

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ АВІАЦІЙНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ФАКУЛЬТЕТ ЕКОЛОГІЧНОЇ
БЕЗПЕКИ, ІНЖЕНЕРІЇ ТА ТЕХНОЛОГІЙ
КАФЕДРА ХІМІЇ І ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ

ДОПУСТИТИ ДО ЗАХИСТУ

Завідувач випускової кафедри

_____ А.Д.Кустовська

« ____ » _____ 2022 р

**КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА
(ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА)**

ВИПУСКНИКА ОСВІТНЬОГО СТУПЕНЯ МАГІСТР

за спеціальністю: 161 «Хімічні технології та інженерія»

освітньо-професійної програми «Хімічні технології палива та вуглецевих
матеріалів»

Тема: «Моделювання процесу седиментації грубодисперсних суспензій»

Виконавець: студентка ХП-202М групи ФЕБІТ Мишко Олена Василівна

Керівник: проф., д.х.н, Чумак Віталій Лукич _____

(підпис)

Консультант розділу «Охорона навколишнього середовища»:

(підпис)

Падун А.О.

(П.І.Б)

Консультант розділу «Охорона праці»: _____

(підпис)

Халмурадов Б.Д.

(П.І.Б)

Нормоконтролер: _____

(підпис)

Максимюк М.Р.

(П.І.Б)

КИЇВ 2022

НАЦІОНАЛЬНИЙ АВІАЦІЙНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
Факультет екологічної безпеки, інженерії та технологій
Кафедра хімії і хімічної технології
Спеціальність: 161 «Хімічні технології та інженерія»
Спеціалізація: «Хімічні технології палива та вуглецевих матеріалів»

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ А.Д.Кустовська

«___» _____ 2022 р.

ЗАВДАННЯ

на виконання дипломної роботи

Мишко Олени Василівни

1. Тема дипломної роботи: «Моделювання процесу седиментації грубодисперсних суспензій» затверджена наказом ректора від 22.08.2022 р. №1103/ст
2. Термін виконання роботи: з 26 вересня 2022 року по 30 листопада 2022 року.
3. Вихідні дані роботи: Седиментаційний аналіз грубодисперсних суспензій глини у воді. Математичне моделювання процесу седиментації грубодисперсних суспензій.
4. Зміст пояснювальної записки: РОЗДІЛ 1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД. ПОНЯТТЯ МОДЕЛІ ТА МОДЕЛЮВАННЯ. ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ. ВИДИ МОДЕЛЕЙ; РОЗДІЛ 2. ОБ'ЄКТИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ; РОЗДІЛ 3. МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ СЕДИМЕНТАЦІЇ ГРУБОДИСПЕРСНИХ СУСПЕНЗІЙ. ОТРИМАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ З СЕДИМЕНТАЦІЇ СУСПЕНЗІЙ ГЛИНИ; РОЗДІЛ 4. ОХОРОНА НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА;

РОЗДІЛ 5. ОХОРОНА ПРАЦІ. ВИСНОВКИ. СПИСОК БІБЛІОГРАФІЧНИХ ПОСИЛАНЬ ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.

5. Перелік обов'язкового графічного (ілюстративного) матеріалу: таблиці, рисунки.

6. Календарний план-графік.

№ з/п	Завдання	Термін виконання	Підпис керівника
1.	Провести аналіз наукової літератури з даної теми.	26.09.2022 – 30.09.2022	
2.	Підібрати об'єкти досліджень та опрацювати методи, які використовуються у процесі виконання дипломної роботи.	30.09.2022 – 15.10.2022	
3.	Провести моделювання експериментальної частини процесу седиментації.	15.10.2022 – 20.10.2022	
4.	Провести обробку експериментальних даних з використанням графічного та математичного методів .	20.10.2022 – 25.10.2022	
5.	Проведення аналізу охорони навколишнього середовища та охорони праці.	18.10.2022 – 10.11.2022	
6.	Узагальнити матеріал, оформити дипломну роботу відповідно до «Положення про дипломні роботи випускників НАУ» та підготувати доповідь на засідання ДЕК.	5.11.2022 – 11.11.2022	
7.	Захист дипломної роботи.	24.11.2022	

7. Консультанти з окремих розділів.

Розділ	Консультант (посада, П.І.Б)	Дата, підпис	
		Завдання видав	Завдання прийняв
Охорона навколишнього середовища	к.б.н., доцент, Падун А.О.		
Охорона праці	к.м.н., професор, Халмурадов Б.Д.		

Дата видачі завдання: 26.09.2022р

Керівник дипломної роботи _____ проф., д.х.н, Чумак В.Л.

Завдання прийняла до виконання _____ Мишко О.В.

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка до кваліфікаційної роботи: «Моделювання процесу седиментації грубодисперсних суспензій» містить 87 с., 17 рис., 1 табл., 53 літературних джерел.

Об'єкт дослідження: процес седиментації грубодисперсних частинок глини у водній суспензії.

Предмет дослідження: суспензії глини у воді.

Мета роботи: розробка математичної моделі опису процесу седиментації грубодисперсних суспензій, створення програмного забезпечення для обробки експериментальних даних седиментаційного аналізу грубодисперсних суспензій.

Методи дослідження: метод седиментаційного аналізу суспензій.

Розроблено математичну модель опису процесу седиментації грубодисперсних суспензій. Створено програмне забезпечення обробки експериментальних даних з кривої седиментації у середовищі MS EXCEL. Результати обробки експериментальних даних забезпечили побудову інтегральної та диференціальної кривих розподілу частинок суспензії за радіусами та розрахувати фракційний склад суспензії.

СУСПЕНЗІЇ, СЕДИМЕНТАЦІЯ, БУРОВІ РОЗЧИНИ, МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, ІНТЕГРАЛЬНА ТА ДИФЕРЕНЦІАЛЬНА КРИВІ РОЗПОДІЛУ ЧАСТИНОК ЗА РОЗМІРАМИ.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СКОРОЧЕНЬ, ТЕРМІНІВ.....	8
ВСТУП.....	9
РОЗДІЛ 1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД. ПОНЯТТЯ МОДЕЛІ ТА МОДЕЛЮВАННЯ. ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ. ВИДИ МОДЕЛЕЙ.....	12
1.1 Математичні моделі.....	12
1.2. Моделі стану і процесів.....	15
1.3. Математичні моделі в хімії	17
1.4. Математичні моделі ідеального газу.....	21
1.4.1. Перше наближення (рівняння Клайперона – Менделєєва).....	23
1.4.2. Друге наближення (рівняння Вандер-Вальса).....	24
1.5. Моделі атому	25
1.6. Математична модель розчинів електrolітів.....	30
1.7. Моделі адсорбції. Теорія Ленгмюра. Теорія BET.....	32
1.8. Висновки до розділу.....	35
РОЗДІЛ 2. ОБ'ЄКТИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ.....	36
2.1. Об'єкт дослідження.....	36
2.1.1. Монтморилоніт.....	38
2.2. Методи дослідження.....	41
2.2.1 Седиментаційний аналіз	41
2.2.2. Метод кусочно-лінійної апроксимації.....	44
2.3. Висновки до розділу.....	46
РОЗДІЛ 3. МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ СЕДИМЕНТАЦІЇ ГРУБОДИСПЕРСНИХ СУСПЕНЗІЙ. ОТРИМАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ З СЕДИМЕНТАЦІЇ СУСПЕНЗІЙ ГЛИНИ.....	47
3.1. Виведення рівняння для опису кривої седиментації.....	47
3.2. Складання програми мовою VBA.....	50

3.3. Перевірка математичної моделі опису процесу седиментації на трьохдисперсні суспензії.....	55
3.4. Складання програми мовою VBA.....	59
3.5. Визначення фракційного складу суспензії монтморелонітової глини.....	62
3.6. Обговорення результатів дослідження.....	65
3.7. Висновки до розділу.....	66
РОЗДІЛ 4. ОХОРОНА НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА.....	67
4.1. Види стічних вод хімічних підприємств та забруднень.....	67
4.2. Вплив забруднення стічних вод хімічного виробництва на довкілля та заходи щодо його зниження.....	68
4.3. Висновки до розділу.....	71
РОЗДІЛ 5. ОХОРОНА ПРАЦІ.....	73
5.1. Організація та управління охороною праці в хімічній лабораторії.....	73
5.2. Аналіз небезпечних факторів у лабораторії	75
5.3. Пожежна безпека.....	78
5.4. Висновки до розділу.....	79
ВИСНОВОК.....	82
СПИСОК БІБЛІОГРАФІЧНИХ ПОСИЛАНЬ ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	83

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СКОРОЧЕНЬ, ТЕРМІНІВ

ПАР – поверхнево-активна речовина.

МД – математична модель.

СВ – стічні води.

ВСТУП

Хімічна промисловість стала невід'ємною частиною сучасного життя.

Варто відзначити, що нафтопереробка, різні виробництва пластмас, хімія все ще розвиваються і молоді науки. Таким чином, клінічні тести також доступні та важливі для оцінки якості та досліджень. На жаль, не завжди є можливість експериментувати. Тут у гру вступає моделювання.

Математичне моделювання є одним з найбільш важливих і точних способів обчислення протікання реакцій. Математичні формули можна використовувати для розрахунку кількості реагентів, що використовуються в експерименті, або для моделювання процесу седиментації (осадження) компонентів у диспергуючій рідині.

Актуальність теми. Седиментацію слід розглядати як процес осідання частинок під дією сили тяжіння. Це відбувається, коли рух спрямованих частинок під дією сили тяжіння або відцентрової сили долає термічно хаотичний рух частинок.

Швидкість осідання залежить від наступних факторів: маса, розмір і форма частинок, середня в'язкість і щільність, а також прискорення, спричинене силою тяжіння або відцентровою силою, що діє на частинку. Частинки різного розміру осідають у полі тяжіння.

Наприклад, досить великі частинки, на які не впливає тепло (броунівський рух). В області відцентрової сили можливе осідання колоїдних частинок і макромолекул - молекул природних і синтетичних полімерів. Для малих, невзаємодіючих сферичних частинок, які осідають у ламінарному режимі, швидкість осідання розраховується за допомогою рівняння Стокса. Дисперсії з використанням рідких, особливо газоподібних, дисперсійних середовищ часто включають збільшення часток, що осідають, через коагуляцію та/або коалесценцію. Це рівняння використовують і у промисловості для аналізу продуктів диспергування мінеральних речовин у мінеральних концентратах, розділенням хімічних і нафтохімічних технічних продуктів, очищенням і гідравлічною класифікацією різних порошкоподібних речовин.

Мета і завдання виконання дипломної роботи.

Мета дипломної роботи – розробка математичної моделі опису процесу седиментації грубодисперсних суспензій, створення програмного забезпечення для обробки експериментальних даних седиментаційного аналізу грубодисперсних суспензій.

Завдання дипломної роботи :

- підготувати літературний огляд;
 - опрацювати методику створення математичної моделі опису процесу седиментації;
 - Освоїти можливості обробки експериментальних даних у середовищі MS EXCEL
 - Перевірити математичну модель опису процесу седиментації для теоретичного опису кривої седиментації трьохдисперсної системи;
 - Отримати експериментальні дані з седиментації полідисперсної суспензії глини у воді.
 - Провести обробку експериментальних даних з седиментації полідисперсної суспензії глини у воді за рівнянням математичної моделі
- проаналізувати отримані експериментальні дані.

Об’єкт дослідження: процес седиментації грубодисперсних частинок глини у водної суспензії.

Предмет дослідження: суспензії глини у воді.

Наукова новизна одержаних результатів. Реальні полідисперсної суспензії глини у воді, частинки глини, що утворюють дисперсну фазу, відрізняються розмірами. Вимоги до використання глинистих суспензій у бурових розчинах містять обмеження щодо фракційного складу суспензій. Тому головним завданням

седиментаційного аналізу полідисперсних систем є знаходження фракційного складу суспензій з аналізу інтегральної та диференціальної кривих розподілу частинок глини за радіусами. Взагалі дисперсність полідисперсних систем характеризує властивості промислових продуктів (паст, цементів, фарб та ін.).

Практичне значення одержаних результатів. Розроблена математична модель процесу седиментації дозволяє визначати фракційний склад суспензій. Таким чином, можна використовувати седиментаційний аналіз на стадії контролю якості полідисперсних порошків.

Особистий внесок випускника. Проведена робота з пошуку та аналізу наукової літератури з теми дипломної роботи. За допомогою керівника дипломної отримав навички роботи у середовищі MS EXCEL, освоїв навички програмування на мові програмування Visual Basic for Applications ,експериментальний метод седиментаційного аналізу та виконав експеримент з визначення фракційного складу.

Випускник провів розрахунки у середовищі MS EXCEL та побудував графічні залежності.

Обговорення і інтерпретація отриманих результатів математичної моделі процесу седиментації та висновків з роботи проводилась за участю керівника.

Апробація результатів дипломної роботи. Результати дипломної роботи будуть оприлюднені на міжнародній науково-технічній конференції «Політ», яка відбудеться в Києві у квітні 2023 року.

Публікації. За матеріалами дипломної роботи планується подати тези до опублікування в матеріалах міжнародної науково-технічної конференції «Політ» в Києві у квітні 2023 року.

РОЗДІЛ 1

ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД.

ПОНЯТТЯ МОДЕЛІ ТА МОДЕЛЮВАННЯ. ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ.

ВИДИ МОДЕЛЕЙ.

Сучасне моделювання є основою пізнання нашого навколишнього світу. При проведенні експериментів, теоретичних досліджень, ми також в цей момент здійснюємо моделювання.

Під моделюванням слід розуміти - процес вивчення об'єкту шляхом побудови і дослідження його моделі, що здійснюване з певною метою і складається у заміні експерименту з оригіналом з експерименту на моделі.

Можемо говорити, що взагалі — це метод дослідження процесів або об'єктів, якщо дослідження виконують не на оригіналі, а на моделі, а результат дослідження застосовується для оригіналу.

Існують методи фізичного і математичного моделювання, що базуються на декількох теоріях: фізичної та математичної подібності. На базі фізичної моделі розробляються математичні рівняння. Рівняння називається *математичною моделлю*.

1.1. Математичні моделі

Математична модель – це рівняння або сукупність математичних рівнянь, вона відображає та описує цілий клас процесів, явищ, які мають подібні властивості (або є ізоморфними явища природи), а також властивості об'єкту або технологічного процесу.

Визначення «математичне моделювання» в останні кілька десятиліть у природничо-технічній галузі досить поширене. У даний час практично на будь-якому проектному чи конструкторському підприємстві розраховуються та застосовуються математичні моделі. Останніми роками, поширення набуло застосування математичного моделювання в наукових дослідженнях, особливо в таких галузях, як

економіка, управління, історія, біологія та інші. Слід зазначити, що математичне моделювання є окремою міждисциплінарною областю знань з сукупністю об'єктів, підходів та методів дослідження [1, 2].

Математичною моделлю називають сукупність рівнянь чи інших математичних співвідношень, що відображають основні властивості об'єкта, що вивчається. Також явища пов'язані з прийнятою фізичною моделі та особливості взаємодії з навколишнім середовищем на просторово-часових межах області його локалізації.

Це наближений опис будь-якого класу зовнішніх явищ, виражений зрозумілими математичними символами. Математичне моделювання служить не тільки як метод прогнозування та управління, а й як метод пізнання зовнішнього світу. Аналіз математичних моделей дозволяє проникнути в суть досліджуваного явища.

При створенні математичних моделей вони можуть використовувати загальні закони природознавства, спеціальні закони окремих наук, результати пасивних і активних експериментів, імітаційне моделювання за допомогою ЕОМ. МД можна використовувати для прогнозування перебігу процесу, обчислення цільової функції (початкових параметрів процесу), керування процесом і проектування системи з бажаними властивостями.

Математичні моделі можна створювати за допомогою будь-яких математичних засобів, включаючи диференціальні чи інтегральні рівняння, теорію множин, абстрактну алгебру, математичну логіку, теорію ймовірностей, мови графіків та інші мови. Процес створення математичної моделі називається математичним моделюванням. Це найпоширеніший і широко використовуваний метод дослідження в науці, особливо в кібернетиці.

Якщо відношення задаються аналітично, то їх можна розв'язати в замкнутому вигляді (явно) відносно шуканих змінних як функції від параметрів моделі, або в частково замкнутому вигляді (неявно), коли шукані змінні залежать від одного або багатьох параметрів моделі.

Математична модель є дискретною, якщо вона описує стан системи тільки в термінах дискретних значень незалежних змінних, ігноруючи характер процесів, що відбуваються в проміжках між ними (дискреційний вибір кроку важливий, залежить

від того, наскільки точно математично модель описує реальний об'єкт). Якщо параметри об'єкта, для якого розробляється математична модель, можна вважати незалежними від часу, то така система описується стаціонарною моделлю, ознаками якої є постійні коефіцієнти. У протилежному випадку математична модель є тимчасовою.

Існує визначення — математична хімія — це розділ теоретичної хімії, вона призначена новим застосуванням математики до хімічних завдань (наприклад, це формули що описують взаємодії чи перетворення).

При математичному моделюванні ми орієнтуємось на моделі стандартного вигляду, забезпечені відповідним математичним апаратом. Так, фізичні процеси охарактеризуються просторово-часовими співвідношеннями і, часто, описуються диференційними рівняннями у часткових похідних.

До побудування МД висувають деякі вимоги та розрізняють основні етапи побудови математичної моделі :

- Формулювання проблеми;
- Формалізація;
- Постановка цілей та завдань моделювання;
- Вибір математичного апарату та проведення обчислень для вирішення рівнянь;
- коригування моделі;
- Розрахунок точності та обговорення результатів;

Вимоги до математичної моделі:

Модель повинна бути адекватною (адекватність - здатність відображати задані властивості об'єкта з похибкою не вище заданої).

Точність – оцінюється ступенем збігу значень параметрів дійсного об'єкта та розрахованих на математичних моделях.

Модель повинна бути універсальною – характеризувати повноту відображення моделі властивостей реального об'єкта.

Модель повинна бути економічною - зазвичай характеризується необхідними витратами машинної пам'яті та часу. Іноді оцінюється за кількістю операцій, необхідних при одному зверненні до моделі.

Вимоги універсальності, точності, адекватності з одного боку та економічності з іншого дискусійні. Це зумовлює роботу цілого ряду моделей, що відрізняються тими чи іншими властивостями.

Існує певна класифікація математичних моделей залежно від використання управління процесом.

Класифікуються як:

1. Неконтрольовані прогнозні або обчислювальні моделі. Основна мета цих моделей — отримати інформацію про вихідний стан і поведінку меж, щоб забезпечити прогнозування поведінки системи в часі або просторі.

Приклади включають моделі: передачі тепла, зміни електричного поля, хімічної кінетики та динаміку рідини.

2. Модель оптимізації:

- Фіксовані моделі створюються для проектування різних технічних систем.
- Динамічні моделі - створюються як на проектному рівні, так і для оптимального керування різними процесами - технічними, економічними та ін.

1.2. Моделі стану і процесів

Фактично, процеси можна описати математичними рівняннями рішення яких реалізується складанням програмам. У моделі все програмне забезпечення, що виконується на комп'ютері (яке також може включати саму операційну систему), організоване як набір програм [2, 3].

Розрахунки програмою включають поточні значення програмних лічильників, реєстрів і змінних. З моделі кожен процес має власний віртуальний процесор. Насправді реальні процесори природним чином перемикаються від процесу до процесу, але щоб краще зрозуміти систему, краще уявити серію процесів, що виконуються паралельно, а не уявити процесор, який перемикається від програми до процесу. Це перемикання відоме як багатозадачність. Коли процесор перемикає програми, швидкість, з якою процесор виконує обчислення є змінною і може бути іншим кожного разу, коли процес запускається.

