

ОСНОВИ МОДЕЛЮВАННЯ В ЕРГОНОМІЦІ, ЕКОЛОГІЇ І ХІМІЧНІЙ ТЕХНОЛОГІЇ

Монографія

*За загальною редакцією
д-ра техн. наук, професора С. М. Логвінкова*

**Харків
ХНЕУ ім. С. Кузнеця
2017**

УДК 330.43:[331.101.1:502/504:66]

О-75

Рецензенти: директор Навчально-наукового інституту екологічної безпеки Національного авіаційного університету, д-р техн. наук, професор *О. І. Запорожець*; заступник директора з наукової роботи та маркетингу наукових досліджень НДУ "Український науково-дослідний інститут екологічних проблем", д-р екон. наук *О. О. Дмитрієва*; академік Міжнародної Академії Наук, д-р хім. наук, професор кафедри спеціальної хімії та хімічної технології Національного університету цивільного захисту України *В. Д. Калусін*.

Рекомендовано до видання рішенням вченої ради Харківського національного економічного університету імені Семена Кузнеця.

Протокол № 7 від 24.04.2017 р.

Самостійне електронне текстове мережеве видання

Авторський колектив: д-р техн. наук, професор С. М. Логвінков – вступ, п. 1.2, п. 2.1, п. 2.2 – п. 2.4, п. 3.1.3, п. 3.1.4, висновки, загальна редакція; д-р фіз.-мат. наук, професор Г. Д. Коваленко – п. 3.6; д-р техн. наук, професор О. Б. Скородумова – п. 3.12; д-р техн. наук, доцент О. В. Третьяков – п. 3.3; канд. техн. наук, доцент Г. С. Попенко – п. 1.1, п. 3.10; канд. геогр. наук, доцент Ю. В. Буц – п. 1.3, п. 2.5, п. 3.2, п. 3.5; канд. техн. наук, доцент О. Ф. Протасенко – п. 3.7; канд. техн. наук, доцент Є. О. Михайлова – п. 3.9; канд. техн. наук, доцент Н. С. Цапко – п. 3.1.1, п. 3.1.2; канд. сільгосп. наук, доцент А. А. Івашура – п. 3.8; канд. техн. наук, доцент О. В. Крайнюк – п. 3.2; канд. техн. наук, ст. викладач О. М. Борисенко – п. 3.11; канд. геогр. наук, ст. викладач О. Л. Агапова – п. 3.5; канд. техн. наук, ст. наук. співр. Р. В. Пономаренко – п. 3.4; канд. техн. наук, ст. наук. співр. Г. В. Хабарова – п. 3.6; ст. викладач Т. Б. Гонтар – п. 3.12; ст. викладач В. В. Филенко – п. 3.5; С. В. Власенко – п. 3.13; К. С. Власенко – п. 3.13; аспірант В. Л. Безсонний – п. 3.3.

Основи моделювання в ергономіці, екології і хімічній технології : монографія [Електронний ресурс] / С. М. Логвінков, Г. Д. Коваленко, О. Б. Скородумова та ін. ; за заг. ред. д-ра техн. наук, професора С. М. Логвінкова. – Харків : ХНЕУ ім. С. Кузнеця, 2017. – 326 с.
ISBN 978-966-676-695-6

Розглянуто й обґрунтовано основні види моделювання процесів і принципи системного підходу до побудови моделей. Викладено авторські підходи до методології застосування моделей для управління складними процесами в ергономіці, екології та хімічній технології.

Рекомендовано для студентів, аспірантів, науковців та читачів, які цікавляться сучасними методами моделювання в ергономіці, екології та хімічній технології.

УДК 330.43:[331.101.1:502/504:66]

© С. М. Логвінков, Г. Д. Коваленко,
О. Б. Скородумова та ін., 2017

© Заг. ред. С. М. Логвінкова, 2017

© Харківський національний економічний
університет імені Семена Кузнеця, 2017

ISBN 978-966-676-695-6

Вступ

*"Усі науки настільки пов'язані між собою,
що легше вивчати їх усі відразу,
ніж якусь одну із них окремо від інших".*

Рене Декарт.

Розвиток людства нерозривно пов'язаний із пізнанням законів природи і освоєнням процесів виробництва штучних матеріалів і виробів на їх основі. Створення нових матеріалів базується на досягненнях хімії, і саме хімічне виробництво найбільш повно характеризує прогрес сучасного суспільства. Водночас відходи хімічних виробництв мають тенденцію до різкого збільшення їх кількості, сфери поширення, різноманіття комбінацій токсичних компонентів і становлять основну небезпеку для довкілля людини. Не випадково, що усвідомлення згубних наслідків прагнення до індустріалізації будь-якою ціною почалося в технічно розвинених країнах, в яких екологічні проблеми проявилися найбільш різко. Дуже інтенсивно почала розвиватися нова наука – екологія, покликана для гармонізації взаємовідносин між людиною і середовищем його проживання. У всьому світі їй приділяють все більше і більше уваги, а застаріла парадигма побудови індустріального суспільства змінюється на нову, що враховує домінуючу тенденцію до розвитку зеленої економіки. І чим більше екологічне мислення оволодіває свідомістю світового співтовариства, тим більш значну роль у вирішенні глобальних природоохоронних проблем відводять хімії. Вражає, що хімія є не тільки основним джерелом екологічних проблем, але і основним творчим інструментом у їх вирішенні.

Хімія і екологія мають тісний взаємозв'язок з іншими науками, глибоким проникненням єдиних методів досліджень, наявністю загальних механізмів реалізації різних за сутністю процесів. До дослідження взаємодій різноманітних чинників у хіміко-технологічних та екологічних системах застосовують аналогові поняття, що визначає значну подібність методів моделювання процесів у цих системах, зокрема математичних. В обох науках оброблення експериментальних даних методом математичної статистики залишається найбільш поширеним, але не єдиним методом, оскільки навіть результати дуже тонких експериментів не завжди дозволяють виявити рушійні сили та механізми, що визначають функціональний стан і прогнозований розвиток процесів у цих системах. Безумовно,

що навіть для короткого опису всього комплексу різноманітних методів моделювання хімічних, ергономічних та екологічних процесів недостатньо обсягу цієї монографії. Водночас колектив авторів накопичив значну кількість прикладів ефективного моделювання специфічних процесів, які потребують узагальнення та розподілу для застосування іншими вченими в нових напрямках наукових досліджень. За цих обставин автори виходили з прогностичного висловлювання одного із засновників квантової механіки – Макса Планка: "Кожен видатний дослідник вносить своє ім'я в історію науки не тільки власним відкриттям, але і тими відкриттями, до яких він спонукає інших".

Зміст монографії орієнтований не на професіоналів математиків, а на дослідників інших галузей знань і студентів економічних спеціальностей, пов'язаних із хіміко-екологічними дисциплінами. Тому в монографії приділяється увага деяким темам абсолютно очевидним для математиків, але систематизуються необхідні відомості у основній категорії майбутніх читачів. По суті, наслідували логіку знаменитого натураліста Френсіса Бекона: "Спочатку сходять до аксіом, а потім спускаються до практики". Водночас конкретні приклади моделювання хіміко-екологічних процесів, надані авторами, мають різноманітні галузі наукових інтересів, без змін деталізації, але в суворій науковій термінології та в необхідній точності опису. Таке подання матеріалів монографії автори наслідували у Альберта Ейнштейна: "Уявляйте речі простими, наскільки це можливо, але не більше того".

Колектив авторів висловлює подяку рецензентам за підтримку під час написання монографії і за конструктивні зауваження, деякі з яких були усунені на стадії редагування.

Розділ 1. Основні види моделювання процесів та принципи системного підходу до побудови моделей

1.1. Актуальність моделювання хімічних, екологічних та ергономічних процесів

У цей час найважливіша концепція (з лат. – головна ідея) сучасної науки базується на визнанні: матеріальної єдності світу в будь-яких просторових межах (від мікро- до мегасвіту); універсальності фундаментальних законів та їх справедливості для всіх об'єктів і явищ природи; дискретності (з лат. – уривчастість) простору і часу на рівні квантових комірок (квант з лат. – порція, доза): 10^{-35} м і 10^{-43} с, відповідно. Світ, природа, всесвіт є аналогічними поняттями і визначаються сукупністю всього існуючого, яке складається з речовини, полів та інформації. Речовина проявляється у вигляді наявності маси у матеріальних тіл, а поля – у вигляді наявності енергії між матеріальними тілами. Сучасна наука дозволяє складати балансові рівняння для речовини та енергії (через відомі в термодинаміці і квантовій механіки закони збереження маси, імпульсу, енергії), знає взаємозв'язок між масою і енергією (рівняння Ейнштейна).

Пізнання інформації, яка не може бути віднесена ні до матерії, ні до енергії, знаходиться в початковій стадії. Теорія інформації та практичні області її застосування надзвичайно затребувані в даний час і найбільш інтенсивно розробляються фахівцями. Однак сьогодні не відомі закони для складання балансових рівнянь для інформації, а також механізми впливу інформації на речовину і поле. Взаємозв'язок інформації з речовиною і полями проглядається лише на понятійній аналогії: в термодинаміці – теплова ентропія, в інформатиці – інформаційна (Шеннонська) ентропія. Співвідношення ентропійних одиниць показує, що тепла одиниця в 1 023 разів більша, ніж інформаційна. Ймовірно, саме така значна різниця цих величин обмежує експериментальні можливості вивчати вплив інформації на речовину і поле.

Безумовно, що інформація проявляється лише в діяльності розумних істот, забезпечуючи формування відповідних знань про матеріальні об'єкти, їх взаємодії один з одним і з носієм розуму – людиною. Надшвидкі

темпи розвитку інформаційних технологій дозволили людству досягти вражаючих результатів оброблення, накопичення та передачі інформації. Однак вони не здатні генерувати нову інформацію, яка вирішує зазначену вище проблему. Тому будь-який модельний опис не може забезпечити максимальну достовірність результатів досліджуваного об'єкта або процесу. Крім того, розвиток інформаційних технологій породжує нові проблеми в екології, обумовлені посиленням впливу людської діяльності (антропогенний вплив на навколишнє середовище). Це пов'язано з масштабним використанням електромагнітних хвиль різної частоти, промисловим освоєнням технологічних процесів для одержання нових матеріалів для мікроелектроніки, процесорів, моніторів і т. п.

На думку авторів [86], у працях Гіппократа, Аристотеля та деяких інших давньогрецьких філософів містилися відомості явно екологічного характеру, але введення в 1866 році терміна "екологія" (*oikos* з грецької – притулок, житло; *logos* – наука) приписується німецькому біологу Ернсту Геккелю. Спочатку екологи дослідили взаємозв'язки живих організмів із навколишнім середовищем без урахування впливу діяльності людини. Нині антропогенне навантаження на природу дедалі посилюється, і нехтувати діяльністю людини в екологічних дослідженнях неможливо. Тому предметом вивчення екології є дослідження зв'язків між усіма живими організмами і навколишнім середовищем у процесі еволюції (з лат. – розгортання). Життя на нашій планеті локалізоване в порівняно невеликому за розмірами шарі землі, води і повітряної атмосфери. Для цього шару французький біолог Ж. Б. Ламарк (1744 – 1829 рр.) застосував термін "біосфера", а у 1926 р. в широкий науковий лексикон увів термін засновник сучасної екології В. І. Вернадський [23].

Різноманітність і величезна кількість матеріальних об'єктів у навколишньому середовищі, генезис (з лат. – розвиток) безлічі різних видів тварин і рослин, безупинно мінливий асортимент знарядь праці та засобів виробництва людини вказують на нерівномірність розподілу основних елементів будови біосфери. Але водночас кожна людина переконується на особистому життєвому досвіді на відсутності хаосу в Природі, що вказує на можливості пізнання діючих закономірностей із виявленням найбільш значущих взаємозв'язків елементів будови біосфери. У свою чергу, поняття "будова", "структура" можуть застосовуватися і до природних неорганічних об'єктів, і до живих організмів, і до продуктів людської праці.

Безумовно, що ці поняття вимагають попереднього визначення терміна "система" щодо якого і вживаються поняття. У різних видах наук термін система має відмінні риси, але завжди сприймається однозначно як виділена в просторі реальним фізичним кордоном або уявною математичною поверхнею сукупність матеріальних або віртуальних об'єктів, між якими існують взаємозв'язки і які можуть взаємодіяти між собою при зміні зовнішніх параметрів у навколишньому середовищі. Зазначимо, що за терміном екосистема та його визначення велися широкі дискусії [159; 160; 162; 163]. Відкладаючи подробиці та не претендуючи на точність формулювань, пояснимо смисловий зміст терміна "екосистема". Відразу зазначимо, що він не містить штучно створені об'єкти, які можуть бути узагальнені поняттям "техносфера" ("технос" з грецької – ремесло чи в сучасному розумінні – виробництво). У зв'язку з тим, що різні види мікроорганізмів, тварин і рослин утворюють конкретні угруповання, то виділяють їх поняттям біоценоз, тобто такі угруповання, які мають високий рівень організації взаємовідносин і зв'язків між окремими особинами, популяціями і видами. Будь-який біоценоз характеризується можливістю розвитку в просторі на деякому неорганічному субстраті (основі, підкладці, речовині, предметі). Такий природний субстрат, зайнятий біоценозом, називають біотопом (*bios* з лат. – життя, *topos* – місце). Безперечно, що біотоп характеризується сукупністю ряду абіотичних чинників, наприклад, географічні та мінералогічні умови, сонячна радіація, швидкість вітру, температура, течія водного середовища, наявність газів та інших хімічних речовин у різних агрегатних станах. Фактично біотоп складає фізичну основу для біоценозу і разом з останнім є екосистемою, в якій проявляється взаємовплив біоценозу і біотопу один на одного у зв'язку з безперервним обміном речовиною й енергією не тільки між собою, але і в середині кожного з них.

На ранніх стадіях розвитку людського суспільства людина, як і будь-який інший живий організм, є звичайним елементом біоценозу єдиної екосистеми. У процесі (з лат. – просування, зміна послідовних станів) еволюції відбувалося освоєння людиною нових технологій: від механічних і складальних до хімічних (які змінюють склад і структуру вихідних речовин) та комбінованих (електрохімічні, радіаційно-хімічні, біохімічні та ін.). Отже, створювалися і нові технічні засоби: механізми, агрегати, машини, роботи і т. п. Спільнота людей набула величезних можливостей

для впливу на інші елементи екосистеми, стала доміантною і в біоценозі і в біотопі, більш повномасштабно поширюючи свою діяльність на середовище існування інших видів організмів, у тому числі і за рахунок зміни їх внутрішньої структури, складу і функцій окремих елементів будови (агрохімічні технології, медико-фармацевтична промисловість, селекція рослин і тварин, генна інженерія та ін.). Зараз ні у кого немає сумнівів, що, створюючи техносферу, людство не пізнало в достатній мірі взаємовідносини, взаємозалежності і причинні зв'язки між усіма елементами біосфери. Саме із цієї причини ми не можемо прогнозувати наслідки своєї техніко-технологічної діяльності та контролювати збалансованість елементарних фрагментів біосфери для збереження функціональної цілісності (рис. 1.1).

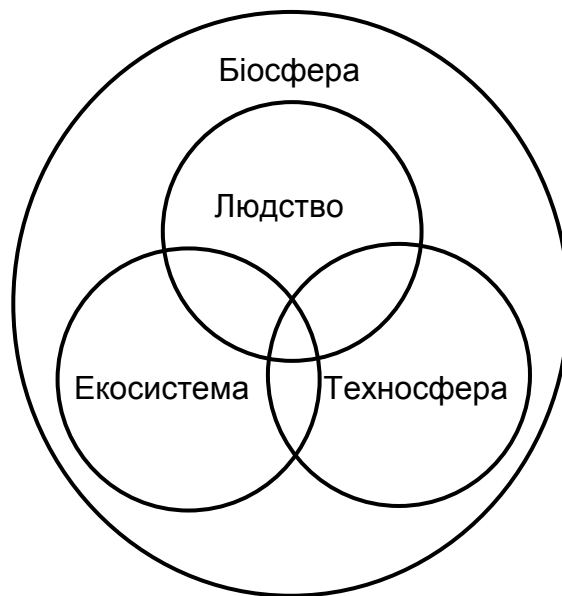


Рис. 1.1. Елементарні фрагменти біосфери та їхній взаємозв'язок

Найбільш значних результатів зі встановлення закономірностей складних взаємодій у системі "людина – технічний засіб" слід очікувати від розвитку такого наукового напрямку, як ергономіка. У пізнанні технічних процесів більш значущу роль відводять хімічному матеріалознавству та поглибленню фізико-хімічних знань, перш за все, отриманих на перетині наук про будову неорганічних речовин та біологічних об'єктів. Споконвічно, природничі такі науки, як ботаніка, біологія, географія, мінералогія, медицина, ветеринарія та інші, значною мірою перенаправляються на вирішення екологічних проблем різних екосистем. Взаємодії окремих елементів

екосистеми і техносфери вивчаються промисловою екологією і фахівцями різних областей екологічної безпеки. В окремий міждисциплінарний науковий напрямок виділилася синергетика (з лат. – спільна дія). Вона досліджує найбільш складні природні та штучні системи, здатні в умовах нерівноважності до самоорганізації процесів взаємного обміну речовиною, енергією та інформацією між елементами і навколишнім середовищем. Саме явища упорядкування й утворення просторово-часових структур характеризують Природу як систему, яка самоорганізується та здатна найбільш ефективно підтримувати свою функціональну цілісність за рахунок адаптації складу, структури і властивостей окремих елементів до змін параметрів зовнішніх впливів. Для подібних систем Нобелівський лауреат (1977 р.) Ілля Пригожин запропонував використовувати назву "дисипативні структури" [117]. Зберегти функціональну цілісність надскладної системи – біосфери Землі, не допускати впливів на її елементи і взаємозв'язки, що призводять до незворотних наслідків та деградації їх складу і структури – глобальна мета людського суспільства на сучасному етапі розвитку. Безумовно, що досягнення цієї мети вимагає вирішення багатопланових проблем у різних наукових напрямках, в яких можна виділити найважливіші аспекти: техніко-економічний, екологічний і соціально-політичний. Перший із аспектів взаємопов'язаний із використанням і виснаженням природних ресурсів, другий – із забрудненням середовища проживання людини і станом екосистем, а третій – визначається значимістю питань охорони природи для всіх держав і будь-яких верств населення.

Фундаментальні знання сучасних напрямів хімії, ергономіки та екології мають вирішальний вплив на збалансованість усіх фрагментів біосфери в ході подальшої еволюції людства. Рішення основних проблем співіснування людей із природою і технікою неможливо без знання основних положень і методів моделювання процесів (послідовна зміна станів матеріальних об'єктів) у зазначених галузях науки. У цей час напрацьовано безліч ефективних для практичного застосування методів, які продовжують створюватися і вдосконалюватися на основі сучасної методології та використанням основних положень системного аналізу, математики, можливостей передових комп'ютерних технологій, у тому числі для імітаційного моделювання та моніторингу [32; 37; 52; 63; 77; 80; 84; 85; 96; 101; 147; 175; 180; 185; 187].

1.2. Відображення об'єктів і процесів у моделях

Виділення людини розумної (*homo sapiens*) із звіроподібної істоти відбувалося за рахунок формування образного мислення. Протягом усієї еволюції люди використовували концепцію образу, моделі і прагнули виразити й уявити за їх допомогою абстрактні поняття (ідеї), реальні матеріальні об'єкти та їх рух у просторі і часі (явища, процеси). Міміка, жести, слова, рисунки, літери, звуки сигнальних інструментів та інші відображення природних об'єктів і явищ сприяли вдосконаленню поняття "модель" і зіграли важливу роль у соціальному становленні людини, розвитку культури, мистецтва і практичної діяльності суспільства. Прогрес науки і техніки нерозривно пов'язаний із розвитком здібностей людини створювати моделі природних явищ та об'єктів. Найважливішою складовою наукової методології досліджень природних і штучних систем є побудова й застосування різних моделей. Моделі можуть бути різноманітні за формою і сутністю, але повинні бути адекватними, тобто максимально точно відображати реальний об'єкт дослідження. Однак жодна модель не дозволяє вичерпно описати реальний об'єкт в якісному і кількісному відношеннях. Тому під час досліджень використовують поетапне моделювання – оптимізацію. До того ж на початковому етапі вдається більш чи менш точне відображення найбільш значущих властивостей досліджуваних об'єктів або процесів, а по можливості додаткових досліджень і накопичення відомостей – точність моделі підвищується. Разом із підвищенням точності зростає і складність застосовуваної моделі, а сама модель набуває приватного характеру, що обмежує її практичне застосування [18; 37; 52; 63; 80; 86; 93; 102; 166; 172].

Дослідник досить часто змушений обмежуватися якісною відповідністю моделі відтвореному об'єкту або процесу. Однак навіть під час такого якісного опису об'єкта, що містить основні змінні та головні риси характеру взаємовпливу різних параметрів, в тому числі екстремальні властивості, вдається отримати цінну інформацію для прогнозування поведінки об'єкта і скорочення кількості подальших експериментів. Відповідно, можуть бути знижені витрати на дорогі хімічні реактиви, індикатори, датчики, дослідницьку та вимірювальну апаратуру і т. п.

Загальноприйнятої класифікації моделей не існує через різноманіття досліджуваних об'єктів і явищ, які передбачають варіативність характерних

ознак і підходів. Водночас безальтернативна думка про побудову всіх видів моделей із застосуванням поняття подібності. Причому подібності не тільки масштабного і топологічного, а які враховують усі можливі елементи сучасної теорії симетрії та ефекту від їх перетворень [93]. Важливість цього уточнення може бути проілюстрована кількома простими прикладами. У живописі художник-портретист не прагне "клонувати" зображений об'єкт, а лише відображає найбільш суттєві його риси і навіть шляхом навмисного спотворення окремих елементів для передачі глядачеві істотних з його точки зору аспектів поведінки, манери, статусу і т. п. У живописі під моделлю розуміють не портрет, а суб'єкт, який зображено, тобто в протилежному сенсі, ніж в науці! Водночас навмисно спрощене відтворення, зображення об'єкта і в науці, і в живописі однозначно визначається терміном "ескіз". У сучасній економіці аналітик, який бажає отримати об'єктивну кількісну даних про положення на ринку, може не звернути належної уваги на дрібні деталі, "пригладити" графіки в спеціальних журнальних статтях для того, щоб розгледіти під зовнішньою оболонкою графічних форм реальність, яку він вважає найбільш важливою. Ринок – дуже складна система, і під час моделювання будь-яких його процесів та об'єктів нехтування навіть найдрібнішими деталями може обернутися реалізацією критичних явищ. Ризики в оцінюванні ринкових процесів можуть виникнути і за рахунок застосування спрощених і застарілих моделей. Так, на початку XXI ст. збанкрутували найбільші інвестиційні корпорації і виникла фінансова криза, яка поставила під сумнів ті моделі, які застосовували консультанти, – теорію випадкових блукань, криву розподілу Гаусса, модель Марковіца, формулу Блека – Шольца та ін. Провідним економістам стало зрозуміло, що моделювання не повинно бути статичним, моделі повинні змінюватися відповідно до зовнішніх обставин, потрібно розвивати альтернативні теорії (теорії фракталів, детермінованого хаосу та ін.) і готувати компетентних економістів [114; 131]. Російські трейдери вже застосовують теоретичні основи фракталів Вільямса, і вони входять до списку індикаторів відомої платформи *Meta Trader 4*.

Певна річ, що один з об'єктів або явищ, між якими існує який-небудь вид подібності, може бути названий об'єктом, а інший – моделлю. Процес моделювання фактично визначається вивченням властивостей об'єкта шляхом аналізу подібних властивостей моделі. У самому загальному

випадку всі моделі можуть бути розділені на реальні і віртуальні. Приклади реальних моделей сучасна людина постійно зустрічає в буденному житті – шаблони, кліше, штампи, макети, зразки, копії, зліпки, фотографії, стрази, імітації і т. п. Безперечно, що частина з таких моделей не може бути виготовлена без початкового створення віртуальних моделей – попередниками технічних засобів, що полегшують відображення об'єктів у матеріальні об'єкти – моделі.

Уявні образи, поняття та умовиводи формуються мозком людини, що є вищим продуктом його нервово-психічної діяльності. У ході своєї еволюції людина навчилася показувати в досліджуваних об'єктах смисловою форму (формалізований опис фізичної природи об'єкта), аналітичний бік (вираз формалізованого опису в граматичній формі, у вигляді хімічних формул, музичних нот, електричних схем, математичних рівнянь та інших функціональних співвідношень між властивостями моделі) і обчислювальний бік (певний порядок дій, моделюючий алгоритм над функціональними співвідношеннями між властивостями моделі для знаходження її параметрів, тобто для забезпечення можливості власне моделювання). Виходячи із загальних філософських позицій, моделювання є ефективним засобом пізнання всього існуючого, і в ХХ ст. воно стало універсальним методом наукових досліджень, який успішно застосовується для розроблення у технічному конструюванні, фізиці, хімії, астрономії, фармацевтиці, біології, будівництві та інших сферах людської діяльності. Сучасне поняття моделювання містить процеси розроблення, побудови та дослідження моделей із використанням абстракцій, висновків і наукових гіпотез. В якості методу наукового пізнання ефект від моделювання є особливо значущим у випадках, коли об'єкт дослідження недосяжний за своєю природою, коли об'єкт не існує в природі і слід визначитися з оптимальною стратегією його створення, коли об'єкт дослідження вимагає дуже тривалого часу спостереження або істотних витрат матеріально-технічних засобів. В ергономіці, екології та хімічній технології моделі використовують для опису складу речовини або біологічного угруповання, структури і поведінки досліджуваної системи. Таким чином, модель відображає характеристики об'єкта досліджень (елементи, взаємопов'язані в структуру, функціональні властивості) і є певним умовним образом об'єкта. Зокрема, структуру виробничих процесів раціонально відображати графічними моделями у вигляді технологічної схеми.

До того ж вибір стадії схеми здійснює технолог або група фахівців, тобто завжди має місце певна частка суб'єктивізму під час оцінювання стадій і необхідності їх відображення в моделі – технологічній схемі. Спрощеність моделі відносно оригіналу або реального процесу є характерною рисою для будь-яких способів моделювання. Але модель лише в необхідному для дослідження об'єкта ступені точності і необхідній кількості співвідношень між елементами відображає об'єкт. Відповідно модель є таким описом складної системи, що відображає певну групу її складових частин і властивостей, які передбачають закономірну поведінку в різних умовах зовнішнього середовища. Залежно від цілей дослідження фахівці можуть будувати різні моделі одного і того самого об'єкта. Тому моделювання можна розглядати як процес дослідження реальних систем шляхом послідовного заміщення одного об'єкта іншим з метою отримання найбільш значущої інформації про властивості об'єкта – оригінала за рахунок об'єкта – моделі.

Загалом моделювання містить побудову моделі, вивчення її властивостей та перенесення (зіставлення) отриманих відомостей на реальний об'єкт [154]. Відповідно до основної функції моделі, як способу пізнання, розрізняють й інші похідні функції:

- спосіб осмислення реальності;
- спосіб спілкування;
- спосіб навчання;
- спосіб прогнозування;
- спосіб планування експериментів;
- спосіб аналізу експериментальних даних та ін.

В якості способу осмислення реальності модель дозволяє упорядкувати і певною мірою формувати первинні і не цілком чіткі уявлення про ті чи інші явища і об'єкти. У самому процесі моделювання до того ж виявляються і набувають визначеності взаємозв'язки між елементами досліджуваного об'єкта, послідовність необхідних дій та кількість матеріально-енергетичних ресурсів для реалізації моделі. Побудова моделей дозволяє більш точно описувати складні поняття, відповідно уточнюють і словесні (вербальні) форми для більш стислого викладення найбільш істотних взаємозв'язків причинно-наслідкових типів, що характеризують структуру і функції системи. Тому моделювання сприяє спілкуванню і розширює його межі, а в якості способу навчання на перший план висуваються

можливості імітації різних реальних процесів на моделях. Особливо важлива ця функція для імітації критичних явищ із метою уникнути можливості повторення помилок у параметрах проведення процесів, забезпечити безпеку об'єкта або масштабної екосистеми. Сучасна педагогіка вдається до практики побудови моделей для підвищення ефективності навчання. До того ж широко використовуються тренінги та різні види ігрового навчання. Для досягнення цілей в ергономіці, екології та хіміко-технологічній практиці, безперечно, важливі останні з перерахованих функцій моделей, тому що вони дозволяють застосовувати модель у контурі управління цими складними системами.

Відсутність єдиної класифікації моделей через різноманітність їх ознак не обмежує можливостей їх характеристик за ступенем повноти відображення властивостей досліджуваного об'єкта, за ступенем визначеності моделі, за ступенем обмеження допустимої області зміни параметрів, за способами опису моделі, моделі залежності від часу, за природою моделей. Залежно від того, наскільки якісно і кількісно точно модель відображає об'єкт або процес (тобто за ступенем повноти відображення властивостей), виділяють *повні*, *неповні* і *наближені* моделі. За ступенем визначеності моделі поділяють на: *детерміновані* (у разі конкретно заданих параметрів на виході моделі фіксується тільки один результат); *стохастичні* (умови функціонування та характеристики стану системи в моделі відображаються випадковими величинами, які підпорядковуються ймовірнісним закономірностям) та *невизначені* (ймовірність розподілу значень параметрів і характеристик стану не відомі). За обмеженнями на область зміни параметрів моделі поділяють на *дискретні*, *з безперервними змінами в значеннях параметрів* і *змішаного типу*. Спосіб опису моделі може не містити явно сформульованого критерію оцінювання якості та ефективності її функціонування, що характерно для дескриптивних моделей. В іншому випадку, коли задані нормальні значення для критеріального оцінювання, моделі класифікують як *нормативні*. Причому нормативні моделі можна використовувати в якості дескриптивних, але дескриптивні моделі в якості нормативних застосувати неможливо. За чинником часу моделі можуть бути розділені на *статичні* (всі параметри, елементи та взаємозв'язки приведені до одного моменту часу відображуваного об'єкта або процесу) і *динамічні*, у яких значення параметрів і характеристик стану системи в явному вигляді

залежать від часу. Динамічні моделі можуть зводитися до послідовності статичних моделей із так званим рекурентним типом зв'язків між ними [154]. Природа моделей значною мірою визначає їх склад, і за цим принципом класифікації можна виділити два основних класи моделей: *матеріальні* (речові або реальні) і *абстрактні* (знакові, символічні або вербальні). У кожному з класів можуть виділятися додаткові класифікаційні ознаки та буде спостерігатися подальше ієрархічне розширення класифікації. Реальні моделі важливі для натурних експериментів, збору лабораторних та експериментальних установок, макетів. Часто натуральні моделі досліджують реальні системи на їх окремих частинах (наприклад, відпрацьовування моделі управління хіміко-технологічними підприємствами на групі устаткування) або навіть на всій системі (до того ж, як правило, обмежують області варіювання параметрів моделі). Аналогові реальні моделі також застосовують у дослідницькій практиці, наприклад, розподіл тріщин у зразках у разі їх складного навантаження вивчають на аналогових електричних схемах [127]. Знакові моделі є предметом вивчення спеціальної галузі знань – семіотики, в якій виділяють три групи відносин [154]:

- *синтаксис* (побудова, порядок) – відносини між різними знаками, що дозволяють побудувати з них більш складні конструкції;
- *семантика* (позначення) – відносини між знаками і тим, що вони визначають, тобто смисловий зміст знаків;
- *прагматика* (дія) – відносини між знаками і тими, хто їх застосовує, тобто понятійний зміст знаків.

Серед знакових моделей особлива роль у будь-яких галузях знань приділяється математичним моделям [151], які також можуть розрізнятися класифікаційними ознаками, але безперечно можуть бути виведені аналітичні та імітаційні математичні моделі. Останні передбачають застосування до них обчислювальної техніки і активно розвиваються в межах ІТ-технологій [151].

Важливо підкреслити, що диференціювання всіх областей науки обов'язково пов'язано зі специфікою у розгляді взаємовідносин між об'єктами дослідження. Водночас багато взаємовідносин у різних галузях науки мають загальні закономірності, хоча і не завжди явні, вони аналогічні один одному і можуть бути описані в межах єдиної математичної моделі. Так, у взаєминах біологічних угруповань (біоценозів) різних видів організмів застосовують класифікацію:

1. Хижацтво (+, -): один вид ("хижак") розвивається за рахунок пригнічення розвитку іншого виду ("жертва").
2. Конкуренція (-, -): кожен із видів пригнічує розвиток іншого.
3. Симбіоз (+, +): кожен із видів прискорює розвиток іншого.
4. Коменсалізм (+, 0): один вид отримує користь у розвитку, не спричиняючи впливу на інший.

У цій класифікації символами "+", "-" і "0" відзначені тенденції видів до розвитку, деградації й до стабільного в часі існування відповідно. Аналогічні до цих класифікаційних ознак взаємини між хімічними речовинами в реакційноздатному середовищі. У термодинаміці хімічної взаємодії про можливість реакції в прямому напрямку (зліва – направо у формульному записі) судять за знаком і модулем значення зміни енергії Гібса (ΔG), що залежить від температури (Т). Від'ємне значення ΔG вказує на можливість розвитку реакції, а чим більше це значення за модулем, тим вище термодинамічна ймовірність взаємодії (стан системи сильно відхилений від рівноважного ($\Delta G = 0$), до якого система прагне). Відповідно, на рис. 1.1 – 1.4 подано чотири можливих типи взаємин між двома хімічними реакціями в реакційноздатній системі (залежності $\Delta G = f(T)$ спрощені до лінійних).

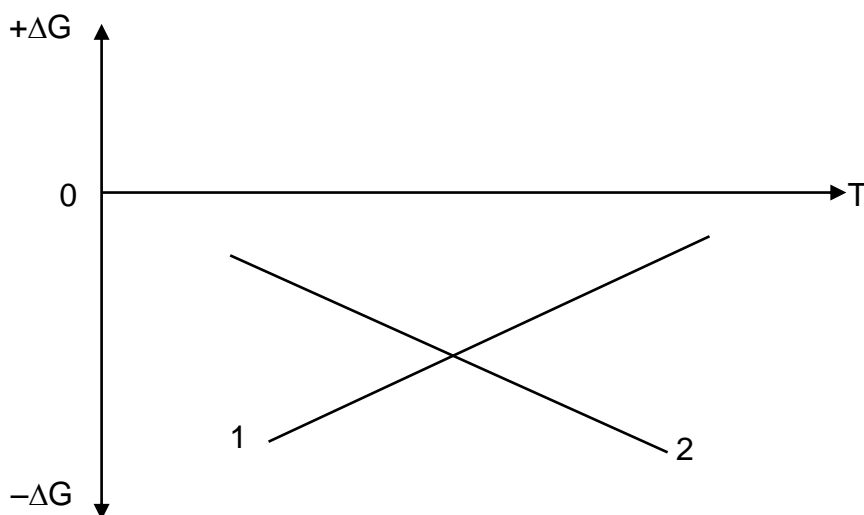


Рис. 1.1. Аналогія відносин "хижацтво" в розвитку хімічних реакцій 1, 2

Цей приклад є наочним для вказівки на наявність єдності в закономірностях розвитку різних за суттю процесів, які можуть бути відображені аналогічними графічними і математичними моделями.

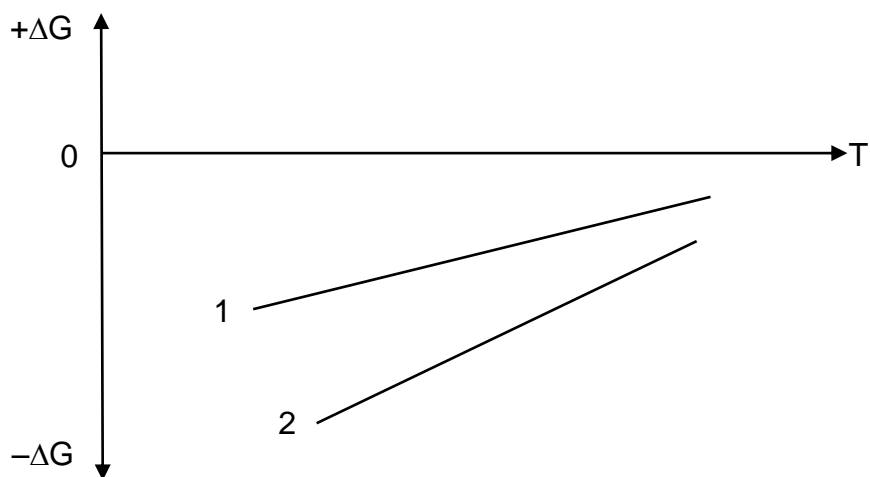


Рис. 1.2. Аналогія відносин "конкуренція" в розвитку хімічних реакцій 1, 2

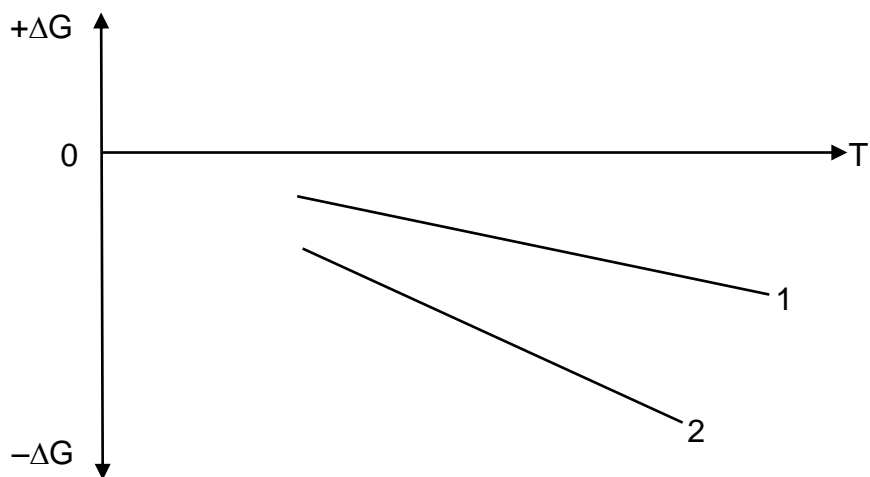


Рис. 1.3. Аналогія відносин "симбіоз" в розвитку хімічних реакцій 1, 2

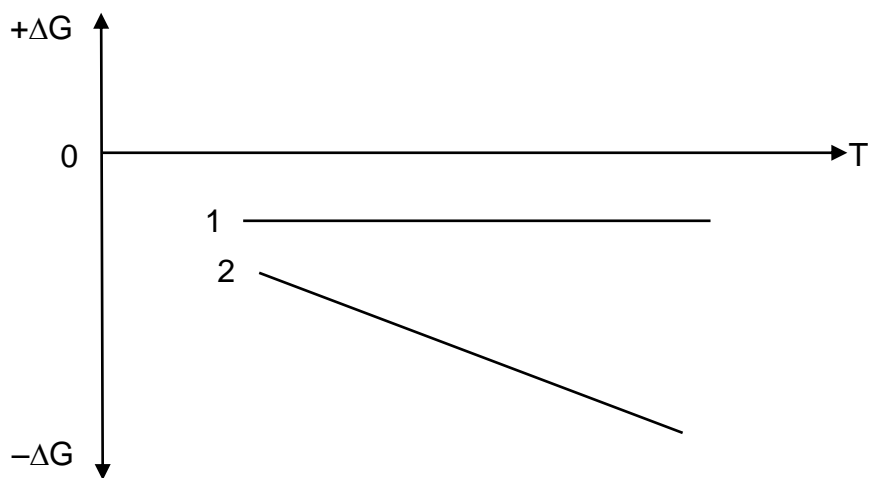


Рис. 1.4. Аналогія відносин "коменсалізм" в розвитку хімічних реакцій 1, 2

1.3. Принципи системного аналізу в розробленні моделей процесів

Під принципами розуміють деякі вихідні положення і правила пізнавальної діяльності, які здатні забезпечити найбільш раціональний напрям наукового пізнання без зазначення конкретної істини досліджуваного явища чи об'єкта. Фактично принципи виконують регуляторну функцію пізнавального процесу і виробляються на основі узагальнення досвіду роботи фахівців відповідного напрямку досліджень. Тому під час виконання будь-яких наукових досліджень важливо враховувати попередній досвід, обґрунтовано обирати необхідні принципи під час побудови конкретних моделей [12; 56; 106; 113; 124; 149; 155].

Під час розроблення моделей процесів складних природних і техногенних систем тільки експериментатор може вирішити, якими принципами системного аналізу слід керуватися і які властивості для порівняння моделі й оригіналу вибрати [93]. Серед безлічі відомих принципів, накопичених за всю історію еволюції людини, зазвичай керуються основними з них: принципом всебічності і єдності; взаємозв'язку; пропорційності; типізації; кінцевої мети; модульності; ієрархії; еквіфінальності; розвитку; децентралізації; невизначеності [93; 113; 124; 154; 155].

Принцип всебічності і єдності передбачає розгляд усіх об'єктів, що входять до системи, з урахуванням діючих на них чинників. Фактично модель складної системи слід складати, керуючись її зображенням ззовні, з боку, але розглядаючи її як ціле, і як сукупність усіх елементів з урахуванням системоутворюючих зв'язків.

Принцип взаємозв'язку вказує на наявність властивості неадитивності складних систем (емерджентність), тобто властивості системи не визначаються в повній мірі властивостями складових її елементів. Функціонування взаємопов'язаних елементів породжує нові функції, які відсутні у кожного окремого її елемента. Цей принцип іноді називають системним або інтегративним: досліджуючи кожен окремий елемент неможливо пізнати всю систему повністю через виникнення ефектів взаємодії, які ускладнюють всю систему і можуть забезпечувати синергетичний ефект, в тому числі з розвитком самоорганізуючих процесів.

Принцип пропорційності встановлює наявність взаємних пропорцій у систем та їх елементів, що дозволяє виділяти пріоритетні масштаби для найбільш адекватного відображення моделлю оригіналу.

Принцип типізації передбачає можливість застосування аналогії (з грецької – подібність) і гомології (з грецької – подоба) для виділення загальних закономірностей у функціях, структурах і методах опису моделей об'єктів і процесів.

Принцип кінцевої мети встановлює абсолютний пріоритет глобальної мети системи над проміжними її цілями або цілями окремих підсистем, груп елементів. Цей принцип включається практично у всі наукові дослідження, тому що узагальнює кілька більш приватних правил, підходів і конкретних методів. Для системного аналізу процесів необхідно поставити і чітко сформулювати мету досліджень. "Розмитість" мети вплине на правильність висновків за результатами досліджень. Аналіз усіх даних слід проводити на основі уявлення про кінцеві цілі досліджуваної системи, що дозволить виділяти критерії їх оцінювання і показники якості. Під час синтезу окремих елементів у систему або під час удосконалення яких-небудь частин досліджуваної системи слід виходити з позитивного впливу таких дій на досягнення кінцевої мети. Як правило, досліджувана експериментатором система є лише частиною більш складної штучної системи, мета функціонування якої задається.

Принцип модульності дозволяє ефективно знижувати рівень складності досліджуваної системи за рахунок її декомпозиції на окремі блоки, модулі і аналізувати її без зайвої деталізації, розглядаючи лише сукупність таких модулів і взаємозв'язків між ними. Фактично частини системи заміщуються з певним ступенем спрощення сукупністю входів і виходів модулів, абстрагуючись від функціональних особливостей поведінки елементів у їх складі.

Принцип ієрархії закладає доцільність знаходження в системі порядку підлеглості в характері зв'язків між її елементами, модулями, підсистемами та їх цілями. Традиційним під час застосування цього принципу є проведення аналізу системи, починаючи з модулів найбільш високого рівня ієрархії. Випадки, коли ієрархічність у структурі, складі, зв'язках і функціях системи не виявляється, більш складні, так як дослідники стикаються із труднощами через необхідність вибору і обґрунтування порядку розгляду складу і взаємозв'язків системи, що впливає на напрямок конкретизації своїх уявлень.

Принцип еквіфінальності акцентує увагу дослідника на визначення стійкості системи відносно до варіацій вихідних і граничних умов, за яких

система здатна досягати потрібного кінцевого стану незалежно від часу, фактично тільки за рахунок власних характеристик.

Принцип розвитку враховує необхідність побудови моделей, що охоплюють мінливість системи, її здатність до перебудови структурно-функціональних можливостей, виникнення нових елементів і зникнення існуючих, накопичення або виснаження маси, енергії та інформації. До того ж перевага повинна надаватися функціям, а не структурі, так як один і той самий набір елементів у певній мірі структурної впорядкованості здатний забезпечувати виконання системою різних функцій. Зворотна ж ситуація не завжди можлива. Практична цінність цього принципу полягає в тому, що в разі необхідності надати системі нові функціональні можливості слід змінювати її структуру, а не намагатися в межах старої структури системи створювати не властиві їй функції. Модернізація структури повинна передбачати узгодженість нових елементів з існуючими та виваженість передісторії розвитку. Цей принцип характеризує здатність систем до вдосконалення зі збереженням основних якісних особливостей і певного рівня універсальності у функціональних можливостях системи.

Принцип децентралізації передбачає виявлення мінімального набору керуючих параметрів для гарантованого досягнення системою поставленої мети. Ступінь централізації функціональної спроможності системи досліднику слід передбачати досить низькою, що знижує кількість і рівень керуючих впливів. Цей принцип характеризує керованість системою, що досягається за рахунок раціоналізації співвідношення впливу зовнішніх чинників і відгуком елементів, їх сумарним виробництвом.

Принцип невизначеності важливий для планування тактичних можливостей розвитку системи та визначення стратегії її застосування з урахуванням впливу випадкових чинників. Цей принцип допускає застосування на практиці систем, в яких склад, структура, функції і зовнішній вплив не повною мірою визначені. Для зниження рівня загроз від прояву у системі чинника випадковості застосовують ризик – орієнтований підхід до моделювання різних ситуацій.

Охарактеризовані в загальних рисах принципи не охоплюють усього переліку, узагальнень досвіду роботи фахівців різного профілю з дослідження складних систем та розроблення їхніх моделей. Водночас вони володіють необхідним ступенем універсальності, можуть застосовуватися

під час аналізу будь-яких типів систем і поповнюватися новими принципами одночасно з накопиченням системно-аналітичного досвіду у експериментаторів. Під час дослідження конкретного об'єкта або процесу застосовують найбільш важливі з точки зору експериментатора принципи і визначають послідовність етапів, зміст майбутніх робіт із застосуванням різноманітних емпіричних і наукових методів та прийомів залежно від складності завдань, що вирішуються. Для ергономічних, екологічних і хіміко-технологічних системних досліджень проблем різного рівня складності найбільш важливими етапами є наступні:

- ставлення завдання й аналіз цілей;
- ресурсний аналіз зі встановленням обмежень;
- аналіз альтернатив;
- аналіз домінантності критеріїв;
- аналіз взаємозв'язків і дій (багатомодульні дослідження);
- оцінювання ризиків та управління ризиками;
- розроблення концептуальних моделей і рекомендацій.

Безперечно, що під час розроблення моделей процесів ергономічного, екологічного або хіміко-технологічного типу, будь-які дослідження слід починати з формування й опису проблемної ситуації, розширення її до проблематики, тобто виявлення інших проблем пов'язаних із нею та без урахування яких вона не може бути вирішена [151; 154].

Розділ 2. Наукові основи і пріоритети моделей в ергономіці, екології та хімічній технології

2.1. Елементарні математичні функції та їх застосування

У всіх сферах життєдіяльності людей цифри і числа займають особливу роль, надаючи властивість конкретності будь-яким моделям, навіть вербальним. У різноманітних природних і технологічних процесах одні величини змінюються, тобто змінюються їх числові значення, а інші – характеризуються одним і тим самим чисельним значенням, залишаючись без змін. У математиці, якщо постійна величина не змінюється в якому-небудь процесі лише в певних умовах, її називають параметром, а якщо не змінюється за будь-яких умов, то константою або абсолютною постійною [107; 191]. Безліч усіх значень змінної величини або параметра називають областю значень цієї величини. Змінна величина називається зростаючою, якщо кожне наступне її значення більше попереднього. Відповідно змінна спадає в разі, коли її наступне значення менше попереднього.

У природних і техногенних системах змінні величини, що характеризують окремі елементи не існують ізольовано, без взаємозв'язку з іншими неорганічними (абіотичними) або біологічними (біотичними) величинами. Математика дозволяє розглядати подібні взаємозв'язки, абстрагуючись від конкретизації таких систем за допомогою поняття "функціональна залежність" або більш коротко – функцій [107; 191].

Якщо кожному значенню змінної (x) з усієї області її значень ставиться у відповідність із визначеним законом значення змінної (y), то говорять про заданість функції: $y = f(x)$, де змінну x називають аргументом, y – функцією, а буква f означає характеристику функції. Для аргументу і характеристики функції можуть використовуватися й інші позначення без втрати загального сенсу поняття: застосувавши до значення аргументу (x) певний закон (f) буде встановлено відповідне значення функції (y).

Функції можуть бути задані в аналітичному вигляді (2.1):

$$y = \frac{1}{2}x^2 - 7, \quad (2.1)$$

у вигляді таблиць значень аргументу x і відповідних їм значень функції в табл. 2.1; у вигляді графіка функції $y = f(x)$, як множини точок, координати (x, y) задовольняють це рівняння $y = f(x)$ (рис. 2.1).

Таблиця 2.1

Таблиця заданої функції $y = f(x)$

x	0	2	-2	4	-4	6	-6
y	-7	-5	-5	1	1	11	11

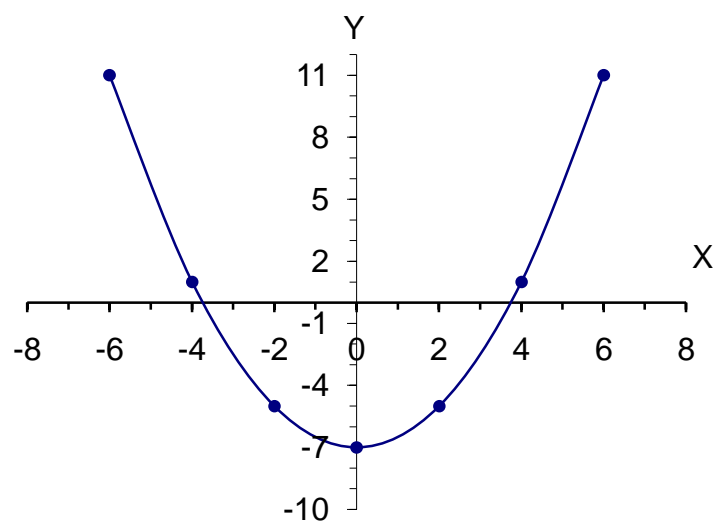


Рис. 2.1. Графічно задана функція $y = f(x)$

Елементарні математичні функції відображають найбільш прості залежності між двома змінними величинами і саме через свою простоту найбільш часто застосовуються для моделювання різноманітних об'єктів і процесів. Лінійну функцію в аналітичній формі записують:

$$y = kx + b \quad (2.2)$$

або

$$ax + by + c = 0. \quad (2.3)$$

Графіком цієї функції є пряма лінія, де числа k , b або a , b , c називаються параметрами, причому параметр k має спеціальну назву – кутовий

коефіцієнт, так як характеризує нахил прямої до осі Ox ($k = \operatorname{tg}\alpha$, де α – кут між прямою і віссю Ox). Параметр (2.3) показує на осі Oy відрізок, що відсікається, від початку координат, отже, якщо $b = 0$ (в рівнянні (2.3) $c = 0$, відповідно), то пряма проходить через початок координат (рис. 2.2). Очевидно, що при $a = 0$ в рівнянні (2.3) пряма буде паралельна осі Ox : $by + c = 0$ при $y = -c / b = y_1$. Відповідно, якщо $b = 0$, то пряма буде паралельна осі Oy : $ax + c = 0$ або $x = -c / a = x_1$ (рис. 2.2).

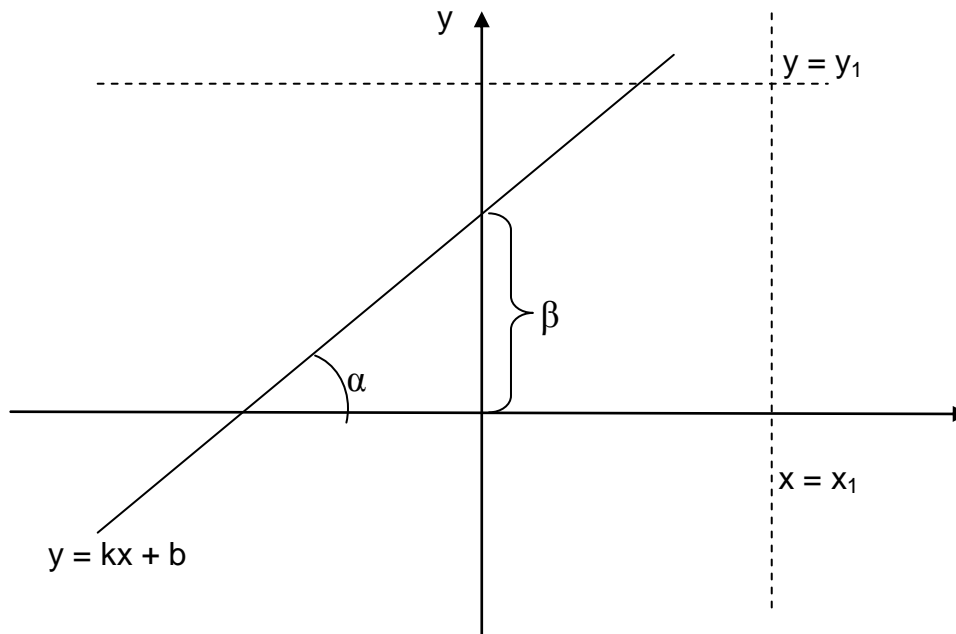


Рис. 2.2. Графік лінійної функції

Лінійна функція дуже наочна і легко сприймається, що обумовлює її застосування для моделювання навіть складних процесів, використовуючи розбиття процесу на кілька етапів, де лінійна залежність дає незначну похибку. У такому разі отримують дробову кусковолінійну модель процесу. Наприклад, на певних проміжках часу вага риб лінійно залежить від їх віку. На лінійні ділянки можуть бути роздроблені багато залежностей швидкості розчинення хімічних речовин від часу дії розчинника і з невеликим відхиленням може застосовуватися дробова кусковолінійна модель.

Прямо пропорційна залежність між змінними величинами x і y означає, що їх співвідношення протягом певного часу залишається незмінним, тобто:

$$y / x = k \text{ або } y = kx. \quad (2.4)$$

Порівнюючи рівняння (2.4) і (2.2), зазначимо, що прямопропорційна залежність є приватним випадком лінійної функції, якщо значення параметра (2.2) $b = 0$. Відповідно графік прямопропорційної залежності – пряма, що проходить через початок координат. Фактично будь-яка пряма, що проходить через точку $M_0(x_0, y_0)$ з координатами x_0 і y_0 відображає прямо пропорційну залежність:

$$y - y_0 = k(x - x_0), \quad (2.5)$$

де k – коефіцієнт пропорційності і кутовий коефіцієнт.

Якщо пряма проходить через дві точки $M_1(x_1, y_1)$ і $M_2(x_2, y_2)$, то рівняння прямої має вигляд:

$$y - y_0 = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}(x - x_1), \quad (2.6)$$

де кутовий коефіцієнт або коефіцієнт пропорційності $k = (y_2 - y_1) / (x_2 - x_1)$.

Обернено пропорційна залежність між двома змінними x і y , означає, що збільшення (зменшення) одного з них у кілька разів приводить до зменшення (збільшення) іншої у стільки ж разів, або, інакше кажучи, що добуток цих змінних залишається величиною постійною: $xy = k$. Аналітична форма запису цієї функції більш очевидно відображає пропорційну залежність:

$$y = k / x. \quad (2.7)$$

Графіком (2.7) є рівнобічна гіпербола, а більш загальний вигляд цієї функції відображаються зміщеною відносно центру координат гіперболою (рис. 2.3):

$$y = \frac{k}{x - a} + b, \quad (2.8)$$

де параметри a , b відображають величини зміщення відносно осей координат Oy і Ox відповідно.

У разі застосування знака постійної величини k на зворотний, графік гіперболи буде симетричний відносно раніше побудованого з формули (2.8) (пунктир на рис. 2.3):

$$y = \frac{-k}{x - a} + b, \quad (2.9)$$

Гіперболічна залежність (2.9) застосовується для моделювання міжвидових відносин в екології, зниження рівня рідин під час розгерметизації резервуарів і безлічі інших процесів у природних і техногенних системах.

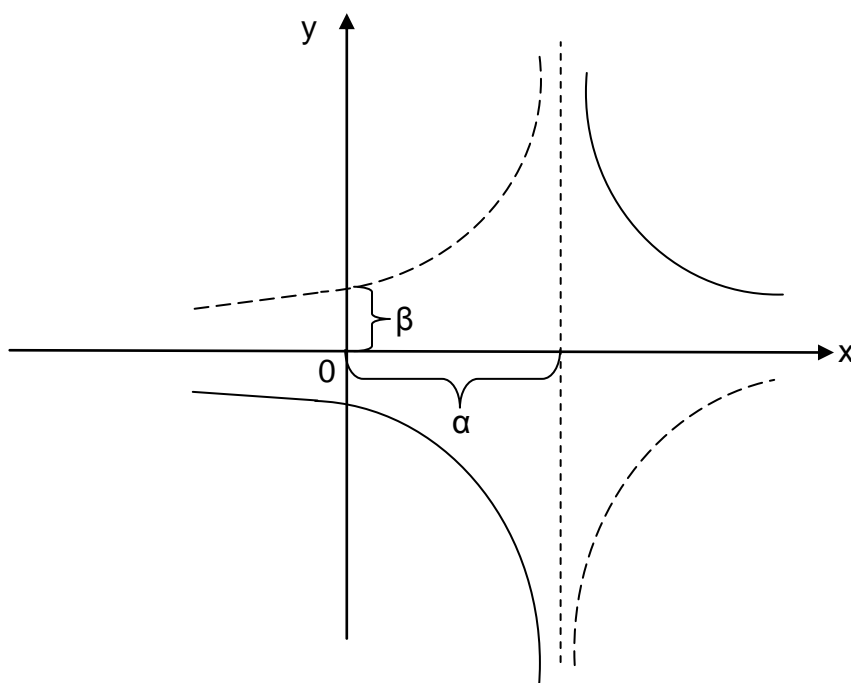


Рис. 2.3. Оберненопропорційна (гіперболічна залежність) для функцій (2.8), (2.9)

Аналогічно тому, що прямопропорційна залежність є приватним випадком лінійної функції, оберненопропорційна залежність є приватним випадком дрібно лінійної функції:

$$y = \frac{ax + b}{cx + d}, \quad (2.10)$$

де a, b, c, d – постійні величини (параметри).

Функція (2.10) визначена при всіх значеннях x , крім $x = -d / c$, так як знаменник не може дорівнювати нулю. При $c = 0$ функція (2.10) перетворюється в лінійну:

$$y = \frac{ax + b}{d} = \frac{a}{d}x + \frac{b}{d}. \quad (2.11)$$

Не викликає складності привести до спільного знаменника праву частину функції (2.8) і переконатися, що вона набуде вигляду (2.10). Відповідно, функцію (2.10) можна привести до вигляду (2.8):

$$y = \frac{ax + b}{cx + d} = \frac{a}{c} + \frac{b - \frac{ad}{c}}{cx + d}. \quad (2.12)$$

Графіком дрібно лінійної функції (2.12), що виражається обернено пропорційною залежністю, є гіпербола, яка зміщена щодо осі Oy на величину $(-d / c)$ і відносно осі Ox на величину $-(a / c)$.

Найбільш відома в екології, біології гіпербола Міхаеліса (рис. 2.4), яку в аналітичній формі називають рівнянням Міхаеліса – Ментен:

$$V = \frac{V_{\max} \cdot S}{K_m + S}, \quad (2.13)$$

де V_{\max} – максимальна швидкість поглинання субстрату (різних корисних речовин),

K_m – постійна Міхаеліса, рівна такій концентрації субстрату, за якої швидкість поглинання досягає половини максимальної швидкості, тобто коли $V = V \cdot 0,5 = 0,5 \cdot V_{\max}$.

У разі необмеженого зростання кількості (концентрації) субстрату ($S \rightarrow \infty$), швидкість його поглинання мікроорганізмами, які на ньому розвиваються, прагне до постійної величини $V = V_{\max}$ (на рис. 2.4 – горизонтальна пряма, яка в математиці має назву асимптота). Подібний вигляд залежності в хімічних технологіях також поширений і часто відмічається в процесах високотемпературного гетерогенного каталізу.

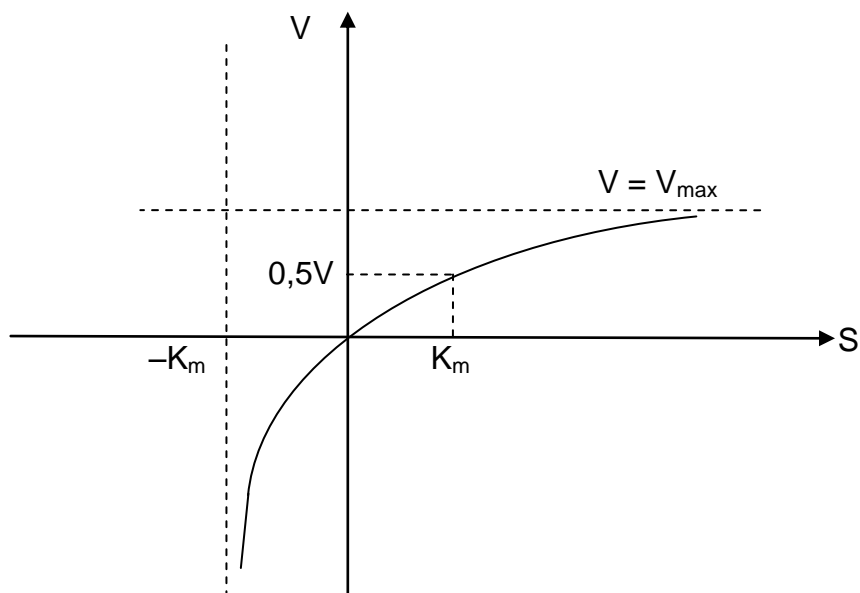


Рис. 2.4. Гіпербола Міхаеліса

Зокрема, швидкість реакційної взаємодії та каталітична активність (щодо конверсії NO) каталізатора на основі оксиду ванадію (V_2O_5), нанесеного на керамічний блочного типу носій, що має стільникову структуру, зростає подібно гіперболі Міхаеліса [139].

Степеневі функції в аналітичній формі запису відповідають рівнянню:

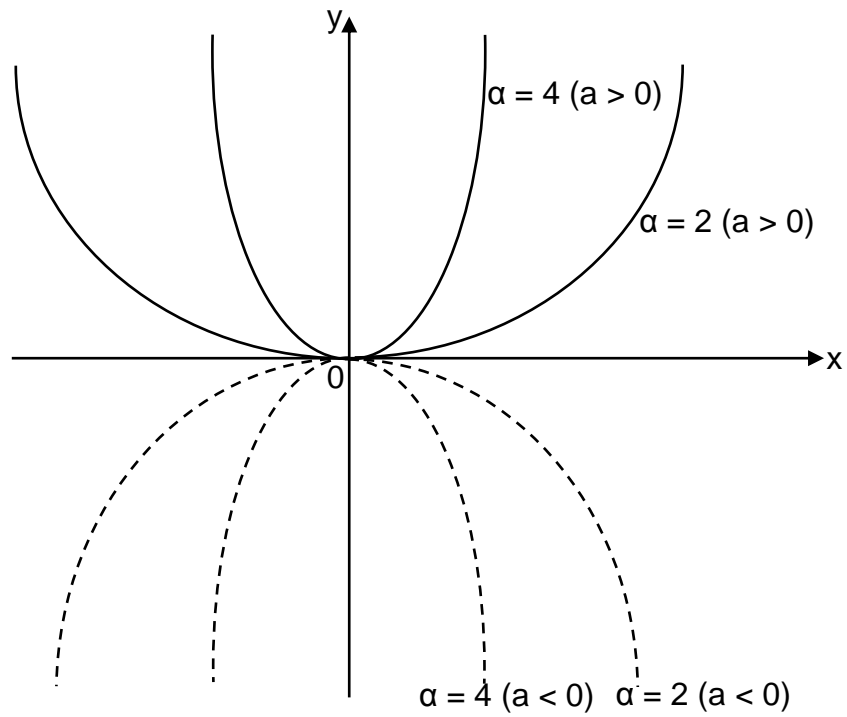
$$y = a \cdot x^\alpha, \quad (2.14)$$

де a – будь-яке стале число (параметр);

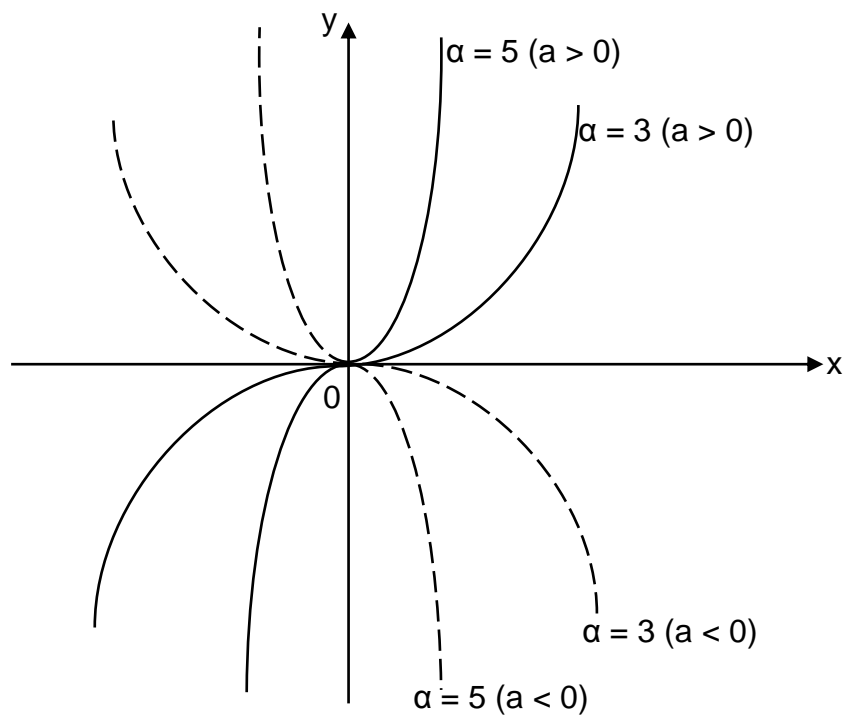
α – раціональне число (показник ступеня).

Найчастіше в ергономічних, екологічних і хіміко-технологічних моделях застосовують степеневі функції з позитивними цілочисельними показниками ступеня [32; 86; 96], тому що їх графіками є параболи. Для таких степеневих функцій характерне те, що їх гілки під час збільшення α лежать ближче до осі Ox . До того ж параболи можуть мати відмінності залежно від значень α і a :

- 1) $a > 0$, α – парне (рис. 2.5, гілки вгору);
- 2) $a < 0$, α – парне (рис. 2.5, гілки вниз);
- 3) $a > 0$, α – непарна (рис. 2.6, суцільні лінії);
- 4) $a < 0$, α – непарна (рис. 2.6, пунктир).



**Рис. 2.5. Параболи степеневих функцій
(парні показники ступеня)**



**Рис. 2.6. Параболи степеневих функцій
(непарні показники ступеня)**

У хімічних технологіях та екології степеневі функції входять до складу більш складних рівнянь, в яких окремі складові моделюють найбільш домінуючий чинник процесу. Наприклад, відомо, що швидкість хімічної реакції і швидкість розмноження популяції (V) часто мають подібний характер, як правило, у початковий період зростають, а потім через недостатнє харчування (витрачання реагентів) і внутрішню конкуренцію починають зменшуватися, прагнучи до значень, близьких до нуля. В екології таку ситуацію, коли підтримується оптимальна для даних умов чисельність популяцій, називають гомеостазом і рівняння для V містить, як мінімум, два доданки:

$$V = r \cdot N - \frac{r}{K} \cdot N^2, \quad (2.15)$$

де N – кількість особин;

r – питома швидкість розмноження особин;

K – ємність середовища (максимальна чисельність особин, за якої швидкість розмноження дорівнює нулю, тобто швидкість розмноження припиняється).

Показова функція має аналітичну форму запису:

$$y = a^x, \quad (2.16)$$

де a – додатне число, що не дорівнює одиниці і називається підставою ступеня.

За будь-яких значень аргументу функція (2.16) завжди позитивна і проходить через точку з координатами $(0, 1)$. При значеннях $a > 1$ графік функції – крива, яка піднімається вгору зліва – направо (рис. 2.7), а при $a < 1$ – справа – наліво (рис. 2.7 пунктир). Порівняння степеневі та показові функцій показує, що обидві вони утворюються за рахунок виконання дії – зведення в ступінь. Якщо у формулі (2.16) за аргумент x взяти результат зведення в ступінь, а за функцію y – показник ступеня, то отримаємо зворотну функціональну залежність:

$$x = a^y. \quad (2.17)$$

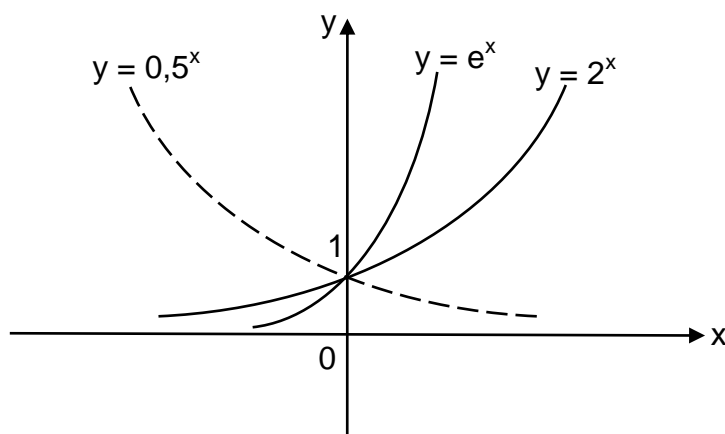


Рис. 2.7. Графіки степеневих функцій

Дію щодо знаходження функції з формули (2.17) називають логарифмуванням:

$$y = \log_a x, \quad (2.18)$$

де a – основа логарифма.

Зворотні функції (2.17) і (2.18) є еквівалентними, але за допомогою формули (2.17) видно, як обчислювати значення функції. Із символічної формули (2.18) цього не видно, і потрібно завжди пам'ятати рівність (2.17), яке є основою під час визначення логарифмічної функції. Графіки логарифмічних функцій (2.17) або (2.18) подібні графікам показової функції, але розміщені вони в інших квадрантах, як результат нахилу на 90° за годинниковою стрілкою показових функцій (рис. 2.7).

У разі, коли в показовій функції за основу беруть ірраціональне число $e = 2,71828$, графік функції буде подібний рис. 2.8. Якщо в логарифмічній функції за основу логарифма беруть число e , то функцію називають натуральним логарифмом: $y = \ln x$. Під час підстановки логарифмічної функції $a = 10$ – функцію називають десятковим логарифмом: $y = \lg x$.

Серед численних прикладів застосування показової функції відзначимо лише деякі. Для багатьох біологічних процесів, у тому числі розмноження популяцій, значення змінних не можуть зростати необмежено і для їх опису зручна показова функція з основою e і від'ємним показником ступеня. Динаміку чисельності N багатьох біологічних популяцій можна описувати математичною моделлю (рис. 2.9):

$$N = N_0 + (N_{\max} - N_0) \cdot (1 - e^{-kt}), \quad (2.19)$$

де N_0 – початкова чисельність популяції;

k – постійна величина, що характеризує тип популяції;

N_{\max} – ємність середовища;

t – час.

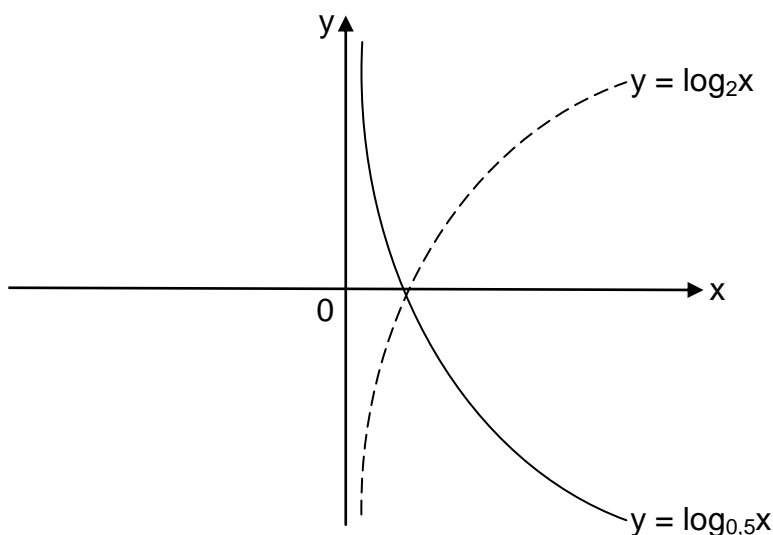


Рис. 2.8. Графік логарифмічної функції

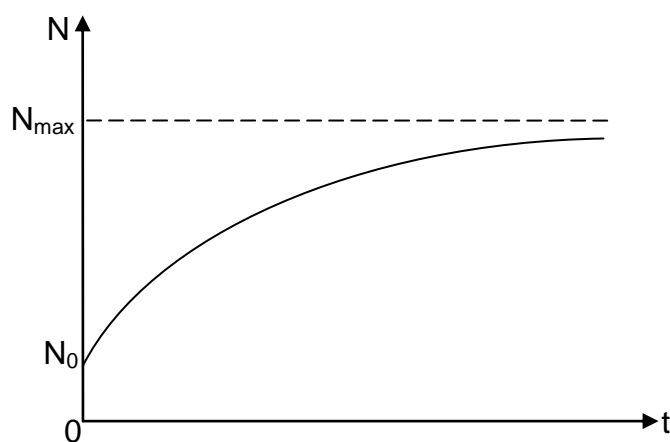


Рис. 2.9. Графік функції (2.19)

Характерний вплив (рис. 2.10) на організм тварин чинять шкідливі речовини (токсичні речовини), поступово скорочуючи тривалість їх життя (T):

$$T = T_p + (T_c - T_p) \cdot e^{-kp}, \quad (2.20)$$

де T_c – середня тривалість життя контрольних тварин;

T – тривалість життя тварин у разі дії великих доз (p) токсикантів ($p \rightarrow \infty$);

k – постійна величина, що характеризує вид тварин, тип токсиканта.

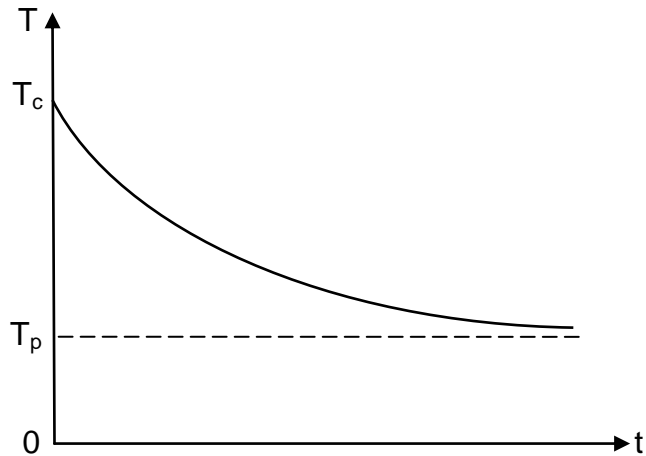


Рис. 2.10. Вплив токсикантів на тривалість життя тварин

Математична модель (2.20) адекватно описує процес "отруєння" нікелевих каталізаторів для парокисневої конверсії метану газоподібними сірковмісними домішками [33]. Характер активності м'язів людини – оператора в разі стомлюваності через накопичення молочної кислоти також змінюється згідно з графіком (рис. 2.10).

2.2. Тригонометричні функції в додатку до моделювання періодичних процесів

Залежності між сторонами прямокутного трикутника і його гострими кутами відображають тригонометричні функції (рис. 2.11а).

Нагадаємо, яким чином визначені найпростіші тригонометричні функції (рис. 2.11а):

$$\sin A = \frac{a}{c}, \quad \cos A = \frac{b}{c}, \quad \operatorname{tg} A = \frac{a}{b}, \quad \operatorname{ctg} A = \frac{b}{a}. \quad (2.21)$$

Кути можуть вимірюватися як в градусах, так і в радіанах. За 1 радіан приймають гострий кут, під яким із центру окружності O видно дугу MN , довжина якої дорівнює радіусу R ($R = OM = ON = MN$). До того ж половину кола (довжина πR) з її центру видно під кутом 180° , і цей розгорнутий кут має π радіан (рис. 2.11б). Тому 1 радіан дорівнює $180^\circ / \pi = 57^\circ 17' 44''$,

$1^\circ = \pi / 180^\circ$ (радіан). Будь-який кут, що вимірюють в градусах, може бути переведений в радіани:

$$\alpha(\text{радіан}) = \frac{\pi}{180} \cdot \alpha(\text{градуси}). \quad (2.22)$$

Для довільного кута x визначення тригонометричних функцій (y) реалізується через поняття радіус-вектор \vec{R} , його довжину (модуль) R і його координати R_x, R_y (проекції на вісь Ox і Oy відповідно) (рис. 2.11б):

$$y = \sin x = \frac{R_y}{R}, \quad y = \cos x = \frac{R_x}{R}, \quad y = \operatorname{tg} x = \frac{R_y}{R_x}, \quad y = \operatorname{ctg} x = \frac{R_x}{R_y}, \quad (2.23)$$

де x – довільний кут, утворений радіус-вектором \vec{R} з додатним напрямком осі Ox .

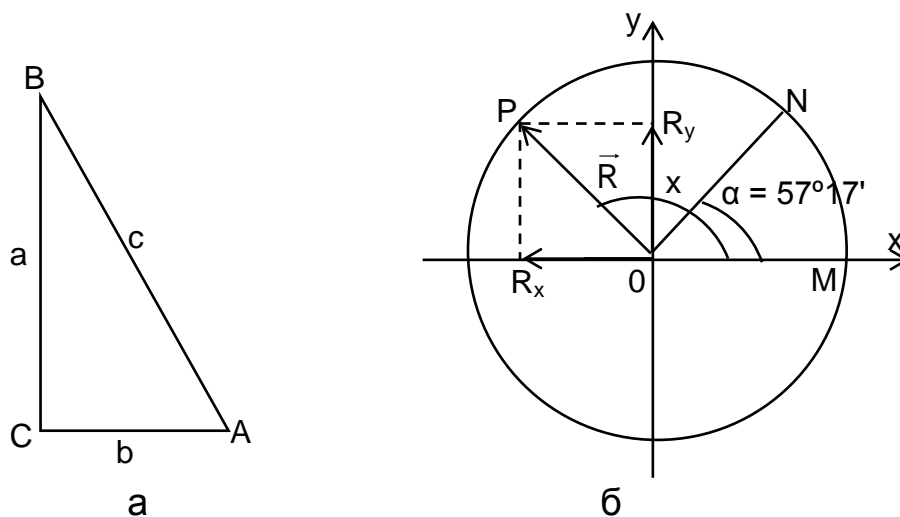


Рис. 2.11. Прямокутний трикутник (а) та коло із радіус-вектором R і радіаном α (б)

Крім того, значення тригонометричних функцій довільного кута x мають геометричні інтерпретації – можуть бути зображені відрізками визначеної довжини відносно кола, радіус якого дорівнює одиниці (рис. 2.12). До того ж для деяких кутів тригонометричні функції мають значення (табл. 2.2), за яким зручно будувати графіки відповідних функцій.

Повторюваність певних явищ у природі, дій частин тіла біологічних організмів, окремих елементів у структурі кристалів, технологічних операцій у виробничих процесах – найбільш характерна властивість Всесвіту. Повторюваність, періодичність процесів лягла в основу усвідомлення

та розвитку поглядів людини на різні види симетрії, які лежать в основі дії всіх фізичних законів [93]. Водночас періодичність є характерною властивістю тригонометричних функцій. З математичних позицій функція є періодичною, якщо існує таке число h , під час додавання якого до будь-якого значення аргументу не змінюється значення функції:

$$f(x + h) = f(x). \quad (2.24)$$

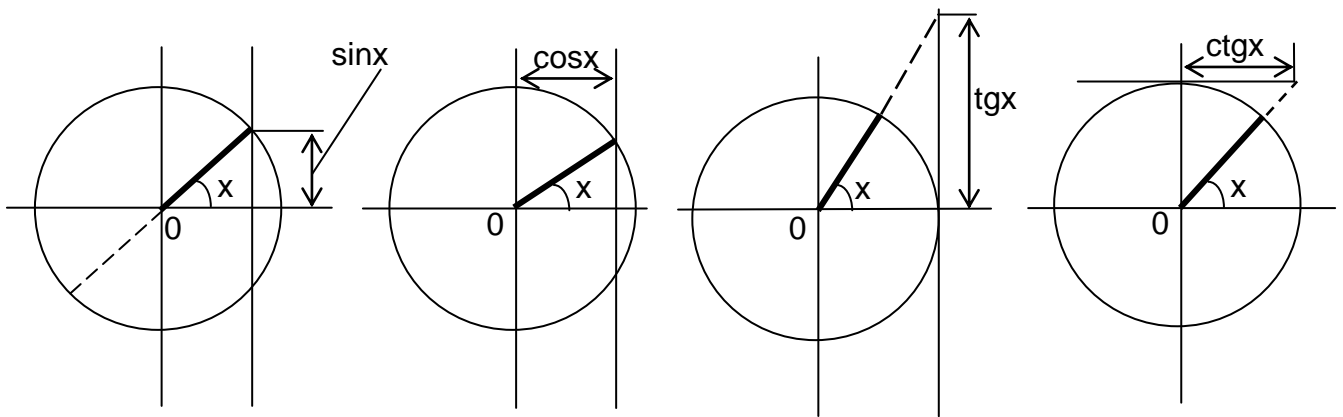


Рис. 2.12. Графічне зображення тригонометричних функцій

Таблиця 2.2

Характерне значення тригонометричних функцій

y	α, градуси							
	0	30	45	60	90	180	270	360
sinx	0	0,5	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1	0	-1	0
cosx	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	0,5	0	-1	0	1
tgx	0	$\frac{\sqrt{3}}{3}$	1	$\sqrt{3}$	$\pm\infty$	0	$\pm\infty$	0
ctgx	$\pm\infty$	$\sqrt{3}$	1	$\frac{\sqrt{3}}{3}$	0	$\pm\infty$	0	$\pm\infty$
y	0	$\pi/6$	$\pi/4$	$\pi/3$	$\pi/2$	π	$3/2\pi$	2π
	x							

Мінімальне значення з можливих чисел h називають періодом функції, часто позначають T і називають основним періодом. Під час графічної побудови тригонометричних функцій не складно переконатися, що основний період $\sin x$ і $\cos x$ дорівнює 2π , а для $\operatorname{tg} x$ і $\operatorname{ctg} x$ дорівнює π .

Для природних і різних технологічних процесів, близьких до періодичних (квазіперіодичних), моделювання реалізують, застосовуючи гармонійну форму запису тригонометричних функцій [80; 86; 102; 147; 166; 172]:

$$y = A \cdot \sin(\omega t + \varphi), \quad (2.25)$$

де A – амплітуда;

$\omega > 0$ – частота;

$(\omega t + \varphi)$ – фаза;

φ – початкова фаза при $t = 0$.

З формули (2.25) випливає, що значення амплітуди збільшує (зменшує) висоту синусоїди в A разів, частота ω перетворює період 2π на період T , який менше ω разів:

$$T = \frac{2\pi}{\omega}. \quad (2.26)$$

Початкова фаза φ (при $-\varphi$) зміщує синусоїду відносно початку координат вліво (або вправо) на величину φ / ω .

У деяких випадках застосовують і більш складні тригонометричні функції, зокрема, секанс і косеканс, які обернені до функцій $\sin x$ і $\cos x$ відповідно. Тригонометричні функції різного виду охарактеризовані в доступній довідковій літературі, наприклад [191].

2.3. Методи середніх величин та найменших квадратів у побудові емпіричних формул

Під час оброблення експериментальних даних у багатьох випадках потрібна первинна, без значної точності, побудова моделі у вигляді емпіричних формул. Із цією метою раціонально застосовувати метод середніх величин, або метод середніх [85; 86; 107; 191].

Метод середніх часто застосовують для отримання емпіричних формул у вигляді лінійної або квадратичної залежності функції від аргументу. Якщо експериментальними спостереженнями встановлено залежність

між x і y , що задана точками: $M_1(x_1, y_1)$, $M_2(x_2, y_2)$, ..., $M_n(x_n, y_n)$, то для моделювання емпіричної формули лінійної залежності ($y = ax + b$) потрібно знайти відхилення розрахункових ординат від заданих:

$$\delta_k = ax_k + b - y_k. \quad (2.27)$$

Невідомі параметри a , b знаходять за умови, що сума всіх відхилень повинна дорівнювати нулю. У зв'язку із знаходженням двох параметрів, будуть потрібні два рівняння, які можна отримати розділивши експериментальні дані на дві групи: одна – з m точок, інша – з $(n - m)$ точок. Тоді для визначення параметрів a , b отримаємо систему з двох рівнянь:

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^m (ax_k + b - y_k) = 0, \\ \sum_{k=m+1}^n (ax_k + b - y_k) = 0. \end{cases} \quad (2.28)$$

У разі, якщо експериментатор передбачає більш адекватною емпіричну формулу у вигляді квадратного тричлена $y = ax_k^2 + bx_k + c$, то невідомі параметри a , b , c знаходимо з умови рівності нулю суми таких відхилень:

$$\delta_k = (ax_k^2 + bx_k + c - y_k). \quad (2.29)$$

Для знаходження трьох невідомих необхідно мати три рівняння і всі експериментальні точки поділити на три групи: в першій – m точок, в другій – l точок, а в третій – $(n - m - l)$ точок:

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^m (ax_k^2 + bx_k + c - y_k) = 0, \\ \sum_{k=m+1}^{m+l} (ax_k^2 + bx_k + c - y_k) = 0, \\ \sum_{k=m+l+1}^n (ax_k^2 + bx_k + c - y_k) = 0. \end{cases} \quad (2.30)$$

Метод середніх величин може давати недостатню точність у зв'язку з тим, що окремі відхилення (похибки) можуть бути як негативними, так і позитивними величинами. Відповідно, сумарне відхилення може бути маленьким чи взагалі дорівнювати нулю, а окремі відхилення – дуже значними.

Ця проблема методу усувається в іншому ще більш поширеному методі – найменших квадратів. Продемонструємо його можливості на кількох прикладах.

Натурні спостереження або дані експериментів у технологів, екологів, фахівців з ергономіки найчастіше заносять у таблицю, а потім значення аргументу і функції переносять на міліметровку або інший аркуш папера з певним масштабом. Характер розташування точок на папері обумовлює вигляд формули (функції), яку експериментатор вважає здатною описати наближену закономірність в експерименті. Іноді не вдається підібрати одну формулу для всього інтервалу визначення функції і його доводиться розбивати на окремі частини, для кожної з яких слід підбирати найбільш підходящу формулу. Розглянемо ситуацію, коли експериментатору відомі емпіричні дані динаміки зміни, наприклад, товщини або маси нагару (M) на стінках якогось резервуару з 2000 до 2016 р. (рис. 2.13). Залежність M від часу спостереження за нагаром (t) будемо описувати лінійною функцією:

$$M = at + b. \quad (2.31)$$

Насамперед, параметри a , b зазвичай визначають графічним методом, проводячи пряму так, щоб більшість точок на рис. 2.13 була розташована близько до прямої.

Виберемо на рис. 2.13 координати двох точок, краще ті, які легко визначені на графіку, наприклад, точка (2000; 1,0) і точка (2016; 7,5). За обраними точками знайдемо:

$$\Delta M = 7,5 - 1,0 = 6,5; \Delta t = 2016 - 2000 = 16;$$

$$a = \operatorname{tg} \alpha = \Delta M / \Delta t = 6,5 / 16 \approx 0,4;$$

$$b = -0,4 \cdot 2016 + 6,5 \approx -800,0.$$

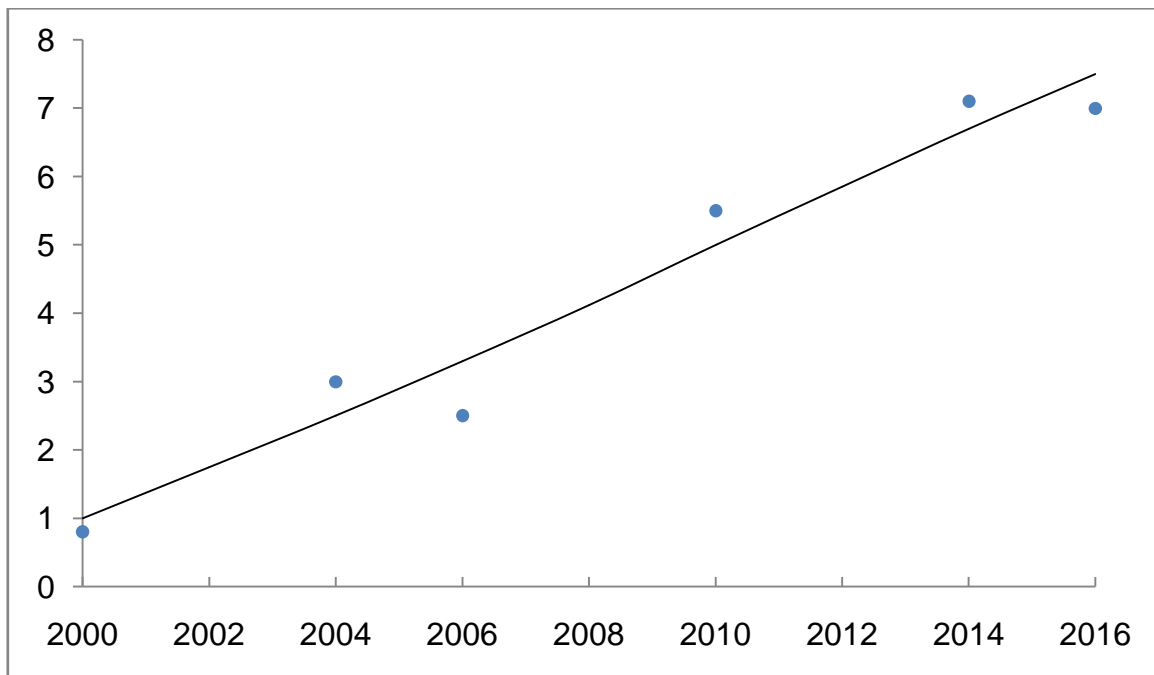


Рис. 2.13. Динаміка нагару на стінках резервуара

Відповідна лінійна залежність буде виражатися у вигляді:

$$M(t) = 0,4 \cdot t - 800. \quad (2.32)$$

Визначимо, наскільки точна отримана залежність (2.32) і обчислимо нагар на стінках резервуара для тих же років, для яких відомі експериментальні дані:

$$\begin{aligned} M_1 &= M(2000) = 0,4 \cdot 2000 - 800 = 0; \\ M_1 &= M(2004) = 0,4 \cdot 2004 - 800 = 1,6; \\ M_1 &= M(2006) = 0,4 \cdot 2006 - 800 = 2,4; \\ M_1 &= M(2010) = 0,4 \cdot 2010 - 800 = 4,0; \\ M_1 &= M(2014) = 0,4 \cdot 2014 - 800 = 5,6; \\ M_1 &= M(2016) = 0,4 \cdot 2016 - 800 = 6,4. \end{aligned}$$

За результатами порівняння теоретичних і експериментальних значень легко обчислити відхилення розрахункових величин від їх реальних величин:

$$\begin{aligned} \delta_1 &= 0,8 - 0 = 0,8; \quad \delta_2 = 3,0 - 1,6 = 1,4; \quad \delta_3 = 2,5 - 2,4 = 0,1; \\ \delta_4 &= 5,5 - 4,0 = 1,5; \quad \delta_5 = 7,1 - 5,6 = 1,5; \quad \delta_6 = 7,0 - 6,4 = 0,6. \end{aligned}$$

Загальну похибку визначимо як суму всіх квадратів відхилень:

$$\bar{\delta}^2 = \sum_{i=1}^6 \delta_i^2 = 0,64 + 1,96 + 0,01 + 2,25 + 2,25 + 0,36 = 7,47.$$

Тепер будемо застосовувати метод найменших квадратів для тих же експериментальних даних, щоб більш точно побудувати лінійну функцію: $y = kx + b$. Для більшої наочності достоїнств методу перевизначимо результати експерименту через x_i та y_i . Під час підстановки значень аргументу x_i у формулу лінійної функції будемо отримувати відповідні значення функції y_i , які будуть відрізнятися від експериментальних величин на деяке значення $\bar{\delta}_i$ (відхилення, нев'язка, помилка, похибка):

$$\begin{cases} kx_1 + b - y_1 = \bar{\delta}_1, \\ kx_2 + b - y_2 = \bar{\delta}_2, \\ \dots\dots\dots \\ kx_n + b - y_n = \bar{\delta}_n. \end{cases} \quad (2.33)$$

У методі найменших квадратів прагнуть мінімізувати за абсолютною величиною похибки, тому параметри k , b вибирають за умови, що сума квадратів усіх похибок (S) буде найменшою:

$$S = \bar{\delta}_1^2 + \bar{\delta}_2^2 + \dots + \bar{\delta}_n^2. \quad (2.34)$$

Підставляючи значення похибок з формули (2.33) в формулу (2.34), отримаємо:

$$S(k,b) = (kx_1 + b - y_1)^2 + (kx_2 + b - y_2)^2 + \dots + (kx_n + b - y_n)^2. \quad (2.35)$$

Фактично отримаємо функцію S , що залежить від двох невідомих параметрів k , b . Для пошуку найменшого значення цієї функції записують умову екстремуму:

$$\frac{\partial S}{\partial b} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial k} = 0. \quad (2.36)$$

З урахуванням формули (2.35) можна записати рівняння (2.36) у вигляді:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial k} = 2(kx_1 + b - y_1) x_1 + 2(kx_2 + b - y_2) x_2 + \dots + 2(kx_n + b - y_n) x_n = 0, \\ \frac{\partial S}{\partial b} = 2(kx_1 + b - y_1) + 2(kx_2 + b - y_2) + \dots + 2(kx_n + b - y_n) = 0. \end{cases} \quad (2.37)$$

У більш зручному вигляді запису (2.37) групують:

$$\begin{cases} k \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i, \\ k \sum_{i=1}^n x_i + b = \sum_{i=1}^n y_i. \end{cases} \quad (2.38)$$

У формі запису (2.38) систему методів найменших квадратів називають нормальною, якщо рішення дозволяє отримати значення k , b відповідно шуканій лінійній функції [86].

