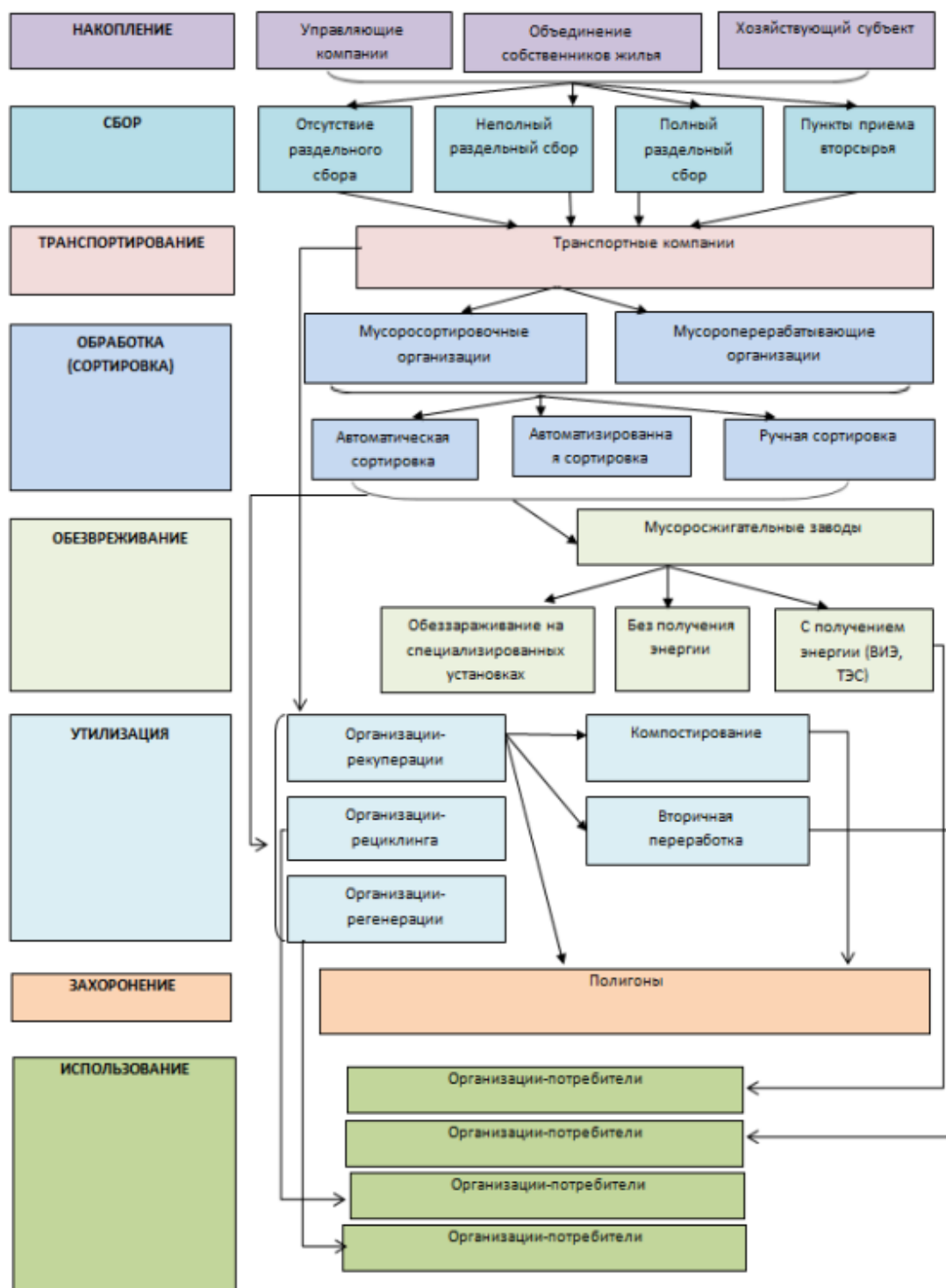


Рисунок 3. Организационно-технологическая цепочка системы обращения с ТКО [12].