Створення програми для операційної системи має забезпечити наявність усіх необхідних процесів. Як і в будь-якій системі, призначеній для запуску однієї програми, найпростіша система може реалізувати ситуацію, коли система містить всі процеси, які можуть знадобитися під час роботи програми. Типова програма повинна мати спосіб створювати та зупиняти процеси на вимогу. Розглянемо кілька способів вирішення цієї проблеми.

Рівняння моделі стану системи зазвичай називають рівняннями стану або фазовими рівняннями. Параметри можуть бути включені в моделі стану системи та моделі спостереження. Його можна включити в початкові або граничні умови. Це відповідає тому, що ми не знаємо конкретних додаткових умов і повинні визначити найкращий опис. У цьому випадку, для отримання інформаційної матриці, необхідний вихід величин стану для невідомих параметрів, що містяться у обмеженнях.

Модель стану системи може бути задана неявно, у вигляді системи рівнянь (алгебраїчних, різницевих, диференціальних та інших), тому, щоб мати можливість визначити оцінки параметрів і змінних стану, все одно потрібно вміти розраховувати рівняння стану. Задачу про розв'язування рівняння стану прийнято у математичній літературі називати прямою задачею, а задачу про визначення коефіцієнтів такого рівняння – оберненою задачею про визначення коефіцієнтів.

Для рішення моделей часто використовують принцип максимальної правдоподібності який успішно використовується при оцінюванні параметрів сучасних динамічних моделей, де модель стану системи зазвичай виражається різницевиими або диференціальними рівняннями.

Для розрахунку головного фактору необхідно розробити спеціальний алгоритм. Він приймає як вхідні дані модель стану системи під час прийняття рішення та обчислення на основі ефективного стану системи, це вимагає зусиль. Часто припускають, що модель стану системи не містить шумових компонентів при визначених змінних стану.

Особливу роль відіграють модельні уявлення при вивченні термодинамічних процесів, особливо у хімії. Це пояснюється тим, що термодинаміка вивчає лише

результати та встановлює обмеження для процесів, які задовольняють певні умови. Тому модель стану системи не залежить від термодинамічних методів і дозволяє розглядати раціональні моделі системи. Ця умова зробила дві моделі термодинамічно еквівалентними. Одним із її видів є фізико-хімічна модель, яка максимально враховує всі молекулярні форми, які реально існують у системі. Другий тип, який традиційно можна назвати формальними моделями, вводить конкретні коефіцієнти, що враховують відхилення системи від ідеального стану.

Тому термодинамічні моделі дуже важливі і корисні. Вони дозволяють розрахувати енергію процесу, склад рівноважної системи і вихід продуктів реакції.

Не слід забувати про формалізм цього методу, відсутність врахування механізму процесу та моделі стану системи. Такий формальний підхід дозволяє використовувати такі поняття, як коефіцієнти активності, які характеризують відмінність моделі від реальних процесів. Однак, комплексні термодинамічні вивчення систем з використанням термодинамічних даних є одним із найважливіших напрямів вивчення хімічних процесів.

1.3. Математичні моделі в хімії

Багато прикладів, коли моделювання допомогло не тільки пояснити будь-які явища в природі, техніці або хімії, але й передбачити нові відкриття в тих напрямках людської діяльності, без яких людство не може обійтися.

Досить згадати важливість видобутку, передачі та зберігання енергії для сучасної діяльності в електротехніці та електронній інженерії, машинобудуванні та приладобудуванні. У природничих науках найбільш поширені фізико-математичні моделі. Немає сумніву, що математичні розрахунки, розробка і застосування математичних моделей і математичних апаратів буде інтенсифікуватися в найближчі роки [1].

Розвиток хімічної технології пов'язаний із створенням нових високоефективних процесів та модернізацією діючих технологічних установок.

Для рішення цих завдань використовуються математичні моделі для дослідження властивостей об'єктів, прогнозування оптимальних складів сумішей і режимів роботи установок з використанням комп'ютера. Розробкою систем автоматичного керування технологічними процесами займаються математики, які можуть забезпечити навчання, можуть бути успішно вирішені за допомогою методів системне моделювання.

Моделювання молекул, хімічних процесів і реакцій

МД широко використовується в хімії для пізнання і вивчення будови речовин і особливостей процесів протікання хімічних реакцій, для виявлення оптимальних умов хіміко-технологічних процесів та ін [4, 5].

Наприклад, математична модель осадження сполук нікелю. За відсутності H_2O_2 отримано математичну модель для нікелю, яка має вигляд:

$$\lg Ni = -1,2904 + \left[1 - \left(1 + \exp\left(\frac{pH - 9,14}{0,476} \right) \right)^{-1} \right] \times \\ \times [0,914 \cdot \lg(Ni^{2+}) + 0,000587 \cdot \exp(0,0244 \cdot T) - \\ - 1,1925 \cdot T^{0,5} + 15,396 \cdot \exp(1,1618 \cdot \tau)],$$

де $\lg Ni$ – логарифм кінцевої концентрації нікелю у розчині, моль/л;

$\lg (Mn^{2+})$ – логарифм початкової концентрації нікелю у розчині, моль/л.

Моделювання відіграє дуже важливу роль у біохімії та фармакології. Досягнення фармакології характеризуються постійним пошуком і розробкою нових і більш досконалих ліків. В останні роки в основі розробки нових ліків лежать не біоактивні речовини, як у минулому, а субстрати, з якими вони взаємодіють (рецептори, ферменти тощо). Такі дослідження вимагають найдетальніших даних про тривимірну структуру макромолекул, які є основними мішенями ліків. Зараз існують бази даних таких даних, що охоплюють значну кількість ферментів і нуклеїнових кислот.

Багато факторів сприяли прогресу в цьому напрямку. По-перше, було вдосконалено рентгенівський структурний аналіз і розроблено спектроскопію на основі ядерного магнітного резонансу. Останній метод відкрив принципово нові

можливості, оскільки дозволив визначити тривимірну структуру речовини в розчині, тобто в некристалічному стані. Важливо, що за допомогою генної інженерії вдалося отримати достатню кількість субстратів для детальних хімічних і фізико-хімічних досліджень [7].

На основі наявних даних про властивості багатьох макромолекул їх структури можна змоделювати обчислювальним шляхом. Це дає нам чітке уявлення не тільки про загальну молекулу, а й про форму її активного центру, який взаємодіє з лігандом. Досліджено особливості рельєфу поверхні субстрату, природу його структурних елементів та можливі типи міжатомних взаємодій з ендогенними чи ксенобіотичними речовинами.

Крім того, молекулярне комп'ютерне моделювання, використання графічних систем і відповідних статистичних прийомів дозволяють отримати досить повну картину тривимірної структури фармакологічних речовин і розподілу їх електронного поля. Така сукупна інформація про біологічно активні сполуки та субстрати повинна полегшити ефективне проектування потенційних лігандів з високою компліментарністю та спорідненістю. Досі такі можливості були лише мріями, а тепер вони стали реальністю.

Комп'ютерне моделювання молекул базується на безлічі наближень і припущень. Так, вважається, що енергія молекули визначається лише координатами атомів у просторі. Однак насправді молекули не перебувають у спокої, і обчислення енергії в комп'ютерах виконуються на статичних молекулах. В даний час розробляються методи молекулярної динаміки, які можуть пояснити тепловий рух молекул, але поки що жоден підхід не може надійно пояснити ентропійну складову енергії. Крім того, тривалість життя системи порядку кількох пікосекунд може бути розрахована за прийнятний проміжок часу.

Вивчення тривимірної структури білків створює великі проблеми. На даний момент не існує методу точного прогнозування тривимірної структури білка за його амінокислотою послідовністю. Дійсно, метод аналогії використовується, коли передбачається, що ідентичні амінокислотні ділянки різних білків підходять одна

одній подібним чином. Експериментальне отримання 3D-зображень викликає багато проблем.

Рентгеноструктурний аналіз вимагає кристалізації білків (що можливо лише для розчинних білків), а потенціал ядерного магнітного резонансу обмежений розміром білкових молекул.

Моделювання хімічних реакторів використовується для прогнозування результатів хімічних процесів за заданих умов для пристроїв довільного розміру. Спроби здійснити широкомасштабний перехід від малих реакторів до промислових реакторів за допомогою фізичного моделювання провалилися через несумісність подібних умов для хімічних і фізичних компонентів процесу (щодо швидкості хімічної конверсії, вплив фізичних факторів) значно відрізняються для різних розмірів реактори). Тому для широкомасштабних перетворень в основному використовувалися емпіричні методи.

Процес досліджували в реакторах безперервного перемішування (у лабораторії, розширені випробувальні установки, напівтехнічні установки та промислові реактори).

Математичне моделювання дозволило вивчити хімічні реактори та реалізувати масштабні наземні мости. Процеси в реакторах складаються з багатьох хімічних і фізичних взаємодій на різних структурних рівнях, таких як молекули, макродомени, елементи реактора та реактори. За структурним рівнем процесу будується багаторівнева математична модель реактора. Перший рівень відповідає кінетичній моделі, рівняння якої описують залежність швидкості реакції від концентрації реагентів, температури та тиску в певному інтервалі значень і фактичних умов процесу [10-11].

Властивості наступного структурного рівня залежать від типу реактора. Наприклад, для реактора з нерухомим шаром каталізатора другий рівень — це процеси, які відбуваються в частинках каталізатора, де важливі масо- та теплообмін усередині пористих частинок. Кожен наступний рівень структури містить як компоненти всі попередні, такі як математичний опис каталітичного процесу частинок, включаючи транспортні та кінетичні рівняння. Моделі третього рівня також

включають рівняння для передачі маси, тепла та імпульсу, наприклад, у шарах каталізатора. Моделі інших типів реакторів (з киплячим шаром, колонного типу з підвішеним каталізатором тощо) також мають ієрархічну структуру.

1.4. Математичні моделі ідеального газу

Ідеальний газ — це теоретична модель газу, в якій нехтують розміром і взаємодією частинок газу і розглядають лише пружні зіткнення.

Іншими словами, передбачається, що внутрішня енергія ідеального газу визначається тільки кінетичною енергією його частинок (тобто без урахування потенційних енергій міжмолекулярних взаємодій).

Модель ідеального газу була запропонована Дж. Геррапатом у 1847 році. На основі цієї моделі теоретично були виведені раніше експериментально встановлені газові закони (закон Бойля-Маріотта, закон Гей-Люссака, закон Шарля, закон Авогадро). Теорія молекулярної динаміки газів базувалася на моделі ідеального газу. Аксіоми ідеального газу (модель руху Геррапата):

1. Усі частинки мають кінетичну енергію і перебувають у постійному русі.
2. Між частинками немає далекосяжних сил притягання чи відштовхування, а зіткнення між частинками та зі стінками посудини повністю пружні.
3. Потенційна енергія взаємодії частинок, що входять до складу газу, незначна. В даний час вона вважається єдиною моделлю ідеального газу в науковій і навчальній літературі.
4. Загальний об'єм частинок газу незначний порівняно з об'ємом ємності.
5. Час взаємодії частинок незначний порівняно із середнім часом між зіткненнями. Концепція «ідеального газу» передбачає, що атоми не взаємодіють один з одним і що повна внутрішня енергія газу складається лише з кінетичної енергії атомів.

Аксіоми ідеального газу (модель кінетичного потенціалу автора):

1. Усі частинки мають кінетичну енергію і перебувають у постійному русі.

2. Між частинками існує далеке притягання. Це означає, що кожна молекула газу має не тільки кінетичну енергію, а й потенційну енергію взаємодії.

3. Зіткнення між частинками і зі стінками судин повністю пружні.

4. Загальний об'єм частинок газу невеликий.

Порівняння показує, що припущення настільки різні, що неможливо сплутати моделі, засновані на радикально різних припущеннях. Проте більш пильний погляд показує, що відмінності між моделями полягають не стільки в гіпотезах, скільки в їх сприйнятті типу енергії, притаманного частинкам газу.

У моделі Герапата частинки газу мають лише кінетичну енергію, або визнається лише зіткняльна взаємодія між частинками. Наявність інших типів енергії в частинках газу не визнається, тому за визначенням не може бути іншого типу взаємодії між частинками газу.

У моделі, запропонованій авторами, частинки газу мають як кінетичну, так і потенційну енергію. Тому передбачається, що частинки газу взаємодіють не тільки за рахунок зіткнень, але й за рахунок дальнодійних (прихованих) сил.

Однак це не обмежує кількість можливих моделей ідеального газу. Деякі інші автори пропонують іншу модель ідеального газу.

Можливості суті цієї моделі полягає в тому, що частинки газу є нерухомими. Х. Вони не мають кінетичної енергії. Таку газову модель іноді називають "кристалічною", оскільки передбачається, що частинки газу є кристалічними на певній відстані одна від одної. Однак відстань між частинками здається набагато більшою, ніж у звичайних кристалах [12]. У цьому випадку частинки газу взаємодіють між собою тільки потенційними (дальнодійними) силами. Автори вважають таку модель незадовільною фізичною реальністю, оскільки за допомогою цієї моделі дуже важко пояснити деякі властивості газів. В. Вільне розширення, взаємодифузія тощо. Проте зауважимо, що така модель існує.

Основними законами ідеального газу є рівняння стану і закон Авогадро, і вперше макровластивості газу (тиск, температура, маса) були пов'язані з молекулярною масою (рівняння Менделєєва-Клапейрона або ідеальний газ) . рівняння стану).

Він також використовується в сучасній фізиці для опису набору слабо взаємодіючих частинок. Модель ідеального газу застосовується до реальних класичних газів при досить високих температурах і розчиненнях, коли середня відстань між молекулами набагато більша, ніж розмір самих молекул. У цьому випадку гравітацією можна знехтувати.

Сили відштовхування виникають лише тоді, коли вони стикаються за малий час інтервали. Проста газова модель розглядає молекули як тверді сфери з дуже малою масою. Рух окремих молекул підкоряється законам механіки Ньютона.

Звичайно, така модель не може бути використана для опису всіх процесів благородних газів, але вона може бути використана для розрахунку тиску газу.

1.4.1. Перше наближення (рівняння Клайперона – Менделєєва)

Ідеальний газ — це сукупність великої кількості молекул, які не взаємодіють віддалено.

Для ідеального газу:

1. Молекули не мають розмірів.
2. Відсутні сили міжмолекулярної взаємодії.
3. Молекули, що стикаються одна з одною та зі стінками судин, є абсолютно пружними.

Ідеальний газ — це ідеалізоване поняття, а реальні гази (такі як азот) можна вважати майже ідеальними за досить низьких тисків і досить високих температур, щоб можна було знехтувати розміром молекул і взаємодіями [14]. Мікромлини (поведінка окремих молекул газу) неможливо контролювати. Макростани (прояви руху багатьох молекул в ємності об'ємом V) можна контролювати, вимірюючи p і T . Значення p , V і T є параметрами стану.

Це рівняння вперше було отримано в 1834 році французьким фізиком та інженером Емілем Клапейроном в результаті узагальнення експериментальних законів Бойля Маріотта, Шарля і Гей-Люссака:

$$pV/T = \text{const}$$

Однак, Клапейрон використовував дещо незручну систему констант. Потім усі константи Клапейрона були замінені одним значенням R . Це зробив Дмитро Іванович Менделєєв, тому записаний вираз називають формулою рівняння Клапейрона-Менделєєва.

Масовий стан газу повністю визначений, якщо відомі тиск, температура та об'єм. Ці величини називають параметрами стану газу. Рівняння, що зв'язує параметри стану, називається рівнянням стану.

Для будь-якої маси газу стан газу описується рівнянням Менделєєва-Клапейрона:

$$pV = mRT/M,$$

де p — тиск, V — об'єм, m — маса, M — молярна маса, R — універсальна газова стала.

Фізичний зміст універсальної газової постійної полягає в тому, що вона показує, яку роботу виконує один моль ідеального газу під час ізобарного розширення при нагріванні на 1 К ($R = 8,31$ Дж/моль · К).

Слід зазначити одну важливу особливість цього рівняння. Це не залежить від хімічного складу або складу газу. Тому його часто називають універсальним.

Рівняння Менделєєва-Клапейрона показує, що три параметри, які характеризують стан ідеального газу, можуть бути змінені одночасно. Однак багато процесів у газах, що відбуваються в природі і виконуються технологією, можна розглядати як процеси, в яких змінюються лише два параметри. Особливу роль у фізиці і техніці відіграють три процеси: ізотермічний, ізохорний, ізобарний [13].

1.4.2. Друге наближення (рівняння Ван-Дер-Вальса)

Загальне рівняння стану реальних газів має вигляд $f(p, V, T) = 0$, де кожна змінна є функцією двох інших. Взаємодії молекул реального газу визначають відхилення рівняння від рівняння Менделєєва-Клапейрона, що описує ідеальний газ.

У 1873 році голландський фізик Вандер Вальс вивів рівняння стану реальних газів, модифікувавши рівняння Менделєєва-Клапейрона [13, 15, 17, 18] для питомих об'ємів молекул і сили міжмолекулярних взаємодій.

1. Розрахунок молекулярного питомого об'єму. Існування сили відштовхування, яка перешкоджає проникненню інших молекул в об'єм, який займає молекула, пов'язано з тим, що фактичний вільний об'єм, в якому може переміщатися один моль молекули реального газу, становить не V_m , а $V_m - b$. де b – приблизно простір, який займає сама молекула. Об'єм b відповідає чотирикратному власному об'єму молекули.

2. Розрахунок молекулярного притягання. Дія сил притягання між молекулами газу створює додатковий тиск у газі, який називається внутрішнім тиском. За розрахунками Вандер-Вальса внутрішній тиск обернено пропорційний квадрату

молярного об'єму:
$$p' = \frac{a}{V_m^2},$$

де a – постійна Вандер-Вальса, що характеризує сили міжмолекулярного притягання; V_m – молярний об'єм. Вводячи обидві поправки і рівняння Менделєєва-Клапейрона, одержимо рівняння Вандер-Вальса для 1 моля газу (рівняння стану

реальних газів):
$$\left(p + \frac{a}{V_m^2} \right) (V_m - b) = RT.$$

Для довільної кількості речовини ν газу рівняння Вандер-Вальса набуде вигляду

$$\left(p + \frac{\nu^2 a}{V^2} \right) (V - \nu b) = \nu RT,$$

де поправки a і b – постійні для кожного газу величини, визначувані експериментально (записуються рівняння Ван-дер-Ваальса для двохвідомих з досліду станів газу і розв'язуються відносно a і b). Рівняння Вандер-Вальса, зважаючи на цілий ряд спрощень, є наближеним і кількісно описує властивості реальних газів у області високих температур і низького тиску.

Рівняння Вандер-Вальса – не єдине рівняння, що застосовується до опису реальних газів.

1.5. Моделі атому

Атом — частинка речовини мікроскопічних розмірів і маси і є найменшою частиною хімічного елемента з його властивостями.

Атоми складаються з ядра і електронів (точніше, електронних хмар). Атомне ядро складається з протонів і нейтронів. Кількість нейтронів у ядрі може бути різною.

Від нуля до десятків. Загалом, атом є електрично нейтральним, якщо кількість електронів у ядрі відповідає кількості протонів. В іншому випадку вони мають позитивний або негативний заряд і називаються іонами. У деяких випадках ми стикаємося із зарядженими іонами, оскільки атоми розуміються лише як електрично нейтральні системи, в яких заряд ядра дорівнює повному заряду електронів [20].

Ядро, яке несе майже всю атомну масу (понад 99,9%), складається з позитивно заряджених протонів і незаряджених нейтронів, які утримуються разом сильними взаємодіями. Атоми класифікуються за кількістю протонів і нейтронів у ядрі.