Продемонструємо знаходження параметрів a , b , які входять у рівняння (2.31) методом найменших квадратів. Для зручності обчислень введемо заміну змінної: $\tau = t - 2000$, вважаючи відлік часу спостереження за динамікою нагару в резервуарі розпочатому в 2000 р. і вводячи замість осі t нову вісь часу τ . Нормальна система рівнянь (2.38) буде мати такий вигляд:

$$\begin{cases} a \cdot (16 + 36 + 100 + 196 + 256) + b \cdot (4 + 6 + 10 + 14 + 16) = \\ \quad = 4 \cdot 3,0 + 6 \cdot 2,5 + 10 \cdot 5,5 + 14 \cdot 7,1 + 16 \cdot 7,0; \\ a \cdot (4 + 6 + 10 + 14 + 16) + b \cdot 5 = (3,0 + 2,5 + 5,5 + 7,1 + 7,0). \end{cases}$$

Після спрощення отримаємо нормальну систему у вигляді:

$$\begin{cases} 604 a + 50 b = 293,4; \\ 50 a + 5 b = 25,1. \end{cases} \quad (2.39)$$

Розв'язавши систему (2.39), знайдемо шукані значення параметрів:
 $a = 0,4931$, $b = 0,089$. Відповідна лінійна залежність буде мати вигляд:

$$B(\tau) = 0,4931\tau + 0,089. \quad (2.40)$$

Як і раніше, визначимо за рівнянням (2.40) розрахункові значення нагару в резервуарі в 2004, 2006, 2010, 2014 і 2016 рр., тобто при значеннях τ : $\tau_1 = 4$, $\tau_2 = 6$, $\tau_3 = 10$, $\tau_4 = 10$ та $\tau_5 = 10$:

$$\begin{aligned} B(4) &= 0,4931 \cdot 4 + 0,089 = 2,06; \\ B(6) &= 0,4931 \cdot 6 + 0,089 = 3,05; \\ B(10) &= 0,4931 \cdot 10 + 0,089 = 5,02; \\ B(14) &= 0,4931 \cdot 14 + 0,089 = 6,99; \\ B(16) &= 0,4931 \cdot 16 + 0,089 = 7,98. \end{aligned}$$

Відповідні відхилення для даного випадку будуть:

$$\begin{aligned} \bar{\delta}_1 &= 3,0 - 2,06 = 0,94; \quad \bar{\delta}_2 = 2,5 - 3,05 = -0,55; \quad \bar{\delta}_3 = 5,5 - 5,02 = 0,48; \\ \bar{\delta}_4 &= 7,1 - 6,99 = 0,11; \quad \bar{\delta}_5 = 7,0 - 7,98 = -0,98. \end{aligned}$$

Загальна похибка визначається як сума квадратів відхилень:

$$\bar{\delta}^2 \approx 0,88 + 0,30 + 0,23 + 0,01 + 0,96 = 2,38.$$

Згадаймо, що загальна похибка під час застосування графічного методу становила значення 7,47, що істотно більше 2,38 і використання формули (2.40) дає більш адекватні величини.

Метод найменших квадратів надзвичайно корисний для експериментаторів під час пошуку емпіричних формул у вигляді многочлена n ступеня:

$$y = A_0 + A_1 \cdot x + A_2 \cdot x^2 + \dots + A_n \cdot x^n. \quad (2.41)$$

Методика отримання формул вигляду (2.41) детально описана в різних довідниках, її найчастіше використовують для многочлена другого ступеня, тобто квадратного тричлена:

$$y = ax^2 + bx + c. \quad (2.42)$$

Для пошуку параметрів a , b з рівняння (2.42) застосовують нормальну систему:

$$\begin{cases} n \cdot c + b \sum_{k=1}^n x_k + a \sum_{k=1}^n x_k^2 = \sum_{k=1}^n x_k, \\ c \sum_{k=1}^n x_k + b \sum_{k=1}^n x_k^2 + a \sum_{k=1}^n x_k^3 = \sum_{k=1}^n x_k y_k, \\ c \sum_{k=1}^n x_k^2 + b \sum_{k=1}^n x_k^3 + a \sum_{k=1}^n x_k^4 = \sum_{k=1}^n x_k^2 y_k. \end{cases} \quad (2.43)$$

Часто під час аналізу складних функціональних залежностей, що описуються нелінійними моделями процесів, експериментатори, насамперед, зводять їх до лінійних функцій, а потім застосовують метод квадратів. Із цією метою використовують способи вирівнювання (випрямлення). У найбільш загальному випадку для рівнянь, що мають вигляд:

$$\varphi(x, y) = a + b \cdot f(x, y), \quad (2.44)$$

за допомогою введення нових змінних:

$$U = \varphi(x, y), \quad v = f(x, y), \quad (2.45)$$

можна привести їх до лінійного виду:

$$U = a + b \cdot v. \quad (2.46)$$

Стосовно експоненційної функції:

$$y = a \cdot e^{\pm bx}, \quad (2.47)$$

застосовують логарифмування лівої і правої частини і отримують лінійне рівняння вигляду:

$$U = A \pm bx, \quad (2.48)$$

де $U = \ln y$, $A = \ln x$.

Аналогічним чином вирівнюється степенева функція ($y = a \cdot x^\alpha$):

$$U = A + \alpha \cdot v, \quad (2.49)$$

де $U = \ln y$, $A = \ln a$, $v = \ln x$.

Для дробово-лінійної функції експериментатори, як правило, вибирають один із двох способів вирівнювання. Якщо використовувати перший, то функцію:

$$y = \frac{1}{a + bx} \quad (2.50)$$

можна записати у вигляді:

$$\frac{1}{y} = a + bx. \quad (2.51)$$

Відповідно, рівняння (2.51) легко привести до лінійного вигляду:

$$U = a + bx, \quad (2.52)$$

де $U = 1 / x$.

У другому способі вирівнювання початкова форма дробово-лінійної функції має вигляд:

$$y = \frac{x}{a + bx}, \quad (2.53)$$

який можна звести до наступного вигляду:

$$a + bx = \frac{x}{y}, \quad (2.54)$$

$$\frac{1}{y} = \frac{a}{x} + b, \quad (2.55)$$

$$\frac{y}{x} = \frac{1}{a} - \frac{by}{a}. \quad (2.56)$$

Зручність і бажаний вигляд лінійних рівнянь (2.54) – (2.56) оцінює експериментатор за конкретних умов і реалізує за допомогою відповідної заміни змінних:

$$(x, x / y), (1 / y, 1 / x), (y / x, y). \quad (2.57)$$

До того ж прагнуть, щоб чисельні значення цих змінних перебували у вузьких інтервалах і щоб точки навколо прямої розміщувалися рівномірно, без значних відхилень.

2.4. Основи методу теорії диференціальних рівнянь у побудові моделей складних процесів

Сучасна теорія диференціальних рівнянь надає експериментаторам дуже великий набір методів моделювання різноманітних і складних об'єктів і процесів взаємодії як між окремими елементами еко- і техносистем, так і між цими елементами із зовнішніми чинниками навколишнього середовища. Диференціальні рівняння відрізняються універсалізмом стосовно до різних видів динаміки біологічних, механічних, хіміко-технологічних та інших видів процесів. В основі математичної теорії про диференціальні обчислення лежить поняття похідної від функції або просто – похідної. До суті цього поняття приводить задача про дотичну до кривої, яка є графіком деякої функції $y = f(x)$, заданої в інтервалі значень. В елементарній математиці дотичну до кола визначають як пряму, що має з колом одну спільну точку. Але для довільної кривої (рис. 2.14) таке визначення не підходить. Очевидно, наприклад, що до параболи можна провести безліч таких прямих, які мають одну спільну точку із самою параболою, але не будуть дотичними. Тому узагальнене поняття дотичної до кривої в даній точці $M_0(x_0, y_0)$ – крайнє положення січної M_0M , коли точка M наближається до точки M_0 (рис. 2.14).

Із рис. 2.14 видно, що кут нахилу січної SM_0 до осі Ox визначають:

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}. \quad (2.58)$$

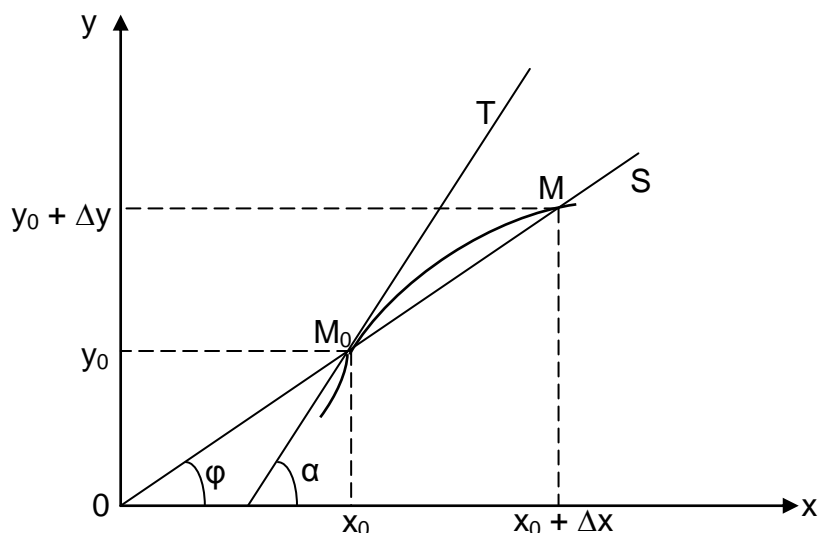


Рис. 2.14. Дотична до кривої в точці M_0

Якщо точка M буде рухатися по кривій y напрямку до M_0 , то Δx буде прагнути до нуля ($\Delta x \rightarrow 0$), а величина кута φ буде наближатися до значення кута α ($\text{tg } \varphi \rightarrow \text{tg } \alpha$). Нагадаємо, що тангенс кута нахилу прямої до осі абсцис називають кутовим коефіцієнтом (k), і він для точки M_0 буде мати значення:

$$\text{tg } \varphi = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} . \quad (2.59)$$

Відповідно, для визначення формули дотичної необхідно скористатися рівнянням прямої, задавши значення кутового коефіцієнта, що дорівнює $\text{tg } \alpha$ (2.59):

$$y - y_0 = k(x - x_0) . \quad (2.60)$$

По суті, границя відношення приросту функції Δy до приросту аргументу за умови прагнення приросту аргументу до нуля, що відповідає поняття похідної (2.59). Для позначення похідної застосовують такі символічні позначення:

$$y' = f'(x) = \frac{dy}{dx} = y'_x = \lim_{\Delta x \rightarrow \infty} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow \infty} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} . \quad (2.61)$$

Позначення y' ввів Ж. К. Лагранж (1736 – 1813 pp.), dy / dx – Л. Лейбніц (1646 – 1716 pp.), $y' = f'(x)$ – В. Ньютон (1643 – 1727 pp.) [1]. Операцію знаходження похідної називають диференціюванням.

У випадку залежності деякої функції (Z) від двох аргументів (x, y) вводять поняття приватного прирощення функції:

$$\Delta_x Z = f(x + \Delta x, y) - f(x, y), \quad (2.62)$$

$$\Delta_y Z = f(x, y + \Delta y) - f(x, y). \quad (2.63)$$

Відповідно, приватні похідні визначають:

$$Z'_x = \frac{\partial Z}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x}, \quad (2.64)$$

$$Z'_y = \frac{\partial Z}{\partial y} = \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y)}{\Delta y}. \quad (2.65)$$

Коли задана похідна:

$$f'(x) = F(x), \quad (2.66)$$

а потрібно знайти функцію $f(x)$, то таку зворотну (стосовно операції диференціювання) операцію знаходження функції за її похідною називають інтегрування. У випадку (2.66) функцію $f(x)$ називають первинною, а сукупність $f(x) + C$ всіх первинних – невизначеним інтегралом від функції $F(x)$ і позначають:

$$\int F(x) dx = f(x) + C, \quad (2.67)$$

де C – постійна величина.

Рівняння (2.66), в яке входить похідна невідомої функції $f(x)$, називають диференціальним рівнянням. Розв'язати диференціальне рівняння означає знайти невідому функцію $y = f(x)$ або сімейство функцій $f(x) + C$, які задовольняють дане диференціальне рівняння, зокрема, (2.66). Для розв'язання диференціального рівняння (2.66) використовують формулу (2.67).

Поняття похідної має не тільки математичний, але і фізичний, хімічний сенс. Проілюструємо це на відповідних прикладах.

У разі рівномірного руху матеріального тіла по прямій (рис. 2.15) його швидкість (V) буде визначатися співвідношенням шляху, пройденого тілом, до часу:

$$V = \frac{(S_1 - S_0)}{(t_1 - t_0)} = \frac{(S - S_0)}{(t - t_0)} = \frac{\Delta S}{\Delta t} = \text{const} . \quad (2.68)$$

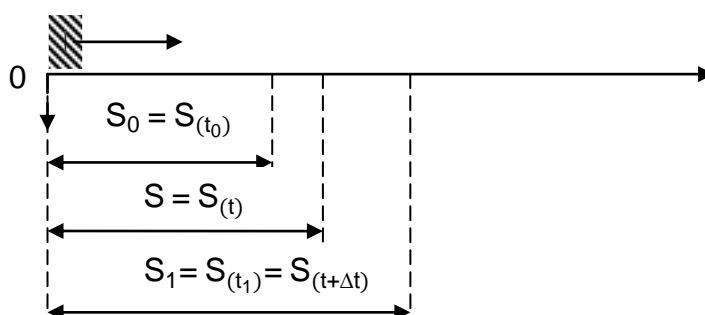


Рис. 2.15. Рівномірний рух тіла по прямій

Коли матеріальне тіло рухається по прямій нерівномірно, тобто за рівні проміжки часу тіло проходить різні відстані, то в цьому випадку співвідношення (2.68) характеризує середню швидкість руху тіла. Чим менше проміжок часу $\Delta t = t - t_0$, відповідно і проміжок шляху $\Delta S = S - S_0$, тим більше середня швидкість ($V_{\text{сеп}}$) буде ближче до значення реальної швидкості в даний момент часу, що називається миттєвою швидкістю.

Таким чином, для середньої швидкості тіла справедливе рівняння:

$$V_{\text{сеп}} = \frac{\Delta S}{\Delta t} = \frac{S_1 - S}{\Delta t} = \frac{S_{(t+\Delta t)} - S_{(t)}}{\Delta t} . \quad (2.69)$$

Миттєва швидкість (V_M) визначатиметься граничним значенням за умови $\Delta t \rightarrow 0$:

$$V_M = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta S}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{S_{(t+\Delta t)} - S_{(t)}}{\Delta t} . \quad (2.70)$$

Одне з основних понять у хімії і споріднених галузях знань – швидкість хімічної реакції. Під час перетворення речовини А в речовину В за початкову масу речовини, що прореагувала (в момент часу t_0), приймається

значення m_0 , а через деякий час Δt , маса речовини, що прореагувала, змінюється до значення m_1 . Фактично за час від t_0 до $t_0 + \Delta t$ прореагувала маса речовини, що дорівнює $\Delta m = m_1 - m_0$. Відповідно швидкістю хімічної реакції називають масу речовини Δm , яка вступила в реакцію або утворилася в процесі реакції за одиницю часу в одиниці об'єму. Через нерівномірність процесу хімічної взаємодії визначають реальну або миттєву швидкість реакції (V_A) за допомогою вже описаної раніше рівності:

$$V_A = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta m_A}{W_A \Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta C_A}{\Delta t}, \quad (2.71)$$

де C_A – концентрація речовини А, що визначає масу речовини А (m_A) в одиниці об'єму (W_A).

В екологічних задачах поширений пошук швидкості розмноження певних популяцій. До того ж досить наочні рішення реалізуються із застосуванням диференціальних моделей. Зокрема, якщо відома чисельність певних організмів у початкових сприятливих умовах (N_0), а попередніми спостереженнями встановлено прямопропорційну залежність швидкості розмноження від кількості особин цих організмів, то швидкість розмноження визначають похідною dN / dt . Можна записати рівняння:

$$\frac{dN}{dt} = r \cdot N, \quad (2.72)$$

де r – коефіцієнт пропорційності, що залежить від багатьох чинників і конкретного виду організмів, називають константою розмноження.

У рівнянні (2.72) розділяють змінні та інтегрують:

$$\frac{dN}{N} = r dt, \quad \int \frac{dN}{N} = \int r dt + 1. \quad (2.73)$$

Вважаючи значення постійної величини А рівним $\ln a$, де a – відповідна константа, отримуємо рівняння вигляду:

$$\ln N = r t + \ln a. \quad (2.74)$$

Тоді з рівняння (2.74) отримуємо:

$$N(t) = a \cdot e^{rt}. \quad (2.75)$$

Враховуючи, що в початковий момент $N(0) = N_0$, рівняння (2.75) можна записати у вигляді:

$$N(t) = N_0 \cdot e^{rt}. \quad (2.76)$$

Щоб визначити постійну r , досить знати кількість організмів в який-небудь момент часу $t = t_1$. Нехай відомо $N(t_1) = N_1$, і його підстановка в рівняння (2.76) дає:

$$N_1 = N_0 \cdot e^{rt_1}. \quad (2.77)$$

Логарифмуючи ліву і праву частини рівняння (2.77), отримаємо:

$$\ln N_1 = \ln N_0 + rt_1. \quad (2.78)$$

З рівняння (2.78) можна визначити значення r :

$$r = \frac{\ln N_1 - \ln N_0}{t_1}. \quad (2.79)$$

Відповідно, рівняння (2.76) перетворюється в остаточний вигляд:

$$N(t) = N_0 \cdot \exp \left[(\ln N_1 - \ln N_0) \cdot \left(\frac{t}{t_1} \right) \right], \quad (2.80)$$

де символ \exp (експоненціальна залежність) використовується для спрощення форми запису степеневі функції з основою e .

Не менш ефективно застосування основ теорії диференціальних рівнянь хімічної кінетики, одним із законів якої є закон діючих мас. Цей закон ставить у відповідність швидкість протікання реакцій від концентрації речовини, що бере участь у взаємодії:

$$v_A = -kC_A \text{ або } v_B = -kC_A, \quad (2.81)$$

де k – коефіцієнт пропорційності;

v і C – швидкість реакції і концентрація відповідних речовин, взаємодіючих за рівнянням: $A \rightarrow B$;

знак мінус (2.81) показує на спад концентрації речовини A під час протікання реакції.

Застосовуючи поняття похідної до рівнянь (2.81), можна записати в диференціальній формі:

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A, \quad \frac{dC_B}{dt} = kC_A. \quad (2.82)$$

Інтегруючи перше з рівнянь (2.82), отримаємо:

$$C_A = a \cdot C^{-kt}. \quad (2.83)$$

Для визначення постійних a , потрібно знати концентрації речовин A , до початку взаємодії. Нехай $C_A(0) = C_0$, тоді $a = C_0$, і взаємодія реалізується згідно із законом:

$$C_A(t) = C_0 \cdot e^{-kt}. \quad (2.84)$$

Для знаходження концентрації речовини можна використовувати друге рівняння (2.82), переписавши його з урахуванням (2.83) і $a = C_0$ у вигляді:

$$\frac{dC_B}{dt} = kC_0 \cdot e^{-kt}. \quad (2.85)$$

Після інтегрування рівняння (2.85) отримаємо:

$$C_B(t) = -C_0 e^{-kt} + b. \quad (2.86)$$

Вважаючи, що в початковий момент взаємодії $C_B(t) = -C_0 + b = 0$, тобто $b = C_0$, отримаємо:

$$C_B(t) = C_0 \cdot (1 - e^{-kt}). \quad (2.87)$$

Під час проектування технічних пристроїв часто доводиться знаходити похідну від похідної, так званої другої похідної або похідної другого порядку. Позначають другу похідну символами:

$$y'', f''(x), \frac{d^2y}{dx^2} \text{ тощо.} \quad (2.88)$$

У зв'язку з тим, що друга похідна показує швидкість зміни швидкості матеріального тіла, то вона має фізичний сенс прискорення, тобто другій похідній шляху матеріального тіла від часу. За участі другої похідної фактично складаються квадратні диференціальні рівняння. Застосування подібних рівнянь для моделювання складних процесів також є досить поширеною практикою. Зокрема, з факту сталості прискорення вільного падіння тіл ($g = 9,82 \text{ м/с}^2$) можна записати рівняння:

$$\frac{dv}{dt} = g, \quad (2.89)$$

де $v = dS / dt$ – швидкість падіння тіла, визначається похідною шляху за часом.

Прискорення вільного падіння через другу похідну має вигляд:

$$\frac{d^2S}{dt^2} = g. \quad (2.90)$$

Інтегруючи рівняння (2.90) один раз, отримаємо:

$$\frac{dS}{dt} = g \cdot t + C_1, \quad (2.91)$$

де C_1 – постійна інтегрування.

Інтегруючи рівняння (2.91) або другий раз рівняння (2.90), отримаємо:

$$S(t) = 0,5g \cdot t^2 + C_1 \cdot t + C_2, \quad (2.92)$$

де C_2 – постійна другого інтегрування.

Якщо відомо початкове положення і початкова швидкість, то можна моделювати рух матеріального тіла при його вільному падінні. Нехай $S(0) = S_0$, $v(0) = v_0$. Тоді за аналогією і висновків (2.81) – (2.87), знайдемо:

$$v(0) = C_1 = v_0, \quad S(0) = C_2 = S_0. \quad (2.93)$$

З урахуванням рівняння (2.93) загальна модель, що визначає положення матеріального тіла в разі вільного падіння, буде мати наступний вигляд:

$$S(t) = 0,5g \cdot t^2 + v_0 \cdot t + S_0. \quad (2.94)$$

Більш складні диференціальні рівняння, у тому числі з використанням часткових похідних, похідних високого порядку, рідше застосовуються для традиційних моделей, а їх роль більш значуща під час імітаційного моделювання із застосуванням сучасних комп'ютерів й інформаційних технологій.

2.5. Аналіз традиційних моделей в екології

Першими простими математичними моделями людина почала оперувати в період освоєння найдавніших ремесел, промислів і паралельно розвиваючи математичні знання. У зв'язку з раннім розвитком мисливства, рибальства, землеробства, приручення звірів і птахів та інших видів діяльності, моделювання в екології має більш глибокі, історично зумовлені витoki. Саме тому в механіці, електрофізиці, хімічній кінетиці та інших галузях знань не рідкі випадки, коли фактично перевідкривали заново вже відомі з екології математичні моделі. Уже тільки із цих позицій доцільною є можливість проаналізувати кілька математичних моделей, що стали традиційними для екології. Крім того, останні досягнення багатьох галузей знань на нинішньому етапі еволюції людства сталися завдяки спостереженням за природними процесами за допомогою сучасних апаратурно-дослідних засобів і відтворення в технічних пристроях динамічних особливостей рухів окремих частин біологічних організмів та їх угруповань. Зокрема, високошвидкісні зйомки на кінокамери рухів мух, бабок дозволили встановити раніше невідомі принципи створення підйомної сили за рахунок збудження завихрень у передній частині крил. Вивчення елементів руху кінцівок у павуків, багатоніжок та інших членистоногих плазунів дозволило розробляти нові механізми крокуючих пристроїв для переміщення по поверхні зі складним рельєфом, в тому числі для майбутніх планетоходів. Землерийки, кроти, черв'яки стали прототипами для

проектування рудодобувних механізмів і тунелепрокладальних машин. Із цих позицій обґрунтованим видається і ретроспективний аналіз деяких із математичних моделей екології.

Серед найбільш часто розв'язуваних екологами завдань є знаходження швидкості зміни чисельності популяції або певного біологічного угруповання. До того ж під популяцією розуміють яку-небудь групу організмів одного виду, яка тривалий час займає певний простір і може функціонувати (розмножуватися, розвиватися, гинути) в конкретних умовах природного середовища. Фактично популяція виступає елементарною одиницею процесу еволюції і формою існування виду. Це безліч організмів, що мають властивість саморозмножуватися.

Біологічне угруповання більш ємне поняття і є сукупністю популяцій, яка функціонує як цілісна одиниця в певних межах простору природного середовища. Середня швидкість розмноження популяції визначається співвідношенням зміни кількості організмів (особин) ΔN до проміжку часу Δt , протягом якого сталися ці зміни (збільшення або зменшення, в останньому випадку береться зі знаком мінус). Миттєва або істинна швидкість розмноження організмів V є похідною за часом від кількості цих організмів:

$$V = \frac{dN}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta t}. \quad (2.95)$$

Важливим показником для формалізації закономірностей розмноження популяцій виступає наведена швидкість розмноження (r), яку визначають зміною числа організмів за одиницю часу в розрахунку на одну особину:

$$r = \frac{\Delta N}{N \Delta t}. \quad (2.96)$$

З рівняння (2.96), за сприятливих умов навколишнього середовища та відсутності лімітуючих чинників, для розмноження популяцій можна використовувати диференціальне рівняння:

$$\frac{dN}{dt} = r \cdot N. \quad (2.97)$$

Рівняння (2.97) виражає так званий закон пропорційності швидкості розмноження популяції [86]. У рівнянні (2.97) параметр r називають коефіцієнтом швидкості розмноження популяції (біотичного угруповання). У такій формі це рівняння вперше отримав у 1802 р. англійський священик Томас Мальтус, він розв'язав це диференціальне рівняння. Сьогодні розв'язати рівняння (2.97) нескладно. Для цього спочатку слід розділити змінні N і t :

$$\frac{dN}{N} = r \cdot dt. \quad (2.98)$$

Інтегруємо рівняння (2.98):

$$\int \frac{dN}{N} = \int r \cdot dt + A. \quad (2.99)$$

Після розкриття інтегралів отримаємо:

$$\ln N = r \cdot t + \ln a, \quad (2.100)$$

де $A = \ln a$.

Для знаходження N застосуємо потенціювання рівняння (2.100):

$$N = a \cdot e^{rt}. \quad (2.101)$$

Якщо відома чисельність організмів у популяції ($N = N_0$) в початковий момент часу ($t = t_0$), то можна знайти значення постійного коефіцієнта a :

$$N_0 = a \cdot e^{rt_0} \text{ або } a = N_0 \cdot e^{-rt_0}. \quad (2.102)$$

Тоді рівняння (2.101) з урахуванням рівняння (2.102) можна записати в загальному вигляді:

$$N(t) = N_0 \cdot e^{r(t-t_0)}. \quad (2.103)$$

Експоненціальна функція (2.103) описує зміну чисельності популяції організмів і адекватно описує розмноження деяких колоній бактерій на обмеженій культурному середовищі (до виснаження запасу їжі). На рис. 2.16 зазначений умовний графік такої функції (суцільна лінія).

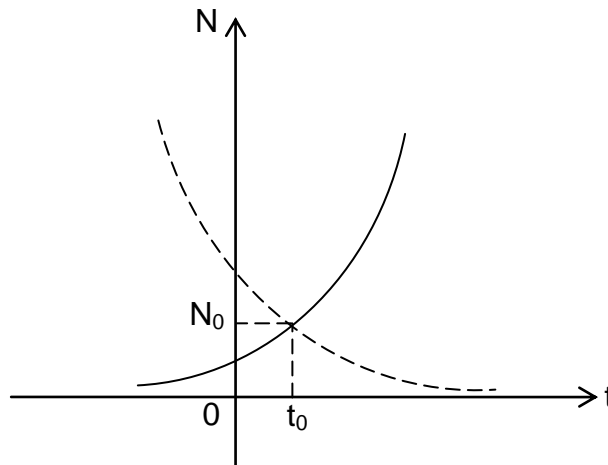


Рис. 2.16. Функція $N = f(x)$

За допомогою рівняння (2.103) легко можна визначити значення коефіцієнта r , для чого слід, логарифмуючи обидві частини цього рівняння, записати його у вигляді:

$$\ln N = \ln N_0 + r(t - t_0). \quad (2.104)$$

За двома відомими значеннями величин N_1 і N_2 у відповідні два моменти часу (t_1 , t_2) визначаємо r :

$$r = \frac{\ln N_2 - \ln N_1}{t_2 - t_1}. \quad (2.105)$$

Рівняння (2.104) дозволяє відобразити зміну чисельності популяції організмів у відповідність з основною функцією $N(t)$ (2.103) у логарифмічному масштабі (рис. 2.17).

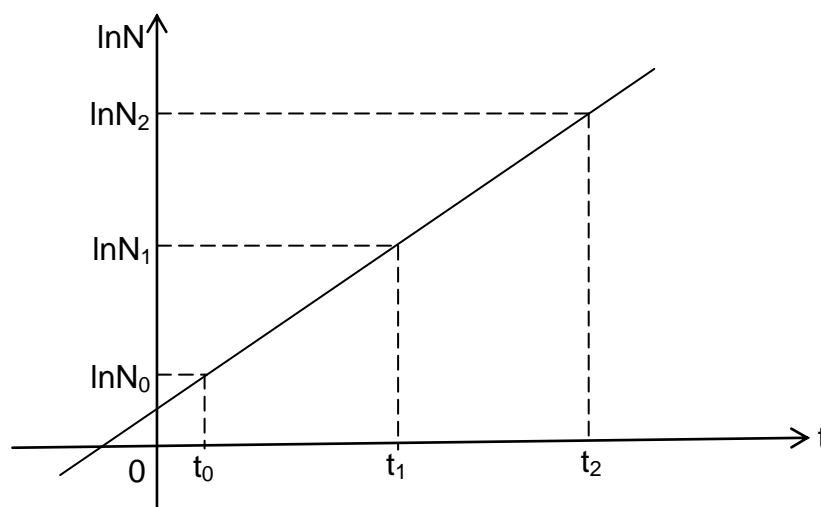


Рис. 2.17. Зміна чисельності популяції організмів у логарифмічному масштабі

Зазначимо, що рівняння Т. Мальтуса (2.103) еквівалентне в математичному вигляді широко відомому в хімії рівнянню С. Арреніуса [46; 177], яке було виведено лише у 1889 р.:

$$K = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}, \quad (2.106)$$

де K – константа швидкості хімічної реакції;

R – універсальна газова постійна;

A – стеричний коефіцієнт, що визначає кількість зіткнень частинок у хімічній реакції, що протікає в одиничному обсязі за одиницю часу;

$e^{-\frac{E_a}{RT}}$ – множник, який визначає частку активних зіткнень і враховує енергію активації (E_a) і температуру в реакційному просторі (T).

Також зазначимо, що коефіцієнт швидкості розмноження має біологічну інтерпретацію, становлячи собою різницю між питомою швидкістю народження " b " (*birth*) і питомою швидкістю смертності " d " (*death*):

$$r = b - d. \quad (2.107)$$

У такій інтерпретації показник r застосовують для кількісної характеристики репродуктивної пристосованості організмів популяції в генетичному сенсі. Його називають біотичним потенціалом. Фактично характеризується вроджена здатність організмів до розмноження і виживання, а умова рівняння (2.107) в неявному вигляді закладає в модель вплив певних несприятливих чинників (нестача харчування, перенасиченість або недонасиченість території організмами, внутрішні і зовнішні вороги тощо). Якщо питома швидкість смертності перевищує питому швидкість народжуваності, то величина стає від'ємною, тобто:

$$N_{(t)} = N_0 \cdot e^{-r(t-t_0)}. \quad (2.108)$$

Графік функції (2.108) представлено спадною кривою з асимптотою $N = 0$ (див. рис. 2.16, пунктир).

Модель (2.97) закону прямопропорційності швидкості розмноження популяцій може мати і більш явну форму обліку впливу на організми яких-небудь чинників. У таких випадках права частина диференціального рівняння містить певний доданок. Зокрема, якщо зростання чисельності

популяції має кількісне обмеження числа особин, здатних до стабільного співіснування, то часто застосовують модель у вигляді логістичного рівняння:

$$\frac{dN}{dt} = rN - \frac{r}{K} \cdot N^2, \quad (2.109)$$

де $K = N_{\max}$ – максимальна чисельність організмів, здатних до співіснування.

Як видно з форми запису рівняння (2.109), це нелінійне диференціальне рівняння, яке може мати вигляд:

$$\frac{dN}{dt} = rN \frac{K - N}{K}. \quad (2.110)$$

Для розв'язання рівняння (2.110) розділимо змінні:

$$\frac{KdN}{N(K - N)} = rdt. \quad (2.111)$$

Врахуємо можливість перетворення:

$$\frac{1}{N(K - N)} = \frac{1}{KN} + \frac{1}{K(K - N)}. \quad (2.112)$$

З урахуванням рівняння (2.112) запишемо рівняння (2.111) у вигляді:

$$\left(\frac{1}{N} + \frac{1}{K - N} \right) dN = rdt. \quad (2.113)$$

Проінтегруємо рівняння (2.113):

$$\int \left(\frac{1}{N} + \frac{1}{K - N} \right) dN = \int rdt + A. \quad (2.114)$$

Отримаємо:

$$\ln N - \ln(K - N) = rt + \ln a, \quad (2.115)$$

де $\ln a = A$ – константа інтегрування.

Перетворимо рівняння (2.115):

$$\ln \frac{N}{K-N} = rt + \ln a. \quad (2.116)$$

З рівняння (2.116) витікає:

$$\frac{N}{K-N} = a \cdot e^{rt}. \quad (2.117)$$

Якщо відомо, що при $t = 0$ кількість особин популяції $N = N_0$, то з (2.117) можна знайти значення a :

$$a = \frac{N_0}{K - N_0}. \quad (2.118)$$

Виділимо N у рівнянні (2.117) і отримаємо шукану функцію $N_{(t)}$ у вигляді:

$$N_{(t)} = \frac{a \cdot K \cdot e^{rt}}{1 + a \cdot e^{rt}}, \quad (2.119)$$

де $a = \frac{N_0}{K - N_0}$ та має значення $0 < a < \infty$.

У більш зручній формі запису рівняння (2.119) запишемо, якщо поділити в ньому чисельник і знаменник на e^{rt} :

$$N_{(t)} = \frac{a \cdot K}{a + e^{-rt}}. \quad (2.120)$$

Можна спростити рівняння (2.120) за рахунок заміни постійної інтегрування (a) новим коефіцієнтом (q):

$$q = \ln \frac{1}{a} = \ln \frac{K - N_0}{N_0}. \quad (2.121)$$

Підставляючи рівняння (2.121) у рівняння (2.120), отримаємо:

$$N_{(t)} = \frac{K}{1 + \exp(q - rt)}. \quad (2.122)$$

Графіком функції (2.122) є сигмоподібна крива з асимптотою $N = K$, яку називають логістичною кривою (рис. 2.18). Рівняння (2.122) є розв'язком нелінійного диференціального рівняння (2.109), яке вже наводилося в рівнянні (2.15) в загальному контексті аналогій екології та хімічних технологій. Сьогодні подібні моделі мають ще більшу кількість аналогій у найрізноманітніших процесах. Така ситуація складається у зв'язку з тим, що ця модель у самому загальному вигляді вже враховує здатність елементів (організмів, особин) до саморегуляції у складі складної і численної системи (популяції, біотичної угруповання). Встановлення сигмоподібної залежності для досліджуваних процесів у різних галузях знань стало своєрідним індикатором на здатність до самоорганізації у відповідних системах.

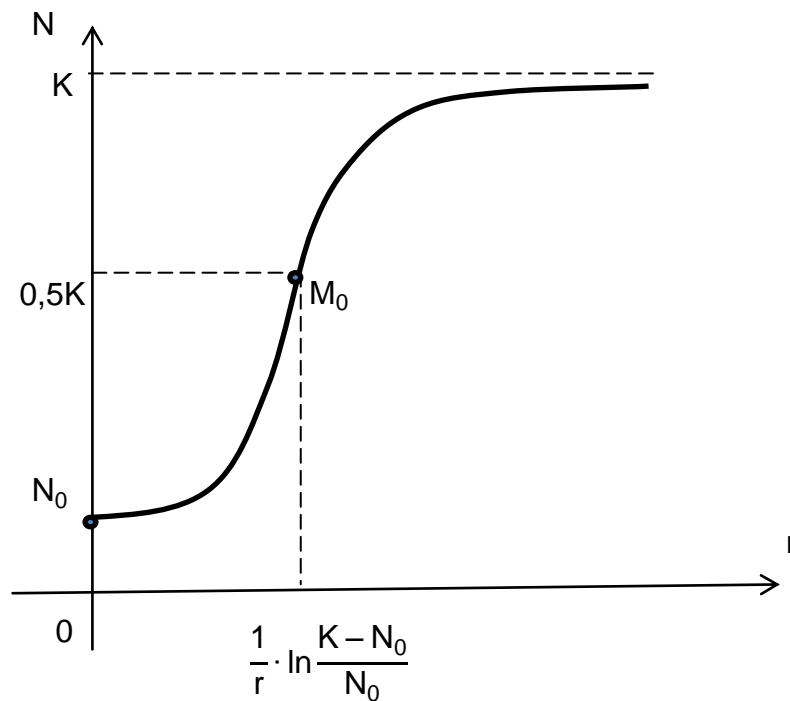


Рис. 2.18. Логістична крива

У зв'язку із зростаючою значимістю моделі (2.109) зазначимо, що часто відповідне рівняння називають рівнянням Ферхюльста – Перла і Лотки – Вольтерри. Це пов'язано з тим, що вона неодноразово "перевідкривалася". Логістичне рівняння вперше в 1938 р. запропоновано Ферхюльстом для обліку так званого ефекту самоотруєння популяцій або внутрішньої боротьби (конкуренції) у популяції [86; 205]. Цим рівнянням у 1956 р. користувався Лотка, потім його "перевідкрили" Перл, Рід і Вольтер

[32; 119; 202]. Відзначимо також дві важливі особливості розв'язання цього рівняння (2.122):

- у разі малих значень чисельності популяцій її зростання відбувається за експоненціальним законом, аналогічно функції (2.108);
- у разі тривалого часу існування популяції швидкість зростання її чисельності сповільнюється і асимптотично наближається до постійного значення, часто званого ємністю середовища, а швидкість розмноження (крутизна сигмоподібної кривої (рис. 2.18) положення точки перегину M_0 цієї кривої) залежить від співвідношення $r = b - d$, тобто від різниці у швидкостях зміни чисельності народжуваності і смертності.

Модель Мальтуса (2.103) вважається "жорсткою" через постійність параметра r , а логістична модель (2.122) – більш "м'якою", тому що в ній параметр r розглядають як змінну величину, що залежить від чисельності популяції і враховує зворотний зв'язок за рахунок наявності у вихідному диференціальному рівнянні (2.109) додаткового доданку в правій частині $(-r \cdot N^2/K)$. Фактична оптимізація моделей реалізується їх "пом'якшенням", при якому права частина диференціального рівняння доповнюється новим членом, що враховує конкретні чинники впливу на зростання популяції. Зрозуміло, що логістична модель у випадку впливу на популяцію людського (антропогенного) чинника (q) повинна враховувати його вплив і стати більш адекватною "м'якою":

$$\frac{dN}{dt} = r_0 N - \frac{r_0}{K} N^2 - q. \quad (2.123)$$

У разі необхідності врахування впливу однієї популяції на іншу (взаємини типу рис. 1.1 – 1.4) слід враховувати відповідний тип взаємовпливу і оптимізувати модель шляхом не тільки введенням додаткового члена в праву частину рівняння (наприклад, полога взаємодія пропорційна добутку чисельності першої та другої популяції $N_1 N_2$), але розв'язуючи систему рівнянь. Зокрема, для взаємин "хижацтво" динаміка популяцій може моделюватися системою рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dN_1}{dt} = r_1 N_1 - \frac{r_1}{K_1} N_1^2 + j_1 N_1 N_2; \\ \frac{dN_2}{dt} = r_2 N_2 - \frac{r_2}{K_2} N_2^2 - j_2 N_1 N_2, \end{cases} \quad (2.124)$$

де j_1, j_2 – коефіцієнт пропорційності взаємовпливу.

У випадку "конкуренції" модель динаміки має вигляд:

$$\begin{cases} \frac{dN_1}{dt} = r_1 N_1 - \frac{r_1}{K_1} N_1^2 - j_1 N_1 N_2; \\ \frac{dN_2}{dt} = r_2 N_2 - \frac{r_2}{K_2} N_2^2 - j_2 N_1 N_2. \end{cases} \quad (2.125)$$

У випадку "симбіоз" модель динаміки має вигляд:

$$\begin{cases} \frac{dN_1}{dt} = r_1 N_1 - \frac{r_1}{K_1} N_1^2 + j_1 N_1 N_2; \\ \frac{dN_2}{dt} = r_2 N_2 - \frac{r_2}{K_2} N_2^2 + j_2 N_1 N_2. \end{cases} \quad (2.126)$$

Подані вище моделі досить логічні й прості, що є їх перевагою. Однак у моделях слід у максимальній мірі враховувати всі можливі чинники впливу, що забезпечує їм м'якість і більш високий рівень відображення реальних процесів. Зокрема, під час розгляду взаємовідносин "хижак – жертва" важливе значення має швидкість виїдання, яка залежить і від кількості хижаків, і від кількості жертв. Цю залежність в екології називають трофічною функцією, або коефіцієнтом. Зрозуміло, що ця функція в загальному вигляді може бути дуже складною, тому що залежить ще і від мисливської стратегії хижака, наявності укриттів у жертв, маскувальних і захисних можливостей жертви і т. п.

Перші математичні моделі взаємовідносин "хижак – жертва" були отримані італійським математиком Віто Вольтерра [32], якого вважають батьком математичної екології [86]. Спочатку розглядалися прості моделі у вигляді системи лінійних диференціальних рівнянь, де чисельність популяції "жертв" позначена B , а "хижаків" – P . До того ж популяція P розмножується відповідно до експоненціальних законів і впливає на популяцію, яка має доступ до стійкого запасу їжі:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = \alpha_1 Q_1 - m_1 B - j_1 P; \\ \frac{dP}{dt} = r_2 P, \quad r_2 = j_2 - m_2, \end{cases} \quad (2.127)$$

де α_1 – коефіцієнт засвоєння їжі "жертвою";

m_1, m_2 – коефіцієнти смертності "жертви" і "хижака" відповідно;

j_1, j_2 – коефіцієнти виїдання "хижаком" "жертв" і засвоєння їжі "хижаком";

Q_1 – швидкість підходу ресурсу в систему.

Рішення другого рівняння системи має вигляд:

$$P(t) = P_0 \cdot e^{r_2 t}, \quad r_2 = j_2 - m_2 \quad (2.128)$$

Підставляючи рівняння (2.128) в перше рівняння системи (2.127), отримаємо:

$$\frac{dB}{dt} = \alpha_1 Q_1 - m_1 B - j_1 P \cdot e^{r_2 t}. \quad (2.129)$$

Рівняння (2.129) є неоднорідним лінійним і його рішення можна знайти за допомогою рішення відповідного лінійного однорідного рівняння:

$$\frac{dB}{dt} = -m_1 B. \quad (2.130)$$

Рішенням рівняння (2.130) є:

$$B(t) = A(t) \cdot e^{-m_1 t}, \quad (2.131)$$

де $A(t)$ – поки що невідома функція, для пошуку якої спочатку знайдемо похідну (2.131):

$$\frac{dB}{dt} = \frac{dA}{dt} \cdot e^{-m_1 t} - A(t) \cdot m_1 \cdot e^{-m_1 t}. \quad (2.132)$$

Підставимо рівняння (2.131), (2.132) в рівняння (2.129) і отримаємо:

$$\frac{dA}{dt} \cdot e^{-m_1 t} - A(t) \cdot m_1 \cdot e^{-m_1 t} = \alpha_1 Q_1 - m_1 \cdot A(t) \cdot e^{-m_1 t} - j_1 P_0 \cdot e^{r_2 t}. \quad (2.133)$$

Спростуємо рівняння (2.133):

$$\frac{dA}{dt} = \alpha_1 Q_1 \cdot e^{m_1 t} - j_1 P_0 \cdot e^{(m_1 + r_2)t}. \quad (2.134)$$

Після інтегрування рівняння (2.134) отримаємо:

$$A(t) = \frac{\alpha_1 Q_1}{m_1} \cdot e^{m_1 t} - \frac{j_1 P_0}{m_1 + r_2} \cdot e^{(m_1 + r_2)t} + A_1, \quad (2.135)$$

де A_1 – поки невідома постійна інтегрування.

З урахуванням рівняння (2.135) рішенням рівняння (2.131) буде:

$$B(t) = \frac{\alpha_1 Q_1}{m_1} - \frac{j_1 P_0}{m_1 + r_2} \cdot e^{r_2 t} + A_1 \cdot e^{-m_1 t}. \quad (2.136)$$

При відомих початкових умовах $B = B_0$, коли $t = 0$, отримаємо:

$$B(0) = \frac{\alpha_1 Q_1}{m_1} - \frac{j_1 P_0}{m_1 + r_2} + A_1. \quad (2.137)$$

З рівняння (2.137) знаходимо значення A_1 :

$$A_1 = B_0 - \frac{\alpha_1 Q_1}{m_1} + \frac{j_1 P_0}{m_1 + r_2}. \quad (2.138)$$

Враховуючи рівняння (2.138), знаходимо спільне рішення (2.136):

$$B(t) = \frac{\alpha_1 Q_1}{m_1} - \frac{j_1 P_0}{m_1 + r_2} + \left\{ B_0 - \frac{\alpha_1 Q_1}{m_1} + \frac{j_1 P_0}{m_1 + r_2} \right\} \cdot e^{-m_1 t}, \quad (2.139)$$

де $r_2 = j_2 - m_2$.

Таким чином, функції (2.128) і (2.139) є розв'язками системи рівнянь (2.127), яка описує динаміку двох популяцій виду "хижак – жертва". У роботі [86] представлені графіки функцій P і B для різних співвідношень P і B , які відповідно подані на рис. 2.19а і б.

Більш складна модель у вигляді системи лінійних диференціальних рівнянь описує ситуацію взаємовідносин між популяціями "хижак – жертва", якщо обидві популяції мають стійкий, відновлюваний ззовні системи, запас кормів (Q_1 , Q_2):

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = \alpha_1 Q_1 - m_1 B - jP, \\ \frac{dP}{dt} = \alpha_2 Q_2 - m_2 P, \end{cases} \quad (2.140)$$

де α_2 – коефіцієнт засвоєння їжі "хижаком";
 j – коефіцієнт поїдання (пригнічення).

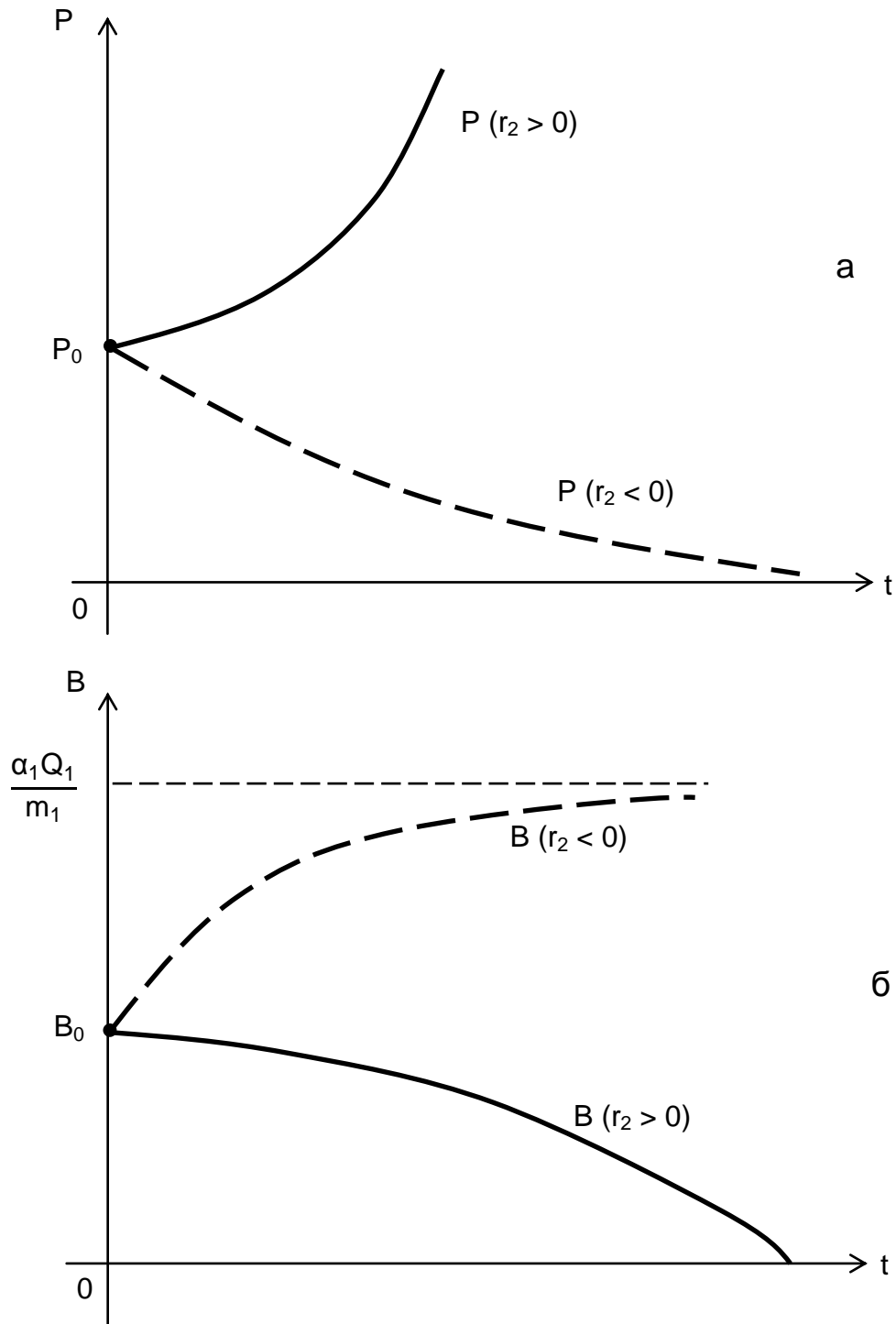


Рис. 2.19. Динаміка популяції "хижаків" (а) та "жертв" (б)

За аналогією с пошуком рішення попередньої моделі отримаємо розв'язок системи (2.140) у вигляді:

$$V(t) = \frac{\alpha_1 m_2 Q_1 - \alpha_2 j Q_2}{m_1 m_2} - \frac{j(m_2 P_0 - \alpha_2 Q_2)}{(m_1 - m_2) m_2} \cdot e^{-m_2 t} + \left\{ B_0 - \frac{\alpha_1 m_2 Q_1 - \alpha_2 j Q_2}{m_1 m_2} - \frac{j(m_2 P_0 - \alpha_2 Q_2)}{(m_1 - m_2) m_2} \right\} \cdot e^{-m_1 t}; \quad (2.141)$$

$$P(t) = \frac{\alpha_2 Q_2}{m_2} + \left\{ P_0 - \frac{\alpha_2 Q_2}{m_2} \right\} \cdot e^{-m_2 t}. \quad (2.142)$$

На відміну від виду функцій $P(t)$, $V(t)$ для попередньої моделі (2.127), рівняння (2.141), (2.142) подають у вигляді графіків (рис. 2.20).

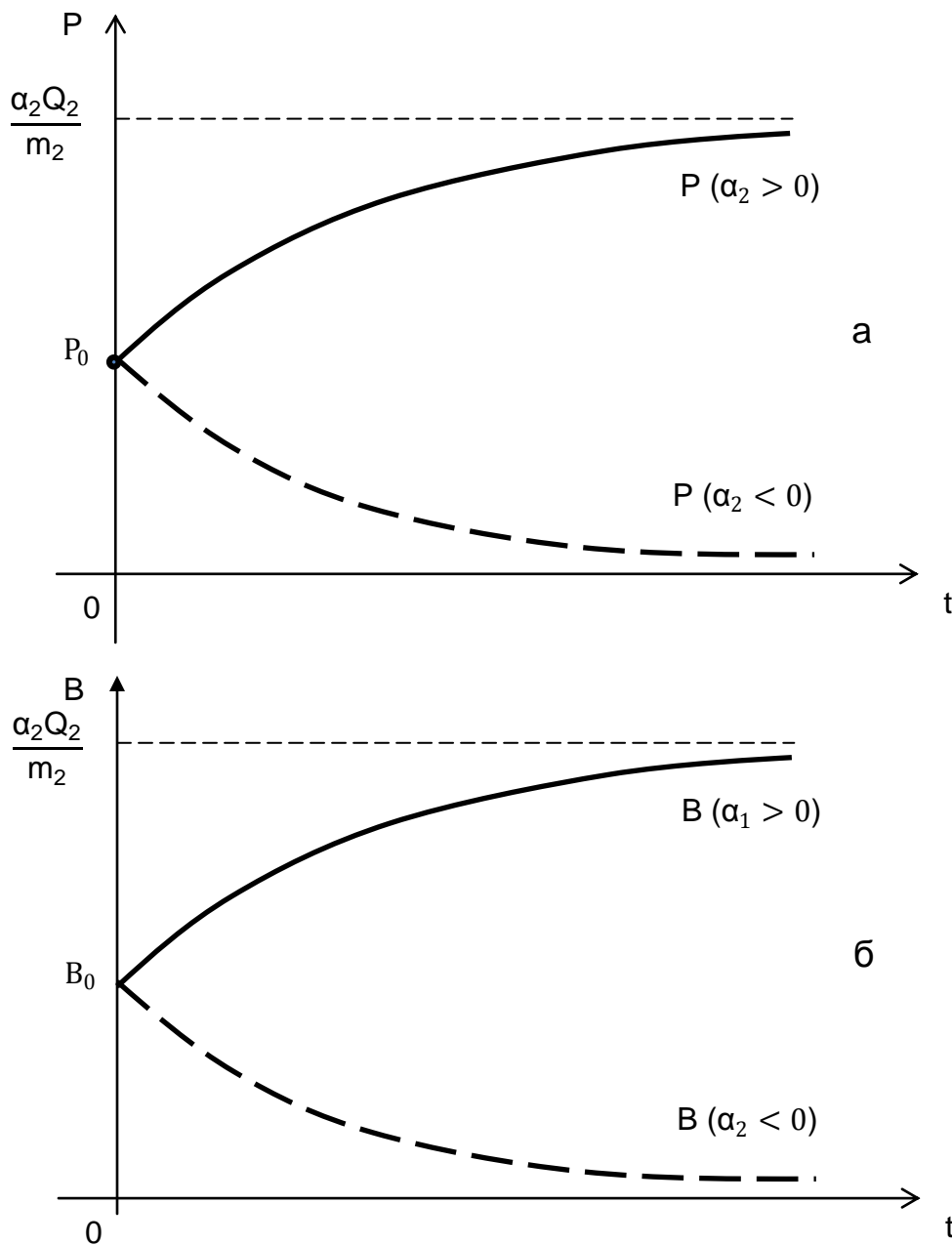


Рис. 2.20. Функції $P(t)$, $V(t)$ за (2.141) та (2.142) відповідно (а), (б)

Якщо запаси їжі не заповнюються ззовні, тобто $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$, то система "хижак – жертва" являє собою закритий тип екосистеми і модель (2.140) спрощується:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = -m_1 B - jP, \\ \frac{dP}{dt} = -m_2 P. \end{cases} \quad (2.143)$$

Рішення системи (2.143) мають вигляд рівнянь:

$$B(t) = \frac{-jP_0}{m_1 - m_2} + \left(B_0 + \frac{jP_0}{m_1 - m_2} \right) \cdot e^{-m_1 t}, \quad (2.144)$$

$$P(t) = P_0 \cdot e^{-m_2 t}, \quad (2.145)$$

де B_0, P_0 – початкова чисельність популяцій відповідного виду.

Проаналізувавши модель В. Вольтерра із системи нелінійних диференціальних рівнянь, що описують взаємодію популяцій "хижак" із чисельністю Y і "жертва" із чисельністю X , маємо:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = aX - bX^2 - cXY, \\ \frac{dY}{dt} = -eY + dXY, \end{cases} \quad (2.146)$$

де a – питома швидкість розмноження;

a / b – ємність середовища;

$-b / X^2$ – чинник пригнічення популяції за рахунок внутрішньої конкуренції, який часто називають демпфуючим елементом, що знижує амплітуду коливань у загальній динаміці процесу;

b, e – коефіцієнти смертності організмів відповідної популяції;

c, d – трофічні коефіцієнти.

При $Y = 0$ численність "жертв" змінюється за логістичною кривою.

На сучасному етапі моделювання екологічних процесів широко застосовують системи рівнянь, які пом'якшують відносно "жорсткої" моделі (2.146) через постійність коефіцієнтів c, d . До того ж в моделях використовують трофічну функцію $V(R, N)$, яка встановлює відповідність

кількості ресурсу їжі (R) від питомої швидкості споживання однією особою із чисельністю N :

$$\begin{cases} \frac{dR}{dt} = Q - V(R, N)N, \\ \frac{dN}{dt} = -mN + kV(R, N)N, \end{cases} \quad (2.147)$$

де Q – швидкість відновлення харчового ресурсу ззовні системи;

$k < 1$ – частина ресурсу, засвоюваного на продуктивні цілі;

m – коефіцієнт смертності, який обернено пропорційний середній тривалості життя особин популяції в певних умовах навколишнього середовища.

Під час застосування системи рівнянь (2.147) можуть враховуватися певні варіації (у найпростішому випадку – величини Q , k , $m = \text{const}$), наприклад, залежність трофічної функції від однієї змінної, частіше R , величину зміни якої обмежують. Характерно, що результати багатьох реальних спостережень показують, що все різноманіття трофічних функцій розпадається всього на два типи залежностей: 1) обмежені асимптоту функції з опуклим вгору графіком (безхребетні хижаки, багато видів хижих риб); 2) логістичні криві (організми з досить складною груповою поведінкою, здатні до навчання – хребетні хижаки). У випадках моделювання екосистем на сьогодні формалізація взаємин у них реалізується з урахуванням уявлень про трофічні функції. Найтиповішим поданням такої функції є схематичне, у вигляді деякого топологічного графа – трофічний ланцюг. Подібний підхід дозволяє більш просто скласти систему диференціальних рівнянь математичної моделі, наприклад, у вигляді:

$$\begin{cases} \frac{dR}{dt} = Q_0 - V_0 N_1 + \sum_{i=1}^m a_i m_i N_i, \\ \frac{dN_1}{dt} = k_1 V_0 N_1 - m_1 N_1 - V_1 N_2, \\ \frac{dN_2}{dt} = k_2 V_1 N_2 - m_2 N_2 - V_2 N_3, \\ \dots \\ \frac{dN_n}{dt} = k_n V_{n-1} N_n - m_n N_n, \end{cases} \quad (2.148)$$

де Q_0 – зовнішній потік ресурсу;

R – первинна кількість ресурсу в екосистемі;

N_i – кількість особин популяції i -го виду;

m_i – коефіцієнт природної смертності особин i -го виду;

k_i – коефіцієнт засвоєння i -им видом особин $(i - 1)$ – виду;

$V_i(N_i)$ – трофічна функція, що характеризує інтенсивність взаємодії особин i -х видів;

$a_i < 1$ – частка відновлювальна деструкторами ресурсу, який міститься у відмерлій біомасі особин i -го виду і який характеризує міру замкнутості екосистеми (для відкритої екосистеми: виділений член першого рівняння (2.148) буде відсутній).

В окрему групу моделей екологічних процесів можуть бути виділені взаємини популяцій "господар – паразит". Істотний розвиток цього напрямку моделювання екологічних процесів зумовило дослідження Р. М. Андерсона [192; 193]. Окремі аспекти проблематики впливу паразитів на організми, в яких вони розвиваються, вивчені досить докладно. Однак багато питань, наприклад, вплив антропогенного чинника за рахунок застосування токсинантів або зміни у видовому складі паразитів під впливом резистентності "господаря" (генетично обумовлена здатність до опору), в достатній мірі не вивчені експериментально. Розглянемо спочатку найпростіші математичні моделі на основі одного або двох лінійних диференціальних рівнянь. Сприятливі умови перебування паразитів чисельністю P усередині "господаря" дозволяють описувати динаміку популяції P подібно до рівняння (2.98):

$$\frac{dP}{dt} = \alpha E_0 - mP, \quad (2.149)$$

де $\alpha > 0$ – постійна швидкості імміграції яєць паразитів в організм "господаря";

E_0 – кількість яєць паразитів у навколишньому середовищі;

$m > 0$ – коефіцієнт природної смертності паразитів.

За несприятливих умов (токсичні речовини в організмі "господаря" чи в навколишньому зовнішньому середовищі) розмноження паразитів може сповільнюватися до повного припинення. Наявність токсикантів в організмі "господаря" обумовлює збільшення смертності паразитів

($m_1 > m$), а в разі токсикантів у зовнішньому середовищі – зменшується значення постійної імітації яєць ($\alpha_1 < \alpha$). Маючи початкові умови ($t = t_0 = 0$, $P = P_0$), чисельність популяції паразитів буде:

$$P(t) = \frac{\alpha E_0}{m} + \left(P_0 - \frac{\alpha E_0}{m} \right) \cdot e^{-mt}. \quad (2.150)$$

Для несприятливих умов (P_1):

$$P_1(t) = \frac{\alpha_1 E_0}{m_1} + \left(P_0 - \frac{\alpha_1 E_0}{m_1} \right) \cdot e^{-m_1 t}. \quad (2.151)$$

Обидва рішення рівнянь (2.150), (2.151) вказують на тенденцію до досягнення стійкої чисельності паразитів при $t \rightarrow \infty$ (стаціонарний стан):

$$P_{CT}(t) = \frac{\alpha E_0}{m} \quad \text{та} \quad P_{1CT}(t) = \frac{\alpha_1 E_0}{m_1}. \quad (2.152)$$

До того ж (α_1 / m_1) \ll α / m та $P_{1CT} \ll P_{CT}$. Під час впливу токсикантів чисельність паразитів зменшується і асимптотично наближається до величини $\alpha E_0 / m$ (рис. 2.21).

На рис. 2.21 та рис. 2.22 відразу відображаються зміни в чисельності популяції "господар" відповідно до змін чисельності популяції "паразит", які не впливають із моделі (2.149), а впливають із більш складної моделі з двох лінійних диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = \alpha E_0 - mP, \\ \frac{dH}{dt} = rH - \beta P, \end{cases} \quad (2.153)$$

де $r = b - d$;

r – коефіцієнт розмноження популяції "господар";

b – коефіцієнт народжуваності ($b > 0$);

d – коефіцієнт смертності ($d > 0$);

β – коефіцієнт пригнічення або шкідливого впливу особин популяції "паразит" на особин популяції "господар".

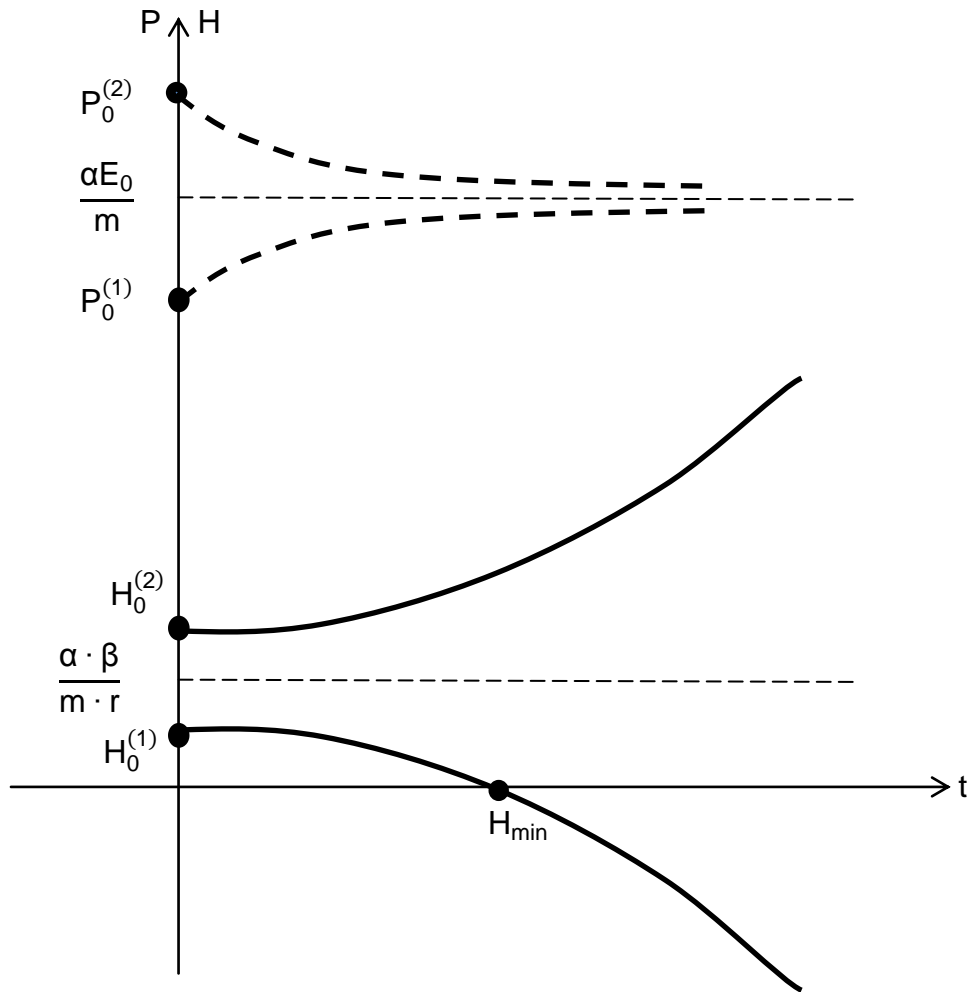


Рис. 2.21. Динаміка взаємовідносин "паразит – хазяїн" ($r > 0$)

Для системи рівнянь (2.153) стаціонарні і нестаціонарні рішення знаходять аналогічно вище поданим рівнянням (2.150), (2.151) і мають вигляд рівнянь (2.154) – (2.157) відповідно:

$$P_{CT} = \frac{\alpha}{m} \cdot E_0, \quad (2.154)$$

$$H_{CT} = \frac{\alpha \cdot \beta}{m \cdot r} \cdot E_0, \quad (2.155)$$

$$P_{(t)} = k_1 \cdot E_0 + (P_0 - k_1 \cdot E_0) \cdot e^{-mt}, \quad (2.156)$$

$$H_{(t)} = k_1 \cdot k_2 \cdot E_0 + k_2 \cdot \frac{P_0 - k_1 \cdot E_0}{1 + k_3} \cdot e^{-mt} + \left(H_0 - k_1 \cdot k_2 \cdot E_0 - k_2 \cdot \frac{P_0 - k_1 \cdot E_0}{1 + k_3} \right) \cdot e^{rt}, \quad (2.157)$$

де $k_1 = \alpha / m$, $k_2 = \beta / r$, $k_3 = m / r$.

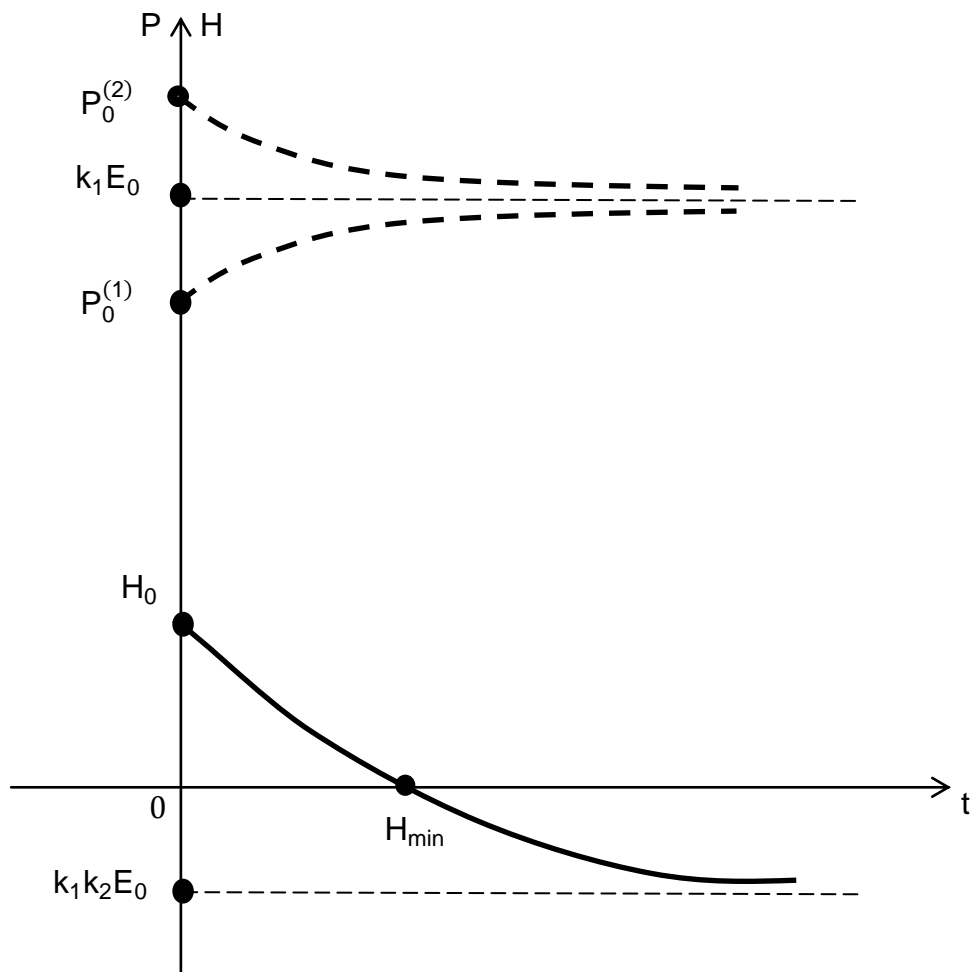


Рис. 2.22. Динаміка взаємовідносин "паразит – хазяїн" ($r < 0$)

Згідно з рівняннями (2.154) – (2.157), відображеними у графічній формі на рис. 2.21 і рис. 2.22, динаміка чисельності обох популяцій чутлива до змін параметрів швидкості міграції, народжуваності, смертності та пригнічення, які враховуються значеннями m , r , β , α та відповідними коефіцієнтами k_1 , k_2 , k_3 .

Однак модель (2.153) також є порівняно простою, оскільки не враховує вплив "господар" на популяцію "паразит". Для процесів, в яких можливий взаємовплив через зворотний зв'язок, також може відбуватися саморегуляція чисельності популяцій, необхідно застосувати більш складні моделі. Одну з таких моделей Р. М. Андерсон розглянув для популяції гельмінтів у риб [192; 193]. До того ж враховано, що чисельність яєць паразитів реально не є постійною величиною, як у попередніх моделях ($E = \text{const}$). Ця величина залежить від чисельності дорослих особин

"паразит", від загибелі яєць у результаті їх поїдання і природної смертності, яка підвищується через збільшення інтенсивності дії токсикантів. Ця модель представлена трьома диференційними рівняннями:

$$\frac{dP}{dt} = \alpha E - m, \quad (2.158)$$

$$\frac{dH}{dt} = rH - \beta P, \quad r = b - d, \quad (2.159)$$

$$\frac{dE}{dt} = \alpha P - \alpha_1 E - jH^*, \quad \alpha_1 = \alpha + m_1, \quad (2.160)$$

де введені такі додаткові позначення:

α – коефіцієнт появи паразитів у водному середовищі;

j – коефіцієнт поїдання яєць паразитів;

$H^* = B + j_0 H$ (B – кількість водних організмів, які не досліджуються);

m_1 – коефіцієнт природної смертності яєць паразитів;

α_1 – коефіцієнт смертності яєць паразитів з урахуванням імміграції в організм "господаря".

У разі підвищення інтенсивності дії токсикантів істотно збільшуються α_1 , j , а зменшуються α , r . Модель (2.158) – (2.160) вже враховує взаємовплив дорослих особин "паразит" та їх яєць, але зворотний зв'язок між "паразит – хазяїн" може бути враховано допущенням про сталість кількості яєць E_0 :

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = \alpha E_0 - mP + \beta_1 H, \\ \frac{dH}{dt} = rH - \beta_2 P, \end{cases} \quad (2.161)$$

де β_1 , β_2 – постійні взаємовпливи "господаря" на "паразита" і навпаки відповідно.

Додатково "пом'якшити" модель із саморегуляцією (2.161) можна шляхом визначення меж чисельності особин популяції "паразит" від k_{\min} до k_{\max} і для "господар" (від k'_{\min} до k'_{\max}). У такому разі модель буде неавтономною, зі змінними коефіцієнтами:

$$\frac{dP}{dt} = \alpha E_0 - mP + \beta_1 \left[k_{\max} + (k_{\min} - k_{\max}) \cdot e^{-\frac{kt}{\beta_c}} \right] \cdot H, \quad (2.162)$$

$$\frac{dH}{dt} = rH - \beta_2 \left[k'_{\max} + (k'_{\min} - k'_{\max}) \cdot e^{-\frac{k't}{\beta_c}} \right] \cdot P, \quad (2.163)$$

де k, k' – постійні верифікації;

$\beta_c = C_{кр} / C$ – постійна інтенсивності дії токсиканту від критичного значення концентрації $C_{кр}$ (при якій гине 50 % "паразитів" і "господарів") до поточної концентрації токсиканту C .

Модель (2.162), (2.163) може бути узагальнена і доповнена до нелінійного вигляду:

$$\frac{dP}{dt} = \alpha E - mP^2 + \beta_1 \left[k_{\max} + (k_{\min} - k_{\max}) \cdot e^{-\frac{kt}{\beta_c}} \right] \cdot P \cdot H, \quad (2.164)$$

$$\frac{dH}{dt} = bH - dH - \beta_2 \left[k'_{\max} + (k'_{\min} - k'_{\max}) \cdot e^{-\frac{k't}{\beta_c}} \right] \cdot H \cdot P, \quad (2.165)$$

$$\frac{dE}{dt} = \alpha PH - \alpha E - m_1 E^2 - jH'. \quad (2.166)$$

Умови розвитку яєць паразитів впливають на динаміку взаємин "паразит – хазяїн" та обчислюються рівнянням (2.166) в моделі (2.164) – (2.166), яка досить повно відображає різні чинники впливу. Для практичного застосування можуть виявитись більш корисними найпростіші лінійні моделі, а більш складні моделі не представляється можливим застосувати без імітаційного моделювання процесів на ЕОМ, але такі моделі надають експериментаторам найбільш точні дані про динаміку чисельності популяцій типу "паразит – хазяїн".

Розділ 3. Застосування моделей для управління складними процесами

3.1. Масообмінні процеси в матеріалознавстві

3.1.1. Моделі дифузії під час твердофазних реакцій у технології тугоплавких неметалічних матеріалів

Дифузійні процеси становлять основу всіх сучасних технологій штучних матеріалів і багатьох видів оброблення найрізноманітніших виробів. Під дифузією розуміють мимовільний перехід нерівноважних фізико-хімічних систем або їх окремих частин до стану рівноваги. Рушійною силою дифузії атомів (іонів) є градієнт хімічного потенціалу:

$$I \sim \frac{d\mu}{dx}, \quad (3.1)$$

де I – кількість речовини, що проходить в одиницю часу через одиницю поверхні, нормальної до напрямку потоку;

μ – хімічний потенціал речовини;

x – відстань переміщення речовини.

У зв'язку з фундаментальним значенням дифузії для різних галузей науки, технологій і практичної діяльності, загальні питання теорії описані у відповідних науково-технічних джерелах літератури, наприклад [38; 46; 70; 83; 99; 126; 158]. Для технології тугоплавких неметалічних матеріалів важливі питання виділення процесів самодифузії (або хаотичною дифузії) і гетеродифузії в кристалічних матеріалах. В однокомпонентних кристалічних матеріалах поняття "концентрація" не має сенсу і флуктуації енергії обумовлюють безперервний хаотичний рух атомів (іонів). Саме цей процес і передбачає термін "самодифузія", а його елементарним актом є перескок атома на відстань розміру параметра кристалічної решітки (a). У зв'язку з тим, що перескакування можуть бути різнотипними (з октаедричної порожнини в тетраедричну або навпаки, з вузла решітки в міжвузля тощо), то зміщення атома (іона) може бути більше або менше параметра a . Тому мірою

відстані перескоку виступає середнє квадратичне зміщення (\bar{x}) багатьма атомами за n перескоків:

$$\bar{x}^2 = (a_1 + a_2 + \dots + a_n) (a_1 + a_2 + \dots + a_n) = a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2 + 2a_1a_2 + 2a_1a_3 + \dots + 2a_1a_n + \dots + 2a_{n-1}a_n. \quad (3.2)$$

У рівнянні (3.2) сума подвоєних добутоків виду $2a_{n-1}a_n$ дорівнює нулю, тобто кожен член $a_1 + a_2 + \dots + a_n$ з рівною ймовірністю може бути негативним або позитивним. Відповідно, формула (3.2) спрощується до суми квадратів, а з урахуванням рівності всіх a_1, a_2, \dots, a_n для однокомпонентних кристалічних речовин, – перетворюється у форму:

$$\bar{x}^2 = n \cdot a^2. \quad (3.3)$$

Для речовин з об'ємно- або гранецентрованою кубічною решіткою число можливих напрямів перескоків дорівнює шести і враховуючи, що число перескоків можна виразити через час (τ) і частоту (f) перескоку або через час перескоку і час "осілого" життя атома (τ_0), – можна застосувати вираз:

$$\bar{x}^2 = fa^2 \cdot \tau \text{ або } \bar{x}^2 = a^2\tau / \tau_0. \quad (3.4)$$

Для переміщення атома в одному з шести можливих напрямках отримують відповідні лінійні коефіцієнти самодифузії (D^* , $\text{см}^2 / \text{с}$):

$$D^* = f \frac{a^2}{6} \text{ або } \frac{a^2}{6\tau_0}. \quad (3.5)$$

Фактично середньоквадратичне зміщення (або дрейф атома) за час τ визначається коефіцієнтом самодифузії:

$$\bar{x}^2 = D^* \cdot \tau. \quad (3.6)$$

У більш багатоконпонентних кристалічних речовинах дифузія приводить до вирівнювання концентрацій компонентів по всьому об'єму, а процес називають гетеродифузією.

У бінарних (компоненти А, В) кристалічних речовинах у будь-якому напрямку можуть бути встановлені потоки речовини А і В. За умови незалежності цих потоків можуть обчислюватися коефіцієнти дифузії для кожного з компонентів (D). У разі визначення гетеродифузії в одному напрямку коефіцієнт дифузії називають загальним (D).

Для твердих розчинів А і В взаємозв'язок загальних і власних коефіцієнтів дифузії виражається рівнянням Даркена:

$$D = D_1 N_2 + D_2 N_1, \quad (3.7)$$

де N_1 , N_2 – молярні частки розчинника і розчиненого компонентів у перерізі напрямку гетеродифузії.

Рівняння (3.7) знаходить застосування під час моделювання процесів дифузії у твердих розчинах тугоплавких оксидів. Різниця у значеннях коефіцієнтів дифузії компонентів визначає дифузійну повзучість і відповідну швидкість течії матеріалу (V):

$$V = (D_1 - D_2) \left(\frac{\partial N_1}{\partial x} \right)_{c = \text{const}}. \quad (3.8)$$

З нерівністю коефіцієнтів взаємної дифузії ($D_{A \rightarrow B} \neq D_{B \rightarrow A}$) пов'язані два важливі у практичному матеріалознавстві ефекти – Киркендалла і Френкеля. У разі $D_{A \rightarrow B} > D_{B \rightarrow A}$ під час переходу атомів А в речовину В залишатимуться в речовині А вакансійні пустоти чи просто вакансії. Вакансії в ході теплових процесів можуть розглядатися подібно віртуальним частинкам із негативною масою, також здатних рухатися, взаємодіяти і рости в розмірах. Тому за відсутності або під час утруднення виведення вакансій на поверхню зразка речовини А, у ньому формуються пори, що мають часто ограновування кристала і називаються негативними кристалами або дифузійними порами. Механізм формування дифузійної пористості належить до ефекту Френкеля. У разі виникнення можливості виходу вакансій на поверхню кордону зразка або взаємодії з іншими вакансіями чи дефектами структури (наприклад, дислокаціями) до поглинання вихідних вакансій відбуваються об'ємні зміни: обсяг В збільшується, а А – зменшується. Відповідно межа розділу А і В зсувається і відбувається дифузійна повзучість. Такий механізм дифузійної повзучості належить до ефекту Киркендалла.

Відомі і багато інших особливостей дифузії: термодинамічний множник коефіцієнта дифузії або поправка Ейнштейна, концентраційні та температурні впливи, відмінності дифузії за міжвузлами і вузлами, різниця в міжзеренному поверхневому і дислокаційному механізмах дифузії, залежність від в'язкості та електропровідності фаз матеріалу та ін. [157]. Однак основні положення засновані на законах Фіка. Перший закон Фіка формулюється наступним чином: кількість дифузійної в одному напрямку речовини (I), що проходить в одиницю часу через одиницю площі нормального до напрямку дифузії перерізу, пропорційно градієнту концентрації ($\partial C/\partial x$):

$$I_i = -D_i \left(\frac{\partial C_i}{\partial x} \right), \quad (3.9)$$

де D_i – коефіцієнт дифузії для i -го компонента; знак мінус вказує, що потік маси спрямований від області високого до області з низькою концентрацією.

Для стаціонарних умов дифузійного потоку виконуються рівності:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_T = \text{const} \text{ та } \left(\frac{\partial C}{\partial T} \right)_x = 0. \quad (3.10)$$

Згідно з першою рівністю (3.10):

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_T = \frac{\Delta C}{\Delta x} = \frac{C_1 - C_0}{\Delta} = -\frac{C_0 - C_1}{\Delta x_1}. \quad (3.11)$$

Відповідно, для стаціонарного потоку перший закон Фіка перетворюється до виду:

$$I = D \frac{C_0 - C_1}{x_1}. \quad (3.12)$$

Для нестационарних умов (рівності (3.10) не виконуються) другий закон Фіка визначає рівність швидкості накопичення дифузійної речовини

в одиниці об'єму і різниці між вхідним і вихідним потоками цієї речовини. Для вхідного потоку можна застосувати формулу (3.9):

$$I_1 = D \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (3.13)$$

Кількість дифузійної речовини на виході потоку можна визначити як суму двох доданків: перший – I_1 , а другий – внесок зміни кількості дифузанта за нескінченно мале зміщення:

$$I_2 = I_1 + \frac{\partial I_1}{\partial x} dx = -D \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) dx. \quad (3.14)$$

Різницю ($I_1 - I_2$) запишемо у вигляді:

$$\frac{(I_1 - I_2)}{dx} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right). \quad (3.15)$$

З формули (3.15) випливає, що зміна потоку дифузанта в часі враховує вираз:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right). \quad (3.16)$$

За умови, що коефіцієнт дифузії не залежить від концентрації ($D \neq f(c)$), можна стверджувати про рівність першої похідної концентрації за часом другої похідної концентрації по відстані:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (3.17)$$

У практиці моделювання найбільш складні і в той же час найбільш важливі завдання пов'язані з визначенням розподілу дифузійної речовини в будь-який момент часу після початку відліку. Відповідно, в математичному сенсі завдання зводяться до вирішення формули (3.17). Це квадратне рівняння в приватних похідних не має спільного рішення, до того ж вид інтеграла залежить від граничних умов. У деяких випадках формулу (3.17)

можна використати для нескінченної, напівнескінченної одновірної дифузії (при $x \rightarrow \infty$). Для квазінапівнескінченної системи приймається наближення, що тіло має нескінченну протяжність у бік позитивних значень x і розмір його істотно більше, ніж відстань на якій спостерігається зміна концентрації в даний час. До того ж можна припускати, що початковий склад речовини матеріального тіла (C_0) скрізь однаковий, а питома поверхнева концентрація відразу після початку експерименту приймає значення насичення (C_H) і зберігається незмінною надалі протягом всього часу. Відповідні граничні умови мають вигляд:

$$\begin{cases} C = C_0 \text{ при } t = 0 \text{ і } 0 < x < \infty, \\ C = C_H \text{ при } x = 0 \text{ і } 0 < t < \infty. \end{cases} \quad (3.18)$$

Відповідний інтегральний вираз для формули (3.17) має вигляд:

$$\frac{C - C_0}{C_H - C_0} = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{0,5x\sqrt{Dt}} e^{-x^2} dx, \quad (3.19)$$

де ліва частина рівняння – ступінь насичення;

$2/\sqrt{\pi}$ – нормовочний множник;

інтеграл $\int_0^\infty e^{-x^2} dx$ – інтеграл помилок [157], а нормовочний множник спільно з інтегралом помилок позначають $\operatorname{erf}x$ (error function); $\lim_{x \rightarrow \infty} = 1$ і застосовується за умови $\lim_{x \rightarrow \infty} (1 - \operatorname{erf}x) = 0$.

У разі заміни змінної:

$$z = 0,5x\sqrt{Dt}, \quad (3.20)$$

отримаємо:

$$\frac{C - C_0}{C_H - C_0} = 1 - \operatorname{erf}z. \quad (3.21)$$

Графік залежності $\operatorname{erf}z$ від z подано на рис. 3.1. Для розрахунків використовують наближення: при $z \geq 2,8$ значення $\operatorname{erf}z \approx 1$.

Половинний ступінь насичення ($C / C_H \approx 0,5$) досягається в разі значення безрозмірного параметра x/\sqrt{Dt} близького до одиниці (0,9538), що видно з рис. 3.2.

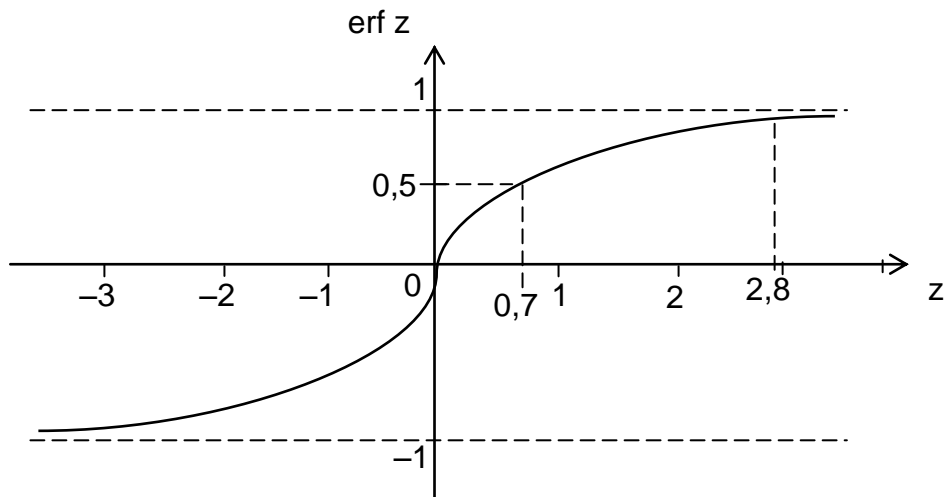


Рис. 3.1. Залежність $\text{erf}z = f(z)$

Основна стадія технології тугоплавких неметалічних матеріалів – термооброблення, яке проводять для консолідації всіх компонентів в єдину структуру. Для полегшення спікання досить поширено його проведення у присутності розплаву, коли температурний режим процесу перевищує значення температур плавлення деяких вихідних компонентів матеріалу. Цьому сприяє значне (на кілька порядків) перевищення коефіцієнтів само-дифузії речовини в рідині, ніж у твердому стані.

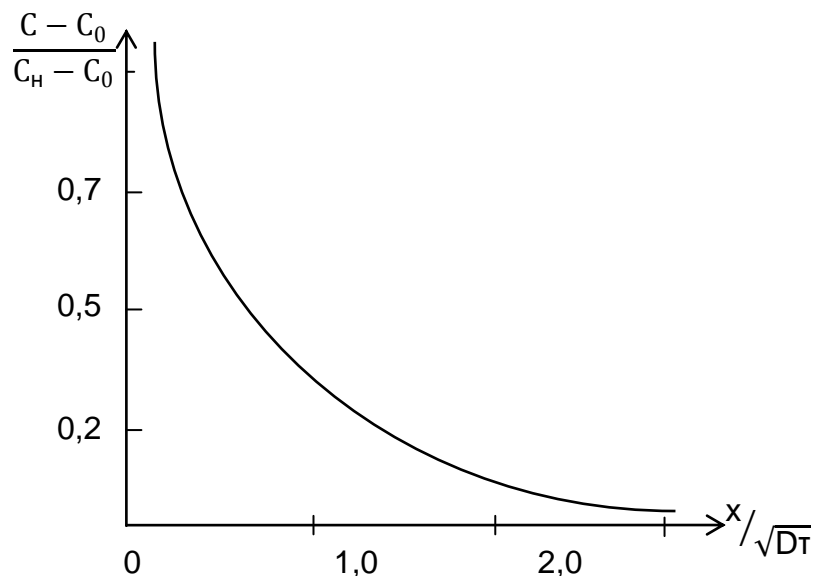


Рис. 3.2. Крива насичення для одновимірної дифузії залежно від значення безрозмірного параметра x / \sqrt{Dt}

Зокрема, в оксидосилікатних розплавах при температурах близько 1000 °C: $D_{Ca^{2+}} = (3 \div 5)10^{-6}$, $D_{P^{5+}} = (2,6 \div 2,7)10^{-6}$ (см² / с). Відомо, що дифузія катіонів в оксидних розплавах значно визначена їх найближчим оточенням, залежить від координації [157]. Так, в системі CaO – Al₂O₃ – SiO₂ зміщення складів матеріалів псевдобінарного перерізу Al₂O₃ – CaSiO₃ в глиноземисту область приводить до зростання частки Al³⁺ в шестерній координації і при 1450 °C $D_{Al^{3+}} = 7 \cdot 10^{-7}$ см² / с при 6 % вмісті Al₂O₃, $D_{Al^{3+}} = 4 \cdot 10^{-7}$ см² / с при 12,5 % вмісті Al₂O₃. У розплавах цієї системи коефіцієнт дифузії лужноземельних катіонів (Ca²⁺) приблизно на порядок вище, ніж для сіткоутворюючого катіона (Si⁴⁺), що обумовлено утворенням комплексних аніонів із кремнекисневих тетраедрів (SiO₄⁴⁻) і відповідним зниженням дифузійної рухливості. У випадках, коли відомий поверхневий натяг розплаву (σ), можна визначити коефіцієнт дифузії за усадкою зразків матеріалу після спікання за модельним рівнянням, відомим як формула Кобла:

$$D = \frac{3kTR^3}{4\sigma \cdot \delta^3} \left(\frac{\Delta L / L_0}{\tau^{0,5}} \right), \quad (3.22)$$

де k – постійна Больцмана ($1,38066 \cdot 10^{-23}$ Дж / К);

R – середній шлях дифузії, приймається рівним середнім розмірам зерна вихідних компонентів;

δ – обсяг кисневої вакансії ($1,6 \cdot 10^{-23}$ см³);

$L, \Delta L$ – початковий розмір зразка і його лінійна зміна після спікання;

τ – час спікання (с).

Для практичних розрахунків формула (3.22) громіздка, і часто вдаються до її графічної інтерпретації з визначенням тангенса кута нахилу експериментальної прямої спікання (логарифмічні координати) серії зразків [157].

Не менш важливо враховувати вплив пор на дифузію в реальних тугоплавких матеріалах. За наявності в полікристалічних матеріалах пор, вони є концентраторами катіонних і аніонних вакансій, що визначає під час спікання дифузію вакансій від пор вглиб матеріалу, а іонів і переважно

катіонів – до пор. Відповідно, реалізується один із механізмів "заліковування" пор з утворенням зарядженої ділянки матеріалу, яка буде перешкоджати подальшому переміщенню іонів. Крім того, деякі сполуки і фази, що присутні в структурі тугоплавких неметалічних матеріалів, можуть мати власну кисневу нестехіометрію, що обумовлює можливість самодифузії кисню і чинить додатковий вплив на загальну дифузію. Значний коефіцієнт самодифузії кисню відзначають для матеріалів на основі стабілізованого (15 мол. % CaO) діоксиду цирконію: при 1000 °C для $Zr_{0,85}Ca_{0,15}O_{1,85}$ значення $D = 7 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2 / \text{с}$ [157]. У безкисневих тугоплавких неметалевих матеріалах характерні ковалентні хімічні зв'язки, які істотно міцніше іонних зв'язків у оксидних матеріалах, відповідно, відзначаються низькі коефіцієнти дифузії. Зокрема, за 2000 °C коефіцієнт дифузії вуглецю в карбіді кремнію (SiC) становить значення 10 – 20 $\text{см}^2 / \text{с}$, що на 11 порядків нижче, ніж у наведеному вище випадку для діоксидцирконієвих матеріалів.

3.1.2. Механізми масообміну в оксидних керамічних матеріалах

У різних видах керамічних виробів найбільш масово використовуються спечені матеріали на основі гетерофазних оксидів [52]. Основною технологічною стадією їх виготовлення є спікання – термооброблення вихідної заготовки для консолідації компонентів матеріалу в структурі певного типу і додання заготовці необхідних розмірів і геометричної форми. У ході термооброблення вихідної заготовки (вироби сирцю) на границі фаз між окремими компонентами відбуваються гетерогенні процеси з участю речовин у твердому стані. Часто не ідентифікують реальний вигляд процесів за їх складністю і спрощено говорять про протікання твердофазних реакцій [157]. У разі локалізації продуктів взаємодії на поверхні розділу між твердими фазами реакції називають топохімічними, які на відміну від реакцій у газоподібному стані або реакцій у розчинах мають суттєві відмінності – поряд із хімічними в них відбуваються фізичні і фізико-хімічні процеси. Виділяють так звані періоди твердофазних реакцій за Хюттигом: "покривання" одного компонента іншим; активація компонентів внаслідок утворення квазімолекул і молекулярних поверхневих плівок; дезактивація молекулярних поверхневих плівок; друга активація компонентів у ході об'ємної дифузії; утворення продукту взаємодії; заліковування

дефектів кристалічної решітки новоутворення і зростання кристалів [157]. Компонентом, що "покриває", як правило, виступає речовина з більш низькою температурою плавлення. Перша активація обумовлена більш високою швидкістю поверхневої дифузії, а дезактивація настає внаслідок збільшення міцності зв'язків у поверхневій плівці.

Реальні твердофазні реакції можуть не мати всіх перерахованих стадій. Фізичні і хімічні процеси твердофазної взаємодії вдається контролювати за умови:

- 1) виникнення дефектів кристалічних решіток;
- 2) реалізації реакцій синтезу і диспропорціонування;
- 3) наявності поліморфізму або політипізму у фазах і перебудови їх кристалічної структури;
- 4) плавленні одного або декількох компонентів;
- 5) евтектичних і перитектичних взаємодій компонентів;
- 6) утворення і розпад твердих розчинів;
- 7) дифузії (граничної, поверхневої, об'ємної) аж до спікання, рекристалізації;
- 8) кристалізації і перекристалізації з розплаву;
- 9) об'ємних змін у процесі термооброблення.

Безперечно, що перелік можливого технологічного інструментарію не вичерпаний перерахованими процесами. Він найімовірніше вказує на неможливість описати твердофазні процеси яким-небудь єдиним механізмом. Водночас реакціям у твердих фазах притаманні всі основні закономірності класичної хімії та розчинів, але з урахуванням особливостей їх протікання в присутності речовин у твердому стані. Для протікання власне хімічної реакції також, як і в будь-якому випадку, необхідно підвести до зони взаємодії вхідних речовин (реагентів) і відведення продуктів реакції. Підведення реагентів, хімічну взаємодію і відведення реагентів можуть розглядати в якості стадій процесу, які послідовно протікають і сумарну швидкість яких лімітує найбільш повільну стадію. Якщо найбільш повільною стадією є безпосередньо хімічна реакція, то гетерогенний процес описується згідно із законами хімічної кінетики і говорять про його протікання в кінетичній області. У разі, якщо процес лімітують стадії підведення реагентів у реакційну зону або відведення продуктів взаємодії, здійснювані за рахунок дифузії, вважають, що процес протікає в дифузійній області. Найчастіше температура сильніше впливає на хімічну

реакцію, ніж на дифузію, але взаємодія, розпочавшись у кінетичній області може із зростанням температури і збільшенням шляху дифузії переходити в дифузійну область [157].