Исследования, проведенные по проблеме отходов производства и потребления, выявили тревожный факт. Несмотря на наличие более 1200 перерабатывающих предприятий по всей стране, способных перерабатывать до 37 миллионов тонн отходов в год, лишь 10% имеющихся мощностей активно задействованы в процессе переработки. Это несоответствие указывает на значительный разрыв между существующим потенциалом и фактическим использованием перерабатывающих предприятий в решении проблемы управления отходами. Усилия должны быть направлены на максимальное использование этих перерабатывающих предприятий для обеспечения более устойчивого и эффективного подхода к переработке отходов в будущем [14]. Внедрение раздельного сбора отходов служит первым шагом на пути к продвижению эффективной практики рециклинга и управления отходами. Однако создание систем раздельного сбора отходов в России столкнулось с рядом проблем. Во-первых, существует недостаточная осведомленность населения о важности раздельного сбора отходов, в основном из-за ограниченных усилий государственных органов, муниципалитетов и образовательных учреждений по просвещению населения. В настоящее время только волонтерские инициативы, такие как общественное движение "ЭКА", фонд "ЭРА", ГК "Экотехнология", а также проекты, подобные проекту Coca-Cola HBC "Разделяй с нами", направлены на просвещение населения о правилах сортировки отходов. Общественные образовательные кампании оказались одной из самых действенных мер. Например, в Торонто образовательные программы и просветительские кампании позволили успешно сократить количество пищевых отходов на 35 000 тонн в год. Эти примеры подчеркивают важность общественного образования для формирования позитивных поведенческих изменений и продвижения практики сокращения отходов [15].

Нехватка организаций по сбору и переработке отходов является заметной проблемой в России. В августе 2018 года Центр "Россия - ОЭСР" инициировал общение с Советом депутатов муниципального округа Царицыно с целью изучения возможности создания пунктов сбора вторичного сырья. К сожалению, просьба была встречена отказом, так как не было существующих организаций, ответственных за реализацию раздельного сбора отходов. В ответ руководство района заявило о готовности рассмотреть вопрос об установке специализированных пунктов сбора вторсырья после получения предложений от соответствующих организаций. Однако многие пункты сбора отходов принимают отходы только от крупных организаций в количестве 500 кг и более, что ограничивает возможности населения по утилизации отсортированных отходов. Кроме того, пункты сбора, предназначенные для населения, часто расположены неудобно, далеко от станций метро и автобусных остановок, что создает транспортные барьеры, которые не позволяют людям использовать эти пункты для утилизации отходов. Эти проблемы еще больше препятствуют эффективной реализации инициатив по

управлению отходами на уровне местных сообществ [16].

Таким образом в России отсутствует эффективная иерархия отходов [17], которая бы позволяла внедрять новые инструменты для решения сложившейся проблемы обращения с бытовыми отходами, также административные и правовые барьеры не дают возможности развитию сектора сбора отходов, а экономическая эффективность переработки подавляется более выгодной системой экологических платежей, при которой инвестиции в технические фонды по утилизации и переработке не доказывают свою состоятельность. Отрасль также испытывает трудности в связи с низким доверием населения, которое вызвано отсутствием достаточной информированности о состоянии проблемы и существующих возможностях выхода из сложившейся ситуации.

Проведенный анализ потенциала российского рынка вторичных материальных ресурсов, позволяет сделать следующие выводы:

Решение проблемы обращения с бытовыми отходами требует комплексного подхода, который включает в себя образование и информирование населения, развитие необходимой инфраструктуры и создание эффективной системы управления отходами. Для достижения устойчивого развития и сохранения окружающей среды для будущих поколений необходимо активное взаимодействие между государством, бизнесом и гражданским обществом.

Международный опыт в решении проблемы бытовых отходов подтверждает необходимость комплексного подхода, который включает сотрудничество государства, бизнеса, научного сообщества и некоммерческих организаций. Важную роль играет образование населения и формирование понимания проблемы, а также внедрение инноваций в эту область. Следует отметить, что хотя решение данной проблемы может быть длительным процессом, современные технологии и быстрый обмен информацией позволяют ускорить этот процесс и улучшить его результаты.

В России отсутствует эффективная иерархия обращения с отходами, что затрудняет внедрение новых инструментов для решения проблемы бытовых отходов. Административные и правовые ограничения также препятствуют развитию отрасли сбора отходов. Кроме того, экономическая эффективность переработки ограничивается преимуществами системы экологических платежей, которая не стимулирует достаточные инвестиции в техническое оборудование для утилизации и переработки отходов. Низкое доверие населения также создает трудности, и это связано с недостаточной информированностью о проблеме и о существующих возможностях для ее решения.