Число протонів Z відповідає атомному номеру атомів у періодичній системі Менделєєва і визначає, які атоми належать до того чи іншого хімічного елемента. Число нейтронів N є ізотопом певного елемента. Протій - єдиний стабільний атом, який не містить нейтронів у своєму ядрі. Число Z також визначає загальний позитивний заряд ($Z \times e$) ядра та кількість електронів у нейтральному атомі, що визначає його розмір.

Наприкінці 19 століття вчені вважали, що неподільні атоми складаються з рівномірно заряджених сфер з «позитивним зарядом». Електрони розсіяні навколо цієї сфери, і весь атом нейтральний. Британський фізик Дж. Дж. Томсон, який запропонував таку атомну модель у 1898 році, одного разу описав її як «пудинг із родзинками». Модель Томсона отримала назву «пі», оскільки вчений порівнював атоми з пудингами, а електрони — з родзинками.

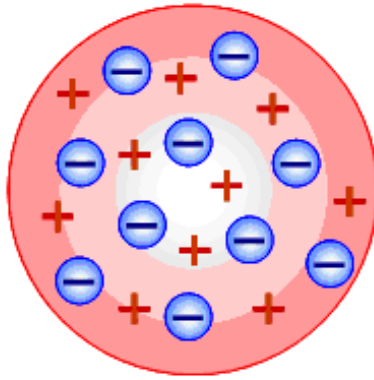


Рис. 1.1. Кексова модель атома, запропонована Дж.Дж.Томсоном

Після моделі Томсона було кілька цікавих та інноваційних моделей, заснованих на математичних розрахунках і деяких фізичних експериментах. Зокрема, Х. Нагаоку запропонував модель атомів Сатурна. Відповідно до цієї моделі атом має важке ядро в центрі, а електрони обертаються навколо ядра по звичайних орбітах.

Ядро має позитивний заряд, що дорівнює сумарному заряду найближчих кільцевих електронів [21].

При цьому відстань між ядром і електроном дуже мала. Розташування електронів навколо ядра нагадує пояс астероїдів навколо планети Сатурн. Звідси і назва моделі.

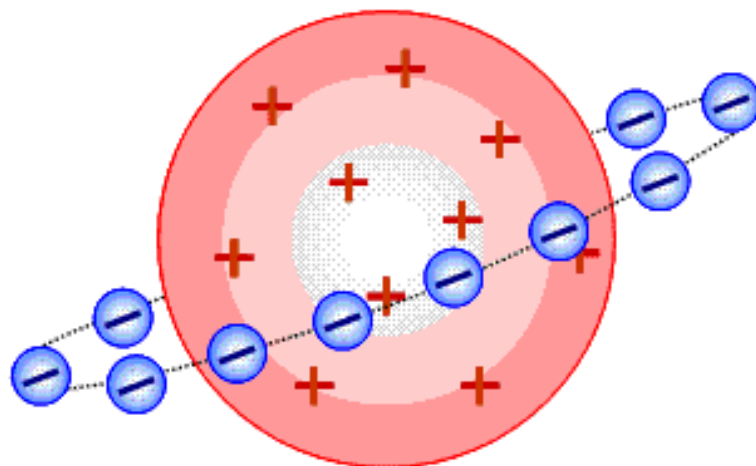


Рис. 1.2. Сатурнова модель атома, запропонована Х. Нагаоком

Найбільш близько до теоретичного вирішення проблеми будови атома підійшов Б. Чичерін. Модель Б. Чичеріна базувалася на математичних розрахунках і складалася з таких елементів: У центрі атома знаходиться гігантське позитивно заряджене ядро, оточене електронами.

Однак, на відміну від попередніх моделей, електрони мали форму не сфер, а скоріше схожих на кільця з атомним ядром посередині. Кількість електронів в атомі, кількість кілець навколо ядра. Крім того, хоча всі ці кільця можуть лежати в різних площинах, вони мають спільний центр, у якому розташовані ядра.

Загальний заряд усіх електронів на модуль дорівнює заряду ядра.

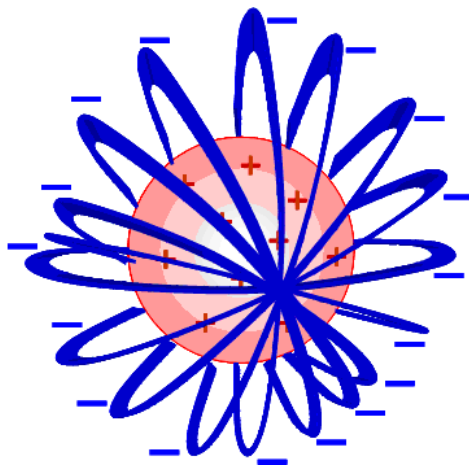


Рис. 1.3. Модель атома Б.Чичеріна

У 1906 році Резерфорд запропонував використовувати альфа-частинки для дослідження атомів, щоб експериментально вивчити розподіл позитивних зарядів і, отже, масу всередині атомів. Ці частинки утворюються при розпаді радію та інших елементів. Їх маса приблизно в 8000 разів перевищує масу електрона, а позитивний заряд дорівнює подвоєному модулю заряду електрона. Ці дані вказують на те, що ці частинки є повністю іонізованими атомами гелію. Швидкість альфа-частинок дуже висока. Це $1/15$ швидкості світла [20].

Використовуючи природне джерело радіації, Резерфорд побудував гармату. Це свинцева коробка з вузькою щілиною, що містить радіоактивний матеріал. В результаті α -частинки поглиналися свинцевим екраном, і спрямований пучок α -

частинок виходив лише через щілину. Далі на шляху променя було ще кілька свинцевих екранів з вузькими щілинами, які блокували частинки, що збивалися з точно визначеного напрямку.

В результаті ідеально сфокусований пучок альфа-частинок летів до мішені, яка сама по собі була дуже тонким шматочком золотої фольги, на яку потрапили альфа-промені.

Після зіткнення з атомами фольги альфа-частинки продовжили свій шлях і вдарилися об люмінофорний екран, розміщений позаду мішені, і при попаданні альфа-частинок був зафіксований спалах. З них експериментатор зміг зробити висновок, як і в якій мірі альфа-частинки відхиляються від напрямку прямолінійного руху через зіткнення з атомами Augum.

Спираючись на модель Томсона, Резерфорд вважав, що альфа-частинки повинні вільно пролітати через золоті пластини, але був здивований результатами своїх експериментів. Окремі альфа-частинки (від 8000 до 10000 частин) дуже різко відскакують від екрана. Про це сам Резерфорд писав так: «...отримані результати здавалися настільки ж неймовірними, як якби вистрілювали снарядом в цигарковий папір і цей снаряд відбився б назад і потрапив у вас ...»

У 1911 році Ернст Резерфорд провів спеціальний експеримент з виявлення однієї з багатьох існуючих реальних моделей атома.

1. У центрі атома знаходиться дуже маленьке позитивно заряджене ядро, в якому зосереджена майже вся маса.

2. Електрони хаотично рухаються навколо ядра, як планети в полі тяжіння Сонця.

3. Через велику кількість електронів атоми загалом електрично нейтральні. Ця структурна модель атома отримала назву «планетарна модель Резерфорда». Це виявилось дуже зрозумілим і корисним для пояснення багатьох експериментальних даних. Однак модель швидко виявила свої недоліки і викликала ще більше запитань у фізиків і хіміків, ніж раніше [20].

Зокрема, електрони, що рухаються з прискоренням навколо ядра (де діє доцентрова сила), повинні безперервно виділяти енергію відповідно до

електромагнітної теорії. Це призводить до дисбалансу між електронами та ядрами. Електрон поступово втрачає енергію, обертається по спіралі навколо ядра і врешті-решт неминуче падає в ядро [21].

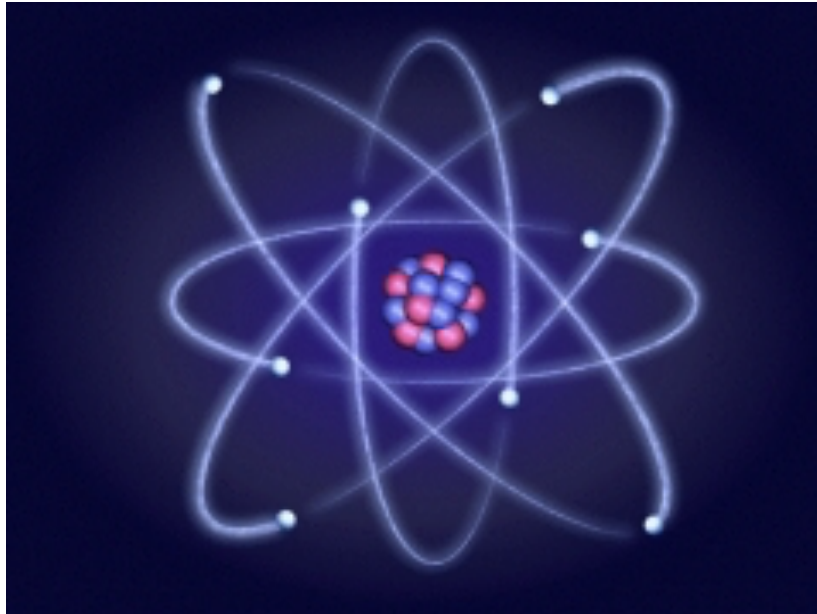


Рис.1.4. Планетарна модель атома, запропонована Е. Резерфордом у 1911 році

Результатом цього експерименту є планетарна модель атома, розроблена Резерфордом, згідно з якою атом має позитивно заряджене ядро (що складається з протонів і нейтронів) у своєму центрі, а електрони навколо цього ядра рухається по колу або еліптично орбіта. Відстань між ядром і електроном набагато більша за радіус самого ядра [21].

1.6. Математична модель розчинів електролітів

Математичні моделі розчинів електролітів засновані на наближених описах властивостей, станів і поведінки іонів у розчині з урахуванням електростатичних взаємодій між іонами. Такі ідеї теоретично використав Дебай Хюккель.

У другому наближенні Дебая-Хюккеля термодинамічні константи розраховуються за допомогою теорії Дебая-Хюккеля в квадратичному наближенні

Якщо ми не обмежуємо рівняння Дебая-Хюккеля першим членом, ми можемо показати, що взаємодії між іонами можуть призвести до таких результатів. У цьому розділі термодинамічні властивості розчинів електролітів розглядаються переважно з точки зору коефіцієнтів іонної активності, здебільшого в рамках теорії Дебая-Хюккеля [22, 23].

Для потенціалу ми використовуємо рівняння теорії Дебая-Хюккеля, припускаючи, що електроліт у розчині повністю дисоційований. Електростатичні взаємодії протилежно заряджених іонів означають, що негативно заряджені іони частіше зустрічаються навколо позитивно заряджених іонів, а позитивні іони частіше зустрічаються навколо негативних іонів. При цьому розчин залишається електрично нейтральним [22, 24].

Застосовність теорії Дебая-Хюккеля не обмежується обчисленням коефіцієнтів активності. Рівняння тощо пов'язують різні термодинамічні властивості розчинів з коефіцієнтами активності. На основі цих співвідношень і формул можна отримати формули для коефіцієнтів проникності, відносних парціальних молярних ентальпій та інших властивостей.

Математична модель Дебая-Хюккеля для розчинів електролітів містить рівняння для коефіцієнтів активності іонів у розчині. Однак наближення, використане для створення математичної моделі, не може використовувати формулу для коефіцієнта активності іонів у концентрованих розчинах. Теорія Дебая-Хюккеля описує значення активності іонів у розбавлених розчинах. Перше наближення для розрахунку коефіцієнта активності іонів має вигляд:

$$\lg \gamma = -0,509 \cdot Z^2 \cdot \sqrt{I} \approx -0,5 \cdot Z^2 \cdot \sqrt{I}.$$

Друге наближення моделі Дебая-Хюккеля, що враховує розміри іонів, описує властивості розчинів електролітів для більш концентрованих розчинів (для концентрації рибки 0,01 моль.л).

Друге наближення з урахуванням розміру іонів має вигляд:

$$\lg \gamma = \frac{-A_0 \cdot Z^2 \cdot \sqrt{I}}{1 + aB\sqrt{I}} \approx \frac{-0,5 \cdot Z^2 \cdot \sqrt{I}}{1 + \sqrt{I}}.$$

1.7. Моделі адсорбції. Теорія Ленгмюра. Теорія БЕТ

Фундаментальним внеском у вивчення адсорбції стала теорія Ірвінга Ленгмюра (1914-1918). Це могло б пояснити найбільше відхилення від закону Генрі, пов'язане з обмеженою площею поверхні адсорбенту [19, 25].

Обмеження цього параметра призводить до адсорбційного насичення поверхні адсорбенту зі збільшенням концентрації диспергованого матеріалу [19].

1) Адсорбція зумовлена валентними силами (в цьому випадку всі сили, які визначають когезію та поверхневий натяг речовини, вважаються хімічними і також діють під час випаровування та кристалізації) [20, 21, 25].

2) Адсорбція відбувається в активних центрах (неоднорідності поверхні, кристалічні валики та обвуглювання, поверхневі дефекти).

3) Центри адсорбції енергетично еквівалентні.

4) На поверхні адсорбенту утворюється лише моношар молекул адсорбенту. Іншими словами, відбувається адсорбційне насичення (межа адсорбції).

5) Адсорбція локалізована – адсорбовані молекули не рухаються по поверхні і кожен центр взаємодіє лише з однією адсорбованою молекулою.

6) Адсорбовані молекули не взаємодіють одна з одною.

7) Баланс динамічний.

Рівняння ізотерми адсорбції Ленгмюра:

$$A = A_{\infty} \frac{K_c}{1 + K_c}$$

де A_{∞} гранична мономолекулярна адсорбція ємність моношару,

K — константа адсорбційної рівноваги

c — концентрація адсорбтиву в об'ємній фазі

p — тиск пари адсорбату

Рівняння Ленгмюра (довільна ступінь покриття поверхні):

$$\frac{\theta}{1 - \theta} = K_c$$

Коли одношарове заповнення поверхні завершується, A стає

$$\text{рівним } A_{\infty} \theta = 1.$$

Рівняння Ленгмюра можна використовувати лише за відсутності моношарової масової адсорбції. Цій умові відповідає хемосорбція (фізична адсорбція газів при низьких тисках і вище критичної температури), часто адсорбція з розчину. Ці обмеження щодо застосування рівняння Ленгмюра мають мало спільного з формальним описом адсорбції. Це тому, що неможливо отримати правильні значення коефіцієнта адсорбції та ємності моношару відповідно до фізичного значення [20-22].

У більшості випадків реальна поверхня твердого тіла не є повністю однорідною за енергією. Адсорбція зазвичай не є строго локалізованою. Адсорбовані молекули здебільшого взаємодіють одна з одною [14, 18-19]. Хоча стехіометрія може бути порушена, це не обмежує адсорбцію утворенням моношару. Тому фактична ізотерма адсорбції завжди відхиляється від ізотерми Ленгмюра. Навіть сам Ленгмюр показав, що якщо вважати центри адсорбції енергетично неоднорідними, то загальна адсорбція в усіх центрах виражається наступним рівнянням:

$$A = \sum \left(A_{m,i} \cdot \frac{b_i p}{1 + b_i p} \right),$$

де i – кількість груп однакових центрів.

Брунауер, Еммет і Теллер відмовилися від другого припущення Ленгмюра, що призвело до одномолекулярної адсорбції. Вони розробили теорію мультимолекулярної адсорбції, коли температура адсорбенту нижче критичної температури (тобто це все ще пара).

Теорія БЕТ підтримує ідею Ленгмюра про динамічний характер адсорбції. Адсорбцію вважають багатогранною. Молекули першого шару адсорбуються на поверхні адсорбенту за рахунок міжмолекулярних взаємодій між адсорбентом і адсорбатом. Кожна адсорбована молекула в першому адсорбованому шарі може служити центром адсорбції для молекул у другому шарі і так далі. Так утворюються

другий і наступні сорбційні шари. Теплота адсорбції в першому шарі q_1 визначається взаємодією адсорбат-адсорбент, у всіх наступних шарах – взаємодією адсорбат-адсорбат [15]. Тому теплота адсорбції в усіх шарах, починаючи з другого, дорівнює теплоті конденсації λ .

Брунауер, Еммет і Теллер узагальнили модель Ленгмюра на полімолекулярну адсорбцію (рис.1.5):

1. Поверхня сорбенту має енергетично еквівалентні активні центри, здатні утримувати молекули сорбенту.

2. Кожна молекула в першому адсорбційному шарі є можливим центром адсорбції і утворює другий адсорбційний шар, кожна молекула в другому шарі є можливим центром адсорбції в третьому шарі.

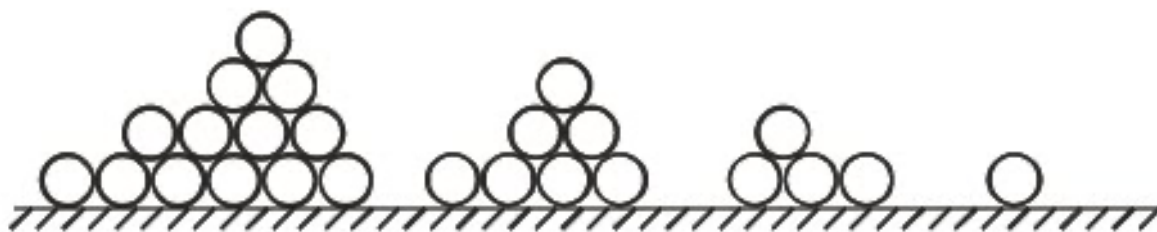


Рис.1.5. Формування адсорбційних шарів згідно до теорії БЕТ

3. Модель побудована так, що сусідні адсорбати не взаємодіють.

4. Теплота адсорбції в першому шарі може мати особливе значення, що відображає властивості взаємодії між молекулами адсорбенту і адсорбентом, тоді як у всіх інших шарах теплота адсорбції зумовлена конденсацією рідкого адсорбенту, що дорівнює тепло.

П'ять. Конденсація або випаровування відбувається лише на поверхнях, які вже вкриті молекулами або вже були вкриті.

6. Рівняння Ленгмюра вважається придатним не тільки для першого шару адсорбенту, а й для інших шарів.

Рівняння БЕТ:

$$A = \frac{A_{\infty} C p / p_s}{(1 - p / p_s) [1 + (C - 1) \cdot p / p_s]}$$

де C — константа, яка визначається енергією взаємодії адсорбату з поверхнею адсорбенту,

p_s — тиск насиченої пари адсорбату.

При $p/p_s \ll 1$ рівняння БЕТ переходить у рівняння Ленгмюра:

$$\frac{p}{A(p_s - p)} = \frac{1}{A_{\infty} C} + \frac{C - 1}{A_{\infty} C} \cdot p / p_s$$

Адсорбція що описується рівнянням Ленгмюра або рівнянням теорії БЕТ використовується для розрахунків питомої поверхні речовин – адсорбентів.

$$S_{\text{nut}} = A_{\infty} \cdot N_A \cdot S_M,$$

де S_M площа, яку займає одна молекула адсорбату в насиченому адсорбційному шарі.

1.8. Висновки до розділу

Отже, в цьому розділі було проведено аналіз теоретичної частини, а саме – літературний огляд. Великий різновид математичних моделей дозволяє у сучасній хімії використовувати різноманітні методи для аналізу, апроксимації, моделювання можливих складностей при реальному експерименту. Тобто, за допомогою сучасного математичного моделювання можна пришвидшити дослід та зекономити не лише час, а й скоротити затрати.

Математичні моделі станів, явищ та процесів завжди будуються на певних уявленнях та допущеннях і тому їх використання для реальних об'єктів потребує експериментальних підтверджень.