Під час протікання твердофазних реакцій у оксидних керамічних матеріалах важливо враховувати об'ємні зміни між продуктами взаємодії і вихідними реагентами. Об'ємні зміни можуть зменшити контакт між реагуючими компонентами і в граничному випадку повністю його порушити. Характер, ступінь контакту та механізм його підтримки суттєво впливають під час формування структури синтезованих матеріалів. Під час синтезу щільних керамічних матеріалів збільшення обсягу в ході хімічної реакції може мати і позитивну роль (наприклад, підвищити високотемпературну міцність) [94; 97; 134], а також негативну (розпушення структури і утворення вакансійної пористості). Очевидно, що в разі отримання проникної конструкційної кераміки або теплоізоляційних матеріалів слід очікувати протилежного впливу збільшення обсягу в ході твердофазних реакцій, оскільки необхідне формування специфічних пор і капілярів у кінцевій структурі матеріалу. Багато дослідників виділяють індивідуальні шляхи протікання твердофазних взаємодій [144], під час реакцій розкладання з виділенням газоподібного продукту ($AB \rightarrow A \rightarrow B \uparrow$) і залежно від розмірів пор, які утворюються, та рухливості кристалічної решітки можливі три варіанти:

- 1) ідеальний псевдоморфізм по вихідній фазі, тобто збереження іонів А на тих же місцях, які вони займали в кристалічній решітці АВ;
- 2) утворення псевдокристалічної, аморфної фази А;
- 3) безпосереднє утворення кристалічної фази А.

Усі три варіанти розвитку такої твердофазної реакції описують можливу реалізацію послідовних станів продукту взаємодії А: псевдоморфізм за $AB \rightarrow$ аморфна А \rightarrow кристалічна А.

Кристалохімічний аспект моделювання твердофазних реакцій має самостійне і важливе технологічне значення. Зокрема, з'являється можливість враховувати генерації в кристалічній решітці вакансій, передусім, катіонних. Найбільш типовим механізмом генерації вакансій у гетерофазних оксидних керамічних матеріалах є гетеровалентний ізоморфізм, наприклад, три катіони магнію заміщуються на два катіони алюмінію з утворенням вакансії ($3Mg^{2+} \rightarrow 2Al^{3+} + 1 \text{ вакансія}$). Подібний механізм

визначає підвищення ступеня свободи структурних елементів у продукті взаємодії, що демпфує об'ємні напруги під час різкого охолодження і обумовлює підвищення термічної стійкості керамічних матеріалів [90; 91; 95]. Ізоморфне заміщення катіонів є дифузійним процесом, але в технологічній практиці отримання керамічних матеріалів відомі і бездифузійні процеси. В останніх структурні зміни реалізуються під час зсувів атомів (іонів) на відстані, які менші за період кристалічної решітки. Подібний тип мають мартененситні перетворення, фазовий розпад лабільних (абсолютно нестійких) твердих розчинів за спинодальним механізмом на два (або більше) твердих розчинів (недонасичених і пересичених щодо вихідного складу твердого розчину в якій-небудь підрешітці) [89; 128; 133]. Такі бездифузійні процеси технологічно більш складні для управління через їх протікання з надзвичайно високими швидкостями за конкретних температур і через їх розвиток паралельно з реалізацією типових твердофазних реакцій по дифузійному механізму. Водночас бездифузійні процеси є своєрідним відгуком реакційної системи на критичні значення параметрів, досягнутих під час технологічного оброблення або під час експлуатаційних режимів. Вони дедалі більшого значення набувають для нових керамічних матеріалів, призначених для зверхнапружених умов їх застосування. Певний інструментарій управління такими процесами накопичений під час отримання склокристалічних матеріалів за рахунок ліквідації розплавів, а також у технології кордієритової і цельзіанової кераміки [5; 89; 119; 128] за рахунок контролю за розвитком твердофазних реакцій обміну.

Створення нових гетерофазних оксидних керамічних матеріалів є своєрідним резервом для отримання матеріалів із необхідним комплексом властивостей. Так, збільшення кількості вихідних компонентів і відповідна комбінаторна різноманітність фазових композицій з урахуванням морфологічних особливостей кожного інгредієнта, – найбільш прогресивний шлях регулювання експлуатаційних можливостей. Збільшення кількості компонентів ускладнює проблему моделювання фазового складу, мікроструктури і прогнозування властивостей нових матеріалів. Тому значно зростає цінність інформації про механізми масообміну і розвитку модельних уявлень про відповідні процеси. Раціональний метод моделювання масообміну під час синтезу алюмомагнезійальної шпінелі застосував Вагнер, надалі широко став використовуватися для аналізу

механізмів високотемпературного каталізу, а для дослідження утворення твердих розчинів розвинений Шмальцридом і описаний у роботах [70; 96; 157; 171]. Цей метод наочний і інформативний для розроблення найбільш перспективних керамічних матеріалів із дисипативною структурою, які здатні "розумно" адаптувати фазовий склад до змін параметрів зовнішнього середовища за рахунок самоорганізації, що реалізується під час досягнення критичних значень температури і складу структурних компонентів у ході спряження твердофазних реакцій обміну в системі $\text{MgO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$ [89 – 91; 95; 96; 119; 128; 133].

Вихідні модельні уявлення про твердофазні обмінні реакції в зазначеній системі враховували участь лише стехіометричних оксидів:

- 1) $\text{A}_3\text{S}_2 + 2\text{M}_2\text{S} = 3\text{A} + 4\text{MS}$;
- 2) $4\text{MA} + 4\text{MS} = 2\text{M}_2\text{S} + \text{M}_4\text{A}_4\text{S}_2$;
- 3) $\text{M}_4\text{A}_4\text{S}_2 + 16\text{MS} = 8\text{M}_2\text{S} + 2\text{M}_2\text{A}_2\text{S}_5$;
- 4) $4\text{MA} + 20\text{MS} = 10\text{M}_2\text{S} + 2\text{M}_2\text{A}_2\text{S}_5$;
- 5) $\text{A}_3\text{S}_2 + 4\text{MA} = 3\text{A} + \text{M}_4\text{A}_4\text{S}_2$;
- 6) $4\text{A}_3\text{S}_2 + \text{M}_4\text{A}_4\text{S}_2 = 12\text{A} + 2\text{M}_2\text{A}_2\text{S}_5$;
- 7) $5\text{A}_3\text{S}_2 + 4\text{MA} = 15\text{A} + 2\text{M}_2\text{A}_2\text{S}_5$.

У реакції (1) – (7) застосована для скорочення подальшого запису проста їх нумерація та умовні позначення, які будуть використовуватися і далі: M – MgO , A – Al_2O_3 , S – SiO_2 . Реакції (1) – (3) фактично є елементарними стадіями реакцій (4) – (7), хімічні рівняння яких можуть бути отримані відповідним алгебраїчним підсумовуванням:

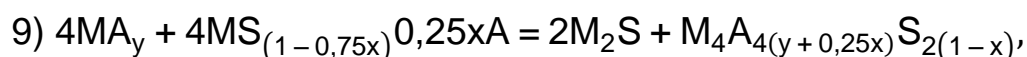
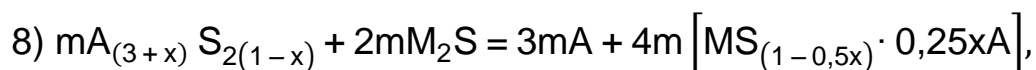
- (4) \equiv (2) + (3);
- (5) \equiv (1) + (2);
- (6) \equiv 4·(1) + (3);
- (7) \equiv (5) + (6) або 5(1) + (2) + (3) або 5(1) + (4).

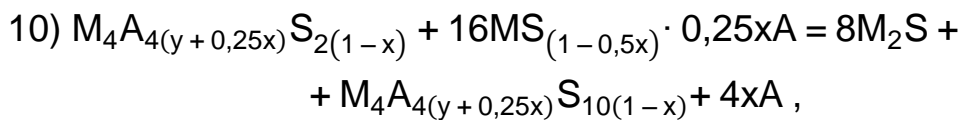
У ході серії подальших досліджень матеріалів системи $\text{MgO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$ (наприклад, [96; 97; 134]) уявлення про масообмін були значно розвинені. Наявність у реакцій (4) – (7) загальних стадій масообміну вказує на можливість їх спряження за певних температур у новий механізм реалізації хімічної взаємодії завдяки розвитку флуктуацій складу реакційної системи до макрорівня (біфуркацій) і "відбору" серед термодинамічно можливих фаз тільки більш адаптованих, що відповідають сумарним рівнянням реакції. До того ж самоорганізуючий процес розвивається

як коопераційне явище з участю великої кількості частинок, оскільки за критичного значення температури перехід до біфуркацій реалізується стрибкоподібно і реакційна система віддаляється від стану рівноваги, що підвищує автономність існування нової фазової комбінації в умовах підвищеного термічного навантаження із збереженням цілісності матеріалу. Ці обставини зумовили додаткову актуальність отримання таких "розумних" керамічних матеріалів, які на відміну від відомих сплавів з ефектом пам'яті форми мають ефект пам'яті фазового складу в умовах зміни температури експлуатації виробів із них [126; 180].

При температурах спряження в реакційній системі матеріалів, що спекаються, встановлюється стаціонарне, термодинамічно рівноймовірне протікання твердофазних реакцій з утворенням дисипативної структури. Останній термін введений у науковий лексикон В. Пригожиним для підкреслення відмінності від рівноважної структури, в якій положення кожного елемента і взаємозв'язків між ними статично і конкретно обумовлене. Дисипативні структури динамічні, вони постійно видозмінюються на нанорозмірному рівні щодо фазового складу (рівноймовірно утворення кожної з фаз, що беруть участь у спряжених реакціях) і щодо конформаційної будови [134]. У зразках керамічних матеріалів, охолоджувальних від температури спряження в режимі загартування, часто спостерігаються так звані модульовані або графічні ділянки в мікроструктурі [70; 90; 91; 95 – 97].

Перспективи керамічних матеріалів, що реалізують спряження твердофазних реакцій обміну і утворюють дисипативні структури, вимагають уточнити модель механізму масообміну в системі $MgO - Al_2O_3 - SiO_2$ з урахуванням можливої участі в реакціях (1) – (7) не тільки стехіометричних сполук, але і твердих розчинів на їх основі. По суті, коригуванню підлягав запис реагентів в реакціях (1) – (3), оскільки схема спряження цих "елементарних" стадій для реакцій (4) – (7) повинна залишатися принципово в тому самому вигляді. З урахуванням меж твердих розчинів на основі сполук системи $MgO - Al_2O_3 - SiO_2$ нова модель масообміну описується, натомість реакцій (1) – (3), наступними реакціями:





де $A_{(3+x)}S_{2(1-x)}$, MA_y , $MS_{(1-0,5x)} \cdot 0,25xA$, $M_4A_{4(y+0,25x)}S_{2(1-x)}$, $M_4A_{4(y+0,25x)}S_{10(1-x)}$ – тверді розчини на основі муліту, шпінелі, кліноенстатиту (так званий алюмінієвий енстатит), сапфірину та кордієриту відповідно.

Аналітична форма рівнянь реакцій (8) – (10), а також рівняння типу (4) – (7), які нескладно записати з урахуванням твердих розчинів через комбінації реакцій (8) – (10), складні для сприйняття масообміну в технологічній практиці. Для усунення цього недоліку застосовано схематичне моделювання за Вагнер – Шмальцридом. Із цією метою, подібно до моделей для реакцій (1) – (7) [92], механізм дифузійного масообміну представляли графічними блоками. На кінцях схем розміщували напівнескінченні блоки, що відповідають вихідним реагентам, між ними розташовували реакційну зону, що містить низку блоків, котрі відповідають продуктам реакцій і розділених умовним міжфазним кордоном у вигляді відрізка (або декількох відрізків) прямої. Киснева підрешітка всіх реагентів може вважатися інертною в механізмі масообміну, оскільки порівняно швидко підлаштовується під зміни катіонних підрешіток, що лімітують процес. Фактично складені схеми катіонного масообміну, на яких пунктиром у верхній частині виділені кордони реакційної зони, стрілками від відповідних міжфазних кордонів вказані напрямки дифузії катіонів, а поруч – кількість цих катіонів. На рис. 3.3 подано схеми механізму масообміну з реакцій (8) – (10), а на рис. 3.4 та рис. 3.5 для реакцій (4) – (7), що враховують можливість участі у взаємодії твердих розчинів.

На рис. 3.3 – 3.5 наочно простежується механізм масообміну у твердофазних реакціях системи $MgO - Al_2O_3 - SiO_2$, який узгоджується з основними термодинамічними закономірностями їх спряження [96] і може служити інструментарієм для отримання "розумних" керамічних матеріалів із заданим фазовим складом та комплексом необхідних фізико-механічних властивостей.

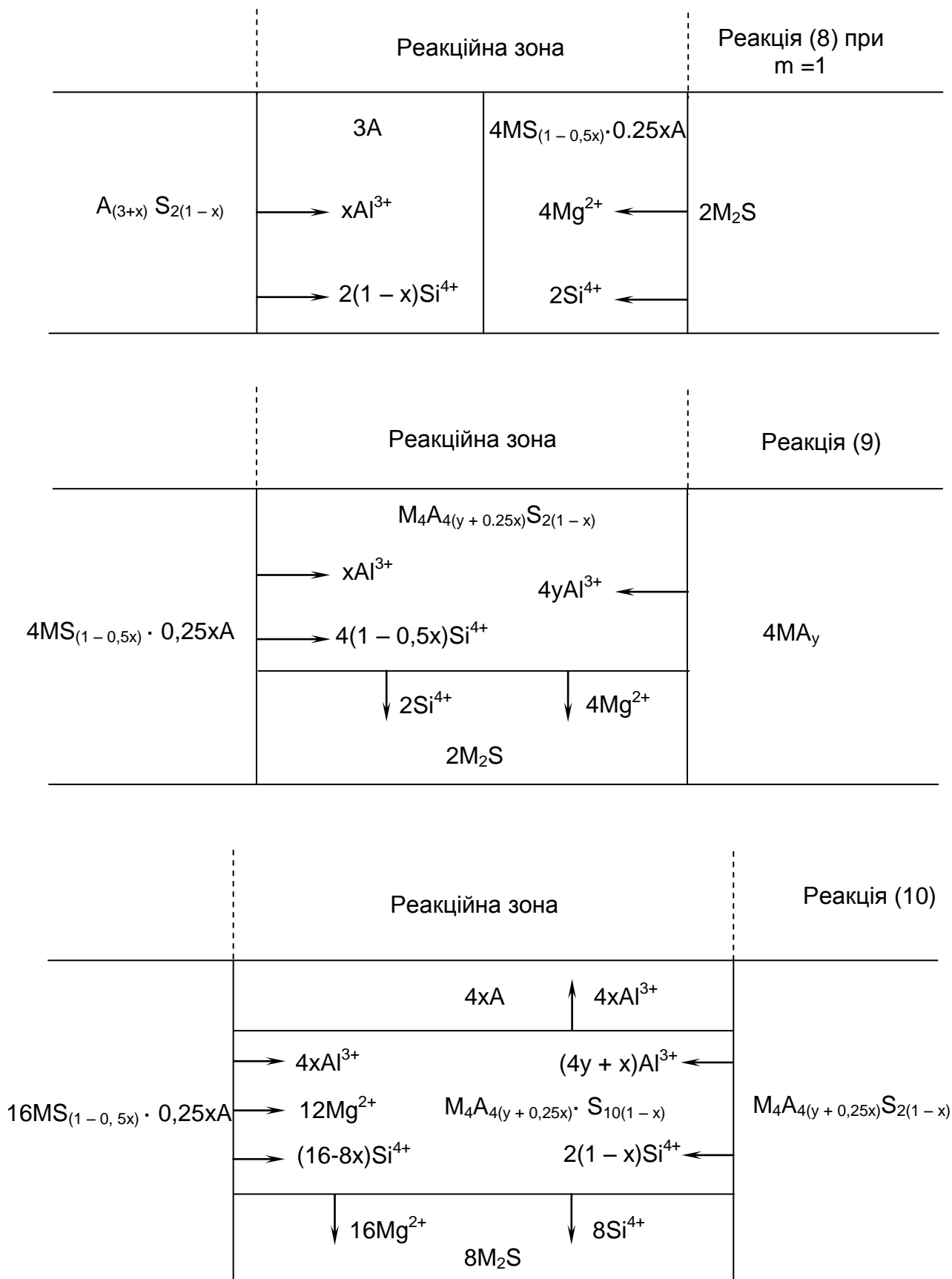


Рис. 3.3. Схема механізму дифузійного масообміну у твердофазних реакціях (8) – (10)

Реакція (4)				
$16MS_{(1-0,5x)} \cdot 0,25xA$	$4xA$		$M_4A_{4(y+0,25x)}S_{2(1-x)}$	$2M_2S$
	$M_4A_{4(y+0,25x)}S_{10(1-x)}$			
	$8M_2S$			
$4MS_{(1-0,5x)} \cdot 0,25xA$	$2M_2S$			

Реакція (6)				
$4A_{(3+x)}S_{2(1-x)}$	$12A$	$16MS_{(1-0,5x)} \cdot 0,25xA$	$4xA$	$M_4A_{4(y+0,25x)}S_{2(1-x)}$
			$M_4A_{4(y+0,25x)}S_{10(1-x)}$	
			$8M_2S$	

Реакція (7)				
$A_{(3+x)}S_{2(1-x)}$	$3A$	$4MS_{(1-0,5x)} \cdot 0,25xA$	$M_4A_{4(y+0,25x)}S_{2(1-x)}$	$4MA_y$
			$2M_2S$	

Рис. 3.4. Схема механізму сполучення дифузійних масообмінних взаємодій у реакціях (4), (6) і (7)

Реакція обернена (7)				
$4A_{(3+x)}S_{2(1-x)}$	$12A$	$16MS_{(1-0,5x)} \cdot 0,25xA$	$4xA$	$M_4A_{4(y+0,25x)}S_{2(1-x)}$
			$M_4A_{4(y+0,25x)}S_{10(1-x)}$	
			$8M_2S$	
$A_{(3+x)}S_{2(1-x)}$	$3A$	$4MS_{(1-0,5x)} \cdot 0,25xA$	$2M_2S$	

Рис. 3.5. Схема механізму сумарного сполучення дифузійних масообмінних взаємодій у реакції оберненій (7)

3.1.3. Топологічні моделі твердофазних реакцій

Особливості процесів масообміну у твердофазних реакціях під час отримання нових керамічних матеріалів раціонально аналізувати на моделях, що становлять собою топологічні графи [9; 15; 87]. Із цією самою метою представляється раціональним скористатися побудовою на основі рівнянь хімічних реакцій двочасткових графів з орієнтованими ребрами. У вершини графів поміщають реагенти, ребра – орієнтують від вихідних реагентів до продуктів взаємодії, зображуючи їх стрілками. Для складних масообмінних процесів, у яких беруть участь кілька хімічних реакцій, подібні топологічні графи можуть служити індикатором самоорганізуючих систем. Спряження реакцій буде проявлятися утворенням на графах циклів, а вища ступінь спряження, що відповідає періодичному, послідовному спряженню з видаленням реакційної системи від стану рівноваги і з формуванням дисипативної структури, утворенням на графі орієнтованого циклу (характеризується можливістю обходу всіх його вершин за напрямками ребер), в якому беруть участь усі проміжні речовини твердофазної взаємодії і всі реакції (розрізняються типом позначення ребер) [96].

Топологічний граф, що відображає спряження реакцій типу (2) і (3) з урахуванням твердих розчинів, належить до класу плоских, що видно з відсутності перетину ребер на рис. 3.6а. Усі цикли цього графа неорієнтовані, з ним не можна пройти через усі вершини і ребра тільки за напрямками стрілок.

На можливість інгібування сумарного процесу взаємодії за спряженими реакціями типу (2) і (3) вказує наявність у графі вершин двох типів:

вершин тільки з вихідними стрілками обох типів ребер (наприклад, Е на рис. 3.6а), що вказує на витрачання однієї і тієї ж речовини в різних реакціях, що забезпечує конкуренцію – гальмування сумарного взаємодії;

вершин тільки з вхідними стрілками обох типів ребер (наприклад, Ф на рис. 3.6а), що вказує на утворення однакового продукту взаємодії і гальмування за рахунок його надмірного накопичення.

Каталізатором сумарної взаємодії під час спряження реакцій типу (2) і (3) виступає сапфіриновий твердий розчин, позначений на рис. 3.6а вершиною С, оскільки до неї підходять стрілки одного типу реакцій і виходять стрілки іншого типу реакції, що вказує на утворення в одній із реакцій

продукту, який є вихідним реагентом для розвитку іншої реакції. На топологічному графі вершини, які об'єднують різні типи протилежно спрямованих ребер, відповідають проміжним речовинам сумарної взаємодії.

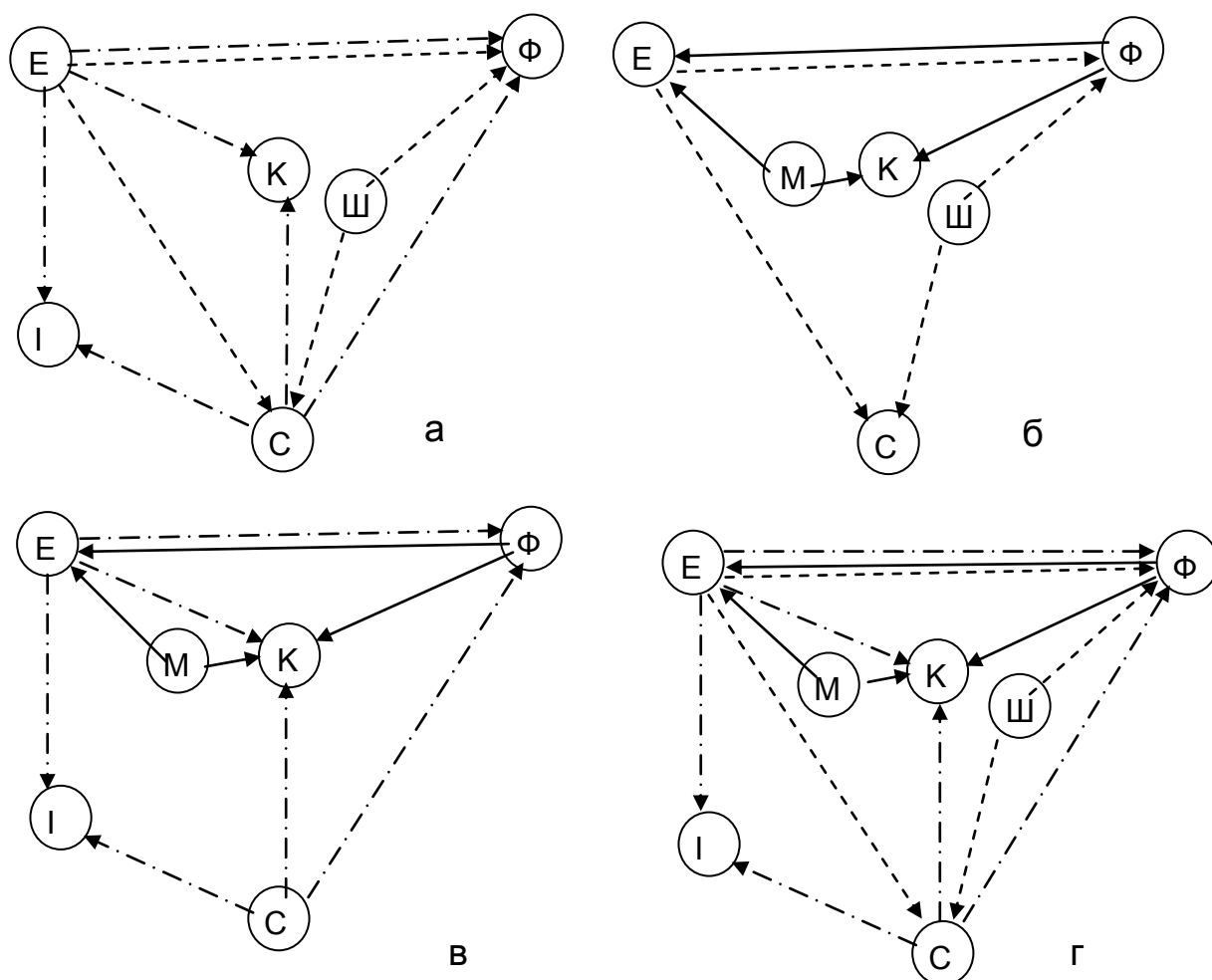


Рис. 3.6. Топологічні графи для спряження реакцій 1 – 3:

Е – твердий розчин на основі енстатиту,
 так званий алюмінієвий енстатит; Ф – форстерит; К – корунд;
 тверді розчини на основі:
 Ш – шпінелі; М – муліту; З – сапфірину; І – кордієриту

Наявність на графі спарених ребер свідчить про наявність спільного для обох спряжених реакцій напряму дифузійного масопереносу, як між вершинами Е та Ф на рис. 3.6а, а сам вигляд графа належить до мультиграфа [9; 15; 87]. Для плоских мультиграфів існує взаємозв'язок між

кількістю його вершин (k), кількістю ребер (m) і кількістю елементарних циклів (f), в тому числі виродженого – у вигляді спарених ребер, а також нескінченного циклу, навколишнього мультиграфа. Така залежність визначена формулою Ейлера:

$$k = m - f + 2. \quad (3.23)$$

Для випадку графа на рис. 3.6а формула Ейлера набуває значення $k = 10 - 6 + 2 = 6$, що не складно перевірити на рисунку. Кількість елементарних циклів, без урахування нескінченного, називають цикломатичним числом (ν) і визначають за формулою (3.23):

$$\nu = m - k + 1. \quad (3.24)$$

З формули (3.24) і раніше визначеного значення f випливає, що цикломатичне число мультиграфа на рис. 3.6а дорівнює $\nu = 10 - 6 + 1 = 5$. Подібна інформація може представляти самостійну цінність під час вирішення більш складних завдань із доданням певної ваги вершин або довжин ребер графа, для визначення критичних шляхів розвитку масообмінних процесів. Крім того, топологічні графи можуть бути представлені в матричній формі і така інформація буде доповнювати результати матричного аналізу. Кількість і топологічну будову циклів у графі важливо знати у зв'язку з тим, що цикли із загальними вершинами і ребрами є індикаторами можливості критичних явищ у кінетиці процесу. Зокрема, показником існування множинності точок стаціонарних станів реакційної системи [30; 31].

Спряження твердофазних реакцій типу (1) та (2) з урахуванням можливості утворення твердих розчинів відображає топологічний граф на рис. 3.6б. Цей граф також належить до типу плоских мультиграфів і характеризується значеннями $k = 8 - 4 + 2 = 6$ і відповідно $\nu = 8 - 6 + 1 = 3$. Вершини Е й Ф у сукупності зі спареними і різноспрямованими ребрами вказують на можливість прояву перехресного автокаталізу в сумарній взаємодії, основну роль у якому виконують твердий розчин енстатита і форстерита (вказує вироджений через спареність ребер, але орієнтований цикл Е – Ф на рис. 3.6б).

Реакції типу (1) та (3) під час їх спряження в єдиний механізм масообміну відображено топологічним графом рис. 3.6в. Граф також є плоским мультиграфом зі значенням $k = 10 - 6 + 2 = 6$ і $v = 10 - 6 + 1 = 5$. Роль виродженого циклу Е – Ф (відповідно, енстатитового твердого розчину і форстерита) аналогічна описаним для графа на рис. 3.6б, але наявність у вершини К тільки ребер, що сходяться, від обох реакцій вказує на складність перехресного автокаталізу за рахунок інгібування через накопичення загального продукту (корунду). Крім того, під час твердофазних реакцій згідно з графом 3.6б сапфіриновий твердий розчин тільки утворюється, а згідно з графом 3.6в – лише витрачається. Крім корунду під час спряження реакцій (1) і (3) утворюється кордієрит і граф 3.6в дозволяє зрозуміти механізм масообміну під час його синтезу.

На відміну від топологічних графів на рис. 3.6а – 3.6в, які фактично відображають твердофазні реакції (4) – (6) через відповідне спряження їх елементарних стадій у вигляді реакцій (1) – (3), граф на рис. 3.6г описує найскладніше спряження всіх трьох елементарних стадій (1) – (3) у взаємодії з реакцією типу (7). Цей граф найбільш повно відображає весь механізм масообміну, є плоским мультиграфом ($k = 14 - 9 + 2 = 7$, $v = 14 - 7 + 1 = 8$) і в ньому присутній орієнтований цикл Ф – Е – С (крім вироджених за рахунок спарювання ребер), який об'єднує вершини, відповідні проміжним продуктам у сумарній взаємодії, а також всі три типи елементарних стадій – реакцій (1) – (3). Тому в реакційній системі кожна із цих проміжних речовин забезпечує можливість перехресного автокаталізу, а інгібує сумарний процес – накопичення корунду (до відповідної вершини К на рис. 3.6г ребра різних типів тільки сходяться). На шляху термічної еволюції реакційна система, відповідна графу рис. 3.6г, може проявляти кооперативний, який самоорганізується, характер. Спряження твердофазних реакцій може проявлятися: *кінетичним спряженням* (на графі утворюються цикли із загальними вершинами); *термодинамічним спряженням* (на графі утворюються цикли зі спільними ребрами); *об'єднаним варіантом* (мультиграф, в якому всі вершини, що відповідають проміжним речовинам, що об'єднані в орієнтований цикл і складаються з усіх типів ребер (гіперцикл) [96]. На рис. 3.6г видно гіперцикл Е – Ф – С, що вказує на взаємоузгодженість енергомасообмінних процесів у реакційній системі через періодичний характер спряження твердофазних реакцій, котрий проявляється не тільки в "підстроюванні" швидкостей, але навіть

у зміні напрямків окремих стадій і, більш того, лише сумарного процесу. Динамічна поведінка реакційної системи згідно з графом рис. 3.6г стабілізується за рахунок квазістаціонарного стану проміжних продуктів взаємодії через різні шляхи масообміну, в тому числі з різними напрямками дифузійних потоків.

Топологічні графи в якості моделей твердофазних реакцій системи $\text{MgO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$ можуть застосовуватися без обмежень під час аналізу складних взаємодій у будь-яких інших багатокomпонентних оксидних системах та стануть у нагоді в технологічній практиці під час розроблення нових керамічних матеріалів, призначених для експлуатації виробів із них у понад термонавантажених умовах експлуатації.

3.1.4. Кінетичні моделі спікання гетерофазних оксидних матеріалів

Моделювання кінетики твердофазних реакцій має важливе прикладне значення в прогнозуванні основних фізико-хімічних властивостей оксидних керамічних матеріалів і, відповідно, має глибокий історичний аспект і різноманітність конкретних моделей. У публікації [157] наведені найтипівші види кінетичних кривих залежностей ступеня перетворення (засвоєння) вихідної в кінцеву речовину від часу або температури проведення процесу, а також залежностей швидкостей твердофазних процесів перетворення від ступеня перетворення. Підкреслено, що опис таких кінетичних кривих заснований на певних моделях твердофазних взаємодій, серед яких домінуючою є модель об'ємної дифузії реагентів через шар продукту взаємодії, у тому числі односторонньої і зустрічної. Так, Тамман експериментально встановив обернено-пропорційну залежність зміни шару продукту твердофазної взаємодії від товщини цього шару (x) в ізотермічних умовах випалу [157]:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{k}{x}, \quad (3.25)$$

де k – коефіцієнт пропорційності, який згідно з Вагнером для випадку синтезу алюмомагнезійної шпінелі (MgAl_2O_4) з оксидів пропорційний коефіцієнту дифузії (D), тобто $k = b \cdot D$, де b – коефіцієнт відповідності.

Інтегруючи вираз (3.25) з урахуванням граничних умов, за яких у початковий момент твердофазної взаємодії товщина шару дорівнює нулю ($t = 0, x = 0$), отримаємо:

$$x^2 = 2bDt = k_p t, \quad (3.26)$$

де k_p – константа швидкості параболічного процесу.

Рівняння (3.26) враховує односторонній характер дифузії покривальної речовини, її надлишок і подання у вигляді однакових за розміром сферичних частинок із початковим радіусом R . У такому випадку ступінь перетворення (α , частки одиниці) виражається у вигляді:

$$\alpha = \frac{[R^3 - (R - x)^3]}{R^3}. \quad (3.27)$$

Широко застосовуване в матеріалознавстві оксидних вогнетривів рівняння Яндера отримано під час комбінування виразів (3.26) і (3.27):

$$kt = \left(1 - \sqrt[3]{1 - \alpha}\right)^2, \quad (3.28)$$

де $k = 2bD/R^2$.

Рівняння (3.28) зручне для технологічної практики, оскільки для різних температур синтезу вміст речовини, що прореагувала, через певний час порівняно легко встановлюється експериментально і досить просто

будуються графічні залежності $\left[1 - (1 - \alpha)^{1/3}\right]^2$ від t . На графіках отримують серію прямих, що виходять із початку координат, тангенс нахилу яких відповідає значенню константи k за певної температури.

Модель Яндера має декілька обмежень і дає адекватні результати для порівняно низьких ступенів перетворення речовини ($\alpha \sim 0,1 \dots 0,4$), у ній у неявному вигляді використані положення про дрейф атомів з урахуванням рівняння Даркена, а коефіцієнт дифузії має умовний характер через залежність (3.27) для ступеня перетворення одночасно як від кінетичних, так і від дифузійних процесів.

Значне поширення під час розроблення барійвміщуючих спеціальних в'язучих речовин із підвищеною радіаційною стійкістю отримала модель Гістлінга – Броунштейна. У рівнянні цієї моделі приймаються умови Яндера, але швидкість реакції визначають не за параболічною залежністю (3.26), а згідно з виразом:

$$\frac{\partial x}{\partial \tau} = \frac{k \cdot R_0}{[x (R_0 - x)]}. \quad (3.29)$$

У формулі (3.29) права частина відображає потовщення шару продукту у сферичній частині. Інтегруючи формулу (3.29) і висловлюючи x через α із застосуванням (3.27), отримуємо залежність α від тривалості процесу (τ) і радіуса (R), яка має назву рівняння Гістлінга – Броунштейна:

$$\frac{k\tau}{R^2} = 1 - \frac{2\alpha}{3} - (1 - \alpha)^{\frac{2}{3}}. \quad (3.30)$$

Модель (3.30) адекватно описує кінетику синтезу гетерофазних барійвміщуючих в'язучих речовин і неодноразово апробована провідними фахівцями в цій сфері – науковою школою проф. Г. М. Шабанової [62; 63]. До того ж відзначається позитивний момент у застосуванні цієї моделі за можливості визначення ступеня засвоєння оксиду барію в різних умовах високотемпературного синтезу із застосуванням етилглицератного методу хімічного аналізу. Для високих значень α рекомендується застосовувати видозмінене рівняння дифузійної кінетики [96]:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = \frac{k(1 - \alpha)^{1/3}}{1 - (1 - \alpha)^{1/3}}. \quad (3.31)$$

Для топологічних реакцій, в тому числі за участю газової фази через розкладання, дисоціації вихідних реагентів, отримано загальний вид кінетичного рівняння [96]:

$$1 - (1 - \alpha)^{1/n} = k\tau, \quad (3.32)$$

де n – постійна, залежна від мірності дифузії.

Деякі кінетичні рівняння та умови дифузійних процесів зведені в табл. 3.1.

Таблиця 3.1

Кінетичні моделі

№	Диференційне рівняння	Інтегральне рівняння	Умова дифузії, назва моделі
1	2	3	4
1	$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = \frac{k}{\alpha}$	$k\tau = \alpha^2$	1-мірна дифузія, $D = \text{const}$
2	$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = k[\ln(1 - \alpha)]$	$k\tau = (1 - \alpha) \cdot \ln(1 - \alpha) + \alpha$	2-мірна дифузія, циліндрична симетрія
3	$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = k(1 - \alpha)^{1/3} \times [-\ln(1 - \alpha)]^{-1}$	$k\tau = [1 - (1 - \alpha)^{1/3}]^2$	3-мірна дифузія, сферична симетрія, модель Яндера
4	$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = k[-\ln(1 - \alpha)]^{-1}$	$k\tau = \left(1 - 2 \cdot \frac{\alpha}{3}\right) - (1 - \alpha)^{2/3}$	3-мірна дифузія, сферична симетрія, модель Гістлінга – Броунштейна
5	$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = k(1 - \alpha)$	$k\tau = -\ln(1 - \alpha)$	Випадкові зародки, один на кожен частину
6	$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = k(1 - \alpha) \times [-\ln(1 - \alpha)]^{1/2}$	$k\tau = [-\ln(1 - \alpha)]^{1/2}$	Випадкові зародки та їх ріст у двох напрямках, модель Аврамі
7	$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = k(1 - \alpha)^{1/3}$	$k\tau = 1 - (1 - \alpha)^{2/3}$	1-мірний рух міжфазної границі
8	$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = k(1 - \alpha)^{1/2}$	$k\tau = 1 - (1 - \alpha)^{1/3}$	2-мірний рух міжфазної границі, циліндрична симетрія, рівняння "стискального циліндра"
9	$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = k(1 - \alpha)^{2/3}$	$k\tau = 1 - (1 - \alpha)^{1/3}$	3-мірний рух міжфазної границі, циліндрична симетрія, рівняння "стискальної сфери"
10	$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = \frac{k}{\tau}$	$k \ln \tau = 1 - (1 - \alpha)^{1/3}$	Рівняння Таммана
11	$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = \frac{k}{(x \cdot \tau)}$	$k \ln \tau = [1 - (1 - \alpha)^{1/3}]^2$	Рівняння Крегера – Циглера
12	$\frac{\partial V}{\partial \tau} = \frac{4\pi k D R_1}{(R_2 - R_1)\tau}$	$k\tau = \left(\frac{z}{z-1}\right) - (1 - \alpha)^{2/3} - \frac{[1 + \alpha(z-1)]^{2/3}}{(z-1)}$	Рівняння Картера – Валенсі – Хольберта

Для моделі № 12 використовують умовні позначення: $z = v_1 / v_2$, де v_1 – об'єм продуктів реакції, v_2 – обсяг покривального матеріалу, в доповненні до сферичних часток із відповідними радіусами (R_1, R_2).

У табл. 3.1 моделі № 4, 10 – 12 застосовані для кінетичних залежностей між активними компонентами і матеріалів з підвищеною концентрацією дефектів [96]. Для подібних випадків, а також під час взаємодії твердих тіл із газами, популярним є рівняння Колмогорова – Єрофеева:

$$\alpha = 1 - e^{-k\tau^m}, \quad (3.33)$$

де m – кінетичний параметр, величина якого дозволяє відрізнити кінетичну і дифузійну області процесу, $m > 1$ та $m < 1$ відповідно.

У відомих кінетичних моделях твердофазних реакцій використовують поняття активованого комплексу та енергетичного бар'єра взаємодії [96]. Водночас швидкість реакції (V) має вигляд основного рівняння теорії перехідного стану:

$$V = \chi \cdot \left(\frac{kT}{h}\right) \cdot e^{\left(-\frac{\Delta H_0}{RT}\right)} \cdot e^{\left(\frac{\Delta S_0}{R}\right)} \cdot C_a \cdot C_b, \quad (3.34)$$

де $\Delta H_0, \Delta S_0$ – зміна ентальпії та ентропії під час утворення активного комплексу;

C_a, C_b – концентрації вихідних компонентів реакції під час утворення активного комплексу;

R – універсальна газова стала;

h – постійна Планка;

T – абсолютна температура (K);

k – постійна Больцмана;

χ – коефіцієнт ймовірності перетворення активного комплексу в продукти реакційної взаємодії.

Сьогодні термін концентрація відносно твердих речовин під час реакційної взаємодії піддається суттєвій критиці. Із цієї причини втрачає сенс поняття і порядок реакції, хоча в окремих публікаціях і застосовують рівняння Н. Хеннея, що пов'язує швидкість реакції з концентраціями реагентів (у квадратних дужках):

$$-\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = 4\pi S(D_A + D_B) \cdot \left[1 + \frac{S}{\{\pi(D_A + D_B) \cdot \tau\}^2} \right] \cdot [A][B], \quad (3.35)$$

де D_A, D_B – коефіцієнти дифузії відповідних реагентів А, В;
 S – радіус "захоплення" або радіус дії молекулярних сил.

Рівняння Н. Хеннея часто застосовували для визначення порядку реакції:

при $[A] \approx [B]$ і досить тривалого часу (τ) множник у дужках рівняння (3.35) близький до одиниці і реакція належить до другого порядку (параболічний закон);

при $[B] \gg [A]$ можна прийняти $[B] = \text{const}$ і віднести до першого порядку реакції, що протікає (лінійна залежність).

Вважають, що реакції типу розкладання або поліморфізм мають нульовий порядок [96]. Для технології спечених керамічних матеріалів поняття порядок реакції не несе корисної інформації, воно втратило значення. Водночас для процесів одержання гетерофазних керамічних матеріалів, що містять не тільки синтез бінарних, але і потрійних оксидних сполук, пропонуються складні кінетичні моделі, які мають обмежене, але конкретне практичне значення. Так, для моделі зародження кристалів кордієриту під час полірування скла відповідного складу з допомогою CeO_2 виведено кінетичне рівняння, яке враховує два варіанти механізму виникнення зародків кристалів [2]:

$$N_{\mu(T, t)} = N_0 \left\{ 1 - \exp \left[-\alpha_{\mu_0} \cdot t \left(\exp \left(-\frac{\tau}{t} \right) + \frac{\tau}{t} E_i \left(-\frac{\tau}{t} \right) \right) \right] \right\}, \quad (3.36)$$

де $N_{\mu(T, t)}$ – число кристалів, які зародилися, при зазначеній температурі (T) і часу полірування (t);

α_{μ_0} – стаціонарне значення ймовірності зародження кристала на окремому активному центрі;

τ – час встановлення стаціонарного значення ймовірності зародження;

E_i – інтегральна експоненціальна функція: $\alpha_{\mu_0} = \alpha_{\mu_0} \cdot \exp(-\tau / t)$.

Рівняння (3.36) дозволило визначити температури зародження кордієриту за двома різними механізмам: 1008 °С и 938 °С, відповідно, які

отримували по серії температур полірування скла з експериментальним встановленням значень α_{μ_0} і t . Складні і реакційноздатні оксидні системи, зокрема, система $MgO - Al_2O_3 - SiO_2$ з наявністю двох потрійних сполук і можливістю утворення твердих розчинів, виявляються з надзвичайно прогнозованим характером кінетики спікання. Моделювати і описувати експерименти із синтезу кордієриту вдається тільки із залученням корпоративних і періодичних процесів дифузії при цьому [44].

Для випадку найпростіших корпоративних процесів під час автокатолітичного розвитку реакцій затвердіння епоксидних систем із константами рівноваги k_1 і k_2 застосовуються рівняння, що впливають із моделі Камалія [79; 197]:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial T} = (K_{1(T)} + K_{2(T)} \cdot \alpha^m) (1 - \alpha)^n = K_{(T)} (B + \alpha^m) (1 - \alpha)^n, \quad (3.37)$$

де B – показник, що враховує константу рівноваги сумарного процесу;

n, m – експериментально визначені при різних значеннях температур затвердіння (T) константи.

Для оксидних систем, моделі вигляду (3.37), які відображаються типовими S-образними кривими залежностей ступеня завершеності (перетворення) процесу від температури не апробовані до теперішнього часу через складнощі визначення параметрів математичного рівняння у високотемпературних умовах. Раціональний підхід до можливості імітаційного моделювання періодичних процесів у системі $MgO - Al_2O_3 - SiO_2$ розглянуто в публікації [96]. Також розглядаються не тимчасові, а температурні залежності зміни параметрів під час взаємодій, що враховують твердофазні реакції (1) – (7) та їх особливості, пов'язані з оборотним характером протікання і можливістю періодичного спряження з розвитком самоорганізуючих процесів у дисипативних структурах. Крім того, розвинений у цій роботі [96] підхід дозволяє вирішувати найважливіше технологічне завдання – прогнозувати і якісний, і кількісний склад фаз у синтезованих за різних температур матеріалів, задаючи кількісний вміст вихідних оксидів у сировинній шихті. Математичний опис процесів враховує поки тільки участь стехіометричних оксидів у реакційній взаємодії із залученням результатів термодинамічних розрахунків змін енергії Гібса (ΔG) відповідних твердофазних реакцій і температур їх оборотності (T_{06}). Зазначені результати подано в табл. 3.2 [96].

Значення ΔG та $T_{об}$ реакцій (1) – (7)

№ реакції	ΔG , кДж/моль						$T_{об}$, К
	800	1000	1200	1400	1600	1800	
1	-32	-23	-14	-5	5	14	1501
2	-23	-5	17	41	69	98	1047
3	91	49	3	-46	-99	-153	1213
4	67	44	20	-5	-30	-55	1360
5	-55	-28	3	37	73	113	1183
6	-37	-43	-53	-65	-80	-96	-
7	-92	-71	-50	-29	-7	16	1658

"Елементарна" реакція (3) має термодинамічний заборону на розвиток у прямому напрямку до 1213 К, що дозволяє в початкових умовах реакційної взаємодії враховувати лише вихідні реагенти реакцій (1), (2). Відповідно, вихідні концентрації цих сполук можна позначити $x(A_3S_2)$, $y(A_2S)$, $z(MA)$ та $k(MS)$, і вони повністю задані вмістом простих оксидів (M, A, S) у шихті. Значення x , y , z , k можна визначити через відомі значення M, A, S, скориставшись умовою нормування останніх до 100 % або одиниці, а також балансовими рівняннями відповідно до формульного запису рівнянь (1) – (7):

$$M + A + S = 1, \quad (3.38)$$

$$M = 4y + 4z + 4k, \quad (3.39)$$

$$A = 3x + 4z, \quad (3.40)$$

$$S = 2x + 2y + 4k. \quad (3.41)$$

Система чотирьох лінійних рівнянь (3.38) – (3.41) має чотири невідомі і розв'язується наступним чином:

$$x = 1 - 0,25M, \quad (3.42)$$

$$y = 2,5 - 0,5A - 0,5S - 0,125M, \quad (3.43)$$

$$z = 0,25A + 0,1875M - 0,75, \quad (3.44)$$

$$k = 0,25A + 0,5S + 0,1875M - 1,75. \quad (3.45)$$

Граничні умови окреслюють на діаграмі стану системи концентраційну область, вершини якої визначені складами бінарних оксидів A_3S_2 , MA , MS і M_2S . За необхідністю моделювання реакційних взаємодій для складів шихт поза зазначеної області, рівняння (1) – (7) повинні бути доповнені надлишковими компонентами з урахуванням їх запису і в якості вихідних реагентів, і в якості продуктів взаємодії, що змінить і відповідні значення граничних умов x , y , z , k .

Зміна кількості молей речовини, що беруть участь у взаємодії (dn_i), може розглядатися із застосуванням поняття координати реакції (λ) [99]:

$$\frac{dn_1}{\vartheta_1} = \frac{dn_2}{\vartheta_2} = \dots = \frac{dn_i}{\vartheta_i} = d\lambda, \quad (3.46)$$

де ϑ_i – стехіометричні коефіцієнти в рівнянні реакції для відповідної і речовини (позитивні для продуктів взаємодії і негативні для вихідних реагентів).

Для реакцій (1) – (7) є сім невідомих у вигляді молей речовин: $n_{A_3S_2}$, n_{M_2S} , n_A , n_{MS} , n_{MA} , $n_{A_3S_2}$, $n_{A_4M_4S_2}$, $n_{A_2M_2S_5}$. Балансові рівняння незалежних стадій (реакції (1) – (3)) і умова нормування простих оксидів до одиниці дозволяють скласти чотири рівняння. Потрібно ще три рівняння для знаходження невідомих. Відсутні рівняння можна отримати з рівнянь (1) – (3), позначивши відповідні координати реакцій λ_1 , λ_2 , λ_3 для одного моля реакційної суміші:

$$n_{A_3S_2} = [A_3S_2]_0 - \lambda_1, \quad (3.47)$$

$$n_{M_2S} = [M_2S]_0 - \lambda_1 + 2\lambda_2 + 8\lambda_3, \quad (3.48)$$

$$n_A = \lambda_1, \quad (3.49)$$

$$n_{MS} = [MS]_0 + 4\lambda_1 - 4\lambda_2 - 16\lambda_3, \quad (3.50)$$

$$n_{MA} = [MA]_0 - \lambda_2, \quad (3.51)$$

$$n_{A_4M_4S_2} = \lambda_2 - \lambda_3, \quad (3.52)$$

$$n_{A_2M_2S_5} = 2\lambda_3. \quad (3.53)$$

У рівняннях (3.47) – (3.53) потрібно узгодження знаків перед λ_i згідно з напрямом протікання реакцій (1) – (7) за значенням (табл. 3.2), що обумовлює необхідність модернізації єдиної моделі (фактично – потрібно застосовувати різні моделі, що розрізняються знаками λ_i) і ускладнює

програмування для ЕОМ. Значення λ_1 , λ_2 , λ_3 для шуканих температур випалу (синтезу) визначаються шляхом розв'язання системи рівнянь, складених для констант рівноваги (K_{C_1} , K_{C_2} , K_{C_3}) відповідних реакцій (1) – (3):

$$K_{C_1} = \frac{\lambda_1^3 \cdot ([MS]_0 + 4\lambda_1 - 4\lambda_2 - 16\lambda_3)^4}{([A_3S_2]_0 - \lambda_1)([M_2S]_0 - \lambda_1 + 2\lambda_2 + 8\lambda_3)^2}, \quad (3.54)$$

$$K_{C_2} = \frac{([M_2S]_0 - \lambda_1 + 2\lambda_2 + 8\lambda_3)^2 (\lambda_2 - \lambda_3)}{([MA]_0 - \lambda_2)^4 ([MS]_0 + 4\lambda_1 - 4\lambda_2 - 16\lambda_3)^4}, \quad (3.55)$$

$$K_{C_3} = \frac{([M_2S]_0 - \lambda_1 + 2\lambda_2 + 8\lambda_3)^8 (2\lambda_3)^2}{(\lambda_2 - \lambda_3)([MS]_0 + 4\lambda_1 - 4\lambda_2 - 16\lambda_3)^{16}}. \quad (3.56)$$

Значення констант рівноваги K_{C_1} , K_{C_2} , K_{C_3} для шуканих температур реакцій визначають за значеннями ΔG (табл. 3.2) реакцій (1) – (3) з рівняння:

$$\Delta G = RT \cdot \ln K_{C_i}, \quad (3.57)$$

де R – універсальна газова постійна.

Математичний опис процесу розрахунку кількості молей речовин, що беруть участь у реакційній взаємодії в системі $MgO - Al_2O_3 - SiO_2$, повністю визначено для імітаційного моделювання рівняннями (3.47) – (3.52) і допоміжними виразами (3.54) – (3.57).

3.2. Моделювання релаксії геосистем, породжених надзвичайними ситуаціями пірогенного характеру

Сьогодні науковим дослідженням, що спрямовані на вивчення впливу пірогенного (дослівно "породженого вогнем") чинника на природні комплекси в Україні приділяється недостатньо уваги. Переважно, це поодинокі експериментальні дослідження впливу вогню на певні компоненти геосистем: рослинність, ґрунти, мезо- та мікрофауну, а також прогнозування і поширення природних пожеж [42; 115].

Не дивлячись на досягнення вітчизняних вчених у моделюванні пожеж у природних геосистемах, слід відзначити, що на сьогодні відсутні математичні моделі, які б враховували індивідуальні особливості природних

комплексів. Поодинокі, на погляд авторів монографії, наукові роботи, в яких розглядаються ризики виникнення пожеж у геосистемах різних природних зон. У кінцевому підсумку, не відображені у вітчизняній науковій літературі дослідження спрямовані на відновлення і відтворення природних комплексів після пливу надзвичайних ситуацій пірогенного походження [19; 20].

Для виявлення закономірностей релаксії геосистем різних природних зон було запропоновано побудувати регресійну модель, яка б враховувала вплив групи чинників (площа пожеж Y_1 , кількість пожеж Y_2 , втрату гумусу у ґрунті від дії вогню Y_3 , динаміку кислотно-лужного балансу Y_4 , тощо) на релаксію геосистем різних природних зон. Вирішальним чинником релаксії обрано відновлюваність видового різноманіття F (видового багатства Маргалєфа) основних ділянок, що зазнали впливу пірогенного чинника порівняно з видовим різноманіттям (видового багатства Маргалєфа) фонових ділянок, що не зазнали дії пожеж (у відсотках). Спостереження проводилися протягом 2008 – 2012 рр. в межах пройденої вогнем території у Харківському регіоні.

Відповідна регресія є суттєво нелінійною, причому за всіма чинниками прослідковується обернено пропорційна залежність.

Авторами запропонована така регресійна залежність:

$$F = A_0 + \frac{A_1}{Y_1^{\alpha_1}} + \frac{A_2}{Y_2^{\alpha_2}} + \frac{A_3}{Y_3^{\alpha_3}} + \dots + \frac{A_n}{Y_n^{\alpha_n}}, \quad (3.58)$$

де F – показник відновлюваності геосистем;

$A_1, A_2, A_3, \dots, A_n$ – невідомі коефіцієнти кореляції;

$Y_1, Y_2, Y_3, \dots, Y_n$ – чинники, що впливають на відновлення геосистем.

За умови введення нових перемінних (чинників): $X_i = Y_i^{-\alpha_i}$, ($i = 1, \dots, n$), регресія стає лінійною:

$$F = A_0 + A_1X_1 + A_2X_2 + A_2X_2 + \dots + A_nX_n. \quad (3.59)$$

Для знаходження невідомих коефіцієнтів A_i ($i = 0, \dots, n$) використано метод найменших квадратів та наявну статистичну інформацію згідно з даними Харківського обласного управління лісового та мисливського

господарства, а також за результатами проведених експериментальних досліджень на основі польових спостережень. Математичні розрахунки проводились за допомогою програми *MathCAD*.

Ввівши прямокутну матрицю $X = \{X_{ij}\}$ ($i = 1, \dots, n$; $j = 0, \dots, m$), $X_{i0} = 1$; $X_{ij} = Y_{ij}^{-\alpha_j}$, ($i = 1, \dots, n$; $j = 1, \dots, m$), оператор метода найменших квадратів дозволяє знайти вектор:

$$\hat{\vec{A}} = (\hat{A}_0 + \hat{A}_1 + \hat{A}_2 + \hat{A}_3, \dots, \hat{A}_n)^T, \quad (3.60)$$

оптимальний із погляду метода найменших квадратів:

$$\hat{\vec{A}} = (X^T X)^{-1} X^T \vec{F}, \quad (3.61)$$

де $\vec{F} = (38,4; 29,6; 23,4; 49,8; 36,2; 39,8)^T$ – вектор відновлюваності (%) за 6 територіальними одиницями (лісгоспами).

У результаті отримуємо вектор коефіцієнтів:

$$\hat{\vec{A}}^T = (-36,047; -19,104; 102,82; 52,263; -0,083)^T.$$

Показники α_j ($j = 1, \dots, n$) обирались із умови мінімізації суми квадратів нев'язок у заданих точках:

$$\Delta = \sum_{i=1}^6 (F_i - (X\hat{\vec{A}})_i)^2 \Rightarrow \min. \quad (3.62)$$

У результаті отримано наступні значення: $\alpha_1 = 0,1$; $\alpha_2 = 0,3$; $\alpha_3 = 0,2$; $\alpha_4 = 3$.

Відповідна нев'язок при цьому склала величину $\approx 3\%$.

Для перевірки якості регресії вираховувався коефіцієнт детермінації:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{n=1}^6 (F_n - F_{1n})^2}{\sum_{n=1}^6 (F_n - \bar{F})^2}, \quad (3.63)$$

де $F1_n = (X\hat{A})_n$, $\bar{F} = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 F_i$.

За проведеними розрахунками отримане значення становить $R^2 = 0,993$, що свідчить про адекватність моделі та можливості використання її для прогнозування.

Для більш наочного аналізу, прогнозування та розрахунку довірчих ймовірностей, запропоновано усереднені дані пожеж у геосистемах лісових масивів Харківського регіону та їх наслідків. Припустимо, що потрібно оцінити середню відновлюваність (релаксію) геосистеми згідно із заданими значеннями:

- середня площа пожежі $Y_{10} = S_0 = 20$ га;
- середній кількості пожеж за рік $Y_{20} = N_0 = 30$;
- середній втраті гумусу (%) у ґрунті внаслідок пожеж $Y_{30} = X_0 = 1$;
- середній динамічності кислотно-лужного показника рН $Y_{40} = y_0 = 0,5$.

Виразуємо точковий прогноз. Попередньо обчислимо $X_{j_0} = Y_{j_0}^{-\alpha_j}$, ($j = 1, \dots, 4$), при цьому $X_{00} = 1$.

Розрахуємо скалярний добуток, який і є точковим прогнозом:

$$F_0 = \bar{X}_0^T \hat{A}. \quad (3.64)$$

У цьому випадку $F_0 = 38,45$.

Ввівши критерій:

$$t = \frac{\bar{X}_0^T \hat{A} - \bar{X}_0^T \bar{A}}{S \sqrt{\bar{X}_0^T (X^T X)^{-1} \bar{X}_0}}, \quad (3.65)$$

де $S = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N (F_n - F1_n)^2}{N - M}}$ – незміщена оцінка середньоквадратичної похибки апроксимації.

Величина t задовольняє t – розподілу Стьюдента з $N - M$ ступенями свободи. У наведеному випадку $N = 6$ – кількість точок спостережень; $M = 5$ – кількість невідомих коефіцієнтів. Враховуючи випадковий характер

оцінки, отримуємо $100(1 - \varepsilon) \%$ довірчий інтервал для математичного очікування прогнозу $M(F_0)$:

$$\vec{X}_0^T \hat{A} - t_{\varepsilon/2} \Delta F \leq M(F_0) \leq \vec{X}_0^T \hat{A} + t_{\varepsilon/2} \Delta F, \quad (3.66)$$

де $\Delta F = S \sqrt{\vec{X}_0^T (X^T X)^{-1} \vec{X}_0}$ – похибка прогнозу.

Враховуючи двосторонність критерію, $t_{\varepsilon/2}$ – значення критерію Стьюдента, що відповідає $100(1 - \varepsilon) \%$ довірчий ймовірності.

У наведеному прикладі $t_{0,025} = 12,706$; $t_{0,05} = 6,314$.

Отже, можна зробити висновок, що з ймовірністю 0,95 математичне очікування прогнозного значення буде знаходитись в інтервалі: $23,49 < M(F_0) < 53,42$.

Математичне очікування з ймовірністю 0,9 – $31,02 < M(F_0) < 45,89$.

Таким чином, аналізуючи значення коефіцієнтів, можемо зробити висновок, що найбільший вплив на відновлюваність (релаксію) геосистем хвойних лісів мають кількість пожеж та їх періодичність, а також втрати гумусу у ґрунтах внаслідок термічної дії пірогенного чинника.

Аналогічним чином (за формулами 3.58, 3.59) побудовано регресійні моделі для відновлюваності (релаксії) геосистем на прикладі видового різноманіття Маргалефа для геосистем степів (остепнених лук) та водно-болотних природних комплексів

Проте, враховуючи, що під час розрахунків використано лише два показника, тому Y_1 – відповідає втраті гумусу у ґрунтах степових природних комплексів внаслідок пірогенної дії вогню; Y_2 – зміна показника рН. До того ж аналіз проводився за результатами експериментальних досліджень на основі проведених польових спостережень на чотирьох основних ділянках ($N = 4$ – кількість точок спостережень; $M = 3$ – кількість невідомих коефіцієнтів).

У результаті застосування методу найменших квадратів, отримано значення вектора коефіцієнтів: $\hat{A}^T = (73,87; 0,1; 1,66)^T$.

Було обрано наступні показники: $\alpha_1 = 5$; $\alpha_2 = 1$.

Значення суми квадратів нев'язок: $\Delta = 4,7 \%$.

Коефіцієнт детермінації: $R^2 = 0,773$.

Для даних розрахунків значення коефіцієнта дещо менше, ніж для геосистем соснових лісів, що пов'язано з відсутністю статистичних даних. Проте його величини достатньо для проведення прогнозу.

В якості прикладу обраний вектор прогнозних значень: $\bar{Y} = (0,75; 0,25)$. Тобто необхідно оцінити відновлюваність (релаксію) геосистем, коли втрати гумусу у ґрунті внаслідок пожежі складають величину $Y_{10} = 0,75$, а зміна рН при цьому становить $Y_{20} = 0,25$.

$$X_{j_0} = Y_{j_0}^{-\alpha_j}, \quad (j = 1; 2), \quad \text{при цьому } X_{00} = 1.$$

Розрахуємо скалярний добуток, який і є точковим прогнозом:

$$F_0 = \bar{X}_0^T \hat{A} = 80,93.$$

Аналогічно до попередніх розрахунків для геосистем соснових лісів, отримуємо довірчі інтервали:

для ймовірності 0,95 значення становлять $62,38 < M(F_0) < 99,5$;

для ймовірності 0,9 – $71,7 < M(F_0) < 90,15$.

Варто зазначити, що для геосистем степів та остепнених лук кореляція між відновлюваністю видового різноманіття і змінами показника кислотно-лужного балансу більша, ніж між відновлюваністю й втратами гумусу.

За аналогією з попередніми розрахунками для степових геосистем, проведено обчислення кореляції відновлюваності видового різноманіття геосистем водно-болотних природних комплексів із втратами гумусу та зміні рН.

Отримані значення коефіцієнтів становлять $\hat{A}^T = (87,58; 2,91; 0,029)^T$.

Було обрано наступні показники: $\alpha_1 = 0,7$; $\alpha_2 = 2$;

Значення суми квадратів нев'язок: $\Delta = 0,96 \%$

Коефіцієнт детермінації: $R^2 = 0,928$.

Розрахунки дозволяють провести прогноз. Для цього припускаємо, що під час пожежі в геосистемі водно-болотних природних комплексів втрати гумусу становили 0,35 %; зміна рН – 0,3. Отже, $\bar{Y} = (0,75; 0,25)$.

Згідно з проведеними обчисленнями отримуємо значення точкового прогнозу ($F_0 \approx 94 \%$).

Подібно до попередніх розрахунків для геосистем соснових лісів і степів отримуємо довірчі інтервали.

Для ймовірності 0,95 значення становлять $85,53 < M(F_0) < 100$.

Для ймовірності 0,9 – $89,78 < M(F_0) < 98,17$.

Отже, найбільша кореляція для водно-болотних геосистем виявлена між відновлюваністю видового різноманіття і втратами гумусу у ґрунтах внаслідок його згоряння в разі дії пірогенного чинника.

Подальші дослідження означеної проблеми, на погляд авторів, повинні враховувати якомога більшу кількість чинників навколишнього природного середовища під час встановлення закономірностей релаксії природно-територіальних комплексів після впливу пірогенного чинника.

3.3. Математичне моделювання в оцінюванні впливу забруднень на екологічний стан поверхневих вод

Сучасний незадовільний стан водних об'єктів показує, що проблеми у сфері охорони вод від забруднення та виснаження не тільки не були вирішені, а й значно загострилися, особливо в останні роки. Відсутність басейнового принципу контролю, управління і відповідальності за стан поверхневих вод призводить до того, що найчастіше основні забруднюючі об'єкти промисловості, що впливають на екологічний стан поверхневих вод, розташовані на території одних областей, а споживання води із цього джерела відбувається на території інших.

Питанням побудови математичних моделей для прогнозу та оцінювання якості річкових вод присвячена велика кількість публікацій. Зокрема, досить повні огляди наведені в публікаціях [136; 142; 168].

Моделі якості вод описують просторові та часові зміни досліджуваних компонентів у водному об'єкті, котрі відбуваються в результаті дії фізичного (адвекційного чи дифузійного) переносу, а також хімічних та біологічних реакцій. Але і в тому і в іншому випадках повинна бути відома картина потоків та швидкості течії. Отже, структуру моделей якості води визначають трьома компонентами [136]:

- рівняннями руху;
- рівняннями переносу;
- рівняннями процесів реакцій.

Усі відомі моделі можна розбити на два класи – оптимізаційні та імітаційні. Перші призначені для визначення оптимальної стратегії господарювання й для вибору оптимального плану водоохоронних заходів. Відповідні математичні моделі дозволяють обґрунтувати різні види платежів і нормативні документи. Вони сприяють виробленню раціональної стратегії із визначеними пріоритетами водоохоронної діяльності, з точною адресністю фінансових вкладень, певними нормативами й забезпеченням правових і контролюючих функцій [137]. До того ж розгляд ведеться в масштабах цілого регіону, наприклад, басейну ріки або великої його частини. Обґрунтування регіональної стратегії базується на спрощених моделях зміни якості води й методах оптимізації. При всій ефективності оптимізаційних моделей для відбору й аналізу способів управління якістю води, за їх допомогою не можливо точно прогнозувати всі наслідки, які можуть виникнути в результаті вибору будь-якої політики управління. Прикладом подібного роду моделювання можуть стати такі моделі лінійного програмування, як моделі управління якістю води або міжрегіональні моделі [140; 163].

Імітаційні моделі використовуються для одержання довгострокових (перспективних) прогнозів і для оперативного управління водними ресурсами. У разі оперативного управління імітаційні моделі використовуються для прогнозування безпосереднього впливу на стан водного середовища будь-якої події (аварійного скидання забруднюючих речовин тощо). Отримані результати використовуються для вибору екстрених заходів, що забезпечують зниження або повне запобігання збитків від подібних випадків [136].

Під час побудови математичних моделей стану водного середовища необхідно оцінювати якість води за допомогою однієї або декількох числових величин, тобто провести формалізацію параметра "якість води". Якість природних вод характеризується сукупністю фізичних, хімічних і біологічних показників, котрі визначають ступінь придатності води для конкретних видів водокористування й охорони навколишнього середовища, що відповідають вимогам [54]. Воно характеризується складом і кількістю розчинених і зважених у воді речовин, змістом біомаси й мікроорганізмів, температурою й іншими фізичними характеристиками. Дійсне число компонентів екосистеми може бути нескінченно великим, можна виділяти десятки і сотні різних параметрів [148]. Тому індивідуальний облік у моделі кожної з них неможливий і марний. Залежно від характеру

завдання та на основі наявних результатів дослідження екосистеми більшою частиною компонентів зневажають. Як правило, реальні методи використовують кілька найпростіших параметрів: розчинений кисень, біологічне споживання кисню, концентрація домішок тощо.

На сьогодні існує досить великий клас моделей якості поверхневих вод, починаючи з перших класичних моделей Фелпса та Стрітера [136; 137; 140], що запропонували формули для розрахунку динаміки біохімічної потреби кисню (БПК) і розчиненого кисню (РК) [13], і закінчуючи сучасними програмними розрахунковими комплексами, що детально моделюють основні гідрологічні й гідрохімічні процеси [194 – 196, 200; 216]. Найвідоміші сьогодні наступні моделі якості води:

- імовірнісна модель для стохастичних навантажень консервативних забруднювачів;
- модель Стрітера – Фелпса для потоку РК і БПК;
- спрощені моделі зважених речовин;
- моделі мікрозабруднювачів, що враховують абсорбцію й інші процеси [137].

Отримали поширення двокомпонентні моделі якості води, в яких процеси, що формують якість води, оцінюються споживанням кисню (процеси біохімічного окислення органічних сполук) та його надходженням (процес атмосферної аерації).

Модель якості води, що описує процеси хімічних реакцій у багатокомпонентних системах, являє собою систему пов'язаних диференціальних рівнянь та містить шість рівнів деталізації взаємодії БСК та РК: **а)** БСК-РК; **б)** БСК-РК, включаючи донні відклади органіки; **в)** БСК-РК, включаючи нітрифікацію; **г)** БСК-РК, включаючи донні відклади, нітрифікацію та денітрифікацію; **д)** БСК-РК, включаючи невідкладену та відкладену потребу кисню та донні відклади; **е)** усі перераховані вище процеси [150].

Диференціальні рівняння рівнів **а** та **б** для БСК та РК являють собою найбільш прості моделі взаємодії. На більш складних рівнях (**в** та **г**) модель враховує продукти розпаду органіки, а також виділення рівня поживних речовин та зміну рівня окислення азоту. Для ще більш складних рівнів (**д** та **е**) розглядають три компоненти: БСК, суспензія та донна фракція. Для самого високого рівня використовують систему семи диференціальних рівнянь: кисень, три фракції БСК, амоній, азот і температура. Тобто кількість диференціальних рівнянь залежить від обраного рівня взаємодії БСК та РК.

У моделюванні якості води з'являються нові тенденції [45]: повернення до класичних моделей (рівень а), в яких концентрація РК є функцією природних процесів (атмосферна аерація) та розпаду розчиненої органіки. Співвідношення "БСК – РК" на цьому рівні описується класичною моделлю Стрітера – Фелпса. Рівняння процесів у моделі Стрітера – Фелпса базуються на допущеннях кінетики першого порядку [14; 53; 136], були аналітично розв'язані Фелпсом і Стрітером для ділянки ріки, і на сьогодні широко використовуються в розрахунках [29; 40; 112; 136; 137; 143; 182].

Розглянемо застосування моделі Стрітера – Фелпса для прогнозування екологічного стану р. Сіверський Донець на ділянці, розташованій в Ізюмському районі Харківської області.

Екологічний стан басейну р. Сіверський Донець, вплив на нього стічних вод та кисневий режим аналізується в роботах [161; 169; 170; 174].

Рівняння, що характеризують комплекс процесів, реально впливаючих на якість води, очевидно, досить складні, оскільки зміна концентрації однієї складової буде автоматично впливати на інші, що обумовлено законом збереження мас. Під час використання класичних рівнянь Стрітера – Фелпса [136] весь комплекс забруднюючих речовин, що скидаються до річки, оцінюється споживанням кисню та компенсаторним впливом атмосферної аерації.

Концентрація розчиненого у воді кисню є інтегральною величиною, що визначається співвідношенням різноспрямованих фізико-хімічних, гідробіологічних і гідродинамічних процесів, які відбуваються у водному середовищі та на межі розділення "вода – атмосфера" [136].

Прогнозування якості води – це визначення якості води на перспективу з урахуванням діючих чинників впливу на водний об'єкт [39], визначення дієвих важелів впливу та забезпечення реалізації басейнового принципу управління водними ресурсами.

Вихідною інформацією для завдань прогнозування якості води є результати спостережень. Спостереження та прогноз тісно пов'язані між собою: прогноз якості води можливий, з одного боку, за наявності інформації щодо її якості (прямий зв'язок); побудова прогнозу, з іншого – передбачає знання закономірностей змін водного середовища та можливість чисельних розрахунків (зворотний зв'язок).

Рівняння Стрітера – Фелпса визначає співвідношення між концентрацією розчиненого кисню і біохімічним споживанням кисню протягом певного інтервалу часу. До того ж вводяться дві фазові змінні: $C_1 = \text{БСК}$, мг/л; та $C_2 = \text{DO}_S - \text{DO}$. Тут C_2 – дефіцит кисню, DO_S – гранична концентрація РК у воді (за відсутності відходів), мг/л, DO – концентрація РК у воді в довільний момент часу, мг/л. Рівняння процесів за схемою Стрітера – Фелпса описуються системою рівнянь:

$$\frac{dC_1}{dt} = -k_1 \cdot C_1, \quad (3.67)$$

$$\frac{dC_2}{dt} = k_1 \cdot C_1 - k_2 \cdot C_2, \quad (3.68)$$

де k_1 – коефіцієнт мінералізації (коефіцієнт біохімічного окислення органічних речовин, 1 / добу);

k_2 – коефіцієнт реаерації, 1 / добу).

Для річки, що має постійну швидкість течії U , величина t може інтерпретуватися як тривалість ($t = x / U$) протікання процесу на ділянці довжиною x при швидкості течії U . Тоді система рівнянь (3.67) та (3.68) має аналітичне рішення вигляду:

$$C_1 = C_{1,0} \cdot e^{-k_1 t}, \quad (3.69)$$

$$C_2 = \frac{k_1 \cdot C_{1,0}}{k_2 - k_1} \cdot (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) + C_{2,0} \cdot e^{-k_2 t}. \quad (3.70)$$

де $C_{1,0}$ – БПК в початковий момент часу;

$C_{2,0}$ – дефіцит кисню в початковий момент часу, обумовлений джерелом забруднення.

До того ж цьому рівняння (3.67) характеризує процес розкладу органічної речовини, а рівняння (3.68) – криву спаду розчиненого кисню. Крива спаду показує, що дефіцит кисню досягає максимуму на деякій критичній відстані від скиду стічних вод [19].

Множники $C_{1,0}$ та $C_{2,0}$ в рівняннях (3.69) та (3.70) визначаються експериментально, коефіцієнти k_1 та k_2 невідомі.

Із рівняння (3.69) коефіцієнт мінералізації k_1 може бути представлено у вигляді:

$$k_1 = t^{-1} \cdot \ln \frac{C_{1,0}}{C_1} . \quad (3.71)$$

З рівняння (4) знаходимо коефіцієнт реаерації k_2 :

$$k_2 = \frac{C_{1,0} \cdot k_1 \cdot e^{-k_1 t}}{C_2} . \quad (3.72)$$

Вихідними даними для розрахунку є результати аналізів стану води р. Сіверський Донець, що виконані хімічною лабораторією Ізюмського комунального виробничого водопровідно-каналізаційного підприємства за період 2010 – 2014 рр. Місця відбору проб: 1) місце скиду стічних вод у р. Сіверський Донець; 2) р. Сіверський Донець 500 м вище скиду; 3) р. Сіверський Донець 500 м нижче скиду.

Враховуючи вплив температурного режиму залежно від пори року на розчинність кисню у воді, вбачається доцільним розрахунок параметрів моделі для кожного місяця окремо. Таким чином, вихідними даними для розрахунку коефіцієнтів k_1 та k_2 є усереднені середньомісячні багаторічні значення відповідних показників за період 2013 – 2014 рр. Дані 2014 р. будуть використані для перевірки адекватності прогнозу та побудованої моделі.

У табл. 3.3 наведені значення коефіцієнтів k_1 та k_2 , розраховані на підставі емпіричних даних за формулами (3.71) та (3.72).

Таблиця 3.3

Розраховані значення коефіцієнтів k_1 та k_2

	Січень	Лютий	Березень	Квітень	Травень	Червень	Липень	Серпень	Вересень	Жовтень	Листопад	Грудень
k_1	0,0008	0,0009	0,0008	0,0007	0,0008	0,0011	0,0013	0,0013	0,0012	0,0014	0,0015	0,0015
k_2	0,0253	-0,006	-0,011	0,0052	0,0053	0,0147	0,031	0,0286	0,0313	0,0326	0,0163	0,1744

Перевірка адекватності розрахованої моделі прогнозних значень БСК та дефіциту кисню показані на відповідних графіках (рис. 3.7 та рис. 3.8), де зображені криві середньорічних значень показників, прогнозні значення на 2014 р. та фактично отримані значення показників БСК та дефіциту розчиненого кисню.

Коефіцієнт кореляції між прогнозним значенням БСК та емпіричним становить 0,74, що можна вважати прийнятним з огляду на результати інших дослідників [143], які вказують на те, що на всі моделі, запропоновані для опису взаємодії РК та БСК, впливає факт неточності завдання усіх параметрів цієї моделі, отриманих із експерименту (величина похибки може досягати 40 %).

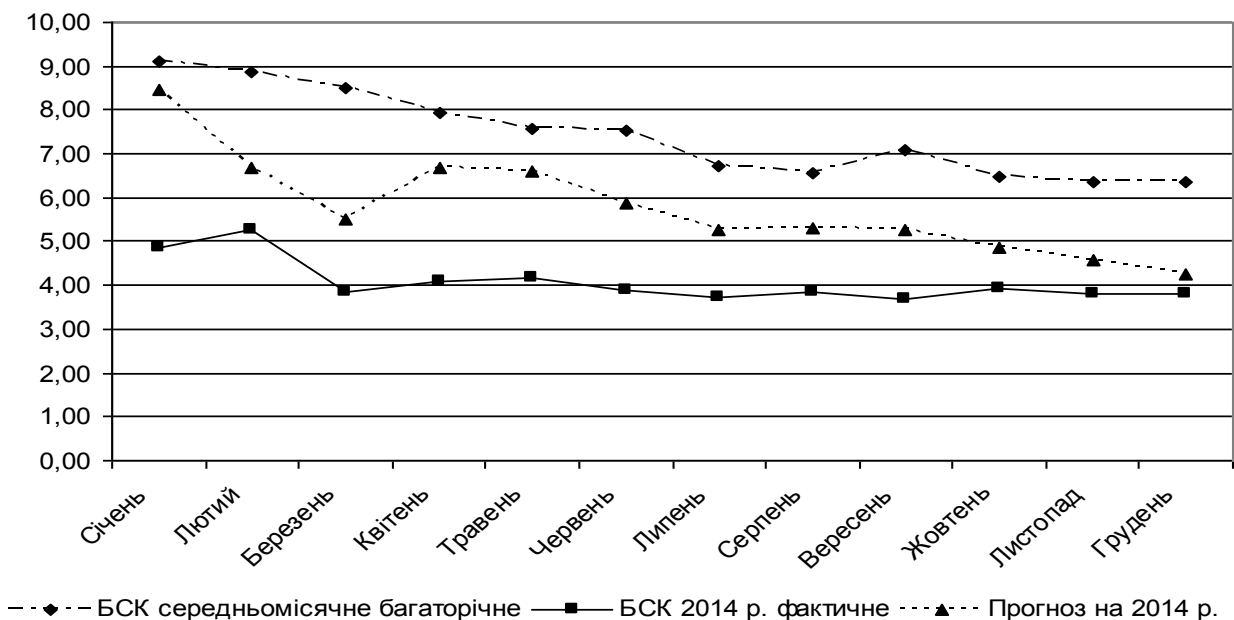


Рис. 3.7. Емпіричні та прогнозні значення показників БСК

Результат прогнозу значень дефіциту розчиненого кисню на 2014 р. (рис. 3.8) показує високий коефіцієнт кореляції (0.9) для значень, що належать до другого півріччя.

"Провал" прогнозних показників для лютого та березня пояснюється характером вихідної інформації для аналізу та нестійким температурним режимом цих місяців. Для обчислень використовували вже усереднені за місяць дані хімічних аналізів.

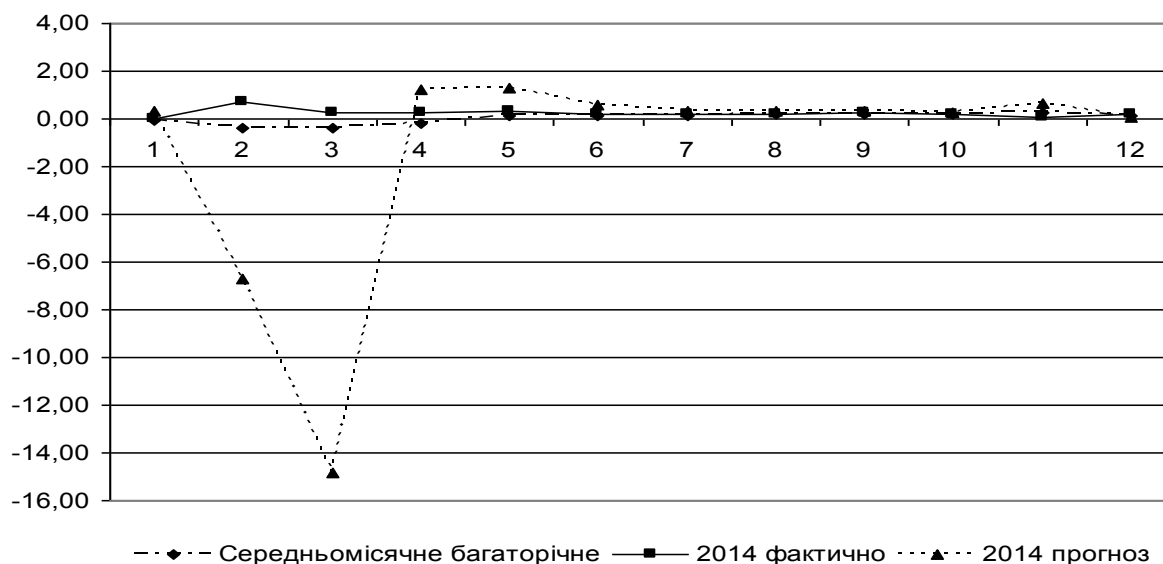


Рис. 3.8. Емпіричні та прогнозні значення показників дефіциту розчиненого кисню

Оскільки основне призначення такої моделі – прогноз показників БСК та дефіциту розчиненого кисню за результатами саме оперативного моніторингу, що здійснюється в терміни не значної зміни температурних показників, то прогнозу модель можна вважати адекватною для прогнозування в умовах стабільної або мало динамічної температури.

Перспективним вбачається включення до рівнянь моделі змінних, що характеризують гідрологічні та температурні показники досліджуваного об'єкта для більш точного визначення параметрів.

Серед різних методів математичного моделювання якості води, зі своїми перевагами та недоліками, модель Стрітера – Фелпса вигідна тим, що не вимагає даних повного аналізу хімічного складу забруднень, а використовує тільки показники кисневого режиму, оскільки БСК є одним із найважливіших критеріїв рівня забрудненості водойми, визначає кількість легкоокислюваних органічних забруднюючих речовин у воді. В умовах відсутності належної лабораторної бази показники РК – БПК можна використовувати інтегральні показники забруднення водойми, відповідно і моделі даного типу є найбільш простими та інформативними, оскільки вони можуть враховувати широкий спектр легкоокислюваних органічних сполук, що знаходяться у воді. Простота вимірювання біохімічної потреби в кисні та розчиненого кисню, наочність та доступність даних роблять цей метод одним за найкращих стандартних методів аналізу якості води.

3.4. Управління процесом протидії джерелам екологічної небезпеки в умовах діючих станцій підготовки питної води

Критерії, за якими оцінюють ступінь екологічного ризику від провадження господарської діяльності у сфері питного водопостачання, встановлюють із метою проведення оцінювання господарської діяльності, пов'язаної із забезпеченням надійності водопостачання, безпеки для життя і здоров'я населення, із запобіганням виникненню загрози навколишньому природному середовищу, на основі яких визначається ступінь екологічного ризику – високий, середній та незначний.

До критеріїв, стосовно екологічної ситуації, належать:

- оцінювання ефективності заходів щодо запобігання виникненню надзвичайної екологічної ситуації;
- оцінювання ефективності заходів щодо надійного забезпечення споживачів послугами питного водопостачання, що враховують рівень загрози виникнення негативних екологічних наслідків для населення, навколишнього природного середовища від провадження зазначеної господарської діяльності.

Критеріями віднесення суб'єктів господарювання до групи суб'єктів із високим ступенем екологічного ризику є наявність у них об'єктів:

- питного водопостачання, зокрема водозабірних споруд, очисних споруд, насосних станцій, водопровідних мереж, резервуарів і водонапірних башт;
- віднесених відповідно до законодавства до категорій потенційно небезпечних і підвищеної небезпеки;
- провадження діяльності із забезпечення питною водою за допомогою розподільних водопровідних мереж, пов'язаних єдиним технологічним процесом виробництва та транспортування питної води.

Згідно з вищевказаними критеріями, Карачунівський водопровідний комплекс (КВК) належить до суб'єктів господарювання з високим ступенем екологічного ризику. Тому необхідно провести визначення ефективності наявних ресурсів захисту в умовах КВК щодо запобігання виникненню надзвичайної екологічної ситуації.

Оперативне управління процесами забезпечення екологічної надійності систем водопостачання нерідко пов'язане з проблемами вибору управлінських рішень в умовах швидкої і глибокої зміни чинників, що

впливають на надходження до споживачів води у заданому обсязі й оптимальній якості. Для об'єктивного і оперативного реагування на негативні зміни цих чинників недостатньо даних моніторингових спостережень. Велике значення має можливість швидкого аналізу потенційних сценаріїв розвитку кризових ситуацій і вибору більш відповідного (за економічними й екологічними ознаками) варіанта управлінських рішень. Таку можливість надають методи комплексного оцінювання стану системи і можливості появи ризику. Відповідно в цих умовах зростають вимоги до оперативності та обґрунтованості управлінських рішень, оскільки будь-які зволікання чи нераціональні дії неминуче призводять до збільшення втрат і витрат.

Практичним підтвердженням ефективності такого підходу є розроблення декількох автоматизованих систем підтримки управлінських рішень із регіональної безпеки. Зокрема, в Україні було створено систему "Інформ-Чорнобиль" [41] для управління комплексними заходами з ліквідації наслідків Чорнобильської катастрофи, а також систему "Центр" [11] для прогнозного моделювання обстановки та управління силами і засобами у зонах хімічного зараження, радіоактивного забруднення, катастрофічних затоплень, сейсмічних руйнувань та ін. Для інформаційного забезпечення заходів із захисту населення і територій від джерел екологічних небезпек створено першу чергу Урядової інформаційно-аналітичної системи з питань надзвичайних ситуацій (НС) [48]. На Заході функціонують відомі аналогічні системи *IRIS* (Німеччина), *RIMNET* (Великобританія), *ARAC* (США) та ін., що забезпечують постійний контроль за радіаційно-небезпечними об'єктами, прогнозуванням і аналізом наслідків можливих або реальних аварійних ситуацій, інформаційну підтримку захисних заходів [11].

Формалізований опис процесів розвитку і протидії джерелам екологічних небезпек (ЕН) відображається, як встановлення системоутворюючих причинно-наслідкових зв'язків між джерелами ЕН, об'єктами ураження і ресурсами захисту. Оскільки ці казуальні зв'язки призводять до зміни станів і властивостей взаємодіючих компонентів, застосовують подієвий підхід для їх визначення [49; 66; 173]. Джерела екологічної небезпеки – це такі джерела, які створюють умови щодо зміни стану природного навколишнього середовища, коли не гарантується запобігання виникнення небезпеки для здоров'я людини. Подією називають стрибкоподібну зміну властивостей того чи іншого компонента, під час якої він переходить

у якісно новий стан. Кожна подія відбувається під впливом взаємозумовлених зовнішніх і внутрішніх чинників. Перші спрямовані на компонент із боку оточуючого його середовища, другі – із середини компонента. За природної властивості кожний компонент або створює опір несприятливим впливам зовнішнього середовища, або навпаки – переходить у стан, небезпечний для цього середовища. Результати взаємодії компонентів під впливом зовнішніх і внутрішніх чинників проявляються у вигляді послідовних подій, що характеризують процеси розвитку і протидії джерелам екологічних небезпек. Кожна із цих подій реалізує певний казуальний зв'язок між станом-причиною і одним із можливих станів-наслідків взаємодіючих компонентів.

Виходячи з викладеного раніше, можна сказати, що процеси появи джерел ЕН можна представити в загальному вигляді орієнтованим мультиграфом [49; 66; 173]:

$$\Sigma = (C, P), \quad (3.73)$$

вершини C якого відповідають якісно різним станам складових компонентів джерел екологічних небезпек, а дуги P – альтернативним подіям, що відбуваються при зміні цих станів, вони ж є критеріями, які визначають екологічну безпеку в умовах КВК.

Складові компоненти ЕН утворюють взаємозалежну тріаду [49; 66; 173]:

$$C = \{V, X, Z\}, \quad (3.74)$$

де: $V = \bigcup_{\gamma} V_{\gamma}$ – множина джерел небезпеки;

$X = \bigcup_{\alpha} X_{\alpha}$ – множина об'єктів ураження;

$Z = \bigcup_{\beta} Z_{\beta}$ – множина ресурсів захисту.

Зміна станів цих компонентів відбувається під дією чинників:

$$P = \{U, R\}, \quad (3.75)$$

де U – множина непересічних підмножин вражаючих впливів W і захисних заходів M ;

R – множина внутрішніх чинників ураження Q і захисту F .

Чинники W і Q викликають переходи компонентів у небажані стани, а чинники M і F – у бажані.

Графова модель протидії джерелам екологічних небезпек була побудована для КВК. Побудову графової моделі проводили в три етапи [11].

Було проведено структурування критеріїв джерел екологічної небезпеки, а саме: всебічне обстеження заданого об'єкта для виявлення альтернативних джерел екологічної небезпеки – V_{γ}^i ; потенційних об'єктів ураження – X_{α}^i ; наявних ресурсів захисту – Z_{β}^i . Структурований вигляд наявності цих критеріїв наведено в табл. 3.4.

Таблиця 3.4

Структуризація критеріїв, які визначають екологічну безпеку для КВК

Джерела екологічної небезпеки, V_{γ}	Об'єкти ураження, X_{α}	Ресурси захисту, Z_{β}
V_{γ}^1 – стан притоків водосховища	X_{α}^1 – стан води в водосховищі	Z_{β}^1 – технічні рішення підготовки питної води
V_{γ}^2 – аварії на підприємствах, що скидають води у притоки водосховища	X_{α}^2 – біота водосховища	Z_{β}^2 – організація постачання питної води з інших джерел
V_{γ}^3 – активний розвиток водоростей у водосховищі	X_{α}^3 – питна вода приготована за технічними рішеннями водопровідного комплексу	Z_{β}^3 – створення нових технічних рішень підготовки питної води *
V_{γ}^4 – замор риби		
V_{γ}^5 – комплекс споруд водопровідного комплексу		
V_{γ}^6 – комунікації постачання питної води		
<i>Примітка.</i> Розглянуто як можливо потенційний ресурс захисту.		

На початку побудови графової моделі розроблялися можливі сценарії прояву небезпечних екологічних чинників, які впливають на стан води в Карачунівського водосховища (КВ) та на екологічний стан водоймища в цілому, а отже, як наслідок – на стан питної води.

Для оцінювання вихідних станів джерел екологічних небезпек, які можуть виникнути в середовищі об'єктів ураження, було використано

показник загрозливості – V^p_y . Основні джерела екологічних небезпек, для умов КВ, було взято з табл. 3.4, взаємозв'язок та можливі сценарії розвитку цих джерел в об'єктах ураження відображено на рис. 3.9.

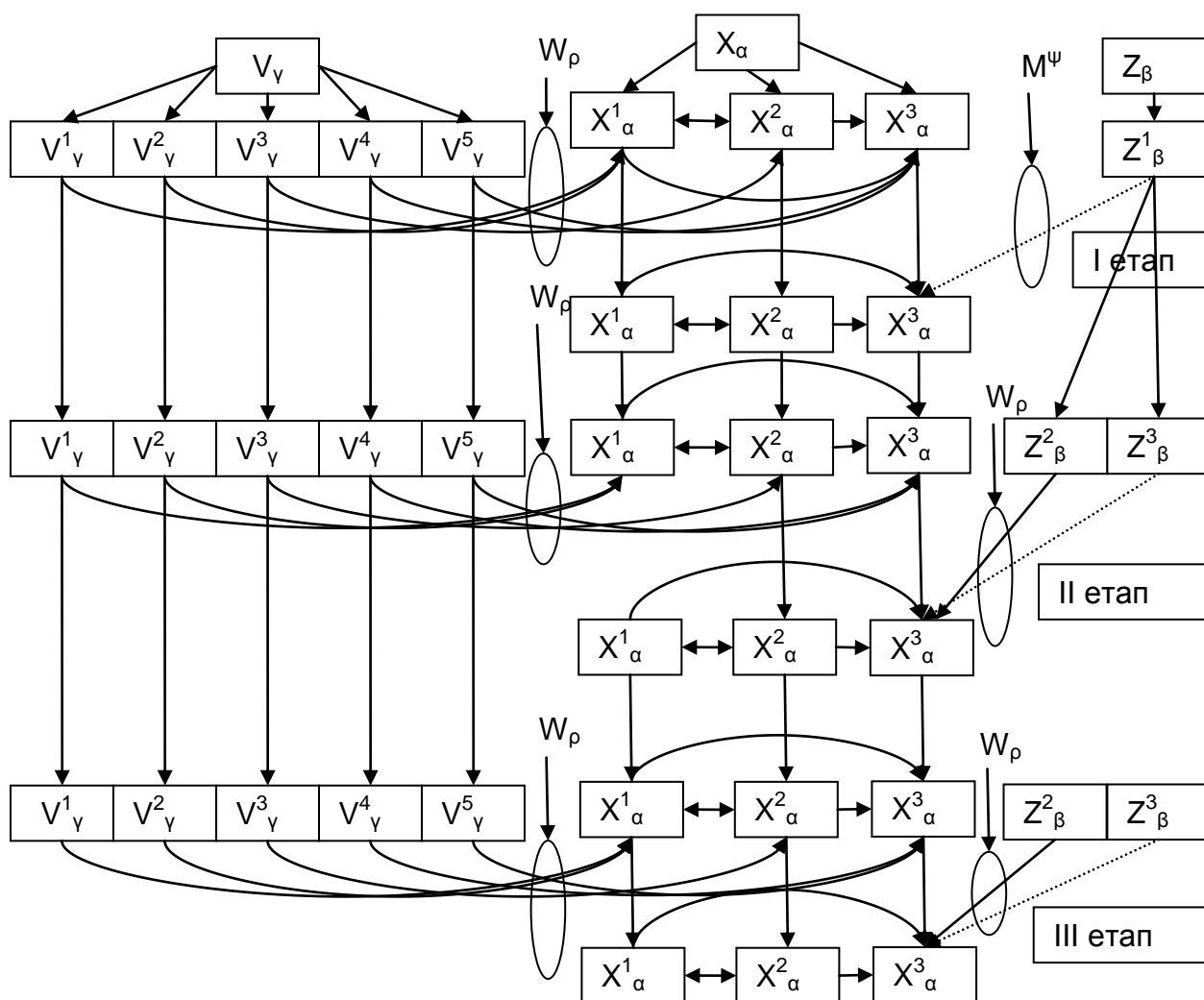


Рис. 3.9. Структуризація процесів виникнення, розвитку та протидії джерелам екологічної небезпеки для об'єктів питного водопостачання

До того ж стан джерел характеризувався за більш важкими сценаріями здатності їх формувати зони ризику (рис. 3.9).

Переходи джерел у ці стани спричиняються чинниками Q^p :

$$Q^p = V_y \rightarrow \bigcup_{\rho=1}^h X_\alpha^{p_\epsilon}, \quad (3.76)$$

де $X_\alpha^{p_\epsilon}$ – показники уразливості, що характеризують можливі погіршення стану води в КВ під час невиконання попереджувальних заходів.

Заходи щодо попередження появи джерел ЕН повинні бути спрямовані на організацію підготовки питної води з якістю, що відповідає вимогам чинних санітарних норм, в умовах наявності джерел ЕН за існуючими технічними рішеннями її підготовки.

На сьогодні технічні рішення підготовки питної води на КВК є єдиним ресурсом, який може бути використаний в якості первинного попереджувального заходу і тим самим запобігти можливості появи джерел екологічної небезпеки.

Дія вражаючих впливів – W^p на населення, внаслідок вживання неякісної питної води визначалася, як:

$$W_p : V_Y^p \times X_\alpha \rightarrow \bigcup_{\varepsilon=1}^{\alpha} X_\alpha^{\rho_\varepsilon}, \quad (3.77)$$

де V_Y^p – показник загрози;

$X_a^{\rho_\varepsilon}$ – показник уразливості;

X_α – об'єкти ураження.

Під загрозою вражаючих впливів на населення внаслідок вживання неякісної питної води розуміють – інфекційні захворювання, отруєння та, як наслідок – погіршення екологічної обстановки в регіоні.

Для запобігання можливих втрат необхідно розробити варіантні попереджувальні заходи і відповідні угруповання ресурсів для їх реалізації. У цьому випадку такими є:

1. Оцінювання залишкового потенціалу існуючої технічних рішень підготовки питної води щодо протидії джерелам ЕН.

2. Організація альтернативного постачання питної води з інших джерел.

3. Розроблення та впровадження нових технічних рішень підготовки питної води, здатних забезпечити її якість на нормативному рівні у будь-який період розвитку джерел ЕН та мати необхідний запас технологічної міцності щодо можливого погіршення стану вихідної води.

Після проведення попереджувальних заходів за допомогою існуючих ресурсів захисту визначався новий стан питної води. До того ж оцінювання нового стану виконувалося за допомогою показника опірності X^{ψ}_α , що характеризує можливості об'єктів чинити протидію очікуваним вражаючим

впливам за допомогою попереджувальних заходів. Переходи об'єктів у нові стани реалізуються під дією зовнішніх чинників у вигляді попереджувальних заходів M^ψ :

$$M^\psi : Z_\beta^\psi \times X_\alpha^{\rho_\varepsilon} \rightarrow \bigcup_{v=1}^b X_\alpha^{\psi_v}, \quad (3.78)$$

де $X_\alpha^{\psi_v}$ – показник опірності;
 $X_\alpha^{\rho_\varepsilon}$ – показник уразливості;
 Z_β – ресурси захисту.