#### Список литературы

1. Рябова Т. М., Амерсланова Э. Х. Основные направления в сфере утилизации твёрдых коммунальных отходов в Московской области:

проблемы и перспективы // Социодинамика. – 2022. – № 3. – С. 33-44.

2. Федеральный закон от 10.01.2002 № 7-ФЗ «Об охране окружающей среды». [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://www.consultant.ru/document/cons\\_doc\\_LAW\\_34823/](https://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_34823/) (дата обращения: 04.04.2023).

3. Федеральный проект «Экономика замкнутого цикла». [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://reo.ru/ezc> (дата обращения: 04.04.2023).

4. Охрана окружающей среды в России. 2022: Стат. сб./Росстат. – 0-92 М., 2022 – 115 с.

5. Федеральная служба по надзору в сфере природопользования (Росприроднадзор): официальный сайт. – Москва. – Обновляется в течение суток. – URL: <https://http.rpn.gov.ru/open-service/analytic-data/statistic-reports/unauthorized-landfill/> (дата обращения: 19.05.2023)

6. Гюнтер Дехуст. Гюнтер Дехуст о мусоросжигании в Германии: альтернативы существуют, и их целесообразно внедрять. // Текст статьи «Мусор, салки, обращение с ТКО. Отходы, загрязнение окружающей среды/ Экологический правовой Центр «Беллона». 05.04.2021.

7. Ахмедова Ж. А., Месробян К. Е., Алиев М. Э. Зарубежный опыт управления твердыми бытовыми отходами // Механизм реализации стратегии социально-экономического развития государства. – 2022. – С. 42-46.

8. Бронская Ю. К., Пармененков К. Н. Осознанное потребление как один из факторов в росте утилизации мусора в Российской Федерации на современном этапе // Финансовые рынки и банки. – 2023. – № 1. – С. 5-13.

9. Rogowska J., Zimmermann A. Household Pharmaceutical Waste Disposal as a Global Problem—A Review // International Journal of Environmental Research and Public Health. – 2022. – Т. 19. – № 23. – С. 15798.

10. Реформа обращения с отходами производства и потребления в Российской Федерации. URL: [ru.wikipedia.org](http://ru.wikipedia.org) (дата обращения: 21.05.2023)

11. С трудом перерабатываемые отходы. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.vedomosti.ru/economics/articles/2020/09/22/840840-trudom-pererabativaemie> (дата обращения: 21.05.2023).

12. Губернаторов А. М. Развитие финансовых инструментов реализации инвестиционных проектов в системе обращения с твердыми коммунальными отходами.

13. Трейман М. Г., Игнатова Д. Ю. Анализ эколого-экономической ситуации на рынке по обращению с отходами в российской федерации // Научный журнал НИУ ИТМО. Серия «Экономика и экологический менеджмент». – 2022. – № 3. – С. 33-41.

14. Дружакина О. П., Рязанова А. А., Тарасов Т. А. Формирование инфраструктуры раздельного сбора отходов как условие утилизации отходов производства и потребления // Утилизация отходов производства и потребления: инновационные подходы и технологии: материалы II Всероссийской научно-практической конференции; Вятский государственный университет (17 ноября 2020 г.). Киров, 2020. С. 47–51.

15. Гирич М. Г., Левашенко А. Д. Разделяй и властвуй: скрытые возможности рынка отходов в России и мире // Международная торговля и торговая политика. — 2019. — № 1 (17). — С. 72–84.

16. Глобальный рынок управления отходами по видам отходов и услугам: анализ глобальных возможностей и отраслевой прогноз, Allied Market Research, 2017-2023 гг. – URL: <https://www.alliedmarketresearch.com/waste-management-market> (дата обращения: 25.05.2023).

17. Пахомова Н. В., Рихтер К. К., Ветрова М. А. Формирование современной системы обращения с отходами — от безопасного захоронения к ремануфактурингу // ПСЭ. – 2016. – № 4 (60).

**Российский химико-  
технологический  
университет  
имени Д.И. Менделеева**



**При поддержке**

**Совет молодых ученых и специалистов (СМУС)  
РХТУ им. Д.И. Менделеева**

**ООО «БИНАКОР-ХТ»**



Научное издание

**УСПЕХИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

**Том XXXVII**

**№ 4 (266)**

Компьютерная верстка: Зверева О.В.  
Текст репродуцирован с оригиналов авторов

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева

Совет молодых ученых и специалистов (СМУС)

Адрес университета: 125047, г. Москва,

Миусская пл., д. 9