РОЗДІЛ 2 ОБ'ЄКТИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

2.1. Об'єкт дослідження

ГЛИНИ. Глинисті осадові породи на мінеральній основі (рис.2.1), дисперсні (дрібнодисперсні) і не містять цементу.



Рис.2.1. Глини в пластах осадових порід

До глин відносяться так звані гірські породи, в яких більше 50% маси становлять частинки розміром до 0,01 мм. За винятком кременевого клею, інші глини утворюють з водою пластичні маси, зберігають форму після висихання і (після випалу) досягають твердості каменю.

Глини утворюються в результаті фізико-хімічного руйнування гірських порід. Наприклад, глина бентоніт (рис.2.2) може утворюватися при перетворенні на місці основного матеріалу, при підводному розкладанні вулканічних порід, попелу [26]. Метаморфізм (вплив високих температур і ущільнення) в шарах земної кори призводить до того, що глинисті сполуки втрачають здатність утворювати пластичні маси з водою, з часом перетворюючись на сланці (та інші щільні аргіліти) [27].



Рис.2.2. Необроблений бентонітовий глинистий мінерал

Однією з властивостей глини є пластичність, усадка (повітряна, вогнева), пористість, вогнетривкість, спекаємость, гігроскопічність і набухання, сорбційна здатність, зв'язуюча здатність, набухання, мінливість, гідрофільність. Пластичність глини зростає зі збільшенням дисперсності та вмісту глинистих мінералів.

Тугоплавкість визначається температурою плавлення, край змінюється від 1350 °С (легкоплавкі глини) до 1700 °С і вище (високотугоплавкі), зростаючи зі збільшенням концентрації Al_2O_3 і зменшенням лужних і лужноземельних елементів.

Здатність до набухання визначається здатністю глинистих мінералів розпадатися на дрібні частинки при змочуванні водою або іншими рідинами. Це пояснюється проникненням рідини між гранями кристала. При цьому мінеральний шар може відокремити практично будь-яку кількість води. Сорбційна здатність виражається не тільки поглинанням води, а й поглинанням катіонів і аніонів.

Так бентонітові глини (монтморилонітового складу) поглинають катіони $(4-15) \cdot 10^{-2}$ г/моль і аніони $(2-3) \cdot 10^{-2}$ г/моль. Щоб збільшити пористість і набухання, до глини додають органічні речовини (наприклад, мазут).

Каолітові глини характеризуються високою пластичністю і низьким вмістом заліза (Fe). Каолітова глина широко використовується для виготовлення шамоту, порцеляни, фаянсу і кислотостійких матеріалів. Її називають бентонітовою глиною.

Цікаво, що використовуватиметься знежирення повсті, бурові розчини, виробництво залізорудних окатишів, нафтопродуктів, вина, переробка відпрацьованого трансформаторного масла, виробництво ливарного піску в металургії, а також виробництво керамзиту для зменшення фільтрації води.

В Україні найбільш економічно цінні глини знаходяться на Українському щиті (Вінницька, Дніпропетровська, Запорізька, Черкаська, Кіровоградська, Хмельницька області) і на північному заході Донбасу. Поклади бентонітових глин розробляються в Черкаській і Закарпатській областях.

Полімінеральні аргіліти поширені у відкладах по всій Україні. Вони використовуються на численних цегельних і цементних заводах [29].

2.1.1. Монтморилоніт

Монтморилоніт – це природна речовина, $(\text{Na,Ca})_{0.3}(\text{Al,Mg})_2[\text{Si}_4\text{O}_{10}](\text{OH})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ – зустрічається в природі як представник групи смектиків - переважаючий мінерал бентоніт (технічний термін для сорбітів з дуже вираженими коактивними властивостями) [28]. Тонко розподілені шари інших смектитів (бейделіту, сапоніту), паліфорскіту, сепіоліту та різноманітних змішаношарових мінералів із сорбційними властивостями тепер часто називають бентонітами (бентонітовими глинами).

Бентонітові глини, як правило, полімінеральні. Бентонітова глина є універсальною мінеральною сировиною, що характеризується багатьма корисними фізико-механічними та хімічними властивостями, такими як пластичність, здатність до набухання та висока сорбційна активність [37]. Бентоніт видобувають відкритим способом. Цей матеріал утворився давно, приблизно 25 мільйонів років тому, на доісторичному дні океану з вулканічного попелу та туфу. Бентонітова глина була вперше виявлена в 1898 році поблизу міста Бентон в США. Основним мінералом, що міститься в цьому матеріалі, є монтморилоніт.

Монтморилоніт буває різним за кольором: білий, сірувато-білий ввідтінки, блакитний, ніжно-рожевий, червоний, жовтий, зелено-жовтий, зелений чорний. Колір монтморилоніту визначає його хімічний склад. Наприклад, рожевий і червоний відтінки монтморилоніту зумовлені підвищеним вмістом марганцю. Чорний колір спричинений високим вмістом органічних домішок. Монтморилоніт — непрозорий глинистий мінерал з тьмяним (матовим) блиском. Мінерал має питому вагу 2-3 г/см³ [37-39].

Монтморилоніт, як правило, утворює щільні глинисті маси, а також зустрічається у вигляді агрегатів - високодисперсних, кристалічних, лускатих і вузликкових. Кристали монтморилоніту дуже малі (менше 1 мкм). Вони помітні лише під електронним мікроскопом. Кристали зазвичай мають вигляд тонких листів з неправильними контурами [39, 41].

Товщина частинок монтморилоніту залежить від кількості адсорбованих молекул води. Ізоморфні перестановки октаедричних і тетраедричних шарів мінералів в основному визначають негативні заряди, які несуть елементарні кластери. Негативні заряди нейтралізуються обмінними катіонами з одним або двома шарами води, розташованими в міжшарових просторах між елементарними кластерами. Ступінь упорядкованості кристалічної структури, кількість катіонів заміщення в шарах і характер міжшарових комплексів значною мірою визначають хімічні та структурно-механічні властивості монтморилоніту та специфіку його будови. Природа обмінних катіонів також відіграє роль у розвитку властивостей [40].

Насправді монтморилонітові (рис.2.3) бентоніти є найпоширенішими утвореннями земної осадової оболонки, які здавна використовувалися людиною як відбілюючі та очисні засоби, ліки від хвороб шлунка тощо.



Рис.2.3. Фото монтморилоніту

Монтморилонітова глина має кілька місцевих назв. Кефекеліт - від турецької назви мила, кіл - мильний камінь (Крим), хілма (мильна глина, Азербайджан), Тавсабаніміца (глина для миття голови, Грузія).

В надрах України ця глина присутня в родовищах - Приазов'я, Криворіжжя (сланцях і андезитах). Класифікують монтморилонітові глини наступним чином: монтморилонітові, бейделіт-монтморилонітові (переважно монтморилонітові) і монтморилоніто-бейделітові (переважно бейделітові).

Найвідомішим родовищем Черкас є полімінерал монтморилоніт палігорскіт. Продуктивний пласт в його межах складається з п'яти шарів пластолентикулярних тіл, з яких лише другий шар майже чистий монтморилоніт (98%). Мінералізація також досить висока в четвертому (50%) і п'ятому (40%) шарах.

Очищаючі та абсорбційні властивості монтморилоніту, як і інших смектитів, зумовлені специфічною структурою цих мінералів у формі тришарових пакетів, розділених шарами неструктурованих обмінних катіонів і молекул води.

Міцна структура. Позиція в сполучній структурі, яка слабо пов'язана з пучком Al (Mg) -Si-O.

Постулюється самостійне утворення монтморилоніту в глибоководних відкладеннях з цеолітами, хлоритом та ін. Монтморилоніт є істотним компонентом сучасних чорноморських грязей.

Україна має значні родовища бентоніту, в тому числі монтморилоніту, глини, яка нині використовується як ливарна та керамічна сировина для виробництва бурових розчинів, природного в нафтопереробній, металургійній та харчовій промисловості. каталізатор і адсорбент.

Сфери застосування монтморилоніту дуже широкі [41]. Застосовується практично у всіх галузях народного господарства. У харчовій промисловості його використовують для відбілювання вина і соків. У медицині монтморилонітова глина є одним із засобів, які можна використовувати для виведення з організму людини різного роду токсинів. Монтморилонітова глина містить практично всі мікро- і макроелементи, корисні для живих організмів, тому її часто додають у корм худобі. Також монтморилонітова глина використовується для очищення землі від різного роду хімічних забруднень. У шкіряній промисловості монтморилоніт можна використовувати для наповнення шкіряних напівфабрикатів.

2.2. Методи дослідження

При виконанні роботи застосовували фізико-хімічний метод аналізу суспензій : метод седиментації, з подальшим обробкою отриманих експериментальних даних у середовищі MS EXCEL за створеними програмами на мові програмування Visual Basic for Applications.

2.2.1. Метод седиментації

Розрахунок фракційного складу полідисперсних матеріалів базується на використанні методів, за якими розраховують радіус частинок. Ці методи отримали назву - гранулометрія [4,19].

Розрахунки розміру частинок і фракційного складу для полідисперсних систем базуються на дослідженому процесі седиментації частинок під дією сили тяжіння. Седиментація — це процес осадження частинок розміром $1 \cdot 10^{-6}$ до $1 \cdot 10^{-4}$ м. м під дією сили тяжіння.

Модель седиментації основана на поняттях гідродинамічного рівномірного руху сферичних частинок у дисперсійній фазі під дією сили тяжіння і сил опору середовища [19]. Гідродинамічний рівномірний рух сферичних частинок у середовищі описується законом Стокса. Закон Стокса передбачає такі наближення:

частинки сферичні, рухаються без контакту з іншими частинками та поверхня частинок добре змочується розчинником.

По закону Стокса, сила опору (F) руху сферичної частинки радіусом R у середовищі з в'язкістю η ЗАЛЕЖИТЬ ВІД швидкості руху частинки v :

$$F = 6\pi\eta Rv.$$

Так як частинка осідає під дією земного тяжіння, то сила, що викликає її рух, є сила тяжіння P [19]:

$$P = (\rho - \rho_0) \cdot V g ,$$

де ρ - густина речовини частинки, ρ_0 - густина розчинника, V - об'єм частинки, g - прискорення вільного падіння, $\rho_0 \cdot V \cdot g$ - втрата маси частки за законом Архімеда.

При рівномірному руху частинок сила F дорівнює силі P (тобто сила тяжіння дорівнює силі опору середовища), і для кулястих частинок [19]:

$$6\pi\eta r v = \frac{4}{3}\pi r^3 (\rho - \rho_0) g, \quad (2.1)$$

або

$$v = \frac{2}{9} \cdot \frac{g(\rho - \rho_0)}{\eta} r^2. \quad (2.2)$$

Отриманне рівняння седиментаційного аналізу, яке зв'язує розмір часток з їх швидкістю осідання:

$$r = \sqrt{\frac{9\eta u}{2(\rho - \rho_0)g}} \quad (2.3)$$

Отримані рівняння справедливі, якщо виконуються такі умови[19]:

- а) частинки мають форму кулі.
- б) частинки не заважають одна одній під час седиментації (тому седиментаційний аналіз проводять при низьких концентраціях дисперсної фази 0,5-2%);
- в) швидкість осідання постійна.
- г) поверхня частинок змочується дисперсійним середовищем (без міжфазного ковзання).

Метод застосовується для суспензій, емульсій, порошоків з розмірами частинок дисперсійної фази-часток $10^{-5} - 10^{-2}$ см. [19].

Всі сталі величини рівняння (2.3) можна об'єднати в одну константу K :

$$K = \sqrt{\frac{9\eta}{2(\rho - \rho_0)g}} \quad (2.4)$$

тоді розрахунок еквівалентного радіуса проводиться за рівнянням :

$$r = K\sqrt{u} \quad (2.5)$$

Швидкість осідання $u = H/\tau$, де H – висота осідання часток, м; τ – час осідання.

Обробка даних седиментаційного аналізу базується на використанні рівняння Сведберга-Одена [19]. :

$$m = Q_i + \frac{dm}{d\tau} \tau \quad (2.6)$$

Q_i — маса частинок, що повністю осіли в момент часу τ . Це рівняння має фізичний зміст: швидкість збільшення маси осаду $dm/d\tau$ залежить осіданням часток розміром, менших $r = r(\tau)$.

Оскільки до цього моменту нагромадження таких часток йшло з постійною швидкістю, добуток $\tau(dQ/d\tau)$ являє собою вагу часток розміром $r < r_\tau$ осілих до часу τ на шальку седиментометра, а залишок $Q_i = Q - \tau(dm/d\tau)$ — вага більших часток, що вже завершили осідання.

Рівняння, що описує масу речовини, що осідає, від часу від часу [19]:

$$m = Q_{\max} \frac{\tau}{\tau + \tau_0}, \quad (2.7)$$

де Q_{\max} - маса частинок усієї дисперсної фази, а значення τ_0 легко визначити, за умови $\tau = \tau_0$. Тоді $m_{\tau_0} = Q_{\max}/2$, або τ_0 визначає час, за який осідає половина маси частинок дисперсної фази.

Можна перетворити рівняння (2.7) до вигляду [19]:

$$\frac{\tau}{m} = \frac{\tau_0}{Q_{\max}} + \frac{1}{Q_{\max}} \tau, \quad (2.8)$$

Це рівняння дозволяє розраховувати значення Q_{\max} та τ_0 . Це параметри прямої лінії у координатах $\tau/Q - \tau$, перший дорівнює $1/Q_{\max}$, а другий дорівнює τ_0/Q_{\max} .

Маючи ці вихідні дані побудуємо інтегральну криву розподілу ($Q_i = f(r)$) та диференціальну криву ($f(r) = \frac{-dQ(r)}{dr \cdot Q_{\max}}$) використовуючи отриманні рівняння.

На основі рівняння (2.6)[19]:

$$Q_i = m - \tau(dm/d\tau) \quad (2.9)$$

З цих рівнянь отримаємо:

$$Q_i = Q(r) = Q_{\max} \left(\frac{r_0^2}{r_0^2 + r^2} \right)^2 \quad (2.10)$$

де $r_0 = K \sqrt{\frac{H}{\tau_0}}$.

Ця рівняння є рівнянням інтегральної кривої розподілу частинок за розмірами. Отримаємо рівняння диференціальної кривої: Возьмемо похідну $f(r) = \frac{-dQ(r)}{dr \cdot Q_{\max}}$ і отримаємо[19]:

$$f(r) = \frac{-dQ(r)}{dr \cdot Q_{\max}} = \frac{4rr_0^4}{(r_0^2 + r^2)^3} \quad (2.11)$$

Оброблення експериментальних даних седиментаційного аналізу бажано виконувати у додатку MS EXCEL. Розрахунки базуються на використанні рівнянь:

$$Q_1 = Q(r) = Q_{\max} \left(\frac{r_0^2}{r_0^2 + r^2} \right)^2 \text{ і } \frac{-dQ(r)}{dr \cdot Q_{\max}} = \frac{4rr_0^4}{(r_0^2 + r^2)^3} \cdot \quad (2.12)$$

2.2.2. Метод кусочно-лінійної апроксимації

Цей метод базується на використанні пропозицій З.М.Яремко та М. Н. Солтиса опис кривих седиментації за допомогою кусково-лінійної апроксимації. Запропоновано чисельні методи обробки даних седиментаційного аналізу, за допомогою яких можна визначити фракційний склад полідисперсних суспензій незалежно від закону розподілу частинок у полідисперсних системах за радіусом.

Для монодисперсної системи маса осаду (Q_1) з часом буде змінюватись від масі частинок, що містяться у шарі суспензії одиничної товщини та швидкості осідання частинок, тобто[19]:

$$Q_1 = m_1 = \frac{m_{1,\text{зар}}}{H} ut, \text{ або} \quad (2.13)$$

$$Q_1 = m_1 = \frac{m_{1,\text{зар}}}{t_1} t,$$

де t_1 – час повного осідання частинок певного радіуса з висоти H ; $m_{1,\text{зар}}$ – загальна маса частинок. Це рівняння має обмеження воно виконується до часу $t \leq t_1$.

Так як у монодисперсної системи всі частинки однакові, то вони осідають з однаковою швидкістю, а тому залежність маси осаду m від часу t – лінійна (рис. 2.4).

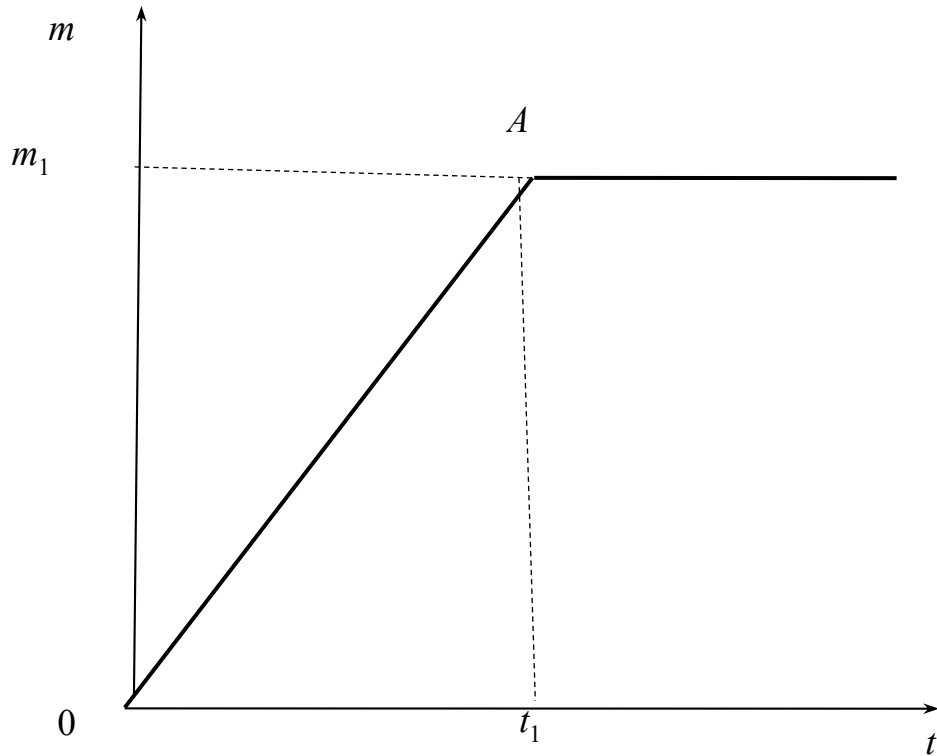


Рис. 2.4. Седиментаційна крива монодисперсної суспензії

Розмір частинок безпосередньо за рівнянням може бути визначений лише для монодисперсної системи.

Точка А відповідає завершенню осідання частинок. Спочатку шальки торсійних терезів досягають частинки, що осідають з малої висоти (з нижнього шару суспензії). Тому точка А на рис. 2.1 відповідає часу, протягом якого частинки пройдуть шлях з висоти H , за цей час осядуть всі частинки і осад нагромаджуватися не буде.

Обчисливши тангенс кута нахилу прямої до осі часу $\left(\frac{m_1}{t_1}\right)$ та за відомими значеннями t_1 і H розраховуємо $U_{\text{осід}}$. За співвідношенням [10], стосовно радіуса

сферичних частинок, що осідають $\left(r = \sqrt{\frac{9\eta U_{\text{осід}}}{2(\rho - \rho_0)g}}\right)$ визначасмо радіус частинок.

Де ρ – густина частинок дисперсійної фази, кг/м^3 ; ρ_0 – густина дисперсійного середовища, кг/м^3 ; g – прискорення вільного падіння; V – об’єм частинки, м^3 , r –

еквівалентний радіус частинок; η – в'язкість середовища; $U_{\text{осід}}$ – швидкість осідання частинки. Зрозуміло, що рівняння справедливе до часу $t \leq t_1$ так як при $t \geq t_1$ частинки повністю осіли і маса осаду залишиться сталою [29].