Для зменшення первинних втрат в умовах наявності джерел ЕН необхідно розробити заходи та встановити необхідні угруповання ресурсів для їх реалізації, будь то забезпечення населення привозною питною водою, чи питною водою з інших джерел водопостачання. Ці дії будуть тягнути за собою певні матеріальні витрати, які кількісно вже будуть перевищувати витрати на попереджувальні заходи на початковому етапі розвитку джерел ЕН. Застосування нових технічних рішень підготовки питної води як ресурсу захисту на даному етапі не можливе, оскільки потребує значних часових витрат на їх впровадження.

Розроблення нових технічних рішень підготовки питної води, може бути основним та дієвим ресурсом захисту, населення від впливу джерел ЕН за участю об'єкта питного водопостачання.

Згідно з розпорядженням "Про взаємодію Криворізького районного відділу Головного управління державної служби з надзвичайних ситуацій (ГУ ДСНС) України в Дніпропетровській області та Державного промислового підприємства "Кривбаспромводопостачання" щодо запобігання і реагування на надзвичайні ситуації техногенного та природного характеру встановлено, що віднесення подій до надзвичайних ситуацій здійснюється Головним управлінням ДСНС України в Дніпропетровській області за погодженням із Державним промисловим підприємством (ДПП) "Кривбаспромводопостачання". Цим же розпорядженням затверджено:

1. Повідомлення про виникнення або загрозу виникнення надзвичайної екологічної ситуації та ліквідації її наслідків на території Криворізького району, в якому відображається: кількість людей, які знаходяться

в зоні події; шкода, заподіяна населенню, масштаби пошкодження довкілля; кількість та стан потерпілих, у тому числі кількість загиблих, захворілих; вказуються сили, що залучаються (залучались) для ліквідації НС (осіб – з них працівників ДСНС, одиниць техніки – з них тієї, що належить ДСНС, інші сили); оцінювання матеріальних збитків, завданих НС (вказувати первинну оцінку або за результатами роботи комісії, відповідних актів); матеріальні витрати на ліквідацію НС.

2. Дислокацію та розрахунок сил і засобів Криворізького районного відділу ГУ ДСНС України в Дніпропетровській області до складу яких входять: аварійно-технічна команда технологічного обладнання; аварійно-технічна команда водопровідних мереж; аварійно-технічна команда електромереж; Артемівська насосна станція; склад хлору ДПП "Кривбаспромводопостачання".

3. Телефонні номери для взаємного інформування й організації взаємодії в разі загрози або виникнення екологічного забруднення, пов'язаного з водним чинником.

4. Під час виникнення надзвичайної ситуації (події), яка виникла на підприємстві, черговий диспетчер ДПП "Кривбаспромводопостачання" негайно подає до Криворізького районного відділу ГУ ДСНС України в Дніпропетровській області інформацію про виникнення надзвичайної ситуації (події). У подальшому інформація в міру ускладнення обстановки та ліквідації надзвичайної ситуації (події) передається станом на 05:00, 11:00, 17:00, 20:00 щоденно до ліквідації надзвичайної ситуації (події).

5. Криворізький районний відділ ГУ ДСНС України в Дніпропетровській області негайно інформує ДПП "Кривбаспромводопостачання" про загрозу або виникнення надзвичайної ситуації (події) в зоні відповідальності цього підприємства.

6. Контроль за виконанням розпорядження покласти на провідного фахівця з питань попередження НС Криворізького районного відділу ГУ ДСНС України в Дніпропетровській області та головного інженера ДПП "Кривбаспромводопостачання".

Схематично порядок взаємодії органів та підрозділів районного відділу ГУ ДСНС України в Дніпропетровській області та ДПП "Кривбаспромводопостачання" щодо запобігання і реагування на надзвичайні ситуації техногенного та природного характеру наведено на рис. 3.10.

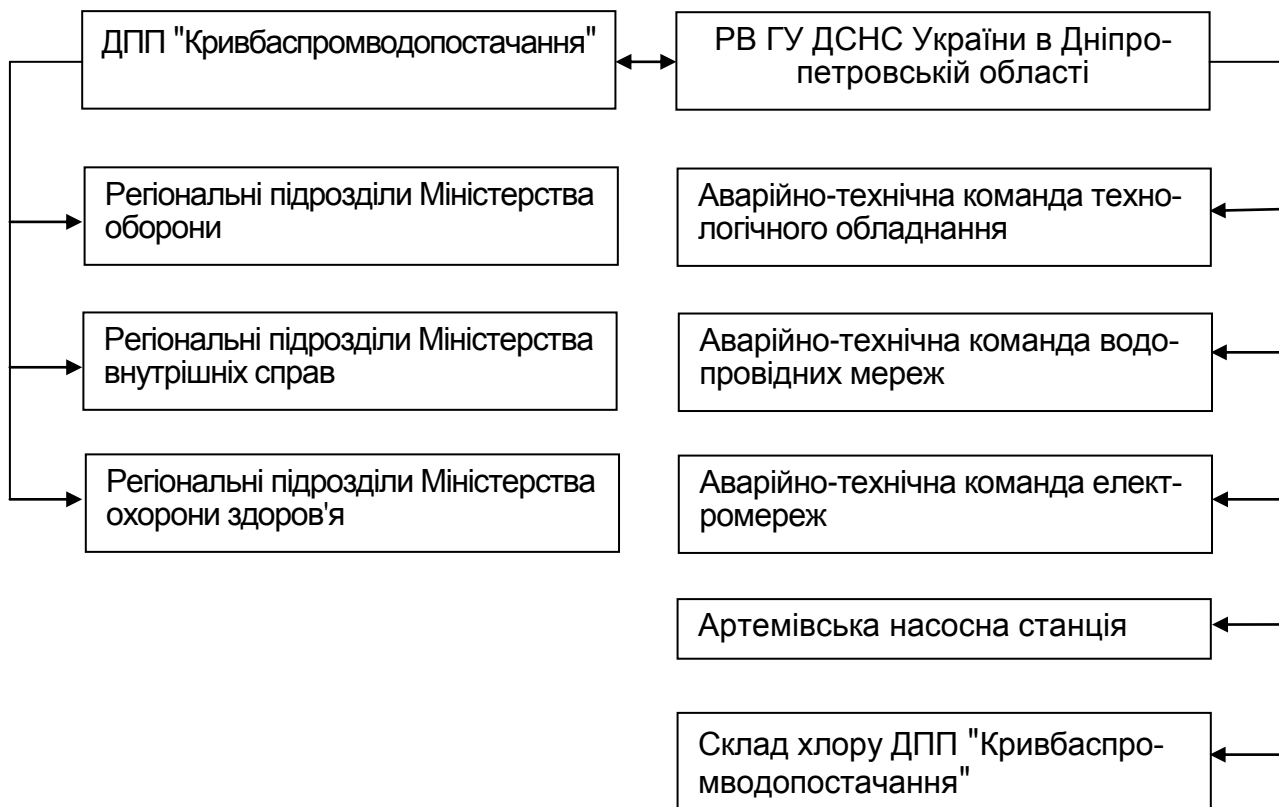


Рис. 3.10. Схема взаємодії органів та підрозділів міністерств та відомств Дніпропетровської області з ДПП "Кривбаспромводопостачання" щодо реагування на екологічну небезпеку

Як видно із схеми, під час реагування на екологічну небезпеку пряма взаємодія існує лише взаємодія між підрозділами ГУ ДСНС України в Дніпропетровській області та ДПП "Кривбаспромводопостачання", а з іншими відомствами – лише односторонній зв'язок. Тобто у випадку появи джерел ЕН ДПП "Кривбаспромводопостачання" інформує відомства про їх виникнення. Чітких розпоряджень щодо дій відомств під час появи джерел ЕН немає.

Незважаючи на вказане вище, на сьогодні у випадку появи джерел ЕН техногенного характеру, пов'язаних із забрудненням питної води, сили та засоби жодної служби в Україні не здатні провести рятувальні або (та) відновлювальні заходи в найкоротший термін, оскільки в їх розпорядженні не має жодних швидкодіючих ресурсів захисту на місцях. Тому, як наслідок, органи місцевого самоврядування змушені будуть використовувати альтернативне джерело для забезпечення населення якісною питною

водою, а саме: організацію постачання питної води, виготовленої з інших джерел водопостачання. Але це буде пов'язано із значними матеріальними та, що головніше, часовими витратами.

Можливі витрати з місцевого бюджету на забезпечення питною водою частини населення м. Кривий Ріг під час появи джерел ЕН, пов'язаних із вмістом домішок у питній воді понад норматив, виходячи із середньостатистичної потреби людини в питній воді на добу (біля 5 л) в разі середньої ціни за 1 л привезеної води 0,5 грн та чисельності населення частини міста 400 тис. осіб, становитимуть – 1 млн грн/добу, без врахування витрат на доставку води у мікрорайони міста.

Враховуючи те, що в умовах КВК наявним ресурсом захисту під час появи джерел ЕН є діючі технічні рішення підготовки питної води, які вже сьогодні в умовах відсутності джерел ЕН не здатні довести якість питної води до рівня вимог нормативних документів, а інший ресурс захисту (організація постачання питної води з інших джерел) потребує значних матеріальних витрат на його реалізацію, доцільно провести розроблення нових технічних рішень процесу підготовки питної води в умовах КВК та порівняльний аналіз матеріальних витрат на їх впровадження.

Більшість поверхневих вод за гідрохімічними показниками в основному належать до 2 – 3 класів, але деяка їх частина взагалі належить до 4 класу якості і є небажаною для використання в якості джерела питного водопостачання [47].

Останнім часом спостерігається погіршення екологічного стану КВ, вода якого використовується для підготовки питної води для частини населення міста. Зростання вмісту солей жорсткості та сульфат-іонів у воді водосховища та існуючі технічні рішення підготовки питної води, які не забезпечують виведення цих домішок до рівня нормативних вимог, змусило отримувати дозвіл від Держспоживстандарту України на використання водопровідної води господарсько-питного призначення з підвищеним вмістом цих домішок.

Відповідно до ДСТУ 4808:2007 "Джерела централізованого питного водопостачання. Гігієнічні та екологічні вимоги щодо якості води і правила вибирання", вода КВ класифікується як вода 4 класу – посередня, обмежено придатна, небажана якість води.

Аналогічні тенденції погіршення якості води спостерігаються у Київському та Канівському водосховищах Дніпровського каскаду [88; 116; 150]. Процес коагуляції з подальшим відстоюванням та фільтрацією, який

застосовується на більшості існуючих станцій підготовки питної води, призначений не тільки для видалення з води колоїдних часток, що обумовлюють забарвленість та каламутність води, але і для часткового виведення з води солей жорсткості (іонів Ca^{2+} та Mg^{2+}) [164]. В умовах КВК у разі застосування сульфату алюмінію у якості коагулянту [152], ефективність видалення солей жорсткості на стадії коагуляції практично дорівнює нулю.

Вихідним матеріалом для проведення аналізу і визначення кореляційних залежностей показників якості води використовувалися дані оперативного хімічного аналізу води за останні п'ять років.

Оскільки загальноприйнятий підхід до визначення якості питної води за допомогою порівняння концентрацій забруднюючих речовин у воді із значеннями гранично допустимої концентрації (ГДК) не дає чіткого уявлення про сумарне забруднення водних об'єктів, перш за все, через відсутність порівнянності окремих показників, то кількісне оцінювання ефективності технічних рішень підготовки питної води було проведено шляхом порівняння окремих показників якості вихідної води і питної води за один і той самий період із використанням показника, який визначався за формулою:

$$\varphi = \frac{П_{\text{ВВ}} - П_{\text{ПВ}}}{П_{\text{ВВ}}} 100, \quad (3.79)$$

де φ – ефективність виведення відповідної домішки з вихідної води, %;

$П_{\text{ВВ}}$ – відповідний показник якості вихідної води КВ;

$П_{\text{ПВ}}$ – відповідний показник якості питної води КВК.

Привертає на себе увагу той факт, що технічні рішення, які реалізуються для підготовки питної води відповідно до діючого технологічного регламенту [14], забезпечують практично повне видалення та виведення колоїдних часток із вихідної води незалежно від сезонних коливань їх вмісту, а саме: усіх колоїдних форм кремнієвої кислоти та виведення каламутності відповідно до вимог. Навіть існує резерв щодо забезпечення цих параметрів на потрібному рівні в разі збільшенні їх концентрацій у 1,5 – 2 рази.

На відміну від цього, виведення іонних домішок із вихідної води практично повністю відсутнє. Технічні рішення, які реалізуються для підготовки питної води, зовсім не здатні вивести іони солей жорсткості та сульфати.

Привертає увагу той факт, що в разі існуючого співвідношення J_0 та L , які мають прояв протягом усього періоду, за який проводився аналіз: $L \approx 0,5 J_0$, за умови, що лужність була б карбонатною або гідрокарбонатною, на стадії коагуляції повинно було б відбуватися утворення карбонату кальцію при існуючих рівнях концентрації іону кальцію [152], але цього не відбувається. Розрахункові значення концентрацій CO_3^{2-} , якщо припустити, що лужність карбонатна і наявні значення концентрацій іонів Ca^{2+} показують, що добуток активних концентрацій іонів Ca^{2+} та CO_3^{2-} , для розрахунку якого була розроблена програма "Kr-Karach" перебільшують добуток розчинності CaCO_3 в умовах проведення процесу коагуляції у 240 – 636 разів.

Із викладеного вище можна зробити наступні припущення:

- лужність води водосховища обумовлена не тільки і не стільки наявністю карбонат- та гідрокарбонат-іонів, скільки наявністю аніонів слабких органічних кислот;
- у воді водосховища присутні органічні комплексоутворюючі сполуки, які здатні у звичайних умовах утворювати стійкі комплекси з іонами кальцію, що і запобігає утворенню твердої фази карбонату кальцію на стадії коагуляції та подальшого відстоювання води.

Кореляційна залежність загальної жорсткості води КВ від її лужності за той самий період ($J_0 = f(L)$) наведена на рис. 3.11. Характер цієї залежності вже досить достовірно свідчить про те, що лужність води водосховища обумовлена не наявністю карбонат- і гідрокарбонат-іонів. Оскільки, якщо б це була карбонатна або гідрокарбонатна лужність, то повинна була б спостерігатися зовсім протилежна залежність: у разі зростання лужності – зменшується жорсткість води внаслідок утворення твердої фази карбонату кальцію безпосередньо у водоймі [167]. Виявлений характер залежності $J_0 = f(L)$ – параболічне збільшення жорсткості вихідної води в разі збільшення її лужності – свідчить про те, що лужність води КВ обумовлена присутністю аніонів інших слабких кислот.

Регресійне рівняння виявленої залежності:

$$y = 0,1208x^2 - 0,3125x + 8,1625, \text{ достовірність апроксимації} - R^2 = 0,9991.$$

На користь цього припущення свідчить той факт, що коливання загальної жорсткості та лужності води водосховища за останні 10 років за середньорічними значеннями абсолютно ідентичні (рис. 3.12, 3.13).

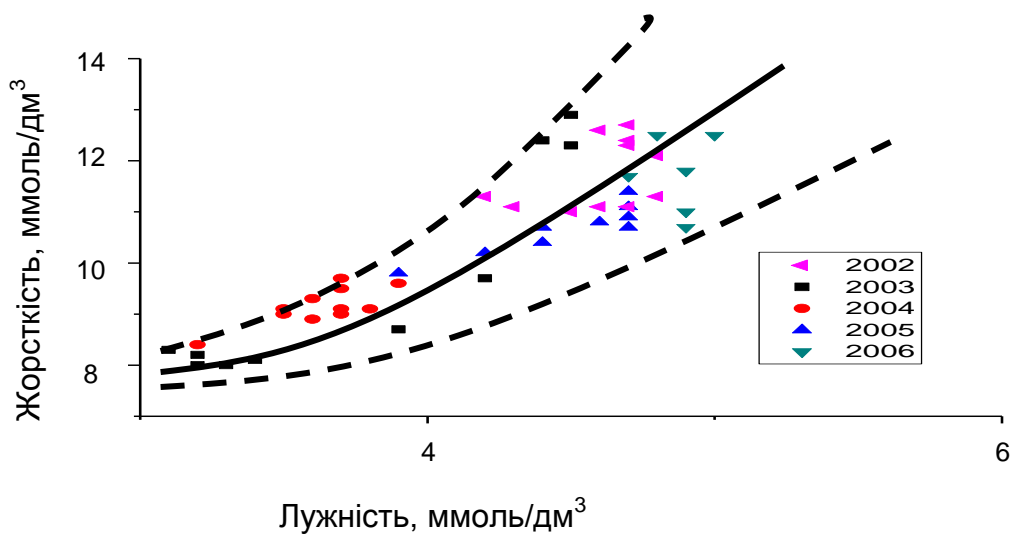


Рис. 3.11. Залежність загальної жорсткості води КВ від її лужності

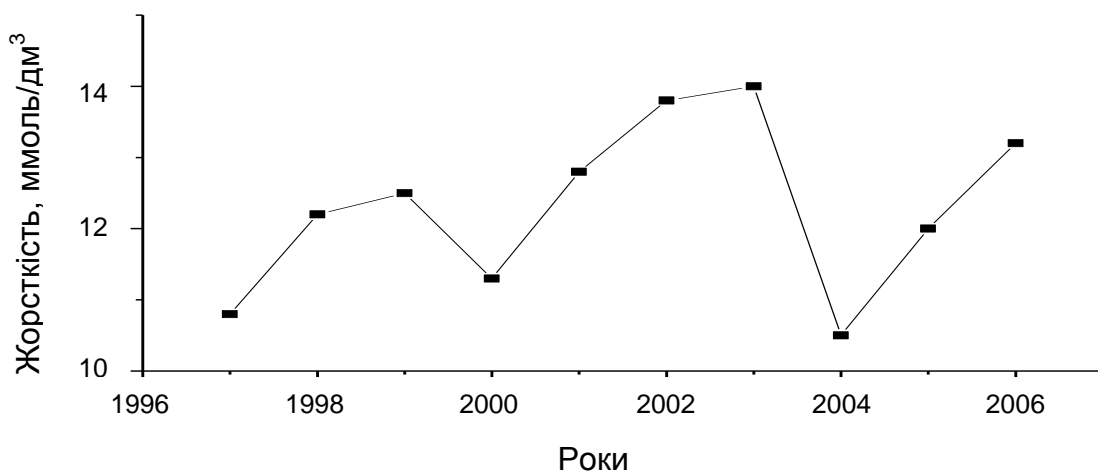


Рис. 3.12. Динаміка зміни вмісту солей жорсткості у КВ (за середньорічними показниками)

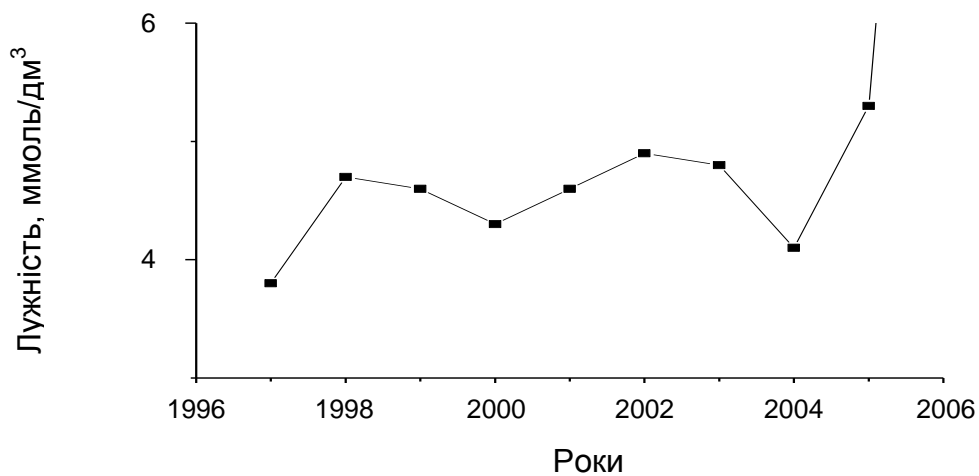


Рис. 3.13. Динаміка зміни вмісту лужності у КВ (за середньорічними показниками)

Наявність такої відповідності також свідчить на користь присутності у воді водосховища кислотних залишків органічних кислот, які здатні до комплексоутворення з іонами кальцію та магнію.

Додатковим свідченням такого припущення є те, що між концентраціями солей жорсткості та сульфатами у воді водосховища досить чітко спостерігається лінійна кореляція (рис. 3.14). Це, по-перше, свідчить про одночасне вимивання іонів кальцію, магнію та сульфатів із донних відкладень під дією комплексоутворюючих речовин, по-друге – донні відкладення близькі за складом до гіпсово-магнезіальних мінералів. Саме в цьому випадку потрапляння вище перелічених іонів у воду водоймища буде одночасним.

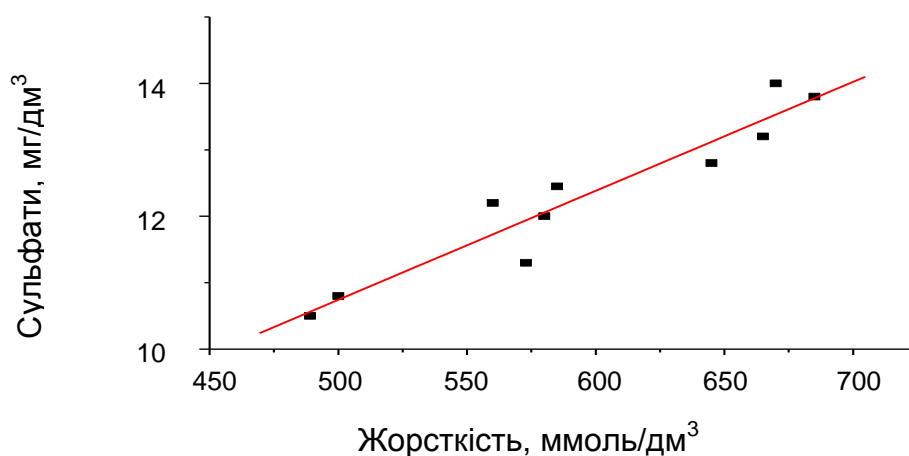


Рис. 3.14. Залежність концентрації сульфат-іонів від вмісту солей жорсткості у КВ

Привертає на себе увагу той факт, що аналогічним чином виглядають відокремленні кореляційні залежності концентрацій сульфат-іонів та іонів кальцію (рис. 3.15) і концентрації сульфат-іонів та іонів магнію (рис. 3.16).

Показником оперативного контролю якості води, який свідчить про наявність у воді органічних сполук, є окислюваність води, яка характеризує кількість у воді відновників як органічних, так і неорганічних, зокрема нітратів, сульфідів, гумінових кислот, H_2S , солей Fe (II) та ін. Визначення вмісту зазначених речовин ґрунтується на їх схильності окислюватися перманганатом калію. Якщо прийняти тезу про вплив органічних кислот, здатних до комплексоутворення з іонами кальцію та магнію, на вміст солей жорсткості у воді водоймища за правильну, то повинна спостерігатися відповідна кореляційна залежність між вмістом солей жорсткості та окислюваністю води за один і той самий період [8] (рис. 3.17).

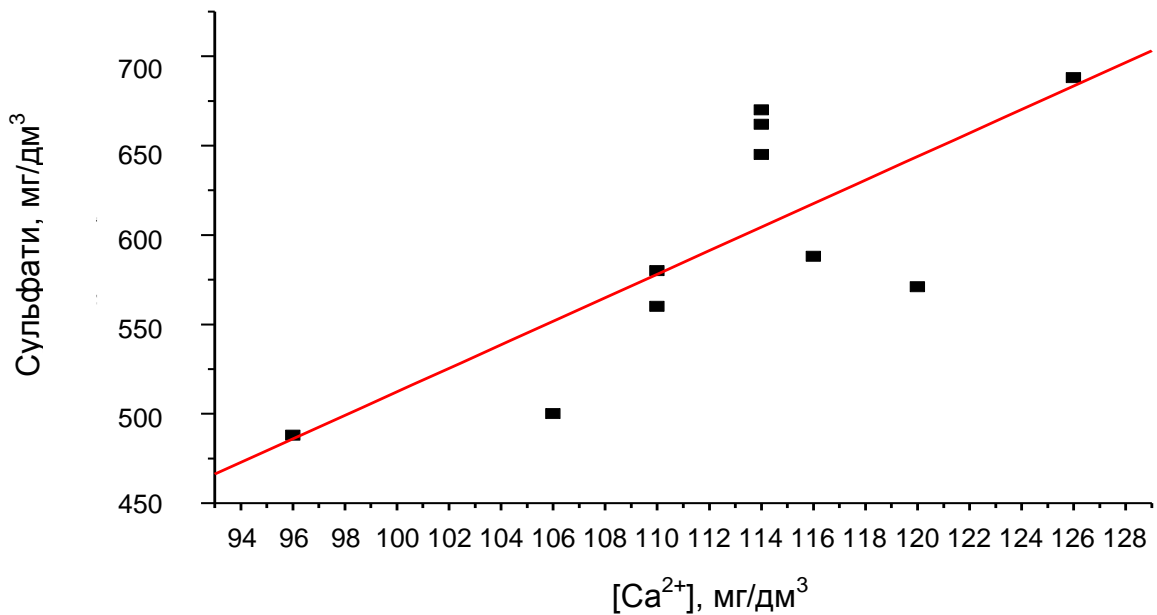


Рис. 3.15. Залежність концентрації сульфат-іонів від концентрації іонів кальцію у КВ

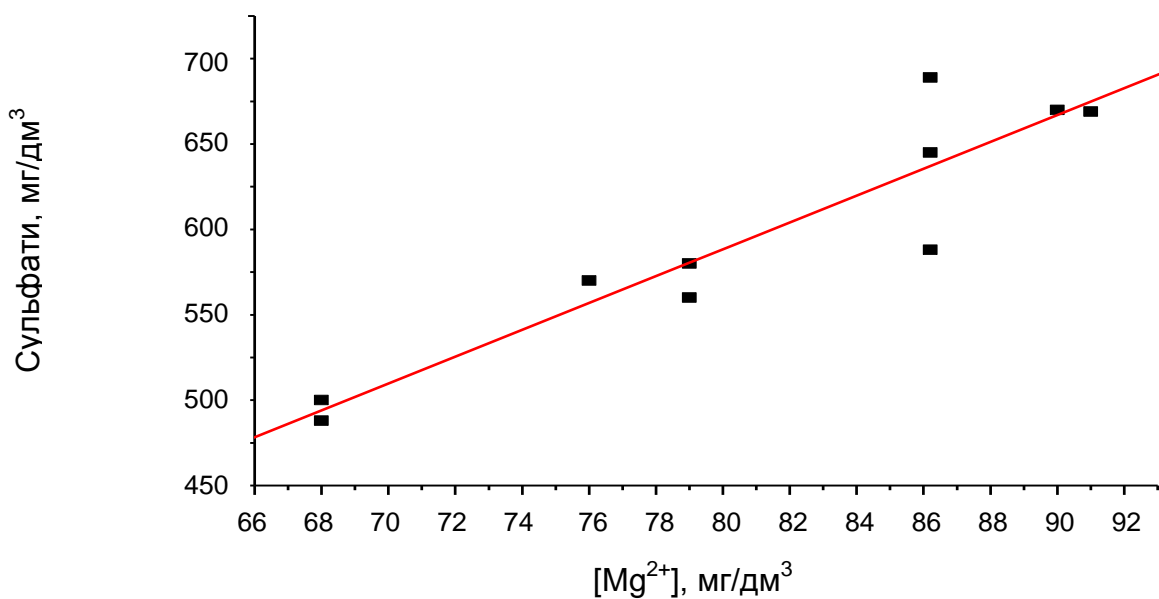


Рис. 3.16. Залежність концентрації сульфат-іонів від концентрації іонів магнію у КВ

Із наведених результатів аналізу відслідковується кореляція, яка дозволяє припустити, що для досягнення деякої граничної концентрації органічних сполук у воді, їх кількісного вмісту не вистачає в повному обсязі для утворення комплексних сполук із солями жорсткості, а в разі перебільшення цієї концентрації вони забезпечують повне утворення комплексних сполук з іонами кальцію та магнію.

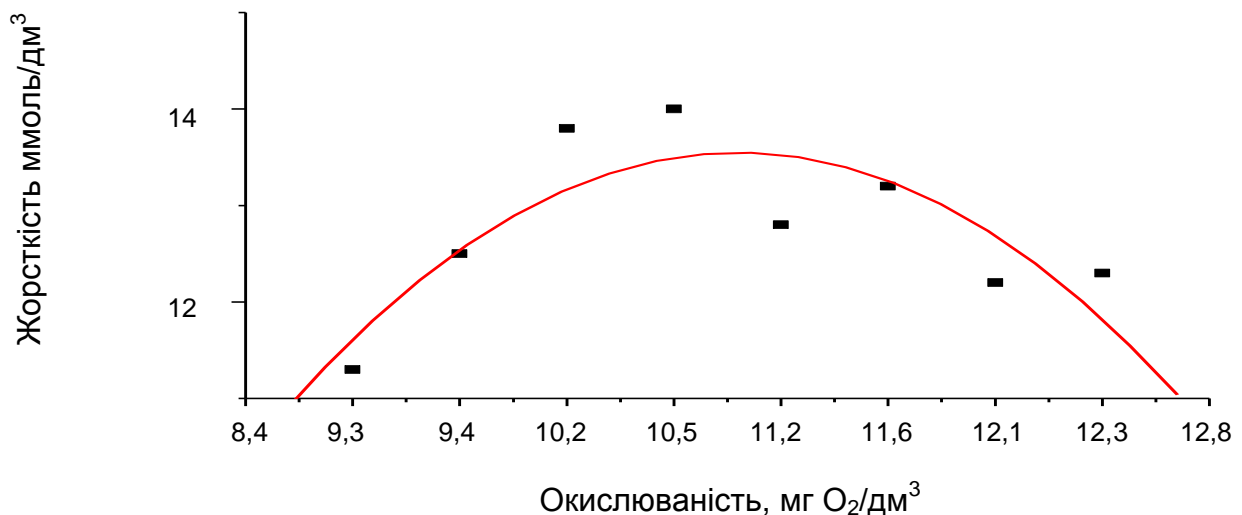


Рис. 3.17. Залежність концентрації солей жорсткості від окислюваності у воді КВ за середньорічними показниками за 10 років

Останнім часом спостерігається небажана тенденція збільшення концентрації мангану у воді р. Дніпро, що призводить до суттєвих негараздів на станціях підготовки питної води, котрі розташовані на водосховищах Дніпровського каскаду. Бурхливий розвиток біопланктону синезелених водоростей провокує цвітіння води на мілководді водосховищ, які складають понад 30 % їх території. В умовах пересичення Дніпровської води органічними і біогенними речовинами посилюються процеси відмирання, гниття, розкладу водоростей і біопланктону, що обумовлює погіршення кисневого режиму, зниження рН води у придонному шарі. І, як наслідок, підвищується концентрація іону мангану у вигляді Mn^{2+} у Дніпровській воді, яка подається на станції водопідготовки в населених пунктах. Концентрація мангану в період липень – серпень збільшується порівняно з зимовим періодом у 3 – 10 разів і складає $1,9 \div 7,0$ мг/дм³ [8; 24; 181]. Це дуже велика проблема для забезпечення якісної питної води, тому що вимоги державного стандарту саме за вмістом мангану Mn^{2+} у питній воді $\leq 0,05$ мг/дм³ [34]. Для з'ясування наявності цієї тенденції у КВ було проведено аналіз результатів оперативного хімічного контролю якості води за вмістом іонів мангану (рис. 3.18, 3.19).

Регресійне рівняння виявленої залежності:

$$y = 0,0054x^2 - 0,0277x + 0,1427,$$

достовірність апроксимації – $R^2 = 0,998$.

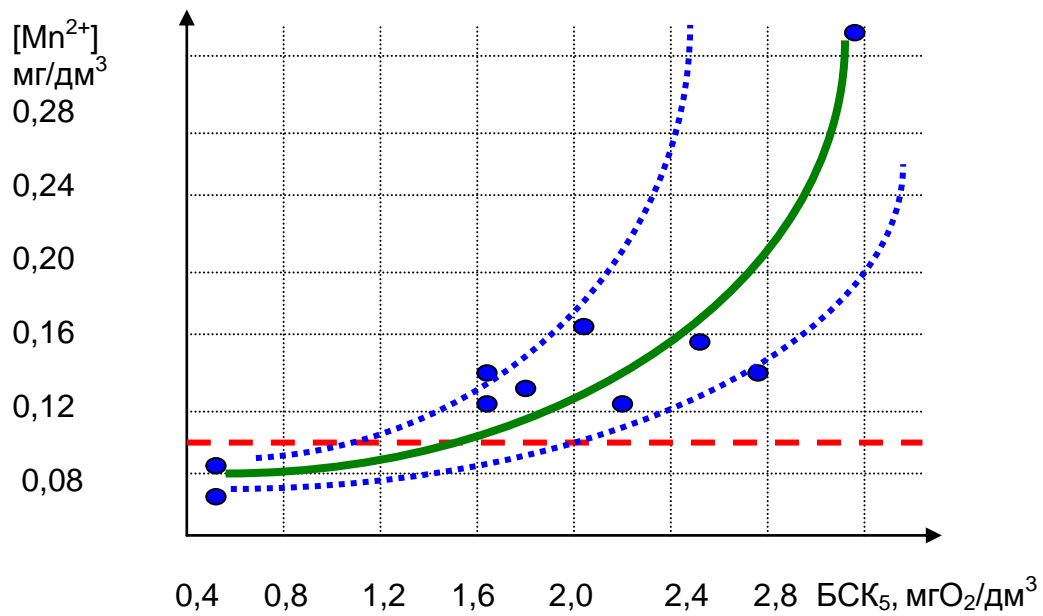


Рис. 3.18. Залежність концентрації іону мангану у воді КВ від БСК₅

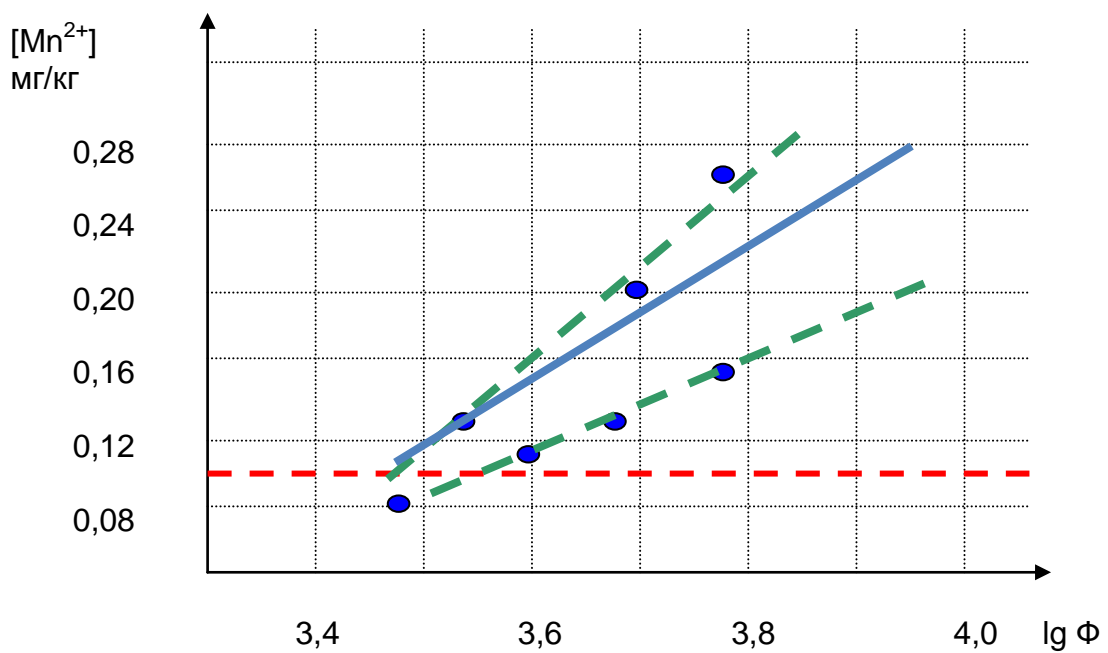


Рис. 3.19. Залежність концентрації іону мангану у воді КВ від вмісту фітопланктону

Виявлені залежності вказують на те, що збільшення мангану у воді КВ спостерігається при збільшенні БСК₅, яке, у свою чергу, корелює з вмістом фітопланктону в умовах водосховища.

Регресійне рівняння виявленої залежності: $y = 0,003x^2 - 0,0027x + 0,1129$, достовірність апроксимації – $R^2 = 0,7803$.

Перш за все слід зазначити, що іон мангану Mn^{2+} належать до складу досить сильних відновників. Реакція $MnO_2 + 4H + 2e^- = Mn^{2+} + 2H_2O$ характеризується значенням Red-Ox потенціалу $E_0 = 1,23$ В. Але в умовах літнього періоду, коли концентрація кисню у воді поверхневих джерел значно зменшується, його, як природного окислювача, у воді не вистачає для того, щоб перевести добре розчинний у воді іон мангану Mn^{2+} до важко розчинної сполуки MnO_2 , яка має бути затримана на механічних фільтрах тонкої очистки на станції водопідготовки. Про це також свідчить встановлена залежність концентрації іонів мангану від концентрації розчиненого у воді кисню (рис. 3.20).

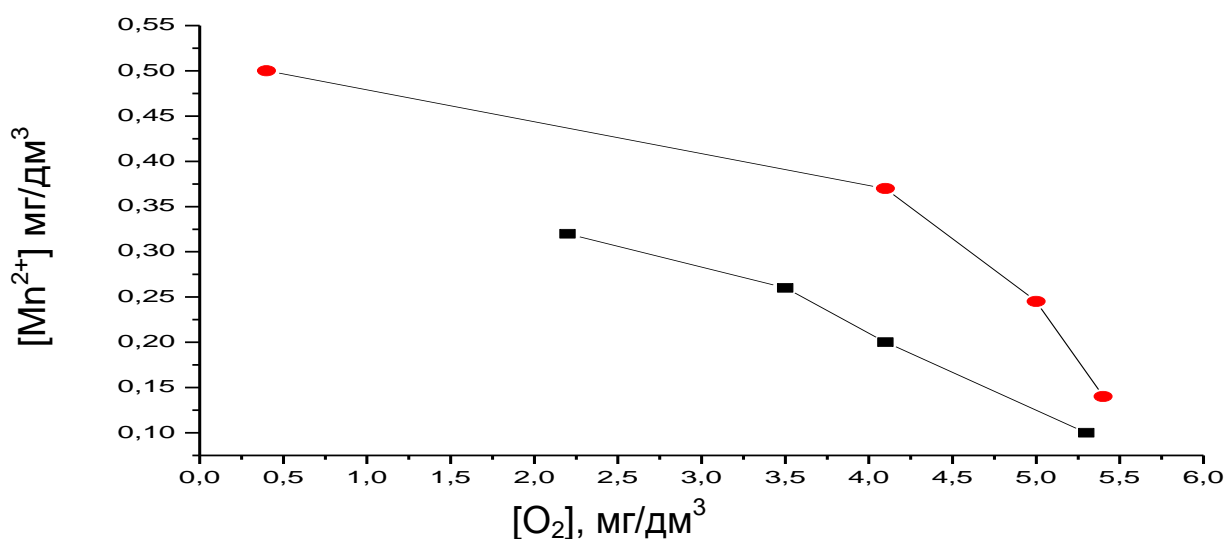
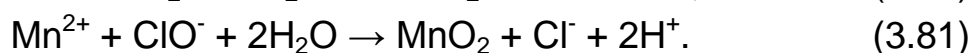
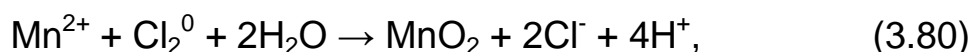


Рис. 3.20. Залежність концентрації іону мангану від концентрації розчиненого кисню у воді КВ

Таким чином, практично весь манган у вигляді іону Mn^{2+} проходить без зміни власної форми до стадії хлорування, де відбувається його перетворення. Саме активний хлор, що застосовується на цій стадії, і виконує функцію окислювача, який забезпечує перетворення іону Mn^{2+} у MnO_2 незалежно від того, який саме реагент використовується рідкий хлор або гіпохлорит:



Завдяки тому, що первинне хлорування води відбувається на КВК практично на першій стадії оброблення природної води, забезпечується не перебільшення в питній воді вмісту іону мангану понад нормативну концентрацію.

Манган виводиться тільки в тому випадку, якщо його вміст у вихідній воді не перебільшує 0,2 мг / дм³. Це свідчить про те, що діючі технічні рішення повністю вичерпали свої можливості щодо виведення іонних домішок, або взагалі були орієнтовані на вихідну воду, іонний склад якої в повному обсязі відповідав вимогам нормативу для питної води.

Газохроматографічним аналізом у пробах води з КВ ідентифікована наявність таких органічних сполук: гумінова кислота, ЕДТА та ТБФ [167]. Характерною особливістю цих сполук є те, що всі вони здатні утворювати стійкі комплексні сполуки з іонами кальцію і магнію. Так константи нестійкості водорозчинних комплексних сполук іонів кальцію і магнію мають наступні значення [167] (табл. 3.5).

Таблиця 3.5

Константи нестійкості комплексних іонів з ЕДТА

Рівняння дисоціації комплексу	K	pK
$\text{CaHEDTA}^- \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + \text{HEDTA}^{3-}$	$3,09 \cdot 10^{-4}$	3,51
$\text{CaEDTA}^{2-} \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + \text{EDTA}^{4-}$	$2,69 \cdot 10^{-11}$	10,57
$\text{MgHEDTA}^- \leftrightarrow \text{Mg}^{2+} + \text{HEDTA}^{3-}$	$5,25 \cdot 10^{-3}$	2,28
$\text{MgEDTA}^{2-} \leftrightarrow \text{Mg}^{2+} + \text{EDTA}^{4-}$	$2,04 \cdot 10^{-9}$	8,69

Потрапляння ЕДТА у воду КВ безумовно можливе лише зі скидами промислових підприємств. Можливим джерелом таких скидів є теплові станції підприємств зі збагачення бурого вугілля м. Олександрія. Унаслідок своїх комплексуючих властивостей ЕДТА здатна розчиняти і переводити у воду кальцій і магній із донних відкладень і тим самим, збільшувати їх вміст у воді річок Карачунівського басейну.

ТБФ, на відміну від ЕДТА, важкорозчинна у воді сполука, здатна утворювати комплексні сполуки з рідкісноземельними елементами. Можливим джерелом потрапляння ТБФ у воду КВ є підприємства збагачення руди у м. Жовті води або талі води хвостосховища центрального гірничо-збагачувального комплексу (ЦГЗК), який розташований неподалік самого водосховища. Але внесок ТБФ у збільшення жорсткості води КВ не може бути значним внаслідок його малої розчинності у воді.

На відміну від двох попередніх органічних сполук, гумінова кислота має природне походження. Вона входить до складу бурого вугілля (20 – 40 %) [59]. Тому не важко зрозуміти, що основним постачальником гумінової кислоти у води річок КВ є ґрунтові води буровугільного родовища (м. Олександрія). Комплексоутворюючі властивості гумінової кислоти відносно до іонів кальцію і магнію поки що вивчені недостатньо. За будовою молекули гумінової кислоти можна припустити, що вона здатна утворювати комплексні сполуки з іонами кальцію і магнію.

Більш за все на показники якості води впливає гумінова кислота, яка забезпечує кольоровість води. Частіше за все кольоровість води обумовлена фульмінними і гуміновими кислотами та їх комплексними сполуками із залізом (II і III).

Достатньо чітка лінійна кореляція спостерігається між кольоровістю та окислюваністю води у КВ (рис. 3.21), що засвідчує таку саму суттєву залежність кольоровості води від вмісту гумінової кислоти, як і в річках Дніпро та Десна.

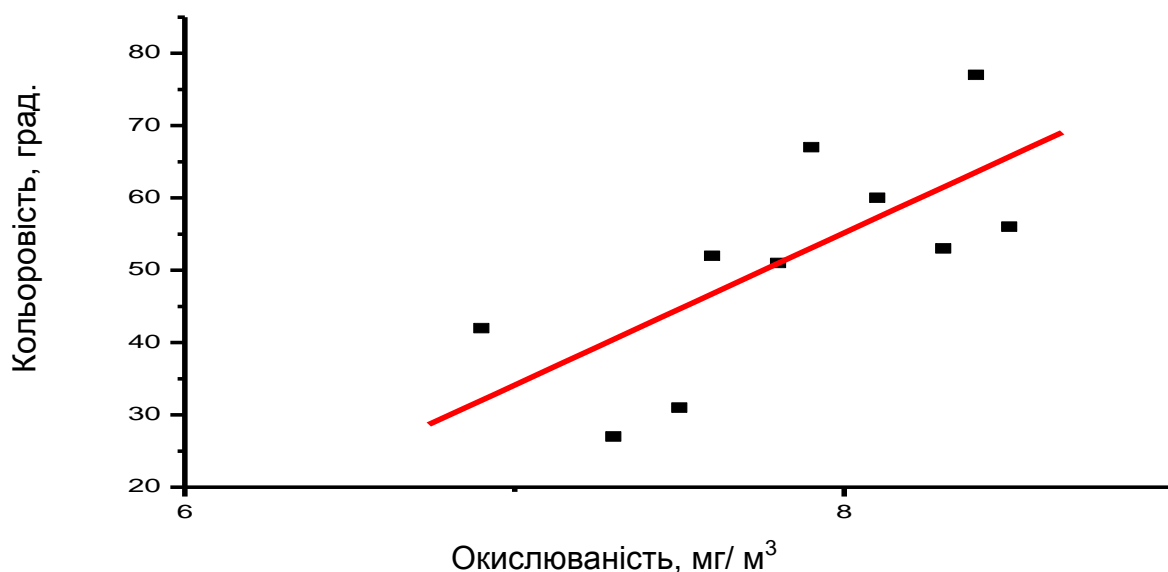


Рис. 3.21. Залежність кольоровості вихідної води КВ від її окислюваності

Основою безпеки господарсько-питної води для населення є щоденний моніторинговий контроль її якості. Але очевидно, що чим більше визначуваних параметрів і достовірніше контроль, тим вище гарантія якості питної води.

Прогноз якості водоймищ повинен проводитися за всіма нормованими показниками і враховувати таке: розбавлення стічних вод водами водотока, деструкцію неконсервативних речовин, утворення нових проміжних продуктів, самоочищення, взаємодію речовин, нейтралізуючу здатність водоймища, гідроліз солей, утворення малорозчинних сполук, сорбційні і десорбційні процеси, температуру води і управління якістю води безпосередньо у водоймищі. У процесі контролю якості природних вод визначається велика кількість гідрохімічних і фізико-хімічних показників, що характеризують їх забрудненість.

Привертає увагу той факт, що виключно води двох притоків р. Інгулець – р. Зелена та р. Жовта обумовлюють підвищений вміст сульфат-іонів у воді водосховища (рис. 3.22). Безперечно, що це пов'язано з неочищеними скидами гірничо-збагачувального виробництва м. Жовті води, на якому використовується сірчана кислота, та свідчить про відсутність належного контролю з боку екологічної інспекції за такими скидами у відкриті водойми, а також потрапляння сульфатів та речовин органічного походження разом із талими водами хвостосховища ЦГЗК.

Оскільки планові заходи державного нагляду (контролю) за діяльністю суб'єктів господарювання з високим ступенем ризику проводяться не частіше двох разів на рік, то поліпшити екологічну безпеку в умовах КВ можливо за рахунок впровадження системи моніторингу за станом водосховища шляхом введення басейнового принципу управління і заходів щодо зниження ризику.

27 лютого 2009 року Указом Президента України № 221/2009 Про рішення Ради національної безпеки і оборони України "Про стан безпеки водних ресурсів держави та забезпечення населення якісною питною водою в населених пунктах України" було визначено, що внаслідок поступового виснаження і забруднення поверхневих джерел водопостачання, незадовільного технічного стану та зношеності систем водопостачання, застосування застарілих технічних рішень підготовки питної води, знижується якість питної води, внаслідок чого знижується екологічна безпека держави. Відповідно до статті 7 Закону України "Про основи національної безпеки України" погіршення екологічного стану водних басейнів, зниження якості питної води, критичний стан основних виробничих фондів у системах життєзабезпечення, зокрема водопостачання та, як наслідок, зростання ризиків виникнення надзвичайних ситуацій техногенного характеру становлять загрози національній безпеці України.

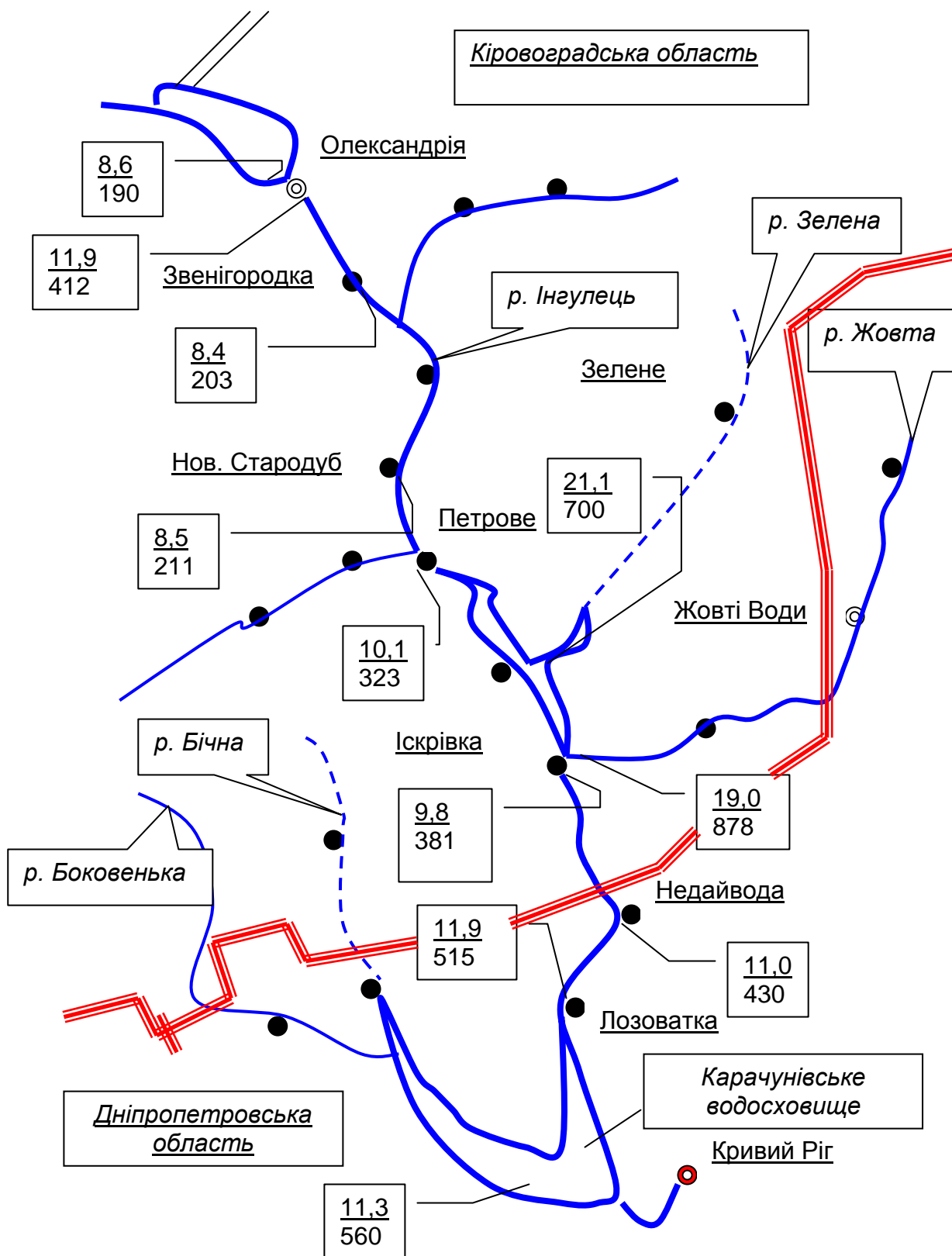


Рис. 3.22. Схема басейну формування КВ, за середніми значеннями періоду, в який проводились дослідження:
 в чисельнику – вміст солей жорсткості (мг-екв / дм³),
 в знаменнику – концентрація сульфатів (мг / дм³)

Необхідно відзначити, що цей самий указ вказує на те, що між-відомча координація і фінансове забезпечення реалізації державних цільових програм, заходи яких спрямовані на поліпшення якості питної води, здійснюється на низькому рівні, що додатково підвищує рівень загрози виникнення НС техногенного характеру.

Таким чином, можна констатувати наростаюче антропогенне навантаження на водні ресурси і, як наслідок, зростання загрози не тільки для водних екосистем, але і для господарсько-питного водопостачання. Тому необхідне розроблення вибору системи водопостачання з урахуванням екологічного ризику.

3.5. Моделювання екологічних характеристик геліо-водневих енергетичних комплексів

Використання відновлюваних джерел енергії (ВДЕ) вже давно стало необхідною передумовою забезпечення сталого енергетичного розвитку та енергетичної безпеки. Незважаючи на велику кількість фундаментальних теоретичних досліджень у цьому напрямі, їх практичне використання показує значні розбіжності між теоретичними розрахунками ефективності використання потенціалу ВДЕ та його реальними значеннями. Особливого значення ці розбіжності набувають у системах на основі фотоелектричних перетворювачів (ФЕП), де вартість фотоелементів є дуже високою, а похибка під час оцінювання необхідної встановленої потужності у 15 – 20 % може поставити під загрозу функціонування всієї системи.

За таких обставин вибір побудови адекватної моделі для оцінювання режиму роботи фотоелектричної станції (ФЕС) має базуватися на просторово-часовому розподілі інсоляції, технології виготовлення ФЕП, технологічних особливостях ФЕС та результатах натурних досліджень.

Проведення відновлюваних джерел енергії сприяє покращенню екологічної ситуації шляхом зниження викидів CO₂ в атмосферу. Вкрай важливою характеристикою енергетичного об'єкта є питома вартість одиниці електроенергії, що для сонячно-водневих електростанцій залежить від сонячної інсоляції на поверхні фотоприймача та коефіцієнта корисної дії системи. Найвищий рівень достовірності про рівень інсоляції та її характер можуть дати результати довгострокових актинометричних

досліджень інтенсивності прямої, розсіяної та сумарної сонячної радіації на горизонтальну поверхню. Такі дослідження на території України проводилися лише в одному пункті спостережень, що не дає можливості їх використання для всієї території України.

Іншим джерелом, у якому розглядається рівень інсоляції конкретної території, є результати довгострокового дослідження NASA [219], що включають супутникове вимірювання, моделювання атмосфери та наземні дослідження. У цій моделі під час моделювання атмосфери використано такі чинники: кліматичні зони, альbedo, хмарність, опади та аерозолі в атмосфері. Дані містяться у масштабі $2,5^0 \times 2,5^0$ (з перерахунком до $1,0^0 \times 1,0^0$). Наведено лише дані про пряму сонячну радіацію, водночас як місячне надходження сумарної радіації на похилу поверхню складається з місячних сум прямої та розсіяної радіації [22]:

$$Q_{\Pi} = \sum S_{\Pi} + \sum D_{\Pi}, \quad (3.82)$$

де Q_{Π} – місячне надходження сумарної сонячної радіації на поверхню фотоелектричних панелей площиною 1 м^2 ;

$\sum S_{\Pi}$ – місячні суми прямої радіації на похилу поверхню;

$\sum D_{\Pi}$ – місячні суми розсіяної радіації на похилу поверхню.

Потік розсіяної радіації на похилу поверхню визначається згідно з рекомендаціями в роботі [76]:

$$\sum D_{\Pi} = \sum D_{\Gamma} \cos^2 \alpha/2, \quad (3.83)$$

де $\sum D_{\Gamma}$ – місячні суми розсіяної радіації на горизонтальну поверхню;

α – кут нахилу приймаючої поверхні.

Місячні суми прямої радіації на похилу поверхню можна розрахувати за допомогою коефіцієнта переходу до перших сум прямої радіації на горизонтальну поверхню:

$$\sum S_{\Pi} = K_s \sum S_{\Gamma}, \quad (3.84)$$

де K_s – коефіцієнт переходу від сум прямої радіації на горизонтальну поверхню до аналогічних значень на похилу поверхню;

$\sum S_{\Gamma}$ – місячні суми прямої радіації на горизонтальну поверхню.

Коефіцієнт переходу (K_s) може бути розрахований за допомогою співвідношення сум теоретично можливої прямої радіації на похилу поверхню до її значень на горизонтальну поверхню:

$$K_s = \frac{\sum S'_{\Pi}}{\sum S'_{\Gamma}}, \quad (3.85)$$

де $\sum S'_{\Pi}$ – місячні суми теоретично можливої прямої радіації на похилу поверхню за умов ясного неба;

$\sum S'_{\Gamma}$ – аналогічні значення на горизонтальну поверхню.

Потік прямої радіації на горизонтальну поверхню в разі ясного неба:

$$S'_{\Gamma} = S_m \sinh_0, \quad (3.86)$$

де S_m – пряма радіація у земної поверхні, що надходить на нормальну до сонячних променів поверхню;

h_0 – висота Сонця.

Перша величина може бути розрахована через сонячну сталу S_0 :

$$S_m = \frac{S_0}{\rho^2} e^{-\tau_6 m_0}, \quad (3.87)$$

де ρ – відстань між Землею та Сонцем, виражена в одиницях середньої відстані;

τ_6 – оптична товща атмосфери;

m_0 – повітряна маса у напрямку до Сонця.

Висота Сонця може бути виражена через схилення Сонця, широту місцевості та часовий кут Сонця:

$$\sinh_0 = \sin\varphi \sin\delta + \cos\varphi \cos\delta \cos\Omega, \quad (3.88)$$

де φ – широта місцевості;

δ – схилення Сонця;

Ω – часовий кут Сонця.

Аналогічним чином розраховується надходження сонячної радіації на похилу поверхню:

$$S'_{\Pi} = S_m \cos i, \quad (3.89)$$

де i – кут падіння сонячних променів на поверхню схилу.

$$\cos i = \cos \alpha \sinh_0 + \sin \alpha \cosh_0 \cos \Psi, \quad (3.90)$$

$$\Psi = \Psi_o - \Psi_n, \quad (3.91)$$

де Ψ_o , Ψ_n – азимут Сонця і проекції нормалі, побудованої до схилу, на горизонтальну площину; азимут векторів відраховують від площини меридіану (прийнято відраховувати азимут додатними у напрямку годинникової стрілки).

Азимут Сонця визначається наступними співвідношеннями:

$$\cos \Psi_o = \frac{\sinh_0 \sin \varphi - \sin \delta}{\cosh_0 \cos \varphi}, \quad (3.92)$$

$$\sin \Psi_o = \frac{\cos \delta \sin \Omega}{\cosh_0}. \quad (3.93)$$

Виробіток енергії ФЕП знаходиться у прямій залежності від таких чинників:

- сумарної сонячної радіації, що надходить на їх поверхню;
- коефіцієнта корисної дії сонячних батарей;
- площі поверхні фотоелектричних панелей;
- частки ефективної поверхні останніх.

Місячне вироблення енергії фотоелектричними системами можна розрахувати за допомогою рівняння:

$$A = Q_{\Pi} S_{\text{ФП}} K_{\text{ККД}} K_{\text{ЕП}}, \quad (3.94)$$

де A – місячний виробіток енергії фотоелектричними системами (кВт·год);

Q_{Π} – місячне надходження сумарної сонячної радіації на поверхню фотоелектричних панелей площиною 1 м^2 ;

$S_{\text{ФП}}$ – площа фотоелектричних панелей;

$K_{\text{ККД}}$ – коефіцієнт корисної дії сонячних батарей;

$K_{\text{ЕП}}$ – коефіцієнт, що відображає частку ефективної поверхні.

Останні три параметри характеризують особливості виконання ФЕП.

Основним матеріалом у світі для виготовлення сонячних модулів є кремній. Близько 83 % усіх модулів виготовляється на основі кристалічного кремнію, ще 14 – на основі тонкоплівкових структур і лише 3 % – на основі інших типів, включаючи концентраторні сонячні енергоустановки [130; 215].

На сучасному етапі прийнято розрізняти три покоління технологій виробництва ФЕП.

Перше покоління містить технології використання кремнієвих пластин. Сюди належать моно- та полікристалічний кремній (*mc-Si* та *m-Si*), технології на основі *GaAs* (*Si*, *GaAs*), *ribbon*-технології (*EFG*, *S-web*) та тонкошаровий полікремній (*Apex*). Друге покоління – тонкі плівки неорганічних або органічних напівпровідників на склі. До цього покоління належать ФЕП, виконані з аморфного кремнію (*a-Si*), мікро- та нанокремнію (*μc-Si/nc-Si*), кремнію на склі (*CSG*), телуриду кадмію (*CdTe*), а також селеніду галія-індія-міді (*CIGS*) та селеніду індію-міді (*CIS*). Третє покоління – тонкі плівки на гнучких підкладках (*a-Si*, *CdTe*, *CIGS*).

Для спрощення роботи з великою кількістю баз даних та прискорення проектних розрахунків ФЕС розроблені спеціальні програмні комплекси. Значного поширення набули два такі комплекси: *RETScreen* та *PVSYST*.

У роботі проведено порівняння результатів розрахунків, виконаних за методикою, наведеною вище, у програмних комплексах *RETScreen* та *PVSYST* (для кутів нахилу 32° та 44°) з результатами функціонування реальної ФЕС. Технологічна схема ФЕС та лабораторно-дослідного стенда наведено на рис. 3.23, а нижче її основні характеристики.

Досліджуваними параметрами під час роботи ФЕС є:

- поточна напруга та потужність електричного струму на вході;
- тривалість роботи фотоелектричної системи (тривалість сонячного періоду, придатного для виробництва електроенергії);
- денний та сумарний виробіток енергії за період роботи;
- безконтактне вимірювання параметрів постійного струму.

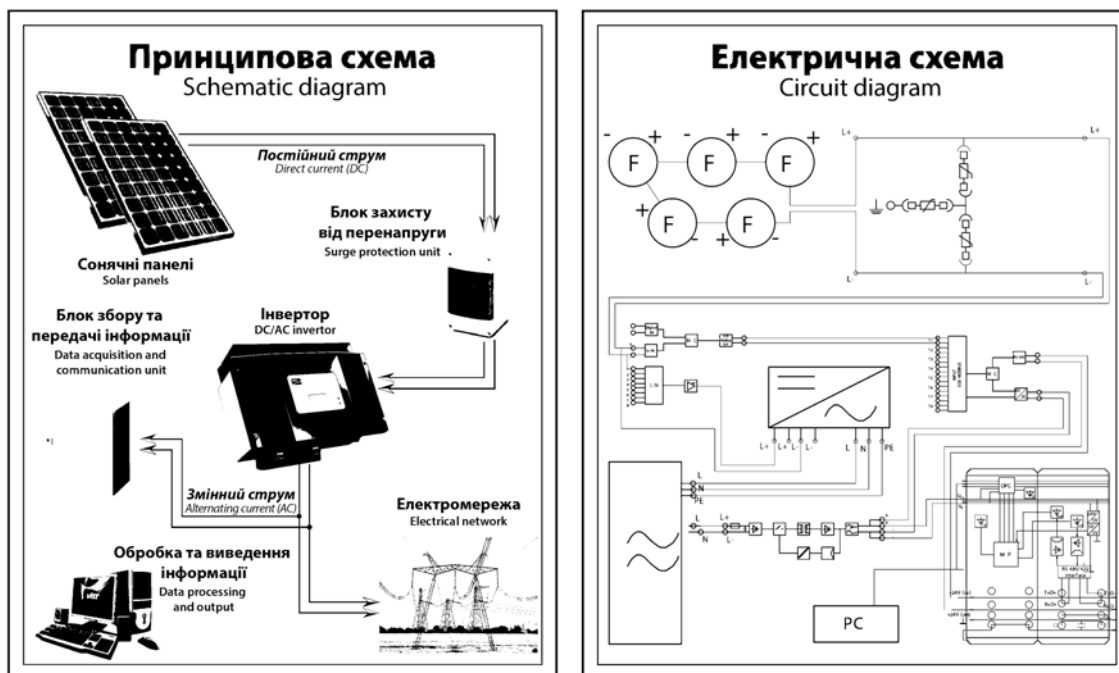


Рис. 3.23. Принципова та електрична схема стенда для дослідження роботи ФЕС

Основні технічні характеристики фотоелектричних елементів:
тип – полікристалічні сонячні ЖМ 235Р-60 (5 шт.);
геометричні розміри панелі, мм – 1650 x 992 x 45;
встановлений кут нахилу – 440;
номінальна потужність – 1175 Вт;
максимальна напруга – 149 В;
максимальна сила струму – 7,89 А.

Лабораторно-дослідний стенд спроектовано та встановлено у північному корпусі Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Схему покрівлі корпусу та місце розташування ФЕС зображено на рис. 3.24. У системі використано мережевий інвертор для ФЕП SMA SUNNY BOY 1700, призначений для роботи в сонячних фотоелектричних системах, що працюють паралельно із централізованим електропостачанням. Інвертор оснащено функцією відслідковування процесу *OptiTrac MPP*, що дозволяє працювати інвертору в оптимальному режимі, навіть за різких змін погодних умов. Інвертори серії *SUNNY BOY* були спеціально розроблені для роботи у малих та середніх системах електроживлення.

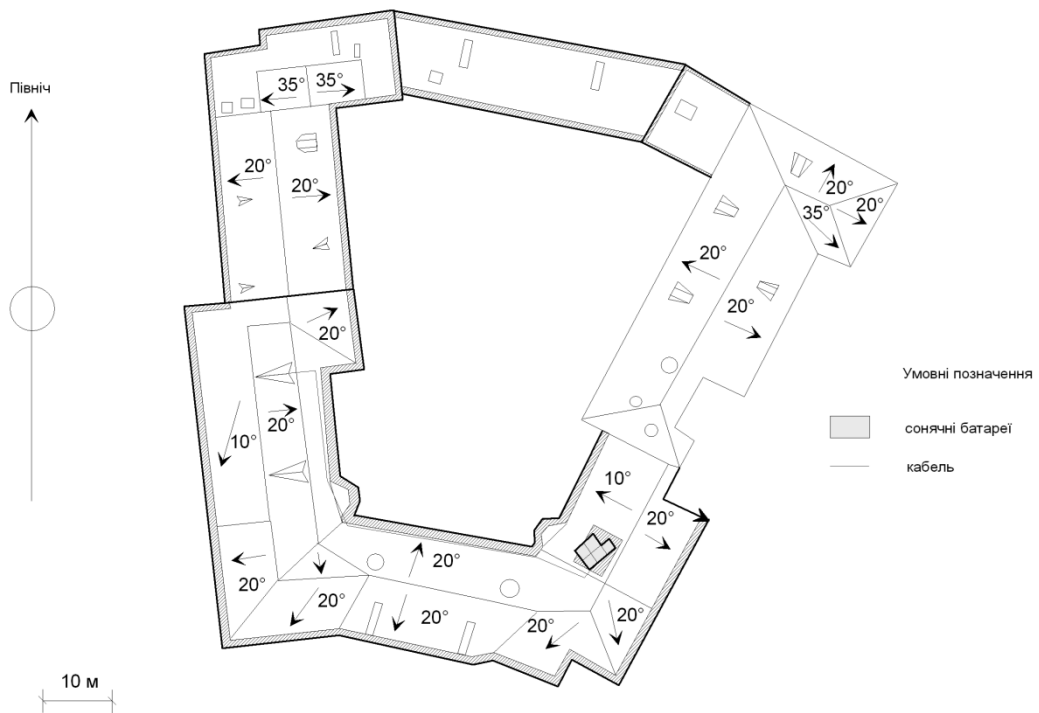


Рис. 3.24. **Схема покрівлі лівого крила північного корпусу ХНУ ім. В. Н. Каразіна**

Паспортну ефективність роботи інвертора зображено на рис. 3.25.

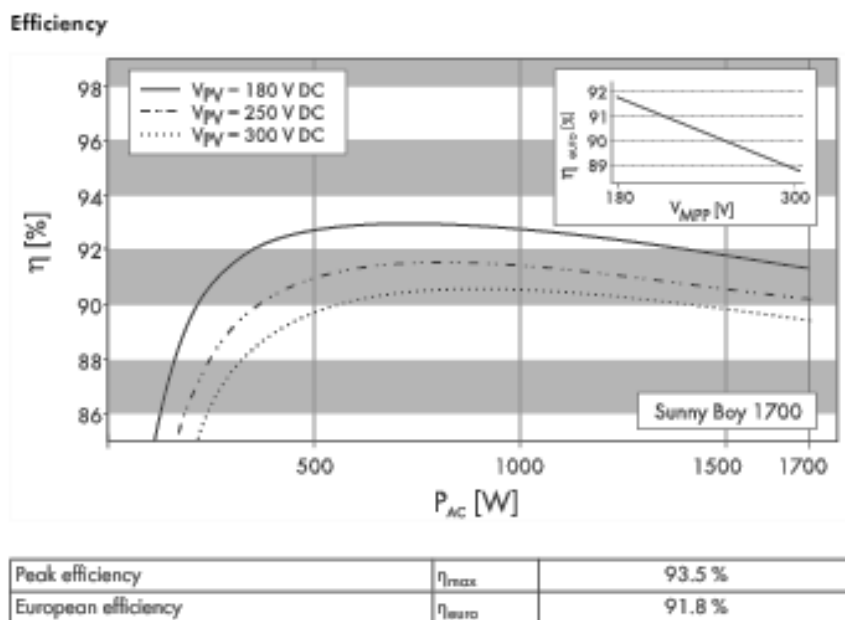


Рис. 3.25. **Ефективність роботи сонячного інвертора**

Рівень шуму під час роботи інвертора не перевищує 46 Дб, внутрішнє використання електроенергії в нічний час складає менше 0,1 Вт.

Вбудована система моніторингу роботи інвертора дає можливість відслідковувати такі параметри роботи ситами:

- поточну напругу та потужність електричного струму на вході;
- тривалість роботи фотоелектричної системи (тривалість сонячного періоду придатного для виробництва електроенергії);
- сумарний виробіток енергії за період роботи.

Зведені дані про сонячну інсоляцію для м. Харкова наведено в табл. 3.6.

Таблиця 3.6

Розподіл сонячної радіації у м. Харків за різними джерелами

Джерело даних	За місяцями												Сума на рік
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII	
Розрахунки за наведеною методикою	46,3	71,4	113,9	162,2	200,8	210,5	214,3	202,7	169,9	119,7	59,9	32,8	1604,4
PVSYST 44 ⁰	47,9	72,5	113,8	131,8	181,6	163,6	166,9	165,5	123,3	101,1	44,1	36,1	1348,2
RETScreen	36,9	56,8	94,6	117,6	166,8	163,8	172,4	151,3	104,7	65,1	35,7	27,9	1193,6
Харків 2013	17,4	32,9	54,2	133,6	188,2	200,1	172,1	143,1	67,1	48,2	21,3	13,7	1091,9

Дані, наведені в табл. 3.6, свідчать, що у 2013 р. рівень сонячної інсоляції був дещо нижчим від середнього значення за довгостроковими дослідженнями та розрахункове значення (рис. 3.26).

Сонячна електроенергетика невпинно збільшує свою частку у Світовому енергетичному балансі. Серед головних перешкод ефективного використання енергетичного потенціалу сонячного випромінювання слід виділити його низьку щільність та високу нерівномірність надходження як протягом світлового дня, так і залежно від пори року. Одним зі шляхів подолання, або мінімізації вказаних перешкод, може стати створення спеціалізованих систем концентрування сонячного випромінювання в поєднанні із системами акумулювання енергії або виробництва екологічно чистого палива. Доцільність першої частини такого підходу для фотоелектричних перетворювачів (ФЕП) науково обґрунтовано та реалізовано на практиці [156; 201].

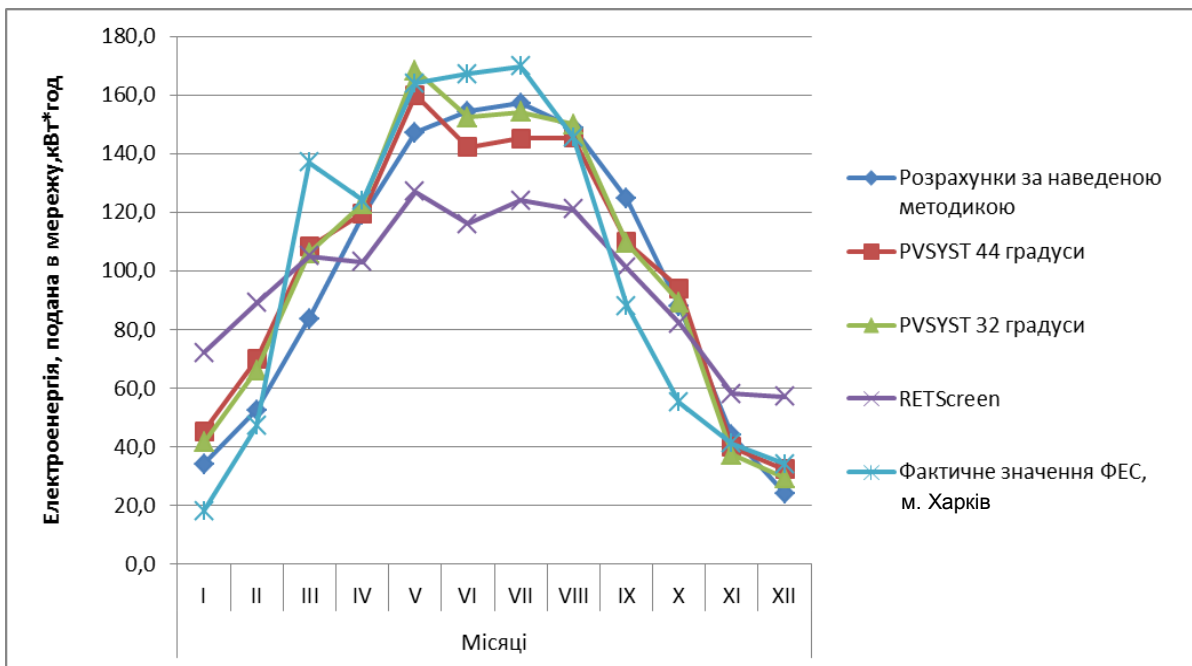


Рис. 3.26. Розрахунковий та експериментальний виробіток електричної енергії ФЕС

Друга частина пропонованого підходу полягає у використанні системами акумулювання енергії або виробництва екологічно чистого палива. В якості перспективних проектів у цьому напрямку, можна виділити роботи, направлені на використання інноваційних водневих технологій в інфраструктурі паливно-енергетичного комплексу, що може істотно зменшити споживання вуглеводневих палив і дозволити поліпшити стан навколишнього середовища в техногенно-навантажених промислових регіонах.

За рахунок використання систем концентрування можливо не лише підвищити енергетичну ефективність використання ФЕП, знизивши при цьому використання дорогих напівпровідникових матеріалів, але й згладити нерівномірність надходження сонячної радіації і покращити економічні та експлуатаційні показники, зокрема систем із використання відновлюваних джерел енергії. Слід зазначити, що такий підхід вимагає чіткого узгодження параметрів концентратора з параметрами енергоперетворювачів. Як наслідок, необхідно забезпечити високу точність розрахункових характеристик концентруючих систем з урахуванням розподілу щільності сконцентрованого випромінювання на поверхні ФЕП.

Зважаючи на актуальність проблеми в сучасній науковій літературі, слід зазначити, що багато уваги приділяється різноманітним видам та моделям концентраторів сонячного випромінювання, котрі передбачають

наявність систем стеження за сонцем (параболічні концентратори) або створення принципово нових фотоелектричних панелей (з використанням призмоконів, лінз Френеля, фоконів та фоклінів, голографічних та люмінесцентних концентраторів, жалюзійних геліостатів – концентраторів та ін.). Окремо слід виділити стаціонарні циліндричні концентратори з U-подібним профілем та їх варіації (концентратори з S – подібним вторинним рефлектором, циліндричні ω – подібні концентратори, багаторівневі системи концентрації та ін.), для яких передбачається використання фотоелементів із двосторонньою робочою поверхнею [201].

З метою підвищення ефективності використання сонячної інсоляції, пропонуємо застосовувати типові стаціонарні ФЕП у поєднанні з параболоциліндричним концентратором (2) та горизонтальним розміщенням фотоприймаючої поверхні (1) (рис. 3.27).

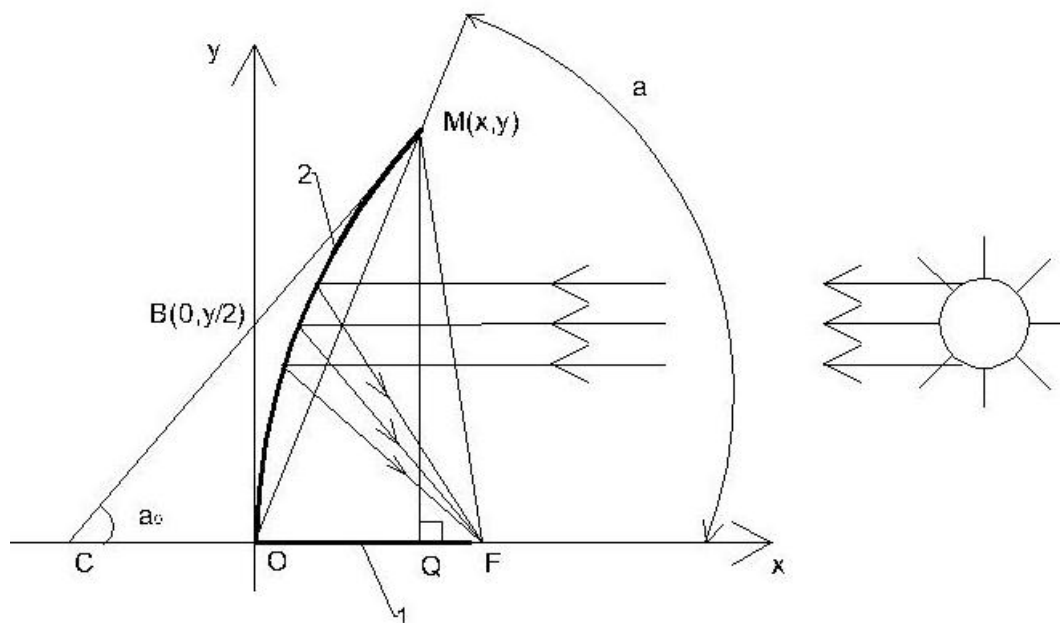


Рис. 3.27. Розрахункова схема параметрів концентратора $\alpha_0 = \beta$

Результати розрахунку сонячної інсоляції на одиницю площі сонячної панелі для м. Харків за даними довгострокових спостережень (липень 1983 – червень 2005 р) [219] подано на рис 3.28.

Дані, наведені на рис. 3.27, демонструють, що використання сконструйованої системи концентрування протягом усього року дозволить у 2,3 рази підвищити надходження сонячного випромінювання на одиницю площі, знизивши при цьому рівень сезонних коливань сонячної інсоляції на поверхні приймача з 2,44 до 2,1.

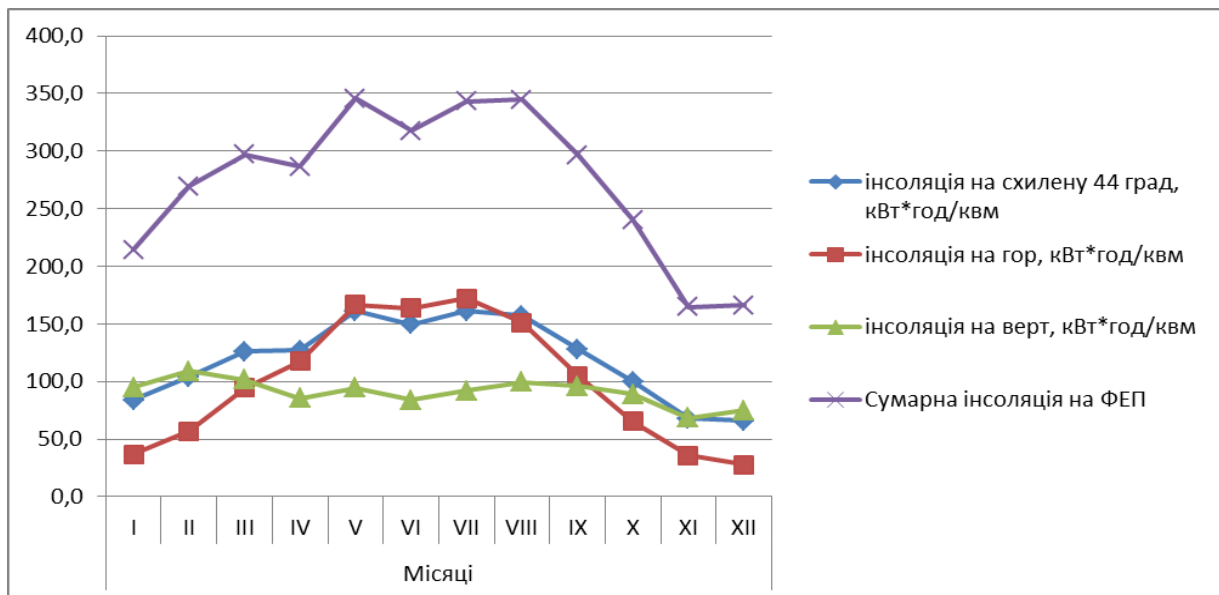


Рис. 3.28. Сумарний місячний рівень сонячної інсоляції для різних кутів нахилу приймаючої поверхні (м. Харків)

У разі використання стандартних полікристалічних фотоелектричних модулів з ККД 14,35 % та інвертора з ККД 0,96 можна розрахувати питомі та сумарні добові значення виробітки електричної енергії з одиниці площі ФЕП з концентратором (табл. 3.7).

Таблиця 3.7

Сумарні добові значення виробітки електричної енергії з одиниці площі ФЕП

Виробітка електричної енергії / місяці	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII	Сума за рік
Місячний виробіток, кВт*год/м ²	29,5	37,1	40,9	39,5	47,6	43,8	47,3	47,5	40,8	33,1	22,7	22,9	452,7
Добовий виробіток 140 модулів ЖКМ 235Р-60, кВт*год	218,0	303,5	302,6	301,3	352,2	334,4	349,7	351,3	312,0	245,0	173,1	169,0	3346,7

Сучасний рівень водневих технологій, які реалізуються, зокрема, в електрохімічних установках створених в ІПМаш НАН України, дозволяє виробляти і накопичувати водень у системах із високим тиском, безпосередньо в умовах водневих заправних станцій, і використовувати його

в якості екологічно чистого палива в автомобільних двигунах та паливних елементах, що знижує токсичність відпрацьованих газів транспортних засобів і забезпечує економію вуглеводневих енергетичних ресурсів [153].

З метою зниження гостроти енергоекологічної кризи пропонується розширити використання відновлювальних видів енергії шляхом створення сонячних водневих заправних станцій (СВЗС) на базі новітніх технологій для забезпечення автотранспорту та побутових споживачів екологічно чистим паливом – воднем (рис. 3.29).

Дослідження енергетичних і режимних характеристик обладнання, яке було розроблено для використання в технологічних схемах СВС, дозволили визначити основні показники роботи установки залежно від гео-кліматичних умов експлуатації. Результати проведених теоретичних досліджень щодо залежності добового виробітку H_2 (водню) і O_2 (кисню) від місяця року для м. Харкова наведено на рис. 3.30.

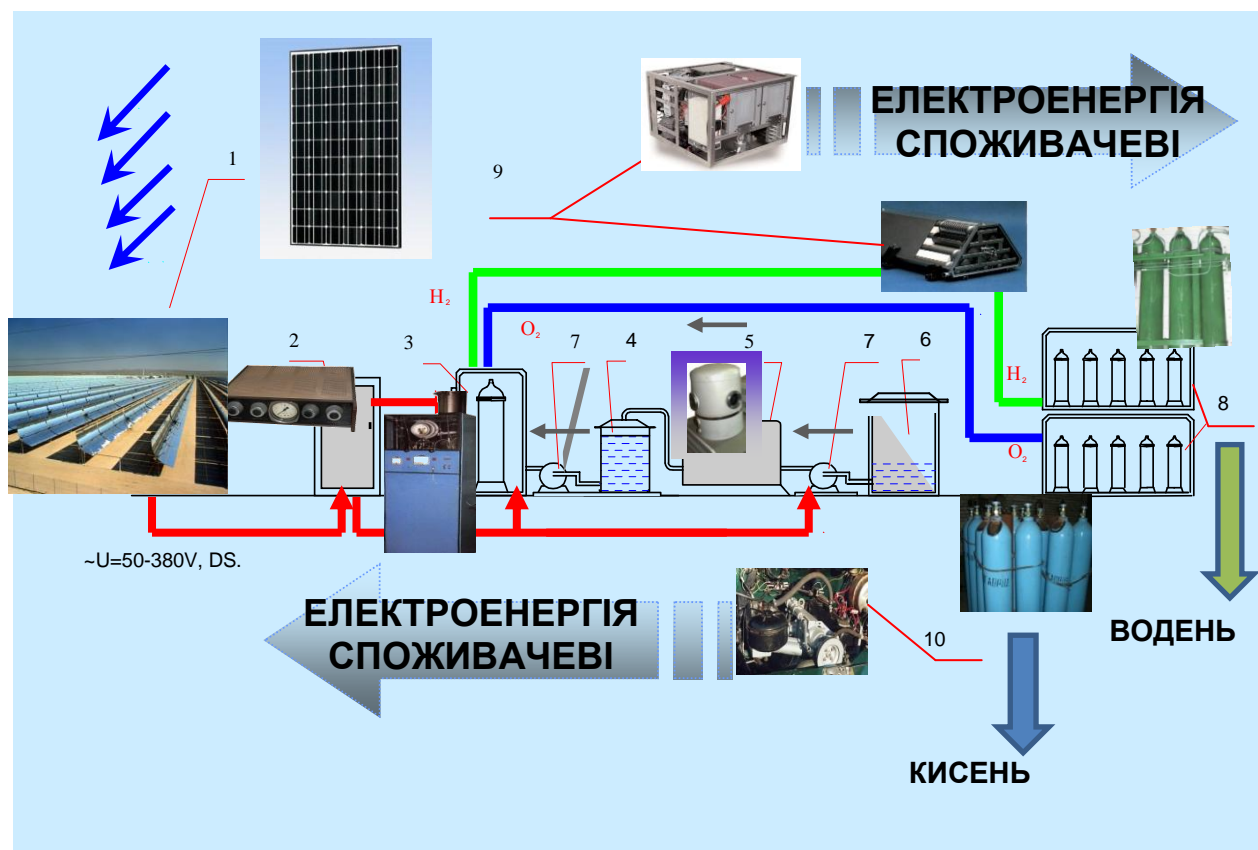


Рис. 3.29. Принципова схема автономного геліоенергетичного водневого енерготехнологічного комплексу для заправки автотранспорту:

1 – фотоелектрична станція зі стаціонарним концентратором сонячного випромінювання; 2 – інвертор і система управління; 3 – електролізер високого тиску; 5 – бак опрісненої води; 6 – опріснювальний блок; 7 – бак початкової води; 4 – насос; 8 – накопичувальні ємкості для водню і кисню; 9, 11 – балони для комерційної реалізації газів; 10 – метало гідридні модулі для тривалого зберігання і стискання водню



Рис. 3.30. Потенціал геліоенергетичних ресурсів для виробітку електроенергії та водню на території України

Використання стаціонарних напівпараболічних концентраторів запропонованої конструкції протягом усього року дозволить у 2,3 рази підвищити надходження сонячного випромінювання на одиницю площі, знизивши при цьому рівень сезонних коливань сонячної інсоляції на поверхні приймача 14 %. Використання зазначених технологій у поєднанні із сучасними електролізерами водню високого тиску дозволить не лише зменшити залежність від викопного палива, але й знизити викиди CO₂ в атмосферу.

3.6. Методологія оцінювання екологічного ризику для теплових електростанцій України

Електроенергетика є базовою галуззю для забезпечення сталого розвитку України, що одночасно чинить надмірний техногенний вплив на навколишнє природне середовище.

Вимоги екологічної безпеки експлуатації теплових електростанцій (ТЕС) є пріоритетними. Зниження рівня екологічної безпеки ТЕС, що використовують кам'яне вугілля під час виробництва електроенергії, викликане зношеністю технологічного обладнання, недостатньо контрольованою якістю кам'яного вугілля і, як наслідок, утворення значних обсягів викидів в атмосферне повітря, що призводить до несприятливої екологічної ситуації та погіршення здоров'я населення України.

Використання кам'яного вугілля на ТЕС України як одного з основних первинних енергоносіїв, запаси якого складають 95,4 % від загальної кількості органічного палива, призводить до істотного забруднення атмосферного повітря викидами хімічних газоподібних речовин та летючої золи [55].

Особливу небезпеку для здоров'я становлять викиди летючої золи, яка містить бенз(а)пірен, важкі метали та природні радіонукліди (ПРН), що мають канцерогенні властивості та газоподібні речовини, які обумовлюють токсичну дію на організм людини. Внаслідок цього ТЕС є об'єктами підвищеного екологічного ризику [179].

Дослідженню хімічного складу летючої золи, що надходить в атмосферне повітря з газоподібними речовинами, під час спалювання кам'яного вугілля на ТЕС України присвячено декілька робіт [27; 122].

На сьогодні визначено, що в складі викидів летючої золи містяться ПРН, та їх внесок у додаткове опромінення населення, що проживає в районах розміщення найпотужніших ТЕС України, але недостатньо досліджено її інші складові.

Найдрібніші частки летючої золи, не вловлені системами очищення на ТЕС, крім ПРН, містять як макрокомпоненти, так і мікроелементи канцерогенних речовин, а також речовин, що характеризуються токсичною дією, вплив яких необхідно враховувати під час оцінювання впливу ТЕС на якість атмосферного повітря та здоров'я населення.

Вивчення гранулометричного та хімічного складу летючого золи ТЕС України під час спалювання кам'яного вугілля дозволить більш точно оцінити техногенне навантаження на навколишнє середовище та екологічний ризик для населення [64].

Для зменшення негативного впливу ТЕС на атмосферне повітря і населення згідно з вимогами міжнародно-правових актів Директиви 96/61/ЕС, Директиви 2001/80/ЕС, Директиви 2008/50/ЕС і Директиви 2004/107/ЕС необхідно проводити дослідження складу летючої золи та їх внесок у формування екологічного ризику.

У цій роботі розглянута методологія комплексного оцінювання екологічного ризику та визначено величини ризику для населення в районах розташування Бурштинської та Зміївської ТЕС, що обумовлені забрудненням атмосферного повітря газоподібними речовинами, летючою золою та її складовими.

Згідно з вимогами "Протоколу про стратегічну екологічну оцінку", важливим напрямом дослідження є оцінювання впливу на навколишнє середовище викидів ТЕС України потужністю більше 300 МВт, що використовують кам'яне вугілля, оцінювання екологічного ризику та розроблення заходів щодо запобігання несприятливих наслідків ТЕС.

Перспективними та важливими напрямками забезпечення екологічної безпеки навколишнього середовища в умовах тривалої експлуатації ТЕС України в нормальному режимі є впровадження підходів і методів, що дозволяють проводити оцінювання екологічного ризику, як обов'язкової процедури оцінювання впливу об'єктів підвищеної екологічної небезпеки, та впровадження природоохоронних заходів, спрямованих на зменшення негативного впливу в процесі виробництва електроенергії.

Відсутність методів і підходів, що дозволяють ідентифікувати та оцінювати всі складові викидів у разі забруднення атмосферного повітря, які впливають на формування екологічного ризику, в умовах тривалої експлуатації ТЕС, обумовлює актуальність досліджень у цьому напрямку, а також необхідність розроблення методу комплексного оцінювання екологічного ризику.

Важливим та наукомістким завданням є оцінювання величини екологічного ризику для населення, обумовленого забрудненням атмосферного повітря викидами хімічних газоподібних речовин, летючої золи та її складовими під час спалювання вугілля на ТЕС для нормального режиму експлуатації.

Під *екологічним ризиком* в роботі розуміють ймовірність виникнення несприятливих ефектів для здоров'я людини внаслідок забруднення атмосферного повітря радіоактивними і хімічними речовинами [71; 74 – 76; 179; 188].

3.6.1. Загальна характеристика теплових електростанцій України

На території України розташовано 14 теплових електростанцій із встановленою потужністю понад 300 МВт. Для виробництва електроенергії на цих ТЕС в якості палива використовують вугілля марок "ГСШ", "Г", "АШ", "Т". Їх сумарна встановлена потужність становить близько 27,6 ГВт [188; 212].

Використання кам'яного вугілля на найпотужніших ТЕС України призводить до надмірного забруднення атмосферного повітря, що викликає утворення значних обсягів викидів хімічних газоподібних речовин та летючої золи, і як, наслідок, погіршення екологічної ситуації в районах розміщення ТЕС.

У цій роботі розглянуто вплив Бурштинської та Зміївської ТЕС України, які входять у "Перелік особливо важливих об'єктів електроенергетики..." [211], на забруднення атмосферного повітря газоподібними речовинами, летючою золою та її складовими й оцінено величини екологічного ризику.

Бурштинська ТЕС входить до складу "ДТЕК Західенерго", вона розташована біля міста Бурштин, Галицького району Івано-Франківської області. Встановлена потужність – 2,3 ГВт. Дванадцять енергоблоків були введені в експлуатацію в 1965 – 1969 рр. Основне технологічне паливо – вугілля газової групи Донецького і Львівсько-Волинського басейнів, допоміжне – природний газ і мазут. Усі паливні котли обладнані комбінованими вуглегазомазутними пальниками.

Бурштинська ТЕС (рис. 3.31) є потужним джерелом викидів шкідливих хімічних речовин в атмосферу, спалюючи на добу від 12,5 до 17 тис. тонн вугілля. Викиди здійснюються через дві 250-метрові і одну 180-метрову труби [215].

Зміївська ТЕС (рис. 3.32) входить до складу "Центренерго", вона розташована в Харківській області в селищі Слобожанське. Встановлена проектна потужність Зміївської ТЕС становить 2,2 ГВт. Основним паливом для ТЕС є вугілля марок "А" і "П", на якому можуть працювати всі енергоблоки електростанції.



Рис. 3.31. **Бурштинська ТЕС** [215]



Рис. 3.32. **Зміївська ТЕС** [216]

Викиди здійснюються через дві 250-метрові, дві 120-метрові і одну 180-метрову труби.

Основним видом діяльності є виробництво електричної енергії, що відпускається в електричну мережу по лініях 110 кВ і 330 кВ, а також централізоване тепlopостачання, водopостачання і водовідведення селища енергетиків Слобожанське (Комсомольське), де проживає близько 17 000 осіб, і прилеглих промислових підприємств [216].

На сьогодні у складі енергетичної системи України діючими є всі десять енергоблоків Зміївської ТЕС, введені в експлуатацію в 1960 – 1969 рр., а підприємство залишається стабільним виробником на енергетичному ринку України, але працює з мінімальним навантаженням через дефіцит палива [216].

3.6.2. Характеристика викидів в атмосферне повітря тепловими електростанціями

У разі спалювання кам'яного вугілля на ТЕС в атмосферне повітря надходять газоподібні речовини (діоксид сірки, діоксид та оксид азоту, оксид вуглецю, метан), бенз(а)пірен та летюча зола, яка містить сполуки ванадію, ртуть, свинець, хром, нікель, арсен, мідь, цинк, та ПРН.