2.3. Висновки до розділу

Отже, у роботу до опрацювання було взято глини. Глини утворюються в результаті фізико-хімічного руйнування гірських порід. Наприклад, глина (бентоніт) може утворюватися при перетворенні на місці основного матеріалу, при підводному розкладанні вулканічних порід, попелу. Очисні та поглинальні властивості монтморилоніту, як і інших смектитів, зумовлені специфічною структурою цих мінералів у формі тришарових пакетів, розділених шарами неструктурованих обмінних катіонів і молекул води. міцна структура. Позиція в структурі зв'язку, слабо зв'язана з пучком Al(Mg)-Si-O.

Глини можуть бути присутніми в стоках хімічних заводів, таких як виробництво гальванічних металів, тому важливо оцінити їх здатність до диспергування після різних етапів очищення СВ. Корисним є математичне моделювання на основі лабораторних експериментів з відібраними пробами води після очищення. Моделювання дозволяє оцінити якість очищення, розрахувати час осідання частинок і виконати наближення.

РОЗДІЛ 3
МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ СЕДИМЕНТАЦІЇ
ГРУБОДИСПЕРСНИХ СУСПЕНЗІЙ. ОТРИМАННЯ
ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ З СЕДИМЕНТАЦІЇ СУСПЕНЗІЙ ГЛИНИ

3. 1. Виведення рівняння для опису кривої седиментації

Для опису залежності маси речовини, яка осіла в процесі седиментації, від часу нами отримано і пропонується рівняння яке можна використовувати для аналізу будь-яких полідисперсних систем.

Виходячи з припущення незалежності руху кожної частинки від інших можна записати, що для n-дисперсної системи маса осаду з часом буде описуватися рівнянням [19]::

$$Q(t) = m = \sum_{i=1}^n m_i,$$

де $m_i = \frac{m_{i,заг}}{t_i} t$ тільки за умови $t \leq t_i$, а при $t > t_i$, $m_i = m_{i,заг}$.

Вказані умови будуть виконані, якщо рівняння $m_i = \frac{m_{i,заг}}{t_i} t$ записати наступним чином [19]::

$$m = \frac{m_i}{t_i} t \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{t_i - t}{2|t_i - t|} \right) \right] + m_i \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{t_i - t}{2|t_i - t|} \right) \right], \quad (3.1)$$

де $|t_i - t|$ модуль числа $t_i - t$, або у вигляді:

$$m_i = \frac{m_{i,заг}}{t_i} t \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{t_i - t}{2\sqrt{(t_i - t)^2}} \right) \right] + m_{i,заг} \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{t_i - t}{2\sqrt{(t_i - t)^2}} \right) \right] \quad (3.2)$$

Тоді при $t \leq t_i$, $m_i = \frac{m_{i,заг}}{t_i} t$, а при $t > t_i$, $m_i = m_{i,заг}$.

Для усунення невизначеності значень m_i при $t = t_i$, рівняння (3.1) потрібно використувати у вигляді:

$$m_i = \frac{m_{i,заг}}{2t_i} t \left[\left(1 + \frac{\delta + t_i - t}{\delta + 2\sqrt{(t_i - t)^2}} \right) \right] + \frac{m_{i,заг}}{2} \left[\left(1 - \frac{\delta + t_i - t}{\delta + 2\sqrt{(t_i - t)^2}} \right) \right] \quad (3.3)$$

де δ – дуже маленька величина часу, наприклад, 10^{-15} с.

Маса дисперсної фази суспензії дорівнює:

$$m = m_1 + m_2 + m_3 + \dots + m_n,$$

де – m_i маса кожної фракції.

Так, виходячи з припущення незалежності руху кожної частинки від інших можна записати, що для n -дисперсної системи (яка містить n частинок з радіусами від r_{\min} до r_{\max}) маса осаду з часом буде описуватися рівняннями:

В інтервалі часу від $0 \leq t \leq t_1$

$$m = \sum_{i=1}^n m_i = \frac{m_1}{t_1} t + \frac{m_2}{t_2} t + \frac{m_3}{t_3} t + \dots + \frac{m_n}{t_n} t. \quad (3.4)$$

В інтервалі часу від $t_1 \leq t \leq t_2$

$$m = m_1 + \frac{m_2}{t_2} t + \frac{m_3}{t_3} t + \dots + \frac{m_n}{t_n} t.$$

В інтервалі часу від $t_2 \leq t \leq t_3$

$$m = m_1 + m_2 + \frac{m_3}{t_3} t + \dots + \frac{m_n}{t_n} t,$$

причому $m = \frac{m_i}{t_i} t$ тільки за умов $t \leq t_i$, а при $t > t_i$, $m = m_i$. Таким чином,

седиментаційну криву n – дисперсної суспензії можна описати як ламану залежність, що складається з n лінійних ділянок. Це підтверджує висновки роботи [29] щодо використання кусочно-лінійної апроксимації для опису кривої седиментації.

Таким чином залежність буде представляти ламану криву, що складається з відрізків прямих. Залежність $m=f(t)$, що складається з відрізків прямих, можна записати наступним чином:

$$m(t) = t \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2t_i} \left[1 + \frac{t_i - t}{|t_i - t|} \right] + \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2} \left[1 - \frac{t_i - t}{|t_i - t|} \right]. \quad (3.5)$$

Крім цього нами для усунення невизначеності значень m при $t = t_i$, для зручності при проведенні розрахунків, рівняння (3.5) потрібно використовувати у вигляді:

$$m(t) = t \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2t_i} \left[1 + \frac{\delta + t_i - t}{\delta + |t_i - t|} \right] + \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2} \left[1 - \frac{\delta + t_i - t}{\delta + |t_i - t|} \right], \quad (3.6)$$

де δ – деяка досить незначна величина, наприклад, 10^{-15} с.

Рівняння має описувати будь-яку криву седиментації, незалежну від закону розподілу частинок полідисперсних систем за радіусом.

Таким чином реальну полідисперсну суспензію можна наближено розглядати як полідисперсну і, зрозуміло, чим більше буде полідисперсність, тим точніше наведене рівняння буде описувати криву седиментації.

Рівняння (3.6) містить n невідомих значень мас фракцій ($m_1, m_2, m_3, \dots, m_n$) які

повністю осідають за відповідний час ($t_1, t_2, t_3, \dots t_n$).

Кількість фракцій (n) для використання при вирішенні прикладних задач практично не більше 10, а сучасні чисельні методи дозволяють визначати невідомі коефіцієнти рівняння (3.6) (невідомі – значення мас фракцій суспензії) за наявності експериментальних даних

Розрахунок фракційного складу (величин m_i) базується на визначенні таких величин m_i , для яких теоретична седиментаційна крива і експериментальна найкращим чином співпадають. Звичайно для рішення таких задач використовують метод найменших квадратів:

$$F(t, m_1, m_2, m_3, \dots, m_n) = \sum_{j=1}^k (m(t_j) - m_{\text{екс}}(t_j))^2 = \min, \quad (3.7)$$

де k – кількість експериментальних вимірювань мас частинок суспензії що осіли ($k \geq n$), $m(t_j)$ – розрахункове значення маси осаду за рівнянням (3.2), $m_{\text{екс}}(t_j)$ – експериментальне значення маси осаду, $F(t, m_1, m_2, m_3, \dots, m_n)$ – функція мети. Для знаходження мінімуму функції мети ($\sum_{j=1}^k (m(t_j) - m_{\text{екс}}(t_j))^2 = \min$) існують різні методи.

3.2. Складання програми мовою VBA

Пропонується для визначення фракційного складу суспензій чисельний метод обробки даних з використанням методів обчислювальної математики та використання можливостей програми MS EXCEL, яка входить до складу офісного пакета Microsoft Office (США). Використання чисельних методів обробки даних дозволяє визначати фракційний склад полідисперсної суспензії незалежно від закону розподілу частинок полідисперсної системи за радіусами [4, 6].

Досить зручним для практичних розрахунків величин $m_1, m_2, m_3, \dots m_n$ – коефіцієнтів у рівнянні є методи, що вбудовані в MS EXCEL у надбудові Пошук рішення. Надбудова Пошук рішення у останніх версіях MS EXCEL дозволяє обирати

метод розв'язання задачі в залежності від її типу. Це наступні методи: метод загального знижувального градієнта, який використовується для розв'язання гладких нелінійних задач; симплекс-метод для розв'язання лінійних задач; еволюційний метод для розв'язання негладких задач.

Фактично надбудова Пошук рішення знаходить мінімум функції мети

$$F(t, m_1, m_2, m_3, \dots, m_n) = \sum_{j=1}^k (m(t_j) - m_{\text{exc}}(t_j))^2 = \min \text{ варіюючи значення } m_1, m_2, m_3, \dots, m_n.$$

Для використання надбудови Пошук рішення потрібно створити програму мовою Microsoft Visual Basic for Applications (VBA) для розрахунку функції мети.

Для використання можливостей MS EXCEL була розроблена програма мовою VBA для розрахунків функції мети $F(t, m_1, m_2, m_3, \dots, m_n)$.

Створена програма наведена нижче:

Function SEDIMENTATION

(N, NT, A1, A2, A3, A4, A5, A6, A7, A8, A9, A10, A11, A12, A13, A14, A15, A16, A17, A18, A19, A20, A21, A22, A23, A24, A25)

Dim x As Double, i As Integer

Dim j As Integer

Dim v As Double, s As Double, z As Double, y As Double

Dim m As Double, mm As Double, mmm As Double, f As Double

x = 0

v = 0

s = 0

For j = 1 To NT

y = Cells(j, 2).Value

s = 0

For i = 1 To N

x = Cells(i, 1).Value

'x-ЦЕ ti

mm = Cells(i, 3).Value

```

a = 0.0000000000000001
s1 = (((x - y) ^ 2) ^ 0.5) + a
s2 = (x - y + a)
m = ((mm / x) * y / 2) * (1# + s2 / s1) + (mm / 2#) * (1# - s2 / s1)
s = s + m
  Next i
  mmm = Cells(j, 4).Value
  f = (s - mmm) ^ 2
  v = v + f
Next j
SEDIMENTATION = v
End Function

```

Для визначення фракційного складу потрібно розрахувати масову частку кожної

фракції ($W_i = \frac{m_i}{m}$)

Зрозуміло, що сума масових часток кожної фракції:

$$1 = W_1 + W_2 + W_3 + \dots + W_n,$$

де W_1 – масова частка частинок фракції, що осідає за проміжок часу від 0 до t_{\min} тобто фракція з радіусами частинок від r_{\max} до r_1 , W_2 з радіусами частинок від r_1 до r_2 і т.д., причому $r_{\max} > r_1 > r_2 > r_3 > \dots > r_n$

Якщо суспензія містить частинки лише двох різних радіусів (бідисперсна суспензія, рис. 3.1), то осідання в такій системі можна уявити як одночасне осідання частинок двох монодисперсних систем (криві ОВЕ та OCD на рис.3.1).

Рівняння яке буде описувати таку залежність що складається з 3-х лінійних ділянок (рис. 3.1) можна представити у вигляді:

$$m = \frac{m_1}{t_1} t \left[\frac{1}{2} + \frac{t_1 - t}{2|t_1 - t|} \right] + m_1 \left[\frac{1}{2} - \frac{t_1 - t}{2|t_1 - t|} \right] + \frac{m_2}{t_2} t \left[\frac{1}{2} + \frac{t_2 - t}{2|t_2 - t|} \right] + m_2 \left[\frac{1}{2} - \frac{t_2 - t}{2|t_2 - t|} \right]. \quad (3.8)$$

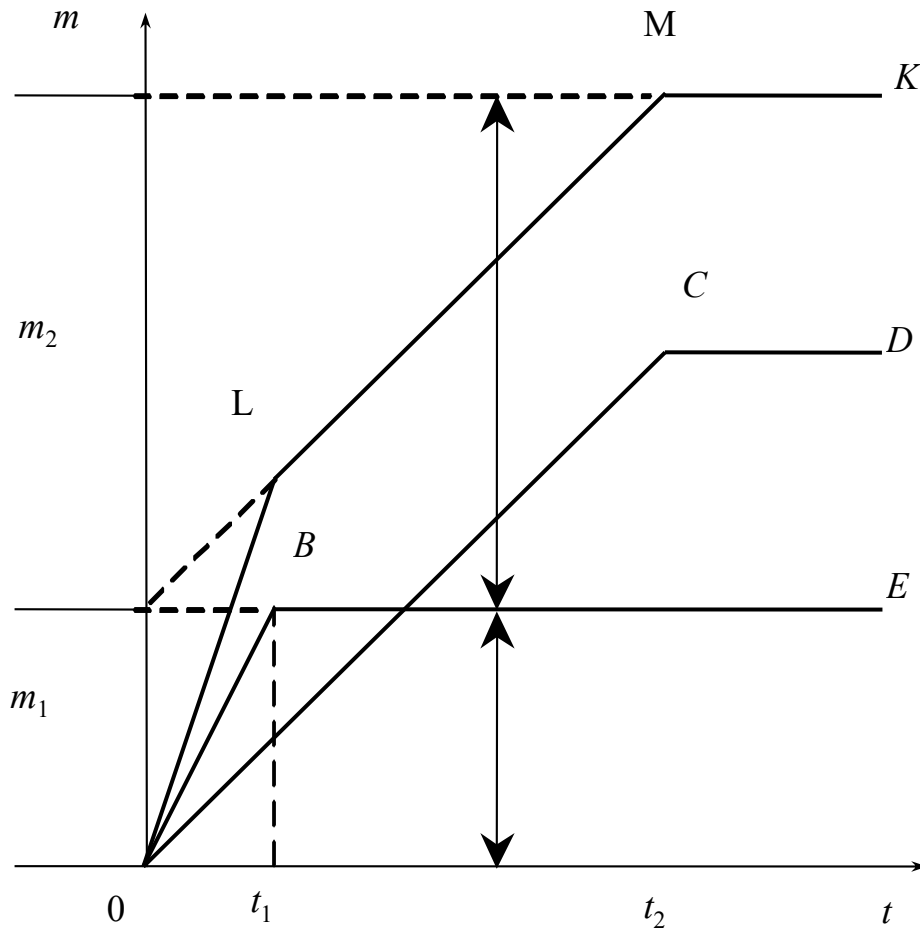


Рис. 3.1. Седиментаційні криві: OBE – монодисперсної суспензії з великими частинками; OCD – монодисперсної суспензії з меншими частинками; $OLMK$ – бідисперсної суспензії

Для полідисперсної системи графік седиментації зображується кривою лінією, яка являє собою ламану з нескінченно великою кількістю точок зламу (рис. 3.2). Графічну залежність маси частинок, що осіли, від часу осадження, називають кривою седиментації. Вона і є початковою інформацією, необхідною для розрахунку розмірів частинок і їх розподілу за розмірами.

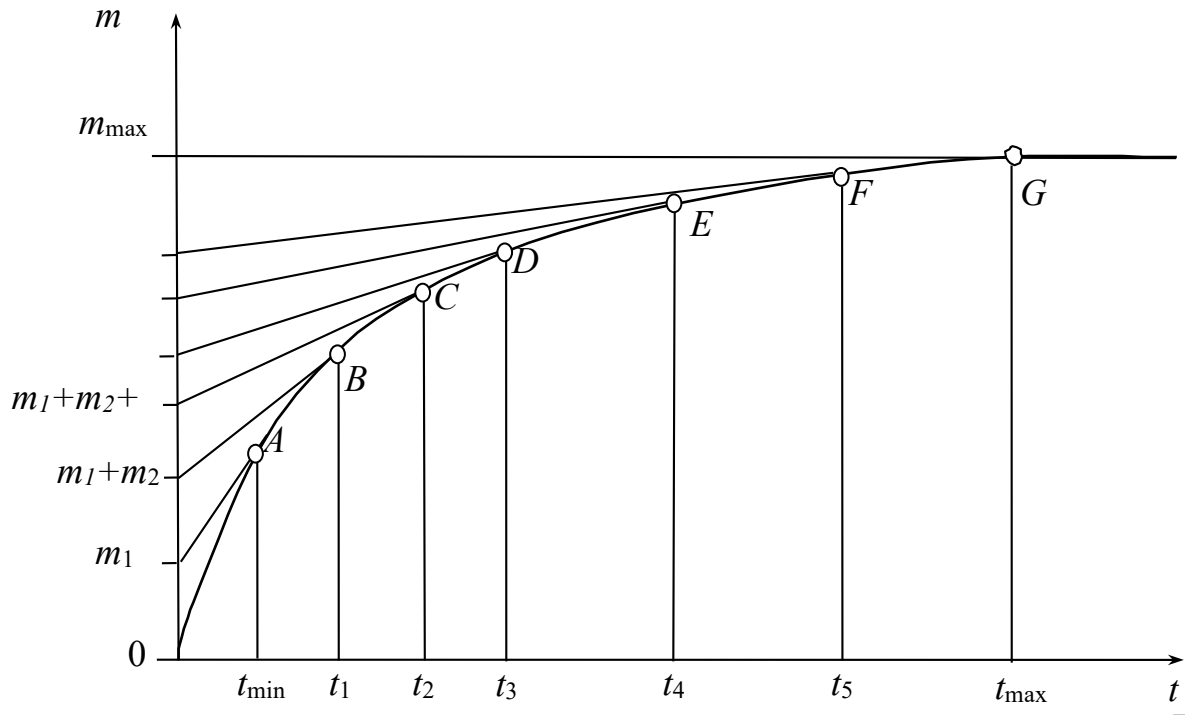


Рис.3.2. Крива седиментації

Тоді для n -дисперсної системи маса осаду з часом буде описуватися рівнянням:

$$Q(t) = \sum_{i=1}^n m_i = \sum_{i=1}^n \frac{m_{i,заг}}{2t_i} t \left[\left(1 + \frac{\delta + t_i - t}{\delta + 2\sqrt{(t_i - t)^2}} \right) \right] + \frac{m_{i,заг}}{2} \left[\left(1 - \frac{\delta + t_i - t}{\delta + 2\sqrt{(t_i - t)^2}} \right) \right] \quad (3.9)$$

Рівняння 3.9 повинно описувати будь яку седиментаційну криву, незалежно від закону розподілу частинок полі дисперсної системи за радіусами.

Для практичного використання рівняння 1.2 потрібно полідисперсну суспензію розглядати як n -дисперсну, при чому кількість експериментальних вимірювань залежності маси осаду від часу повинна бути більшою або дорівнювати величині кількості фракцій. Опис експериментальних даних рівнянням 3.9 дає можливість визначення фракційного складу полідисперсної суспензії. Розрахунок фракційного складу (величин $m_{i,заг}$) базується на визначенні таких значень $m_{i,заг}$, для

яких теоретична седиментаційна крива і експериментальна найкращим чином співпадали. Звичайно для рішення таких задач використовують метод найменших квадратів.

Досить зручним для практичних розрахунків є метод Ньютона, який вбудований в MS EXCEL у програмі ПОИСК РЕШЕНИЯ.

Запропоновану обробку даних седиментаційного аналізу можна використовувати при існуванні складних законів розподілу частинок полідисперсної системи за радіусами, які для природних суспензій можуть бути будь які.

При проведенні розрахунків за аналітичним рівнянням Цурюпи потрібна попередня аргументація відносно того, що розподіл частинок полідисперсної системи за радіусами близький до логарифмічно нормального закону розподілу [9]. Якщо такої аргументації немає то використання рівнянь приведе до неправильних висновків відносно фракційного складу полідисперсної суспензії. Запропонований нами підхід обробки даних седиментаційного аналізу не залежить від закону розподілу частинок полідисперсної системи за радіусами, який для природних суспензій може бути будь який, наприклад, з двома максимумами на диференційній кривій розподілу (двохмодальна функція) [6].