У разі спалювання 1 т кам'яного вугілля в середньому утворюється близько 90 – 100 кг летючої золи, тобто якщо ступінь очищення викидів 70 – 80 %, то в атмосферу потрапляє 20 – 30 кг летючої золи, якщо ефективність очищення 97 – 99 %, то 1 – 3 кг [27].

Частки розміром 5 – 100 мкм, що містяться в золі в кількості до 80 – 85 %, потрапляють із топok котлоагрегатів із димовими газами, і після очищення формують дисперсний склад летючої золи, яка багато в чому залежить від гранулометричних характеристик спалюваного вугілля, а також від ступеня очищення.

На сьогодні значну увагу приділено дисперсному складу летючої золи під час спалювання вугілля певних марок із різних родовищ і показано, що дисперсний склад летючої золи під час спалювання кам'яного і бурого вугілля відрізняється. Летюча зола під час спалювання кам'яного вугілля містить більше частинок розміром до 5 мкм порівняно з летючою золою від бурого вугілля [64]. У табл. 3.8 наведено дисперсний склад летючої золи донецького вугілля.

Дисперсний склад летючої золи кам'яного вугілля, % [5]

Вид вугілля, марка	Розмір, мкм								
	0–5	5–10	10–20	20–30	30–40	40–60	60–80	80–100	>100
Донецьке (АШ)	8	9	14	11	11	20	17	5	5

Більш детальне дослідження летючої золи за дисперсним складом донецького вугілля до 10 мкм наведено в табл. 3.9.

Таблиця 3.9

Дисперсний склад летючої золи, % [5]

Дисперсність, мкм	<0,2	<0,6	<1,0	<2,0	<4,0	<6,0	<10,0
% часток летючої золи донецького вугілля	4,48	24,28	55,82	83,26	92,84	97,51	100

З табл. 3.9 видно, що в діапазоні до 10 мкм значна частина летючої золи має розміри до 4 мкм.

Для донецького вугілля марки "Т" частина часток летючої золи з розмірами в інтервалі 0 ÷ 5 мкм дорівнює 12 %, а в інтервалі 5 ÷ 10 мкм дорівнює 20 % [214].

Дослідженню хімічного складу летючої золи та вмісту в ній ПНР, присвячено декілька робіт [27; 64; 122; 179], у той самий час вміст мікроелементів визначається розрахунковим способом [188].

Хімічний склад летючої золи обумовлений окислами кремнію, алюмінію, титану, калію, натрію, заліза, кальцію, магнію. Кальцій може бути присутнім у вигляді вільного оксиду, а також у складі силікатів, сульфатів та інших сполук. Більш детальні аналізи показують, що в летючій золі в невеликих кількостях містяться й інші елементи, такі, як: германій, бор, миш'як, ванадій, марганець, цинк, уран, срібло, ртуть, фтор, хлор.

Хімічний склад летючої золи під час спалювання донецького вугілля наведено в табл. 3.10 [27; 122].

За даними макрокомпонентного складу летючої золи для ТЕС, які використовують різні марки вугілля, визначено, що її хімічний склад практично не залежить від типу вугілля.

Хімічний макрокомпонентний склад летючої золи донецького вугілля, що спалюють на ТЕС України, %

ТЕС/вид золи	SiO ₂	Fe ₂ O ₃	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₄ ²⁻	Na ₂ O+K ₂ O
Донецьке вугілля	59,6	9,1	23,6	3,2	1,4	0,6	–
Добротвірська	52,0	14,4	26,0	2,7	1,4	–	3,5
Зуївська	52,3	9,6	26,5	3,4	2,4	–	1,0
Придніпровська	45,3	27,7	20,8	2,5	1,1	–	2,6

Експериментальні результати питомої активності радіонуклідів летючої золи Зміївської ТЕС, та дані літературних джерел наведено в табл. 3.11.

Таблиця 3.11

Питомі активності радіонуклідів летючої золи, що потрапляють в атмосферу під час спалювання вугілля, Бк/кг [70]

Летюча зола	Радіонукліди									⁴⁰ K
	Ряд ²³⁸ U						Ряд ²³² Th			
	²³⁸ U	²³⁴ U	²³⁰ Th	²²⁶ Ra	²¹⁰ Pb	²¹⁰ Po	²³² Th	²²⁸ Ra	²²⁸ Th	
Експериментальні дані	–	–	–	164	–	–	119	–	–	726
Антрацитовий штиб [4]	89	89	69	103	344	344	34	34	34	637
Антрацит рядовий [4]	206	206	158	238	793	793	362	362	362	1929
Донецьке вугілля [2]	–	–	–	114,7	148	–	37	–	–	825,1
Донецьке вугілля [5]	–	–	–	155	514	–	–	–	–	–
Донецьке вугілля [6]	–	–	–	103	–	–	34,4	–	–	638
Середнє значення	147,5	147,5	113,5	146,3	449,8	568,5	117,3	198,0	198,0	951,0

Необхідно відзначити, що експериментальні дані вмісту радіонуклідів у летючої золи Зміївської ТЕС добре узгоджуються із середніми значеннями питомої активності радіонуклідів у летючій золі під час спалювання донецького вугілля [64].

У табл. 3.12 наведено характеристики викидів Бурштинської ТЕС в атмосферне повітря за період 2011 – 2014 рр. [215].

Таблиця 3.12

Склад та кількість забруднюючих речовин, що потрапляють в атмосферне повітря від Бурштинської ТЕС [188]

Речовина	Валовий викид, т/рік				Середнє значення
	2011	2012	2013	2014	
Летюча зола	23438,6	18990,1	19552,3	22061,9	21010,7
Діоксид сірки	164547,5	126509,3	128212,8	139552,7	139705,6
Сполуки азоту	11617,8	11917,4	11697,0	11543,6	11693,9
Оксид вуглецю	1099,9	1104,2	1063,3	1068,9	1084,1
П'ятиокис ванадію	0,02	0,05	0,03	0,03	0,03
Ртуть	0,37	3,31	1,69	1,91	1,82
Свинець	3,61	4,22	3,61	4,07	3,87
Мідь	3,46	3,13	3,03	3,42	3,26
Цинк	12,03	10,51	10,38	11,72	11,16
Хром	4,94	3,21	3,76	4,24	4,04
Нікель	3,91	0,82	2,18	2,46	2,34
Миш'як	4,35	3,48	3,61	4,07	3,88

Середньорічний викид летючої золи в разі спалювання кам'яного вугілля на Зміївській ТЕС за період 2001 – 2012 рр. становить 36,2 тис. т / рік [216]. У табл. 3.13 наведено характеристики викидів Зміївської ТЕС в атмосферне повітря за 2011 р. [215].

Таблиця 3.13

Склад та кількість забруднюючих речовин, що потрапляють в атмосферне повітря від Зміївської ТЕС [188]

Речовина	Валовий викид, т/рік	Речовина	Валовий викид, т/рік
Летюча зола	38527,8	Свинець	6,28
Діоксид сірки	79064,67	Мідь	4,47
Сполуки азоту	7479,21	Цинк	14,92
Оксид вуглецю	763,24	Хром	6,54
П'ятиокис ванадію	0,05	Нікель	4,97
Ртуть	0,54	Миш'як	5,54

За допомогою спеціального обладнання проведено вимірювання складу летючої золи Зміївської ТЕС. Елементний склад визначався з використанням двох ядерно-фізичних методів – миттєвого γ -випромінювання для ядерних реакцій (МВЯР) і характеристичного рентгенівського випромінювання (ХРВ) [190].

За результатами вимірювань отримано склад елементів у діапазоні від Li до Pb. Макроелементи знаходяться у формі з'єднань із киснем і представлені Al, Si, Fe, K, Ca, S (табл. 3.14) [64].

Необхідно відзначити, що під час спалювання вугілля відбувається збагачення складових летючої золи.

Таблиця 3.14

Склад елементів в летючій золі Зміївської ТЕС [64]

Елемент	Вміст	
	%	тони
F	0,139	50,32
Na	0,792	286,70
Mg	0,732	264,98
Al	24,21	8 764,02
Si	19,26	6 972,12
P	0,793	287,07
S	1,542	558,20
K	5,466	1 978,69
Ca	5,19	1 878,78
Ti	0,779	282,00
Cr	0,079	28,60
Mn	0,203	73,49
Fe	6,435	2 329,47
Ni	0,15	54,30
Cu	0,054	19,55
Zn	0,473	171,23
As	0,005	1,81
Zr	0,028	10,14
Pb	0,011	3,98

3.6.3. Розсіювання шкідливих речовин в атмосферному повітрі

Сьогодні існує безліч математичних моделей та комп'ютерних програм для розрахунків поширення хмари викидів [204; 218]. У них використовуються усереднені параметри викидів за рік. Розсіювання викидів в атмосфері оцінюють за допомогою моделі Гауса, сухе осадження – за допомогою моделі виснаження джерела, вологе осадження – з використанням коефіцієнтів вимивання [190].

Гаусова модель розсіювання, яка використовується в CAP88 [218], – одна з найбільш часто використовуваних моделей у багатьох країнах, в тому числі і в Україні. Вона дає результати, які узгоджуються з вимірними даними так само добре, як і результати інших моделей, але при цьому CAP88 є досить проста в роботі і сумісна з довільним характером турбулентності, проте в моделі використовується лише одна усереднена швидкість осідання часток летючої золи, що дорівнює 0,18 см / с, причому змінювати цю швидкість, призначений для користувача, інтерфейс не дозволяє.

Діюча в цей час в Україні "Методика розрахунку концентрацій в атмосферному повітрі шкідливих речовин, що містяться у викидах підприємств" – (ОНД-86) [13], також встановлює одну усереднену швидкість осідання для всіх часток летючої золи за допомогою коефіцієнта осідання F . Можна змінювати коефіцієнт осідання F , що враховує швидкість осідання часток в атмосферному повітрі залежно від дисперсного складу летючої золи, це все ж лише одна усереднена швидкість випадіння [28].

Визначення коефіцієнта F дозволяє відповідно до ОНД-86 більш точно оцінити значення максимальних приземних концентрацій твердих часток, за якими для ТЕС встановлюють категорію викидів.

З урахуванням загальноприйнятого підходу розсіювання викидів в атмосфері і особливостей сучасного підходу до розрахунку осідання часток летючої золи представлена модель, в якій можлива зміна необхідних параметрів та аналіз зміни в розрахунках [28; 51; 61; 218].

На рис. 3.33 наведена залежність концентрації часток летючої золи від відстані до 80 км для висоти труби 225 м.

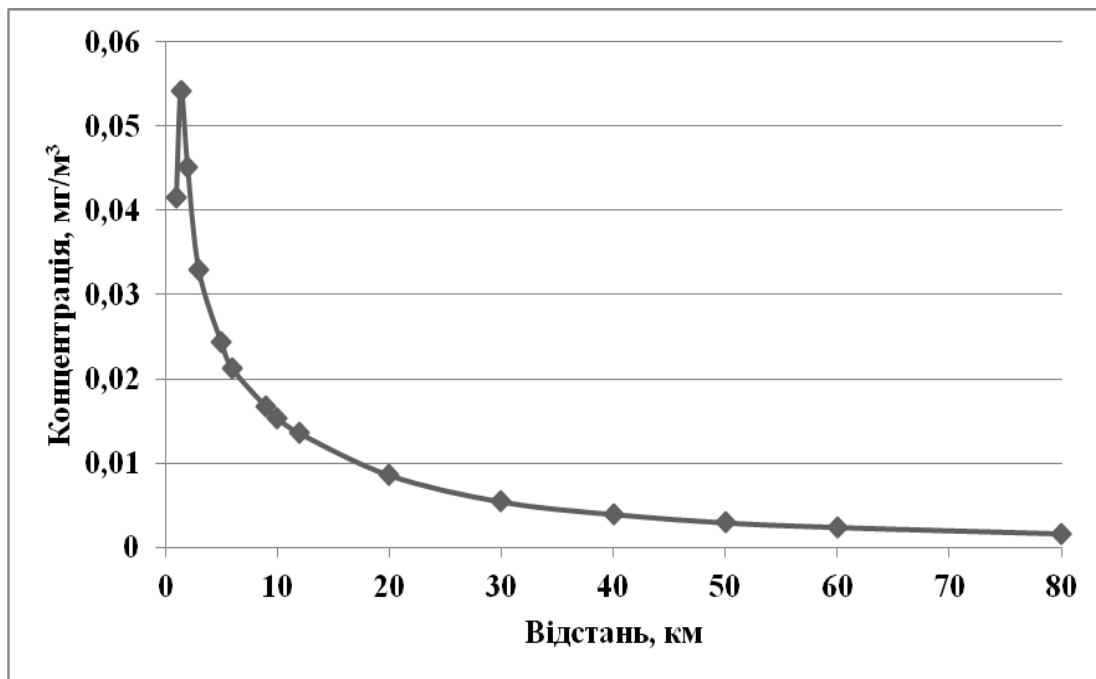


Рис. 3.33. Залежність концентрації часток летючої від відстані

Розрахунки для великих відстаней можна проводити за допомогою програми *PC CREAM* [204]. У ній також для розрахунку розсіювання домішок в атмосфері використовують Гаусову модель. Особливістю цієї моделі є те, що вона призначена для розрахунків концентрацій на відстанях до 3 000 км. Один суттєвий недолік цієї моделі – обмеження висоти джерела викидів на рівні 100 м.

Рекомендовані Всесвітньою організацією охорони здоров'я (ВООЗ) [213] середньорічні концентрації часток летючої золи з розміром менше 10 мкм для чистого повітря 20 мкг / м³, а з розміром менше 2,5 мкм – 10 мкг / м³.

У табл. 3.15 наведено розраховані середньорічні концентрації речовин, що містяться у викидах ТЕС на відстані 1 км, та індивідуальні дози за сімдесятирічний період, що будуть використані під час оцінювання екологічного ризику для населення за нормальних умов експлуатації Бурштинської ТЕС.

У табл. 3.16 та табл. 3.17 наведено розраховані концентрації речовин, що містяться у викидах ТЕС на відстані 1 км та індивідуальні дози за сімдесятирічний період, що будуть використані під час оцінювання екологічного ризику для населення в разі нормального режиму експлуатації Зміївської ТЕС.

Таблиця 3.15

Показники для оцінювання екологічного ризику для населення, обумовленого викидами в атмосферне повітря в разі нормального режиму експлуатації Бурштинської ТЕС [188]

Речовина	Середньорічна концентрація, мг/м ³	Індивідуальна доза (70 років), мг
Летюча зола	$2,27 \cdot 10^{-2}$	$1,29 \cdot 10^4$
Діоксид сірки	$1,51 \cdot 10^{-1}$	$8,55 \cdot 10^4$
Діоксид азоту	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$7,13 \cdot 10^3$
Оксид азоту	$1,40 \cdot 10^{-4}$	$7,92 \cdot 10^1$
Оксид вуглецю	$1,17 \cdot 10^{-3}$	$6,64 \cdot 10^2$
П'ятиокис ванадію	$3,24 \cdot 10^{-8}$	$1,84 \cdot 10^{-2}$
Ртуть	$1,96 \cdot 10^{-6}$	$1,11 \cdot 10^0$
Свинець	$4,18 \cdot 10^{-6}$	$2,37 \cdot 10^0$
Мідь	$3,52 \cdot 10^{-6}$	$2,00 \cdot 10^0$
Цинк	$1,20 \cdot 10^{-5}$	$6,83 \cdot 10^0$
Хром	$4,36 \cdot 10^{-6}$	$2,47 \cdot 10^0$
Нікель	$2,53 \cdot 10^{-6}$	$1,43 \cdot 10^0$
Миш'як	$4,19 \cdot 10^{-6}$	$2,38 \cdot 10^0$

Таблиця 3.16

Показники для оцінювання екологічного ризику для населення, обумовленого викидами в атмосферне повітря в разі нормального режиму експлуатації Зміївської ТЕС

Речовина	Концентрація, мг/м ³	Індивідуальна доза, (70 років), мг
Летюча зола	$4,16 \cdot 10^{-2}$	$2,36 \cdot 10^4$
Діоксид сірки	$8,53 \cdot 10^{-2}$	$4,84 \cdot 10^4$
Окисли азоту	$8,07 \cdot 10^{-3}$	$4,58 \cdot 10^3$
Оксид вуглецю	$8,24 \cdot 10^{-4}$	$4,67 \cdot 10^2$
П'ятиокис ванадію	$5,37 \cdot 10^{-8}$	$3,05 \cdot 10^{-2}$
Ртуть	$5,87 \cdot 10^{-7}$	$3,33 \cdot 10^{-1}$
Свинець	$6,78 \cdot 10^{-6}$	$3,84 \cdot 10^0$
Мідь	$4,83 \cdot 10^{-6}$	$2,74 \cdot 10^0$
Цинк	$1,61 \cdot 10^{-5}$	$9,14 \cdot 10^0$
Хром	$7,06 \cdot 10^{-6}$	$4,01 \cdot 10^0$
Нікель	$5,36 \cdot 10^{-6}$	$3,04 \cdot 10^0$
Миш'як	$5,98 \cdot 10^{-6}$	$3,39 \cdot 10^0$

**Показники для оцінювання екологічного ризику,
обумовленого складовими летучої золи, що надходять
в атмосферне повітря від Зміївської ТЕС**

Елемент	Середньорічна концентрація, мг/м ³	Індивідуальна доза, мг
F	$5,15 \cdot 10^{-5}$	$2,92 \cdot 10^1$
Na	$2,93 \cdot 10^{-4}$	$1,66 \cdot 10^2$
Mg	$2,71 \cdot 10^{-4}$	$1,54 \cdot 10^2$
Al	$8,96 \cdot 10^{-3}$	$5,08 \cdot 10^3$
Si	$7,13 \cdot 10^{-3}$	$4,04 \cdot 10^3$
P	$2,94 \cdot 10^{-4}$	$1,66 \cdot 10^2$
S	$5,71 \cdot 10^{-4}$	$3,24 \cdot 10^2$
K	$2,02 \cdot 10^{-3}$	$1,15 \cdot 10^3$
Ca	$1,92 \cdot 10^{-3}$	$1,09 \cdot 10^3$
Ti	$2,88 \cdot 10^{-4}$	$1,64 \cdot 10^2$
Cr	$2,93 \cdot 10^{-5}$	$1,66 \cdot 10^1$
Mn	$7,52 \cdot 10^{-5}$	$4,26 \cdot 10^1$
Fe	$2,38 \cdot 10^{-3}$	$1,35 \cdot 10^3$
Ni	$5,55 \cdot 10^{-5}$	$3,15 \cdot 10^1$
Cu	$2,00 \cdot 10^{-5}$	$1,13 \cdot 10^1$
Zn	$1,75 \cdot 10^{-4}$	$9,93 \cdot 10^1$
As	$1,85 \cdot 10^{-6}$	1,05
Zr	$1,04 \cdot 10^{-5}$	5,88
Pb	$4,07 \cdot 10^{-6}$	2,31

3.6.4. Оцінювання величин екологічного ризику

Оцінювати вплив на навколишнє середовище і населення потенційно небезпечних об'єктів, в тому числі і ТЕС, прийнято за величиною екологічного ризику [58; 188; 210]. У декількох роботах [71, 74 – 76, 179] розглянута методологія для оцінювання екологічного ризику, обумовленого викидами ТЕС. Завдяки такому розгляду з'явилась можливість комплексного оцінювання екологічного ризику, обумовленого як канцерогенними, включаючи і радіоактивні, так і неканцерогенними речовинами. Дана методологія також дозволяє оцінити внесок у величину екологічного ризику всіх речовин, що входять до складу твердих часток.

Комплексне оцінювання екологічного ризику дозволяє більш повно оцінити екологічну небезпеку досліджуваного об'єкта та розробити ефективні заходи щодо захисту якості атмосферного повітря і здоров'я населення. Всього розрізняють чотири основних етапи оцінювання екологічного ризику забруднення атмосферного повітря в разі нормального режиму експлуатації ТЕС [74 – 76; 105; 121; 179; 220].

Ідентифікація небезпеки – перший етап оцінювання екологічного ризику під час експлуатації ТЕС – виявлення небезпеки, встановлення джерел і чинників (хімічних та радіаційних) екологічного ризику, а також зон поширення ризику.

Оцінювання експозиції – другий етап оцінювання екологічного ризику під час експлуатації ТЕС полягає в оцінюванні реального впливу хімічних та радіаційних чинників.

Оцінювання залежності "доза – ефект" – третій етап оцінювання екологічного ризику під час експлуатації ТЕС пов'язаний з аналізом впливу хімічних і радіаційних чинників екологічного ризику.

Характеристика ризику – четвертий, заключний етап, містить повну характеристику екологічного ризику під час експлуатації ТЕС із використанням якісних і кількісних параметрів.

На рис. 3.34 подано алгоритм комплексного оцінювання екологічного ризику забруднення атмосферного повітря в разі нормального режиму експлуатації ТЕС.

В основі розробленого методу комплексного оцінювання екологічного ризику використано імовірнісний підхід для визначення очікуваного числа додаткових випадків виникнення соматико-стохастичних ефектів у населення за фактичних рівнянь впливу хімічних та радіоактивних речовин, що є складовими викидів ТЕС в атмосферне повітря під час спалювання кам'яного вугілля [71; 74 – 76].

Кількісне оцінювання екологічного ризику особливо важлива на регіональному рівні, в першу чергу для регіонів, де зосереджено значний потенціал ТЕС України, які є основними джерелами хімічного неканцерогенного, канцерогенного та радіоактивного забруднення атмосферного повітря.

З метою встановлення причинно-наслідкового зв'язку між впливом шкідливих речовин і виникненням соматико-стохастичних ефектів у населення, що довгостроково проживає в районах експлуатації ТЕС, застосовується залежність між дозою шкідливої речовини та очікуваним ефектом.

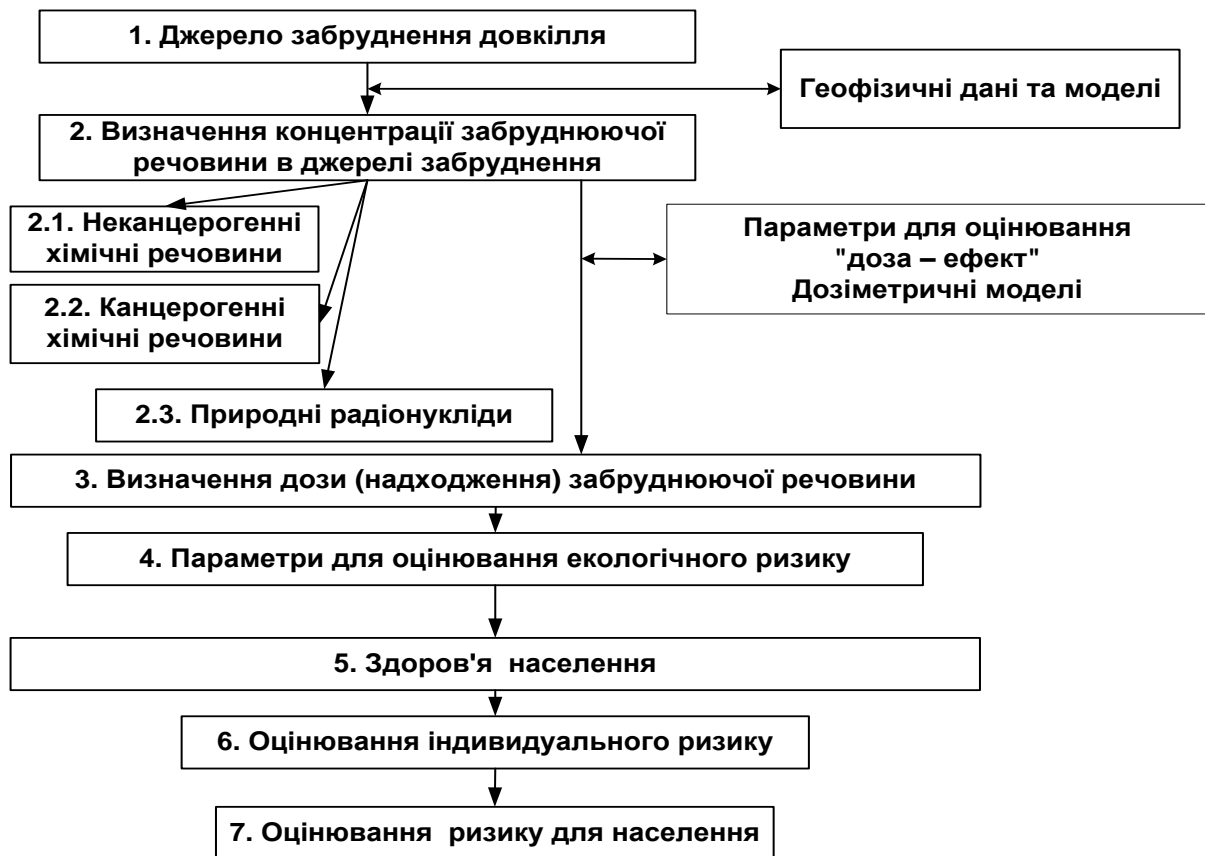


Рис. 3.34. Алгоритм комплексного оцінювання екологічного ризику забруднення атмосферного повітря в разі нормального режиму експлуатації ТЕС

Екологічний ризик r , обумовлений забрудненням атмосферного повітря викидами неканцерогенних, канцерогенних і радіоактивних речовин, залежить від кількості їх надходження в організм людини [71; 74 – 76]:

$$r = f(D), \quad (3.95)$$

де $f(D)$ – функція дози речовини, що потрапила в організм людини.

Індивідуальну дозу впливу хімічних D_{indch} та радіоактивних D_{indr} речовин визначають добутком концентрації речовини c , інтенсивності надходження вдихуваного повітря людиною v і повним часом його надходження t .

Очікується, що в області малих доз співвідношення між дозою речовини D_{ch} та реакцією на неї є лінійним, а вплив неканцерогенних, канцерогенних хімічних та радіоактивних речовин немає порогу.

Зі збільшенням дози зростає і ступінь прояву цих порушень. Ефекти ж обумовлені впливом малих доз проявляються у віддалені періоди. Такі ефекти прийнято називати стохастичними, імовірнісними [198]. Стохастичний зв'язок "доза – ефект" означає: чим більше доза опромінення, тим більша ймовірність або ризик появи даного ефекту в опроміненій людині.

Таким чином, гіпотеза про лінійний безпороговий характер залежності "доза – ефект" в області малих значень дозволяє оцінювати вірогідність додаткового ризику $r(D)$ з використанням коефіцієнтів ризику за формулою [71; 74 – 76; 198]:

$$r(D_{ch}) = F_{Dch} \cdot c \cdot v \cdot t, \quad (3.96)$$

де c – концентрація хімічних неканцерогенних або канцерогенних речовин, мг/м^3 ;

D_{ch} – доза впливу хімічних неканцерогенних або канцерогенних речовин, мг ;

F_{Dch} – коефіцієнт ризику, пропорційний нахилу кривої "доза – ефект", що відображає ступінь наростання ризику зі збільшенням дози хімічних речовин на одну одиницю дози, мг^{-1} ;

$v = 8,10 \cdot 10^3$ – інтенсивність надходження вдихуваного людиною повітря, що містить неканцерогенні та канцерогенні хімічні речовини, $\text{м}^3/\text{рік}$ [71; 74 – 76; 179];

t – час, протягом якого неканцерогенні і канцерогенні хімічні речовини надходили в організм людини, рік .

В основу моделі розрахунку екологічного ризику забруднення атмосферного повітря протягом всього життя людини (сімдесятирічний період), покладено безпорогову модель впливу. Рівень прийняттого ризику для неканцерогенних хімічних речовин встановлено 10^{-6} за рік. Також використовують нормативи $\text{ГДК}_{\text{сд}}$ або референтної концентрації RfC_d , пов'язані з прийнятним ризиком, за умови, коли для більшості населення відсутня видима або прихована небезпека для здоров'я.

Розрахунок соматико-стохастичних ефектів, пов'язаних із забрудненням атмосферного повітря хімічними неканцерогенними речовинами протягом тривалого періоду, проводиться з використанням інформації щодо їх усереднених (як мінімум за рік) концентраціях [71; 74 – 76; 179].

У табл. 3.18 наведено коефіцієнти для речовин, що обумовлюють екологічний ризик під час впливу хімічних газоподібних сполук, летючої золи та її неканцерогенних складових $F^{1,2}_{Dchncanc}$ залежно від застосовуваного підходу щодо ГДК_{сд} або RfC_d відповідно і канцерогенних $F_{Dchncanc}$ речовин на одиницю дози [71; 74 – 76; 179].

Згідно із прийнятою гіпотезою, у співвідношенні до середньодобових гранично-допустимих концентрацій (ГДК_{сд}) або добових референтних концентрацій (RfC_d) річне надходження речовин в організм дає певний приріст додаткових випадків тяжких наслідків для здоров'я населення.

Таблиця 3.18

**Коефіцієнти екологічного ризику виникнення
соматико-стохастичних ефектів у населення
від впливу не канцерогенних хімічних газоподібних сполук,
летючої золи та її складових (за 1 рік)**

Речовина	$F^1_{Dchncanc}, \text{мг}^{-1}$	$F^2_{Dchncanc}, \text{мг}^{-1}$
NO _x	$3,09 \cdot 10^{-9}$	$3,09 \cdot 10^{-9}$
NO	$2,06 \cdot 10^{-9}$	$2,06 \cdot 10^{-9}$
SO ₂	$2,47 \cdot 10^{-9}$	$1,54 \cdot 10^{-9}$
CO	$4,11 \cdot 10^{-11}$	$4,11 \cdot 10^{-11}$
Летюча зола	$6,17 \cdot 10^{-9}$	$8,23 \cdot 10^{-9}$
Складові летючої золи		
Pb	$4,11 \cdot 10^{-7}$	$8,23 \cdot 10^{-7}$
V	$6,17 \cdot 10^{-8}$	$1,76 \cdot 10^{-6}$
Hg	$4,11 \cdot 10^{-7}$	$4,11 \cdot 10^{-8}$
Cu	$6,17 \cdot 10^{-8}$	$6,17 \cdot 10^{-6}$
Zn	$2,47 \cdot 10^{-9}$	$1,37 \cdot 10^{-7}$
Cr		$2,35 \cdot 10^{-5*}$
Ni		$5,09 \cdot 10^{-7*}$
As		$8,39 \cdot 10^{-6*}$
ПРН		$5,7 \cdot 10^{-2**}$
Примітки. * Коефіцієнти взято з підходу Агентства з охорони навколишнього природного середовища США та розраховані для розмірності [мг ⁻¹]. ** Коефіцієнт взято з Публікації ICRP 103, має розмірність [Зв ⁻¹].		

Вагові коефіцієнти ризику для канцерогенних хімічних речовин $F_{Dchncanc}$ взято з підходу Агентства з охорони навколишнього природного середовища США та розраховані для розмірності [мг⁻¹], коефіцієнт ризику

для ПРН взято з Публікації ICRP 103 (Міжнародної Комісії з Радіаційного Захисту – МКРЗ) [217] (табл. 3.18). Коефіцієнти екологічного ризику виникнення соматико-стохастичних ефектів у населення від впливу складових летючої золи (за 1 рік) розраховані із застосуванням підходу щодо $ГДК_{сд}$ і наведено в табл. 3.19.

Таблиця 3.19

Коефіцієнти екологічного ризику виникнення соматико-стохастичних ефектів у населення від впливу складових летючої золи

Речовина	$F^2_{Dchncanc}, \text{Mg}^{-1}$
F	$4,12 \cdot 10^{-9}$
Na	$1,23 \cdot 10^{-9}$
Mg	$2,47 \cdot 10^{-9}$
Al	$1,23 \cdot 10^{-8}$
Si	$2,47 \cdot 10^{-9}$
P	$2,47 \cdot 10^{-9}$
S	$1,76 \cdot 10^{-8}$
K	$2,47 \cdot 10^{-9}$
Ca	$2,47 \cdot 10^{-9}$
Ti	$2,47 \cdot 10^{-10}$
Mn	$5,09 \cdot 10^{-7}$
Fe	$3,09 \cdot 10^{-9}$
Zr	$1,23 \cdot 10^{-8}$

У табл. 3.20 – 3.22 наведено величини екологічного ризику для населення, обумовлені забрудненням атмосферного повітря газоподібними речовинами, летючою золою та їх складовими від Бурштинської та Зміївської ТЕС у разі нормального режиму їх експлуатації, залежно від підходів що до RfC_d і $ГДК_{сд}$ [21; 71; 74 – 76; 179].

Екологічний ризик, обумовлений забрудненням атмосферного повітря газоподібними сполуками і твердими частками, залежно від підходів відрізняється в межах одного порядку і становить залежно від підходу $ГДК_{сд} = 3,13 \cdot 10^{-4}$ і $RfC_d = 2,60 \cdot 10^{-4}$. Кількість випадків соматико-стохастичних ефектів для населення обумовлена забрудненням атмосферного повітря газоподібними сполуками і твердими частками. І залежно від підходу $ГДК_{сд}$ становить на 23 випадків більше, порівняно з підходом RfC_d .

**Показники складових в реалізації екологічного ризику
для населення від Бурштинської ТЕС**

Речовина	Імовірність соматико-стохастичних ефектів		Кількість випадків соматико-стохастичних ефектів	
	Відносно RfC _д	Відносно ГДК _{сд}	Відносно RfC _д	Відносно ГДК _{сд}
Летюча зола	$1,06 \cdot 10^{-4}$	$7,94 \cdot 10^{-5}$	33,7	25,2
Діоксид сірки	$1,32 \cdot 10^{-4}$	$2,11 \cdot 10^{-4}$	51,0	81,7
Діоксид азоту	$2,20 \cdot 10^{-5}$	$2,20 \cdot 10^{-5}$	8,52	8,52
Оксид азоту	$1,63 \cdot 10^{-7}$	$1,63 \cdot 10^{-7}$	$6,31 \cdot 10^{-2}$	$6,31 \cdot 10^{-2}$
Оксид вуглецю	$2,73 \cdot 10^{-8}$	$2,73 \cdot 10^{-8}$	$1,06 \cdot 10^{-2}$	$1,06 \cdot 10^{-2}$
Σ	$2,60 \cdot 10^{-4}$	$3,13 \cdot 10^{-4}$	93,2	116,2
Неканцерогенні складові летючої золи				
П'ятиокис ванадію	$3,23 \cdot 10^{-8}$	$1,13 \cdot 10^{-9}$	$1,03 \cdot 10^{-2}$	$3,60 \cdot 10^{-4}$
Ртуть	$4,58 \cdot 10^{-8}$	$4,58 \cdot 10^{-7}$	$1,46 \cdot 10^{-2}$	$1,46 \cdot 10^{-1}$
Свинець	$1,95 \cdot 10^{-6}$	$9,74 \cdot 10^{-7}$	$6,20 \cdot 10^{-1}$	$3,10 \cdot 10^{-1}$
Мідь	$1,23 \cdot 10^{-5}$	$1,23 \cdot 10^{-7}$	3,92	$3,92 \cdot 10^{-2}$
Цинк	$9,36 \cdot 10^{-7}$	$1,69 \cdot 10^{-8}$	$2,98 \cdot 10^{-1}$	$5,37 \cdot 10^{-3}$
Σ	$1,53 \cdot 10^{-5}$	$1,57 \cdot 10^{-6}$	4,48	$5,00 \cdot 10^{-1}$
Канцерогенні складові летючої золи				
Хром	$5,81 \cdot 10^{-5}$		18,5	
Нікель	$7,29 \cdot 10^{-7}$		$2,32 \cdot 10^{-1}$	
Миш'як	$7,14 \cdot 10^{-6}$		6,34	
Σ	$7,88 \cdot 10^{-5}$		25,1	
Радіоактивні речовини				
ПРН	$3,13 \cdot 10^{-5}$		9,95	

Необхідно відзначити, що додатковий внесок в екологічний ризик обумовлений складовими летючої золи залежно від підходів щодо ГДК_{сд} становлять $1,12 \cdot 10^{-4}$ і RfC_д – $1,25 \cdot 10^{-4}$.

Екологічний ризик більшою мірою визначається внеском канцерогенних складових хрому ($5,81 \cdot 10^{-5}$) і становить відповідно 47 – 52 % залежно від підходів від величин ризику, обумовленого усіма складовими летючої золи, а також близько 14 % від загального ризику, обумовленого всіма викидами Бурштинської ТЕС. У табл. 3.21 наведено порівняльне

оцінювання екологічного ризику для населення, обумовленого забрудненням атмосферного повітря викидами Бурштинської ТЕС в разі нормального режиму експлуатації.

Таблиця 3.21

**Порівняльне оцінювання екологічного ризику для населення
під час впливу хімічних газоподібних речовин,
летючої золи та її складових**

Параметр	Імовірність соматико-стохастичних ефектів		Кількість випадків соматико-стохастичних ефектів	
	RfC _д	ГДК _{сд}	RfC _д	ГДК _{сд}
Газоподібні речовини + летюча зола (класичний варіант)	$2,60 \cdot 10^{-4}$	$3,13 \cdot 10^{-4}$	93,2	116
Неканцерогенні важкі метали	$1,53 \cdot 10^{-5}$	$1,57 \cdot 10^{-6}$	4,86	0,5
Канцерогенні важкі метали	$7,88 \cdot 10^{-5}$		25,1	
ПРН	$3,13 \cdot 10^{-5}$		9,95	
Загальний ризик	$3,85 \cdot 10^{-4}$	$4,25 \cdot 10^{-4}$	120	151

У межах дослідження оцінювання екологічного ризику, обумовленого забрудненням атмосферного повітря складовими летючої золи неканцерогенними і канцерогенними важкими металами, виявлено, що оцінений ризик залежно від підходів не суттєво відрізняється. Виняток становлять результати екологічного ризику, обумовленого неканцерогенними складовими летючої золи, що відрізняються на один порядок.

Величина додаткового внеску в екологічний ризик, яка обумовлена складовими летючої золи – неканцерогенними і канцерогенними, за оцінками проведених досліджень, для Бурштинської ТЕС складає близько 30 %, порівняно з ризиком, обумовленим газоподібними сполуками і твердими частками, в класичному оцінюванні.

Екологічний ризик, обумовлений радіаційною складовою становить $3,13 \cdot 10^{-5}$, що складає близько 7 % від загального ризику, обумовленого всіма викидами Бурштинської ТЕС.

Екологічний ризик для Зміївської ТЕС, обумовлений забрудненням атмосферного повітря газоподібними сполуками і летючої золи, залежно від підходів відрізняється в межах одного порядку і становить залежно від підходу $ГДК_{сд} - 2,83 \cdot 10^{-4}$ і $RfC_{д} - 2,79 \cdot 10^{-4}$. Кількість випадків соматико-стохастичних ефектів для населення, обумовлена забрудненням атмосферного повітря газоподібними сполуками і твердими частками, і залежно від підходу $ГДК_{сд}$ на два випадки більше порівняно з підходом $RfC_{с}$.

Таблиця 3.22

**Показники складових у реалізації екологічного ризику
для населення від Зміївської ТЕС**

Речовина	Імовірність соматико-стохастичних ефектів		Кількість випадків соматико-стохастичних ефектів	
	Відносно $RfC_{д}$	Відносно $ГДК_{сд}$	Відносно $RfC_{д}$	Відносно $ГДК_{сд}$
Летюча зола	$1,94 \cdot 10^{-4}$	$1,46 \cdot 10^{-4}$	61,7	46,3
Діоксид сірки	$7,45 \cdot 10^{-5}$	$1,20 \cdot 10^{-4}$	28,8	46,3
Окисли азоту	$1,41 \cdot 10^{-5}$	$1,41 \cdot 10^{-5}$	5,47	5,47
Оксид вуглецю	$1,92 \cdot 10^{-8}$	$1,92 \cdot 10^{-8}$	$7,43 \cdot 10^{-3}$	$7,43 \cdot 10^{-3}$
Σ	$2,83 \cdot 10^{-4}$	$2,79 \cdot 10^{-4}$	96,1	98,0
Неканцерогенні складові летючої золи				
П'ятиокис ванадію	$5,36 \cdot 10^{-8}$	$1,88 \cdot 10^{-9}$	$1,70 \cdot 10^{-2}$	$5,98 \cdot 10^{-4}$
Ртуть	$1,37 \cdot 10^{-8}$	$1,37 \cdot 10^{-7}$	$4,35 \cdot 10^{-3}$	$4,35 \cdot 10^{-2}$
Свинець	$3,16 \cdot 10^{-6}$	$1,58 \cdot 10^{-6}$	1,01	$5,02 \cdot 10^{-1}$
Мідь	$1,69 \cdot 10^{-5}$	$1,69 \cdot 10^{-7}$	5,37	$5,37 \cdot 10^{-2}$
Цинк	$1,25 \cdot 10^{-6}$	$2,26 \cdot 10^{-8}$	$3,98 \cdot 10^{-1}$	$7,18 \cdot 10^{-3}$
Σ	$2,14 \cdot 10^{-5}$	$1,91 \cdot 10^{-6}$	6,80	$6,07 \cdot 10^{-1}$
Канцерогенні складові летючої золи				
Хром	$9,41 \cdot 10^{-5}$		29,9	
Нікель	$1,55 \cdot 10^{-6}$		$4,92 \cdot 10^{-1}$	
Миш'як	$2,85 \cdot 10^{-5}$		9,06	
Σ	$1,24 \cdot 10^{-4}$		39,5	
Радіоактивні речовини				
ПРН	$5,73 \cdot 10^{-5}$		18,2	

Необхідно відзначити, що додатковий внесок в екологічний ризик обумовлений складовими летючої золи, і залежно від підходів щодо ГДК_{сд} становить $1,83 \cdot 10^{-4}$ і RfC_д – $2,03 \cdot 10^{-4}$.

Екологічний ризик більшою мірою визначається внеском канцерогенної складової хрому ($9,41 \cdot 10^{-5}$) і становить 46 – 51% залежно від підходів величини ризику, обумовленого всіма складовими твердих часток, а також складає 23 % від загального ризику, обумовленого всіма викидами Зміївської ТЕС.

Екологічний ризик, обумовлений радіаційною складовою, становить $5,73 \cdot 10^{-5}$, що складає близько 14 % від загального ризику, обумовленого всіма викидами Зміївської ТЕС.

Необхідно відзначити, що величина екологічного ризику, обумовлена складовими летючої золи (неканцерогенними, канцерогенними та радіаційною), становить майже 40 % від величини ризику, обумовленим викидами Зміївської ТЕС.

У табл. 3.23 наведено порівняльне оцінювання екологічного ризику для населення, обумовленого забрудненням атмосферного повітря викидами Зміївської ТЕС у разі нормального режиму експлуатації.

Таблиця 3.23

Порівняльне оцінювання екологічного ризику для населення під час впливу хімічних газоподібних речовин, летючої золи та її складових [10]

Параметр	Імовірність соматико-стохастичних ефектів		Кількість випадків соматико-стохастичних ефектів	
	RfC _д	ГДК _{сд}	RfC _д	ГДК _{сд}
Газоподібні речовини + летюча зола (класичний варіант)	$2,83 \cdot 10^{-4}$	$2,79 \cdot 10^{-4}$	96,1	98,0
Неканцерогенні важкі метали	$2,14 \cdot 10^{-5}$	$1,91 \cdot 10^{-6}$	6,8	0,61
Канцерогенні важкі метали	$1,24 \cdot 10^{-4}$		39,5	
ПРН	$5,73 \cdot 10^{-5}$		18,2	
Загальний ризик	$4,86 \cdot 10^{-4}$	$4,62 \cdot 10^{-4}$	161	156

У результаті оцінювання екологічного ризику для населення, обумовленого викидами Бурштинської та Зміївської ТЕС, встановлено значний внесок важких металів та радіонуклідів, які є складовими летючої золи.

У табл. 3.24 наведено величини екологічного ризику, обумовленого забрудненням атмосферного повітря всіма складовими летючої золи Зміївської ТЕС за ГДК_{сд}. Величина внеску обумовлена всіма складовими летючої золи Зміївської ТЕС (табл. 3.24) в екологічний ризик і за експертними оцінками в чотири рази перевищує ($5,42 \cdot 10^{-4}$) величини ризику, обумовленого летючою золою ($1,34 \cdot 10^{-4}$) як твердими частками.

Таблиця 3.24

Екологічний ризик, обумовлений забрудненням атмосферного повітря всіма складовими летючої золи-виносу Зміївської ТЕС

Елементи	Екологічний ризик
F	$1,20 \cdot 10^{-7}$
Na	$2,05 \cdot 10^{-7}$
Mg	$3,79 \cdot 10^{-7}$
Al	$6,28 \cdot 10^{-5}$
Si	$9,98 \cdot 10^{-6}$
P	$4,11 \cdot 10^{-7}$
S	$5,71 \cdot 10^{-6}$
K	$2,83 \cdot 10^{-6}$
Ca	$2,69 \cdot 10^{-6}$
Ti	$4,04 \cdot 10^{-8}$
Cr	$3,90 \cdot 10^{-4}$
Mn	$5,26 \cdot 10^{-6}$
Fe	$4,17 \cdot 10^{-6}$
Ni	$1,60 \cdot 10^{-5}$
Cu	$7,00 \cdot 10^{-7}$
Zn	$2,45 \cdot 10^{-7}$
As	$8,81 \cdot 10^{-6}$
Zr	$7,26 \cdot 10^{-8}$
Pb	$2,85 \cdot 10^{-7}$
Сума	$5,1 \cdot 10^{-4}$
Радіонукліди	$3,13 \cdot 10^{-5}$
Загальна сума	$5,42 \cdot 10^{-4}$
Летюча зола	$1,34 \cdot 10^{-4}$

Важливо зазначити, що додатковий екологічний ризик, обумовлений елементним складом летючої золи Зміївської ТЕС, що містить

макрокомпоненти, мікроелементи та радіоактивні речовини майже у два рази перевищує ризик, обумовлений оцінюванням у класичному уявленні.

Отримані результати свідчать про необхідність проводити моніторинг складу летючої золи та враховувати її елементний склад під час оцінювання екологічного ризику для населення.

Величина додаткового внеску в екологічний ризик обумовлена складовими летючої золи Бурштинської та Зміївської ТЕС – неканцерогенними і канцерогенними. За результатами проведених досліджень величина цього додаткового внеску складає близько 40 %, порівняно з ризиком, обумовленим газоподібними сполуками і твердими частками, згідно з класичним оцінюванням. Екологічний ризик більшою мірою визначають внеском хрому як канцерогенною складовою.

Результати оцінювання екологічного ризику для населення, обумовленого викидами Бурштинської та Зміївської ТЕС, вказують на істотну значимість контролю вихідної сировини до процесу спалювання кам'яного вугілля, та на проведення моніторингу складу летючої золи, що надходить в атмосферу, на мікроелементний склад важких металів та їх сполук під час виробництва електроенергії на найпотужніших ТЕС України.

За прогнозними оцінками експертів величина екологічного ризику, обумовленого складом летючої золи Зміївської ТЕС з урахуванням радіаційної складової, в чотири рази більша за екологічний ризик, обумовлений впливом летючої золи з твердих часток.

Елементний склад летючої золи Зміївської ТЕС, який представлено як макрокомпонентами, так і мікроелементами канцерогенних речовин, у тому числі і ПРН, а також речовинами токсичної дії, важливо враховувати під час оцінювання впливу ТЕС на якість атмосферного повітря і здоров'я населення. А екологічний ризик, обумовлений летучою золою, становить найбільшу загрозу під час виробництва електроенергії на найбільших ТЕС України.

3.7. Моделювання в ергономіці

Відомо, що основне поняття в ергономіці – система "людина – техніка – середовище" (СЛТС). Вона містить у собі людину-оператора, технічній пристрій, який застосовують для здійснення трудової діяльності, і середовище на робочому місці.

Компоненти СЛТС [111]:

1) головний – людина-оператор, тобто людина, що здійснює трудову діяльність, основою якої є взаємодія з об'єктом впливу, машиною і середовищем на робочому місці під час використання інформаційної моделі й органів управління;

2) техніка – сукупність технічних засобів, що забезпечують процеси отримання, перетворення, передачі і використання енергії, матеріалів або інформації;

3) середовище на робочому місці – формується сукупністю фізичних, хімічних, біологічних, психологічних і соціальних чинників, що впливають на оператора СЛТС на його робочому місці в ході його діяльності.

Найбільш складним для дослідження, оцінювання і прогнозування надійності й якості діяльності об'єктом є людина. Це обумовлено, перш за все, різноманіттям і швидкою (часом різкою) зміною її функціональних станів під час роботи. На відміну від людини всі технічні пристрої мають певні режими роботи, кожний з яких характеризується визначеними показниками, що забезпечує їх прогнозованість. Саме через свою складність функціональний стан людини потребує пошуку нових шляхів у дослідженні, оцінюванні й прогнозуванні. Що таке функціональний стан людини-оператора?

Функціональний стан (ФС) людини-оператора – інтегральний комплекс наявних характеристик тих функцій і якостей людини, які прямо або побічно обумовлюють виконання діяльності.

До того ж ФС людини-оператора, що виникає в кожній конкретній ситуації, є унікальним. Це обумовлює необхідність у кожному випадку визначати інтегральний комплекс характеристик, за допомогою яких можна зробити адекватне оцінювання стану людини-оператора. Правильність і точність оцінювання ФС людини безпосередньо впливає на кількість нещасних випадків, аварій, катастроф і тому подібних подій, обумовлених "людським чинником".

Для дослідження ФС людини дуже часто використовують **методи моделювання**, оскільки постановка експериментів безпосередньо на робочому місці під час трудового процесу не завжди можлива через те, що:

1) процес вимірювання показників ФС часто відволікає працівника від основного робочого процесу, створюючи певний дискомфорт, що є додатковим навантаженням для нього, яке в подальшому впливає на достовірність одержаних результатів;

2) необхідно одночасно вимірювати значну кількість різноманітних даних про ФС працівника: фізіологічні характеристики (артеріальний тиск, пульс й ін.), психологічні особливості (увага, сприйняття інформації, швидкість реагування на сигнал й ін.), показники якості діяльності та ін., що в реальних обставинах складно забезпечити.

Особливо актуальне застосування методів моделювання в тих випадках, коли мова йде про такі складні й неоднозначні для дослідження, оцінювання й прогнозування ФС людини, як стрес.

3.7.1. Стрес: визначення і класифікації

На сьогодні поняття "стрес" має велику кількість визначень, що обумовлює широкий спектр підходів до дослідження цього ФС. Теоретичний і практичний базис для вивчення стресових станів оператора закладений у роботах Г. Сельє, Ф. З. Меєрсона, Ф. П. Ведяєва, В. В. Паріна, В. М. Муніпова, Р. М. Баєвського, А. І. Зотіна та інших учених. Значну увагу цій проблемі приділяли такі вчені, як: А. І. Губинський, В. В. Кобзєв, А. Б. Леонова, П. К. Анохін, Б. Ф. Ломов, Г. М. Зараковський та ін.

Отже, поняття "стрес" є досить складним. Це обумовлено тим, що стресовий стан достатньо різнобічний у своєму прояві і його можна розглядати з різних позицій. Із загальнобіологічних – як систему пристосувальних актів, що виробилися й удосконалилися в процесі еволюції; у фізіологічному аспекті – як механізми регуляції діяльності різних функціональних систем організму; у психологічному – вплив на різні сторони психічної діяльності (сприйняття, пам'ять, увага, мислення, зв'язок з особливостями особистості, характером, темпераментом, досвідом і т. д.); у соціальному (поводження в колективі) і т. п. Проте найбільш точним є наступне визначення.

Стрес – це стан організму людини, що формується у відповідь на будь-які порушення гомеостазу [109].

До того ж під терміном **гомеостаз** мають на увазі успадковану властивість організму людини підтримувати життєво важливі функції в умовах навколишнього середовища, що змінюється. Проте значні й стійкі порушення гомеостазу приводять до включення процесів **адаптації**, що являє собою процес вироблення оптимальної стратегії живої системи, який полягає в пристосуванні організму людини до умов навколишнього середовища, що змінилися. Адаптація, як і будь-який процес, має початок,

розвиток і закінчення, тому завершенням адаптації є формування нового рівня гомеостазу, що забезпечує нормальне функціонування організму людини в нових умовах середовища.

Отже, послідовність розвитку стресового стану в людини можна узагальнено представити у вигляді наступної схеми (рис. 3.35).

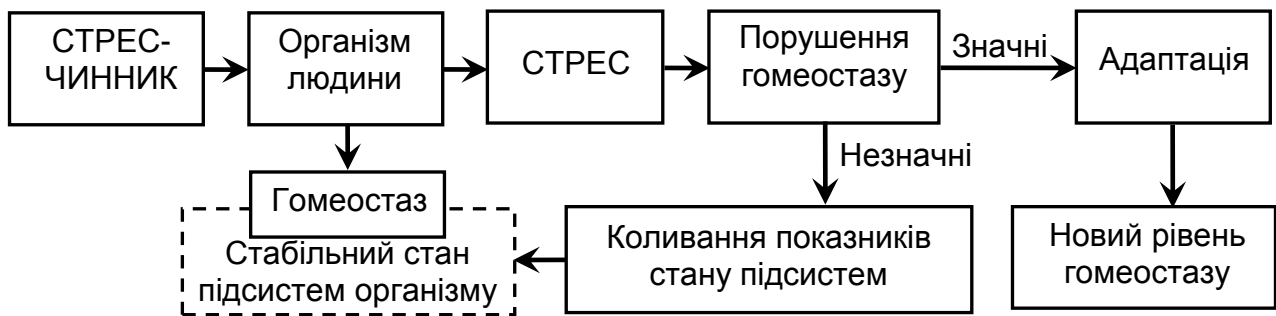


Рис. 3.35. Послідовність розвитку стресового стану

Наступний етап – визначення ролі стресових станів у діяльності людини. Систематизація літературних даних із цього питання дозволила створити класифікацію стресів за характером психофізіологічних змін стану людини [108] (рис. 3.36).

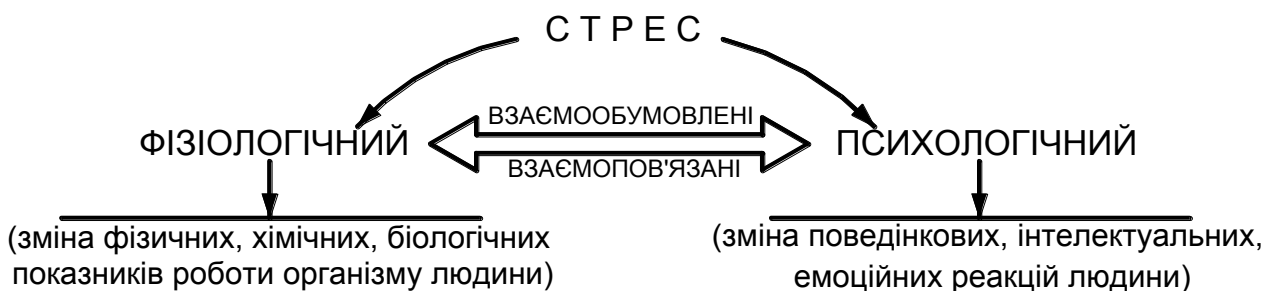


Рис. 3.36. Класифікація стресів за характером психофізіологічних змін стану людини

Очевидно, що стрес може привести до появи різного роду змін у психофізіологічному стані людини, однак всі вони взаємопов'язані таким чином, що наявність одного рано або пізно приведе до появи інших. Також слід зазначити, що один і той самий стрес-чинник залежно від ситуації й індивідуальних особливостей людини може привести до різних психофізіологічних змін у його стані, тобто проявити себе й на фізіологічному, і на психологічному рівні.

Інформаційний пошук з питання наслідків реалізації стресового стану для людини дозволив запропонувати таку класифікацію стресових станів [108] (рис. 3.37):

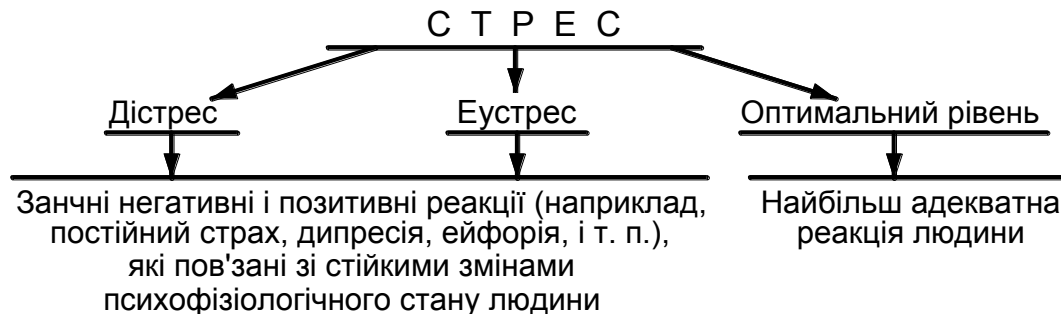


Рис. 3.37. Класифікація стресових станів людини-оператора

Таким чином, стресові стани можуть мати як негативні, так і сприятливі наслідки для людини. Отже, можна припустити, що в кількох випадках стресовий стан є для людини найбільш адекватним. Виникає закономірне питання: "Які ж умови, за яких стрес є оптимальним станом для людини?".

Результати досліджень показали, що найбільш важливою умовою адекватності стресового стану є така: під час формування стресової реакції зміни в організмі не повинні перевищувати фізіологічних і психологічних можливостей людини. небезпечними є крайні прояви стресу, тобто дістрес і еустрес, оскільки вони завжди пов'язані зі значними змінами в стані людини, які перевищують можливості організму. Основний наслідок нездатності організму людини впоратися із впливом стрес-чинника – розвиток патологічних станів, які часто стають однією з основних причин аварій і катастроф, що відбулися з вини людини.

3.7.2. Стресостійкість як системне поняття

Наслідком існування проблеми стресу стала необхідність вивчення стресостійкості як здатності людини протистояти розвитку негативних наслідків реалізації стресових станів. За цих обставин стресостійкість як здатність людини протистояти стресу повинна містити в собі не окремі властивості, характеристики або якості людини, а їх комплекс. Саме сукупність психологічних та фізіологічних властивостей і процесів організму

людини дозволить їй максимально швидко й ефективно виробити нову стратегію поведінки, завдяки якій відбудеться адаптація до впливу стрес-чинника. Однак варто звернути увагу на те, що психологічні і фізіологічні властивості й процеси людини можуть мати різну природу походження. Вони можуть бути як генетично успадкованими, так і сформованими в процесі життя людини, що зумовлено існуванням двох напрямів у дослідженні стресостійкості.

У зв'язку із цим необхідно зробити розподіл напрямів дослідження стресостійкості за природою походження, а саме: розглядати її і як генетично успадковану здатність організму людини протистояти впливу негативних чинників, і як здатність, сформовану в процесі життєдіяльності [109] (рис. 3.40).

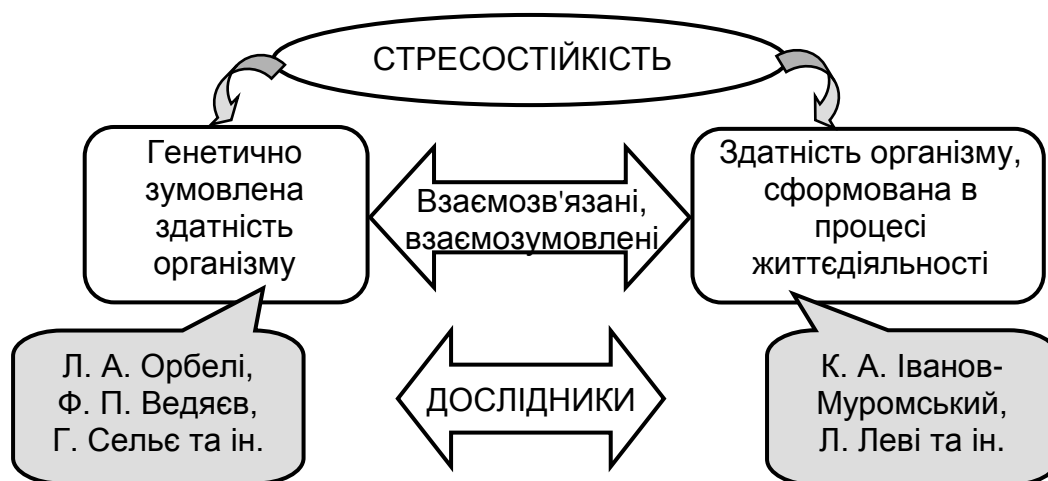


Рис. 3.38. Напрями дослідження стресостійкості

Необхідно зазначити, що вивченню стресостійкості як генетично зумовленої здатності організму людини протистояти дії негативних чинників приділено з боку науковців значно більше уваги, ніж дослідженню її як сформованої в процесі життєдіяльності здатності. Саме тому на сьогодні така тенденція в дослідженнях стресостійкості знайшла своє відображення в більшості методик, які використовуються під час проведення профвідборів. Особливо значного поширення набули дослідження таких психологічних особливостей людини, як темперамент, характер, здібності, знання, навички та ін.

Вивчення стресостійкості як сформованої в процесі життєдіяльності здатності організму набуло суттєвого розвитку лише останнім часом

завдяки появі нових видів діяльності людини-оператора, специфіка яких потребує прояву не тільки певних знань, умінь, навичок, але й можливостей до їх подальшого розвитку. Однак обидва напрями дослідження стресостійкості при цьому не є протилежними, вони доповнюють один одного, тому що більшість можливостей людини, які закладені генетично, так або інакше в процесі життєдіяльності певною мірою змінюються (прогресують або залишаються на тому самому рівні залежно від чинників, що впливають в тих або інших обставинах).

Таким чином, можна сформулювати таке визначення: **стресостійкість** – здатність людини протистояти негативному впливу стрес-чинників, зумовлена індивідуальним комплексом його вроджених і надбаних психологічних і фізіологічних властивостей і процесів [109].

Саме стресостійкість забезпечує людині-оператору надійне й безпечне функціонування під час трудової діяльності. Відповідно, чим вище буде її рівень, тим менш чутливою до негативних впливів стресових чинників буде людина.

Із зазначеного вище випливає, що стресостійкість є тією здатністю, яка зумовлюється індивідуальністю людини. У зв'язку із цим під час впливу одного й того ж стрес-чинника в одних людей може бути низький рівень стресостійкості, а в інших – високий. У разі зміни характеру впливу стрес-чинника рівень їхньої стресостійкості також може змінитися на прямо протилежне значення.

Цей факт обумовлює необхідність вибору тих особливостей оператора, які є пріоритетними для конкретного виду діяльності, що дозволить від початку забезпечити високий рівень його стресостійкості. Саме тому в деяких випадках більшою мірою важливі генетичні особливості людини, а іноді – можливість їхнього формування шляхом цілеспрямованих дій. Наприклад, у таких професіях, як льотчик, водій, авіадиспетчер, у першу чергу необхідна відповідність генетичних даних працівника дуже високим вимогам щодо стресостійкості. Для більшості інших професій найчастіше досить лише деякої відповідності генетичних особливостей людини пропонуваним вимогам, але при цьому виняткову увагу приділяють здатності працівника до подальшого формування необхідних якостей, що дозволяє забезпечувати необхідний рівень стресостійкості і, відповідно, високі результати діяльності, а також зниження її "психофізіологічної ціни".

3.7.3. Моделювання під час оцінювання стресостійкості оператора

Дослідження й оцінювання стресостійкості людини-оператора нерозривно пов'язані з розробленням і впровадженням систем контролю за змінною показників її ФС. Загальне завдання створення систем контролю формування стресостійкості полягає в досягненні необхідного ефекту – підвищення стресостійкості оператора. Однак це завдання є складним через велику кількість стрес-чинників, які впливають на ФС людини-оператора, оскільки будь-які збурення призводять до появи перехідних процесів у функціональних системах організму оператора, отже, і у формуванні його ФС. Все це робить практично неможливим пряме управління ФС людини-оператора як системи з якісною і тимчасовою неоднорідністю, зі здатністю до пристосування до мінливих умов навколишнього середовища та до своїх внутрішніх змін з метою підвищення ефективності функціонування. У зв'язку із цим для контролю стану людини-оператора необхідно запропонувати особливий об'єкт, який замінить реальний і матиме окреслені границі, обмеження структури та чинників, що впливають на нього. Таким чином, для побудови системи контролю формування стресостійкості оператора необхідно побудувати модель, у межах якої, спростивши об'єкт моделювання і обмеживши вплив на нього зовнішнього середовища, можна було б оцінити формування рівня його стресостійкості.

У межах цієї роботи завданням моделювання є дослідження стресостійкості як професійно важливої якості оператора персонального комп'ютера (ПК). Отже, **об'єкт моделювання** – оцінювання стресостійкості оператора ПК під час впливу на нього стрес-чинників середовища: природних, соціальних і техногенних. Наведені групи стрес-чинників – найбільш значущі чинники, які справляють вплив на діяльність людини-оператора, тому надалі система "людина-оператор – ПК" буде розглядатися як замкнута та умовно незалежна від зовнішніх впливів іншого характеру. Таким чином, **мета моделювання** – розроблення системи контролю формування стресостійкості оператора ПК у процесі діяльності. **Критеріями вивчення** обраної системи є зміни параметрів біологічно активних точок шкіри (БАТШ) у певному діапазоні значень під час дії стрес-чинників і кількість допущених помилок. Узагальнена схема об'єкта моделювання має такий вигляд (рис. 3.39).

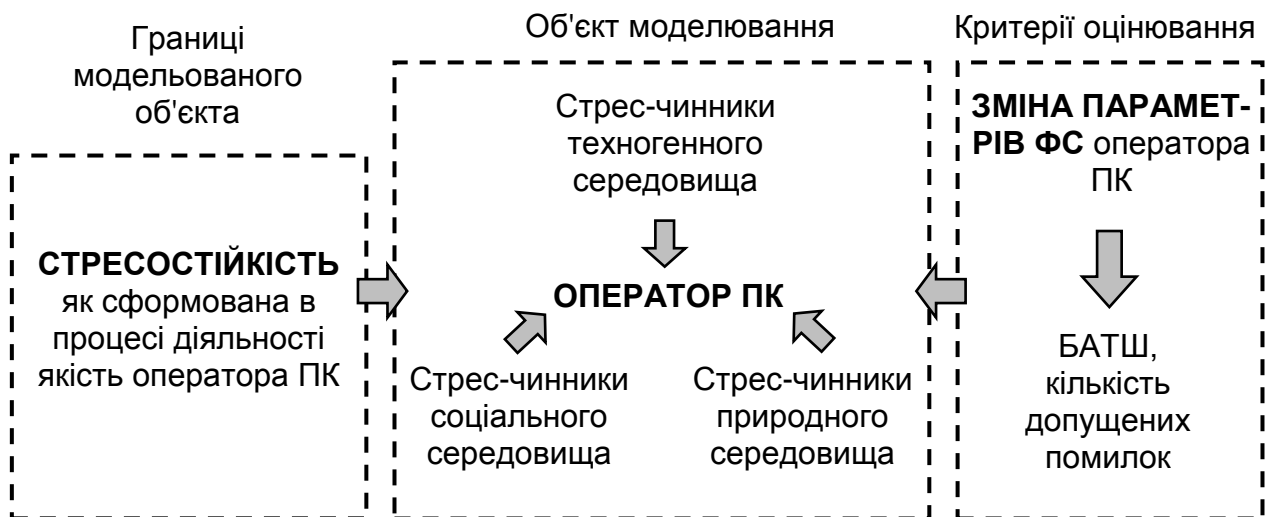


Рис. 3.39. Узагальнена схема об'єкта моделювання

Цей аналіз об'єкта дослідження дозволяє встановити причинно-наслідкові відносини всередині об'єкта, а також визначити системи залежних і незалежних змінних.

Формування множини джерел інформації про стресовий стан і стресостійкість людини-оператора

На сьогодні найбільш інформативним методом дослідження стресових станів людини є рефлексодіагностика. В якості об'єкта досліджень у рефлексодіагностиці слугує шкіра людини, яка є прикордонним органом між внутрішнім та зовнішнім середовищем і виконує регуляторну й обмінну функції, але разом із тим вона несе значну інформацію про внутрішній стан усіх підсистем організму. Таким чином, шкіру можна розглядати як інтегральну інформаційну систему. Її параметри динамічно змінюються під впливом стрес-чинників різного характеру. Крім того, шкіра має тісний функціональний зв'язок з усіма підсистемами організму людини і максимально доступна для проведення вимірів. Зазвичай, вимірювання здійснюють у 24 функціонально взаємозалежних біосенсорах – БАТШ людини, які репрезентують стан кожної з підсистем організму людини. Зазначені біосенсори розташовані на найбільш активних ділянках шкіри людини – стопах і долонях, що відкриває можливість легкого доступу до точок вимірювання параметрів.

В якості вимірюваних параметрів обрані ємність і опір шкіри у змінному полі. Це обумовлено тим, що ємність шкіри людини характеризує не тільки психофізіологічний стан організму людини, але й відображає його енергетичний рівень. БАТШ є гетерогенною системою, отже, її ємність є більш інформативним параметром, ніж інші параметри (ЕКС, потенціал, температура). Електрична ємність БАТШ змінюється внаслідок особливих біохімічних і біоелектричних процесів, які виникають за наявності патології в організмі людини, викликані дією певної групи стресчинників. Крім того, про інформативність ємності свідчить і той факт, що за наявності патології БАТШ збільшує свою площу. Це проявляється, у першу чергу, у змінах значень ємності. Діапазон змін ємності C для здорових молодих людей становить $10^2 \dots 2 \cdot 10^3$ пФ. За наявності того або іншого патологічного процесу діапазон змін ємності істотно розширюється (від 1 до 10^4 і більше пФ). Отже, БАТШ людини є тими сигнальними елементами, які одними з перших свідчать про порушення функціонування організму людини. Найбільш оптимальними точками для проведення вимірювань є точки, розташовані в області проміневозап'ястного суглоба і в області стопи. Ці точки використовують у методі Накатані, що полегшує порівняння результатів вимірювань різних параметрів. Таким чином, у якості БАТШ, що характеризують стан кожної з 12 підсистем організму людини у цілому, обрані такі репрезентативні точки: 1 – P9, 2 – GI5, 3 – E42, 4 – RP3, 5 – C7, 6 – IG4, 7 – V65, 8 – R3, 9 – MC7, 10 – TR4, 11 – VB40, 12 – F3.

На підставі літературних джерел і експериментальних досліджень сформована така сукупність параметрів БАТШ для дослідження стресових станів людини-оператора: ємність (C , пФ) і тангенс кута діелектричних втрат (R , МОм) у репрезентативних БАТШ. Перераховані параметри шкіри дозволяють одержати найбільш повне уявлення про психофізіологічний стан організму людини і його динаміку, що особливо важливо під час оцінювання стресових станів оператора.

З огляду на безперервність перехідних процесів в організмі людини, максимально достовірна і повна інформація про формування і динаміку стресового стану людини-оператора може бути отримана шляхом періодичних вимірювань. Отже, для того, щоб досліджувати такий складний саморегульований механізм, як людський організм, необхідно оцінювати як статичні параметри організму людини, так і динаміку зміни

параметрів БАТШ під впливом стрес-чинників. Для вимірювання параметрів БАТШ використовувались:

1) напівавтоматичний вимірювальний міст *Tesla BM-509* для вимірювання ємності й опору БАТШ;

2) автоматизований комплекс *LCR Meter 878*.

Також для одержання інформації про стресовий стан людини-оператора застосована система психофізіологічного дослідження СПФІ й професійного відбору ППВ фірми "Інфоцентр "Аліас"".

Під час оброблення результатів вимірювань параметрів ФС використовували такі методи статистичного оброблення інформації:

1) розрахунок описових статистичних показників (середнього квадратичного відхилення, показників варіації, коваріації, кореляції і т. п.);

2) теорія ймовірностей (математичне очікування, дисперсія випадкової величини і т. п.).

Однак, окрім перерахованих традиційних методів статистичного оброблення отриманої інформації, запропоновано також використовувати інший спосіб аналізу даних. У його основу покладено принцип системного підходу, що становить послідовне застосування аналітичних і модельних методів, придатних для вивчення складних систем із великою кількістю змінних. Теоретичним базисом даного способу інтерпретації є нелінійна нерівноважна термодинаміка і теорія інформації. Основи застосування цього підходу до дослідження біологічних об'єктів були закладені М. Месаровичем, І. Пригожиним, Т. Уотерменом, К. Шенноном, С. Подолинським. Ці вчені запропонували розглядати живі системи з позицій ентропійного аналізу.

Необхідно зазначити, що ентропійний аналіз застосовувався також і раніше для оцінювання психофізіологічних параметрів ФС людини, зокрема параметрів серцево-судинної системи Р. М. Баєвським, В. П. Казначеевим, В. П. Паріним та іншими вченими. В останні роки ентропійний аналіз також почали застосовувати і для оцінювання параметрів шкіри людини, виміряних в біологічно активних точках.

Обґрунтованість використання ентропійного аналізу для оцінювання стресового стану оператора обумовлена низкою чинників. По-перше, ентропія, як статистична величина, дозволяє порівнювати різні параметри ФС оператора, таким чином, кількість аналізованих параметрів

скорочується, а інформативність даних збільшується. По-друге, ентропія має таку властивість, як адитивність (3.97):

$$S = \sum_{i=1}^n S_i, \quad (3.97)$$

де S – ентропія системи;

S_i – ентропія підсистем;

n – кількість підсистем.

Ця властивість дозволяє, застосовуючи єдиний показник – ентропію, аналізувати систему як за підсистемами, так і в цілому. Таким чином, ентропійний аналіз дозволяє систематизувати, узагальнити і спростити процес одержання інформації про стресовий стан оператора.

Повна ентропія системи має дві складові:

1) міра невизначеності або термодинамічна ентропія (S_T);

2) міра організованості або негентропія ($S_{\text{нег}}$).

Міра організованості оцінює адаптацію людини до впливу стрес-чинників, яка реалізується за рахунок переорганізації в роботі організму як системи, а міра невизначеності дозволяє проаналізувати ефективність цієї адаптації. До того ж, виходячи з основ нелінійної нерівноважної термодинаміки і теорії інформації, для досягнення системою оптимального стану міра невизначеності повинна зменшуватися, а міра організованості – збільшуватися. Отже, характеристикою оптимального стану системи є виконання наступної умови: $S_T \downarrow S_{\text{нег}} \uparrow$. Зміна цього балансу, наприклад, $S_T \uparrow S_{\text{нег}} \downarrow$, буде свідчити про наявність порушень у стані системи. Для того щоб дізнатися, який саме елемент системи викликав ці порушення, можна скористатися властивістю адитивності ентропії, про яку сказано вище. Використовуючи дану властивість, можна обчислити ентропію підсистем і проаналізувати, таким чином, у який з підсистем є істотні порушення в діяльності.

Наведені міркування дають можливість оцінити стрес оператора через аналіз його станів до і після виконання діяльності, тобто одержати уявлення про сам процес формування стресового стану. Крім того, у такий же спосіб можна встановити і ту групу чинників, які найбільш впливають на розвиток негативних наслідків стресового стану для оператора.

Також необхідно зазначити і той факт, що запропоновані способи статистичного оброблення дають можливість одержувати як кількісну,

так і якісну характеристики процесу формування стресового стану оператора, що, у свою чергу, підвищить адекватність кінцевих результатів досліджень.

Поняття стресостійкості людини-оператора з позицій ентропійного аналізу

Усі живі системи без винятку належать до категорії організованих систем, тобто організм людини можна розглядати як кібернетичну систему, функціонування якої визначають процеси перероблення, збереження й одержання інформації (М. Месарович, Т. Уотермен та ін.). Таким чином, процес формування стресостійкості людини необхідно розглядати як перероблення та збереження інформації, яка надходить в організм людини під час впливу стрес-чинників у процесі діяльності.

Повна ентропія системи, якою в цьому випадку є організм людини, має дві складові – міру невизначеності (S_T) та міру організованості ($S_{\text{нег}}$):

$$S = S_T + S_{\text{нег}}. \quad (3.98)$$

Міра невизначеності та міра організованості взаємопов'язані та взаємодоповнюють одна одну. Це підтверджено висновком, що отримав Л. Сцилард. Він припустив, що якщо система здійснює роботу і цим зменшує свою ентропію, то таке перетворення теплоти неможливо без компенсації, а такою компенсацією є інформація про зміни в структурі системи. Саме отримання і перероблення інформації приводить до зниження невизначеності системи. Також у роботах А. Зотіна можна побачити, що кожного разу, коли система отримує певну інформацію, міра невизначеності цієї системи зменшується. Отже, якщо людина перебуває в оптимальному стані, то його повна ентропія підтримується постійною в часі, а міра невизначеності та міра організованості скомпенсовані. Однак, якщо міра невизначеності та міра організованості організму змінилися неадекватно одна одній, тобто спостерігаються незворотні явища, це свідчить про те, що настав перехідний процес (наприклад, стан стресу).

Таким чином, у загальному випадку, з точки зору скомпенсованості складових ентропії, організм людини може знаходитися у двох протилежних станах – рівноважному, коли $S = 0$, і нерівноважному, коли $S > 0$. До того ж необхідно зазначити, що встановлення динамічної рівноваги може свідчити як про норму, так і про патологію. Це пов'язано з тим, що будь-якій відкритій системі притаманна спонтанна активність, викликана

нестійкістю нерівноважних станів, в які рано або пізно приходять кожна система в результаті постійного впливу зовнішніх і внутрішніх стрес-чинників. У такі переломні моменти, які називаються "точки біфуркації", принципово неможливо передбачити, чи стане система менш або більш впорядкованою (згідно з положеннями, викладеними в роботах Л. Брілюєна). Однак можливим є прогнозування настання "точки біфуркації" для кожної конкретної системи. Таким чином, міра невизначеності та міра організованості можуть служити кількісними критеріями під час оцінювання стресостійкості оператора ПК.

Застосування міри невизначеності в межах моделі

Міра невизначеності (S_T) – міра нестачі інформації про дійсну структуру системи, або міра безладу у фізичній системі [135].

Більш глибоко зміст міри невизначеності розкрито у статистичній фізиці, згідно з положеннями якої вона пов'язана з ймовірністю. Якщо штучно створити замкнуту систему з дуже малою ймовірною структурою і надати їй свободу, то вона буде еволюціонувати в бік більш вірогідної структури. Ймовірність має природну тенденцію до зростання так само, як і міра невизначеності. Точне співвідношення можна дати формулою:

$$S_T = k \ln p_i, \quad (3.99)$$

де k – коефіцієнт, який у загальному випадку не дорівнює постійній Больцмана, але прийнятий у межах моделі чисельно як $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$, для одержання порівняних із подальшими розрахунками міри організованості значень.

У межах прийнятих уявлень міра невизначеності підсистеми обчислюється таким чином:

1) визначають різницю величин параметрів, яка відображає зміну стану оператора в період часу, обмежений двома послідовними вимірюваннями: $\Delta N_i = N_i - N_{i+1}$;

2) визначають ймовірність даного стану: $p_i = \Delta N_i / N_{\text{ідеал}}^i$;

де $N_{\text{ідеал}}^i$ – константа, що відображає ідеальний стан підсистеми, в рамках розроблюваної моделі.

$N_{\text{ідеал}}^i$ визначають таким чином: $N_{\text{ідеал}}^i = \frac{N_i}{X_0}$,

де N_i – величина, що відображає поточний стан системи;
 X_0 – масштабний чинник.

Масштабний чинник визначають таким чином:
$$X_0 = \frac{\sum_{i=1}^{24} \left(\frac{N_i + N_{i+1}}{2} \right)}{309}.$$

У загальному вигляді формула для визначення міри невизначеності для підсистем організму людини має такий вигляд:

$$S_T = k \ln \frac{\Delta N_i}{N_{\text{ідеал}}^i}. \quad (3.100)$$

Оскільки ентропія має властивість адитивності, загальну міру невизначеності системи можна визначити як суму мір невизначеності підсистем:

$$S_{T.\text{заг}} = \sum_{i=1}^{12} k \ln \frac{\Delta N_i}{N_{\text{ідеал}}^i}. \quad (3.101)$$

Застосування міри організованості в рамках моделі

Міра організованості ($S_{\text{нег}}$) – міра структурної впорядкованості системи [135]. Міра організованості є величиною статистичною і може бути виражена таким чином:

$$S_{\text{нег}} = - p \log_2 p, \quad (3.102)$$

де p – ймовірність перебування системи в одному з можливих станів.

Ступінь розбалансованості організму людини виражається, насамперед, в енергетичному розбалансі між підгрупами і групами підсистем. У межах прийнятих уявлень міру організованості підсистеми можна обчислити таким чином:

1) визначають різницю величин параметрів, яка відображає стан симетричних груп підсистем організму оператора в даний момент часу:

$$\Delta N_i = N_{\text{ліві}} - N_{\text{праві}}; \quad (3.103)$$

2) визначають імовірність даного стану:

$$p_i = \Delta N_i / N_{\text{ідеал}}^i, \quad (3.104)$$

де – $N_{\text{ідеал}}^i$ константа, що відображає ідеальний стан підсистеми в межах розроблюваної моделі.

$N_{\text{ідеал}}^i$ обчислюють таким чином:

$$N_{\text{ідеал}}^i = \frac{N_i}{X_0}, \quad (3.105)$$

де N_i – величина, що відображає поточний стан підсистеми;
 X_0 – масштабний чинник.

Масштабний чинник обчислюють за формулою:

$$X_0 = \frac{\sum_{i=1}^{24} \left(\frac{N_{\text{ліві}} + N_{\text{праві}}}{2} \right)}{309}. \quad (3.106)$$

Тоді міра організованості підсистеми може бути обчислена за формулою:

$$S_{\text{нег}} = -k p_i \ln p_i. \quad (3.107)$$

У загальному вигляді формула для обчислення міри організованості для підсистем організму людини має такий вигляд:

$$S_{\text{нег}} = -k \frac{\Delta N_i}{N_{\text{ідеал}}^i} \ln \frac{\Delta N_i}{N_{\text{ідеал}}^i}. \quad (3.108)$$

Оскільки ентропія має властивість адитивності, то загальну міру організованості системи можна визначити як суму мір організованості підсистем:

$$S_{\text{нег.заг}} = S_{\text{нег1}} + S_{\text{нег2}} + \dots + S_{\text{нег12}}. \quad (3.109)$$

Таким чином, для розрахунку міри організованості організму людини в цілому формула (3.107) має такий вигляд:

$$S_{\text{нег.заг}} = - \sum_{i=1}^{12} k \frac{\Delta N_i}{N_{\text{ідеал}}^i} \ln \frac{\Delta N_i}{N_{\text{ідеал}}^i}. \quad (3.110)$$

Обчислення сумарних внесків у межах моделі

На підставі сказаного вище можна зробити висновок, що ентропійний аналіз стресостійкості полягає в розрахунку міри невизначеності S_T та міри організованості $S_{нег}$ для кожної підсистеми організму оператора ПК за формулами (3.101) та (3.110) відповідно. У результаті для кожної підсистеми організму людини буде отримано по чотири значення (табл. 3.18).

Таблиця 3.18

Результати розрахунків міри організованості й міри невизначеності для кожної підсистеми організму людини

$S_{негC}$	S_{TC}
$S_{негR}$	S_{TR}

Ємність і опір БАТШ, як складові комплексної ємності, характеризують відповідно пружну синфазну і зрушену за фазою на $\pi / 2$ дисипативну реакцію організму на вплив стрес-чинника. У межах розроблюваної моделі ємність відображає цю реакцію з точки зору енергетичного балансу організму людини, а опір – з точки зору рівня втрат системою енергії. Таким чином, у межах моделі необхідно розглядати не окремі значення міри невизначеності й міри організованості, обчислені за ємністю й опором сукупності БАТШ, а їх сумарні внески, які можна обчислити таким чином:

$$S_{нег.сум} = S_{негC} + S_{негR}, \quad (3.111)$$

$$S_{T.сум} = S_{TC} + S_{TR}. \quad (3.112)$$

Обчислення сумарних внесків міри організованості й міри невизначеності дозволяє зменшити кількість аналізованих даних і підвищити точність під час дослідження реакції людини на вплив стрес-чинника. Таким чином, для кожної підсистеми організму людини необхідно розраховувати по два значення: $S_{нег.сум}$ і $S_{T.сум}$.

Вироблення критерію оцінювання стресостійкості оператора

Для того, щоб оцінити стресостійкість оператора ПК, необхідно враховувати показники його психофізіологічного стану та якості діяльності під час роботи. Для аналізу психофізіологічного стану оператора

застосуємо параметри БАТШ, а для аналізу якості діяльності – кількість допущених помилок протягом робочого дня. Таким чином, критерій стресостійкості оператора є складним, оскільки містить у собі дві ознаки: перша ознака – оцінювання психофізіологічного стану оператора, друга – оцінювання якості діяльності. Розглянемо їх детальніше.

Оцінювання психофізіологічного стану оператора. На підставі експериментальних досліджень встановлено, що процеси адаптації до умов діяльності можуть протікати у трьох напрямках:

1) оптимально, якщо флуктуації психофізіологічних показників гомеостазу становлять не більше $\pm 30\%$;

2) припустимо, якщо флуктуації психофізіологічних показників гомеостазу становлять не більше $\pm 50\%$;

3) неприпустимо, якщо флуктуації психофізіологічних показників гомеостазу складають більше $\pm 50\%$.

Це експериментальне припущення співпадає з результатами досліджень стресостійкості операторів, що наведені в літературних джерелах [135].

Представимо сказане вище через ентропійний аналіз, а точніше через міру невизначеності й міру організованості, які є статистичними еквівалентами параметрів психофізіологічного стану оператора. Отже, можна отримати показники психофізіологічного стану оператора, виражені у вигляді нерівностей, які можна записати таким чином:

• у разі оптимального ФС:

$$|S_{\text{нег.сум}}^{n+1} - S_{\text{нег.сум}}^n| \leq 0,3 |S_{\text{нег.сум}}^n|, \quad (3.113)$$

де n – номер вимірювання параметрів психофізіологічного стану оператора;

$S_{\text{нег.сум}}^n$ – показник психофізіологічного стану оператора на момент n -го вимірювання;

$S_{\text{нег.сум}}^{n+1}$ – показник психофізіологічного стану оператора на момент $(n+1)$ -го вимірювання;

$$|S_{\text{Т.сум}}^{n+1} - S_{\text{Т.сум}}^n| \leq 0,3 |S_{\text{Т.сум}}^n|, \quad (3.114)$$

де $S_{\text{Т.сум}}^{n+1}$ – показник психофізіологічного стану оператора під час n -го вимірювання;

$S_{Т.сум}^{n+1}$ – показник психофізіологічного стану оператора під час $(n+1)$ -го вимірювання;

• у разі допустимого ФС:

$$0,3 |S_{нег.сум}^n| < |S_{нег.сум}^{n+1} - S_{нег.сум}^n| \leq 0,5 |S_{нег.сум}^n|, \quad (3.115)$$

$$0,3 |S_{Т.сум}^n| < |S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n| \leq 0,5 |S_{Т.сум}^n|; \quad (3.116)$$

• у разі недопустимого ФС:

$$|S_{нег.сум}^{n+1} - S_{нег.сум}^n| > 0,5 |S_{нег.сум}^n|, \quad (3.117)$$

$$|S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n| > 0,5 |S_{Т.сум}^n|. \quad (3.118)$$

Необхідно зазначити, що для досягнення системою оптимального стану, виходячи з основ нелінійної нерівноважної термодинаміки і теорії інформації, міра невизначеності повинна зменшуватися, а міра організованості – збільшуватися. Таким чином, щоб комплексно оцінити стан системи, на додачу до нерівностей (3.113) – (3.118) має також реалізуватися така умова:

$$S_{Т.сум} \downarrow S_{нег.сум} \uparrow. \quad (3.119)$$

Ця умова буде реалізована, якщо:

$$\begin{aligned} \Delta S_{Т.сум} &= S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n < 0, \\ \Delta S_{нег.сум} &= S_{нег.сум}^{n+1} - S_{нег.сум}^n < 0. \end{aligned} \quad (3.120)$$

Оцінювання якості діяльності оператора. Для того, щоб оцінити якість діяльності оператора, необхідно використати дані про кількість помилок, допущених ним протягом робочого дня. Середнє нормативне значення кількості помилок для оператора ПК становить чотири помилки протягом робочого дня. Прийmemo дану кількість помилок за показник якості його діяльності.

Таким чином, отримуємо **критерій стресостійкості оператора ПК**, який містить у собі дві ознаки:

- 1) перша ознака – реалізація умов (3.113) – (3.118);
- 2) друга ознака – кількість помилок, допущених оператором протягом робочого дня.

На підставі цих ознак запропоновано класифікацію стресостійкості оператора ПК (табл. 3.26).

Таблиця 3.26

Класифікація стресостійкості оператора ПК за значеннями критерію оцінювання стресостійкості

Характеристичні нерівності	Баланс міри невизначеності й міри організованості	Кількість помилок
1	2	3
Оптимальна стресостійкість		
$S_{Т.сум}^n = S_{Т.сум}^{n+1}, S_{нег.сум}^n = S_{нег.сум}^{n+1}$	$S_{Т.сум}^n = S_{Т.сум}^{n+1}$ $S_{нег.сум}^n = S_{нег.сум}^{n+1}$	0 – 4
$ S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n \leq 0,3 S_{Т.сум}^n ,$ $ S_{нег.сум}^{n+1} - S_{нег.сум}^n \leq 0,3 S_{нег.сум}^n $	$S_{Т.сум} \downarrow S_{нег.сум} \uparrow$ або $S_{Т.сум} \uparrow S_{нег.сум} \uparrow$ або $S_{Т.сум} \downarrow S_{нег.сум} \downarrow$ або $S_{Т.сум} \uparrow S_{нег.сум} \downarrow$ або $S_{Т.сум}^n = S_{Т.сум}^{n+1} S_{нег.сум} \uparrow$ або $S_{Т.сум}^n = S_{Т.сум}^{n+1} S_{нег.сум} \downarrow$ або $S_{нег.сум}^n = S_{нег.сум}^{n+1} S_{Т.сум} \uparrow$ або $S_{нег.сум}^n = S_{нег.сум}^{n+1} S_{Т.сум} \downarrow$	

1	2	3
$ S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n \leq 0,3 S_{Т.сум}^n $ $0,3 S_{нег.сум}^n < S_{нег.сум}^{n+1} - S_{нег.сум}^n \leq 0,5 S_{нег.сум}^n $	$S_{Т.сум} \downarrow S_{нег.сум} \uparrow \text{ або}$ $S_{Т.сум} \uparrow S_{нег.сум} \uparrow \text{ або}$ $S_{Т.сум} \downarrow S_{нег.сум} \downarrow \text{ або}$ $S_{Т.сум} \uparrow S_{нег.сум} \downarrow \text{ або}$ $S_{Т.сум}^n = S_{Т.сум}^{n+1} \quad S_{нег.сум} \uparrow \text{ або}$ $S_{Т.сум}^n = S_{Т.сум}^{n+1} \quad S_{нег.сум} \downarrow$	0 – 4
Припустима стресостійкість		
$0,3 S_{Т.сум}^n < S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n \leq 0,5 S_{Т.сум}^n $ $ S_{нег.сум}^{n+1} - S_{нег.сум}^n \leq 0,3 S_{нег.сум}^n $	$S_{Т.сум} \downarrow S_{нег.сум} \uparrow \text{ або}$ $S_{Т.сум} \uparrow S_{нег.сум} \uparrow \text{ або}$ $S_{Т.сум} \downarrow S_{нег.сум} \downarrow \text{ або}$ $S_{Т.сум} \uparrow S_{нег.сум} \downarrow \text{ або}$ $S_{нег.сум}^n = S_{нег.сум}^{n+1} \quad S_{Т.сум} \uparrow \text{ або}$ $S_{нег.сум}^n = S_{нег.сум}^{n+1} \quad S_{Т.сум} \downarrow$	0 – 4
$0,3 S_{Т.сум}^n < S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n \leq 0,5 S_{Т.сум}^n $ $0,3 S_{нег.сум}^n < S_{нег.сум}^{n+1} - S_{нег.сум}^n \leq 0,5 S_{нег.сум}^n $	$S_{Т.сум} \downarrow S_{нег.сум} \uparrow \text{ або}$ $S_{Т.сум} \uparrow S_{нег.сум} \uparrow \text{ або}$ $S_{Т.сум} \downarrow S_{нег.сум} \downarrow \text{ або}$ $S_{Т.сум} \uparrow S_{нег.сум} \downarrow$	0 – 4

1	2	3
$ S_{\text{т.сум}}^{n+1} - S_{\text{т.сум}}^n > 0,5 S_{\text{т.сум}}^n $ $ S_{\text{нег.сум}}^{n+1} - S_{\text{нег.сум}}^n \leq 0,3 S_{\text{нег.сум}}^n $	$S_{\text{т.сум}} \downarrow S_{\text{нег.сум}} \uparrow \text{ або}$ $S_{\text{т.сум}} \uparrow S_{\text{нег.сум}} \uparrow \text{ або}$ $S_{\text{т.сум}} \downarrow S_{\text{нег.сум}} \downarrow \text{ або}$ $S_{\text{нег.сум}}^n = S_{\text{нег.сум}}^{n+1} S_{\text{т.сум}} \uparrow \text{ або}$ $S_{\text{нег.сум}}^n = S_{\text{нег.сум}}^{n+1} S_{\text{т.сум}} \downarrow$	
$ S_{\text{т.сум}}^{n+1} - S_{\text{т.сум}}^n \leq 0,3 S_{\text{т.сум}}^n $ $ S_{\text{нег.сум}}^{n+1} - S_{\text{нег.сум}}^n > 0,5 S_{\text{нег.сум}}^n $	$S_{\text{т.сум}} \downarrow S_{\text{нег.сум}} \uparrow \text{ або}$ $S_{\text{т.сум}} \uparrow S_{\text{нег.сум}} \uparrow \text{ або}$ $S_{\text{т.сум}} \downarrow S_{\text{нег.сум}} \downarrow \text{ або}$ $S_{\text{т.сум}}^n = S_{\text{т.сум}}^{n+1} S_{\text{нег.сум}} \uparrow \text{ або}$ $S_{\text{т.сум}}^n = S_{\text{т.сум}}^{n+1} S_{\text{нег.сум}} \downarrow$	
$ S_{\text{т.сум}}^{n+1} - S_{\text{т.сум}}^n > 0,5 S_{\text{т.сум}}^n $ $0,3 S_{\text{нег.сум}}^n < S_{\text{нег.сум}}^{n+1} - S_{\text{нег.сум}}^n \leq$ $\leq 0,5 S_{\text{нег.сум}}^n $ $0,3 S_{\text{т.сум}}^n < S_{\text{т.сум}}^{n+1} - S_{\text{т.сум}}^n \leq$ $\leq 0,5 S_{\text{т.сум}}^n $ $ S_{\text{нег.сум}}^{n+1} - S_{\text{нег.сум}}^n > 0,5 S_{\text{нег.сум}}^n $ $ S_{\text{т.сум}}^{n+1} - S_{\text{т.сум}}^n > 0,5 S_{\text{т.сум}}^n $ $ S_{\text{нег.сум}}^{n+1} - S_{\text{нег.сум}}^n > 0,5 S_{\text{нег.сум}}^n $	$S_{\text{т.сум}} \downarrow S_{\text{нег.сум}} \uparrow$ <p style="text-align: center;">або</p> $S_{\text{т.сум}} \uparrow S_{\text{нег.сум}} \uparrow$ <p style="text-align: center;">або</p> $S_{\text{т.сум}} \downarrow S_{\text{нег.сум}} \downarrow$	0 – 4

1	2	3
Неприпустима стресостійкість		
$0,3 S_{Т.сум}^n < S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n \leq 0,5 S_{Т.сум}^n ,$ $ S_{Нег.сум}^{n+1} - S_{Нег.сум}^n > 0,5 S_{Нег.сум}^n ,$ $ S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n > 0,5 S_{Т.сум}^n ,$ $ S_{Нег.сум}^{n+1} - S_{Нег.сум}^n > 0,5 S_{Нег.сум}^n ,$ $ S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n > 0,5 S_{Т.сум}^n ,$	$S_{Т.сум} \uparrow S_{Нег.сум} \downarrow$	
$0,3 S_{Нег.сум}^n < S_{Нег.сум}^{n+1} - S_{Нег.сум}^n \leq$ $\leq 0,5 S_{Нег.сум}^n ,$ $ S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n \leq 0,3 S_{Т.сум}^n ,$ $ S_{Нег.сум}^{n+1} - S_{Нег.сум}^n > 0,5 S_{Нег.сум}^n $ $ S_{Т.сум}^{n+1} - S_{Т.сум}^n > 0,5 S_{Т.сум}^n $ $ S_{Нег.сум}^{n+1} - S_{Нег.сум}^n \leq 0,3 S_{Нег.сум}^n $		Не має значення

Необхідно зазначити, що в наведеній класифікації стресостійкості оператора ПК за умов неприпустимої стресостійкості кількість помилок, допущених оператором, не має значення, оскільки його ФС, згідно з першою ознакою, є неприпустимим, що створює передумови шкоди здоров'ю оператора у випадку продовження його діяльності, навіть якщо якість при цьому не буде знижуватися.