3.3. Перевірка математичної моделі опису процесу седиментації на трьохдисперсній суспензії

Відповідно до теоретичних уявлень крива седиментації трьохдисперсній суспензії повинна містити чотири лінійні ділянки та три точки зламу, які відповідають часу повного осадження першої, другої та третьої фракції.

Рівняння для трьохдисперсної суспензії буде мати вигляд:

$$m = \frac{m_1}{t_1} t \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{t_1 - t}{2|t_1 - t|} \right) \right] + m_1 \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{t_1 - t}{2|t_1 - t|} \right) \right] + \frac{m_2}{t_2} t \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{t_2 - t}{2|t_2 - t|} \right) \right] + m_2 \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{t_2 - t}{2|t_2 - t|} \right) \right] + \frac{m_3}{t_3} t \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{t_3 - t}{2|t_3 - t|} \right) \right] + m_3 \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{t_3 - t}{2|t_3 - t|} \right) \right]. \quad (3.10)$$

Де m_1, m_2, m_3 та t_1, t_2, t_3 відповідні маси фракцій та час повного осідання фракцій.

Перевірку математичної моделі опису процесу седиментації на трьохдисперсній суспензії за вказаним рівнянням можна провести розрахунки для побудови модельної кривої седиментації, для якої потрібно задати значення m_1, m_2, m_3 та t_1, t_2, t_3

Досить зручно такі розрахунки проводити у середовищі MS EXCEL , якщо створити програму мовою Microsoft Visual Basic for Applications (VBA).Така програма має вигляд:

```
Sub SedILLUSTRATION()
```

```
    Dim x As Double, i As Integer
```

```
    Dim j As Integer
```

```
    Dim v As Double, S As Double, z As Double, y As Double
```

```
    Dim m As Double, mm As Double, mmm As Double, f As Double
```

```
    N = Cells(1, 5).Value
```

```
    NT = Cells(2, 5).Value
```

```
    'N-це кількість фракцій
```

```
    'NT- це кількість експериментальних значень часу
```

```
    For j = 1 To NT
```

```
        y = Cells(j, 2).Value
```

```
        'y-це t
```

```
        S = 0
```

```
        For i = 1 To N
```

```
            x = Cells(i, 1).Value
```

```
            'x-це ti
```

```
            mm = Cells(i, 3).Value
```

```
            'mm-це mi
```

```
            a = 0.000000001
```

```
            s1 = (((x - y) ^ 2) ^ 0.5) + a
```

```
            s2 = (x - y + a)
```

```
            m = ((mm / x) * y / 2) * (1# + s2 / s1) + (mm / 2#) * (1# - s2 / s1)
```

```
            S = S + m
```

```
        Next i
```

```
        Cells(j, 6).Value = S
```


Next j

End Sub

Результати такого розрахунку представлено на рис.3.3.

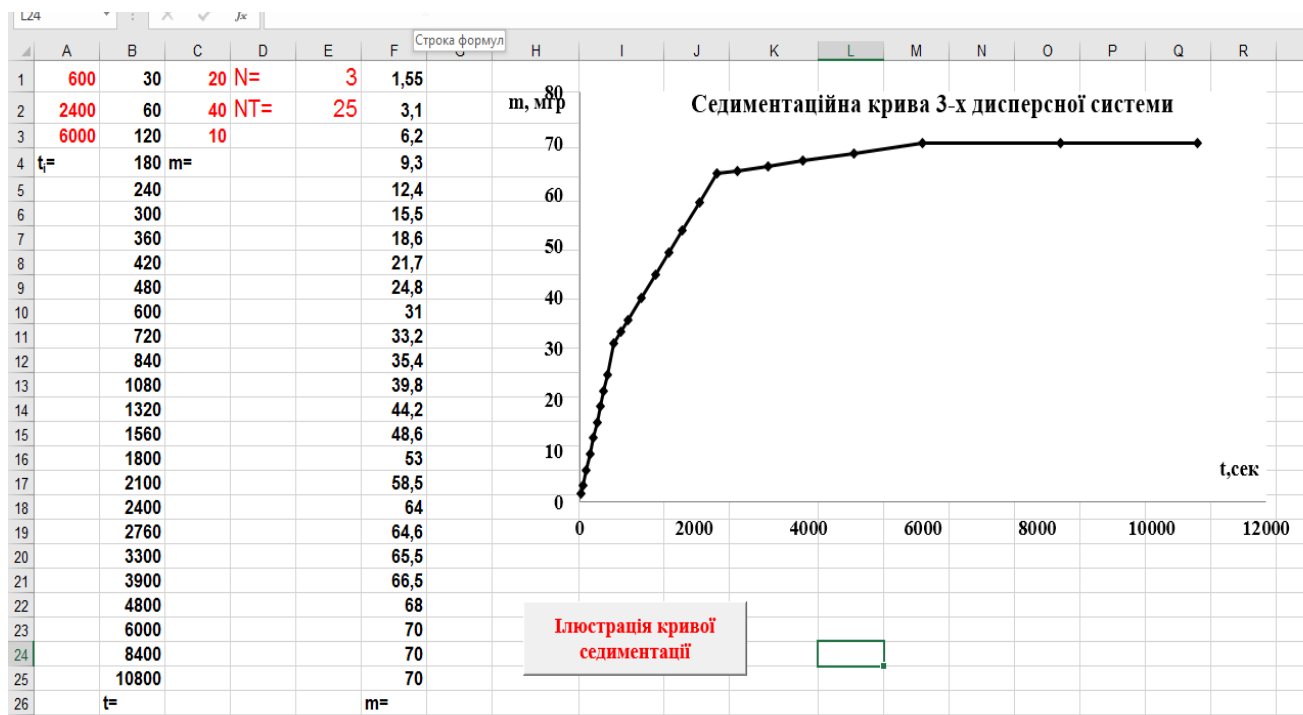


Рис.3.3. Седиментаційна крива трьохдисперсної системи, що отримана за рівнянням

Як видно з графіка седиментаційна крива трьохдисперсної системи, що отримана за рівнянням повністю відповідає уявленню про вигляд седиментаційної кривої трьохдисперсної системи.

Перевірку математичної моделі опису процесу седиментації на полідисперсної суспензії за вказаним рівнянням можна провести для модельної кривої седиментації, для якої потрібно задати значення $m_1, m_2, m_3 \dots m_i$ та $t_1, t_2, t_3 \dots t_i$

Результати такого розрахунку для 25-дисперсної суспензії представлено на рис.3.4.

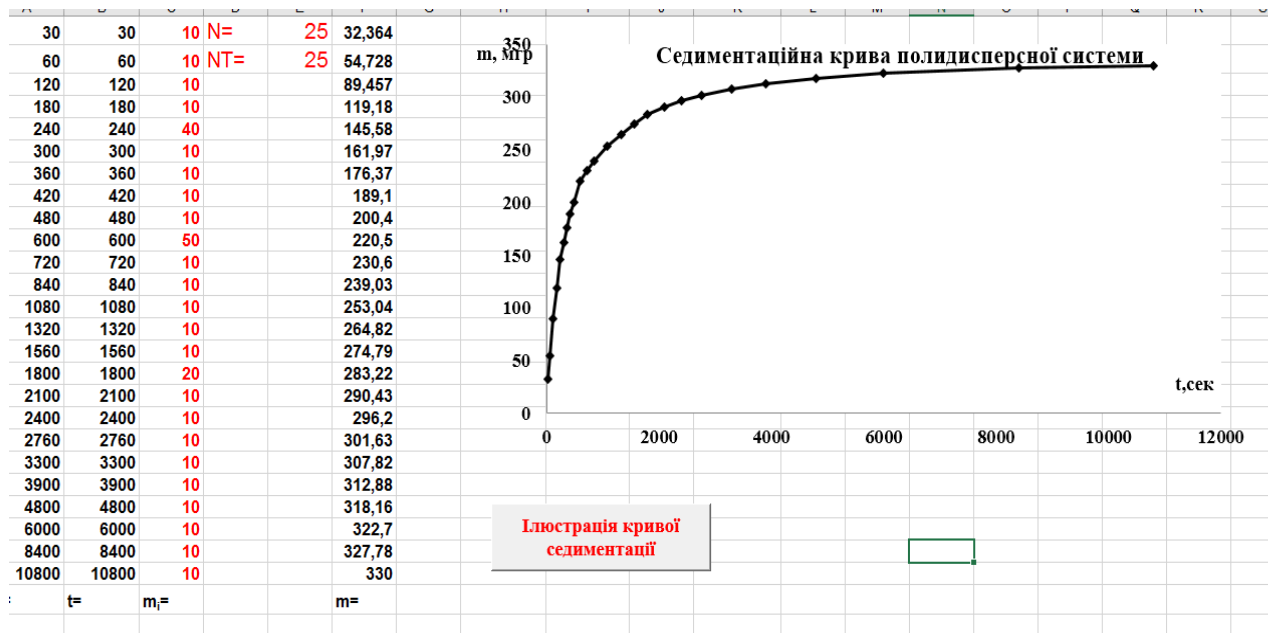


Рис. 3.4. Седиментаційна крива полідисперсної системи, що отримана за рівнянням (3.6)

Як видно з графіка седиментаційна крива полідисперсної системи, що отримана за рівнянням (3.10) повністю відповідає уявленню про вигляд седиментаційної кривої полідисперсної системи.

Таким чином отримана математична модель адекватно описує криві седиментації суспензій. Тобто за отриманим рівнянням можна провести розрахунки для побудови модельної кривої седиментації, для якої потрібно задати значення $m_1, m_2, m_3 \dots m_i$ та $t_1, t_2, t_3 \dots t_i$. Для визначення фракційного складу реальних суспензій потрібно вирішувати зворотню задачу- задати значення $t_1, t_2, t_3 \dots t_i$ та розрахувати відповідні маси фракцій $m_1, m_2, m_3 \dots m_i$. Для знаходження мас фракцій $m_1, m_2, m_3 \dots m_i$ потрібно за експериментальними даними седиментаційного аналізу розрахувати коефіцієнти рівняння (значення мас фракцій $m_1, m_2, m_3 \dots m_i$).

Для практичного використання рівняння потрібно полідисперсну суспензію розглядати як n -дисперсну, при чому кількість експериментальних вимірювань залежності маси осаду від часу повинна бути більшою або дорівнювати величині кількості фракцій. Опис експериментальних даних рівнянням дає можливість

визначати фракційний склад полідисперсної суспензії.

Розрахунок фракційного складу (величин m_i) базується на визначенні таких величин m_i , для яких теоретична седиментаційна крива і експериментальна найкращим чином співпадають. Звичайно для рішення таких задач використовують метод найменших квадратів:

$$F(t, m_1, m_2, m_3, \dots, m_n) = \sum_{j=1}^k (m(t_j) - m_{\text{екс}}(t_j))^2 = \min, \quad (3.11)$$

де k – кількість експериментальних вимірювань мас частинок суспензії що осіли ($k \geq n$), $m(t_j)$ – розрахункове значення маси осаду за рівнянням (3.11), $m_{\text{екс}}(t_j)$ – експериментальне значення маси осаду, $F(t, m_1, m_2, m_3, \dots, m_n)$ – функція цілі. Для

знаходження мінімуму функції цілі ($\sum_{j=1}^k (m(t_j) - m_{\text{екс}}(t_j))^2 = \min$) існують різні методи

[4]. Нами були використані можливості програми MS EXCEL, яка входить до складу офісного пакета Microsoft Office шляхом використання чисельного методу знаходження мінімуму функції, що вбудований в MS EXCEL у вигляді надбудови Пошук рішення

Такий чисельний метод обробки даних дозволяє підібрати найкращі коефіцієнти рівняння що описує експериментальні дані, а у нашому випадку визначати фракційний склад полідисперсної суспензії незалежно від закону розподілу частинок полідисперсної системи за радіусами. Використання надбудови Пошук рішення

потребує проведення розрахунків значень $\sum_{j=1}^k (m(t_j) - m_{\text{екс}}(t_j))^2$ і відповідно потрібно

скласти програму, яка буде виконувати такі розрахунки.

3.4. Складання програми мовою VBA

Пошук рішення у останніх версіях MS EXCEL дозволяє обирати метод розв'язання задачі в залежності від її типу [4, 17]. Це наступні методи: метод

загального знижувального градієнта, який використовується для розв'язання гладких нелінійних задач; симплекс-метод для розв'язання лінійних задач; еволюційний метод для розв'язання негладких задач.

Фактично надбудова Пошук рішення знаходить мінімум функції мети

$$F(t, m_1, m_2, m_3, \dots, m_n) = \sum_{j=1}^k (m(t_j) - m_{\text{екс}}(t_j))^2 = \min \text{ варіюючи значення } m_1, m_2,$$

m_3, \dots, m_n . Для використання надбудови Пошук рішення потрібно створити програму мовою Microsoft Visual Basic for Applications (VBA) для розрахунку функції мети.

Для використання можливостей MS EXCEL була розроблена програма мовою VBA для розрахунків функції цілі $F(t, m_1, m_2, m_3, \dots, m_n)$.

Створена програма наведена нижче:

Function SEDIMENTATION(N, NT, A1, A2, A3, A4, A5, A6, A7, A8, A9, A10, A11, A12, A13, A14, A15, A16, A17, A18, A19, A20, A21, A22, A23, A24, A25)

Dim x As Double, i As Integer

Dim j As Integer

Dim v As Double, s As Double, z As Double, y As Double

Dim m As Double, mm As Double, mmm As Double, f As Double

x = 0

v = 0

s = 0

For j = 1 To NT

y = Cells(j, 2).Value

s = 0

For i = 1 To N

x = Cells(i, 1).Value

'x-ЦЕ ti

mm = Cells(i, 3).Value

a = 0.000000000000001

s1 = (((x - y) ^ 2) ^ 0.5) + a

$$s2 = (x - y + a)$$

$$m = ((mm / x) * y / 2) * (1\# + s2 / s1) + (mm / 2\#) * (1\# - s2 / s1)$$

$$s = s + m$$

Next i

mmm = Cells(j, 4).Value

$$f = (s - mmm) ^ 2$$

$$v = v + f$$

Next j

SEDIMENTATION = v

End Function

3.5. Визначення фракційного складу суспензії монтморелонітової глини

Для визначення фракційного складу суспензії монтморелонітової глини було проведено седиментаційний аналіз суспензії монтморелонітової глини Черкаського родовища за відомою методикою. Установку для проведення експерименту наведено на рис.3.4.



Рис. 3.5. Установка для проведення седиментаційного аналізу

Розроблена програма була використана для обробки даних по седиментації суспензії глини у воді. Седиментаційні дані оброблено за пропонуваним рівнянням ().

При проведенні дослідів використовувались 2 % суспензії бентоніту (кар'єрний зразок, Черкаське родовище);

Для зразку виконувались 5 повторних дослідів по осадженню суспензій. Похибка вимірювань не перевищувала 3 %. У табл. наведені усереднені експериментальні дані.

Експериментальні дані по збільшенню маси осівших частинок суспензії від часу осідання t

t , с	m , МГ	t , с	m , МГ	t , с	m , МГ	t , с	m , МГ	t , с	m , МГ
30	63	300	261	720	327	1500	361	3300	382
60	109	360	277	840	336	1800	367	4800	387
120	171	420	290	960	343	2100	372	5200	388
180	212	480	300	1080	348	2400	375	5600	389
240	240	600	316	1200	353	2700	378	7000	390

Отримана седиментаційна крива має класичний вигляд (рис. 3.6).

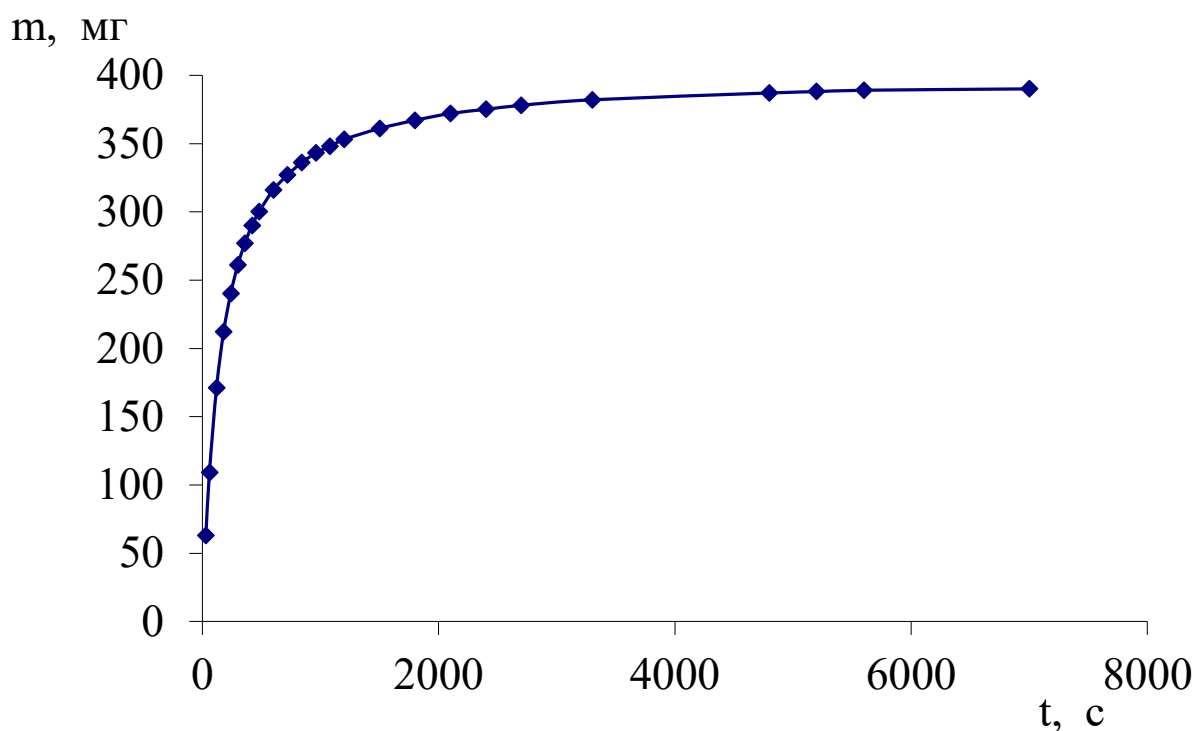


Рис. 3.6. Залежність маси частинок (m) суспензій від часу осідання (t)

Обробка даних по седиментації суспензії глини у воді була проведена за пропонуваним рівнянням (3.7) та створеною програмою. Результати розрахунку фракційного складу суспензії та інтегральні криві розподілу мас частинок суспензії

за радіусами наведено на рис. 3.6., 3.7.

30	30	17,00	63	
60	60	30,00	109	
120	120	42,00	171	
180	180	39,00	212	
240	240	28,01	240	
300	300	24,98	261	
360	360	18,03	277	
420	420	20,96	290	
480	480	16,03	300	
600	600	24,97	316	
720	720	12,02	327	
840	840	13,99	336	
960	960	16,00	343	
1080	1080	0,00	348	
1200	1200	18,00	353	
1500	1500	10,00	361	
1800	1800	6,07	367	
2100	2100	13,72	372	
2400	2400	0,47	375	
2700	2700	8,64	378	
3300	3300	11,43	382	функція мети
4800	4800	0,00	387	0,546633429
5200	5200	0,00	388	
5600	5600	18,15	389	
7000	7000	0,01	390	
t=	t _i =	m _i =	m=	

Рис.3.7. Результати розрахунку фракційного складу суспензії

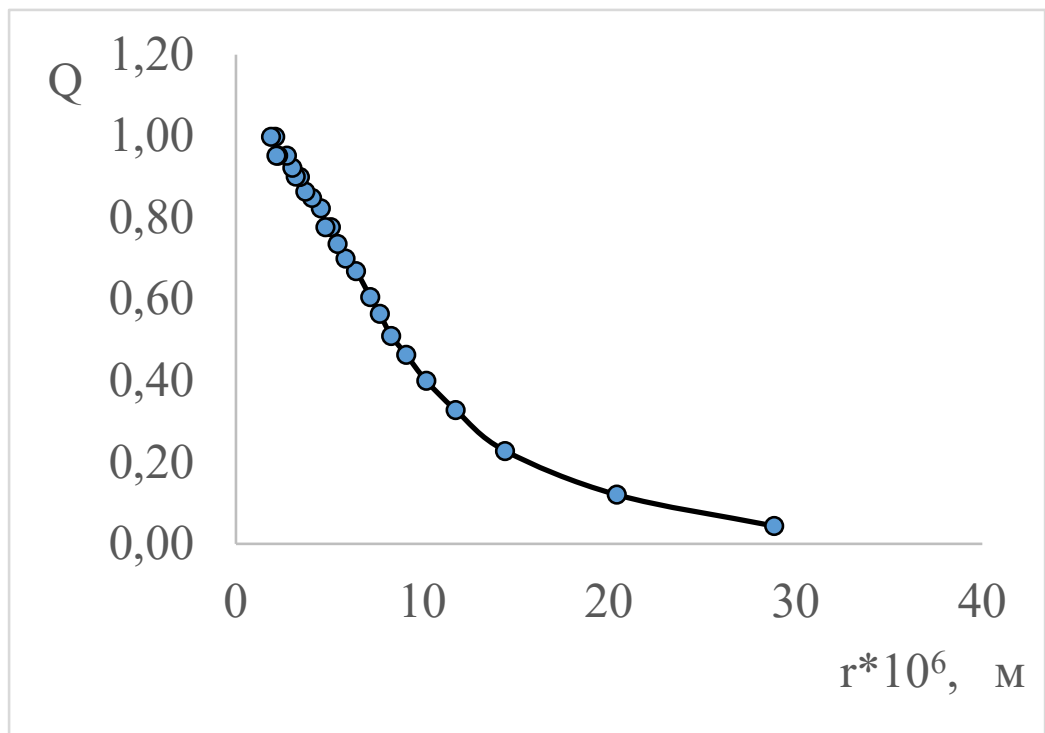


Рис. 3.8. Інтегральні криві розподілу мас частинок суспензії за радіусами

Вигляд інтегральної кривої розподілу мас частинок суспензії за радіусами свідчить про наявність рівномірного розподілу мас частинок в області малих значень радіусів.

3.6. Обговорення результатів дослідження

Як видно з даних табл. 3.1., розрахунковий фракційний склад для модельних даних з седиментації повністю співпадає з вихідними даними. Таке співпадіння свідчить про справедливість виведеного рівняння.

Співпадіння розрахованих значень з вихідними підтверджує також відсутність помилок при складанні програми та підтверджує можливість надбудови «Пошук рішення» розраховувати 25 невідомих коефіцієнтів у рівнянні апроксимації.

Результати розрахунків за експериментальними даними дозволили визначити, використовуючи розроблену програму, фракційний склад зразків (значення величин у стовпчику (на рис.3.6) та побудувати інтегральну криву розподілу мас частинок

суспензії за радіусами (рис.3.7).

Таким чином, проведений експеримент та подальші розрахунки показують, що рівняння (3.7) можна використовувати для опису кривої седиментації та визначення фракційного складу будь-якої полідисперсної системи.

Обробка даних за допомогою запропонованого рівняння принципово може застосовуватись для визначення фракційного складу полідисперсних суспензій з кількістю фракцій більше 25. Такі розрахунки важливі як з наукової точки зору, так і для виробництв, де регламентується фракційний склад дисперсних фаз.

3.7. Висновки до розділу

Отже, за допомогою математичного моделювання ми можемо чисельним методом обробки даних підібрати найкращі коефіцієнти рівняння, що описує експериментальні дані, а у нашому випадку визначати фракційний склад полідисперсної суспензії незалежно від закону розподілу частинок полідисперсної системи за радіусами.

Було досягнуто однієї з основних поставлених цілей, а саме – демонстрація на прикладі седиментаційного аналізу дисперсійного середовища з подальшим математичним розрахунком та графічним моделюванням. Принциповим є те, що математичне моделювання дозволяє розробити теоретичний аналіз. Це зручно коли немає можливості для проведення експерименту, також можна застосувати апроксимацію після математичної перевірки вже отриманих результатів (наприклад, щоб виключити похибку або помилковий вимір).

РОЗДІЛ 4

ОХОРОНА НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА

4.1. Види стічних вод хімічних підприємств та забруднень

Хімічна промисловість об'єднує багато різних хімічних компаній. Стічні води дуже різноманітні за кількістю, якістю та токсичністю. Спільним для них є те, що хімічні заводи зазвичай утворюють два типи стічних вод: сильно забруднені і слабо забруднені [43].

Сильно забруднений матеріал містить велику кількість різних хімічних речовин, більшість з яких є втратою продукту та сировини. Зазвичай на них припадає приблизно 1/3 загального об'єму стічних вод, і їх часто важко очистити.

Слабозабруднені стоки – води від охолодження обладнання, транспортування матеріалів. З промисловими стічними водами у водойми потрапляє багато хімічних речовин, у тому числі токсичних для водних організмів (фенол, його похідні та ін.).

Стічні води умовно поділяються на 3 види:

- виробничі - використані в технологічному процесі виробництва або утворені при видобутку корисних копалин (вугілля, нафти, руди і т. п.);
- побутові - від санітарних вузлів виробничих і невиробничих корпусів і будівель, а також від душових установок;
- атмосферні - дощові і від танення снігу.

Вода використовується в різних технологічних процесах промисловості і утворює такі стічні води:

- Реакційна вода, що виділяється під час реакції. Забруднені домішками із сировини та продуктами реакції.
- Промивання водою після промивання сировини, продукції, обладнання, тари, водного маточного розчину.
- Вода, що надходить із сировиною у вигляді вільної та зв'язаної води.
- Водні екстрагенти та абсорбенти.
- Охолоджуюча вода, яка не контактує з сировиною або продуктами.

А також:

- побутові води з їдалень, душових, після миття приміщень, пралень, туалетів та ін.;
- атмосферні опади, що стікають з території промислових підприємств та інших господарських об'єктів.

Залежно від характеристик їх умовно поділяють на чисті (оборотні) і брудні. Умовно чистими (оборотними) стічними водами є вода після охолодження технічного обладнання. Брудні стічні води відрізняються складом шкідливих речовин, визначеним технологією виробництва.

Забруднені виробничі стічні води містять різні домішки і підрозділяються на три групи:

- забруднені переважно мінеральними домішками (стоки заводів, що виготовляють мінеральні добрива, кислоти, будівельні вироби і матеріали й ін.);
- забруднені переважно органічними домішками (стоки підприємств хімічної і нафтохімічної промисловості, що виготовляють полімерні плівки, пластмаси, каучук та ін.);
- забруднені мінеральними й органічними домішками (стоки підприємств нафтовидобувної, нафтопереробної, нафтохімічної промисловості, що виготовляють продукти органічного синтезу й ін.).

4.2. Вплив забруднення стічних вод хімічного виробництва на довкілля та заходи щодо його зниження

Наприклад, на хімічних підприємствах, таких як металургія, машинобудування, рудна та кам'яновугільна промисловість, підприємства з виробництва мінеральних добрив, кислот і будівельних матеріалів в основному забруднені мінеральними домішками. До них належать піски, руди, глинисті включення, розчини неорганічних солей, лугів і кислот, металеві включення.

Небезпечним ефектом великого накопичення мінеральних забруднень у стічних водах такого виробництва є те, що мінеральні забруднювачі можуть утримувати інші сполуки, які потрапляють у стоки з виробництва [34].

Наприклад, стічні води гальванічної промисловості, що утворюються під час очищення компонентів і систем, а також обробки та заміни відпрацьованих електролітів, забруднені іонами важких металів.

Забруднення водою важкими металами негативно впливає на довкілля. Тобто вони можуть призводити до загибелі водних мікробів, які порушують природний харчовий ланцюг, негативно впливають на біологічне очищення води, а також є канцерогенами, мутагенами, тератогенами (викликають потворність), можуть бути алергенами.

Вживаючи забруднену воду з вмістом водорозчинних солей нікелю, у людини супроводжуються симптоми отруєння, вони можуть бути подібні до симптомів гострих кишкових інфекцій - слабкість, діарея, нудота і блювота. При такому сольовому ураженні, в легенях розвиваються і специфічні захворювання, які проявляються нехарактерними для гострої кишкової інфекції - задишкою і кашлем [43-45].

При припиненні всмоктування токсичних речовин в організм, самі симптоми отруєння можуть спостерігатися та тривати декілька днів. Особливої серйозної шкоди завдає нікелевий посуд, якщо він містить кислотні продукти (наприклад, оцет) і зберігається там тривалий час.

Якщо забруднену воду ми будемо використовувати для зрошення полів, то важкі та кольорові метали концентруватимуться у верхньому родючому шарі ґрунту, а це призведе в подальшому до зниження врожайності, можливого попадання токсичних речовин у корми та сільгосппродукти, а згодом – до організму людини (через споживання зараженої сільгосп продукції).

Найкращими заходами для зниження концентрацій домішок у стічній воді хімічного виробництва є низка стадій її очищення. Так, виходячи зі складу домішок розраховуються стадії та методи очищення.

Розрізняють та існують 4 основних групи способів очистки: механічні, реагентні хімічні, фізико-хімічні та біологічні. Кожну з груп теж можна розподілити на декілька типів.

Механічно: використовують для відділення дисперсних часток від рідини. Вони базуються на процесах седиментації (осідання), фільтрації, центрифугування. При цьому природа та хімічний стан речовини – забруднення не змінюються. Таке очищення застосовують при вилученні зі стічних вод нерозчинених грубодисперсних домішок (методами проціджування, відстоювання, фільтрування). Щоб вловити крупні забруднювачі - воду необхідно проціджувати через ґрати. Частинки, що мають більшу щільність, ніж щільність води, видалятимуть відстоюванням у відстійниках.

Речовини, легші за воду (нафтопродукти, смоли, жири) – у пастках, смоловловниках, олієвловниках, у яких речовини-забрудники спливають на поверхню води, звідки видаляються.

Частинки мінерального походження (наприклад - пісок) відділяють осадженням у пісковловниках. Для звільнення від дрібних частинок застосовують фільтри, найчастіше, з зернистим шаром у фільтрі.

Очищення механічними способами розповсюджено застосовують як першу стадію в загальній системі очищення стічних вод.

Хімічні чи реагентні методи очищення засновані на процесі хімічних реакцій між реагентами та забрудненнями, доданими до забрудненої води. Продукти хімічних реакцій повинні бути екологічно чистими або нерозчинними у стічних водах.

Також розрізняють такі методи, як фізико-хімічні методи, які включають флокуляцію, електрохімічні, термічні, мембранні та магнітні методи, а також біологічне очищення стічних вод (мікроорганізми перетворюють розчинені колоїдні органічні забруднювачі на харчові джерела). Фізико-хімічне очищення значно покращує механічне очищення стічних вод [34].

Біологічне очищення базується на життєдіяльності мікроорганізмів, якими окислюватимуть або відновлюватимуть органічні речовини, що перебувають у стічних водах у вигляді тонких суспензій, колоїдів, розчинив і є для мікроорганізмів джерелом харчування, у результаті чого й відбувається очищення стічних вод від забруднення.

Очисні спорудження біологічного очищення можна розділити на два основних типи:

- спорудження, в яких очищення відбувається в умовах, близьких до природніх;
- спорудження, в яких очищення відбувається в штучно створених умовах.

До першого типу належать споруди, де стічні води фільтруються через землю (наприклад, поля зрошення та фільтрації), а також споруди, які є резервуарами з проточною водою (так звані біологічні ставки). У таких структурах взаємодія мікроорганізмів з киснем відбувається шляхом прямого поглинання з повітря. У другому типі будови мікроорганізми дихають киснем переважно шляхом дифузії через поверхню води (аерація) або механічної аерації.

У штучних умовах біологічне очищення застосовують в аеротенках, біофільтрах й аерофільтрах. В таких умовах процес очищення проходить набагато інтенсивніше, тому що створюються штучно кращі умови для розвитку активної життєдіяльності мікроорганізмів.

Також, хотілося б зауважити, що комплексні методи очистки дають кращий результат. Тому, для очищення СВ при виробництві з гальванічними елементами, першим методом буде очищення механічних домішок механічним способом. Так ми зможемо відділити мінеральні домішки – пісок, глину. Далі застосовуватиметься фізико-хімічні методи з подальшим очищенням виробничої води.

Цікавим є те, що відділена глина на першому етапі, цілком можна використати для використання техногенних геохімічних бар'єрів, для захисту підземних і поверхневих вод від забруднення з створення штучного екрану в основі шламосховищ. Наприклад, іони нікелю Ni^{2+} зв'язуються з глиною, після чого глина стає природним геохімічним бар'єром [31, 33, 34].

4.3. Висновки до розділу

Особливістю СВ хімічного виробництва є багаторівневість в очистці, виходячи від фізико-хімічного складу у воді, що використовувалась та відпрацьована йде у стік.

Забруднення промислових стічних вод або неякісний етап очистки негативно впливає на екосистему. Так, розглядаючи викиди води з виробництва гальванічних елементів, забруднена СВ може потрапляти у поверхневих вод, накопичуючи у ґрунті шкідливі домішки. Ті в свою чергу можуть викликати тяжкі захворювання у людей та

вади, призвести до гибелі риб (через потрапляння у водойми забруднених підземних вод), а також порушення харчової ланки.

Оптимальним є механічне очищення – уловлювання та відділення піску, глини, що утримують інші сполуки (наприклад, це може бути нікель) з подальшим очищенням іншими методами. Також, можливість використання відділеної глини у якості природнього геохімічного бар'єра.

РОЗДІЛ 5 ОХОРОНА ПРАЦІ

5.1. Організація та управління охороною праці в хімічній лабораторії

Відповідно до законодавства України, виробництво (підприємства, цехи чи робочі зони) не може бути розпочато, якщо не гарантовані здорові та безпечні умови праці, тобто відповідно до «Закону про охорону праці». Під час роботи працівники наражаються на небезпеку, тому робота відбувається в спеціальному просторі, який називається виробничим середовищем.

На роботі слід зазначити, що в робочому середовищі є один згубний фактор - це робочий процес. Вплив цього фактора впливає на працівників і може призвести до хвороби та погіршення здоров'я (наприклад, вплив на потомство).

До шкідливих факторів робочого середовища відносять:

- 1) несприятливі метеорологічні умови;
- 2) недостатня освітленість у приміщенні;
- 3) запиленість та загазованість повітря;
- 4) вплив шуму, різних звуків та вібрації;
- 5) наявність електромагнітних полів, випромінювань та ін.

Певні небезпеки в робочому середовищі можуть бути небезпечними залежно від кількісних характеристик і тривалості впливу. Тому всі хімічні лабораторії повинні мати інструкції з безпечного ведення робіт з використання хімічних речовин та їх зберігання, оформлені відповідно до цих правил [51-52].

Небезпечні та шкідливі фактори робочого середовища поділяються:

- 1) фізичні – це рушійні машини та механізми, підвищення рівня шуму та вібрації, електромагнітні та інші випромінювання, погана освітленість (штучне чи природне), підвищений рівень статичної електрики, та звичайно мікрокліматичні (вологість, температура, швидкість руху повітря, теплове випромінювання);

- 2) хімічні – різні хімічні речовини та суміші, деякі речовини біологічного походження;
- 3) біологічні чинники – живі клітини та спори, що містяться у препаратах;
- 4) психофізіологічні – тяжкість та напруженість праці (такі фактори як інтелектуальні, сенсорні, емоційні навантаження, ступінь монотонності навантажень, режим роботи.

Важкість (тяжкість) праці – це характеристика трудового процесу, яка відображає навантаження на опорно-руховий апарат (навантаження на серцево-судинну та дихальні системи також) та функціональні системи організму людини, які забезпечують його діяльність

Напруженість праці – ще одна характеристика трудового процесу, відбиває навантаження на центральну нервову систему, органи почуттів та емоційну сферу працівника. Небезпечний чинник може стати причиною гострого захворювання робітника та призвести навіть до його смерті.

Аналіз умов праці і робочого місця

У приміщенні де проводиться експериментальне дослідження седиментації частинок встановлені такі прилади:

- 1)Центрифуга;
- 2)Фотоколориметр;
- 3)Спектрофотометр;
- 4)Аналітичні та торсіонні ваги;
- 5)Термометр;
- 6)Пікнометр;
- 7)Магнітна мішалка.

Дані прилади призначені для роботи лаборантів та студентів для проведення досліджень.

Розміри приміщення:

- 1) довжина приміщення - 12м;
- 2) ширина приміщення - 6м;
- 3) висота приміщення - 3м.

У приміщенні 6 основних робочих місця. Площа та вільний простір, що приходить на одного співробітника складає:

$$S_c = (a*b)/n = (12м*6м)/6 = 12м^2,$$

$$V_c = S_c * h = 12м^2 * 3м = 36м^3,$$

де, S_c – площа, яка приходить на одного співробітника, $м^2$, a – довжина приміщення, $м$, b – ширина приміщення, $м$, n – кількість співробітників, V_c – обсяг вільного простору, що припадає на одного співробітника, $м^3$, h – висота приміщення, $м$. Відповідно до СН 245-71, дане приміщення відповідає всім вимогам, а саме: $S_c = 6м^2$, $V_c = 21 м^3$.

Основним фактором, що визначає умови праці в лабораторії під час проведення експерименту – хімічний фактор.

5.2. Аналіз небезпечних факторів у лабораторії

Аналіз хімічної небезпеки в лабораторії

Хімічні речовини, що використовуються в лабораторіях, класифікуються за призначенням таким чином: загальні та специфічні. Зазвичай використовуються такі реагенти: кислота (сірчана кислота, азотна кислота, хлорид), луг, неорганічний індикатор та ін. Спеціальні реактиви використовуються тільки для конкретних робіт.

За ступенем чистоти та призначення хімічні реактиви поділяються на : хімічно чисті (х.ч), чисті (ч). Для спеціальних робіт застосовують високочисті препарати: спектрально чисті (сп.ч.), вищої очистки, (в.оч.), особливо чисті (ос.ч). Для реактивів кожної з цих категорій встановлений припустимий вміст домішок.

Реактиви слід зберігати у відповідній тарі, закритими, з етикетками (червона - "Вогнебезпечно", жовта - "Отрута", зелена - "Берегти від води" або інших.), на яких зазначено назву речовини, її хімічна формула, точна концентрація, дата виготовлення, термін зберігання.

Наприклад, багато реактивів зберігають у склянках із звичайного скла або поліетиленових банках, мішечках. Реактиви, що розкладаються під дією світла (КІ,

I₂, KMnO₄, K₂Cr₂O₇, AgNO₃, KSCN, K₃[Fe(CN)₆] та ін.), тримають у жовтих або темних склянках. Посуд з наприклад, пероксид водню - не можна щільно закривати, необхідно щоб кисень що виділяється міг вільно вивільнятися.