Таким чином, ця класифікація дозволяє оцінити процес формування стресостійкості як професійно важливої якості оператора ПК з урахуванням його індивідуальних особливостей, що необхідно для введення коригуючих змін у процес діяльності з метою збереження здоров'я та підвищення ефективності результатів роботи.

Ентропійна модель контролю формування стресостійкості оператора ПК

Завершальним етапом моделювання є побудова структурно-функціональної схеми системи контролю формування стресостійкості оператора ПК (рис. 3.40).

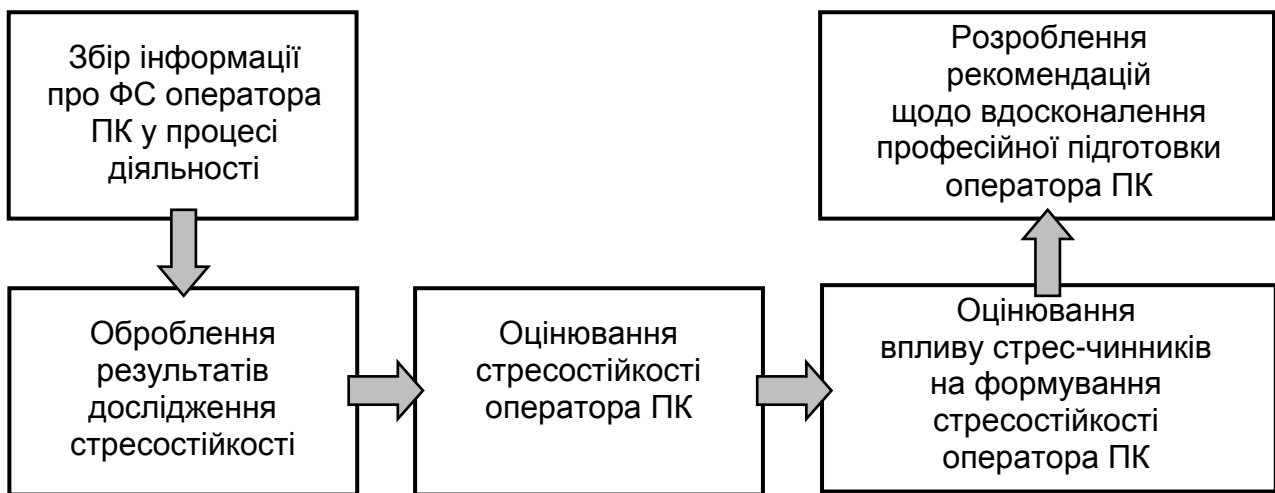


Рис. 3.40. Структурно-функціональна схема контролю формування стресостійкості оператора ПК

Структурно-функціональна схема системи контролю містить кілька взаємопов'язаних і послідовних етапів:

- 1) збір інформації про ФС оператора ПК під час впливу стрес-чинників;
- 2) оброблення результатів досліджень стресостійкості;
- 3) оцінювання стресостійкості оператора;
- 4) оцінювання впливу стрес-чинників на формування стресостійкості оператора;
- 5) розроблення рекомендацій щодо вдосконалення професійної підготовки оператора.

Запропонована структурно-функціональна схема відображає сутність цільового призначення ентропійної моделі контролю формування стресостійкості оператора ПК.

3.7.4. Використання ентропійної моделі для розроблення методу оцінювання стресостійкості оператора

Представлена ентропійна модель контролю формування стресостійкості оператора ПК дозволяє розробити на її основі метод оцінювання стресостійкості. Метою розроблення цього методу є вдосконалення професійної підготовки оператора на основі контролю формування його

стресостійкості в процесі діяльності. Послідовність оцінювання стресостійкості оператора можна представити таким чином:

- 1) дослідження параметрів ФС оператора (ємність і опір репрезентативних БАТШ) в процесі діяльності;
- 2) обчислення міри невизначеності та міри організованості згідно з формулами (3.101) і (3.110) відповідно;
- 3) обчислення сумарних вкладів міри невизначеності й міри організованості згідно з формулами (3.111) і (3.112) відповідно;
- 4) оцінювання ФС оператора згідно з формулами (3.113) – (3.118);
- 5) оцінювання якості діяльності оператора шляхом підрахунку кількості помилок, припущених протягом робочого дня;
- 6) оцінювання стресостійкості оператора згідно з табл. 3.26;
- 7) висновок: подальша діяльність оператора або розроблення рекомендацій щодо вдосконалення його професійної підготовки.

3.7.5. Використання ентропійної моделі для розроблення способів оцінювання впливу стрес-чинників на формування стресостійкості оператора

Як показано вище, у межах ентропійної моделі досліджується вплив на оператора трьох груп стрес-чинників природних, техногенних і соціальних. Перераховані групи стрес-чинників відрізняються за характером походження, але мають однакову результуючу дію – впливають на формування рівня стресостійкості оператора. У зв'язку із цим далі буде розглянуто вплив цих груп стрес-чинників на формування стресостійкості оператора.

Дослідження процесу формування стресостійкості оператора за умов впливу соціальних стрес-чинників. Серед соціальних стрес-чинників особливе місце займають психологічні стресори, оскільки вони мають свій прояв у кожному виді стрес-чинників даної групи. Тому надалі будуть проаналізовані саме психологічні стрес-чинники.

Розглянемо психічний стан людини з позицій концепцій теорії самоорганізації. Кожний психічний стан, як елемент функціональної структури, характеризується певною якісною своєрідністю: сполукою, особливою структурою й специфічною функцією (наприклад, страх – охоронна функція, стомлення – захисна і т. ін.), умовами й механізмами актуалізації й ін. Для того щоб досліджувати складну структуру психічного стану,

який виникає в результаті впливу стрес-чинників, необхідно відмовитися від традиційних підходів і розглядати його з позицій концепції самоорганізації (синергетики). Як відомо, процеси самоорганізації виникають у сильно нерівноважних системах до таких можна віднести й психіку.

Використання підходів синергетики дозволяє звернутися до інформаційно-енергетичних підстав станів. З позицій системного підходу й концепції самоорганізації нерівноважні стани становлять функціональну структуру, що утворюється в разі порушення симетрії між організмом і середовищем. Ці порушення виникають внаслідок процесів, обумовлених внесенням інформації й енергії у відкриту систему, якою є людина. Внаслідок самоорганізації складається новий функціональний утворення системи – нерівноважний (нестійкий) стан.

Нерівноважний стан має певну кількість енергії (чим більше інтенсивність психічного стану, тим більшу кількість енергії вона має), яку дисипує за допомогою дій, вчинків суб'єкта, тобто відповідної поведінки, або обумовлює виникнення нових структур і новоутворень особистості. Новоутворення приводить до згладжування неравноважності й переходу системи (суб'єкта) у відносно стійкий (рівноважний) стан.

Необхідно відзначити, що психічний стан у стресовій ситуації з позицій концепції самоорганізації недостатньо досліджений. Цей стан, у більшості випадків, є предметом дослідження в межах підходу до нього як явища фізичного або психологічного характеру. Отже, необхідний принципово новий підхід у розгляді формування стресової реакції оператора, обумовленої дією соціальних стрес-чинників.

Для вивчення психічних станів із позицій концепції теорії самоорганізації необхідно вибрати адекватні джерела інформації. М. Бененсон, вивчаючи чутливість людини до змінного й постійного струму, відзначив, що особи з підвищеною нервовою збудливістю мають знижений поріг чутливості до електричного струму. Відзначено також, що нервове або емоційне порушення підвищує електропровідність шкіри, а для психопатичних реакцій характерний широкий діапазон коливань електропровідності як у різних людей, так і в однієї людини протягом певного часу.

Дослідження впливу емоційного стресу на психофізіологічний стан БАТШ також показали, що в стані норми параметри БАТШ випробуваних суттєво не відрізняються від індіферентної шкіри, але під час значного психічного навантаження показання значно змінюються. Особливо яскраво це проявляється в точках VG 25, VG 26 і GI 4 – "точках стресу".

У ході дослідження вивчена динаміка психофізіологічного стану перерахованих точок, які для спрощення названі "точками стресу". У ході експерименту досліджувалися такі параметри "точок стресу" як ємність і опір у змінному полі. У результаті встановлено, що значення цих параметрів суттєво збільшуються через вплив стрес-чинників соціального характеру. Таким чином, джерелом інформації про вплив соціальних стрес-чинників на процес формування стресостійкості оператора можуть служити параметри "точок стресу".

У межах ентропійної моделі послідовність оцінювання впливу чинників соціального середовища на формування стресового стану оператора можна представити таким чином:

- 1) дослідження параметрів ФС оператора (ємність і опір "точок стресу") до початку виконання діяльності оператором і після закінчення;
- 2) обчислення мір організованості й невизначеності;
- 3) обчислення сумарних ефектів мір організованості й невизначеності;
- 4) визначення класу стресостійкості оператора;
- 5) висновок про вплив чинників соціального середовища на формування стресового стану оператора;
- 6) висновок про можливості подальшої діяльності оператора.

Дослідження процесу формування стресостійкості оператора за умов впливу природних стрес-чинників. Найбільш чутливим механізмом в організмі людини до впливу стрес-чинників природного характеру є біологічні ритми. Розглянемо ритмічний характер біологічних процесів як спосіб організації живої системи.

Будь-які прояви біологічної активності тією чи іншою мірою відображають у своїй структурі характеристики зовнішніх, у тому числі періодичних, впливів середовища. Організація ритмів у процесі еволюції функцій є одним із провідних механізмів пристосування органічної природи до неорганічного середовища, і, відповідно, від періодичних режимів не вільний не один живий організм. Постійна робота організму проти рівноваги й коливальні режими розглядаються як фундаментальна властивість усього живого і як найспецифічніша риса обміну речовин біологічних об'єктів.

Ритмічні зміни інтенсивності функціональної активності будь-якого роду (і на будь-якому рівні функціональної організації) становлять універсальну форму постійного реагування на впливи зовнішнього середовища.

Можливість оптимальним чином відреагувати як на передбачений, так і на непередбачений вплив значною мірою визначається здатністю організму знайти серед цього діапазону ті значення, які найбільш адекватні цій ситуації.

Адекватна реакція на непередбачені впливи забезпечується за рахунок амплітуди коливань, і чим більше їх розмах, тем кращий "вибір" має організм і, відповідно, тим більш адекватна його реакція.

Враховуючи сказане вище, можна використовувати структуру біологічних ритмів у якості критерію здатності до адаптації людини.

Проаналізуємо зміни біологічних ритмів під впливом стресогенних чинників та їхній прояв. На вплив зовнішнього середовища організм відповідає реакцією адаптації. Завдяки внутрішній біоритмічній структурі система здатна активно досліджувати якості й властивості навколишнього середовища й за каналами зворотної аферентації в підсумку кожного елементарного акту взаємодії одержувати інформацію. Цю властивість живих організмів називають здатністю "зондувати", вона є основою механізмів адаптивної поведінки.

Однак існують й інші механізми взаємодії із середовищем – це ті випадки, коли організм відреагувавши на вплив, прагне до відновлення вихідного стану. Це реакція на короточасні сильні впливи, що протікають за типом так званих перехідних процесів. У цих випадках вплив стрес-чинників викликає різке відхилення рівня параметрів від їхніх поточних значень. Як тільки цей вплив припиняється, відбувається відхилення в протилежному напрямку й, переходячи з одного крайнього стану в інший, система вертається до вихідного рівня. Ця схема застосовна й для біологічних систем, але тільки у випадках короточасних впливів із короточасними перехідними процесами. Якщо ж цей процес відбувається довгостроково або якщо впливи, що викликають коливання, повторні й один перехідний процес змінюється іншим, то в живому організмі, що володіє складною біоритмічною структурною функцією, саме "вихідний стан" значно змінюється в часі.

Таким чином, очевидно, що шляхом тих або інших "перебудов" біоритми організму людини реагують на впливи різного роду стрес-чинників незалежно від їхньої тривалості за часом. "Перебудови" біоритмів організму людини проявляються, у першу чергу, у зміні його ФС. Отже, важливим моментом для оцінювання формування стресостійкості оператора

є встановлення залежності між впливом стрес-чинників і зміною біоритмів його організму. В якості джерела інформації про зміну біоритмів можуть служити параметри біоритмічних точок шкіри оператора.

У межах ентропійної моделі послідовність оцінювання впливу природних чинників на формування стресового стану оператора можна представити в такий спосіб:

- 1) дослідження параметрів ФС оператора (ємність і опір біоритмічних і репрезентативних БАТШ) до початку виконання діяльності оператором і після закінчення;
- 2) обчислення мір невизначеності й організованості;
- 3) обчислення сумарних ефектів невизначеності й організованості;
- 4) класифікація стресостійкості оператора;
- 5) висновок про вплив природних чинників на формування стресового стану оператора;
- 6) висновок про можливості подальшої діяльності оператора.

Дослідження процесу формування стресостійкості оператора за умов впливу техногенних стрес-чинників. Розглянемо психофізіологічні особливості, що супроводжують процес формування стресостійкості під час впливу стрес-чинників техногенного середовища. Як було зазначено раніше, процесу формування неприпустимого рівня стресостійкості оператора передують і його супроводжують такі системні процеси, як порушення адаптації, погіршення саморегуляції, зниження компенсаторних реакцій. На функціональному рівні це супроводжується перебудовою взаємозв'язків між підсистемами організму, тобто порушенням інформаційно-енергетичного обміну. Така перебудова визначається функціональним станом та індивідуальним функціональним резервом людини.

Відомо, що в людини зі значним функціональним резервом процеси саморегуляції й компенсації під час впливу стрес-чинників техногенного середовища приводять до практично повної відсутності будь-яких проявів у цей момент часу, однак є причиною істотного зниження функціональних можливостей надалі.

Таким чином, щоб не допустити зниження стресостійкості оператора, необхідно у цілому оцінити його поточний стан і встановити напрям його зміни. Джерелом інформації про вплив стрес-чинників техногенного середовища на формування стресостійкості оператора можуть служити параметри (ємність і опір) репрезентативних БАТШ.

У межах ентропійної моделі послідовність оцінювання впливу чинників техногенного середовища на формування стресового стану оператора можна представити в такий спосіб:

- 1) дослідження параметрів ФС оператора (ємність та опір репрезентативних БАТШ) до початку виконання робочих операцій і після закінчення;
- 2) обчислення мір невизначеності й організованості;
- 3) обчислення сумарних внесків мір невизначеності й організованості;
- 4) визначення класу стресостійкості оператора;
- 5) висновок про вплив чинників техногенного середовища на формування стресового стану оператора;
- 6) висновок про можливість подальшої діяльності оператора.

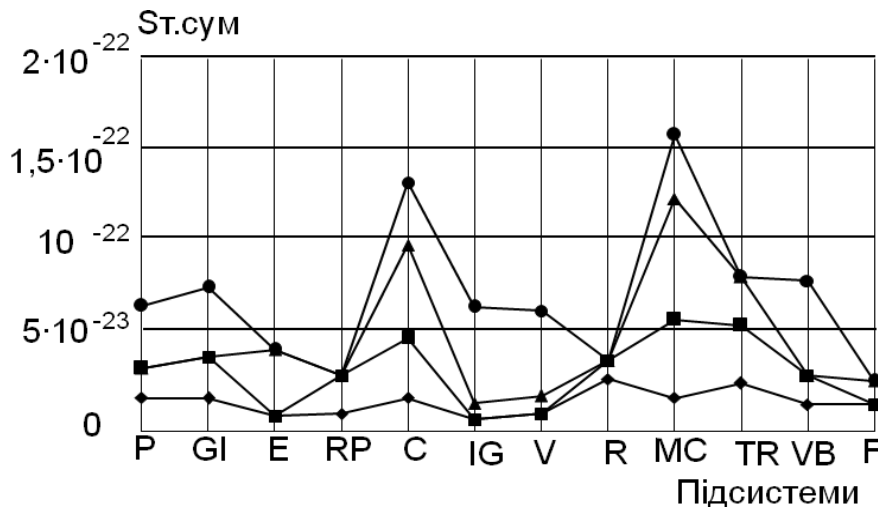
3.7.6. Візуалізація результатів

З метою одержання більш повної інформації про процес формування стресостійкості оператора крім кількісного аналізу стресостійкості, здійснюваного за допомогою запропонованих вище методів і способів, необхідний також і якісний. Отже, розглянемо методи, що дозволяють візуалізувати результати контролю формування стресостійкості оператора.

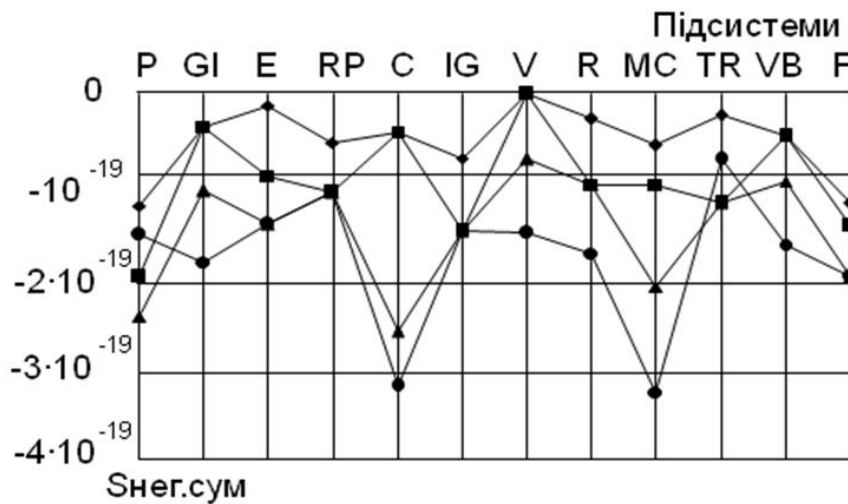
Одним зі способів візуалізації інформації є побудова графіків. Розрахунок сумарних ефектів у межах ентропійної моделі дає кількісне значення рівня стресостійкості оператора, яке також можна представити у вигляді графіків, що якісно відображають процес формування стресостійкості (рис. 3.41).

На графіку за віссю X розташовано підсистеми організму людини, а за віссю Y – значення сумарного ефекту. Чим вище значення сумарних ефектів, обчислених для міри організованості $S_{\text{нег.сум}}$, розташованих за віссю Y , і чим нижче значення сумарних ефектів, обчислених для міри невизначеності $S_{\text{т.сум}}$, тим ближче рівень стресостійкості оператора до оптимального. Таке подання інформації дозволяє дослідити процес формування стресостійкості оператора під час діяльності й визначити, які підсистеми є вразливими й можуть бути основною причиною зниження його стресостійкості. Зниження стресостійкості підсистем можна визначити за ступенем зміни значень мір організованості й невизначеності,

обчисленими для підсистеми, у різні періоди вимірювання параметрів БАТШ оператора.



а



б

Рис. 3.41. **Зміна параметрів підсистем оператора у процесі діяльності:**

а) результати обчислення міри невизначеності; б) результати обчислення міри організованості: —◆— — графік психофізіологічного стану оператора на момент першого вимірювання; —■— — те ж саме для другого вимірювання; —▲— — те ж саме для третього вимірювання; —●— — те ж саме для четвертого вимірювання

Ще один спосіб подання інформації, одержаної в результаті експерименту, – побудова функціональних областей у комплексній площині. Для побудови функціональних областей використовували значення

ємності й опору БАТШ до та після впливу стрес-чинника [110]. До того ж в комплексній площині за оссю X розташовані значення ємності БАТШ, а за оссю Y – значення опору БАТШ. Кожна точка функціональної області характеризує стан однієї з дванадцяти підсистем організму людини.

Мала площа й мінімальний розкид значень опору БАТШ функціональної області свідчать про оптимальність ФС людини, і, навпаки, велика площа й розкид значень опору БАТШ – значне відхилення ФС людини від норми. Крім визначення ФС людини на поточний момент, за допомогою функціональних областей можна судити й про рівень стресостійкості оператора. Для цього застосовано дві ознаки: площа й зсув функціональної області. Наприклад, якщо після впливу стрес-чинника площа функціональної області не змінилася або зменшилась, а її зсув мінімальний щодо початкового розміщення, то це свідчить про оптимальний рівень стресостійкості людини-оператора. І, навпаки, якщо площа функціональної області збільшилась, а її зсув щодо початкового розміщення значний, то це свідчить про неприпустимий рівень стресостійкості (рис. 3.42).

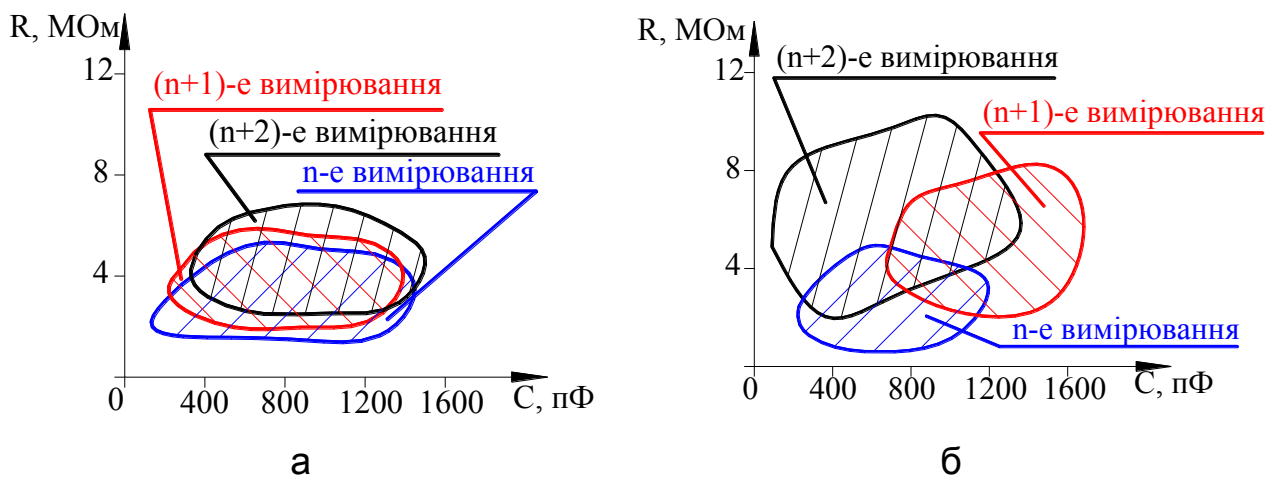


Рис. 3.42. Динаміка функціональних областей у процесі діяльності оператора:

а) оптимальна стресостійкість; б) неприпустима стресостійкість

Необхідно зазначити, що крім якісних характеристик, за допомогою функціональних областей можна також визначити такі кількісні показники:

1) динаміку функціональних областей, яка визначається в міру зміни параметрів його психофізіологічного стану в процесі діяльності. Отже, характеристичні нерівності виглядають наступним чином:

$$|S^{n+1} - S^n| \leq 0,3 S^n, \quad (3.42)$$

$$0,3 S^n < |S^{n+1} - S^n| \leq 0,5 S^n, \quad (3.43)$$

$$0,5 S^n < |S^{n+1} - S^n|, \quad (3.44)$$

де S^n площа функціональної області, яка відображає ФС оператора на момент n -го вимірювання;

S^{n+1} – площа функціональної області, яка відображає ФС оператора на момент $(n+1)$ -го вимірювання;

2) розкид значень опору ΔR між двома послідовними вимірюваннями параметрів ФС оператора:

$$\Delta R = R_{\max} - R_{\min}. \quad (3.45)$$

На підставі якісних і кількісних характеристик також можна зробити висновок про стресостійкість оператора (табл. 3.27).

Таблиця 3.27

Класифікація стресостійкості оператора ПК

Характеристична нерівність	Розкид значень опору ΔR			Кількість помилок
1	2			3
Оптимальна стресостійкість				
$ S^{n+1} - S^n \leq 0,3 S^n$	$R^n > R^{n+1}$	$R_{\max}^n \geq R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n \geq R_{\min}^{n+1}$	0 – 4
$ S^{n+1} - S^n \leq 0,3 S^n$	$R^n > R^{n+1}$	$R_{\max}^n \geq R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n < R_{\min}^{n+1}$	
$ S^{n+1} - S^n \leq 0,3 S^n$	$R^n > R^{n+1}$	$R_{\max}^n < R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n < R_{\min}^{n+1}$	
$ S^{n+1} - S^n \leq 0,3 S^n$	$R^n \leq R^{n+1}$	$R_{\max}^n < R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n < R_{\min}^{n+1}$	
$ S^{n+1} - S^n \leq 0,3 S^n$	$R^n \leq R^{n+1}$	$R_{\max}^n \geq R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n \geq R_{\min}^{n+1}$	
$ S^{n+1} - S^n \leq 0,3 S^n$	$R^n \leq R^{n+1}$	$R_{\max}^n < R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n \geq R_{\min}^{n+1}$	

1	2			3
Припустима стресостійкість				
$0,3 S^n < S^{n+1} - S^n \leq 0,5 S^n$	$R^n > R^{n+1}$	$R_{\max}^n \geq R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n \geq R_{\min}^{n+1}$	0 – 4
$0,3 S^n < S^{n+1} - S^n \leq 0,5 S^n$	$R^n > R^{n+1}$	$R_{\max}^n \geq R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n < R_{\min}^{n+1}$	
$0,3 S^n < S^{n+1} - S^n \leq 0,5 S^n$	$R^n > R^{n+1}$	$R_{\max}^n < R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n < R_{\min}^{n+1}$	
$0,3 S^n < S^{n+1} - S^n \leq 0,5 S^n$	$R^n \leq R^{n+1}$	$R_{\max}^n < R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n < R_{\min}^{n+1}$	
$0,3 S^n < S^{n+1} - S^n \leq 0,5 S^n$	$R^n \leq R^{n+1}$	$R_{\max}^n \geq R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n \geq R_{\min}^{n+1}$	
$0,3 S^n < S^{n+1} - S^n \leq 0,5 S^n$	$R^n \leq R^{n+1}$	$R_{\max}^n < R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n \geq R_{\min}^{n+1}$	
$0,5 S^n < S^{n+1} - S^n $	$R^n > R^{n+1}$	$R_{\max}^n \geq R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n \geq R_{\min}^{n+1}$	
$0,5 S^n < S^{n+1} - S^n $	$R^n > R^{n+1}$	$R_{\max}^n \geq R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n < R_{\min}^{n+1}$	
Неприпустима стресостійкість				
$0,5 S^n < S^{n+1} - S^n $	$R^n > R^{n+1}$	$R_{\max}^n < R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n < R_{\min}^{n+1}$	Не має значення
$0,5 S^n < S^{n+1} - S^n $	$R^n \leq R^{n+1}$	$R_{\max}^n < R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n < R_{\min}^{n+1}$	
$0,5 S^n < S^{n+1} - S^n $	$R^n \leq R^{n+1}$	$R_{\max}^n \geq R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n \geq R_{\min}^{n+1}$	
$0,5 S^n < S^{n+1} - S^n $	$R^n \leq R^{n+1}$	$R_{\max}^n < R_{\max}^{n+1}$	$R_{\min}^n \geq R_{\min}^{n+1}$	

Таким чином, побудова функціональних областей дає як якісне, так і кількісне уявлення про формування стресостійкості оператора в процесі діяльності.

3.7.7. Валідність ентропійної моделі

Із безлічі професійно важливих якостей оператора, які визначають надійність не тільки оператора, але й системи "людина – техніка – середовище" у цілому, найбільш складною для дослідження є стресостійкість оператора, що обумовлено необхідністю враховувати велику кількість чинників (гігієнічні умови праці, фізичне й психоемоційне навантаження, нав'язаний темп роботи й ін.), що формують рівень стресостійкості.

Однак від високого рівня саме цієї якості оператора найбільш суттєво залежить надійність його діяльності.

Системний підхід до дослідження стресостійкості оператора, заснований на відборі, структуруванні й обробленні сукупності психофізіологічних параметрів БАТШ, дозволив застосувати ентропійні методи аналізу в системі контролю формування стресостійкості людини-оператора. Міри невизначеності й організованості підсистем організму оператора закономірно змінюються під час впливу стрес-чинників різної природи походження й ступеня складності, і, таким чином, дають уявлення про ступінь і напрям зміни рівня стресостійкості людини, а також про причини цих змін. Встановлені закономірності зміни критерію стресостійкості оператора й розроблення класифікації стресостійкості оператора дозволили:

1) створити метод оцінювання стресостійкості людини;

2) способи оцінювання впливу стрес-чинників на формування стресостійкості оператора.

У сукупності розроблені методи й способи дають можливість здійснювати поточний контроль формування стресостійкості оператора.

3.8. Моделювання розвитку еколого-економічних систем у цілях зеленої економіки

3.8.1. Природні ресурси як основа економічного зростання

Упродовж останніх двадцяти років найбільш економічно розвинені країни звернені до засад зеленої, глобально-інтегрованої економіки, у якій закладені принципи благополуччя майбутніх поколінь і планування економічного зростання в певних екологічно-дружніх межах; використання "розумної" політики, стимулюючої інновації, яка не дозволяє загрузнути в дороговартісних проектах; оптимізація цін і структур управління.

Розвиток економіки – загальний термін, визначає абсолютні і відносні зміни макроекономічних показників, що характеризують стан економіки країни протягом тривалого періоду часу (року або декількох років). Суспільству властивий розвиток, що виражається в збільшенні масштабів виробництва, прогресивних змінах у галузевій структурі економіки, в зростанні різноманіття споживчих благ і послуг. Загальноприйняті два

типи вимірювання економічного зростання: зіставлення величини реального ВВП з його величиною в минулому та аналіз динаміки ВВП в розрахунку на душу населення.

Після розгляду основних складових економічного зростання в розвинених країнах і країнах, що розвиваються, абсолютно чітко виділяються головні складові, які власне і гарантують це зростання:

- людські ресурси (пропозиція праці, освіта, дисципліна, мотивація);
- природні ресурси (земля, корисні копалини, паливо, якість навколишнього середовища);
- формування капіталу (обладнання, фабрики і заводи, дороги);
- технології (наука, інжиніринг, менеджмент, підприємництво).

Але найважливішим у цій системі є те, що саме природні ресурси (перелік яких подано досить стисло) впливають на всі перераховані чинники [81].

Безперечно, економічне зростання бажане і є ознакою благополуччя і впевненості в майбутньому, але існують значні розбіжності щодо заходів досягнення цього зростання. Перші наполягають на необхідності збільшення інвестицій в основний капітал. Другі – виступають на користь заходів стимулювання науково-дослідних розробок і технологічного прогресу. Треті – підкреслюють важливу роль високого рівня освіти робочої сили.

Занепокоєння з приводу обмеженості природних ресурсів та наслідків, викликаних негативним впливом економіки на навколишнє середовище, змусило багатьох задуматися про можливості збереження колишніх темпів економічного розвитку і в майбутньому. Проблеми, які пов'язані з обмеженими запасами земельних угідь, енергії і мінеральних ресурсів, частково вирішуються завдяки постійним новим відкриттям та розвитку ресурсозберігаючих технологій. Глобальні екологічні проблеми можуть призвести до значних збитків або необхідності прийняття не менш дорогих превентивних заходів.

Накопичення капіталу поряд із підвищенням якості робочої сили складають сутність сучасної теорії неокласичної моделі економічного зростання, яка виражається в уже згадуваній виробничій функції, що пов'язує чинники і технології із забезпеченням потенційного ВВП. У разі збільшення капіталу, трудових або природних ресурсів ми можемо очікувати збільшення обсягів виробництва, хоча при цьому, мабуть, буде спостерігатися зменшення віддачі додаткових чинників виробництва. У підвищенні продуктивності чинників виробництва проявляється роль технологій.

Технологічні зміни, як правило, асоціюються з інвестиціями і новим обладнанням. Їх використання дає великі надії, країнам, які розвиваються, оскільки вони можуть отримати найдосконаліші технології, розроблені більш розвиненими країнами. Тільки для цього їм необхідна підприємливість. Тому це і є одним із найскладніших завдань економічного розвитку – стимулювати економічне зростання в разі нестачі підприємницького духу.

За допомогою багатьох теорій економічного розвитку можна пояснити, які джерела економічного зростання повинні використовуватися або ні в цей час. Географічне положення і клімат, звичаї, ставлення до релігії і до бізнесу, класові конфлікти й політична система – все це впливає на економічний розвиток. Фахівці з питань економічного розвитку сьогодні акцентують увагу на перевагах економічного зростання, необхідності враховувати роль сільського господарства, а також на визначенні чіткої межі у сферах повноважень ринку і держави. І максимальної згоди вони досягли з приводу переваг відкритості економіки.

Вважається, що саме керований ринок дозволив свого часу домогтися чудових успіхів Японії, а також молодим "азіатським драконам": Південній Кореї, Гонконгу, Тайваню і Сінгапуру. Основні чинники, які сприяли цим досягненням: макроекономічна стабільність, високий рівень інвестицій, добре налагоджена фінансова система, значні досягнення в освіті, орієнтація на експорт та технологічний розвиток.

Не знижується інтерес і до проблем сталого розвитку (конференція ООН на вищому рівні під назвою "Планета Земля" (Ріо-де-Жанейро, 3 – 14 червня 1992 р.), Конференція ООН "сталого РОЗВИТКУ РІО + 20" (Ріо-де-Жанейро, 20 – 22 червня 2012 р.) з девізом "Майбутнє, яке ми хочемо – *The Future We Want*"). Це пов'язано з тим, що економічний розвиток може призвести до швидкого накопичення фізичного і людського капіталу за рахунок надмірного виснаження і деградації природного капіталу (навіть якщо сукупний їх запас буде постійним).

Саме в цьому контексті і слід розглядати нову доповідь ЮНЕП – Програму ООН про навколишнє середовище (*UNEP, United Nations Environment Programme*).

Остання, третя частина доповіді "Підтримка переходу до глобальної зеленої економіки", складається з трьох розділів та присвячена деяким методичним підходам. У першій з них – "Моделювання глобальних зелених інвестиційних сценаріїв" (автор-координатор – Андреа М. Басі (*Andrea M. Bass*)) – перевіряється основна гіпотеза, що стала фундаментом

доповіді: "інвестиції в навколишнє середовище дають позитивні макроекономічні результати в доповненні до поліпшення навколишнього середовища" [82]. Як інструмент-модель використовується *Threshold-21 (T21) 3*, яка розроблена в 1980 р. в *Millennium Institute* (США) для комплексного довгострокового планування національного розвитку. За тридцять років були побудовані моделі сталого розвитку для світу в цілому (1980), а також моделі Китаю, Канади, Бангладеш, Тунісу, Малаві, Італії, Камбоджі, Гайани, Папуа, Таїланду, США (2002), Мозамбіку, Кабо-Верде, Гани, США (друга версія, 2004), Ямайки, США (третя версія, 2007), Північної Америки, США (четверта версія, 2009), Свазіленду, Сенегалу, глобальна модель за замовленням ЮНЕП в межах зеленої економіки (*Qu et al.*, 2001), Кенії, Малі.

Були інтегровані економічний, соціальний, природний, ресурсний блоки в єдину імітаційну модель досягнення стійкого стану в окремо взятій державі (понад 800 параметрів, і ще більша кількість рівнів, що їх пов'язує), в групі держав і для світу в цілому. Це дозволяє будувати динамічні моделі для комплексного довгострокового планування національного розвитку. Модель несе функцію навчання: "розігрування" з її допомогою і порівняльний аналіз різних політичних сценаріїв поглиблює у користувачів розуміння проблем у галузі розвитку і допомагає їм визначити комплекс заходів, які, як правило, ведуть до поставленої мети. Особливістю вважається її "прозорість": структура моделі змістовно інтерпретується в термінах, зрозумілих не тільки розробникам із високою математичною кваліфікацією, а й замовникам (політикам, економістам, менеджерам, природоохоронцям, лікарям та ін.). Тому, якщо результати моделювання того чи іншого сценарію не задовольняють дослідника, він може подивитись на процес моделювання і визначити, які змінні вплинули на небажаний результат. Ці змінні в подальшому можуть бути скориговані в новому сценарії, і моделювання повторюється до тих пір, поки не буде досягнуто бажаного результату.

Дві наступні глави – "Сприятливі умови" (Пітер Вудерс (*Peter Wooders*) і "Фінанси" (Пол Клементс-Хант (*Paul Clements-Hunt*) – цілком логічні після короткого, але всебічного огляду результатів моделювання. У них розглядаються сприятливі умови, що гарантують успішний перехід до зеленої економіки, а також відповідні внутрішні фінансові заходи і стратегічні реформи, міжнародне співробітництво через торгівлю, фінанси, інфраструктуру ринку та ін. У доповіді підкреслюється, що для того

щоб бути зеленою, економіка повинна стати не тільки ефективною, але і справедливою (на вітчизняному сленгу – "соціально орієнтованою"). Авторами було зведено п'ять основних сфер сприятливих умов, "які могли б бути використані урядами на всіх рівнях під час ухвалення політичних рішень у короткостроковій і середньостроковій перспективі, з метою введення інноваційних та трансформаційних змін, що можуть з'явитися в подальшому в результаті координації спільної діяльності із зеленою економікою між різними галузями" [82]. Це державні інвестиції і витрати (оптимізація витрат в областях, що стимулюють зелену економіку); використання екологічних податків й інших ринкових інструментів, для мінімізації зовнішніх впливів на навколишнє середовище та компенсації слабкостей ринку; реформи екологічно шкідливих урядових субсидій (обмеження урядових витрат в областях, які виснажують природний капітал); поліпшення бази (підвищення надійності) нормативно-правового регулювання та посилення міжнародного управління. Для нашої країни все це абсолютно нове і знаходиться в нульовій точці відліку.

В останньому розділі "Фінанси" підкреслюється, що глобальний перехід до зеленої економіки потребує значних фінансових ресурсів. До того ж фінансові інвестиції (за даними Міжнародного енергетичного агентства, субсидії на викопне паливо у світі в п'ять разів більше, ніж на поновлювані джерела енергії), головними каналами фінансування зеленої економіки є банківська справа і страхування (зростання і все наростаюче "позеленіння" капіталу, поява нових ринкових інструментів ("вуглецеве" фінансування, "зелені" стимулюючі фонди, банки "зелених" інвестицій, "зелені" облігації та ін.) відкривають можливості для великомасштабного фінансування глобального "зеленого" економічного перетворення [82]. Також автори доповіді підкреслюють, що державна підтримка виступає тільки в якості пускового механізму такого економічного перетворення. Аналогічні думки знаходимо і у вітчизняному документі [50]: "З огляду на те, що сьогодні без державної підтримки, економічно ефективно використання доступних ресурсів відновлюваних джерел енергії (ВДЕ) можливе лише частково, державою передбачаються додаткові механізми стимулювання реалізації проектів використання ВДЕ, які містять надання субсидій, заходи тарифного та податкового регулювання, заходи інституційного характеру. Довгострокове завдання цієї галузі – домогтися природної конкурентоспроможності використання більшості видів ВДЕ порівняно з викопними видами органічного палива".

За період з 2007 р. і до середини 2010 р. близько 557 млрд дол. (\approx 160 млрд дол. на рік) було використано тільки на глобальному ринку відновлюваної енергетики (тобто відбулося 4-кратне збільшення щорічних інвестицій [82]. Наприклад, для Росії щорічна "вартість" державної програми "Енергозбереження та підвищення енергетичної ефективності на період до 2020 року" становить приблизно 30 млрд дол. [50].

Моделювання та аналіз переходу до зеленої економіки показали, що "рівень необхідних додаткових інвестицій становить 1 – 2,5 % від глобального ВВП щорічно до 2050 р." [82]. Автори доповіді впевнені, що такі кошти цілком можна залучити за умови реалізації продуманої державної політики використання інноваційних механізмів фінансування. Зібрати, поділити і ефективно використовувати їх – мета наступного десятиліття, під прапором: "Майбутнє, якого ми хочемо".

3.8.2. Еколого-економічне моделювання на локальному, регіональному та глобальному рівнях

Загроза природним системам походить та накопичується від багатьох локальних впливів людини. Також їх захист і збереження вимагає розуміння прямих і непрямих наслідків антропогенної діяльності за тривалий період часу і на великих територіях. Імітаційні комп'ютерні моделі є одними з кращих засобів для допомоги людям у розумінні складних функцій еколого-економічних систем. Одним із напрямів екологічної економіки є комплексний, різномасштабний, трансдисциплінарний підхід до кількісного еколого-економічного моделювання.

У глобальному масштабі світове співтовариство ставить завдання стабілізації чисельності населення, вирівнювання рівнів розвитку країн, випуск товарів безпечними виробничими процесами, що забезпечують екологічну стійкість. У роботі [4] автори пропонують якісну глобальну модель, яка містить три основні блоки: природне середовище, населення і виробництво товарів та послуг. Чисельність населення планети і його якісні характеристики, що необхідно підтримувати на оптимальному рівні – є заданими умовами моделі. При цьому матеріальні блага і послуги, споживані населенням, не повинні призводити до погіршення параметрів природного середовища. Якість населення оцінюється двома коефіцієнтами. Коефіцієнт здоров'я, що визначається як відношення середньої

тривалості життя (фактичний середній вік померлих протягом поточного року) до біологічної видової тривалості життя. Під коефіцієнтом якості відтворення населення розуміють співвідношення якості повноцінного природного приросту населення до загального приросту.

Геополітичне становище України у світі в межах запропонованої моделі має такий вигляд. Географічне положення, території та їх освоєння вимагають розширеного відтворення основного ресурсу – населення. У той же час стан здоров'я українців і якість їх відтворення мають тенденцію до зниження. Тобто можна прийти до однозначного висновку: геополітичне становище України незадовільне і продовжує погіршуватися. Для окремих регіонів України цю модель можна деталізувати. На відміну від моделей Форрестера і Медоуза в описаній моделі виробництво товарів і послуг, так само як і параметри навколишнього середовища знаходяться залежно від чисельності населення. Людське життя визнається найвищою цінністю, чисельна міра цієї цінності – ступінь наближення середньої тривалості життя до біологічної видової тривалості життя людини. Найвища національна цінність – саме населення країни і забезпечення умов його виживання.

У роботі [176] автор у якості інтегральних індикаторів стійкого розвитку пропонує таку нову макромодель, як індекс антропогенного навантаження на біосферу, для порівняння руйнівної дії на природу окремих країн. Навантаження на біосферу складається з двох взаємопов'язаних видів впливу: біоспоживання (споживання частини біоти у вигляді їжі і деревини) і енергоспоживання, з боку всіх видів господарської діяльності. Їх можна подати у вигляді потужності з урахуванням щільності, тобто навантаження, що припадає на одиницю площі країни (на 1 кв. км). Індекс антропогенного навантаження можна представити як співвідношення щільності антропогенного навантаження для певної країни і для всієї суші планети (без Антарктиди і Гренландії). Якщо потужність біоспоживання відображає населеність, то потужність енергоспоживання – індустріальність країни. Рента за користування біосферою, що виступає як регулятор взаємодії біосфери, людства і країн світу, розраховується на основі індексу антропогенного навантаження. Рента за користування біосферою, яка надає людству середовище проживання зі стабільним кліматом – це така ж фінансова категорія як квартплата за житлоплощу з водо-, тепло- та енергопостачанням. Індекс сталого розвитку також визначається на основі індексу антропогенного навантаження, відображає – співвідношення щільності реального антропогенного навантаження всієї

світової системи (або для окремої країни) до допустимої, для стійкої біосфери щільності антропогенного навантаження. У разі сталого розвитку цей індекс завжди менше одиниці.

Ці показники і моральні принципи є основою запропонованої автором глобальної моделі стійкої системи світового розвитку, яка передбачається планованим розвитком і оптимальним керуванням співтовариства рівноправних країн, що націлене на збереження і вдосконалення людства і навколишнього природного середовища. Модель України, яка оптимально розвивається, зберігає свої духовні і культурні національні особливості, гармонійно вбудовується в модель розвитку стійкої світової системи.

Спираючись на ідеї розроблення системи (ієрархії) взаємопов'язаних математичних моделей (наявність структури в системі моделей дозволяє мати справу із більш досяжними моделями, із точки зору завдань конструктивного синтезу), автори роботи [103] розглядають сталий розвиток соціально-еколого-економічних систем на прикладі окремого регіону. Базою для технології моделювання цього складного об'єкта є оригінальні методи математичного моделювання, системного аналізу, теорії управління, інформатики та штучного інтелекту в умовах багатокритеріальності, конфлікту інтересів, неповноти і неточності інформації, великих структурних збурень. Наведено характеристики деяких отриманих сценаріїв. Розроблено варіант моделі динаміки просторової структури лісу з урахуванням породного складу і розподілу дерев за діаметром.

Для дослідження комплексних проблем навколишнього середовища пропонується методологія побудови природно-соціо-економічних моделей світового розвитку. Таким чином, можна констатувати, що у сфері еколого-економічного моделювання на локальному, регіональному та глобальному рівнях відчувається вагомий внесок сучасних вчених. Причому запропоновані математичні моделі є максимально адаптованими до соціокультурних і духовних особливостей країни, які визначають місце нашої Батьківщини в загальносвітовому процесі сталого розвитку на благо зеленої економіки.

У подальшому ці проблеми мають привернути увагу українських економістів, екологів, соціологів, фахівців у сфері інформації і права, політологів, а також сприятимуть їх участі в широкому спектрі вже існуючих та створенні нових дослідницьких напрямів молодій міждисциплінарній науці – екологічній економіці.

3.8.3. Когнітивне моделювання соціо-еколого-економічної системи в межах регіонального розвитку

Досягнення стану регіональної стійкості в межах зеленої економіки передбачає забезпечення здатності соціально-економічної системи регіону використовувати всі доступні ресурси без порушення рівноважного стану екосистеми. До того ж основою для моделі забезпечення регіональної стабільності є задоволення існуючих потреб території та її населення за допомогою оптимальної організації процесу розподілу обмежених ресурсів. Саме тому сучасна ситуація передбачає розгляд проблеми регіональної стійкості в межах не соціально-економічної, а соціо-еколого-економічної системи. Отже, поняття "еколого-економічна система" останнім часом широко використовується в сучасній науковій літературі. З точки зору системного аналізу систему визначають як взаємопов'язану сукупність елементів, що володіють внутрішньою єдністю і утворюють певну цілісність. Еколого-економічні системи становлять клас складних динамічних систем, що базуються на відносинах між матеріальними структурами, створеними людиною і природою. Крім того, еколого-економічні системи – це системи відкритого типу, тому що в них здійснюється постійний обмін речовиною і енергією між економічною діяльністю та довкіллям. У більш спрощеній моделі еколого-економічної системи сфера суспільного виробництва постає у вигляді "чорної скриньки", на вході до якої надходять ресурси з природного середовища, а на виході утворюються відходи виробничої діяльності, які потрапляють у природне середовище. Таким чином, у цій моделі показані лише потоки речовин, що циркулюють між природним середовищем і сферою суспільного виробництва [213]. У моделі, розробленій Р. Констанці та Х. Делі, економічна підсистема виступає як внутрішня частина еколого-соціальної системи [145]. До того ж функціональна взаємодія і матеріальні потоки утворюють різні форми капіталу: людський (ЛК), природний, представлений відновлюваною (ВПК) і невідновлюваною (НПК) формами, а також виробничий капітал (ВК). Т. А. Акімовою, була запропонована модель еколого-економічної системи, в межах якої економічна і екологічна системи виступають як підсистеми єдиної системи більш високого рівня [3]. У цьому випадку еколого-економічна система являє собою поєднання спільно функціонуючих екологічної та економічної систем, яке володіє емерджентними властивостями. Необхідно відзначити, так як екологічна підсистема

виникає без втручання людини, тому вона належить до природних, а економічна підсистема – до штучних, будучи результатом діяльності людини. Крім того, за своєю природою екологічна підсистема є постійною, тривалість функціонування якої не має часових меж, в той час як економічна підсистема має часовий характер. Однак у межах процесу забезпечення регіональної стабільності цій системі іманентно має бути властива наявність і третьої підсистеми. Мова в цьому випадку йде про соціальну підсистему регіональної соціо-еколого-економічної системи. У межах соціо-еколого-економічної системи відбуваються складні процеси взаємодії населення, природного середовища і господарства, які визначають функціонування цієї системи. Отже, доцільно проводити відображення цих процесів, а також прогнозування можливих варіантів їх розвитку, за допомогою моделювання взаємодії основних елементів соціо-еколого-економічних систем. У зв'язку із цим слід відзначити, що найважливішу групу моделей складають моделі прогнозного характеру. Також за допомогою адаптивного підходу можна досягти ефективного вирішення прогнозних завдань в умовах невизначеності. Розвиток цього підходу в цей час відбувається за кількома основними напрямками. Перший із них, головним чином, орієнтовано, на структурні ускладнення моделей.

У свою чергу, метою другого напрямку є вдосконалення адаптивного механізму, що використовується в цих моделях.

Нарешті, в останньому напрямі реалізується спільне використання адаптивних принципів й імітаційного моделювання [165].

Однак, незважаючи на високу точність прогнозних розрахунків, яка досягається під час використання адаптивних моделей, вони не відображають повне розмаїття можливих траєкторій розвитку цієї системи. Одним із способів, що дозволяють врахувати їх в максимально можливій мірі, є імітаційне моделювання. Саме за допомогою імітаційного моделювання відтворюється поведінка складної системи, представленої структурою взаємозв'язків між її елементами. До того ж імітаційне моделювання застосовується у випадках, коли неможливо побудувати аналітичну модель системи, що враховує причинні зв'язки, наслідки, нелінійності, стохастичні змінні, необхідність імітувати поведінку системи в часі, розглядаючи різні можливі сценарії її розвитку в разі зміни зовнішніх і внутрішніх умов. Класичні методи імітаційного моделювання: метод статистичних випробувань (метод Монте-Карло), статистичне імітаційне моделювання, ситуаційне моделювання (ситуаційне управління). Також у цей

час під імітаційним моделюванням розуміють методи системної динаміки, дискретноподійне моделювання, потокові діаграми, агентне моделювання, ситуаційне моделювання, та все більшої популярності набуває когнітивне моделювання [36].

Поняття "когнітивний" означає здатність розкласти на частини, декомпозувати, аналізувати і синтезувати [100]. Сьогодні основою для сучасних систем динамічного моделювання в економічній сфері є дані когнітивної карти. Когнітивне моделювання базується на формуванні когнітивних карт, що становлять собою знаковий орієнтований граф (орграф) $G =$, в якому V – множина вершин (вершини $V_i \in V$, $i = 1, 2, \dots, k$ є елементами досліджуваної системи), а E – множина дуг (дуги $e_{ij} \in E$, $i, j = 1, 2, \dots, N$ відображають взаємозв'язок між вершинами). Використання в процесі моделювання даних як якісного, так і кількісного характеру дає можливість інструментарій когнітивного аналізу. Причому ступінь використання таких даних може зростати залежно від можливості кількісного оцінювання взаємодіючих чинників, які аналізуються в процесі моделювання [141]. Отже, один із найважливіших чинників успішної реалізації методики когнітивного моделювання – це виявлення елементів, що визначають стійкість регіонального розвитку та які використовуються у зв'язку із цим в якості вершин когнітивної карти. Найбільш перспективним вирішенням зазначеного завдання є використання методології збалансованої системи показників (ЗСП) на основі задіяння рівного обмеженого числа оціночних параметрів для характеристик економічної, соціальної та екологічної стійкості на регіональному рівні. Назва зазначеної системи відображає цільову рівновагу, яка повинна бути досягнута між фінансовими і нефінансовими показниками регіонального розвитку, стратегічним й оперативним рівнем управління (довгостроковими і короткотерміновими цілями), минулими і майбутніми результатами, а також внутрішніми і зовнішніми, щодо регіону, чинниками [118]. Повний набір показників може містити від десятка до декількох сотень одиниць. Занадто велика їх кількість ускладнює процес роботи із ЗСП, занадто мала – може бути недостатньою для виявлення тенденцій і прийняття управлінських рішень. До того ж сукупність показників організовується в струнку систему за причинно-наслідковим принципом таким чином, щоб досягнення необхідних величин індикаторів та досягнення цілей нефінансових перспектив у результаті забезпечило досягнення фінансових орієнтирів. У зв'язку із цим пропонують наступний набір показників, що відображають збалансованість регіонального розвитку, з точки зору пріоритетів розвитку України [35].

Показниками регіональної стійкості є: економічний валовий регіональний продукт на душу населення, частка інноваційно активних підприємств у їх загальній кількості, рівень самозабезпечення продовольчою продукцією, середня заробітна плата в регіоні, соціальний рівень зареєстрованого безробіття, частка витрат на охорону здоров'я, освіту та соціальне забезпечення в регіональному бюджеті, рівень злочинності в регіоні, частка населення, що живе за межею бідності, екологічні викиди забруднюючих речовин в атмосферу регіону, частка порушених земель у загальній площі регіону, обсяг оборотної та послідовно використаної води, величина інвестицій природоохоронного характеру. До того ж кількість і набір цих показників може варіюватися залежно від важливості тих чи інших аспектів регіональної стійкості конкретної території. Формування когнітивної карти досліджуваної системи є початковим етапом когнітивного аналізу. Відштовхуючись від запропонованого набору параметрів регіональної стійкості, які будуть виступати в ролі вершин когнітивної карти забезпечення стійкості регіональної соціо-еколого-економічної системи, цю карту можна представити у вигляді сценаріїв, тобто відображають оптимістичний і песимістичний варіанти розвитку регіональної соціо-еколого-економічної системи досліджуваного району, які спостерігаються в цей час. Базою для моделювання процесу забезпечення регіональної стабільності обираються сценарії, засновані на забезпеченні пріоритетності розвитку в першому випадку промислового виробництва, а в другому – аграрного сектора місцевої економіки. Як показують дослідження, під час збереження існуючих тенденцій розвитку для України переважатиме орієнтація на посилення ролі промислового виробництва, про що свідчать більш високі параметри економічної і соціальної стійкості в цих умовах. Що стосується параметрів екологічної стійкості, то вони демонструють приблизно однакову спрямованість свого розвитку в разі реалізації обох сценаріїв. Під час розроблення оптимістичних сценаріїв розвитку регіональної соціо-еколого-економічної системи можливо розглядати не менше трьох варіантів розвитку ситуації, які полягають у поліпшенні економічної, екологічної та соціальної ситуації в регіоні.

Відзначаючи позитивний вплив на процес забезпечення регіональної стабільності всіх трьох варіантів розвитку подій, слід вказати на те, що максимальні параметри рівня як економічної і соціальної, так і екологічної стійкості досягаються за умови позитивного розвитку ситуації в економіці регіону. Це виглядає цілком природним та може вказувати

на зростання величини валового регіонального продукту. Нарешті, торкаючись моделювання песимістичних варіантів розвитку подій в регіоні, відзначимо, що уявити стан речей у ситуаціях, протилежних проаналізованими нами оптимістичним сценаріями, не складно. Отже, ми розглянули великий спектр ситуацій негативного характеру. Перша із цих ситуацій характеризується зниженням обсягу валового регіонального продукту, погіршенням умов сільськогосподарського виробництва і скороченням фінансування соціальних програм. У межах другої ситуації знижується рівень продовольчого самозабезпечення і рівень інвестицій на охорону навколишнього середовища. Нарешті, під час реалізації третьої ситуації спостерігається антиінноваційний сценарій регіонального розвитку. Як ми можемо наочно побачити, всі три розглянутих варіанти характеризуються вкрай негативними наслідками для всіх блоків забезпечення регіональної стабільності. При цьому, якщо перший варіант призводить до найбільш негативної динаміки розвитку ситуації в соціальній сфері, то в другому і третьому випадках негативні наслідки відчуває на собі регіональна економіка. Аналізуючи отримані результати, які відображають можливі тенденції розвитку регіональної соціо-еколого-економічної системи, можна констатувати, що тенденції, які моделюються, в значній мірі відповідають теоретичним уявленням про взаємозв'язок чинників, що впливають на стійкість даної системи, та їх взаємовплив, а також реально спостережуваним тенденціям навіть за досить спрощених умов. Низка отриманих за підсумками проведеного дослідження висновків дозволяє сформулювати практичні механізми, метою яких є забезпечення необхідного рівня стійкості регіонального розвитку України.

3.9. Математичне моделювання забруднення атмосфери

3.9.1. Теоретичні основи забруднення атмосфери

Атмосфера – газова оболонка Землі, яка є своєрідним буфером між нею і Космосом, носієм тепла і вологи, через неї відбувається фотосинтез та обмін енергією, регулюється теплообмін, радіаційний та тепловий баланси, визначається клімат планети. Найбільше екологічне значення атмосфери – це захист усіх живих організмів Землі від згубного впливу сонячного випромінювання та падіння метеоритів, регулювання сезонних

і добових температур. Атмосфера також впливає на характер і динаміку всіх екзогенних процесів у літосфері та гідросфері [7].

Стале зростання обсягів виробництва та процесів урбанізації призводить до збільшення антропогенного навантаження на атмосферу. У наш час забруднення повітряного басейну в більшості країн світу є великою соціальною й економічною проблемою. Особливо це стосується великих міст, промислових агломерацій, мегаполісів.

Атмосфера забруднюється шляхом привнесення до неї або утворення в ній забруднюючих речовин у концентраціях, що перевищують нормативи якості або рівень природного вмісту. До найбільш розповсюджених забруднювачів належать оксиди карбону, сульфуру, нітрогену, вуглеводневі сполуки, поліциклічні ароматичні вуглеводні, пил [73].

Серед основних галузей економіки, що значно впливають на повітряний басейн, виділяють паливно-енергетичний комплекс, металургію, хімічну промисловість, виробництво будівельних матеріалів, транспорт, сільське господарство та ін.

Забруднення атмосфери загрожує здоров'ю людини, завдає великих економічних збитків, а також негативно впливає на рослинний і тваринний світ. Зростання концентрації деяких забруднювачів у повітрі призводить до появи таких глобальних екологічних проблем, як руйнування озонового шару Землі, випадання кислотних дощів, формування фотохімічного смогу, та, насамперед, глобальне потепління клімату [25].

Основним напрямом діяльності із зменшення шкідливого впливу на навколишнє природне середовище, зокрема на атмосферу, є впровадження комплексу організаційно-технічних заходів, які б забезпечували збільшення обсягів виробництва під час утримання на заданому рівні обсягів викидів від промислових підприємств та транспорту. Базою для вибору ефективних шляхів розвитку технологічних процесів може стати розроблення обґрунтованих прогнозів стану довкілля шляхом математичного моделювання складних фізико-хімічних процесів, що відбуваються в ньому. Такий підхід обумовлений, з одного боку, швидким зростанням використання і можливостей обчислювальної техніки, порівняно низькою вартістю розроблення моделей та достатньо високою точністю розрахунків, а з іншого – дуже обмеженими можливостями лабораторного або натурного моделювання складних процесів навколишнього середовища. Але саме на підставі багаторічних спостережень за зміною стану довкілля та лабораторних досліджень проводять математичне моделювання, без яких воно залишається відірваним від дійсності [72].

Для прогнозування забруднення повітря використовують різноманітні методи та математичні моделі розповсюдження забруднюючих речовин від джерел викидів, які враховують закономірності просторово-часової динаміки розподілу концентрації домішок. Наукові дослідження вказують на те, що величина рівня забруднення повітря цією речовиною в конкретній точці формується під впливом таких чинників, як [189]:

- характеристика джерела викидів;
- параметри пило-газо-повітряної суміші, що виходить із джерела;
- географічне місця, рельєф місцевості та кліматичні умови розміщення джерела викидів;
- координати пункту дослідження забруднення повітря щодо джерела викидів.

Під час моделювання процесів забруднення атмосферного повітря необхідно розрізняти точкові та лінійні джерела викидів.

Точковим стаціонарним виступає джерело, яке розташоване в певному місці і викидає забруднюючі атмосферу речовини з встановленого отвору. Викид забруднювачів відбувається, як правило, на певній висоті, що обумовлено висотою труби. Це, зі свого боку, призводить до поширення забруднюючих речовин на значні території і утворення області стійких забруднень у промислових районах [6; 10].

У більшості випадків точковими стаціонарними джерелами забруднення атмосферного повітря є димові труби промислових підприємств, технологічних установок, теплоелектростанцій, опалювальних котелень, печей і сушарок, а також вентиляційні труби, витяжні шахти, дефлектори, витяжки тощо.

До лінійних джерел забруднення повітряного басейну належить автотранспорт та промислові об'єкти, вентиляція яких здійснюється через аераційні ліхтарі, що являють собою отвори в дахах корпусів великої довжини. У цьому випадку розповсюдження домішок відбувається на невеликій висоті і практично завжди має локальний характер [10].

Розглянемо основні закономірності розсіювання в атмосфері забруднюючих речовин, що викидаються з точкового стаціонарного джерела (рис. 3.43) [7; 189].

Забруднюючі речовини викидаються в атмосферне повітря з певною швидкістю і температурою, що, зазвичай, відрізняються від відповідних характеристик навколишнього середовища. Спочатку рух викидів

має вертикальну складову, що пояснюється початковою вертикальною швидкістю потоку і різницею температур, поки не зникне вплив цих чинників. Такий вертикальний підйом викидів називають підйомом факела [189]. Збільшення швидкості вітру призводить до зменшення висоти підйому факела, а збільшення різниці температур, навпаки, до збільшення цієї висоти [72].

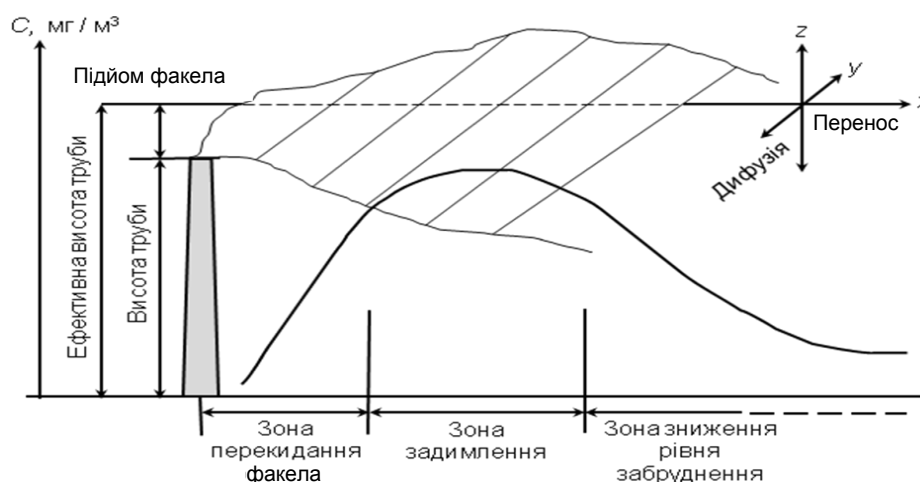


Рис. 3.43. Розсіювання забруднюючих речовин під факелом викиду точкового джерела

Подальше розповсюдження забруднюючих речовин у повітрі пов'язано з атмосферною турбулентністю, яка відбувається за рахунок молекулярної і турбулентної дифузії. У цьому процесі молекулярна дифузія відіграє не значну роль, отже, розсіювання домішок у повітрі підпорядковується законам турбулентної дифузії.

Атмосферна турбулентність є результатом двох процесів: конвективної і механічної турбулентності. Конвективна турбулентність є результатом нагрівання атмосферного повітря, що призводить до виникнення вертикального температурного градієнта. Механічна турбулентність обумовлена зміною з висотою швидкості вітру. За різних метеорологічних умов може переважати та чи інша форма турбулентності. Конвективна турбулентність, звичайно, має місце в сонячні дні, коли швидкість вітру невелика, а механічна – у вітряні ночі. Також на механічну турбулентність впливає рельєф поверхні і розміщення будівель [72].

Горизонтальне перенесення забруднюючих речовин (адвекція) залежить від швидкості вітру, розміщення джерела викиду (труби) відносно

перешкод руху повітря, характеру рельєфу місцевості за напрямком вітру, стійкості атмосфери тощо. У разі збільшення швидкості вітру збільшується відстань від джерела забруднення до місця, де спостерігається максимальна приземна концентрація забруднюючих речовин [72].

Комбінація процесів перенесення і дифузії забруднювачів у повітрі називається атмосферною дисперсією.

Також має значення агрегатний стан забруднювачів. Викиди можуть складатись із лише газових домішок, або містити тверді частинки (пил). За наявності у викидах зважених частинок потрібно враховувати процеси їх осадження під дією сили тяжіння. Розсіювання в атмосфері дисперсних частинок (діаметр менше 10 мкм), що мають незначну швидкість осадження, підпорядковується тим самим закономірностям, що і газоподібні домішки. Для великих частинок пилу швидкість їх осадження під дією сили тяжіння зростає. Це призводить до підвищення концентрації дисперсних частинок у приземному шарі атмосфери порівняно з концентрацією газів, які одночасно з ними було викинуто з одного джерела [189].

Треба зазначити, що зона задимлення, яка показана на рис. 3.43, є найбільш небезпечною для здоров'я людини. Розмір цієї території залежно від метеорологічних умов може складати від 10 до 50 висот димової труби. За санітарними нормами зона задимлення не повинна використовуватися під селітебні забудови.

3.9.2. Характеристика моделей та методів моделювання забруднення атмосфери

На сьогодні не запропоновано єдиної фізико-математичної моделі, яка враховує і пояснює всі аспекти процесу атмосферної дифузії. Розвиток методів моделювання забруднення повітря залежно від чинників, що характеризують середовище і джерело викиду, здійснюється за двома напрямками.

Перший напрям ґрунтується на теорії атмосферної дифузії, на основі якої розроблено, так звані градієнтні моделі або моделі турбулентної дифузії. Другий напрям пов'язаний із статистичною теорією турбулентності, на підставі якої створено Гаусову модель розсіювання забруднюючих речовин.

Згідно з теорією атмосферної дифузії процес поширення шкідливих речовин у повітрі описується рівнянням турбулентної дифузії. Це рівняння властивостям руху домішки в системі координат, яка зафіксована у просторі і передбачає пропорційність потоку забруднюючої речовини градієнту її концентрації в повітрі. Модель використовують для розрахунків розсіювання домішок в умовах розвинутої турбулентності і визначають тільки разові двадцятихвилинні концентрації [10; 13; 72].

Модель турбулентної дифузії є більш універсальною, оскільки достатньо точно імітує фізичні процеси, які описують розповсюдження речовини в атмосфері. Вона дозволяє досліджувати забруднення від джерел різного типу в разі різних характеристик середовища над територією зі складним рельєфом. Таке моделювання дає добрі результати в широкому діапазоні масштабів від локального до регіонального [17]. На практиці для розв'язання рівняння турбулентної дифузії застосовують аналітичні та чисельні методи розрахунків [1; 10].

Під час аналітичного розв'язання моделі отримують математичний вираз у вигляді аналітичної функції досліджуваного параметру (концентрації забруднюючої домішки в повітрі) від параметрів системи і характеристик процесу (часу, просторових координат та ін.) [72]. Перевага аналітичних методів полягає в тому, що вони надають точний розв'язок математичної задачі. Це дозволяє використовувати їх для перевірки більш складних математичних моделей або для ідентифікації параметрів моделі. Наприклад, для визначення коефіцієнтів дифузії за результатами даних експериментальних досліджень. Але недоліком такого підходу є те, що аналітичний розв'язок можна одержати лише для спрощених (ідеалізованих) фізичних процесів [13].

У моделях, де застосовуються чисельні методи розв'язання, через складність математичного опису взаємозв'язків між компонентами системи аналітичні вирази не можуть бути отримані в явному вигляді. У цьому випадку, показники стану атмосферного повітря за різних параметрів процесу розсіювання домішок одержують тільки наближеними методами, як правило, за допомогою ЕОМ. Такий метод моделювання ще називають імітаційним [72].

До недоліків чисельних методів слід віднести складність у користуванні за рахунок, по-перше, великого обсягу необхідної інформації (тривимірного поля вітру для досліджуваної території, кількості та інтенсивності опадів, карти рельєфу місцевості тощо), по-друге – потреби в обчислювальних ресурсах [17].

Моделі поширення забруднювачів на основі статистичного опису процесів будуються на припущенні, що факел забруднюючої речовини має Гаусове розподілення і концентрація в заданій точці за напрямком вітру може бути розрахована за допомогою рівняння Гауса [10; 13; 72].

Гаусову модель найчастіше використовують для прогнозування довготривалого забруднення атмосферного повітря від джерел, що розташовані на рівні земної поверхні або на деякій висоті. Вона працює в стаціонарному режимі за умови незмінності метеорологічних параметрів у часі і просторі [17]. Її застосовують під час планування землекористування, вибору місця розташування промислових і енергетичних об'єктів, розроблення стратегії заміни типу сировини, палива, допоміжних матеріалів на екологічно небезпечних підприємствах [43].

Модель розсіяння Гауса широко використовують завдяки простоті і отриманню результатів, які добре узгоджуються з експериментом. Але застосування моделі обмежене локальним масштабом (до 20 км від джерела викиду), відсутністю надійних метеорологічних даних і характеристик дифузійного переносу забруднюючих домішок особливо для складного рельєфу місцевості, а також у разі стабільного приземного інверсійного шару [43].

Обидва напрями моделювання забруднення атмосфери лише наближено відображають деякі особливості поширення домішок у повітрі. Кількісні оцінювання, отримані за формулами і експериментально, значно розходяться. Тому в розрахункові формули вводять поправочні коефіцієнти або розробляють інші емпіричні та теоретичні співвідношення. Таким альтернативним методом математичного моделювання стала методика визначення локального впливу викидів підприємств на атмосферу [17].

У методиці ступінь забруднення повітря викидами з безперервно діючих джерел визначають за найбільшим розрахованим значенням разової концентрації забруднюючих речовин у приземному шарі атмосфери. Така концентрація встановлюється на деякій відстані від джерела викиду за умови несприятливих метеорологічних параметрів, коли швидкість вітру досягає небезпечного рівня і в приземному шарі відбувається інтенсивний турбулентний обмін [10, 72, 189].

Методика ОНТ-86 належить до моделей емпіричного класу. Це найпростіші моделі, які створюються на основі первинної обробки експериментальних даних і мають вигляд алгебраїчних співвідношень. Вони виступають підґрунтям для розроблення моделей інших типів, зокрема

імітаційних. Перевагами такого типу моделювання є простота розрахунків без використання спеціальних математичних функцій; відсутність у користувача спеціальних знань основних законів, які описують процеси у довкіллі; зручність та економічність для практичної реалізації [13].

Емпіричні моделі є максимально спрощеними, тому не можуть забезпечити необхідну точність оцінювання якості атмосферного повітря. Головними недоліками моделей є те, що вони мають прив'язку до конкретних географічних умов проведення досліджень, не надають просторове розподілення концентрації забруднюючих речовин в атмосфері, і можуть втрачати фізичний зміст за деякими значеннями вхідних параметрів [13]. Але емпіричні моделі успішно використовують для експрес-оцінювання середньорічного забруднення повітря і надають інформацію про доцільність подальшого аналізу забруднення атмосфери цієї території.

Для систематизації і оцінювання рівня забруднення атмосфери за певний період часу (доба, місяць, рік) на цій території використовують кілька статистичних показників якості повітря. У цьому випадку результати спостережень за концентраціями шкідливих домішок на стаціонарних чи маршрутних постах, або під факелами підприємств, розглядають як сукупність випадкових (стохастичних) величин – одиничних разових показників забруднення атмосферного повітря [10, 189]. Таким чином, статистичні моделі розробляють на основі стохастичних рівнянь, які встановлюють співвідношення між показниками якості повітря і метеорологічними даними. До того ж розрізняють регресійні та авторегресійні моделі [16].

Статистичні моделі не потребують застосування обчислювальної техніки і є економічними з точки зору вартості розроблення. Але вони не можуть бути використані поза межами початкових умов (метеорологічних й просторових), які визначаються вихідними даними для їх розроблення та оптимізації. Результати статистичного оброблення не можуть бути перенесені на інші об'єкти без попереднього переоцінювання емпіричних коефіцієнтів [43].

До недоліків методу також належать достатньо високі значення похибок за довгостроковими прогнозами. Для підвищення достовірності результатів у моделях вводять граничні умови, які є специфічними для кожного конкретного завдання прогнозу забруднення атмосферного повітря [16]. Тому статистичну модель використовують лише в тому випадку, коли вона надає кращі результати, ніж чисельна імітаційна модель.

3.9.3. Модель турбулентної дифузії

Теоретичні закономірності поширення забруднюючих речовин в атмосфері визначають шляхом розв'язання рівняння турбулентної дифузії. За певних початкових і граничних умов загальне диференціальне рівняння має наступний вигляд [10; 16; 189]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} k_i \frac{\partial C}{\partial x_i} - aC, \quad (3.125)$$

де C – концентрація домішки, $г/м^3$;

T – час, $с$;

i – напрямок вісі координат ($i = 1, 2, 3$);

x_i – координати;

u_i – складові середньої швидкості переміщення домішки, $м/с$;

k_i – коефіцієнти турбулентної дифузії, $м^2/с$;

a – коефіцієнт, який передбачає зміну концентрації домішки за рахунок її перетворення (хімічної реакції, осадження, фотосинтезу тощо).

Рівняння (3.125) описує просторово-часовий розподіл середніх концентрацій забруднювачів у повітрі, у зв'язку із чим може розглядатися як прогностичне рівняння.

У разі використання декартової системи координат вісі x_1 і x_2 розташовують у горизонтальній площині і позначають через x і y відповідно, а вертикальна вісь x_3 – через z , як показано на рис. 3.43. Враховуючи це, введемо наступні позначення [10; 189]:

$u_1 \equiv u$, $u_2 \equiv v$ – горизонтальні швидкості вітру по координатах x та y відповідно;

$u_3 \equiv w$ – вертикальна швидкість вітру по координаті z ;

$k_1 \equiv k_x$, $k_2 \equiv k_y$ – коефіцієнти горизонтальної дифузії;

$k_3 \equiv k_z$ – коефіцієнт вертикальної дифузії.

Тоді рівняння (3.125) можна записати в наступному вигляді:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} k_x \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} k_y \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial C}{\partial z} - aC \end{aligned} \quad (3.126)$$

Для використання рівняння (3.126) на практиці його необхідно спростити, вводячи наступні граничні умови [10; 129; 189]:

1) якщо вісь X співпадає з напрямком швидкості вітру, то $v = 0$;

2) за наявності вітру, членом з k_x , який враховує дифузію за віссю x , можна знехтувати, оскільки дифузійний потік домішки в цьому напрямку менше конвективного. Його враховують за умов складного рельєфу, коли напрямок вітру негоризонтальний і визначається відстанню x ;

3) змінення концентрації домішки в атмосфері із часом зазвичай носить квазістаціонарний характер, отже, член $\partial C / \partial t$ можна виключити, прийнявши $\partial C / \partial t = 0$. Він має значення тільки в окремих випадках, зокрема під час визначення екстремальних концентрацій речовин від наземних (лінійних) джерел за умови слабого вітру і низької інтенсивності турбулентного обміну;

4) у випадку легкої домішки, яка не має власної швидкості, вертикальне переміщення в атмосфері над горизонтальною однорідною поверхнею дуже мале, тому можна рахувати, що $w = 0$;

5) у випадку важкої домішки, на яку впливає сила тяжіння, w являє собою швидкість осадження, яка входить до рівняння із знаком "-";

6) у випадку умовно інертної домішки (консервативної), з якою протягом часу не відбуваються перетворення, приймаємо $a = 0$.

Отже, рівняння (3.126) набуває вигляду:

• для легкої домішки:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} k_y \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial C}{\partial z}; \quad (3.127)$$

• для важкої домішки:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} - w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y} k_y \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial C}{\partial z}. \quad (3.128)$$

За наявності точкового джерела викиду з висотою H (м) та координатами ($x = 0, y = 0, z = H$) за граничні умови приймають [10]:

$$uC = M\delta(y)\delta(z - H) \quad \text{при } x = 0,$$

де M – потужність джерела викиду (в загальному випадку розглядається як функція часу τ), г/с;

$\delta(\xi)$ – дельта-функція.

У ході прогнозування забруднення атмосферного повітря головне завдання полягає у визначенні очікуваних концентрацій забруднюючих речовин у приземному шарі в довільній точці простору.

Для аналітичного розв'язання моделей турбулентної дифузії (3.127) та (3.128) з урахуванням фізичних основ процесу за Берляндом [10] виражають: $k_y = k_0 u$, $u = u_1 z^n$, $k_z = k_1 z$.

У цьому випадку, наземну концентрацію консервативного забруднювача, який викидається із точкового джерела за умови $z = 0$, можна розрахувати за наступними рівняннями [10; 125]:

- для легкої домішки:

$$C = \frac{M}{2(1+n)k_1 \sqrt{\pi k_0} x^3} \exp\left(-\frac{y^2}{4k_0 x} - \frac{u_1 H^{1+n}}{(1+n)^2 k_1 x}\right); \quad (3.129)$$

- для важкої домішки:

$$C = \frac{M H^{\omega(1+n)} u_1^\omega}{2(1+n)^{1+2\omega} \Gamma(1+\omega) (k_1 x)^{1+\omega} \sqrt{\pi k_0} x} \exp\left(-\frac{y^2}{4k_0 x} - \frac{u_1 H^{1+n}}{(1+n)^2 k_1 x}\right); \quad (3.130)$$

$$\omega = \frac{w}{k_1(1+n)}; \quad w = 1,3 \cdot 10^{-2} \rho_n r_n^2, \quad (3.131)$$

де n , k_0 , k_1 , u_1 , Γ – параметри моделі відповідно Берлянду [10];

w – швидкість падіння сферичних частинок, яку визначають за формулою Стокса, см/с;

ρ_n – густина частинок пилу, г/см³;

r_n – радіус частинок пилу, мкм.

Забруднювачі, що викидаються з різних джерел, зазвичай мають початкову швидкість підйому та часто перегріті відносно навколишнього повітря. Тому в розрахунках розглядають деяке віртуальне джерело з ефективною висотою труби (H), яку визначають за формулою [10; 72; 189]:

$$H = h + \Delta h, \quad (3.132)$$

де h – фактична висота джерела викиду, м;

Δh – висота початкового підйому факела, яка залежить від швидкості вітру і перегріву димових газів щодо навколишнього повітря, м.

З урахуванням проведених досліджень, дослідниками була запропонована наближена формула для визначення початкового підйому факела [10; 189]:

$$\Delta h = \frac{3,75w_0R_0}{u} + \frac{1,6gV_1\Delta T}{T_a u^3}; \quad V_1 = \pi R_0^2 w_0; \quad \Delta T = T_b - T_a, \quad (3.133)$$

де w_0 – початкова швидкість газів на виході із джерела, м / с;

R_0 – радіус джерела викиду (труби), м;

u – швидкість вітру, м/с;

V_1 – об'ємна витрата суміші на виході із джерела, м³/с;

ΔT – перегрів суміші щодо навколишнього повітря, К;

T_a – температура атмосферного повітря, К;

T_b – температура суміші на виході із джерела, К.

Відомо більш наближене аналітичне рішення рівняння (*.3), яке запропоновано Лаурі та Бобелом для легкої консервативної домішки, що викидається з точкового джерела [72]:

$$C = \frac{M}{4\pi\pi\sqrt{k_y k_z}} \exp\left(-\frac{y^2}{4k_y \frac{x}{u}} - \frac{(z-H)^2}{4k_z \frac{x}{u}}\right), \quad (3.134)$$

де r – відстань від джерела викиду до точки, де визначається концентрація домішки, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ (м).

Рівняння (3.134) може використовуватися лише на значних відстанях від джерела викиду. В іншому випадку, на малих відстанях, спостерігається значна розбіжність між розрахунковим та експериментальним значеннями концентрацій забруднювачів [72].

Для наземних (лінійного) джерел ($y = 0, z = 0$) концентрація домішки вздовж лінії, яка розташована під віссю факела викиду (вісь x), може бути визначена за рівнянням [72]:

$$C = \frac{M}{4\pi\pi\sqrt{k_y k_z}}. \quad (3.135)$$

Рівняння (3.135) вказує на те, що концентрація забруднювача не залежить від швидкості вітру u і обернено пропорційна відстані від джерела викиду x . Але експериментальні спостереження доводять, що концентрація обернено пропорційна добутку $ux^{1,76}$ [72]. Таким чином, для більш достовірного прогнозування забруднення атмосферного повітря застосовують чисельні методи розв'язання рівняння (3.127) або різні модифікації моделі турбулентної дифузії.

3.9.4. Модель розсіяння Гауса

Найбільш розповсюдженою модифікацією моделі турбулентної дифузії є модель факела Гауса [6; 10; 16; 72]. Її використовують для визначення локальної дисперсії, а її аналітичний розв'язок отримано для стаціонарних та нестаціонарних умов. Відповідно цієї моделі розсіяння забруднення в атмосферному повітрі здійснюється за напрямком вітру у вигляді факела, а в поперечному розрізі факела концентрація домішки має розподіл Гауса (нормальний розподіл) [10]:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (3.136)$$

де $f(x)$ – функція для змінної x ;

σ – стандартне відхилення;

μ – будь-яке дійсне число.

Рівняння для розсіювання забруднювачів має вигляд двовимірного розподілу Гауса. Тоді модель забруднення атмосфери для точкового джерела з ефективною висотою H за постійної швидкості вітру u (стаціонарних умовах) і відсутності перетворення домішки описується формулою [72]:

$$C = \frac{M}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right), \quad (3.137)$$

де σ_y – дисперсія розсіяння домішки в горизонтальному напрямку, м;

σ_z – дисперсія розсіяння домішки у вертикальному напрямку, м.

У рівнянні (3.137) горизонтальна і вертикальна дисперсії є функціями від координати X і визначаються виразами [6; 72]:

$$\sigma_y = \sqrt{2k_y \frac{x}{u}}; \quad \sigma_z = \sqrt{2k_z \frac{x}{u}}. \quad (3.138)$$

Враховуючи це, слід відмітити, що залежність концентрації забруднюючих речовин, яка описується формулою (3.134) для легкої консервованої домішки, з точністю до коефіцієнта перед експоненціальним множником, співпадає з двовимірним розподілом Гауса (3.137) [6; 72].

У випадку, коли висота джерела викиду невелика, необхідно врахувати ефект відбиття газів, які розповсюджуються в атмосферному повітрі, від поверхні землі. Для цього застосовують метод віртуального джерела, відповідно якого концентрацію забруднювача в деякій точці визначають сумою двох концентрацій. Одну концентрацію встановлюють під час викиду забруднювача із реального джерела з ефективною висотою H без ефекту відбиття, іншу – із віртуального джерела з висотою H , враховуючи ефект відбиття [72].

Тоді загальний вигляд моделі розсіяння Гауса для легкої домішки, що викидається з точкового джерела в стаціонарних умовах, буде таким:

$$C = \frac{M}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \left[\exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right]. \quad (3.139)$$

Якщо розглядається джерело викиду, розташоване на рівні поверхні землі ($z = 0$), то рівняння (3.139) набуває вигляду [72]:

$$C = \frac{M}{\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{H^2}{2\sigma_z^2}\right). \quad (3.140)$$

Також розроблена модель Гауса для розсіяння легкої консервативної домішки в нестационарних умовах, яка описується формулою [16]:

$$C = \frac{M}{(2\pi)^{2/3} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2}\right) \times \left[\exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right]. \quad (314)$$

У разі побудови моделі розсіяння Гауса для важкої домішки, яка викидається точковим джерелом у стаціонарному режимі, слід врахувати наступне. Час її переміщення за напрямком вітру від джерела викиду на відстань x дорівнює $t = x / u$. У цьому випадку вертикальна координата частинки, що знаходиться на відстані x від джерела, становитиме $z = H - vx/u$. Тоді концентрацію дисперсних частинок у довільній точці простору розраховують відповідно рівняння [72]:

$$C = \frac{M}{2\pi t u_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{\left[z - \left(H - \frac{vx}{u}\right)\right]^2}{2\sigma_z^2}\right). \quad (3.142)$$

Значний інтерес із точки зору забруднення атмосферного повітря має величина швидкості випадіння твердих речовин (пилу) на поверхню землі в місці забруднення w_n ($г/(м^2 \cdot с)$). Вона розраховується за виразом: $w_n = Cv$.

Враховуючи це, отримаємо рівняння швидкості випадання забруднюючих частинок із факела викиду точкового джерела в моделі Гауса [72]:

$$w_n = \frac{Mv}{2\pi t u_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{\left[z - \left(H - \frac{vx}{u}\right)\right]^2}{2\sigma_z^2}\right). \quad (3.143)$$

Для практичного використання наведених вище рівнянь окрім фізичних даних (координат, потужності викиду, ефективної висоти джерела викиду) необхідно також знати величини u , σ_y , σ_z .

Зазвичай застосовують значення швидкості вітру u , усереднене за всією течією. Через труднощі її визначення беруть середню швидкість вітру на рівні точці виходу з джерела викиду.

Значення величин просторових дисперсій σ_y і σ_z збільшуються з відстанню x від джерела викиду. На швидкість цієї зміни впливає інтенсивність турбулентності і, тим самим, на стійкість атмосфери. На практиці параметри σ_y і σ_z встановлюють для різних класів стійкості атмосфери за різними відстанями від джерела викиду зі спеціальних діаграм, побудованих на основі експериментальних досліджень [10; 72].

3.9.5. Модель розрахунку максимального приземного забруднення атмосферного повітря

Головним документом в Україні, що застосовується для прогнозування забруднення атмосферного повітря, є "Методика розрахунку концентрацій в атмосферному повітрі шкідливих речовин, що містяться у викидах підприємств. ОНД-86" [104]. Ця методика використовує формули, що одержані під час розв'язання рівняння турбулентної дифузії. У ній окремі чинники об'єднані в усереднені групи і чисельно враховуються комплексними узагальненими коефіцієнтами.

Згідно з методикою ступінь забруднення атмосферного повітря визначають найбільшим розрахунковим значенням концентрації домішки в приземному шарі, що відповідає несприятливим метеорологічним умовам. Ці умови характеризуються інтенсивним турбулентним обміном і значенням небезпечної швидкості вітру [10; 72; 189]. Для кожного джерела існує деяка небезпечна швидкість вітру u_m , за якої спостерігається максимальна концентрації домішки C_m на відстані x_m від джерела викиду за умови $\partial C / \partial x = \partial C / \partial y = 0$.

Під час визначення небезпечної швидкості вітру має значення чи є викид гарячим або холодним, оскільки перегрів суміші, що викидається, посилює ефективний підйом факела із джерела. Отже, чим більше перегрів, тим більше повинна бути швидкість вітру, за якої в приземному шарі формується максимальна концентрація забруднюючої речовини.

Віднесення викидів до нагрітих або холодних проводять згідно з параметром f ($\text{м}/(\text{с}^2 \cdot ^\circ\text{С})$) [10]:

$$f = 10^3 \frac{w_0 D}{H^2 \Delta T}, \quad (3.144)$$

де w_0 – швидкість виходу газової суміші з гирла джерела викиду, $\text{м}/\text{с}$;

D – діаметр гирла джерела (труби), м ;

H – ефективна висота джерела викиду над рівнем землі, м ;

ΔT – різниця між температурою газової суміші, що викидається, і температурою навколишнього повітря, $^\circ\text{С}$.

Відповідно розрахованого значення параметру f проводять наступну класифікацію:

- якщо $f \leq 100$ – викид гарячий;
- якщо $f > 100$ (або при $\Delta T \cong 0$) – викид холодний.

Аналіз наближених аналітичних рішень рівняння турбулентної дифузії вказує на те, що величина небезпечної швидкості вітру u_M залежить від параметра v_M ($\text{м} / \text{с}$), який розраховується для різних умов [10]:

- гарячий викид:

$$v_M = 0,65^3 \sqrt{\frac{V_1 \Delta T}{H}}, \quad (3.145)$$

де V_1 – об'ємна витрата газової суміші, що викидається, $\text{м}^3 / \text{с}$;

- холодний викид:

$$v'_M = 1,3 \frac{w_0 D}{H}. \quad (3.146)$$

Для точкового джерела небезпечна швидкість вітру дорівнює [10]:

- | | | |
|-------------------|--|---------------------------------------|
| • гарячий викид: | при $v_M \leq 0,5 \text{ м} / \text{с}$, | $u_M \leq 0,5 \text{ м} / \text{с}$, |
| | при $0,5 < v_M \leq 2 \text{ м} / \text{с}$ | $u_M \leq v_M$; |
| | при $v_M \leq 2 \text{ м} / \text{с}$ | $u_M = 1 + 0,12\sqrt{f}$; |
| • холодний викид: | при $v'_M \leq 0,5 \text{ м} / \text{с}$ | $u_M \leq 0,5 \text{ м} / \text{с}$; |
| | при $0,5 < v'_M \leq 2 \text{ м} / \text{с}$ | $u_M \leq v'_M$; |
| | при $v'_M > 2 \text{ м} / \text{с}$ | $u_M = 2,2 v'_M$. |

Для лінійного джерела небезпечну швидкість вітру визначають як $u_m = u'_m$ [10], де u'_m належить до точкового джерела з круглим гирлом, яке еквівалентне цьому лінійному джерелу і розраховується за наведеними вище формулами для u_m з використанням еквівалентних значень діаметра джерела $D = D_e$ і об'ємної витрати газової суміші $V_1 = V_e$. Еквівалентні параметри встановлюють наступним чином:

$$D_e = \frac{2LV_1}{L^2w_0 + V_1}; \quad V_e = \frac{\pi D_e^2}{4} w_0, \quad (3.147)$$

де L – довжина лінійного джерела викиду, м.

Для групи джерел із різними параметрами викидів небезпечна швидкість вітру $u_{m,c}$ наближено характеризується середньозваженою величиною, яка розраховується за формулою [10]:

$$u_{m,c} = \frac{\sum_{i=1}^N (u_{m,i} C_{m,i})}{\sum_{i=1}^N C_{m,i}}, \quad (3.148)$$

де $u_{m,i}$, $C_{m,i}$ – розрахункові значення небезпечної швидкості вітру та максимальної концентрації речовини для i -того джерела, м/с, мг/м³;

N – кількість джерел викидів.

Максимальне значення приземної концентрації шкідливої речовини в разі викиду газової суміші з точкового джерела з круглим гирлом на відстані X_m від джерела, що досягається за несприятливих метеорологічних умов, визначають наступним чином [10; 72; 104; 189]:

- гарячий викид:

$$C_m = \frac{AMFm\eta}{H^2 \sqrt[3]{V_1 \Delta T}} \quad (\text{одне джерело}); \quad (3.149)$$

$$C_m = \frac{AMFm\eta}{H^2} \sqrt[3]{\frac{N}{V \Delta \Delta}} \quad (\text{група джерел}); \quad (3.150)$$

- ХОЛОДНИЙ ВИКИД:

$$C_m = \frac{AMF\eta\eta}{H^{4/3}} \frac{D}{8V_1} \text{ (одне джерело);} \quad (3.151)$$

$$C_m = \frac{AMF\eta\eta}{H^{4/3}} \frac{DN}{8V} \text{ (група джерел),} \quad (3.152)$$

де A – коефіцієнт, що залежить від температурної стратифікації атмосфери;

F – безрозмірний коефіцієнт, що враховує швидкість осідання забруднюючих речовин у повітрі;

m , n – безрозмірні коефіцієнти, що враховують умови виходу газової суміші із гирла джерела викидів;

η – безрозмірний коефіцієнт, що враховує рельєф місцевості (у випадку рівної або слабкопересіченої місцевості з перепадом висот не більше 50 м / км, приймається $\eta = 1$);

V – сумарний об'єм газової суміші від усіх джерел викидів, м³/с.

Коефіцієнт A відповідає несприятливим метеорологічним умовам, за яких концентрація шкідливих речовин у приземному шарі атмосфери максимальна. Для розташованих в Україні джерел [104]:

- північніше 52° пн. ш. $A = 160$;
- в зоні від 50 до 52° пн. ш. $A = 180$;
- південніше 50° пн. ш. $A = 200$.

Значення безрозмірного коефіцієнта F приймається [104]:

1) для газоподібних шкідливих речовин і дрібнодисперсних аерозолів (пилу, золи і т. п.), швидкість упорядкованого осідання яких практично дорівнює нулю, $F = 1$;

2) для дрібнодисперсних аерозолів (крім зазначених у пункті 1), якщо коефіцієнт очистки викидів:

- більше 90 % $F = 2$;
- від 75 до 90 % $F = 2,5$;
- менше 75 % і за відсутності очищення $F = 3$.

Безрозмірний коефіцієнт m визначають за формулами [104]:

- гарячий викид:

$$m = \frac{1}{0,67 + 0,1\sqrt{f} + 0,34\sqrt[3]{f}}; \quad (3.153)$$

- ХОЛОДНИЙ ВИКИД:

$$m = \frac{1,47}{\sqrt[3]{f}}. \quad (3.154)$$

Безрозмірний коефіцієнт n залежить від значень v_M , v'_M і розраховується за наступними рівняннями [104]:

- гарячий викид: при $v_M \geq 2$ м / с $n = 1$;
при $0,5 \leq v_M < 2$ м / с $n = 0,532v_M^2 - 2,13v_M + 3,13$;
при $v_M < 0,5$ м / с $n = 4,4v_M$;

● холодний викид: n встановлюють за описаними вище рівняннями, але замість v_M беруть v'_M .

Відстань x_M (м) від джерела викиду до місця, де приземна концентрація забруднюючих речовин за несприятливих метеорологічних умов сягає максимального значення C_M , визначають за формулою [104]:

$$x_M = \frac{5-F}{4} dH, \quad (3.155)$$

де d – безрозмірний коефіцієнт, який розраховується залежно від значень v_M і v'_M :

- гарячий викид: при $v_M \leq 0,5$ м/с $d = 2,48(1 + 0,28\sqrt[3]{f})$;
при $0,5 < v_M \leq 2$ м/с $d = 4,95v_M(1 + 0,28\sqrt[3]{f})$;
при $v_M > 2$ м/с $d = 7\sqrt{v_M}(1 + 0,28\sqrt[3]{f})$;
- холодний викид: при $v'_M \leq 0,5$ м/с $d = 5,7$;
при $0,5 < v'_M \leq 2$ м/с $d = 11,4 v'_M$;
при $v'_M > 2$ м/с $d = \sqrt{v'_M}$.

Таким чином, із наведених вище даних випливає, що методика ОНД-86 не дозволяє визначити динаміку зміни концентрації домішок у часі, а показує лише річний максимальний результат. Також її застосування обмежене локальним масштабом забруднення [17].

3.9.6. Статистичні моделі рівня забруднення атмосфери

Однією з характеристик забруднення атмосферного повітря є фонова концентрація забруднюючої речовини. Фонова концентрація – статистично достовірна максимальна концентрація (C_{ϕ} , мг/м^3), яка характеризує сумарну концентрацію домішок, створювану усіма джерелами викидів, розташованими на даній території. Її встановлюють для кожної речовини за результатами спостережень або визначають шляхом розрахунків [189].