Заходи щодо забезпечення біологічної безпеки

Низька кваліфікація співробітників може призвести нанівець ефективність найнадійніших заходів безпеки щодо захисту персоналу лабораторії. Необхідний персонал повинен пройти інструктаж з техніки безпеки та добре ознайомлений із заходами визначення та обмеження ризику, що має місце в лабораторії. Тому так надзвичайно важливо постійно, у тому числі під час роботи, навчати персонал належним заходам безпеки.

Ефективна програма з техніки безпеки починається з адміністрації лабораторії, відповідальність якої - забезпечення і організація лабораторної роботи таким чином, щоб базове навчання працівників обов'язкове включало практику з техніки безпеки. Заходи з техніки безпеки завжди повинні бути й для щойно прийнятих до лабораторії співробітників. Персонал лабораторії повинен бути ознайомлений з кодексами поведінки в лабораторії, включаючи посібники з техніки безпеки та робочих процедур. У зв'язку з цим після ознайомлення з інструкцією проводиться обов'язкова підписна дія щодо ознайомлення та засвоєння лаборантами загальних рекомендацій.

При виконанні робіт з використанням хімічних речовин слід дотримуватись ряду вимог:

- усі роботи в лабораторії проводяться лише за наявності спецодягу (халата);
- роботу зі шкідливими і небезпечними хімічними речовинами проводити з використанням засобів особистого захисту (ЗОЗ), у тому числі захисних окулярів, масок, резинових фартухів, рукавичок, респіраторів, протигазів тощо;
- усі роботи із їдкими хімічними речовинами проводити під тягою при спущених рамках;
- не нюхати і не пробувати на смак невідомі речовини і розчини. Не набирати ротом рідини в піпетку;
- при розтиранні в ступці твердих хімічних речовин у порошок дотримуватись вимог технологічних норм: при перевищенні кількості речовини в ступці можливий вибух;

- не зливати у раковини відходи хімреактивів та органічних розчинників;
- усі хімічні реактиви повинні бути забезпечені етикетками з зазначенням назви речовини, а для розчину – його концентрації. Реактиви мають зберігатися у металевому сейфі і бути внесені до опису з зазначенням назви, кваліфікації, кількості.

Забороняється користуватися реактивами без етикеток чи з нерозбірливими написами;

- при проведенні синтезів, перший дослід слід проводити з рекомендованими кількостями речовин і чітко дотримуватись прописаних умов;
- дослідницькі роботи, результат яких неможливо передбачити заздалегідь, необхідно проводити із мінімальними кількостями речовин;
- необхідно уважно стежити за чистотою реактивів, не плутати пробки від банок з реактивами, не діставати реактиви з банки брудним шпателем;
- зважування реактивів проводити лише у спеціальному посуді для зважування, не розміщати хімреактиви безпосередньо на чашки ваг;
- забороняється тримати займисті речовини і матеріали поблизу ввімкнених електронагрівальних приладів;
- при розведенні концентрованих кислот слід наливати кислоту в воду, а не навпаки;
- відходи важких металів та їх сполук, а також інших токсичних речовин збирати у спеціальні ємності з відповідними підписами.

Видалення відходів

Правила знешкодження і знищення шкідливих речовин. Необхідність і порядок знищення шкідливих речовин встановлюються наказом керівника підприємства, в якому мають бути чітко відображені: причини знищення; маса (нетто і брутто); особа, відповідальна за знищення речовини і організацію заходів безпеки, місце і порядок знищення; список осіб, допущених до роботи зі знищення; порядок оформлення акта знищення шкідливих речовин. Полімер необхідно видалити з полімерних і латексних стоків одним із процесів, які осаджують високомолекулярні органічні сполуки. Відокремлений осад захороняється. Порядок зливу нейтралізованого розчину визначається відповідною інструкцією, що діє на підприємстві.

Шкідливі речовини необхідно знищувати лише у виняткових випадках, коли немає можливості використати ці речовини. Спосіб знешкодження та знищення вибирається в кожному окремому випадку залежно від кількості знищуваної речовини і місцевих умов, в яких це знищення проводиться.

5.3. Пожежна безпека

Пожежна безпека – це захист людей, різного майна, суспільства та держави загалом від пожеж. Умови соціального чи технічного характеру, встановлені для забезпечення пожежної безпеки законодавством України та уповноваженими органами називають вимогою пожежної безпеки [51, 53].

Заходами пожежної безпеки слід називати дії щодо забезпечення пожежної безпеки, а також виконання вимог пожежної безпеки.

До первинних засобів пожежогасіння відносять:

- 1) пожежні крани;
- 2) пожежні щити;
- 3) переносні та пересувні вогнегасники;
- 4) покривала для ізоляції осередку займання.

Широкопоширені вогнегасники, щогасять вогнище пожежі за рахунок випуску запасеної вогнегасної речовини.

Вогнегасники бувають:

- 1) переносні (вага до 20 кг);
- 2) пересувні (масою не менше 20 кг, але не більше 400 кг).

По виду вогнегасної речовини вогнегасники бувають: 1) водні;

- 2) пінні (повітряно-пінні); 3) хімічні пінні;
- 4) порошкові;
- 5) газові (вуглекислотні); 6) хладонові;
- 7) комбіновані.

Залежно від виду, зарядженої вогнегасної речовини, вогнегасники поділяють:

- 1) для гасіння твердих горючих речовин (клас пожежі А);
- 2) для гасіння рідких горючих речовин (клас пожежі);
- 3) для гасіння газоподібних горючих речовин (клас пожежі);
- 4) для гасіння металів та металовмісних речовин (клас пожежі D);
- 5) для гасіння електроустановок, що знаходяться під напругою (Клас пожежі E).

Також існують вогнегасники, якими можна гасити пожежу, що відноситься до кількох класів відразу.

В останні роки дуже актуально на будь-яких підприємствах встановлювати АПС – система автоматичної пожежної сигналізації. Залежно від датчиків системи АПС поділяють:

- 1) теплові;
- 2) димові;
- 3) світлові;
- 4) ультразвукові;
- 5) фотоелектричні;
- 6) комбіновані.

Усі хімічні лабораторії обладнані автоматичною пожежною сигналізацією та сухими хімічними, газовими або піщаними вогнегасниками. Перед початком робіт персонал проходить інструктаж з техніки протипожежного захисту.

У разі виникнення пожежі необхідно: повідомити завідуючого лабораторією, дирекцію; розпочати гасіння пожежі первинними засобами пожежогасіння (наприклад, вимкнути електроживлення – знеструмити – розлитий продукт засипати піском); при загрозі людям організувати їхню евакуацію відповідно до планів евакуації та надання постраждалим першої медичної допомоги; повідомити за телефоном 101 (пожежні, рятувальники) або 112 (виклик екстрених служб) і назвати точну адресу пожежі, що горить, чи загрожує вогонь людям і своє прізвище.

5.4. Висновки до розділу

Отже, було проведено аналіз умов праці в хімічній лабораторії.

Визначено основну класифікацію зберігання різних типів реактивів в лабораторії, умови маркування та зберігання. Проаналізовано способи забезпечення пожежної безпеки та створено алгоритм дії при пожежі.

1. Модель хімічної лабораторії (в Національному авіаційному університеті) повністю відповідає СН 245-71, за критеріями оцінки площі, вільного простору, що припадає на одного співробітника ($S_c = 12 \text{ м}^2$, $V_c = 36 \text{ м}^3$).

2. Лабораторія, на базі якої проводились дослідження, наповнена належним чином – присутнє усе обладнання, витяжки, комбіноване освітлення. Варто зазначити, персонал або студент повинен проходити інструктаж з техніки безпеки та бути ознайомленим із заходами визначення та обмеження ризику небезпеки перед початком роботи в лабораторному приміщенні.

3. Хімічна лабораторія оснащена автоматичними пожежними сигналізаціями та порошковими, газовими та піщаними вогнегасниками. Перед початком роботи робітників та студентів інформують щодо техніки безпеки при пожежі та правильного користування засобами гасіння.

ВИСНОВКИ

Отже, було проведено аналіз теоретичної частини, а саме – літературний огляд. Великий різновид математичних моделей дозволяє у сучасній хімії використовувати різноманітні методи для аналізу, апроксимації, моделювання можливих ускладнень при реальному експерименту. Тобто, за допомогою сучасного математичного моделювання можна пришвидшити дослід та зекономити не лише час, а й скоротити затрати.

Математичні моделі станів, явищ та процесів завжди будуються на певних уявленнях та допущеннях і тому їх використання для реальних об'єктів потребує експериментальних підтверджень.

За допомогою математичного моделювання ми можемо чисельним методом обробки даних підібрати найкращі коефіцієнти рівняння що описує експериментальні дані, а у нашому випадку визначати фракційний склад полідисперсної суспензії незалежно від закону розподілу частинок полідисперсної системи за радіусами.

Особливістю СВ хімічного виробництва є багаторівневість в очистці, виходячи від фізико-хімічного складу у воді, що використовувалась та відпрацьована йде у стік.

Забруднення промислових стічних вод або неякісний етап очистки негативно впливає на екосистему. Так, розглядаючи викиди води з виробництва гальванічних елементів, забруднена СВ може потрапляти у поверхневі води, накопичуючи у ґрунті шкідливі домішки. Ті в свою чергу можуть викликати тяжкі захворювання у людей та вади, призвести до гибелі риб (через потрапляння у водойми забруднених підземних вод), а також порушення харчової ланки.

Оптимальним є механічне очищення – уловлювання та відділення піску, глини, що утримують інші сполуки (наприклад, це може бути нікель) з подальшим очищенням іншими методами. Також, можливість використання відділеної глини у якості природнього геохімічного бар'єра.

Було досягнуто однієї з основних поставлених цілей, а саме – демонстрація на прикладі седиментаційного аналізу дисперсійного середовища з подальшим математичним розрахунком та графічним моделюванням. Принциповим є те, що математичне моделювання дозволяє розробити теоретичний аналіз, без

експериментальної частини. Це зручно коли немає можливості для проведення експерименту, також можна застосувати апроксимацію після математичної перевірки вже отриманих результатів (наприклад, щоб виключити похибку або помилковий вимір).

СПИСОК БІБЛІОГРАФІЧНИХ ПОСИЛАНЬ ВИКОРИСТАНИХ

ДЖЕРЕЛ

1. Білецький В. С., Смирнов В. О. Моделювання процесів збагачення корисних копалин: (Монографія) — Донецьк: Східний видавничий дім, 2013.- 304 с.
2. Основи біомедичного радіоелектронного апаратобудування : навчальний посібник / С. М. Злепко, С. В. Павлов, Л. Г. Коваль, І. С. Тимчик. – Вінниця : ВНТУ, 2011. – 134 с.
3. Бахрушин В.Є. Математичне моделювання. - Запоріжжя: ГУ "ЗІДМУ", 2004.
4. Чумак В.Л., Максимюк М.Р., Косенко О.І. Оброблення результатів седиментаційного аналізу з використанням методу Ньютона. – Вісник НАУ. – 2010.– №4 (45). – с.153-160.
5. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств: Учеб. пособие для вузов. –М.: Высш. шк.,1991.–400 с.
6. Чумак В.Л. Визначення фракційного складу бентонітових суспензій з використанням методу ньютонна / В.Л. Чумак, М.Р. Максимюк, Л.С. Комкова // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2011, No 2/6(50). – С. 18-21.
7. Олар О. І., Микитюк О. Ю., Федів В. І., Остафійчук Д. І. Методи математичного моделювання як важливий розділ знань для студентів медичних та фармацевтичних спеціальностей. Наукова промисловість Європейського континенту – 2013 : зб. матеріалів ІХ Міжнар. наук.-практ. конф. – Прага : Publishing House “Education and Science”, 2013.
8. N. Trinajstić, I. Gutman, Mathematical Chemistry, Croatica Chemica Acta, 75(2002), pp. 329-356
9. Цюрупа Н.Н. Распределение диспергированной фазы по размеру частиц / Н.Н. Цюрупа // Коллоидный журн.– 1964. – Т.26, No1. – С. 117–125.
10. Лущик У.Б., Новицький В.В., Браніцька Н.С., Алексеєва Т.С., Францевич К.А. Деякі сучасні математичні моделі гемодинаміки // Вопросы механики и ее приложения. Т. 44 / Ин-т математики НАНУ. – К., 2002. – С. 18–23.

11. Дейнека В. С. Математические модели и методы расчета задач с разрывными решениями / Дейнека В. С., Сергиенко И. В., Скопецкий В. В. – К. : Наукова думка, 1995. – 262 с.
12. Белоконь Н.И. Термодинамика. — М. : Госэнергоиздат, 1954. — 417 с.
13. Клапейрона-Менделеева уравнение // Химическая энциклопедия : в 5 т. / гл. ред. И. Л. Кнунянц. — М. : Сов. энцикл., 1990. — Т. 2 : Даффа реакция — Меди сульфат. — Стб. 788.
14. Глосарій термінів з хімії / уклад. Й. Опейда, О. Швайка ; Ін-т фізико-органічної хімії та вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Донецький національний університет. — Дон. : Вебер, 2008. — 738 с.
15. Карапетьянц М.Х. Неорганическая химия: учебн. [для студ. хим.-техн. спец. вузов] / М.Х. Карапетьянц, С.Д. Дракин. – М.: Химия, 1981 – 632с.
16. Антропов Л.І. Теоретична електрохімія : підручник / Л.І.Антропов.– К. : Либідь, 1993. – 544 с.
17. Моделювання фізико-хімічних властивостей вуглеводневих систем: лабораторний практикум / уклад. : В. Л. Чумак, М. П. Кравчук, Т. В. Кравчук. – К. : НАУ, 2022. – 60с.
18. Фізична хімія: Лабораторний практикум. / Авт.: О.І. Косенко, С.В. Іванов, М.Р., Максимюк, В.В.Єфименко, Н.В. Столярова. – К.: НАУ, 2005. – 56 с.
19. Чумак В. Л., Іванов С. В., Максимюк М. Р. Колоїдна хімія : підручник. Київ : НАУ, 2017. 455 с.
20. Ельяшевич М. А. Атом // Большая Советская Энциклопедия. 3-е изд. / гл. ред. А. М. Прохоров. — М.: Советская энциклопедия, 1970. — Т. 2. Ангола — Барзас. — С. 389—394.
21. Химический энциклопедический словарь / Гл. ред. И. Л. Кнунянц. — М.: Советская энциклопедия, 1983. — С. 58. — 792 с.
22. Орехова В.В. Теоретические основы гальваностегических процессов / В.В. Орехова, Б.И. Байрачный. – К. : Вища школа, 1988. – 208 с.
23. Справочник по электрохимии / Под ред. А.М. Сухотина. – Л.:Химия, 1981. – 488с.

24. Якименко Г.Я. Технічна електрохімія. Ч.3. Гальванічні виробництва / Г.Я.Якименко, В.М.Артеменко. – Х. : НТУ «ХП», 2006. – 272 с.
25. Адсорбція // Фармацевтична енциклопедія / голова ред. ради та автор передмови В. П. Черних ; Нац. фармац. ун-т України. — 2-ге вид., переробл. і доповн. — Київ: МОРІОН, 2010. — 1632 с.
26. Мала гірнича енциклопедія : у 3 т. / за ред. В. С. Білецького. — Д. : Донбас, 2004. — Т. 1 : А — К. — 640 с.
27. Самилін В., Білецький В./ Спеціальні методи збагачення корисних копалин. — Донецьк: Східний видавничий дім, 2003. — 116 с.
28. Монтморилоніт // Мінералого-петрографічний словник / Укл. : Білецький В. С., Суярко В. Г., Іщенко Л. В. — Х. : НТУ «ХП», 2018. — Т. 1. Мінералогічний словник. — 444 с.
29. Смирнов В.О., Білецький В.С., Шолда Р.О. Переробка корисних копалин (монографія). Донецьк: Східний видавничий дім. 2013. 600 с.
30. Папушин Ю. Л., Смирнов В. О., Білецький В. С. Дослідження корисних копалин на збагачуваність. — Донецьк: Східний видавничий дім, 2006. — 344 с.
31. М. С. Мальований , С. Б. Большаніна, В. Д. Дудченко. Дослідження ізотерми адсорбції іонів Fe^{2+} на природних глинистих мінералах Сумської області // Екологія довкілля та безпека життєдіяльності, No 6, 2006.– С. 17 – 21.
32. Тарасевич Ю.И. Строение и химия поверхности слоистых силикатов.- К.: На укова думка, 1988.- 248 с.
33. Нечипоренко Г.В., Магунов І.Р., Васютинська К.А. Сорбція іонів нікелю і міді на гідроксо – та фтороапатиті. Труды Одесского политех. ун-та, 2007, вып.. 2. С. 1-5.
34. Мальований М.С.Очищення стічних вод природними дисперсними сорбентами: монографія / М.С.Мальований, І.М. Петрушка. – Львів :Вид-во Львівської політехніки,2012. – 180 с.
35. Дриц В.А., Косовская А.Г. Глинистые минералы.- М.: Мир, 1980.- 204 с.
36. Bellman R. E. Adaptive Control Processes. A Guided Tour. Princeton Legacy Librar. 2016. 276 p.

37. Михайлов В.А. Перспективи розвитку мінерально-сировинної бази бентонітів в Україні / Михайлов В.А., Андрєєва О.О. // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Геологія. Випуск 21. – 2002. – С. 15-18.
38. Типы глин минеральных: [Электронный ресурс] / Геологическая энциклопедия. – Режим доступа к инф. : http://dic.academic.ru/dic.nsf/enc_geolog/18414
39. Монтмориллонит: [Электронный ресурс]. – Режим доступа к инф. : <http://kristallov.net/montmorillonit.html>
40. Осипов В. І. Мікроструктура глинистих порід / Осипов В. І., Соколов В. М., Румянцева Н. А. – М.: Надра. – 1989. – 211 с.
41. Бентонітова глина: [Електронний ресурс]. – Режим доступу до інф.: <http://aboutginka.ru/rizne-10/ekonomika-ta-finansi/109238-bentonitova-glina-marki-zastosuvannja.htm>
42. Адаптивное кусочно-линейное приближение трудновычислимых функций / Г.А. Шелудько, С.В. Угримов // Проблемы машинобудування. — 2018. — Т. 21, № 2. — С. 60-67.
43. Батлук В.А. Основы экологии и охраны окружающей среды. Учебное пособие. – Львів: Афіша, 2001. – 333 с.
44. Даценко І.І. Гігієна і екологія людини. Навч. посібник. – Львів.: Афіша, 2000. – 248 с.
45. Джигирей В.С. Екологія та охорона навколишнього природного середовища: Навч. посібник. – К.: Т-во “Знання”, 2002. – 203 с.
46. Запольський А.К., Салюк А.І. Основи екології: Підручник / За ред. К.М. Ситника. – 3-тє вид., стер. – К.: Вища шк., 2005. – 285 с.
47. Корабльова А.І. Екологія: Взаємовідносини людини і середовища. – Дніпропетровськ: Центр екологічної освіти, КОО, 2001. – 291 с.
48. Промислова екологія: Навчальний посібник / С.О. Апостолюк, В.С. Джигирей, А.С. Апостолюк та ін. – К.: Знання, 2005. – 474 с.
49. Сторожук В.М., Батлук В.А., Назарук М.М. Промислова екологія: Підручник. – Львів: Українська академія друкарства, 2006. – 574 с.

50. Гігієнічні нормативи ГН 3.3.5-8-6.6.1-2002 «Гігієнічна класифікація праці за показниками шкідливості та небезпечності факторів виробничого середовища, важкості та напруженості трудового процесу». Затверджено наказом Міністерства охорони здоров'я України від 27.12.2001 № 528.

51. НАПБ А.01.001-2004 Правила пожежної безпеки в Україні.

52. Міждержавний стандарт ГОСТ 12.1.005-88 ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны.

53. Закон України «Про пожежну безпеку».