Розрахунок фонові концентрації проводиться за даними стаціонарних або підфакельних постів спостережень за період від двох до п'яти років. До того ж кількість спостережень протягом року повинна бути не менше 200 по кожній речовині, а загальна кількість спостережень – не менше 800. З усього масиву одержаних результатів спостережень знаходять величини $C_{\phi i}$, де $i = 0; 1; 2; 3; 4$, що відповідає різним градаціям напрямку α і швидкості вітру w (табл. 3.28) [189]:

Таблиця 3.28

Значення i залежно від швидкості і напрямку вітру

α (різні напрямки руху)	Румби (напрямок руху)	Будь-який напрямок	Північ	Схід	Південь	Захід
	десятки градусів	будь-які градуси	32 – 4	5 – 13	4 – 22	23 – 31
W , м/с		0 – 2	3 – w^*			
i		0	1	2	3	4

Примітка. w^* – верхня межа швидкості вітру. Визначається за умови, що швидкість вітру в даному місці $w > w^*$ зустрічається в 5 % випадків.

Фонова концентрація забруднюючих речовин у повітрі може бути визначена за одним із наступних статистичних розрахункових методів:

1) величину $C_{\phi i}$ визначають за формулою [189]:

$$C_{\phi i} = \bar{C}_i \cdot F_1(V_i), \quad (3.156)$$

де \bar{C}_i – середнє значення концентрації для градації i , мг/м^3 ;

$F_1(V_i)$ – функція F_1 від V_i , яка показана на рис. 3.44;

V_i – коефіцієнт варіації для градації i .

Середню концентрацію домішки та значення величини V_i розраховують наступним чином:

$$\bar{C}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{k=1}^{n_i} C_k; \quad V_i = \frac{S_i}{C_k}; \quad S_i = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{n_i} (C_k - \bar{C}_i)^2}{n_i - 1}}, \quad (3.157)$$

де C_k – значення концентрації k -ої домішки для градації i , мг/м³;

n_i – сумарна кількість спостережень за концентрацією k -ої домішки на всіх постах за певний проміжок часу для градації i ;

S_i – середнє квадратичне відхилення результатів вимірювань від середнього арифметичного значення концентрації, мг/м³.

2) існує більш спрощений спосіб, відповідно якого фонову концентрацію встановлюють за формулою [6; 10; 189]:

$$C_{\text{фi}} = \bar{C}_i \cdot F_2(P_i); \quad P_i = \frac{m_i}{n_i}, \quad (3.158)$$

де $F_2(P_i)$ – функція F_2 від P_i , яка подана на рис. 3.44;

P_i – повторюваність випадків, в яких значення концентрації C_k вище певного критичного значення (середньої за сезон чи місяць, ГДК і ін.);

m_i – кількість спостережень із загального числа n_i протягом періоду з підвищеною концентрацією C_k .

Для характеристики якості повітря в населених пунктах і виявлення речовин, що найбільше впливають на забруднення атмосфери, а також для порівняльного оцінювання забруднення повітря окремих районів або міст, використовують комплексний індекс забруднення атмосфери I_n (КІЗА), який розраховується за формулою [13; 189]:

$$I_n = \sum_{j=1}^n I_j, \quad (3.159)$$

де n – кількість шкідливих домішок, що розглядаються (можуть містити всі забруднюючі речовини, які присутні в повітрі населеного пункту, або пріоритетні, що визначають стан атмосфери: пил, CO, SO₂, NO₂);

I_j – індекс забруднення атмосфери j -ю домішкою (ІЗА).

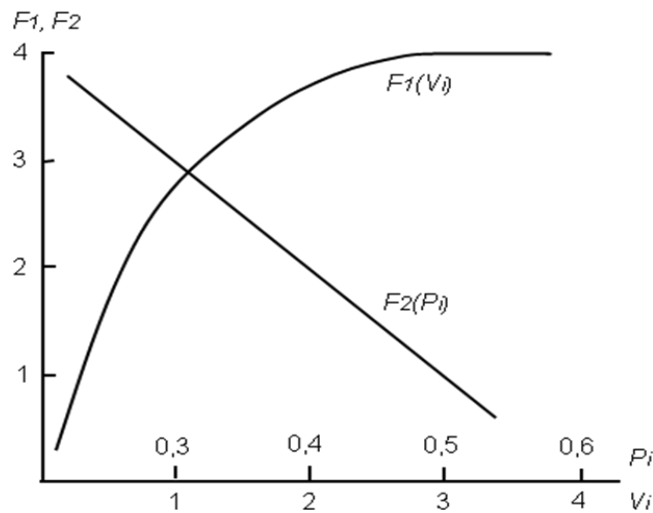


Рис. 3.44. Графік для визначення F_1 і F_2

ІЗА – кількісна характеристика рівня забруднення повітря окремою речовиною, яка приведена до рівня забруднення сульфуру діоксидом.

Індекс забруднення атмосфери окремою домішкою визначають відповідно рівняння [13; 189]:

$$I_j = \left(\frac{\bar{C}_j}{\text{ГДК}_{\text{с.д.},j}} \right)^{C_j}, \quad (3.160)$$

де \bar{C}_j – середня значення концентрації j -ї домішки за певний період часу, мг/м^3 ;

$\text{ГДК}_{\text{с.д.},j}$ – середньодобова гранична концентрація j -ї домішки в атмосферному повітрі населених пунктів, мг/м^3 ;

C_j – безрозмірна константа, яка дозволяє привести ступінь шкідливості j -ї домішки до шкідливості сульфуру діоксиду (SO_2 має 3 клас небезпеки) залежно від класу небезпеки речовини: 1-й клас небезпеки – 1,7; 2-й клас небезпеки – 1,3; 4-й клас небезпеки – 1,0; 5-й клас небезпеки – 0,9.

Одержане розрахункове значення комплексного індексу забруднення атмосфери дозволяє встановити рівень забруднення повітря населеного пункту відповідно даних табл. 3.29.

Рівень забруднення атмосферного повітря населених пунктів

Рівень забруднення атмосфери	Значення КІЗА
Низький	≤ 5
Підвищений	5 – 7
Високий	7 – 14
Дуже високий	> 14

3.10. Моделювання процесу спікання керамічних матеріалів з використанням відходів промисловості

Моделювання можна представити як математичну систему з певною структурою внутрішніх зв'язків, яка може замінити реальний процес. Така система відтворює основні, найбільш важливі внутрішні зв'язки, і відсіює менш важливі. Звісно, математична модель – це спрощена схема реального процесу, але вона дозволяє давати оцінку кінцевих властивостей процесу, за умови достатньої точності моделі.

Виробництво будівельних керамічних матеріалів потребує значних витрат енергії та матеріалів, адже спікання протікає за високих температур. Вихідні маси для керамічних плиток швидкісного випалу є багатоконпонентними, тобто звичайними методами математичного моделювання їхні властивості прогнозувати неможливо. Більш перспективними можна вважати засоби статистичного оброблення даних, зокрема методи регресійного аналізу.

Велике значення також має той факт, що у технології будівельної кераміки можна використовувати деякі відходи промисловості, до складу яких входять оксиди лужних і лужноземельних металів. Їх використання може інтенсифікувати процес спікання маси в разі швидкісних режимів випалу. Побудова математичної модулі процесу спікання і прогнозування властивостей керамічних мас дає можливість оптимізації складу керамічних матеріалів.

Крім того, утилізація відходів промисловості в технології будівельної кераміки зменшує забруднення довкілля, що підвищує рівень екологічної та техногенної безпеки і повітря, і водойм, і ґрунтів [132].

У багатокomпонентних системах статистичне оброблення даних виявляє дещо інші співвідношення між вихідними і кінцевими параметрами, ніж у зв'язках "параметр – функція", коли кожному значенню вихідного параметра відповідає тільки одне значення кінцевої функції. Застосування методу статистичних сукупностей дає можливість установити наявність зв'язку між параметрами, але без порівняльних кількісних залежностей. Найбільш ефективною математичною процедурою щодо оброблення статистичних сукупностей вважається метод кореляції. Сам термін "кореляція" вперше запропонував Ж. Кюв'є у 1800 – 1805 рр., а розбудову математичного апарату цього методу започаткував О. Браве у 1846 р. Термін "кореляція" утворено від лат. *correlation* – відношення, тобто співвідношення або відповідність явищ, предметів або понять.

У сучасному розумінні кореляція – це неповний зв'язок між досліджуваними явищами [123]. Сутність цього поняття – відображення ймовірнісних залежностей даного явища чи процесу, коли одному значенню параметра (змінної величини) може відповідати кілька значень іншого параметра (теж змінної величини). З математичної точки зору кореляція відображає закон множини причин та наслідків і є вільною неповною залежністю.

Особливістю і перевагою кореляційно-регресійного аналізу є можливість визначення ступеня впливу кожного з вихідних чинників цієї сукупності на кінцевий параметр, якщо між собою ці чинники взаємопов'язані та взаємообумовлені.

Кореляційний зв'язок величин характеризує той факт, що якщо задати один вихідний параметр, то йому може відповідати не одне значення, а ймовірності декількох значень [123]. Це означає, що залежність виявляється не між самими величинами, а між кожною з них і відповідним математичним очікуванням іншої.

Встановлення кореляційних залежностей має велике значення під час аналізу процесів, які обумовлені великою кількістю певних параметрів. Кореляція може бути простою, коли визначається зв'язок тільки між двома чинниками. У випадку впливу кількох чинників кореляцію називають множинною.

Отриману в результаті кореляційно-регресійного аналізу кореляційну залежність у вигляді рівняння називають також рівнянням регресії, за пропозицією англійського математика Ф. Гальтона.

Формально статистична модель становить абстрактну схему співвідношень між величинами, що характеризують властивості реального процесу [57]. Вибір вихідних і кінцевих параметрів здійснюють шляхом аналізу реального процесу на основі фактичних даних. До математичної моделі є основна вимога – адекватність її реальному процесу, що дозволяє використовувати її для прогнозування властивостей процесу в подальшому.

Статистичне моделювання зазвичай проводять у декілька етапів:

- 1) визначення мети та об'єкта моделювання;
- 2) попередній аналіз даних;
- 3) математична формалізація моделі;
- 4) оцінювання параметрів моделі;
- 5) перевірка адекватності моделі;
- 6) аналіз отриманих результатів.

Визначення мети обумовлено призначенням моделі, тобто яке її призначення, як її буде використано в майбутньому.

Об'єктом моделювання є статистична сукупність даних, щодо якої бажано виявити закономірність між сукупністю вихідних даних і кінцевих параметрів. Сукупності представлені в матричному вигляді. Аналіз характеристик об'єкта моделювання містить вибір одиничного елемента сукупності – характерного параметра (наприклад, вміст певної речовини) за умови визначення меж об'єкта моделювання (чисельні, просторові, часові межі об'єкта), а також множини кінцевих ознак. Формування множини ознак здійснюється шляхом експертного оцінювання значущості окремих параметрів, точності їх виміру і діапазону оптимальних значень.

До попереднього аналізу даних обов'язково включають статистичний опис об'єкта моделювання і визначення взаємозв'язків між параметрами. Особливе значення має характер зв'язків і особливості тієї інформації, на основі якої планується побудувати математичну модель.

Це пов'язано з тим, що у загальному випадку зв'язки в масиві даних, що обробляються, можна поділити на стохастичні та функціональні, які детерміновані жорстко стосовно вихідних параметрів. Під час моделювання структури і властивостей багатокomпонентних мас для будівельної кераміки причинно-наслідкові відношення в системі мають стохастичний характер. У цьому випадку найбільше підходить такий різновид стохастичних зв'язків, як кореляційні зв'язки у вигляді регресійних моделей.

Розрахунки для побудови математичної моделі здійснюються за певними математичними правилами, алгоритмами для оброблення статистичної інформації. На етапі математичної формалізації моделі визначається алгебраїчна форма розрахунків, провадиться опис процесу, що моделюється, за допомогою символів і знаків, а порядок розрахунків – у вигляді блок-схем [57]. На цьому етапі важливо правильно врахувати характер зв'язків та особливості наявного фактичного матеріалу щодо якого планується побудувати математичну модель.

У побудові математичної моделі вирішальне значення має визначення форм зв'язку вибір типу математичного рівняння, яке з найбільшою точністю описувало взаємозв'язки між чинниками процесу, що моделюється.

Головним етапом побудови статистичної математичної моделі є етап оцінювання параметрів, що становить комп'ютерне оброблення даних. Сучасні комп'ютерні технології дозволяють використовувати методи статистичного моделювання, які реалізовано в системі *Statistica MS Excel*.

Етап перевірки адекватності моделі необхідний для оцінювання відповідності отриманої математичної моделі фактичним характеристикам об'єкта моделювання. Порівняння характеристик отриманої математичної моделі та об'єкта моделювання можна здійснювати різними методами, зокрема, залежно від особливостей об'єкта використовують статистичні критерії або експериментальна перевірка.

Аналіз отриманих результатів як заключний етап математичного моделювання містить у собі оцінювання можливостей отриманої моделі щодо прогнозування властивостей статистичної сукупності даних, що є об'єктом моделювання. Такий аналіз є складною процедурою і залежить від сутності процесів, для яких здійснюється побудова моделі та перевірка її адекватності.

Головним чином на практиці використовують моделі одного показника в якості функції [57], але існує багато різновидів таких моделей залежно від природи, структури взаємозв'язків і особливостей об'єкта моделювання, обсягу інформації тощо. Також особливістю регресійних моделей є складність взаємозв'язків між вихідними чинниками і виявлення безпосереднього впливу кожного вихідного параметра на кінцеву функцію. Якщо враховувати окрім прямих зв'язків опосередкований вплив, то необхідно враховувати сумарний вплив вихідних параметрів. Така

особливість інформації, що обробляється, вимагає складних математичних інструментів різного виду для аналізу системи.

Переваги регресійних моделей полягають ще й у тому, що вони описують кореляційні зв'язки між чинниками, тобто ранжують чинники за ступенем впливу на кінцеві функції (параметри). Кореляційні (ймовірнісні) зв'язки можуть бути найрізноманітнішими і дуже складними.

У загальному вигляді регресійну модель можна представити у вигляді матриці чинників $X \{x_{ij}\}$ і, відповідно, стовпчика відгуків $Y \{y_i\}$, де x_{ij} – значення j -го чинника в i -ому експерименті ($j = 1, \dots, n; i = 1, \dots, N$); y_i – значення відгуку в i -ом експерименті; n – кількість чинників; N – кількість експериментів. Оскільки внаслідок складності моделі практично неможливо встановити точний вигляд функції, тому зазвичай проводять апроксимацію простими функціями значно складніших взаємозв'язків. На практиці така модель має вигляд або лінійної залежності, або залежності другого порядку.

Оцінювання параметрів регресійної моделі здійснюють за допомогою методу найменших квадратів (МНК), який реалізовано у відповідних комп'ютерних програмах.

Оцінювання адекватності регресійної моделі здійснюють за допомогою декількох математичних характеристик, а саме:

- стандартного відхилення;
- множинних коефіцієнтів детермінації та кореляції;
- частинних коефіцієнтів детермінації та кореляції;
- коефіцієнтів окремої детермінації;
- критеріїв перевірки істотності зв'язку.

Під час математичного моделювання реальних процесів, які представлено сукупністю фактичних експериментальних даних найкращим показником адекватності моделі вважається відхилення фактичних значень від теоретичних, розрахованих за отриманою математичною залежністю. Величина цих відхилень залежить від декількох особливостей експериментальних характеристик сукупності даних, наприклад [57]:

- незалежності спостережень;
- обсягу та однорідності сукупності;
- точності параметрів чинників, які відібрано для моделювання;
- стабільності усіх інших чинників, які не враховуються у моделі, тобто незначне коливання їх значень у всіх експериментах або незначний вплив на кінцевий параметр;
- обраного типу моделі.

Практичний досвід застосування регресійного аналізу показав, що неадекватність отриманої математичної моделі часто обумовлена недостатнім обсягом фактичних даних, а також їхньою неоднорідністю. Тому рекомендовано співвідношення між обсягом вибірки і кількістю включених у модель чинників витримувати не меншим, ніж 8 : 1.

Для оцінювання ступеня впливу вихідних чинників на кінцевий параметр у більшості випадків визначають коефіцієнт множинної кореляції. Значення цього коефіцієнта завжди додатне число величиною від 0 до 1. Для двофакторної моделі коефіцієнт множинної кореляції розраховується за формулою [123]:

$$R_{yy_1x_2} = [1 - (1 - r^2_{yx_1})(1 - r^2_{yx_2} \times x_1)]^{1/2}. \quad (3.161)$$

Отримане рівняння і коефіцієнт множинної кореляції оцінюють за вірогідністю шляхом розрахунку критерію Фішера і співставляють із табличними значеннями. Якщо одержана величина для отриманого рівняння більша за табличну, то коефіцієнт кореляції вважають вірогідним. Аналогічним чином розраховують інші математичні параметри рівняння (коефіцієнти детермінації тощо).

Під час використання кореляційно-регресійного аналізу для математичного моделювання слід обов'язково враховувати, що розрахунки за кореляційними методами – це математична процедура, яка не висвітлює фізичний сенс взаємозв'язків у сукупності, що моделюється. Кореляція тільки характеризує наявність зв'язку, а не його причини. На практиці в рівнянні регресії вихідні чинники з обчисленими відповідними коефіцієнтами утворюють послідовність, яка ранжована за ступенем впливу кожного окремого чинника на кінцевий параметр. Звичайно послідовність формується за зменшенням впливу.

У практичній діяльності рівняння математичної моделі, отриманої методами кореляційно-регресійного аналізу, наочно демонструє послідовність вихідних чинників за ступенем впливу на кінцевий параметр. Таким чином, на основі отриманих рівнянь можна прогнозувати подальші дії щодо напряму досліджень.

Метою проведеного дослідження було побудувати кореляційно-регресійної моделі процесу спікання мас для керамічних плиток швидкісного випалу, до складу яких входили деякі відходи промисловості. Відходи

промисловості вміщували легкоплавкі оксиди лужних і лужноземельних металів (R_2O і RO), які сприяють появі рідкої фази (розплаву) за знижених температур випалу.

До складу мас входили глина Веселовського родовища, широко вживані інтенсифікатори спікання – перліт і скловідходи, а також відходи металургійної та хімічної промисловості – вагранковий шлак ХТЗ, кек, відходи збагачення деяких руд – нефеліновий концентрат. На основі результатів експериментальних досліджень процесу формування структури і фазового складу керамічних плиток за різних температур випалу були сформовані множини вихідних параметрів. В якості вихідного параметра було обрано показник водопоглинання (%) як характеристика ступеня спікання керамічних мас. Випал керамічних мас здійснювався у печах швидкісного випалу за максимальних температур 900, 950, 1000 и 1050 °С.

Найбільш важливими вихідними параметрами слід вважати максимальну температуру випалу і хімічний склад керамічних мас. Співвідношення складових у масі має бути таким, щоб розплав з'явився за якомога нижчих температур.

Як було зазначено вище, для кореляційно-регресійного аналізу співвідношення між обсягом вибірки і кількістю включених у модель чинників необхідно витримувати не меншим, ніж 8 : 1. У цій монографії число вихідних параметрів (температура + хімічний склад) дорівнює 15, а чисельність експериментальних мас – 140, тобто ця вимога витримана. Хімічний склад представлено наступними сполуками: SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , RO (CaO і MgO), R_2O (Na_2O і K_2O), B_2O_3 , MnO , TiO_2 , іон F.

Оцінювання параметрів моделі здійснювалось за допомогою системи *Statistica MS Excel*. У результаті було отримано рівняння залежності ступеня спікання (водопоглинання W , %) від максимальної температури випалу і хімічного складу вихідних сумішей наступного вигляду:

$$\begin{aligned} W = & 83,5238 - 0,07294T - 4,3931 F' - 0,06689 R_2O + \\ & + 0,4529 Fe_2O_3 + 0,1053 SiO_2 - 3,3758 MgO - \\ & - 4,3921B_2O_3 - 0,4963 Al_2O_3 + 0,00981MnO + \\ & + 8,9569 TiO_2 - 0,4313 CaO. \end{aligned} \quad (3.162)$$

Коефіцієнт кореляції отриманої математичної залежності дорівнює 0,806, що свідчить про значний ступінь близькості експериментальних даних і отриманої математичної моделі.

Вміст зазначених оксидів знаходився в таких межах (%): 49 – 66 SiO_2 , 19 – 23 Al_2O_3 , 2,5 – 9,0 R_2O , 0,7 – 2,9 Fe_2O_3 , 0,5 – 1,0 TiO_2 , 0,7 – 5,0 CaO , 0,5 – 1,7 MgO , 0 – 0,32 B_2O_3 , 0 – 1,10 F' , 0 – 4,30 MnO . У рівнянні (3.161) порядок оксидів показує ранг впливу кожного компонента на спікання за мірою зменшення впливу на кінцевий результат.

Кореляційно-регресійне рівняння (3.161), що отримане шляхом математичного моделювання, створює можливість зробити оцінювання ступеня спікання керамічних мас швидкісного випалу під час використання відходів промисловості до проведення експериментальних досліджень і відібрати оптимальні співвідношення сировинних компонентів.

Крім того, отримана модель дозволяє попередньо оцінити загальну можливість використання відходів промисловості певного виду в технології будівельної кераміки без проведення експерименту, а також визначити можливі межі їхнього кількісного вмісту в керамічних масах.

Таким чином, отримана модель може бути використана для попереднього відбору відходів промисловості та їхніх композицій з метою утилізації в технології будівельної кераміки. Порівняння експериментальних даних і результатів розрахунків за отриманою математичною моделлю показали задовільну збіжність величин. Так, для деяких мас водопоглинання фактичне і розраховане мали такі значення: 8,31 і 9,06 %, 6,92 і 5,83 %, 4,56 і 6,65 % відповідно. Недоліком цієї моделі можна вважати ту обставину, що вона мало прийнятна для мас, до складу яких не входять активні легкоплавкі сполуки.

Застосування кореляційно-регресійних методів у моделюванні процесів спікання керамічних мас із застосуванням відходів промисловості дає можливість зменшити матеріало- та енергоємність досліджень, оптимізувати склади мас щодо відходів і можливості їх використання, що сприятиме зниженню рівня забруднення довкілля та підвищенню екологічної безпеки на локальному й регіональному рівнях.

3.11. Математичне моделювання складів вогнетривких матеріалів

Сучасний рівень вимог до інтенсивного розвитку і вдосконалення різноманітних матеріалів вимагає від дослідника вміння планувати і ефективно проводити наукові дослідження – планування наукового експерименту, використання ефективних математичних методів під час організації

досліджень, оброблення отриманих результатів і побудова математичних моделей задля оптимізації параметрів виготовлення матеріалів.

Основним завданням у технології виготовлення безвипалюваних периклазовуглецевих вогнетривів є забезпечення високої щільності і міцності під час стиснення виробів та їхньої низької пористості, що забезпечує необхідні експлуатаційні властивості вогнетривів. Зміцнення структури виробів досягається раціональним вибором зернового складу шихтових матеріалів та їхнім співвідношенням. Для цього використовують різноманітні методи математичного планування експерименту, здебільшого метод повного факторного експерименту та симплекс-ґратчастий метод.

3.11.1. Застосування методу повного факторного експерименту для оптимізації технологічних параметрів виробництва периклазовуглецевих матеріалів

Повний факторний експеримент є найбільш легко реалізованим серед численних методів активного експерименту, під час використання якого дослідник не тільки отримує математичну модель процесу, але й може визначитися з подальшою стратегією проведення експерименту.

Досліджено вплив кількості модифікаторів: елементоорганічної речовини ($Z_1 = 0,5 - 1,5 \%$), золю на її основі ($Z_2 = 0,25 - 0,75 \%$) та фенолформальдегідної смоли ($Z_3 = 3,0 - 4,0 \%$) на характеристики міцності периклазовуглецевих матеріалів за допомогою повного факторного експерименту типу 2^3 (ПФЕ). Вихідна матриця планування ПФЕ 2^3 наведена в табл. 3.30.

Таблица 3.30

Вихідна матриця планування ПФЕ 2^3

№ експерименту	Досліджувані чинники			Результати досліджень	
	Z_1	Z_2	Z_2	y_1	y_2
1	2	3	4	5	6
1	+	+	+	51,3	56,5
2	+	-	+	74,1	75,0

1	2	3	4	5	6
3	–	+	+	51,3	45,6
4	+	+	–	34,2	44,1
5	–	+	–	39,9	33,9
6	–	–	+	59,3	51,3
7	+	–	–	45,6	44,1
8	–	–	–	51,3	48,0

Роботу виконуємо наступним чином [26]:

1) кодуємо змінні (табл. 3.31):

$$X_i = \frac{Z_i - Z_i^0}{\lambda_i}. \quad (3.164)$$

Таблица 3.31

Кодування чинників

Чинники	Верхній рівень, Z_i^+	Нижній рівень, Z_i^-	Центр, Z_i^0	Інтервал варіювання λ_i	Залежність кодованої змінної від натуральної
Z_1	1,5	0,5	1,0	0,5	$X_1 = \frac{Z_1 - 1}{0,5}$
Z_2	0,75	0,25	0,5	0,25	$X_2 = \frac{Z_2 - 0,5}{0,25}$
Z_3	4,0	3,0	3,5	0,5	$X_3 = \frac{Z_3 - 3,5}{0,5}$

2) будемо матрицю планування з урахуванням усіх взаємодій і середніх значень відгуку (табл. 3.32).

3) обчислюємо коефіцієнти рівняння регресії, перевіряємо обчислені коефіцієнти на значимість, визначивши дисперсію відтворюваності, та отримаємо рівняння регресії в кодованих змінних, перевіряємо отримане рівняння на адекватність і проводимо інтерпретацію отриманої моделі [26]:

$$y = 50,9 - 6,7Z_2 + 8,1Z_3 - 1,9Z_1Z_2 + 3,3Z_1Z_3 - 1,0Z_2Z_3 - 1,9Z_1Z_2Z_3. \quad (3.165)$$

Матриця планування для оброблення результатів

№	Чинники			Взаємодія				Результати досліджень		Середній результат
	X ₁	X ₂	X ₃	X ₁ X ₂	X ₁ X ₃	X ₂ X ₃	X ₁ X ₂ X ₃	y ₁	y ₂	$\bar{y}_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y_{ij}, j = \overline{1, n}$
1	+	+	+	+	+	+	+	51,3	56,5	53,9
2	+	-	+	-	+	-	-	74,1	75,0	74,55
3	-	+	+	-	-	+	-	51,3	45,6	48,45
4	+	+	-	+	-	-	-	34,2	44,1	39,15
5	-	+	-	-	+	-	+	39,9	33,9	36,9
6	-	-	+	+	-	-	+	59,3	51,3	55,3
7	+	-	-	-	-	+	+	45,6	44,1	44,85
8	-	-	-	+	+	+	-	51,3	48,0	49,65

Найбільший вплив на збільшення межі міцності під час стиснення чинить кількість введеної фенолформальдегідної смоли та парна взаємодія кількості фенолформальдегідної смоли та елементоорганічної речовини, в той час як найбільш негативний ефект на збільшення міцності чинить кількість введеного золю на основі елементоорганічної речовини.

Для наочності отримані результати представимо в графічному вигляді (рис. 3.45).

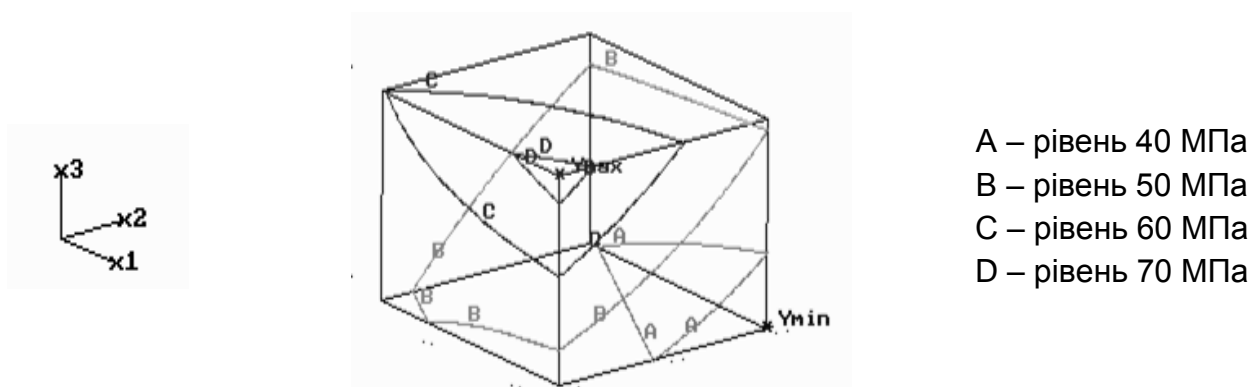


Рис. 3.45. Ізоповерхні міцності

Встановлено, що оптимальна кількість елементоорганічної речовини, золю та фенолформальдегідної смоли, що вводять до складу периклазовуглецевих матеріалів, для отримання вогнетривів із високою міцністю, становить, мас. %: 1,5, 0,25, 4 відповідно.

3.11.2. Застосування методу симплекс-ґратчастого методу планування експерименту для оптимізації зернового складу периклазовуглецевих матеріалів

Під час аналізу виробництва периклазовуглецевих вогнетривів досліджено проблему ущільнення матеріалу, термообробленого при температурі 180 °С, з використанням симплекс-ґратчастого методу планування експерименту [67].

Для опису залежності властивостей периклазовуглецевого матеріалу від кількісного співвідношення фаз периклазового заповнювача використовували поліном неповного третього порядку:

$$y = \beta_1x + \beta_2y + \beta_3z + \beta_{12}xy + \beta_{13}xz + \beta_{23}yz + \beta_{123}xyz. \quad (3.166)$$

В якості параметрів варіювання вибрали три зернисті фракції периклазу, які до складу шихти вводили згідно з планом симплекс-ґратчастого методу планування (табл. 3.33): 2 – 1 мм – 40 – 70 %, 1 – 0 мм – 20 – 55 %, менше 0,08 мм – 10 – 40 %. Зразки піддавали термообробленню при 180 °С. Були визначені відкрита поруватість, уявна щільність та міцність під час стискання периклазовуглецевих зразків термооброблених при температурі 180 °С (табл. 3.33).

Таблиця 3.33

Матриця планування експерименту

№ складу	Чинники					
	Кодові значення			Натуральні значення		
				Межа міцності під час стискання, σ , МПа	Відкрита пористість, П, %	Уявна щільність, ρ , г/см ³
1	1	0	0	50	10,0	2,81
2	0	1	0	49	10,8	2,79
3	0	0	1	41	14,8	2,67
4	0,5	0,5	0	46	11,4	2,78
5	0,5	0	0,5	40	13,3	2,74
6	0	0,5	0,5	51	13,4	2,75
7	0,33	0,33	0,33	50	10,9	2,78

За допомогою симплекс-ґратчастого методу планування під час використання пакета програми "STATISTICA" були отримані наступні рівняння регресії в системі "склад – властивості":

$$\sigma = 50x + 49y + 41z - 14xy - 22xz + 24yz + 126xyz; \quad (3.167)$$

$$\rho = 2,81x + 2,79y + 2,67z - 0,08xy - 0,069xz + 0,084yz + 0,63xyz; \quad (3.168)$$

$$\Pi = 10x + 10,8y + 14,8z + 4xy + 3,6xz + 2,4yz - 56,1xyz. \quad (3.169)$$

Аналізуючи взаємозв'язок "фракційний склад периклазового заповнювача – властивості" периклазовуглецевих зразків (рис. 3.46 – 3.48), можна спостерігати, що максимальні значення міцності, щільності і мінімальні значення пористості, знаходяться в нижній частині концентраційних трикутників, а саме: наближаються до області, де введення фракції 2 – 1 мм максимально.

Хоча максимальну міцність (рис. 3.46) можна спостерігати і під час невеликого введення великої фракції. Але ці склади не мають максимальної щільності (рис. 3.47) і мінімальної пористості (рис. 3.48). Тобто таке поєднання зернистих фракцій периклазу не дає достатнього ущільнення під час термооброблення при 180 °С.

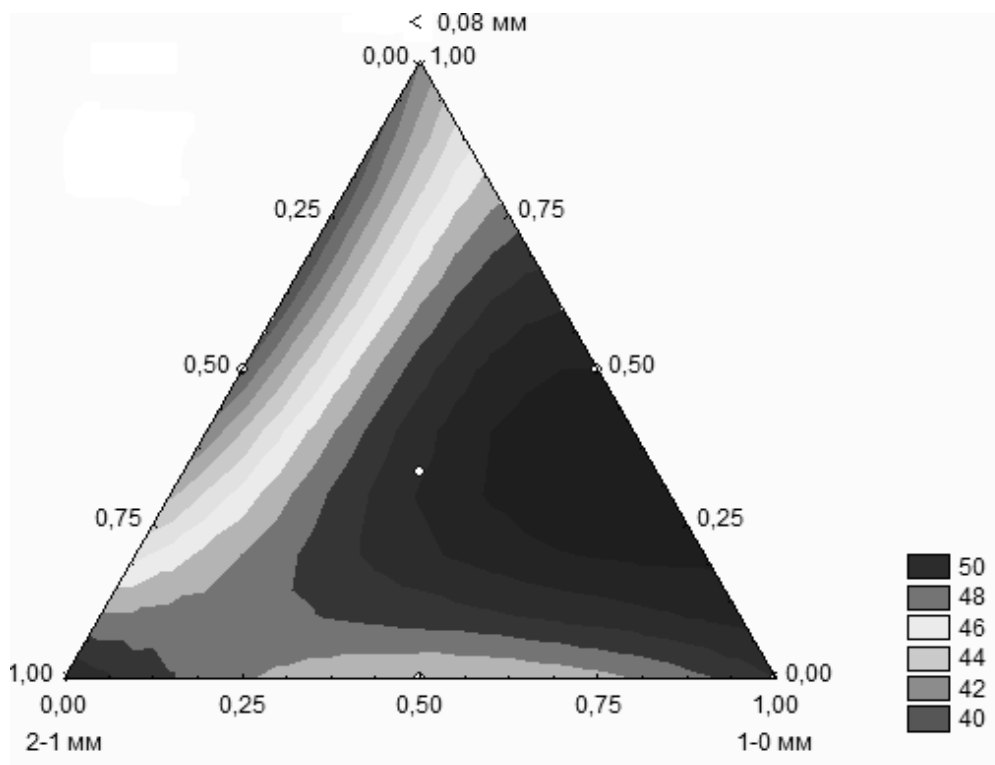


Рис. 3.46. Залежність "фракційний склад заповнювача – межа міцності під час стискання" периклазовуглецевих зразків

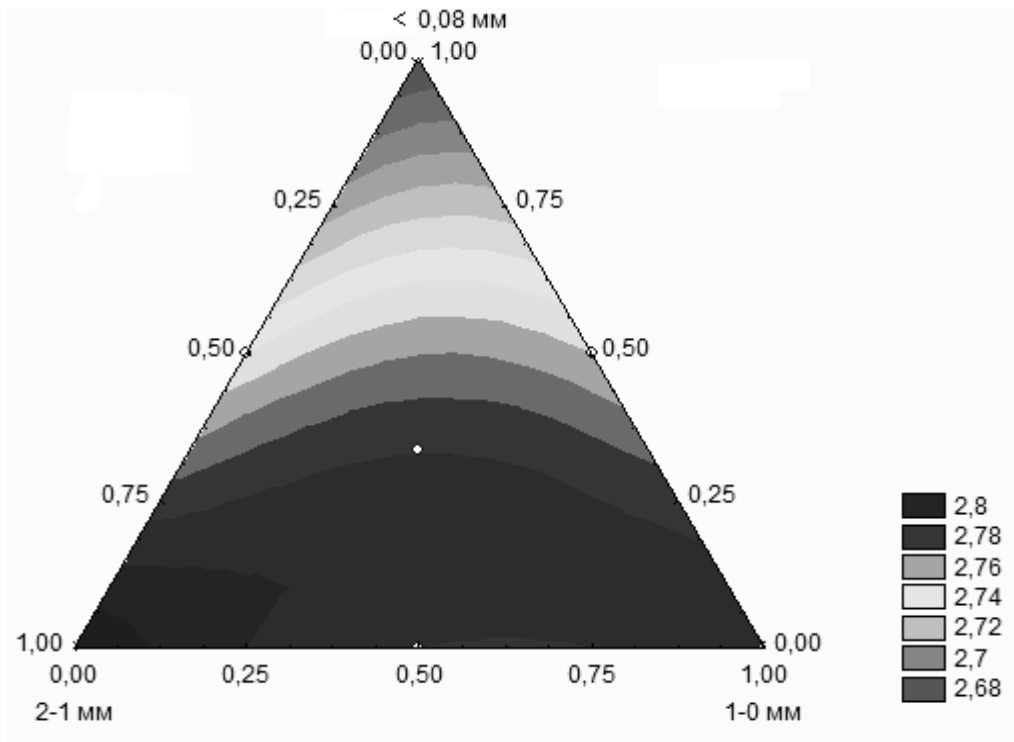


Рис. 3.47. Залежність "фракційний склад заповнювача – уявна щільність" периклазовуглецевих зразків

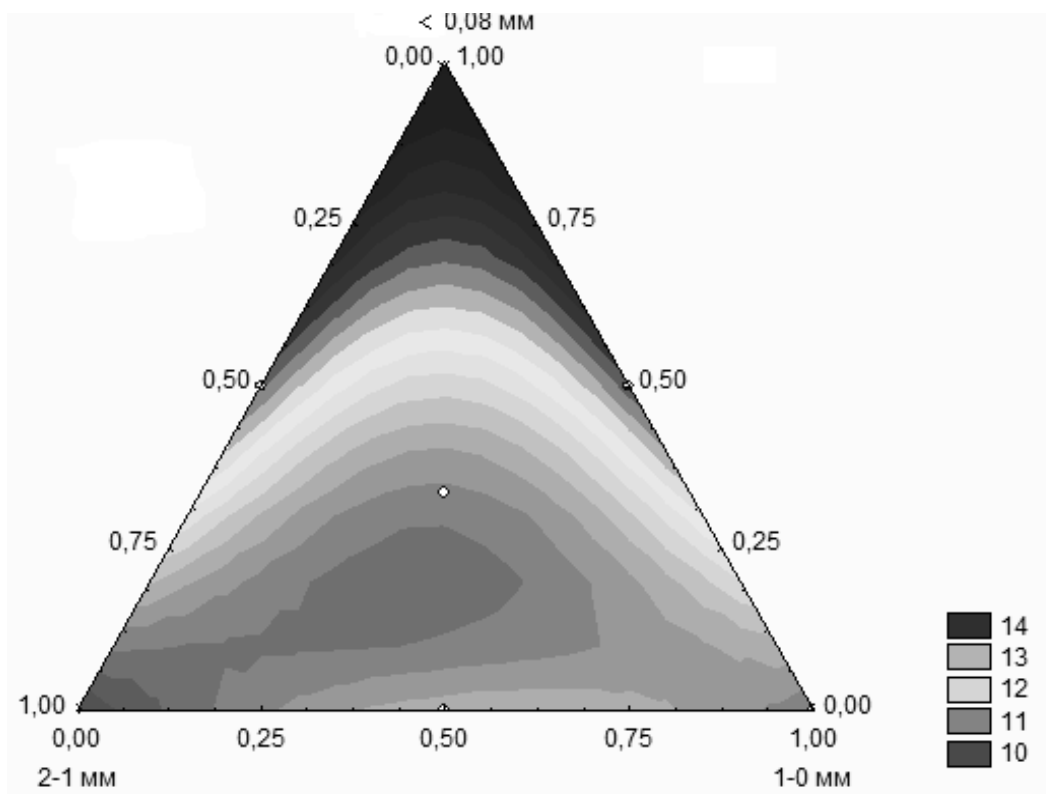


Рис. 3.48. Залежність "фракційний склад заповнювача – відкрита поруватість" периклазовуглецевих зразків

Визначено оптимальний вміст зернистих фракцій периклазу в шихтовому складі периклазовуглецевих матеріалів: фракція 2 – 1 мм – 65 – 70 %, фракція 1 – 0 мм – 20 – 25 %, фракція менше 0,08 мм – 10 – 15 %.

3.12. Математичне моделювання процесу окислення гранули екзотермічної суміші в процесі гарячого ремонту вогнетривкої футерівки

Роль вогнетривких футерівок у сучасних технологічних процесах виключно важлива. Фізико-хімічні та експлуатаційні характеристики вогнетривів безпосередньо впливають не тільки на якість металу, але й на такі важливі техніко-економічні показники виробничих процесів як енергоємність, безпеку, безвідходність, екологічність та ін. [178].

Вогнетривка футерівка теплових агрегатів безперервної дії в процесі експлуатації піддається значному механічному й температурному впливу, що призводить її до поступового зносу, тому вона потребує періодичного ремонту.

Розрізняють холодний і гарячий види ремонтів футерівок теплових агрегатів безперервної дії [62]. Холодний ремонт здійснюють за повним виведенням печей з експлуатації. До недоліків цього методу можна віднести високу трудомісткість, тривалість і енергоємність процесу [178].

Гарячі ремонти проводять без виведення печей з експлуатації. На основі аналізу нормативних документів і наукової літератури на рис. 3.49 подана класифікація методів ремонту за технологічними ознаками [138; 178; 183; 184; 186].

До недоліків холодних методів ремонту (рис. 3.49) можна віднести високу трудомісткість і матеріаломісткість процесів, отримання високопористого покриття, а також велику тривалість ремонту з урахуванням необхідного часу на охолодження й розігрівання теплових агрегатів.

Для гарячих методів ремонту характерними недоліками є висока пористість, високий відсоток відскоку, складне устаткування, невеликий термін служби покриття. Аналізуючи пропоновані методи ремонту, можна зробити висновок про необхідність пошуку сучасної уніфікованої технології, яка була б позбавлена перерахованих недоліків.

Перевага саморосповсюджуючого високотемпературного синтезу (СВС) – технології полягає в можливості отримання низькопористих захисних покриттів, які здатні працювати в умовах екстремальних статичних і динамічних навантажень, мають високу ерозійну й абразивну стійкість, механічну міцність.

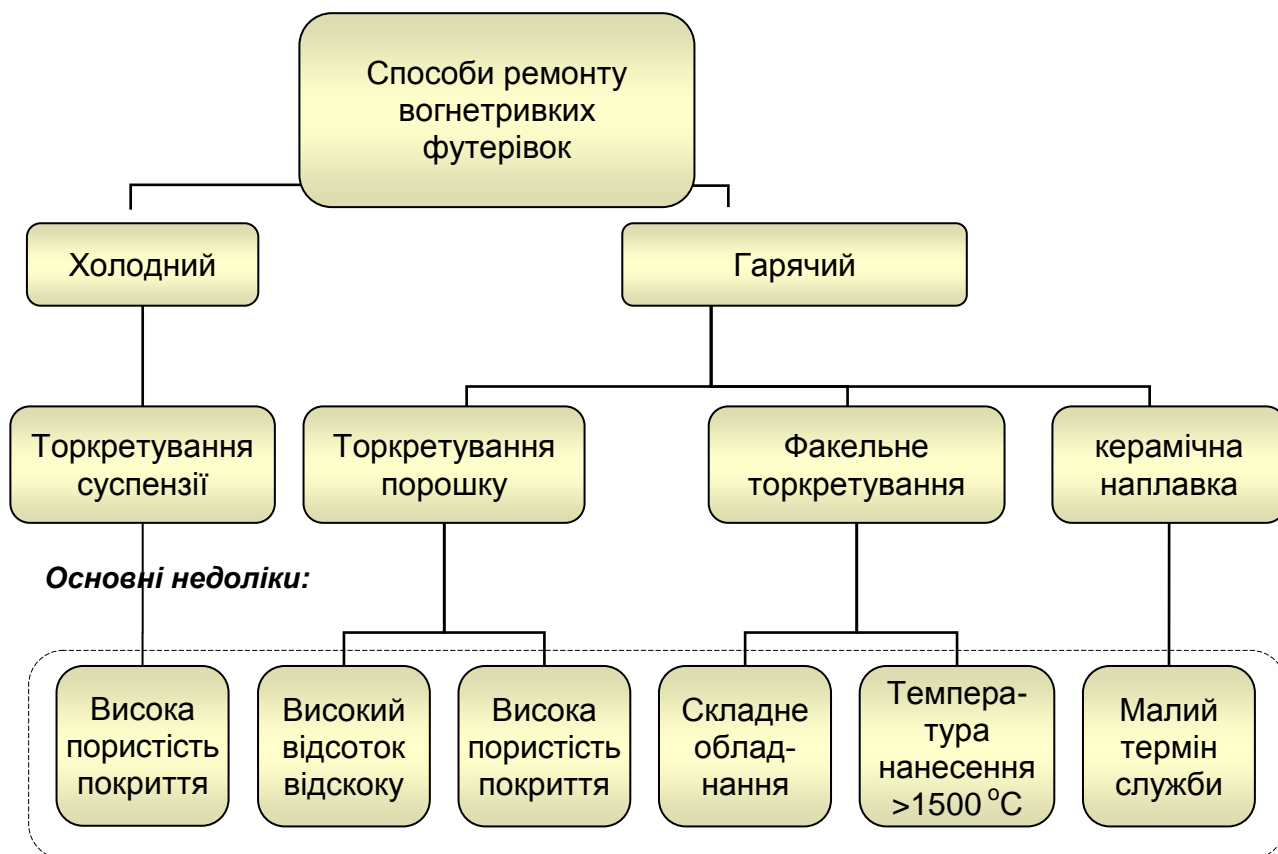


Рис. 3.49. Класифікація методів ремонту вогнетривких футерівок та основні недоліки кожного способу ремонту

Сутність СВС процесу полягає в нанесенні на гарячу поверхню футерівки екзотермічної суміші, яка ініціює протікання екзотермічної реакції з утворенням захисного покриття. Незначні енергетичні витрати, простота обладнання, що застосовується, чистота кінцевого продукту, швидкість проходження процесу, відносна екологічна чистота процесу дозволяє запропонувати СВС технологію як уніфіковану для гарячого ремонту високотемпературних теплових агрегатів широкого профілю.

Для реалізації СВС процесу використовують екзотермічні суміші, які складаються з вогнетривкого наповнювача, горючого компонента і зв'язуючого. Вогнетривкий компонент підбирається залежно від фазового

складу вогнетриву футерівки, що ремонтується, з міркувань кращого зчеплення вогнетриву наповнювача і вогнетриву футерівки. Екзотермічну суміш наносять у струмені окислювача, який одночасно доставляє її в зону ремонту та окислює з утворенням шару захисного відновлювального покриття.

Компоненти суміші значно розрізняються за питомою вагою і дисперсністю, тому найбільш логічно використовувати метод гранулювання. Гранули являють собою частинки вогнетривкого матеріалу, покриті зверху (плаковані) шаром горючого компоненту, який закріплений за допомогою зв'язуючого.

Для отримання математичних моделей горіння екзотермічних сумішей необхідно провести експерименти для підбору уніфікованого горючого компоненту та уніфікованого окислювача.

3.12.1. Обґрунтування вибору виду горючого компонента

Різні види палива можуть бути порівняні між собою за кількістю тепла (Q), яке виділяється під час горіння на одиницю маси продуктів згоряння [65]. Тепло, що виділяється, залежить від теплотворної здатності пального (ΔH) і від кількості окиснювача, необхідного для його повного згоряння:

$$Q = \frac{\Delta H}{1 + W}. \quad (3.170)$$

За теплотворної здатності водень і вуглеводні палива (газ і бензин) перевершують метали [65], однак за кількістю окиснювача, необхідного для повного згоряння 1 кг палива, вони поступаються останнім (рис. 3.50).

Як горючий компонент для отримання захисних покриттів методом СВС з використанням екзотермічних сумішей технічно найбільш доступні алюміній, магній, кремній. Залежність зміни стандартної вільної енергії утворення оксидів від температури для магнію, алюмінію й кремнію [120] наведена на рис. 3.51.

У порядку спадання сили спорідненості до кисню при температурі 1000 °C розглянуті елементи можна розташувати в рядок: $Mg \rightarrow Al \rightarrow Si$, таким чином, найлегше окислюється магній.

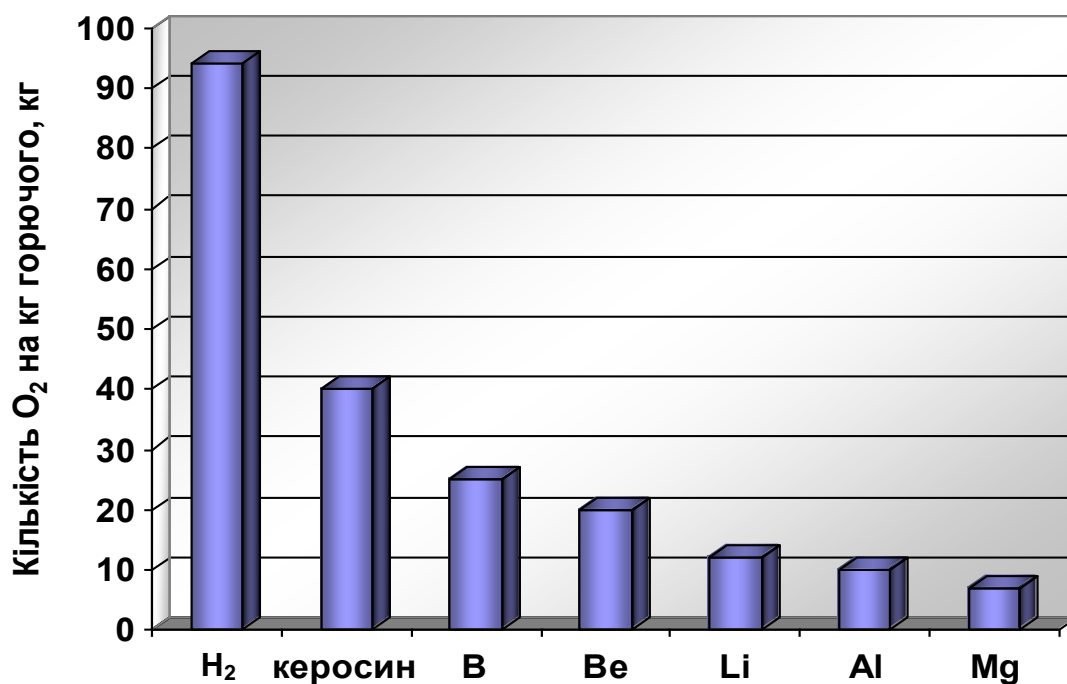


Рис. 3.50. Кількість окиснювача, необхідного для повного згоряння 1 кг горючого компонента [8]

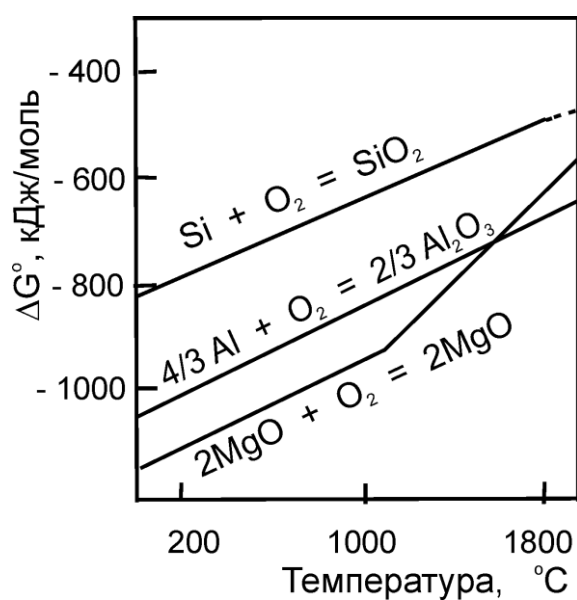


Рис. 3.51. Вплив температури на зміну вільної енергії Гібса ΔG^0 утворення оксидів магнію, алюмінію та кремнію

Згідно з результатами термодинамічного розрахунку максимальна адіабатична температура горіння досягається в разі співвідношення $\text{SiO}_2 : \text{Al} = 1,85$ і дорівнює $1730\text{ }^\circ\text{C}$. Експериментально визначена температура горіння для цих же складів шихти лежить у межах $1600 - 1700\text{ }^\circ\text{C}$, що пояснюється наявністю тепловтрат у реальних умовах синтезу [146]. Перевищення температури горіння точки плавлення металевого алюмінію ($T_{\text{пл}} = 660\text{ }^\circ\text{C}$) означає, що в реакцію синтезу алюміній вступає в розплавленому стані.

Швидкість реакції окислення частинок металів залежить не тільки від температури й концентрації окислюючого реагенту в навколишньому середовищі, а й товщини утворення оксидної плівки. Під час горіння металів у кисні перенесення останнього до поверхні металу здійснюється в результаті дифузії через шар оксиду, що утворився.

Вибір пального компонента повинен також здійснюватися з урахуванням можливої високотемпературної реакції оксиду, що утворюється, та вогнетривкої футерівки.

Дослідним шляхом встановлено, що робоча температура вогнетривкої футерівки повинна бути не нижче $700\text{ }^\circ\text{C}$. При температурі футерівки нижче $700\text{ }^\circ\text{C}$ запалювання екзотермічних сумішей ускладнено, горіння протікає важко.

Враховуючи сказане, доцільно використовувати як горючий компонент порошки алюмінію та магнію або їхні суміші.

Для досліджень використовували тонкодисперсну алюмінієву пудру марки ПАП-2 (ГОСТ 5494-95), порошок магнію (ГОСТ 6001-79) та їхні суміші в різних співвідношеннях. Екзотермічні суміші готували на основі корейського спеченого периклазу (ГОСТ 10888-93), бою цегли периклазохроміту (ГОСТ 10888-93), хромітопериклазу (ГОСТ 5381-93), периклазу (ГОСТ 4689-94) та динасу (ГОСТ 4157-79).

В якості зв'язуючого компонента використовували рідке скло із силікатним модулем 3,0. Температуру загоряння екзотермічних гранульованих сумішей визначали за стандартною методикою (табл. 3.34).

З підвищенням вмісту магнію в пальному компоненті температура загоряння сумішей знижується. Це узгоджується з результатами розрахунку ізобарно-ізотермічного потенціалу утворення Al_2O_3 і MgO під час окислення металічних Al і Mg .

**Вплив сировинного складу пального компонента
на температуру загоряння екзотермічної суміші**

Вид вогнетривкого компонента	Вміст горючого компонента, мас.%		Температура займання екзотермічної суміші, °С
	Mg	Al	
Периклазохромитова цегла	–	100	630
	20	80	590
	40	60	550
	60	40	520
	80	20	500
	100	–	470
Хромітопериклазова цегла	–	100	680
	20	80	640
	40	60	600
	60	40	540
	80	20	510
	100	–	480
Спечений периклаз	–	100	700
	20	80	650
	40	60	570
	60	40	530
	80	20	500
	100	–	480
Периклазова цегла	–	100	580
	20	80	540
	40	60	520
	60	40	500
	80	20	480
	100	–	460
Динасова цегла	–	100	650
	20	80	640
	40	60	620
	60	40	580
	80	20	540
	100	–	530

Встановлено, що збільшення вмісту магнію в суміші горючих компонентів значно зменшує температуру загоряння екзотермічної суміші, тому доцільніше використовувати в якості уніфікованого горючого компонента алюмінієву пудру, яка підвищує інтенсивність горіння екзотермічної суміші і сприяє рівномірному оплавленню ремонтованої ділянки футерівки.

3.12.2. Дослідження впливу виду окиснювача на процес СВС в екзотермічних сумішах

Можливо використання різних типів окиснювачів, але найчастіше використовують кисень. Недоліком застосування в якості окиснювача кисню є його вибухонебезпечність. Відомо, що діоксид вуглецю за високих температур може бути окиснювачем [98], однак можливість використання його для процесу СВС не вивчалась.

Попередньо були проведені термохімічні розрахунки процесів окислення алюмінію киснем і вуглекислим газом за рівняннями реакцій (3.171 – 3.173):



Для реакцій (3.171 – 3.173) значення ентальпії й енергії Гібса, наступні:

$$\Delta H_1 = -1676,0 \text{ кДж / моль}, \quad \Delta G_1 = -1582,3 \text{ кДж / моль},$$

$$\Delta H_2 = -827,0 \text{ кДж / моль}, \quad \Delta G_2 = -810,7 \text{ кДж / моль},$$

$$\Delta H_3 = -1085,7 \text{ кДж / моль}, \quad \Delta G_3 = -990,7 \text{ кДж / моль}.$$

З розрахункових даних видно, що термодинамічно можливе протікання всіх трьох реакцій ($\Delta G < 0$). Причому найбільш інтенсивно повинна протікати реакція взаємодії алюмінію з киснем. Вірогідність протікання реакції взаємодії алюмінію в середовищі вуглекислого газу з утворенням СО й С приблизно однакова.

Вивчали процес горіння у вуглекислому газі алюмінію в суміші з вогнетривким компонентом в якості якого використано бій динасової цегли з розміром гранул 0,1 – 0,5 мм. Співвідношення компонентів і характеристика процесу горіння наведені в табл. 3.35.

Таблиця 3.35

**Характеристика загоряння у вуглекислому газі
алюмінію в суміші з динасом**

№	Вміст компонентів, %		Температура загоряння, °С	Характеристика активності процесу загоряння й продуктів реакції
	А1	Динас		
1	50	50	800	Добре загоряється, інтенсивно горить, продукти повністю спечені
2	40	60	800	Добре загоряється, інтенсивність горіння нижче суміші 1, продукти повністю спечені
3	30	70	810	Добре загоряється, інтенсивність горіння нижче суміші 2, продукти повністю спечені
4	20	80	810	Запалюється із затримкою, інтенсивність горіння нижче суміші 3, продукти спечені частково

Як виходить з отриманих результатів виходить, що можливо зниження вмісту алюмінієвої пудри до 30 %.

Після екзотермічної реакції у вуглекислому газі пори спеченого вогнетривкого покриття були насичені вуглецем. Наявність вільного вуглецю у вогнетривкому покритті є позитивним фактом, тому що в цьому випадку повинно знизитися змочування покриття розплавами шлаків, які утворюються під час виплавляння металів.

Змочування експериментальних покриттів шлаками оцінювали за величиною кута змочування, який визначали за методом "лежачої краплі". На сформоване остигле вогнетривке покриття за динасовою основою поміщали зразки шлаків різного складу у вигляді таблеток діаметром 20 мм і висотою 7 мм. Зразки нагрівали до температури розм'якшення шлаків (1100 °С) і витримували 20 хв. Після остигання шлаків вимірювали кут змочування, що дорівнює ($180^\circ - \theta$).

Досліджували змочування шлаками покриттів, отриманих в атмосфері вуглекислого газу. Склад шлаків наведено в табл. 3.36.

Хімічний склад використаних шлаків

№ шлаків	Хімічний склад, мас. %				
	Al ₂ O ₃	SiO ₂	B ₂ O	Na ₂ O	CaO
1	5	60	–	22	13
2	5	50	27	12	46
3	7	43	21	23	64

Результати виміру кута змочування наведені на рис. 3.52.

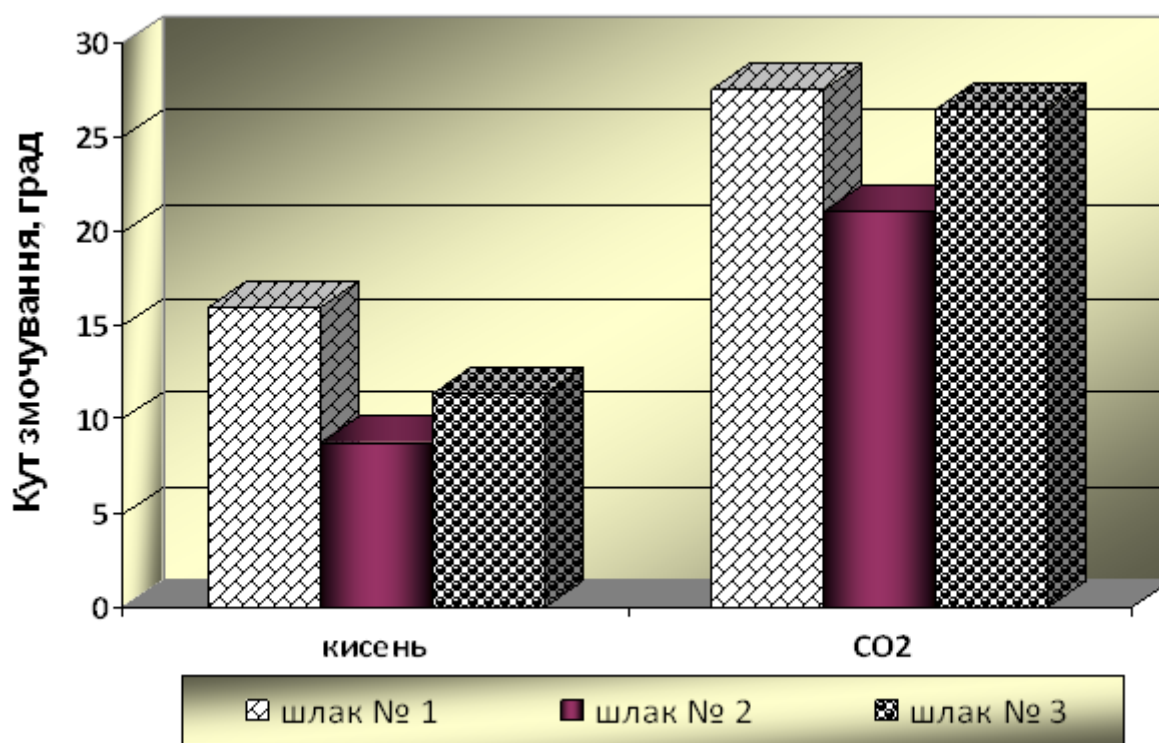


Рис. 3.52. Вплив типу окислювача на кут змочування покриття на основі суміші: динас – 30 % Al

Як видно з рис. 3.52, використання в якості окислювача диоксиду вуглецю приводить до значного збільшення кута змочування отриманого покриття не залежно від хімічного складу шлаків. Очевидно, в результаті екзотермічної реакції окиснення алюмінію в середовищі вуглекислого газу, відбувається процес коксування в порах вогнетривкого покриття, що утворюється.

Таким чином, у результаті проведених досліджень встановлено, що диоксид вуглецю є ефективним окиснювачем екзотермічних сумішей, що містять металеві порошки магнію й алюмінію.

Оптимальний вміст алюмінієвої пудри в екзотермічній суміші становить 30 %. Вогнетривкі покриття, отримані під час згоряння екзотермічних сумішей у середовищі вуглекислого газу, мають більш низьку змочуваність розплавами шлаків порівняно з аналогічними покриттями, отриманими в середовищі кисню. Окрім того, заміна кисню на CO_2 дозволяє значно знизити вибухонебезпечність процесу нанесення покриттів під час гарячого ремонту теплових агрегатів.

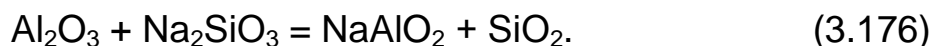
3.12.3. Математичне моделювання процесу окиснення гранули екзотермічної суміші

Для спрощення коригування складів екзотермічних сумішей на основі різних вогнетривких порошоків стосовно до конкретних умов гарячого ремонту теплового агрегату доцільно розробити математичні моделі зміни температури гранули екзотермічної суміші в процесі горіння. Процес попадання гранули екзотермічної суміші в струмені CO_2 до зони ремонту може бути описаний класичною моделлю складного гетерогенного процесу. Відповідно до цієї моделі реакція протікає на зовнішній поверхні гранули з фронтальним переміщенням зони реакції. При цьому зона реакції поступово просувається всередину гранули, а на поверхні утворюється прошарок твердих продуктів реакції, через який дифундують газоподібні продукти. Але класична модель потребує уточнення, тому що необхідно враховувати поруватість та теплопровідність вогнетривкого зерна, тепловий ефект екзотермічної реакції, який підвищує температуру в зоні реакції, та контролювати в'язкість розплаву, що утворюється на поверхні гранул.

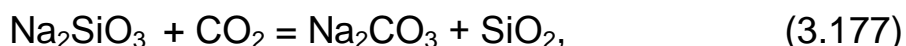
Гранула екзотермічної суміші складається з вогнетривкого зерна, покритого шаром суміші алюмінієвої пудри (Al) і рідкого скла (Na_2SiO_3). Під час влучення гранули в струмені окиснювача в робочий простір теплового агрегату ініціюється реакція екзотермічного окиснення алюмінію за двома конкуруючими схемами:



Ультратонкий аморфний оксид алюмінію може реагувати з розплавленим верхнім шаром рідкого скла з утворенням тугоплавкого алюмінату натрію:



У свою чергу, виділяється ультратонкий аморфний SiO_2 у приповерхневому розплавленому шарі рідкого скла, який може зреагувати з аморфним оксидом алюмінію з утворенням зародків вогнетривкої мулітової фази. Паралельно з перерахованими процесами можливі реакції CO_2 з вуглецем (продуктом реакції окиснення алюмінієвої пудри) і розплавом рідкого скла:



Основною проблемою під час проведення гарячого ремонту печей є необхідність точного контролю в'язкості розплаву, що утворюється на поверхні гранул. Відхилення від оптимального значення в'язкості в будь-який бік приводять до підвищення відсотка відскоку: за високої в'язкості розплаву гранула під час зіткнення з ремонтною поверхнею не приліпає до неї. За низької в'язкості розплаву він може стікати як під час польоту гранули, так і в момент зіткнення її з ремонтною футерівкою.

В'язкість розплаву, що утворюється на поверхні гранули, залежить, насамперед, від температури, яка дорівнює сумі температури в печі й температури додаткового розігріву поверхні гранули в результаті протікання екзотермічних реакцій.

У свою чергу, сумарний тепловий ефект від протікання екзотермічних реакцій залежить від часу реакції, товщини шару суміші алюмінію й рідкого скла, наявності каталізаторів, кількості алюмінієвої пудри, силікатного модуля рідкого скла і його щільності. Оптимальну в'язкість розплаву можна визначити, враховуючи всі ці чинники. Беручи до уваги, що теплові агрегати мають різне призначення, а футерівка повинна відповідати температурі служби печі, склад екзотермічної суміші для ремонту також вимагає коригування. До того ж велике значення має теплопровідність

вогнетривкого зерна, співвідношення Al / рідке скло, товщина покриття, пористість зовнішньої поверхні гранули, відстань і час польоту гранули в струмені окиснювача.

Побудова фізичної моделі екзотермічної гранули

Структура гранули екзотермічної суміші вихідного радіусу R_0 складається з твердої фази і адсорбованої води. До складу твердої фази входять: негорюче вогнетривке зерно, негорючий прошарок затверділого рідкого скла (Na_2SiO_3) і алюмінієва пудра – горюча частина, окислення якої в струмені CO_2 призводить до утворення твердих частинок Al_2O_3 , летючого компонента (оксид вуглецю CO) і коксового залишку (C).

Враховуючи, що процес нанесення покриття складається з двох стадій (I – перенос та прогрівання гранули в струмені окислювача до поверхні футерівки; II – подальше прогрівання гранули на поверхні футерівки та її спікання з футерівкою), для спрощення математичних перетворень задачу було поділено на декілька етапів. На першому етапі (стадія I) відбувається первинний підігрів гранули і випаровування вільної води.

Структура гранули екзотермічної суміші вихідного радіуса R_0 складається із твердої фази й адсорбованої води, яка перебуває у відкритих порах (фізична вода) і у вигляді молекулярного шару на поверхні гранули (адсорбована вода).

Вихідний обсяг пор у гранулі визначається початковою пористістю гранули ϵ_0 та дорівнює:

$$V_{\text{пор}} = \frac{4 \pi R_0^3}{3 \epsilon_0} \quad (3.179)$$

Ступінь заповнення пор вільною (фізичною) водою визначають коефіцієнтом $\epsilon_{\text{в.в}}$.

Математичні моделі за сумарною щільністю $\rho_{\text{ТВ}}$, сумарною питомою теплоємністю $c_{\text{ТВ}}$, загальною теплопровідністю $\lambda_{\text{ТВ}}$ твердої фази та пористості ϵ_0 на різних етапах горіння визначають за формулами:

$$\rho = \frac{1}{\left(\frac{x_{\text{ТВ}}}{\rho_{\text{ТВ}}} + \frac{x_{\text{C}}}{\rho_{\text{C}}} + \frac{x_{\text{CO}}}{\rho_{\text{CO}}} + \frac{x_{\text{ад.в}}}{\rho_{\text{ад.в}}} \right)} \quad (3.180);$$

$$c = x_{\text{ТВ}} \cdot c_{\text{ТВ}} + x_{\text{С}} \cdot c_{\text{С}} + x_{\text{СО}} c_{\text{СО}} + x_{\text{ад.в}} c_{\text{ад.в}}; \quad (3.181);$$

$$\lambda = x_{\text{ТВ}} \lambda_{\text{ТВ}} + x_{\text{С}} \lambda_{\text{С}} + x_{\text{СО}} \lambda_{\text{СО}} + x_{\text{ад.в}} \lambda_{\text{ад.в}}; \quad (3.182);$$

$$\varepsilon_{\text{O}} = 1 - \frac{(1 - \varepsilon) \cdot \left(\frac{x_{\text{ТВ}}}{\rho_{\text{ТВ}}} + \frac{x_{\text{С}}}{\rho_{\text{С}}} + \frac{x_{\text{СО}}}{\rho_{\text{СО}}} \right)}{\left(\frac{x_{\text{ТВ}}}{\rho_{\text{ТВ}}} + \frac{x_{\text{С}}}{\rho_{\text{С}}} + \frac{x_{\text{СО}}}{\rho_{\text{СО}}} + \frac{x_{\text{ад.в}}}{\rho_{\text{ад.в}}} \right)}, \quad (3.183),$$

де $x_{\text{ТВ}}$ – масова частка твердої фази щільністю $\rho_{\text{ТВ}}$, питомою теплоємністю $c_{\text{ТВ}}$, теплопровідністю $\lambda_{\text{ТВ}}$;

$x_{\text{С}}$ – масова частка коксового залишку щільністю $\rho_{\text{С}}$, питомою теплоємністю $c_{\text{С}}$, теплопровідністю $\lambda_{\text{С}}$;

$x_{\text{СО}}$ – масова частка летючих щільністю $\rho_{\text{СО}}$, питомою теплоємністю $c_{\text{СО}}$, теплопровідністю $\lambda_{\text{СО}}$;

$x_{\text{ад.в}}$ – масова частка адсорбованої води щільністю $\rho_{\text{ад.в}}$, питомою теплоємністю $c_{\text{ад.в}}$, теплопровідністю $\lambda_{\text{ад.в}}$;

$\varepsilon_{\text{ТВ}}$ – пористість твердої фаза;

ε – початкова пористість.

Прийmemo, що початковий радіус пор рівний $r_{\text{ор}}$, залежить від технології гранулювання екзотермічної суміші. Залежність числа пор від їхнього радіуса $r (0 \leq r \leq R_0)$ визначають співвідношенням:

$$N_p(r) = 4\varepsilon \left(\frac{r}{r_{\text{ор}}} \right)^2 = N_p(R_0) \cdot \left(\frac{r}{R_0} \right)^2, \quad (3.184)$$

де $N_p(R_0) = N_{\text{пор}}$ – загальне число пор на поверхні твердої гранули, яке під час подальших змін твердої фази залишається незмінним.

Вихідну питому поверхню твердої фази визначають співвідношенням:

$$S_0 = \frac{2\varepsilon_0}{r_{\text{пор}}}. \quad (3.185)$$

У міру видалення із твердої фази адсорбованої води, буде мінятися відкрита пористість гранули та, відповідно, питома поверхня окремих ділянок гранули.

Аналіз початкового прогріву екзотермічної гранули та випаровування вільної вологи (етап 1)

Початковий прогрів гранули описують рівнянням:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \alpha \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} + \frac{2\alpha}{r} \frac{\partial \theta}{\partial r}, 0 \leq r \leq R, \quad (3.186)$$

з граничними умовами:

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \lambda \left. \frac{\partial \theta}{\partial r} \right|_{r=R} = \alpha_{\text{кон}}(t_r - \theta(R)) + \alpha_{\text{рад}}(t_{\text{ф}} - \theta(R)), \quad (3.187)$$

де $\alpha = \frac{\lambda_{\text{ТВ}}}{\rho_{\text{ТВ}} \cdot c_{\text{ТВ}}}$ – коефіцієнт теплопроводності гранули, м²/с;

$\alpha_{\text{кон}}$, $\alpha_{\text{рад}}$ – коефіцієнти конвективної і наведеної радіаційної тепловіддачі;

t_r – температура газу (°C);

$t_{\text{ф}}$ – температура факела (°C).

Наведений коефіцієнт радіаційної тепловіддачі визначають із виразу:

$$\alpha_{\text{рад}} = \varepsilon_{\text{рад}} \cdot \sigma \cdot 10^{-8} \cdot [(t_{\text{ф}} + 273)^3 + (t_{\text{ф}} + 273)^2 \cdot (\theta(R) + 273) + (t_{\text{ф}} + 273) \cdot (\theta(R) + 273)^2 + (\theta(R) + 273)^3],$$

де $\varepsilon_{\text{рад}}$ – наведений коефіцієнт чорноти частинки;

$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$ – постійна Стефана-Больцмана (Вт/(м² × К⁴)).

Рішення рівняння (3.186) з граничними умовами (3.187) на інтервалі $[0, R_0]$ здійснюється методом різниць за неявною схемою з кроком у часі Δt і радіусу $\Delta r = \text{const}$. Для вирішення відповідної системи лінійних алгебраїчних рівнянь використовується метод прогону.

У момент часу τ_1 , коли температура поверхні – $\theta(R)$ досягає температури кипіння вільної води в порах – $t_{\text{кип.в.в}}$, утворюється фронт випаровування вільної води радіуса R_1 , швидкість руху якого визначають рівнянням:

$$\frac{\partial R_1}{\partial \tau} = \frac{-((1 - \varepsilon)q_1 - q_2)}{\varepsilon \cdot \varepsilon_{\text{в.в}} \rho_{\text{в.в}} \cdot \Delta H_{\text{в.в}}}, \quad (3.188)$$

де ε – початкова пористість;

$\varepsilon_{в.в}$ – пористість гранули, де випаровується вільна вода:

$$\varepsilon_{св.в} = 1 - \frac{(1 - \varepsilon) \cdot \left(\frac{x_{ТВ}}{\rho_{ТВ}} + \frac{x_C}{\rho_C} + \frac{x_{CO}}{\rho_{CO}} \right)}{\left(\frac{x_{ТВ}}{\rho_{ТВ}} + \frac{x_C}{\rho_C} + \frac{x_{CO}}{\rho_{CO}} + \frac{x_{ад.в}}{\rho_{ад.в}} \right)}, \quad (3.189)$$

$\Delta H_{в.в}$ – питома теплота випаровування вільної води;

q_1 – щільність теплового потоку на границі випаровування;

q_2 – щільність теплового потоку, що відходить у в середину частинки:

$$q_1 = \lambda_{ТВ} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=R_{1+0}}; \quad q_2 = \lambda_{ТВ} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=R_{1-0}}. \quad (3.190)$$

Передбачається, що підведення тепла здійснюється за скелетом твердої фази. Витрати випарованої вологи визначають за рівнянням:

$$G_{в.1} = \frac{4\pi R_1^2 \cdot ((1 - \varepsilon) \cdot q_1 - q_2)}{\Delta H_{в.в}} \quad (3.191)$$

Подальше рішення рівняння (3.186) на ділянці $[0, R_1]$, що містить вільну вологу, здійснюють зі змінним кроком Δr , при цьому друга гранична умова (3.187) набуває вигляду $\theta(R_1) = t_{кп.в.в}$. Рішення триває до моменту видалення всієї вільної вологи з пор, у разі виконання умови $R_1 \approx 0$. Результати розрахунку процесу прогріву частки до початку видалення вільної вологи наведені на рис. 3.53, за умови: вихідний діаметр частинки – 3 мм; початкова відносна вологість – 13 %; вихідна пористість гранули – 0,8; температура навколишнього середовища – 900 °С.

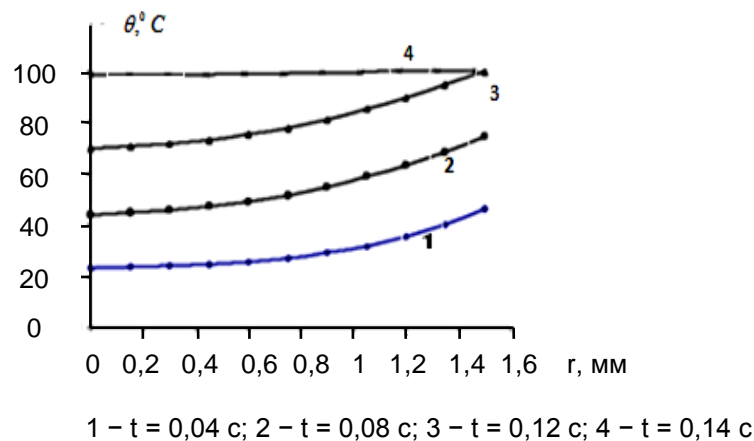


Рис. 3.53. Зміна температури гранули по радіусу на етапі прогріву

Аналіз процесу прогріву твердої фази екзотермічної гранули й видалення зв'язаної води (етап 2)

Наступні процеси на ділянці твердої фази, що утворювався після видалення вільної води з пор, зв'язані не тільки з подальшим прогрівом, але й із послідовним видаленням спочатку зв'язаної вологи, а потім летучих компонентів. Через відсутність надійних даних про кінетику цих процесів передбачається, що кожний з них відбувається за певної температури, яка залишається постійною до повного видалення відповідного компоненту. Саме видалення пов'язане з витратою певної кількості енергії.

Рівняння, які описують нагрів твердої фази і пари, мають вигляд:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} + \frac{2\alpha}{r} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{S_{\text{ТВ}} \cdot \alpha (t_{\text{кип}} - \theta)}{(1 - \varepsilon) \rho_{\text{ТВ2}} c_{\text{ТВ2}}}, \quad (3.191)$$

$$R_1 \leq r \leq R_0,$$

$$\frac{\partial t_{\text{кип}}}{\partial r} = \frac{4\pi r^2 S_{\text{ТВ}} \alpha (\theta - t_{\text{кип}})}{G_{\text{В.П}} c_{\text{В.П}}}. \quad (3.193)$$

Граничні умови для температури твердої фази θ мають вигляд:

$$\theta(R_1) = t_{\text{вип.ад.в}}; \quad \lambda_{\text{ТВ.2}} \frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=R_0} = \alpha_{\text{конд}} (t_{\text{г}} - \theta(R_0)) + \alpha_{\text{рад}} (t_{\text{ф}} - \theta(R_0)). \quad (3.194)$$

Для температури випаровування вологи $t_{\text{вип}}$ маємо таку умову при:

$$r = R_1 \quad t_{\text{вип.ад.в}}(R_1) = t_{\text{кип.в.в}}, \quad (3.195)$$

де $\alpha = \frac{\lambda_{\text{ТВ2}}}{\rho_{\text{ТВ2}} \cdot c_{\text{ТВ2}}}$, $\lambda_{\text{ТВ2}} = \lambda_{\text{ТВ}}$, $\rho_{\text{ТВ2}} = \rho_{\text{ТВ}}$, $c_{\text{ТВ2}} = c_{\text{ТВ}}$;

$S_{\text{ТВ}}$ – питома поверхня;

$c_{\text{В.П}}$ – питома теплоємність водяної пари (Дж/(гК)).

Рішення рівнянь (3.192, 3.193) за умов (3.194, 3.195) на інтервалі $[R_1, R_0]$ виконують методом матричного прогону.

У момент часу t_2 , коли температура поверхні $\theta(R_0)$ досягає температури виділення зв'язаної води, утворюється фронт виділення зв'язаної води радіуса R_2 , швидкість руху якого визначається рівнянням:

$$\frac{\partial R_2}{\partial t} = \frac{-(q_3 - q_4)}{\rho_{\text{ТВ.В2}} \cdot x_{\text{ад.В}} \Delta H_{\text{ад.В}}}, \quad (3.196)$$

де $\Delta H_{\text{св.В}}$ – питома теплота виділення зв'язаної води (Дж/г);

q_3 – щільність теплового потоку на границі R_2 ;

q_4 – щільність теплового потоку, що відходить від границі R_2 всередину гранули:

$$q_3 = \lambda_{\text{ТВ3}} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=R_{2+0}}; \quad q_4 = \lambda_{\text{ТВ2}} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=R_{2-0}},$$

де $\lambda_{\text{ТВ3}}$ – теплопровідність твердої фази після видалення зв'язаної води;

$x_{\text{ад.В}}$ – частка зв'язаної води (Вт/(м °С)).

Витрати випарюваної вологи визначають за рівнянням:

$$G_{\text{вип2}} = \frac{4\pi R_2^2 \cdot ((1 - \varepsilon_{\text{ад.В}}) \cdot q_3 - (1 - \varepsilon) q_4)}{\Delta H_{\text{ад.В}}}.$$

Подальше рішення рівнянь (3.192, 3.193) здійснюють на ділянці видалення зв'язаної вологи $[R_1, R_2]$ при цьому друга гранична умова (3.194) набуває вигляду $\theta(R_2) = t_{\text{вип.ад.В}}$.

Крім того, в момент, коли завершується випаровування всієї вільної води в порах ($R_1 \approx 0$), перша умова в (3.194) набуває вигляду:

$$\frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0.$$

Розрахунок на даній ділянці триває до виконання умови $R_2 \approx 0$, що відповідає моменту видалення всієї зв'язаної вологи.

Аналіз процесу прогріву твердої фази екзотермічної гранули й видалення летучих (етап 3)

Настає етап 3 (стадія II) – прогрів твердої фази, утворення прошарку розплаву на поверхні гранули і видалення летучих речовин. Після видалення зв'язаної вологи теплофізичні параметри твердої фази визначаються зі співвідношень (3.180 – 3.183):

$$\rho_{\text{ТВ3}} = \frac{(1 - x_{\text{ад.в}})}{\left(\frac{x_{\text{ТВ}}}{\rho_{\text{ТВ}}} + \frac{x_{\text{С}}}{\rho_{\text{С}}} + \frac{x_{\text{СО}}}{\rho_{\text{СО}}}\right)}; \quad (3.197)$$

$$c_{\text{ТВ3}} = \frac{x_{\text{ТВ}}c_{\text{ТВ}} + x_{\text{С}}c_{\text{С}} + x_{\text{СО}}c_{\text{СО}}}{1 - x_{\text{ад.в}}}; \quad (3.198)$$

$$\lambda_{\text{ТВ3}} = \frac{x_{\text{ТВ}}\lambda_{\text{ТВ}} + x_{\text{С}}\lambda_{\text{С}} + x_{\text{СО}}\lambda_{\text{СО}}}{1 - x_{\text{ад.в}}}; \quad (3.199)$$

$$\varepsilon_3 = 1 - \frac{(1 - \varepsilon_0) \cdot \left(\frac{x_{\text{ТВ}}}{\rho_{\text{ТВ}}} + \frac{x_{\text{С}}}{\rho_{\text{С}}}\right)}{\left(\frac{x_{\text{ТВ}}}{\rho_{\text{ТВ}}} + \frac{x_{\text{С}}}{\rho_{\text{С}}} + \frac{x_{\text{СО}}}{\rho_{\text{СО}}} + \frac{x_{\text{ад.в}}}{\rho_{\text{ад.в}}}\right)}. \quad (3.200)$$

Рівняння, які описують нагрів твердої фази і пара мають вигляд, аналогічний процесу нагріву і видалення зв'язаної води:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} + \frac{2\alpha}{r} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{S_{\text{ТВ}} \cdot \alpha (t_{\text{кип}} - \theta)}{(1 - \varepsilon) \rho_{\text{ТВ3}} c_{\text{ТВ3}}}, R_2 \leq r \leq R_0, \quad (3.201)$$

$$\frac{\partial t_{\text{кип}}}{\partial r} = \frac{4\pi r^2 S_{\text{ТВ}} \alpha (\theta - t_{\text{кип.в.в}})}{G_{\text{вип3}} c_{\text{вип.ад.в}}}. \quad (3.202)$$

Граничні умови для температури твердої фази θ мають вигляд:

$$\theta(R_2) = t_{\text{кип.ад.в}}; \quad \lambda_{\text{ТВ.3}} \frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=R_0} = \alpha_{\text{конд}} (t_{\text{г}} - \theta(R_0)) + \alpha_{\text{рад}} (t_{\text{ф}} - \theta(R_0)). \quad (3.203)$$

Для пара при $r = R_2$:

$$t_{\text{кип}}(R_2) = \frac{G_{\text{в1}} t_{\text{кип2}} + G_{\text{в2}} t_{\text{кип.ад.в}}}{G_{\text{в1}} + G_{\text{в2}}} = \frac{G_{\text{в1}} t_{\text{кип2}} + G_{\text{в2}} t_{\text{кип.ад.в}}}{G_{\text{в3}}}, \quad (3.204)$$

де $G_{\text{в3}} = G_{\text{в1}} + G_{\text{в2}}$;

Рішення рівнянь (3.201, 3.202) з умовами (3.203, 3.204) на інтервалі $[R_2, R_0]$ здійснюється так само, як і під час видалення зв'язаної води.

У момент t_3 , коли температура поверхні – $\theta(R_0)$ досягає температури видалення летючих – $t_{\text{вип CO}}$, утворюється фронт радіуса R_3 , швидкість руху якого визначають рівнянням:

$$\frac{\partial R_3}{\partial t} = \frac{-(q_5 - q_6)}{\rho_{\text{ТВ3}} \cdot x_{\text{CO}} \Delta H_{\text{CO}}},$$

де ΔH_{CO} – питома теплота видалення летючих речовин;

q_5 – щільність теплового потоку, що приходить ззовні на границі R_3 ;

q_6 – щільність теплового потоку, що відходить від кордону R_3 в середину частинки:

$$q_5 = \lambda_{\text{ТВ4}} \cdot \left. \frac{\partial \theta}{\partial r} \right|_{r=R_{3+0}}; \quad q_6 = \lambda_{\text{ТВ3}} \cdot \left. \frac{\partial \theta}{\partial r} \right|_{r=R_{3-0}},$$

де $\lambda_{\text{ТВ4}}$ – теплопровідність твердої фази після видалення летких.

Витрату летючих визначають із рівняння:

$$G_{\text{CO}} = \frac{4\pi R_3^2 \cdot ((1 - \epsilon_3) \cdot q_5 - (1 - \epsilon_2) q_6)}{\Delta H_{\text{CO}}},$$

де ΔH_{CO} – теплота виділення летких.

Подальше рішення рівнянь (3.201, 3.202) здійснюють на ділянці видалення летючих $[R_2, R_3]$, при цьому друга гранична умова (3.203) набуває вигляду $\theta(R_2) = t_{\text{видCO}}$. Крім того, в момент, коли завершується видалення всієї зв'язаної води ($R_2 \approx 0$), перша умова в (3.204) набуває вигляду: $\left. \frac{\partial \theta}{\partial r} \right|_{r=0} = 0$. У всіх зазначених розрахунках, крім розподілу температури твердої фази, обчислюють також температуру парового потоку $G_{\text{В3}}$ на виході з ділянки – $t_{\text{видCO}}$. Розрахунок на цій ділянці триває до виконання умови $R_3 \approx 0$, що відповідає моменту видалення всіх летючих.

На рис. 3.54 подано результати розрахунків процесу на етапах видалення вільної й зв'язаної води, видалення летучих і прогріву вуглецевого залишку до моменту горіння летучих на поверхні гранули (вихідний діаметр гранули 3 мм; початкова відносна вологість – 13 %; вихідна пористість гранули – 0,8; температура навколишнього середовища – 900 °С).

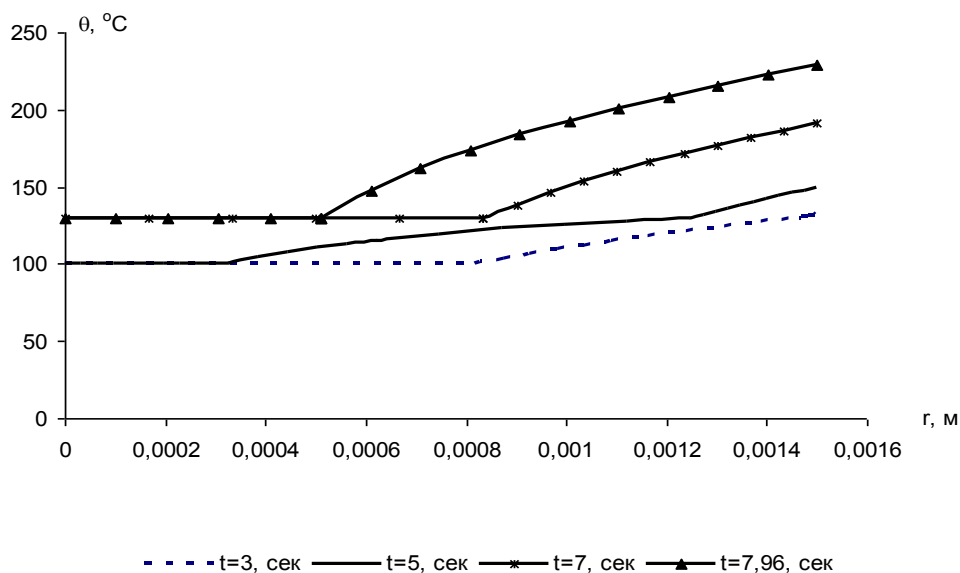


Рис. 3.54. Зміна температури гранули по радіусу на етапах видалення вільної й зв'язаної води, видалення летучих і прогріву вуглецевого залишку до моменту горіння летучих на поверхні

Аналіз процесу факельного горіння летучих і зовнішнього вигорання коксового залишку екзотермічної гранули (етап 4)

Процес факельного горіння, об'ємного нагріву твердої фази летучих і зовнішнього вигорання коксового залишку відбувається на етапі 4 (стадія II).

Після видалення зв'язаної води і летучих, тверда фаза складається з вогнетривкого компоненту і вуглецевого залишку. Її теплофізичні параметри визначають зі співвідношень:

$$\rho_{ТВ4} = \frac{(1 - x_{ад.в} - x_{CO})}{\left(\frac{1}{\rho_{ТВ}} + \frac{1}{\rho_{C}}\right)}; \quad (3.205)$$

$$c_{ТВ4} = \frac{x_{ТВ}c_{ТВ} + x_{C}\lambda_{C} + x_{CO}\lambda_{CO}}{1 - x_{ад.в} - x_{CO}}; \quad (3.206)$$

$$\lambda_{ТВ4} = \frac{x_{ТВ4}\lambda_{ТВ} + x_C\lambda_C + x_{CO}\lambda_{CO}}{1 - x_{ад.в} - x_{CO}}; \quad (3.207)$$

$$\varepsilon_{ТВ4} = 1 - \frac{(1 - \varepsilon_0) \cdot \frac{x_{ТВ}}{\rho_{ТВ}}}{\left(\frac{x_{ТВ}}{\rho_{ТВ}} + \frac{x_C}{\rho_C} + \frac{x_{CO}}{\rho_{CO}} + \frac{x_{ад.в}}{\rho_{ад.в}}\right)}. \quad (3.208)$$

На цій ділянці тверда фаза контактує з газовим потоком, що складається із суміші водяної пари і летких у газовій формі, концентрація яких дорівнює:

$$x_{CO} = \frac{G_{CO}}{G_{в.3} + G_{CO}}.$$

Рівняння, які описують нагрів твердої і змішаної газоподібної фази мають вигляд:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} + \frac{2\alpha}{r} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{S_{ТВ} \cdot \alpha (t_{кип} - \theta)}{(1 - \varepsilon) \rho_{ТВ4} c_{ТВ4}}, R_2 \leq r \leq R_0, \quad (3.209)$$

$$\frac{\partial t_{кип}}{\partial r} = \frac{4\pi r^2 S_{ТВ} \alpha (\theta - t_{кип})}{G_{в.4} c_{в.4}}. \quad (3.210)$$

Граничні умови для температури твердої фази θ мають вигляд:

$$\theta(R_3) = t_{вид\ CO}; \quad \lambda_{ТВ.4} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=R_0} = \alpha_{кон}(t_r - \theta(R_0)) + \alpha_{рад}(t_{ф} - \theta(R_0)). \quad (3.211)$$

Для газоподібної фази маємо такі умови при $r = R_3$:

$$t_r(R_3) = \frac{G_{в.3} c_{в.3} t_{в.3} + G_{CO} c_{CO} t_{вид.CO}}{G_{в.4} c_{в.4}}, \quad (3.112)$$

де $G_{в.4} = G_{в.3} + G_{CO}$, $c_{в.4} = (1 - x_{CO}) \cdot c_{CO} + x_{CO} \cdot c_{CO}$, c_{CO} – теплоємність газоподібної форми летючих.

Рішення рівнянь (3.209, 3.210) з умовами (3.211, 3.112) на інтервалі $[R_3, R_0]$ здійснюють так само, як і на попередніх ділянках.

Цей процес триває, поки поверхня частинки не досягне температури t_{CO} займання летючих. Маємо для рівняння (2.43) замість другої умови (2.45) наступну граничну умову ($r = R_0$):

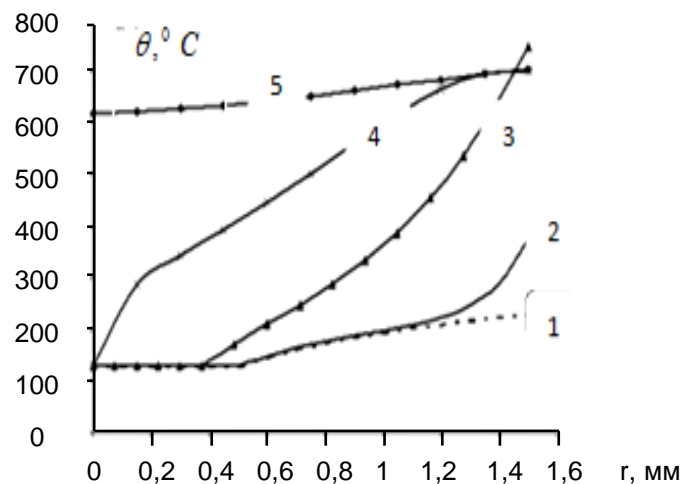
$$\lambda_{ТВ4} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=R_0} = \alpha_{кон}(t_{г} - \theta(R_0)) + \alpha_{рад}(t_{ф} - \theta(R_0)) + G_{CO}(1,313c_{CO} \cdot \theta + H_{CO}),$$

де c_{CO} – питома теплоємність летючих у газовому стані;

H_{CO} – питома теплота згоряння летючих речовин;

1,313 – коефіцієнт, що відображає збільшення об'єму продуктів згоряння відносно до витрат летючих.

Після повного видалення з твердої фази летючих та їх згоряння починається фаза вигорання вуглецевого залишку (етап 5, стадія II). На рис. 3.55 подано результати розрахунку процесу на етапах видалення летючих речовин та їх згоряння на поверхні гранули, що закріпилася на поверхні футерівки, з одночасним прогріванням вуглецевого залишку. Після повного видалення з твердої фази летючих та їх згоряння починається фаза вигорання вуглецевого залишку (етап 5).



1 - $t = 0,78$ с; 2 - $t = 0,8$ с; 3 - $t = 0,82$ с; 4 - $t = 0,84$ с; 5 - $t = 0,86$ с

Рис. 3.55. Зміна температури гранули по радіусу на етапах видалення летючих і їх згоряння на поверхні гранули

Отже, у результаті проведених досліджень встановлено:

1. Прогрівання гранули (в момент руху в струмені окислювача) з вихідним діаметром 3 мм, початковою відносною вологістю – 13 %,

температурою 20 °С і початковою пористістю 0,8 в середовищі з температурою 900 °С до температури активного видалення вільної вологи (100 °С) відбувається за 0,14 с.

2. Через 0,36 с поверхня гранули прогрівається до 120 °С, що призводить до протікання одночасних процесів видалення вільної вологи з глибших шарів гранули та зв'язаної вологи з її поверхні.

3. Під час прогрівання поверхні гранули (в момент її попадання на поверхню футерівки, що ремонтується) до температури вище 130 °С починається виділення летючих, утворюється фронт їх видалення. Повне видалення вільної вологи настає через 5,8 с, при цьому поверхня гранули прогрівається до 165 °С.

4. Через 8 с поверхня гранули прогрівається вище 230 °С і починається горіння летких. Повне видалення зв'язаної вологи настає через 8,6 с, при цьому поверхня гранули прогрівається до 700 °С і починається горіння вуглецевого залишку. У цей момент починається спікання продуктів окислення гранули.

Отримані результати дозволяють визначити час прогрівання гранул на основі вогнетривких наповнювачів різних фазових складових та теплофізичних характеристик. Одержання такої інформації дозволяє корегувати склад екзотермічної суміші для забезпечення мінімального відсотка відскоку під час нанесення покриття за рахунок одержання оптимальної в'язкості розплаву на поверхні гранул екзотермічної суміші.

3.13. Моделювання аудіовізуального супроводження конструкторсько-технологічних рішень

У сучасному житті моделювання із застосуванням сучасних інформаційних технологій дозволяє з одного боку, суттєво скорочувати матеріальні, людські та часові витрати на виготовлення одиниці продукції, з іншого – припускає зниження антропогенного навантаження на навколишнє середовище, біосферу.

Безумовно досконале володіння інформаційно-комунікативними комп'ютерними технологіями та методиками їх вживання для підвищення якості виробів, знаходження нестандартних рішень та компетентної підготовки конкурентоздатних фахівців є вимогою часу. Інформаційні технології (ІТ) є важливою складовою різних видів технологій. Вони відіграють

у них роль інтелектуального центру, який відповідає за прискорення процесів отримання, розповсюдження і використання суспільством нових знань.

На сьогодні розроблено безліч програм моделювання для техніко-технологічного проектування конструкцій виробів, емуляції процесів роботи різних електронних і механічних пристроїв із можливістю оперативного редагування їх параметрів під час одночасного аудіовізуального супроводу, демонстрації їх функціонування.

Моделювання як процес творчості розробника й експериментатора, і водночас як інструмент в руках дослідника надає широкі можливості візуалізації процесів різноманітної природи походження з тієї роздільною здатністю, яка обмежується тільки можливостями сучасних комп'ютерних технологій.

Математичні і науково-технічні розрахунки є важливою сферою застосування персональних комп'ютерів (ПК). Сьогодні цю роботу нерідко виконують звичайні користувачі ПК. Для цього вони змушені вивчати мови програмування і численні, часом досить тонкі, примхливі чисельні методи математичних розрахунків, що займає багато часу.

Це положення може змінити застосування, наприклад, інтегрованої програмної системи автоматизації математичних розрахунків *Mathcad*. Фірма *MathSoft Inc.* (США) випустила першу версію системи ще в 1986 році. Головною відмінною рисою системи *Mathcad* є її вхідна мова, яка максимально наближена до природньої математичної мови. Під час роботи із системою користувач готує інтерактивні документи з візуальним супроводом, у тому числі і для командної роботи. Для користувача важливо, щоб програмний продукт мав простий та інтуїтивно зрозумілий інтерфейс, і *Mathcad* його має. Формули та дані вводяться з клавіатури та з панелі інструментів, а вирази відображаються графічно, на відміну від текстового запису у мовах програмування.

Під час створення документів-додатків використовують принцип *WYSIWYG (What You See Is What You Get)* – "що бачиш, те й отримуєш". Відкрита архітектура додатків у поєднанні з підтримкою технологій *.NET* і *XML (Extensible Markup Language)* дозволяють легко інтегрувати *Mathcad* практично в будь-які ІТ-структури й інженерні додатки. Крім того, програмна система автоматизації математичних розрахунків *Mathcad* надає можливість створювати електронні книги (*e-Book*).

У цей час значні переваги в питаннях опрацювання конструкторсько-технологічних рішень надають такі програмні продукти, як *ANSYS*, *Autodesk Inventor*, *AutoCAD*, *Blender* – технології створення цифрових прототипів, комплекти програмних утиліт для 3D моделювання, як окремих деталей виробів, так і закінчених складних комплексів. Будучи наукомісткими технологіями комп'ютерного інжинірингу (*Computer-Aided Engineering, CAE*), із застосуванням сучасних засобів візуалізації: *CAD*, *Computer-Aided Design* та комп'ютерного проектування з використанням методу кінцевих елементів (*MKE; Finite Element Method, FEM*) вони є основоположною парадигмою сучасного космічного та авіабудування, виготовлення автомобілів, електроавтомобілів, пристроїв перетворення енергії.

За допомогою CAE-систем розробляють і застосовують раціональні математичні моделі, що володіють високим рівнем адекватності реальним об'єктам і реальним фізико-механічним процесам. Рішення багатовимірних дослідних та промислових завдань у таких системах виконуються більш ефективно і описуються, як правило, нестационарними нелінійними диференціальними рівняннями в приватних похідних у просторових областях складної форми, а відповідними термінами уточнюють спеціалізацію програмного середовища, наприклад, *MCAE (Mechanical CAE, механіка)*, *ECAE (Electrical CAE, електрика)*, *AEC (Architecture, Engineering and Construction)* [78].

Відмінною характеристикою нашого часу є створення із застосуванням сучасних технологій нових функціональних матеріалів із заданими фізико-механічними властивостями, які, з одного боку, є "матеріалами – конструкціями", а з іншого – самі є складовою частиною або компонентом великої конструкції (автомобіля, космічної станції і т. д.)

Завдяки відкриттю німецького фізика М. Лауе (у 1912 р.) явища – дифракції рентгенівських променів на кристалах стало можливим проводити рентгеноструктурний аналіз хімічних сполук та отримувати експериментальним методом відомості про атомну будову речовини. Безумовно хімічний склад мінералів – це фундаментальна характеристика, від якої більшою мірою залежать різні фізичні властивості. Однак властивості мінералів більшою мірою залежать і від геометричного розташування складових структури з'єднань атомів, іонів або молекул, від природи хімічних сил – хімічних зв'язків, реалізованих в тому чи іншому кристалі [54]. Сучасні програмні продукти дозволяють розробляти візуальні 3D моделі просторового розташування атомів у структурі кристалічних тіл. Як приклад,

зображено структури двох модифікацій олова: білого, яке має тетрагональну об'ємноцентровану сингонію (рис. 3.56а) і сірого олова, що має кубічну сингонію типу алмазу (рис. 3.56б).

Під дією низьких температур біле олово переходить у сіре, а збільшення об'єму, створює у металі значні напруги та тріщини, що перетворює його на кристалічний сірий порошок і призводить до відмов у роботі виробів та завдає великі збитки. Для усунення цього явища, наприклад, у конструкціях багат шарових мікрокабелів, мікробірок та модулів для міжнародного експерименту *ALICE* (*A Large Ion Collider Experiment*), застосовувалась композиція олово-вісмут (SnBi), що дозволило усунути відмови із цієї причини. *ALICE* є одним із семи експериментальних детекторів, споруджених на Великому адронному колайдері (ВАК, *Large Hadron Collider, LHC*) [3].

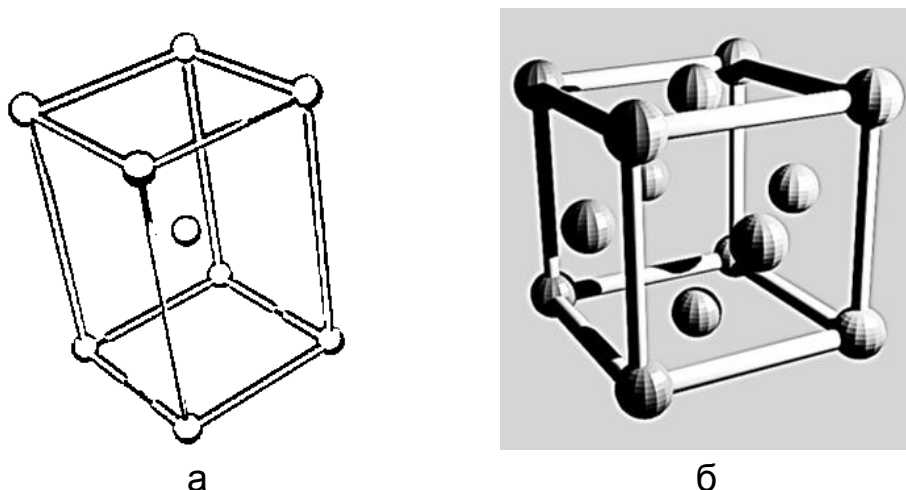


Рис. 3.56. Моделі елементарних ґраток кристалічних структур олова:
а – білого; б – сірого

Колаборація *ALICE*, фокусуючись на фізиці сильно взаємодіючої матерії за екстремально високих щільностях енергії, пізнає основне питання квантової хромодинаміки – існування кварк-глюонної плазми та її властивостей, що необхідно для пояснення конфайнмента і відновлення киральної симетрії. Відтворення цього початкового стану матерії і розуміння того, як вона еволюціонує, дозволяє пролити світло на питання організації матерії, про механізми, які з'єднують кварки і глюони, про природу сильних взаємодій і про те, як в результаті цих взаємодій утворюється більша частина маси звичайної речовини [214].

Під час виконання науково-дослідних робіт українськими вченими та інженерами, які входили до колаборації *ALICE* [214], була запропонована алюмінієва (*chip on flex*) технологія виготовлення та монтажу багат шарових мікрокабелів (плат) безпосереднього на контактні площинки чипів (кристалів) мікросхем із використанням лакофольгового діелектрика поліамідного ФДІ-А на алюмінієвій фользі товщиною 10, 14, 30 мкм. Діелектрик типу ФДІ, підданий термічній імідізації, може працювати в інтервалі температур 60 ÷ 200 °С. Мікроскладання з пасивними компонентами, яка входила до модуля мікростріпового детектора іонізуючих випромінювань, будучи багат шаровою структурою на базі лакофольгового діелектрика, складалася з гнучких плат із струмопровідними алюмінієвими провідниками, навісних стандартних компонентів і жорсткої основи з вуглепластику [68]. З'єднання шарів і струмопровідних елементів здійснювалося приклеюванням, ультразвуковим зварюванням та пайкою за відпрацьованими технологіями. Враховуючи, що конструкції проектувалися і виготовлялися з метою їх подальшого масового виробництва і тривалої експлуатації (12 років), замовник вимагав підтвердження надійності виробів. Дослідною групою одержано: метод оцінювання надійності в разі неповного контролю виробу, експериментальне значення показників надійності складових частин виробів, схеми надійності всіх складових частин та проведені циклічні прискорені випробування у форсованому режимі [68]. У якості чинника прискорення була обрана температура. Схема надійності мікроскладання містила 22 блоки, з котрих 18 блоків були доступні для контролю. Математична модель для розрахунку ймовірності безвідмовної роботи виробу – мікроскладання описується формулою:

$$\begin{aligned}
 P_{MC} = & \left[1 - (1 - p_{33})^{10} \right]^3 \times \left[1 - (1 - p_{33})^{10} \right] \times \left[1 - (1 - p_{33})^4 \right]^4 \times \\
 & \times \left[1 - (1 - p_{св})^2 \right]^{41} \times p_{св}^{112} \times \left[1 - (1 - p_{кл})^4 \right] \times p_{па}^{22} \times p_{кз}^{64} \times \\
 & \times p_{стр.ел.}^{207} \times p_R^5 \times p_C^5, \quad (3.113)
 \end{aligned}$$

де P_{MC} – ймовірності безвідмовної роботи виробу – мікроскладання;

p_{33} – ймовірність відмов елемента з'єднання зварюванням;

$p_{кл}$ – ймовірність відмов елемента клейового з'єднання;

$p_{па}$ – ймовірність відмов елемента з'єднання пайкою;

$p_{кз}$ – ймовірність відмов елемента коротке замикання незалежних ланцюгів;

$p_{стр.ел.}$ – ймовірність відмов струмопровідних елементів;

P_R – ймовірність відмов резистора;

P_C – ймовірність відмов конденсатора.

На рис. 3.57 зображено конструкцію контактуючого пристрою разом із дослідним зразком мікроскладання, встановленої для проведення контролю параметрів після термоциклічних випробувань.

Операції контролю, що є частиною технологічного процесу, дозволяють враховувати різні технологічні чинники, в тому числі відхилення режимів оброблення, властивості вихідного матеріалу, помилки операторів і, відповідно до цього свідомо керувати процесами виробництва. Процес проектування без урахування реальних виробничих похибок неминуче тягне за собою помилки, що призводять, або до значного браку, або до непотрібних ускладнень технологічного процесу і збільшення вартості виробу. Дослідною групою, яка відповідає за проектування мікрокабелів, було запропоновано для збирання інформації з контрольних операцій використовувати метод, який базується на дослідженні добре відомих в мікроелектроніці структур Ван-дер-Пау. Об'єктами випробувань були тестові структури, що містять можливі комбінації струмопровідних шарів Al, Al – Ni, Al – Ni – Sn/Bi. На рис. 3.58 зображена топологія тестових структур, що містять можливі комбінації струмопровідних шарів Al, Al – Ni, Al – Ni – Sn/Bi шириною від 800 до 50 мкм.

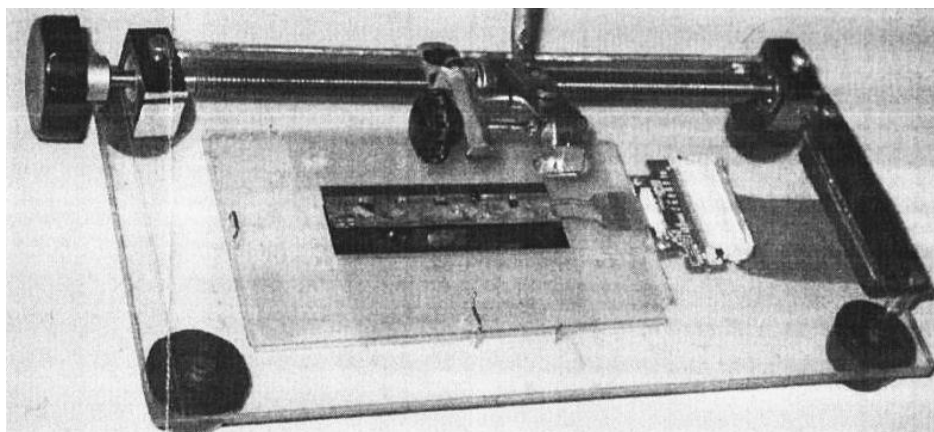


Рис. 3.57. Конструкція контактуючого пристрою з мікроскладанням

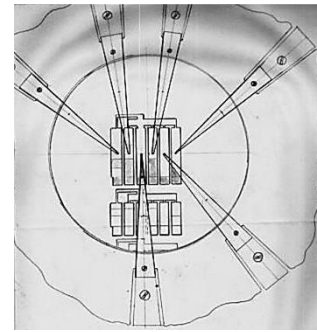
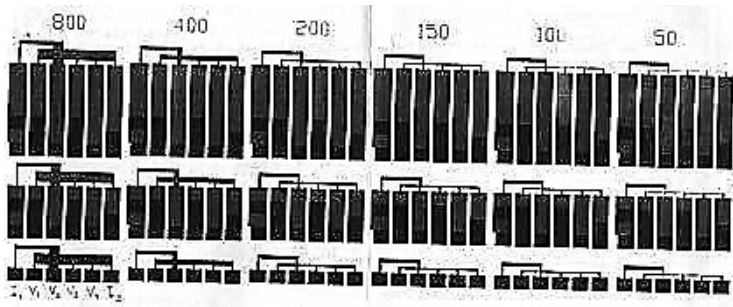


Рис. 3.58. Топологія тестових структур Ван-дер-Пау

Багато питань моделювання ергономічних і технологічних процесів значно ефективніше вирішуються із застосуванням сповіщувально-сигнальних пристроїв, розрахованих на с прийняття інформації слуховими аналізаторами людини. Сучасні тенденції розвитку спеціалізованих програм та пристроїв вказують на значний прогрес, який відбувався одночасно в декількох напрямках.

Один із них це створення *BIOS (Basic Input/Output System* – базової системи введення/виведення) провідними виробниками програм *AMI BIOS, Award BIOS, Phoenix BIOS*. У персональних і портативних комп'ютерах *BIOS* відповідає за стартовий запуск, налаштування обладнання, забезпечення функцій введення/виведення та процедуру самодіагностики (*Power-On Self Test – POST*). За наявності помилок у роботі устаткування запуск системи зупиняється і видаються відповідні, звукові сигнали, які вказують на несправність. Наприклад, звукові сигнали *Phoenix BIOS* складаються з кількох серій коротких гудків, які слідує із деяким інтервалом і сигнал із кодом 4 – 2 – 4 звучатиме так: чотири короткі гудки, пауза, два короткі гудки, пауза, чотири короткі гудки, що відповідає несправності – помилка центрального процесора. Звукові сигнали *AMI BIOS* звучатимуть згідно з причиною несправності наступним чином: п'ять коротких сигналів – несправність процесора; один довгий сигнал два коротких – несправність відеоадаптера. Для *Award BIOS* та *AMI BIOS*: один короткий сигнал вказує, що – помилка не виявлено і завантаження системи триває. У той самий час відсутність звукових сигналів свідчить про несправність блока живлення комп'ютера або системної плати, як в *Award BIOS* так і в *AMI BIOS*.

Другий напрямок розвитку – розроблення професійних програм для оброблення аудіоданих і створенням високоякісної музичної продукції.

Сучасні програмні продукти *Guitar Pro*, *Adobe Audition*, *Sibelius* мають практично необмежені можливості для моделювання звуку. Використовуючи їх різноманітний інструментарій, продемонструємо порядок створення (моделювання) музичних композицій, на прикладах складених і записаних авторами.

Процес творення вказує на прагнення забезпечити не тільки однозначне сприйняття аудіосигналу ("є сигнал" або "сигнал відсутній"), а й на естетичне його наповнення, збагачення палітрою звуків (у випадках, коли це можливо). Очевидність такої тенденції можна побачити за еволюцією дзвінків мобільних телефонів, яка відбувається і до теперішнього часу: від тривожних одиночних звуків до мелодій і цілих музичних творів. Відповідно, слід враховувати особливі психофізичні можливості як сприйняття аудіосигналів людиною – споживачем (слухачем), так і створення високохудожніх музично-вокальних творів для звуковідтворювальних пристроїв. Зрозуміло, що розробник аудіоапаратури не обов'язково повинен бути унікальним співаком або музикантом, тому важливо використовувати раніше накопичений досвід із безумовним урахуванням можливостей сучасних технологій.

Технологічний процес взаємодії людини із сучасними комп'ютерними технологіями дозволяє винахіднику за допомогою програмного середовища створювати вібрації, які підпорядковують собі фізичні об'єкти живої і віртуальної природи (моделювати звуки, створювати їх візуалізацію у вигляді нотних символів (рис. 3.59а) або хвиль на екрані монітору (рис. 3.59б).

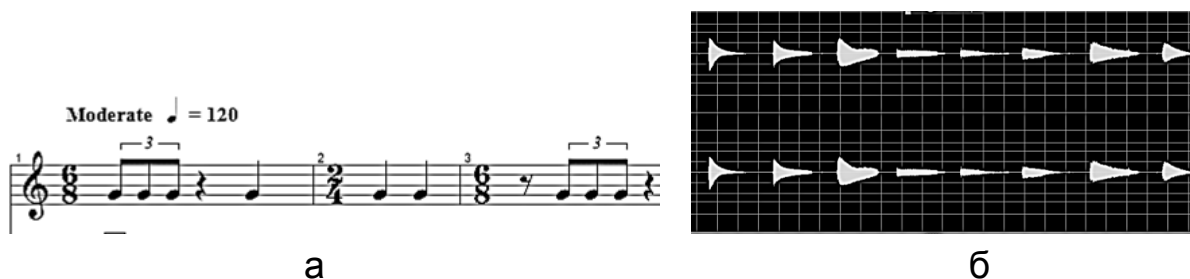


Рис. 3.59. Моделювання нот у *Guitar Pro* і *Adobe Audition*

Усе це можливо завдяки нашому слуху – сукупній роботі механічних, рецепторних і нервових структур, що сприймають і аналізують звукові коливання. Вухо людини як периферичний відділ слухового аналізатора

перетворює різні параметри звуку (інтенсивність, частоту, тривалість) в активність периферичних і центральних слухових нейронів, на основі чого будується суб'єктивне сприйняття характеристик звуку (гучність, висота, тривалість).

На рис. 3.60 зображено візуалізацію міжнародного сигналу "sos", що змодельований у програмі *Adobe Audition*, і відтвореного звуком ноти "соль" першої октави 6-ти струнної гітари у вигляді хвиль звукового сигналу.

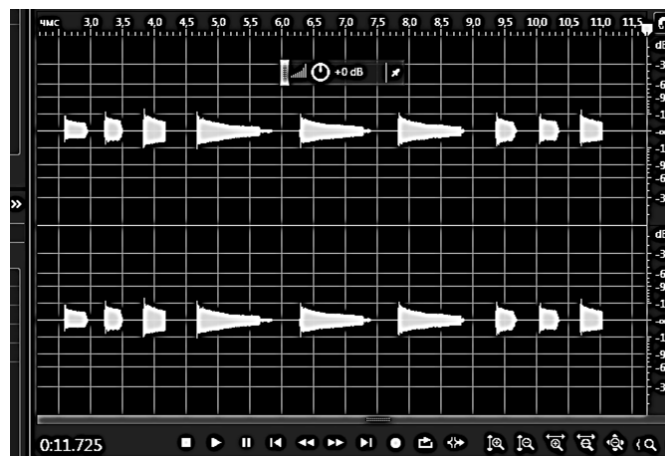


Рис. 3.60. Моделювання сигналу в програмі *Adobe Audition*

Сигнал "sos" у вигляді хвиль відтворений за допомогою "голосу" (рис. 3.61).

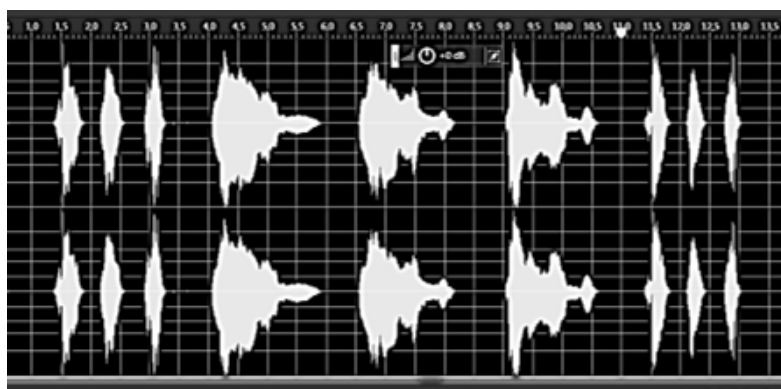


Рис. 3.61. Моделювання сигналу в програмі *Adobe Audition*

Візуалізація сигналу "sos" за допомогою програми *Guitar Pro* у вигляді нотного запису (нота "соль" першої октави), подано на рис. 3.62.

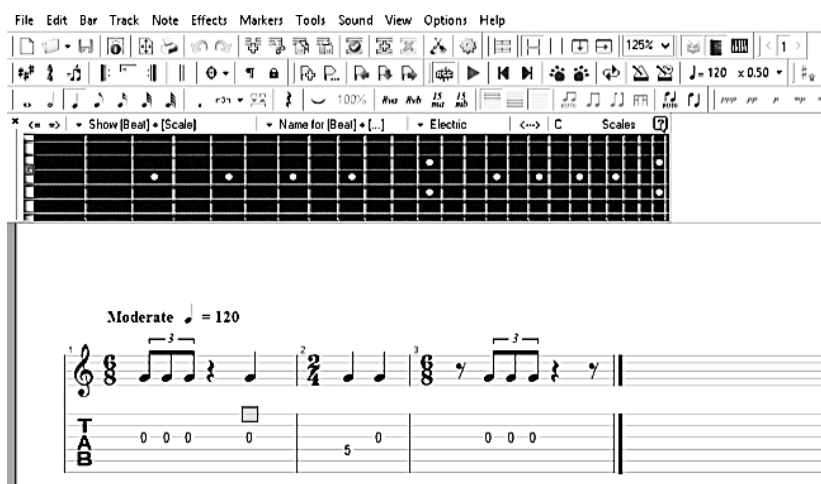


Рис. 3.62. Моделювання сигналу у програмі **Guitar Pro**

На рис. 3.63 зображено фрагмент гами до мажор від ноти "до" першої октави до ноти "до" другої октави.

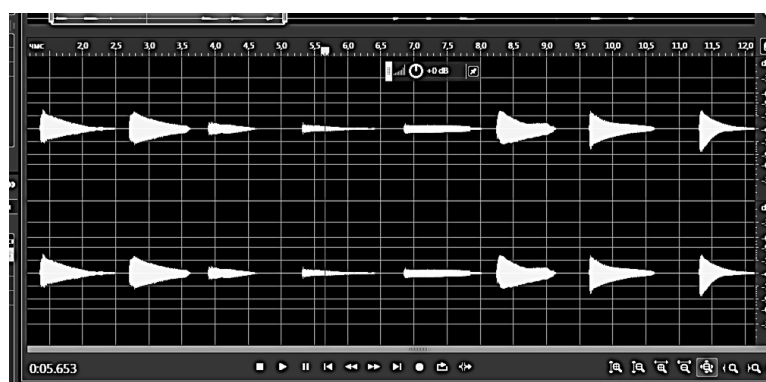


Рис. 3.63. Моделювання звуків нот у програмі **Adobe Audition**

Важливо зазначити, що основною складовою процесу звукового моделювання є людське натхнення – певний психоемоційний стан людини, відповідний рівень свідомості та мотивації на розв'язання конкретної практичної задачі.

Для участі у всеукраїнському творчому конкурсі "ЄВРОХІТ – пісня для країни, гордість для історії", приуроченому до чемпіонату Європи з футболу "Євро-2012" колектив авторів за допомогою програмного продукту *Guitar Pro* та фортепіано створив музичний твір "Свято футболу в Україні" і отримав на нього авторське свідоцтво.

На рис. 3.64 зображено візуалізацію аудіофрагмента музичного твору "Свято футболу в Україні" в робочому середовищі програми *Adobe Audition*.

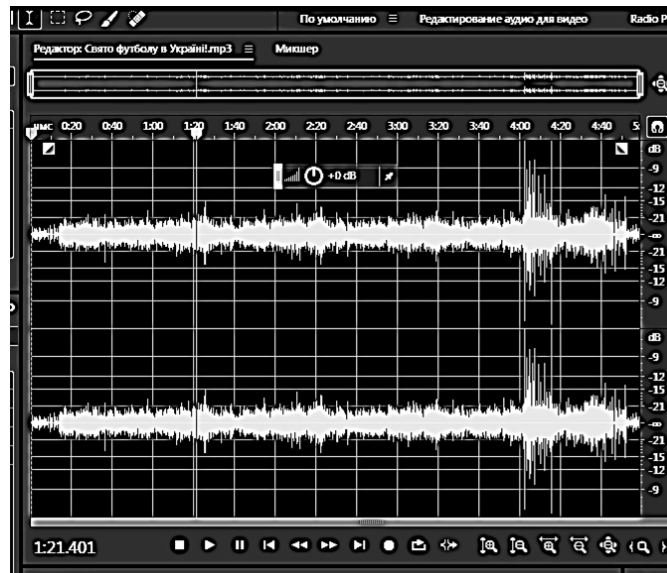


Рис. 3.64. Фрагмент аудіофайла музичного твору "Свято футболу в Україні" у робочому середовищі програми Adobe Audition

Аудіофайл зберігається у вигляді партитури нот (рис. 3.65) або в електронному звуковому форматі (*wav*, *mp3* т. ін).

Свято футболу в Україні

Сл. Сергія Власенко Муз. Катерини Власенко

Урочисто Ст Алт

1. Фут - боль-на Єв-ро-па до нас та-ві-та-па.
G Ст

Гос-тей зві-ду-сіль зует-рі-ча-є-мо ми. Єв-ро
Алт

двад-цять два-над-цять ше-сат-о фут-бо-ду. Ві-
G Ст

17. Го-мі ко-ман-ди, ф зір-ко-ві грав-ці, в
F В F

Ки-їв, До-нецьк, Львів та Хар-ків, двад-цять два-над-цять
С F В F

Єв-ро фут-бол. зро-би-мо раз-ом всі-ра-ве свя-то Ук-ри - І-на прий-ма-а-є
С F В F | 1., С F | 4., С F

Єв-ро-пейсь-кий фут-бол. 2. Фор - //
3. За - //
4. Фут - //

Рис. 3.65. Партитура музичного твору

На рис. 3.66. зображено відповідне вікно програми *Adobe Audition*. На рис. 3.65 – візуальну форму музичного твору у вигляді нотної партитури, створеної в середовищі програмного продукту *Guitar Pro*.

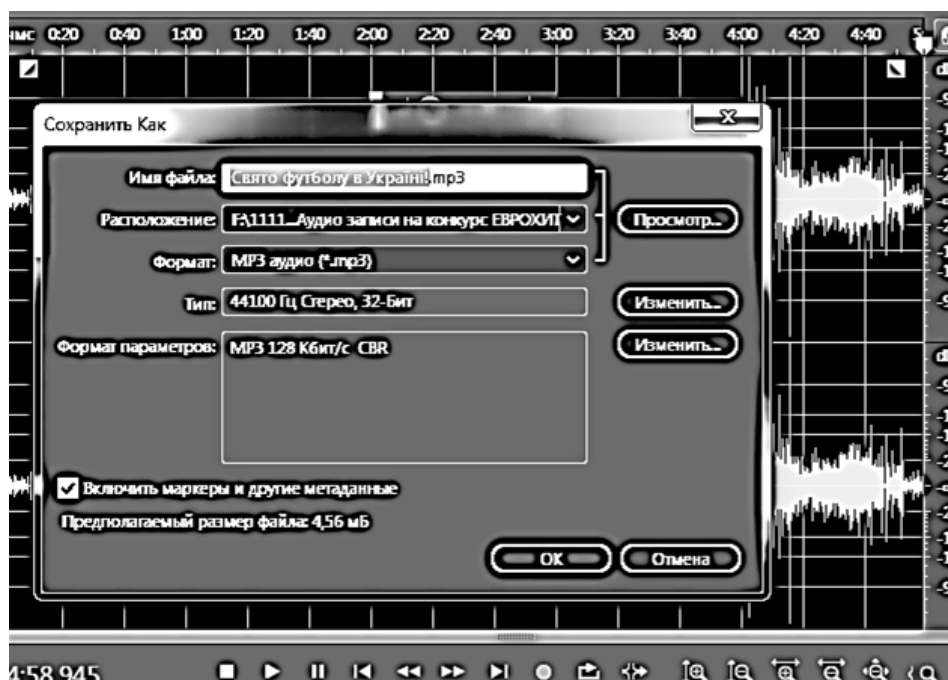


Рис. 3.66. Вікно для збереження параметрів аудіофайла – музичного твору в програмі *Adobe Audition*

Зазначимо, що вибір формату зберігання аудіофайла має значення для подальшого його застосування та впливає на обсяг файла в байтах (в *wav* – 600 Mb, а *MP3* – 5 Mb).

В якості ще одного прикладу успішної реалізації процесу моделювання звуку в сучасних програмних продуктах, розглянемо процес створення музичного твору за допомогою професійного нотного редактора *Sibelius* (Сибеліус).

Слід зазначити наступне:

- для написання високоякісного музичного твору, одного тільки бажання і сучасної програми недостатньо, необхідна наявність відповідного професійного рівня музиканта (композитора);
- необхідно впевнено володіти всіма наявними компонентами професійного нотного редактору;
- для якісного звуку важливо мати у своєму розпорядженні звуковідтворювальну апаратуру та обладнання;

• ніяка найдосконаліша програма не зможе замінити творчість виконавця (майстра).

На рис. 3.67 зображена стартова сторінка у вікно створення нової партитури в нотному редакторі *Sibelius* (версії 6).

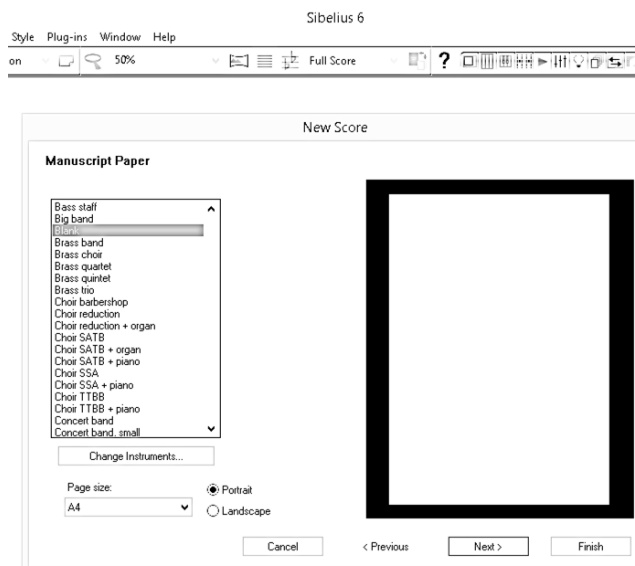


Рис. 3.67. Стартова сторінка створення нової партитури в нотному редакторі *Sibelius*

На рис. 3.68 зображена партитура вступної частини музичного твору, присвяченого 85-річчю ХНЕУ імені С. Кузнеця, яка була створена в нотному редакторі *Sibelius*.

Рис. 3.68. Партитура музичного твору "Гімн ХНЕУ ім. С. Кузнеця"

Інтерфейс програмного продукту *Sibelius* дозволяє швидко переходити в різні режими роботи.

На рис. 3.69 зображено робочий стіл програми *Sibelius*, зліва відкрито вікно з партитурою музичного твору, а праворуч – вікна з елементами управління та навігації у режимі звуковідтворення.

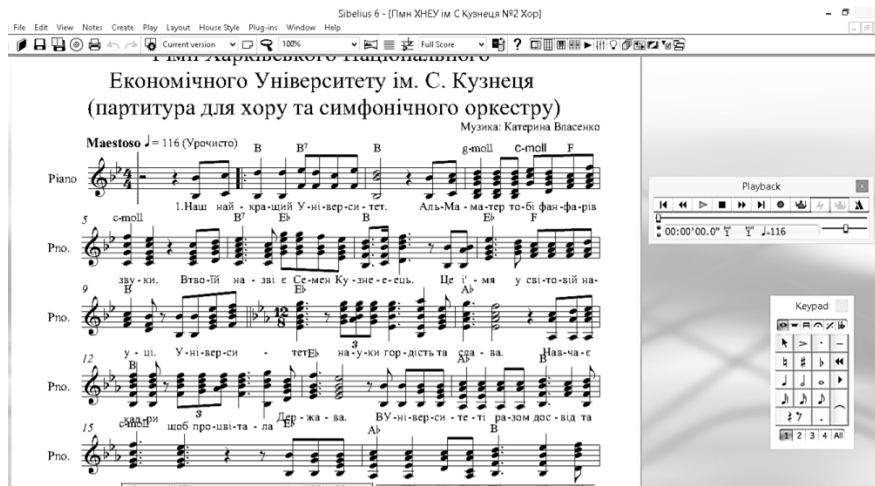


Рис. 3.69. Партитура для хору та оркестру в режимі звуковідтворення

Під час створення музичної композиції достатньо викликати відповідне меню та розташувати вікна з необхідними компонентами на робочому столі за бажанням виконавця. На рис. 3.70 зображена партитура для хору та оркестру в режимі редагування.

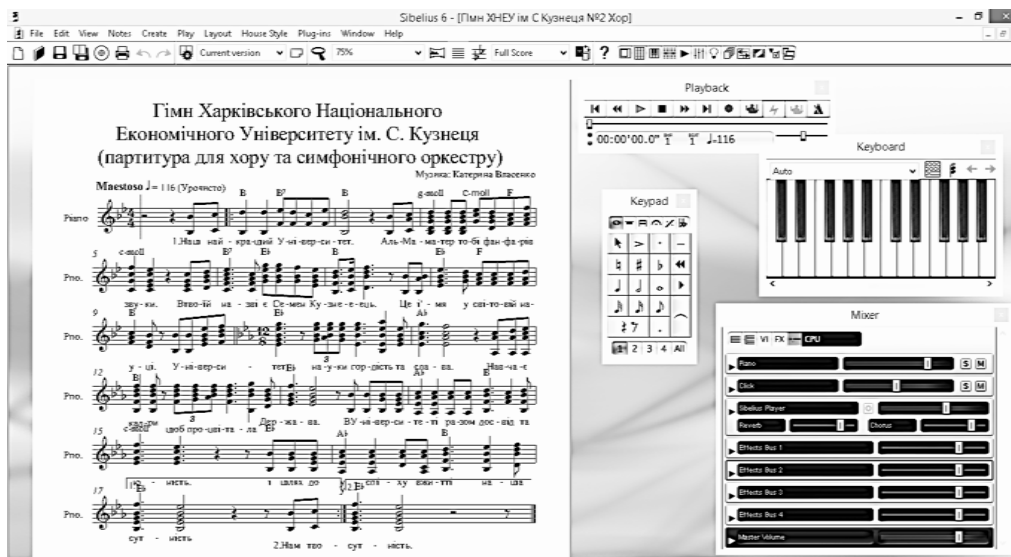


Рис. 3.70. Партитура для хору та оркестру в режимі редагування

На рис. 3.71 наведено партитуру для оркестру, завершеного музичного твору – "Гімн ХНЕУ ім. С. Кузнеця", який був присвячений 85-річниці університету.

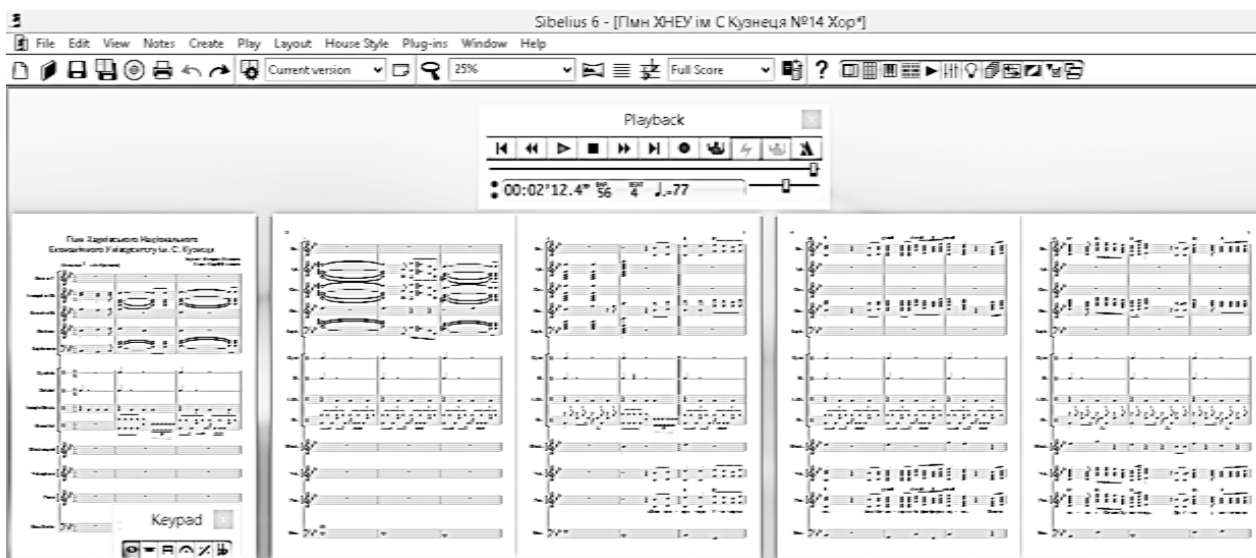


Рис. 3.71. Партитура музичного твору, присвяченого 85-річниці університету – "Гімн ХНЕУ ім. С. Кузнеця"

Таким чином, на прикладах сучасних програмних продуктів для моделювання звуку *Guitar Pro*, *Adobe Audition* та *Sibelius*, використовуючи їх інструментарій, продемонстровано процес створення від окремих звуків та сигналів до об'ємних, поліфонічних, музичних творів.

На сьогодні у світі понад 80 млн людей мають обмежений зір або зовсім незрячі. Людина може отримувати інформацію за допомогою органів чуття (очей, вух, носа, мови, шкіри, м'язів). Відповідно до цього і розрізняють види інформації: зорова, звукова, нюхова, смакова, дотикальна, м'язове почуття. Різні види інформації не рівноцінні між собою за "інформативністю" для людини. Найбільше людина сприймає зорової інформації (близько 80 %), звукової (близько 10 %), інші види становлять незначні відсотки.

Відомо, що після створення у 1824 р. шрифту Брайля люди з обмеженим зором і незрячі отримали можливість читати і писати. Для зображення використовуються шість (вісім) крапок, які розташовані у два стовпці. На рис. 3.72 зображено модель панелі брайлівського дисплею з 3D текстом, набраним рельєфно-крапковим тактильним шрифтом. Моделювання виконане в середовищі програми *Blender*.

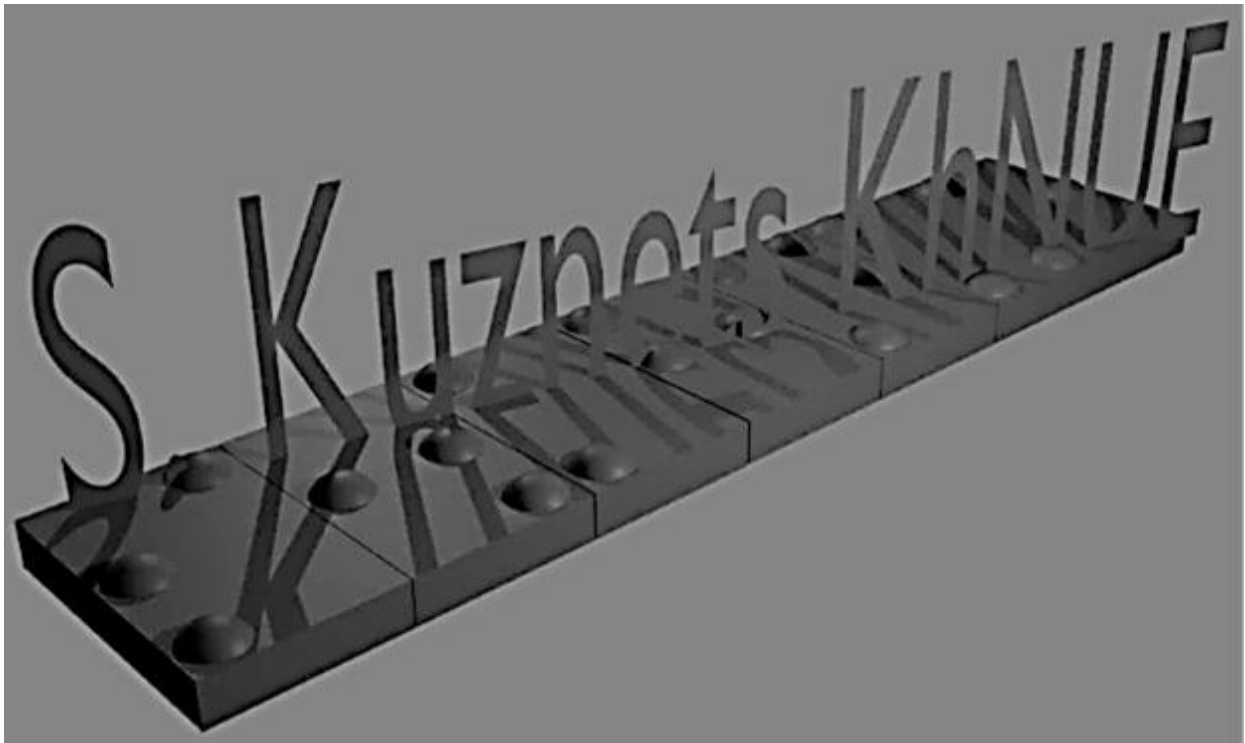


Рис. 3.72. Модель панелі брайлівського дисплею з 3D-текстом, набраним рельєфно-крапковим тактильним шрифтом

Сучасні технології надають можливості людям з обмеженим зором та незрячим, які мають достатню компетенцію для читання літературного шрифту Брайля, навчатися музичній грамоті за допомогою спеціально розробленого музичного шрифту Брайля.

На рис. 3.73 наведено приклад гами до мажор, записаної шістнадцятими нотами та рельєфно-крапковим музичним шрифтом Брайля.

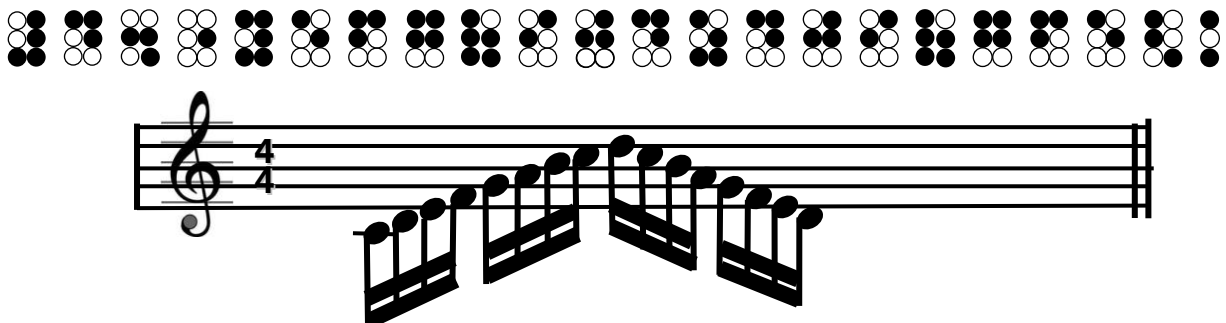


Рис. 3.73. Приклади запису гами до мажор музичним шрифтом Брайля

Комп'ютер та спеціальні пристрої здатні перетворювати інформаційні дані у зручну форму, яку людина з обмеженим зором може сприйняти на дотик, але водночас користувач повинен володіти відповідними знаннями.

Підсумовуючи, підкреслимо важливість взаємного поєднання в процесах сучасного моделювання знань, умінь та навичок дослідника в широкому діапазоні наукових досліджень.

Висновки

У монографії подано різноманітні приклади моделювання в ергономіці, екології та хімічній технології:

1. Узагальнено основні види моделювання процесів та принципи системного підходу до побудови моделей. Для ергономічних, екологічних і хіміко-технологічних системних досліджень проблем різного рівня складності найбільш важливими етапами є наступні: ставлення завдання і аналіз цілей; ресурсний аналіз зі встановленням обмежень; аналіз альтернатив; аналіз домінантності критеріїв; аналіз взаємозв'язків і дій (багатомодульні дослідження); оцінювання ризиків та управління ризиками; розроблення концептуальних моделей і рекомендацій.

2. Представлено основні елементарні математичні функції та наведені приклади їх використання. Тригонометричні функції використовують для моделювання періодичних процесів. Метод середніх величин та найменших квадратів використовують для побудови емпіричних формул. Для побудови моделей складних процесів проаналізовано метод теорії диференціальних рівнянь. Представлено аналіз традиційних моделей в екології.

3. Встановлено механізм масообміну у твердофазних реакціях системи $MgO - Al_2O_3 - SiO_2$, який узгоджується з основними термодинамічними закономірностями їх спряження і може служити інструментарієм для отримання "розумних" керамічних матеріалів із заданим фазовим складом і комплексом необхідних фізико-механічних властивостей. Топологічні графи в якості моделей твердофазних реакцій системи $MgO - Al_2O_3 - SiO_2$ можуть застосовуватися без обмежень під час аналізу складних взаємодій у будь-яких інших багатокомпонентних оксидних системах та будуть корисні в технологічній практиці під час розроблення нових керамічних матеріалів, призначених для експлуатації виробів із них у зверхтермонавантажених умовах експлуатації.

4. Запропоновано регресійну модель, яка враховує вплив групи чинників на релаксію геосистем різних природних зон. Згідно з моделлю, найбільше впливають на відновлюваність (релаксію) геосистем хвойних лісів кількість пожеж та їх періодичність, а також втрати гумусу в ґрунтах внаслідок термічної дії пірогенного чинника. Для геосистем степів та остепнених лук кореляція між відновлюваністю видового різноманіття

та змінами показника кислотно-лужного балансу більша, ніж між відновлюваністю і втратами гумусу. Найбільша кореляція для водно-болотних геосистем виявлена між відновлюваністю видового різноманіття і втратами гумусу в ґрунтах внаслідок його згоряння під час дії пірогенного чинника.

5. Наведено основи структуризації процесів виникнення і розвитку екологічних небезпек і протидії їх джерелам та її застосування для об'єктів питного водопостачання. Проаналізовано схему формування басейну Карачунівського водосховища з визначенням основних джерел постачання домішок у водосховище. У подальшому дослідження доцільно спрямувати в бік побудови та перевірки адекватності математичної моделі взаємодій основних домішок у природній (вихідній) воді задля оперативного прогнозування змін її екологічного стану та вибору дієвих методів водопідготовки, яка в подальшому може бути основою під час розроблення технічних рекомендацій щодо підвищення рівня екологічної безпеки питного водопостачання регіону при значному антропогенному навантаженні на поверхневі джерела з урахуванням їх незадовільного екологічного стану.

6. Використання стаціонарних напівпараболічних концентраторів запропонованої конструкції протягом усього року дозволить у 2,3 рази підвищити надходження сонячного випромінювання на одиницю площі, знизивши при цьому рівень сезонних коливань сонячної інсоляції на поверхні приймача на 14 %. Використання зазначених технологій у поєднанні із сучасними улектролізерами водню високого тиску дозволить не лише зменшити залежність від викопного палива, але й знизити викиди CO₂ в атмосферу. Методика розрахунку та моделювання може бути використана для широкого спектру питань підвищення екологічної ефективності елементів енергетичних систем, в тому числі *SMART*-місто, *SMART*-будинки та *SMART*-транспорт.

7. Визначено, що величина додаткового вкладу в екологічний ризик, обумовлений складовими летючої золи Бурштинської та Зміївської ТЕС – неканцерогенними і канцерогенними, за оцінками проведених досліджень складає близько 40 %, порівняно з ризиком, обумовленим газоподібними сполуками і твердими частками, в класичному представленні оцінювання. Екологічний ризик більшою мірою визначається внеском хрому як канцерогенної складової. Результати оцінювання екологічного ризику для населення, обумовленого викидами Бурштинської та Зміївської ТЕС,

вказують на істотну значимість контролю вихідної сировини до процесу спалювання кам'яного вугілля та проведення моніторингу складу летючої золи, що надходить в атмосферу, на мікроелементний склад важких металів та їхніх сполук під час виробництва електроенергії на найпотужніших ТЕС України. За прогнозними оцінками величина екологічного ризику, обумовленого складом летючої золи Зміївської ТЕС з урахуванням радіаційної складової в чотири рази більше обумовленого впливом летючої золи, як твердими частками.

8. Обґрунтовано, що із безлічі професійно важливих якостей оператора, які визначають надійність не тільки оператора, але й системи "людина – техніка – середовище" в цілому, найбільш складною для дослідження є стресостійкість оператора, що обумовлено необхідністю враховувати велику кількість чинників (гігієнічні умови праці, фізичне й психоемоційне навантаження, нав'язаний темп роботи й ін.), що формують рівень стресостійкості. Однак від високого рівня саме цієї якості оператора суттєво залежить надійність його діяльності. Системний підхід до дослідження стресостійкості оператора, заснований на відборі, структуруванні й обробленні сукупності психофізіологічних параметрів БАТШ, дозволив застосувати ентропійні методи аналізу в системі контролю формування стресостійкості людини-оператора. Міри невизначеності й організованості підсистем організму оператора закономірно змінюються під час впливу стрес-чинників різної природи походження й ступеня складності, і, таким чином, дають уявлення про ступінь і напрям зміни рівня стресостійкості людини, а також про причини даних змін. Встановлені закономірності зміни критерію стресостійкості оператора й розроблення класифікації стресостійкості оператора дозволили: створити метод оцінювання стресостійкості людини; способи оцінювання впливу стрес-чинників на формування стресостійкості оператора. У сукупності розроблені методи й способи дають можливість здійснювати поточний контроль формування стресостійкості оператора.

9. Обґрунтовано, що спрямованість розвитку діяльності людини та природи в межах традиційної економічної теорії не має спільних рис. Природа підпорядковується природним законам. Тому "співдружність" людини з природою не може бути системною. По-перше, ці системи передбачають різні цілі, а по-друге – економічність їх діяльності вимірюється на основі різних принципів. Неможливо без змін у логіці та методології перейти до опису економічних зв'язків природи і людини. Необхідне введення до економічних моделей додаткових нових вимірів: біологічних,

психологічних, інформаційних на основі отримання системної об'єктивної цінності. Також для удосконалення еколого-економічного моделювання на локальному, регіональному та глобальному рівнях необхідний внесок саме вітчизняних вчених. Причому запропоновані математичні моделі повинні бути адаптовані до соціокультурних і духовних особливостей України, що визначає місце нашої країни в загальносвітовому процесі сталого розвитку.

10. Встановлено, що створення системи контролю та управління якістю довкілля, у тому числі і атмосферного повітря, на основі математичного моделювання дозволяє теоретично передбачити наслідки впровадження технологічних проектів і розробити науково обґрунтовані методи оперативних та довгострокових заходів, спрямованих на скорочення викидів шкідливих речовин. Для оперативного прогнозування забруднення атмосфери зазвичай використовують статистичні моделі лінійної та нелінійної регресії. Перевагою цих методів є простота реалізації і алгоритмізації. Основним недоліком, який обмежує їх застосування, виступає невисока точність, що пояснюється відсутністю безпосереднього врахування фізичних особливостей процесу забруднення довкілля. Для довгострокового прогнозування широко застосовують розрахункові моделі, одержані на базі рівняння турбулентної дифузії. Остаточний вибір математичної моделі визначатиметься метою та завданнями прогнозування в кожному конкретному випадку.

11. Встановлено, що застосування кореляційно-регресійних методів у моделюванні процесів спікання керамічних мас із застосуванням відходів промисловості дає можливість зменшити матеріало- й енергоємність досліджень, оптимізувати склади мас щодо відходів і можливість їх використання, що сприятиме зниженню рівня забруднення довкілля та підвищенню екологічної безпеки на локальному і регіональному рівнях.

12. Наведено методи математичного планування експерименту: метод повного факторного експерименту та симплекс-ґратчастий метод, котрі використовуються в технології виготовлення безвипалюваних периклазовуглецевих вогнетривів для забезпечення високої щільності і міцності в разі стиснення виробів та їх низької пористості, що забезпечує необхідні експлуатаційні властивості вогнетривів.

13. Подано удосконалену класифікацію способів ремонту високотемпературних теплових агрегатів. Визначено необхідність використовувати уніфіковану технологію гарячого ремонту високотемпературних

теплових агрегатів за методом саморозповсюдженого високотемпературного синтезу в уніфікованій екзотермічній суміші. Визначено вплив уніфікованого горючого компонента на технологічні параметри нанесення захисного покриття методом СВС. Запропоновано в якості горючого компоненту використовувати тонкодисперсну алюмінієву пудру в кількості 30 мас. %. Визначено вплив уніфікованого окисника на технологічні параметри та безпеку нанесення захисного покриття методом СВС. Запропоновано використовувати в якості уніфікованого окисника диоксид вуглецю. Розроблені математичні моделі процесу переносу та прогрівання гранули екзотермічної суміші в струмені окисника до поверхні футерівки і подальшого прогрівання гранули на поверхні футерівки та її спікання з футерівкою для отримання захисних покриттів під час ремонту високотемпературних теплових агрегатів.

14. Впроваджено сучасні комп'ютерні технології створення цифрових прототипів із застосуванням засобів моделювання та візуалізації, що дозволяють скоротити матеріальні і часові витрати на виготовлення конкурентоспроможної продукції. Продемонстровано процеси створення аудіосупроводження від окремих звуків та простих сигналів до об'ємних поліфонічних музичних творів. Наведено приклади авторських розробок у вигляді графічних символів сучасної музичної нотації та екранних форм із зображенням візуальних 3D моделей, отриманих у спеціальному програмному середовищі.

Використана література

1. Абрамовский Е. Р. Атмосфера больших городов / Е. Р. Абрамовский, В. И. Карплюк, Н. Н. Переметчик. – Днепропетровск : Наука и образование, 2011. – 350 с.
2. Аввакумов Е. Г. Кордиерит – перспективный керамический материал / Е. Г. Аввакумов, А. А. Гусев. – Новосибирск : Изд. СО РАН, 1999. – 166 с.
3. Акимова Т. А. Теоретические основы организации эколого-экономических систем / Т. А. Акимова // Экономика природопользования. – Москва : ВИНТИ, 2003. – Вып. 4. – С. 7.
4. Алексеев А. С. К вопросу оценки тенденций, целей и макропоказателей социального развития / А. С. Алексеев, Г. И. Карпачев // Закономерности социального развития: ориентиры и критерии моделей будущего. – Новосибирск : РАН СО, 1994. – Ч. 2. – С. 94–101.
5. Анализ фазовых изменений в материалах высокобариевой области системы ВаО – Al₂O₃ – SiO₂ / Г. Н. Шабанова, С. М. Логвинков, Цапко Н. С. и др. // Зб. наук. праць ВАТ "УкрНДІВогнетривів ім. А. С. Бережного". – Харків : Каравела, 2009. – № 109. – С. 132–138.
6. Бабков В. С. Анализ математических моделей распространения примесей от точечных источников / В. С. Бабков, Т. Ю. Ткаченко // Наукові праці ДонНТУ. – 2011. – Вип. 13 (185). – С. 147–155. – ISSN 1996-1588.
7. Батлук В. А. Основы екології : підручник / В. А. Батлук. – Київ : Знання, 2007. – 519 с. – ISBN 966-346-308-2.
8. Белан Ф. И. Водоподготовка / Ф. И. Белан. – Москва : Энергия, 1980. – 256 с.
9. Березина Л. Ю. Графы и их применение : пособие для учителей / Л. Ю. Березина. – Москва : Просвещение, 1979. – 143 с.
10. Берлянд М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы / М. Е. Берлянд. – Ленинград : Гидрометеиздат, 1985. – 272 с.
11. Биченок М. М. Основы інформатизації управління регіональною безпекою / М. М. Биченок. – Київ : ІПНБ РНБОУ, 2005. – 196 с.
12. Білуха М. Т. Методологія наукових досліджень : підручник / М. Т. Білуха. – Київ : АБУ, 2002. – 480 с.
13. Біляєв М. М. Моделювання і прогнозування стану довкілля : підручник для студентів вищих навчальних закладів / М. М. Біляєв, В. В. Біляєва, П. С. Кіріченко. – Кривий Ріг : Вид. Р. А. Козлов, 2016. – 207 с. – ISBN 978-617-7104-61-1.

14. Бек М. Б. Моделирование содержания растворенного кислорода на участке реки, далеко от эстуария / М. Б. Бек ; [пер. с англ. А. А. Воинова, Н. К. Лукьянова ; под. ред. Ю. М. Свирижева] // Математические модели контроля загрязнения воды. – Москва : Мир, 1981. – С. 165–199.
15. Берг К. Теория графов и ее применение / К. Берг. – Москва : Изд. иностр. лит., 1962. – 319 с.
16. Бойко В. В. Аналіз методів математичного моделювання розповсюдження забруднюючих речовин в атмосфері / В. В. Бойко, Л. Д. Пляцук // Вісник КНУ імені Михайла Остроградського. – 2010. – Вип. 6 (65), Ч. 1. – С. 1–4. – ISSN 1995–0519.
17. Бондаренко М. Г. Вибір методу та засобу моделювання для оцінки забруднення ґрунту атмосферними викидами теплової електростанції / М. Г. Бондаренко // Збірник наукових праць Інституту геохімії навколишнього середовища. – 2009. – Вип. 17. – С. 67–73.
18. Бояринов А. И. Методы оптимизации в химической технологии / А. И. Бояринов, В. В. Кафаров. – Москва : Химия, 1975. – 576 с.
19. Буц Ю. В. Математическое моделирование восстанавливаемости природных комплексов после воздействия пирогенного фактора / Ю. В. Буц // Международный научно-исследовательский журнал. Research Journal of International Studies. – Екатеринбург : МНИЖ, 2013. – № 3 – С. 132–138.
20. Буц Ю. В. Про математичне моделювання пожеж в природних екосистемах / Ю. В. Буц // Людина та довкілля. Проблеми неоекології. – Харків : ХНУ ім. В.Н. Каразіна, 2012. – № 3–4. – С. 17–22.
21. Ваганов П. А. Экологические риски : учеб. пособ. / П. А. Ваганов, Им Ман-Сунг. – 2-е изд-е. – Санкт-Петербург : Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2001. – 152 с.
22. Величко С. А. Природно-ресурсне забезпечення гібридних геліо-вітроенергетичних систем (в межах рівнинної території України): дис... канд. географ. наук : 11.00.11 / С. А. Величко. – Харків, 2006. – 300 с.
23. Вернадский В. И. Химическое строение биосферы Земли и ее окружение / В. И. Вернадский. – Москва : Наука, 1965. – 374 с.
24. Верниченко А. А. Экологический мониторинг поверхностных вод Украины / А. А. Верниченко, А. А. Васенко, И. В. Колдоба // Актуальные вопросы охраны окружающей среды от антропогенного воздействия : материалы международной научно-практической конференции, 18–20 мая 1997 г. – Кременчуг, 1997. – С. 54–59.

25. Викиди парникових газів в Україні та світі : збірник наук. статей та матеріалів VIII-ї міжнар. наук.-метод. конф. та 115-ї між нар. конф. EAS ["Безпека людини у сучасних умовах"] (8 – 9 грудня 2016 року). – Харків : ГО "СФБЖДЛ", 2016. – С. 256–264. – ISBN 978-966-97496-6-6.
26. Винарский М. С. Планирование эксперимента в технологических исследованиях / М. С. Винарский, М. В. Лурье. – Киев : Техника, 1975. – 168 с.
27. ВИНТИ. Обзорная информация. Реферативный журнал. Научные и технические аспекты охраны окружающей среды. – Москва, 2004. – № 6. – 274 с.
28. Витько В. И. Рассеяние летучей золы при выбросах ТЭС, работающих на угле / В. И. Витько, Г. Д. Коваленко // Екологічна безпека : проблеми і шляхи вирішення : XII Міжн. наук.-практ. конф., Харків, 5 – 9 вересня 2016 р. : зб. наук. ст. – Харків : Райдер, 2016. – С. 67–75.
29. Волкова Т. А. Особенности решения уравнений Стритера – Фелпса для оценки экологической безопасности морской акватории / Т. А. Волкова, А. И. Кондратьев // Транспортное дело России. – 2011. – № 7 (92). – С. 120–122.
30. Волькенштейн М. В. Применение теории графов к расчету сложных реакций / М. В. Волькенштейн, Б. Н. Гольдштейн // Доклады АН СССР. – 1966. – Т. 70, № 4. – С. 963–965.
31. Вольперт А. И. Дифференциальные уравнения на графах / А. И. Вольперт // Математический сборник. – 1972. – Т. 88 (130), № 4 (8). – С. 578–588.
32. Вольтерра В. Математическая теория борьбы за существование / В. Вольтерра. – Москва : Наука, 1976. – 436 с.
33. Высокоэффективные керамические катализаторные блоки сотовой структуры / С. М. Логвинков, Г. Д. Семченко, С. В. Тищенко и др. // Стекло и керамика. – 1996. – № 1–2. – С. 33–34.
34. Гігієнічні вимоги до води питної, призначеної для споживання людиною : ДСанПіН 2.2.4-171-10. – [Чинний від 2010-06-01]. – Київ : Міністерство охорони здоров'я України, 2010. – 89 с. – (Державні санітарні норми та правила).
35. Горелова Г. В. Исследование слабоструктурированных проблем социально-экономических систем: когнитивный подход / Г. В. Горелова, Е. Н. Захарова, С. Н. Радченко. – Ростов на Дону : Изд-во РГУ, 2006. – 334 с.

36. Горелова Г. В. Когнитивный подход к имитационному моделированию сложных систем / Г. В. Горелова // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2013. – № 3. – С. 75.

37. Горстко А. Б. Модели управления эколого-экономическими системами / А. Б. Горстко, Ю. А. Домбровский, Ф. А. Сурков. – Москва : Наука, 1984. – 199 с.

38. Горшков В. С. Физическая химия силикатов и других тугоплавких соединений / В. С. Горшков, В. Г. Савельев, Н. Ф. Федоров. – Москва : Высшая школа, 1988. – 400 с.

39. ГОСТ 27065-86. Качество вод. Термины и определения. – Введ. 1987-01-01. – Москва : Изд-во стандартов, 1986. – 17 с.

40. Готовцев А. В. Определение скорости биохимического окисления и биохимической потребности в кислороде табличным методом / А. В. Готовцев // Научное обеспечение реализации "Водной стратегии Российской Федерации на период до 2020 г." : Всеросс. научн. конф., 6 – 11 июля 2015 г. : сборник научных трудов. – Петрозаводск, 2015. – Т. 1. – С. 263–272.

41. Григорьев А. А. Экологические уроки прошлого и современности / А. А. Григорьев. – Львов : Наука, 1991. – 47 с.

42. Гриценко А. В. К вопросу о методологии исследований восстановления геосистем после чрезвычайных ситуаций / А. В. Гриценко, Ю. В. Буц // Проблеми охорони навколишнього природного середовища та екологічної безпеки : зб. наук. пр. УкрНДІЕП. – Харків : ВД "Райдер", 2011. – Вип. XXXIII. – С. 3–11.

43. Громова О. В. Аналіз моделей поширення домішок в атмосфері від стаціонарних джерел / О. В. Громова // Наук. праці УкрНДГМІ. – 2004. – Вип. 253. – С. 173–181.

44. Гропянов А. В. Кинетическое уравнение твердофазного спекания / А. В. Гропянов, В. М. Гропянов // Высокотемпературная химия силикатов и оксидов : 7 межд. научн. конф. : тезисы докл. – Санкт-Петербург : ИХС РАН, 1998. – С. 34.

45. Данилов-Данильян В. И. Управление водными ресурсами в условиях климатических изменений / В. И. Данилов-Данильян, В. Г. Пряжинская // Обоснование стратегий управления водными ресурсами. – Москва : Научный мир, 2006. – С. 62–76.

46. Даниэльс Ф. Физическая химия / Ф. Даниэльс, Р. Олберти. – Москва : Мир, 1978. – 645 с.

47. Джерела централізованого питного водопостачання. Гігієнічні та екологічні вимоги щодо якості води і правила вибирання : ДСТУ 4808:2007 – [Чинний від 05-06-2007]. – Київ : Держстандарт України, 2007. (Національний стандарт України). – 40 с.
48. Довгий С. О. Автоматизована система для підтримки прийняття рішень при ліквідації наслідків аварії на ЧАЕС / С. О. Довгий, О. В. Копійка. – Київ : Наукова думка, 2001. – С. 211 – 266.
49. Додонов А. Г. Введение в теорию живучести вычислительных систем / А. Г. Додонов. – Київ : Наукова думка, 1990. – 180 с.
50. Доклад "О реализации принципов устойчивого развития в Российской Федерации. Российский взгляд на новую парадигму устойчивого развития. Подготовка к "Рио + 20" // Бюллетень "Использование и охрана природных ресурсов России". – Москва, 2012. – № 4. – С. 102–108.
51. Допустимые выбросы радиоактивных и химических веществ в приземной слой атмосферы / Н. Е. Артемова, А. А. Бондарев, В. И. Карпов и др. ; [под общ. ред. Е. Н. Теверовского и И. А. Терновского]. – Москва : Атомиздат, 1980. – 240 с.
52. Дружинин Н. И. Математическое моделирование и прогнозирование загрязнения поверхностных вод суши / Н. И. Дружинин, А. И. Шишкин. – Львов : Гидрометеиздат, 1984. – 390 с.
53. Дружинин Н. И. Математическое моделирование и прогнозирование загрязнения поверхностных вод суши : монография / Н. И. Дружинин, А. И. Шишкин. – Ленинград : Гидрометеиздат, 1989. – 390 с.
54. Егоров-Тисменко Ю. К. ЕЗО Кристаллография и кристаллохимия / Ю. К. Егоров-Тисменко ; [под ред. академика В. С. Урусова]. – Москва : КДУ, 2005. – 592 с. – ISBN 5-98227-095-4.
55. Енергетична стратегія України на період до 2030 року та подальшу перспективу. Концептуальні положення. – Київ : НАНУ, 2004. – 56 с.
56. Єріна А. М. Методологія наукових досліджень : навч. посіб. / А. М. Єріна. – Київ : АБУ, 2004. – 212 с.
57. Єріна А. М. Статистичне моделювання та прогнозування : навч. посіб. / А. М. Єріна. – Київ : КНЕУ, 2001. – 170 с. – ISBN 966-574-209-4.
58. Закон України "Про екологічну експертизу" // Голос України. 16 березня 1995. – № 49 (1049). – С. 6–8.
59. Запольський А. К. Знебарвлення природних поверхневих вод для питних потреб / А. К. Запольський // Вода і водоочисні технічні рішення. – 2007. – № 4. – С. 23–27.

60. Захарова Е. Н. О когнитивном моделировании устойчивого развития социально-экономических систем / Е. Н. Захарова // Вестник Адыгейского государственного университета. Сер. Регионоведение : философия, история, социология, юриспруденция, политология, культурология. – 2007. – Вып. 1. – С. 223–229.

61. Защита от ионизирующих излучений / Н. Г. Гусев, Е. Е. Ковалев, В. П. Машкович, А. П. Суворов. – Москва : Энергоатомиздат, 1990. – Т. 2. – 352 с.

62. Зуев А. Л. Особенности концентрационно-капиллярной конвекции / А. Л. Зуев, К. Г. Костарев // Успехи физических наук. – 2008. – Т. 1, № 10. – С. 1065–1085.

63. Ивахненко А. Г. Самоорганизация прогнозирующих моделей / А. Г. Ивахненко, И. А. Мюллер. – Киев : Техника, 1985. – 233 с.

64. Исследование микроэлементного состава тяжелых металлов и естественных радионуклидов летучей золы Змиевской ТЭС Украины / Г. Д. Коваленко, В. В. Витько, В. В. Карташев, А. В. Хабарова // Екологічна безпека: проблеми і шляхи вирішення: XII Міжнародна наук.-практ. конференція, Харків, 5 – 9 вересня 2016 р. : зб. наук. ст. – Харків : Райдер, 2016. – С. 111–116.

65. Каркер Я. И. Металл-горючее / Я. И. Каркер, Г. Ю. Мазинг // Химия и жизнь. – 1983. – № 12. – С. 80–84.

66. Касти Дж. Большие системы. Связность, сложность и катастрофы / Дж. Касти. – Москва : Мир, 1982. – 216 с.

67. Кафаров В. В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии / В. В. Кафаров, С. Л. Ахназарова. – Москва : Высшая школа, 1978. – 319 с.

68. К вопросу оценки надежности при неполном контроле изделия / С. В. Власенко, В. А. Демидова, М. А. Проценко и др. // Технология приборостроения. – 2005. – Вып. 1. – С. 39–43

69. Клімат України ; [за ред. В. М. Ліпінського, В. А. Дячука]. – Київ : Вид-во Раєвського, 2003. – 344 с.

70. Кнотько А. В. Химия твердого тела / А. В. Кнотько, К. А. Пресняков, Ю. Д. Третьяков. – Москва : Издательский центр "Академия", 2006. – 304 с.

71. Коваленко Г. Д. Методические аспекты оценки экологического риска для здоровья населения при эксплуатации ТЭС Украины / Г. Д. Коваленко, А. В. Хабарова (Пивень) // Научные Ведомости Белгородского государственного университета. Сер.: Естественные науки. – Белгород : НИУ "БелГУ", 2015. – № 15 (212). Вып. 32. – С. 131–141.

72. Коваленко Г. Д. Моделирование та прогнозування стану навколишнього природного середовища : навч. посіб. / Г. Д. Коваленко. – Харків : Вид. ХНЕУ, 2010. – 168 с.

73. Коваленко Г. Д. Основы экологии : учеб. пособ. / Г. Д. Коваленко, Г. С. Попенко. – Харьков : ИД "ИНЖЕК", 2009. – 280 с. – ISBN 978-966-392-237-9.

74. Коваленко Г. Д. Оценка ущерба, наносимого окружающей природной среде и здоровью населения радиоактивными выбросами электростанций Украины / Г. Д. Коваленко, А. В. Хабарова // Экология и промышленность. – 2015. – № 3. – С. 77–81.

75. Коваленко Г. Д. Оценка экологического риска для здоровья населения при сжигании каменного угля на ТЭС Украины / Г. Д. Коваленко, А. В. Хабарова // Ядерна енергетика та довкілля. – 2015. – № 1 (5). – С. 63–68.

76. Коваленко Г. Д. Повышение эффективности очистки выбросов тепловых электростанций Украины, использующих каменный уголь с учетом экологического риска / Г. Д. Коваленко, А. В. Хабарова // Інноваційні шляхи модернізації базових галузей промисловості, енерго- та ресурсозбереження, охорона навколишнього середовища : V Міжн. наук.-практ. конф. молодих вчених та спеціалістів, 23–24 березня 2016 р. : зб. наук. праць. – Харків : УкрНТЦ "Енергосталь", 2015. – С. 155–158.

77. Колебания и бегущие волны в химических системах / [пер. с англ. ; под ред. Р. Филда, М. Бургера, А. М. Жаботинского]. – Москва : Мир, 1988. – 720 с.

78. Компьютерный инжиниринг / А. И. Боровко, С. Ф. Бурдаков, О. И. Клявин и др. ; [под. ред. А. И. Боровко]. – Санкт-Петербург : Изд-во Политехн. ун-та, 2012. – 93 с. – ISBN 978-5-7422-3766-2.

79. Крамаренко В. Ю. Неизотермическая кинетика в термическом анализе полимеров. 2. Изоконверсионный анализ / В. Ю. Крамаренко // Вісник НТУ "ХПІ" : зб. наук. праць. – Харків : НТУ "ХПІ", 2015. – Вип. 50 (1159). – С. 32–41.

80. Крапивин В. Ф. Математическое моделирование глобальных биосферных процессов / В. Ф. Крапивин, Ю. М. Свирежев, А. М. Тарко. – Москва : Наука, 1982. – 282 с.

81. Красс М. С. Математические методы и модели для магистрантов экономики / М. С. Красс, Б. П. Чупрынов. – Санкт-Петербург : Питер, 2006. – 496 с.

82. Кудинова Г. Э. Навстречу "зеленой" экономике: пути к устойчивому развитию и искоренению бедности / Г. Э. Кудинова, Г. С. Розенберг, В. С. Юрина. – Найроби (Кения); Женева (Швейцария); Москва (Россия) : ЮНЕП, 2011. – 738 с.
83. Кузнецова Т. В. Физическая химия вяжущих материалов / Т. В. Кузнецова, И. В. Кудряшова, В. В. Тимашев. – Москва : Высшая школа, 1989. – 503 с.
84. Лаврик В. И. Комфортные отображения физико-топологических моделей / В. И. Лаврик, В. П. Фильчакова, А. А. Яшин. – Киев : Наукова думка, 1990. – 374 с.
85. Лаврик В. І. Методи математичного моделювання в екології / В. І. Лаврик. – Київ : Фітосоціоцентр", 1998. – 131 с.
86. Лаврик В. І. Методи математичного моделювання в екології : навч. посіб. / В. І. Лаврик. – Київ : Вид. дім "КМ Академія", 2002. – 203 с.
87. Лекции по теории графов / В. А. Емеличев, О. И. Мельников, В. И. Сарванов и др. – Москва : Наука, 1990. – 384 с.
88. Линник П. Н. Причины ухудшения качества воды в Киевском и Каневском водохранилищах / П. Н. Линник // Химия и технология воды. – 2003. – Т. 25, № 4. – С. 384–406.
89. Логвинков С. М. Закономерности фазовых равновесий в системе $MgO - Al_2O_3 - SiO_2$ в решении проблем синтеза, стабильности и применения кордиерита / С. М. Логвинков // Вісник НТУ "ХПІ" : зб. наук. праць. – Харків : НТУ "ХПІ", 2004. – Вип. 33. – С. 127–135.
90. Логвинков С. М. Механизм диффузионного массообмена при синтезе сапфирина и кордиерита / С. М. Логвинков, Г. Д. Семченко, Н. К. Вернигора // Огнеупоры и техническая керамика. – 2005. – № 2. – С. 2–7.
91. Логвинков С. М. Механизм фазового распада сапфириновых и кордиеритовых твердых растворов / С. М. Логвинков // Вісник НТУ "ХПІ" : зб. наук. праць. – Харків : НТУ "ХПІ", 2001. – № 20. – С. 102–106.
92. Логвинков С. М. О механизмах обратимых твердофазных химических реакций в системе $MgO - Al_2O_3 - SiO_2$ / С. М. Логвинков, Г. Д. Семченко, Д. А. Кобызева // Огнеупоры и техническая керамика. – 1998. – № 8. – С. 29–34.
93. Логвінков С. М. Основи технологічних систем : навч. посіб. / С. М. Логвінков, О. М. Борисенко. – Харків : ХНЕУ ім. С. Кузнеця, 2015. – 308 с.

94. Логвинков С. М. Релаксация упругих напряжений и повышение высокотемпературной прочности при распаде кордиеритовых твердых растворов / С. М. Логвинков // Структурна релаксація у твердих тілах : міжнарод. наук.- практ. конф., 19 – 21 травня 2009 р. : тези доп. – Вінниця, 2009. – С. 55–56.
95. Логвинков С. М. Структурно-фазовая релаксация в материалах системы $MgO - Al_2O_3 - SiO_2$ при термических нагрузках / С. М. Логвинков, Н. К. Вернигора // Вісник НТУ "ХПІ" : зб. наук. праць. – Харків : НТУ "ХПІ", 2006. – Вип. 44. – С. 129–135.
96. Логвинков С. М. Твердофазные реакции обмена в технологии и керамики : монография / С. М. Логвинков. – Харьков : Изд. ХНЭУ, 2013. – 248 с.
97. Логвинков С. М. Эффекты от твердофазных обменных реакций при получении гетерофазных тугоплавких оксидных материалов / С. М. Логвинков // Зб. наук. праць ВАТ "УкрНДІВогнетривів ім. А. С. Бережного". – Харків : Каравела, 2009. – № 109. – С. 132–138.
98. Локенбах А. К. Фазовый состав и структура оксидных пленок на частичках высокодисперсных порошков алюминия / А. К. Локенбах, Н. А. Запорина, Л. К. Лепина // Вестник Академии наук Латвийской ССР. – 1981. – № 1. – С. 45–49.
99. Люпис К. Химическая термодинамика материалов / К. Люпис. – Москва : Металлургия, 1989. – 503 с.
100. Лясковская Т. А. Теоретические основы моделирования взаимодействий в строительном комплексе на основе когнитивного подхода / Т. А. Лясковская, Е. П. Савельева, Т. А. Шиндина // Вестник Челябинского государственного университета. – 2008. – № 7. – С. 24.
101. Марри Дж. Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии : лекции о моделях / Дж. Марри ; пер. с англ. – Москва : Мир, 1983. – 397 с.
102. Марчук Г. Н. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Г. Н. Марчук. – Москва : Наука, 1982. – 304 с.
103. Математические модели и методы исследования устойчивого развития региона / В. А. Батулин, С. Н. Васильев, А. В. Лакеев, А. И. Москаленко // Закономерности социального развития: ориентиры и критерии моделей будущего. – Новосибирск : РАН СО. – Ч. 2. – 1994. – С. 107–116.
104. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий. ОНД-86. – Ленинград : Гидрометеиздат, 1986. – 94 с.

105. Методичні рекомендації МР 2.2.12-142-2007. "Оцінка ризику для здоров'я населення від забруднення атмосферного повітря" : Затв. наказом МОЗ України від 13.04.2007 р. № 184. – Київ, 2007. – 40 с.

106. Методы и модели планирования ресурсов в GRID-системах : монография / [В. С. Пономаренко, С. В. Листовой, С. В. Минухин, С. В. Знахур]. – Харьков : ИД "ИНЖЭК", 2008. – 407 с.

107. Методы математической биологии. В 8 книгах. Книга 2. Методы синтеза алгебраических вероятностных моделей биологических систем. – Киев : Вища школа, 1981. – 312 с.

108. Мигаль Г. В. Проблема стресса в обеспечении безопасности человека / Г. В. Мигаль, О. Ф. Протасенко // Коммунальное хозяйство городов. – 2008. – № 81. – С. 385–390.

109. Мигаль Г. В. Стресостійкість людини-оператора. Методи підвищення стресостійкості / Г. В. Мигаль, О. Ф. Протасенко // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии. – 2008. – № 39. – С. 248–253.

110. Мигаль Г. В. Функциональное состояние человека-оператора как источник мониторинговой информации / Г. В. Мигаль, О. Ф. Протасенко // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии. – № 40. – 2008. – С. 187–193.

111. Мигаль Г. В. Эргономическая оценка проектируемых систем "человек – техника – среда" / Г. В. Мигаль, О. Ф. Протасенко. – Харьков : Нац. аэрокосм. ун-т "Харьков. авиац. ин-т", 2007. – 63 с.

112. Михайлов М. Д. Об одной модификации модели Стритера – Фелпса и ее численной реализации с помощью многопроцессорных вычислительных систем / М. Д. Михайлов // Вестник томского государственного университета. Серия: Математика и механика. – 2010. – № 1(9). – С. 39–46.

113. Могилевский В. Д. Методология систем / В. Д. Могилевский. – Москва : Экономика, 1999. – 251 с.

114. Модели оценки, анализа и прогнозирования социально-экономических систем : монография / [под ред. Т. С. Клебановой, Н. А. Кизима]. – Харьков : ИД "ИНЖЭК", 2012. – 277 с.

115. Научно-методические и прикладные аспекты экологизации : монография / [под общ. ред. И. Ю. Швеца]. – Симферополь : ТНУ им. В. И. Вернадского, 2013. – 366 с.

116. Національна програма екологічного оздоровлення басейну Дніпра та поліпшення якості питної води: за станом на 1997 р. / Верховна Рада України. – Офіц. вид. – Київ : Парлам. вид-во, 1997. – 279 с. – (Бібліотека офіційних видань).

117. Николис Г. Самоорганизация в неравновесных системах / Г. Николис, И. Пригожин. – Москва : Мир, 1979. – 512 с.

118. Никонова И. А. Реализация стратегии, методы и инструменты / И. А. Никонова, Р. Я. Шамгунов // Банковское дело в Москве. – 2005. – № 8. – С. 30.

119. Обменные твердофазные реакции при формировании диссипативных структур в оксидных материалах / С. М. Логвинков, Г. Н. Шабанова, Н. К. Вернигора и др. / Огнеупоры и техническая керамика. – 2010. – № 7–8. – С. 56–61.

120. Огнеупоры: материалы, изделия, свойства и применение. Каталог-справочник в 2-х книгах / [под ред. И. Д. Кашеева]. – Москва : Теплоэнергетик, 2003. – 336 с.

121. Окружающая среда. Оценка риска для здоровья (мировой опыт) / С. Л. Авалиани, М. М. Андрианова, Е. В. Печенникова, О. В. Пономарева. – Москва, 1996. – 158 с.

122. Онкологическая "цена" тепловой и атомной энергии / Л. А. Ильин, В. А. Книжников, Н. К. Шандала и др. ; [под ред. Л. А. Ильина и И. П. Коренкова]. – Москва : Медицина, 2001. – 240 с.

123. Опря А. Т. Статистика : навч. посіб. / А. Т. Опря. – Київ : Центр учбової літератури, 2012. – 448 с. – ISBN 978-611-01-0266-7.

124. Остейковский В. А. Теория систем : учебник для вузов / В. А. Остейковский. – Москва : Высшая школа, 1997. – 240 с.

125. Павлий В. А. Построение информационной модели расчета распространения примеси в приземном слое атмосферы над территориально-распределенными объектами / В. А. Павлий // Системний аналіз та інформаційні технології у науках про природу та суспільство. – 2011. – Вип. 1. – С. 71–81.

126. Палатник Л. С. Физика и химия фазовых превращений / Л. С. Палатник. – Харьков : ХПИ, 1992. – 156 с.

127. Партон В. З. Механика разрушения : от теории к практике / В. З. Партон. – Москва : Наука, 1990. – 240 с.

128. Перспективи технологічного використання спінодального фазового розпаду сапфіринових і кордієритових твердих розчинів / С. М. Логвинков, Г. Д. Семченко, Д. А. Кобизєва та ін. // Фізика і хімія твердого тіла. – 2002. – Т. 3. – № 2. – С. 341–345.

129. Пляцук Л. Д. Оцінка впливу поля вітру та коефіцієнта турбулентності при моделюванні розповсюдження викидів в атмосфері / Л. Д. Пляцук, В. В. Бойко // Вісник КНУ імені Михайла Остроградського. – 2011. – Вип. 1 (66), Ч. 1. – С. 141–144. – ISSN 1995–0519.

130. Повышение энергоэффективности концентраторных фотоэлектрических модулей для солнечных батарей / В. М. Андреев, В. Д. Румянцев, Н. А. Садчиков и др. // Возобновляемая энергетика. Пути повышения энергетической и экономической эффективности REENFOR-2014 : Материалы международного форума. – Москва : Объединенный институт высоких температур РАН, 2014. – С 57–62.

131. Пономаренко В. С. Проблеми підготовки компетентних економістів та менеджерів України : монографія / В. С. Пономаренко. – Харків : ВД "ИНЖЕК", 2012. – 328 с.

132. Попенко Г. С. Проблемы моделирования экологической безопасности и экологических рисков / Г. С. Попенко // Управління розвитком. ХНЕУ. Міжнародна науково-практична конференція "Стратегії ІТ-технологій в освіті, економіці та екології" : зб. наук. ст. – 2007. – № 7. – С. 103–104.

133. Принципы наноструктурирования и высокотемпературного упрочнения материалов в многокомпонентных оксидных системах / С. М. Логвинков, Г. Д. Семченко, Г. Н. Шабанова и др. // Фізика і хімія твердого тіла. – Т. 11. – № 3. – 2010. – С. 723–732.

134. Прогнозирование и перспективы диссипативной структуры в керамических материалах / С. М. Логвинков, О. Н. Борисенко, Г. С. Попенко, А. А. Ивашура // Вісник НТУ "ХПІ". – 2016. – № 22 (1194). – С. 126–131.

135. Протасенко О. Ф. Совершенствование профессиональной подготовки операционистов банковского отделения на основе контроля формирования стрессоустойчивости : дис. ... канд. техн. наук : 05.01.04 / О. Ф. Протасенко. – Национальный аэрокосмический ун-т им. Н. Е. Жуковского "Харьковский авиационный ин-т". – Харьков, 2005. – 172 с.

136. Пряжинская В. Г. Компьютерное моделирование в управлении водными ресурсами / В. Г. Пряжинская, Д. М. Ярошевский, Л. К. Левит-Гуревич. – Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2002. – 496 с.

137. Пряжинская В. Г. Современные методы управления качеством речных вод урбанизированных территорий / В. Г. Пряжинская // Водные ресурсы. – 1996. – № 2. – С. 168–175.

138. Пути повышения долговечности блочной бетонной кладки коксовых батарей / А. С. Парфенюк, М. П. Зборщик, С. П. Веретельник и др. // Огнеупоры. – 1992. – № 4. – С. 24–26.

139. Разработка носителя блочного катализатора для восстановления NO_x / В. И. Тошинский, М. И. Ворожбян, Г. Д. Семченко и др. // Информационные технологии : наука, техника, технология, оборудование, здоровье : междун. научн.-техн. конф. : труды конф. – Харьков – Мишкольц – Магдебург : ХГПУ, 1997. – Ч. 4. – С. 156–159.

140. Рациональное использование водных ресурсов бассейна Азовского моря / [под ред. И. И. Воровича]. – Москва : Наука, 1981. – С. 52–57, С. 197–207.

141. Робертс Ф. С. Дискретные математические модели с приложениями к социальным, биологическим и экологическим задачам / Ф. С. Робертс. – Москва : Наука, 1986. – 38 с.

142. Рогалев А. Н. Детерминированные и стохастические методы оценки качества воды в условиях неопределенности / А. Н. Рогалев // Распределенные информационные и вычислительные ресурсы (DICR-2012) : материалы XIV Российской конференции с международным участием.– Институт вычислительных технологий Сибирского отделения РАН, 2012. – С. 101–112.

143. Рогалев А. Н. Численная реализация модели Стритера – Фелпса и ее модификаций с учетом неопределенности данных / А. Н. Рогалев, А. А. Рогалев // Кубатурные формулы, методы Монте-Карло и их приложения : межд. конф. посвященная 90-летию со дня рождения И. П. Мысовских : сборник материалов. – Красноярск, 4 – 7 июля 2011 года. – С. 100–104.

144. Рогинский С. З. Гетерогенный катализ. Некоторые вопросы теории / С. З. Рогинский. – Москва : Наука, 1979. – 416 с.

145. Розенберг А. Г. Комментарий к статье Роберта Констанцы с соавторами (NATURE, 1997) / А. Г. Розенберг // Проблемы региональной и глобальной экологии. – 2011. – Т. 20, № 1. – С. 205 – 214.

146. Самсонов Г. В. Физико-химические свойства окислов / Г. В. Самсонов. – Москва : Металлургия, 1978. – 472 с.

147. Свирежев Ю. М. Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии / Ю. М. Свирежев. – Москва : Наука, 1978. – 366 с.

148. Системный подход к управлению водными ресурсами / [А. К. Бисвас, Р. К. Линслей и др.] ; под ред. А. К. Бисваса ; пер. с англ. С. Б. Огнивцева и др. ; под ред. Н. Н. Моисеева. – Москва : Наука, 1985. – 396 с.

149. Смирнова Н. А. Фазовое поведение и формы самоорганизации растворов смесей поверхностно-активных веществ / Н. А. Смирнова // Успехи химии. – 2005. – № 74 (2). – С. 138–153.

150. Современное состояние источников водоснабжения и качества питьевой воды в Украине: анализ ситуации, проблемы и пути их решения / В. А. Прокопов, С. Б. Тарабарова, И. А. Тетенева, Н. В. Миронец // Збірка тез доповідей науково-практичної конференції, присвяченої пам'яті О. М. Марзеєва. – 1999. – № 2. – С. 25–38.

151. Современные проблемы моделирования социально-экономических систем : монография / [под ред. В. С. Пономаренко, Н. А. Кизима, Т. С. Клебановой]. – Харьков : ВД "ИНЖЕК", 2009. – 428 с.

152. Современные проблемы технологии подготовки питьевой воды / В. В. Гончарук, Н. А. Клименко, Л. А. Савчина и др. // Химия и технология воды. – 2006. – № 1. – С. 3–95.

153. Соловей В. В. Активация водорода и водородсодержащих энергоносителей / В. В. Соловей, М. А. Оболенский, А. В. Бастеев. – Киев : Наукова думка, 1993. – 168 с.

154. Сопов В. П. Основы системного анализа : навч. посіб. / В. П. Сопов. – Харків : ХНУБА, 2015. – 80 с.

155. Спицадель В. Н. Основы системного анализа : учеб. пособ. / В. Н. Спицадель. – Санкт-Петербург : Бизнес-пресса, 2000. – 326 с.

156. Стребков Д. С. Концентраторы солнечного излучения / Д. С. Стребков, Э. В. Тверьянович. – Москва: Государственное научное учреждение "Всероссийский научно-исследовательский институт электрификации сельского хозяйства" (ГНУ ВИЭСХ), 2007. – 315 с.

157. Стрелов К. К. Диффузия и реакции в твердых фазах силикатов и тугоплавких оксидов / К. К. Стрелов, И. Д. Кащеев. – Свердловск : Изд. УПИ им. С. М. Кирова, 1983. – 72 с.

158. Стрелов К. К. Теоретические основы технологии огнеупорных материалов / К. К. Стрелов, И. Д. Кащеев. – Москва : Metallurgy, 1996. – 608 с.

159. Сукачев В. Н. Биогеоценология и фитоценология / В. Н. Сукачев // ДАН СССР. – 1945. – Т. 47, № 6. – С. 447–449.

160. Сукачев В. Н. Основные понятия лесной биогеоценологии / В. Н. Сукачев. – Москва : Наука, 1964. – С. 5–49.
161. Сучасний екологічний стан української частини річки Сіверський Донець (експедиційні дослідження) / А. В. Гриценко, О. Г. Васенко, А. В. Колісник та ін. ; [за ред. д-ра геогр. наук, проф. А. В. Гриценка, канд. біол. наук, доц. О. Г. Васенка]. – Харків : ВПП "Контраст", 2011. – 340 с
162. Страшкраба М. Пресноводные экосистемы: математическое моделирование / М. Страшкраба, А. Гнаука. – Москва : Мир, 1989. – 376 с.
163. Теория систем в приложении к проблемам защиты окружающей среды / [пер. с англ. под ред. С. Ринальди]. – Киев : Высшая школа, 1981. – 264 с.
164. Технологічний регламент Карачунівського водопровідного комплексу. 2007 // ДПП "Кривбасводопостачання". – 2007. – С. 100.
165. Тинякова В. И. Адаптивно-рациональное прогнозирование в экономических системах: концептуальные идеи и модели реализации / В. И. Тинякова // Вестник Воронежского государственного университета. Сер. Экономика и управление. – 2006. – № 2. – С. 286.
166. Торнли Дж. Г. М. Математические модели в физиологии растений / Дж. Г. М. Торнли [пер. с англ.]. – Киев : Наукова думка, 1982. – 310 с.
167. Третьяков О. В. Запобігання водопостачання неякісної питної води з поверхневих джерел в сучасних умовах / О. В. Третьяков, В. А. Андронов // Зб. наук. праць "Проблеми надзвичайних ситуацій". – 2007. – № 6. – С. 142–148.
168. Третьяков О. В. Основні методи математичного моделювання для методичного забезпечення басейнового підходу в управлінні якістю водних ресурсів / О. В. Третьяков, В. Л. Безсонний // Системи обробки інформації. – 2016. – № 8 (145). – С. 194–199.
169. Третьяков О. В. Оцінка впливу стічних вод на екологічний стан річки Сіверський Донець / О. В. Третьяков, В. Л. Безсонний // Вестник ХНАДУ. – 2015. – Вып. 71. – С. 103–108.
170. Третьяков О. В. Підвищення рівня екологічної безпеки питного водопостачання Харківського регіону / О. В. Третьяков, Т. О. Шевченко, В. Л. Безсонний // Східно-європейський журнал передових технологій. – 2015. – Т. 5 "Екологія". – № 10 (77). – С. 40–49.
171. Третьяков Ю. Д. Твердофазные реакции / Ю. Д. Третьяков. – Москва : Химия, 1978. – 360 с.
172. Троян П. Факторная экология / П. Троян ; [пер. с польского]. – Киев : Вища школа, 1989. – 232 с.

173. Управление ресурсами в чрезвычайных ситуациях // Механизация и автоматизация управления. – 1991. – № 4. – С. 28–32.

174. Ухань О. О. Характеристика кисневого режиму поверхневих вод басейну р. Сіверський Донець / О. О. Ухань, Н. М. Осадча // Наукові праці УкрНДГМІ. – 2010. – Вип. 259. – С. 199–216.

175. Уэлес С. Фазовые равновесия в химической технологии / С. Уэлес. – Москва : Мир, 1989. – 663 с.

176. Федотов А. П. Мировая система и Россия : закономерности и модели развития /А. П. Федотов // Реформы в России с позиций концепции устойчивого развития : тр. науч. конф. – Новосибирск : Гражданский мир, 1995. – С. 51–61.

177. Физическая химия. В 2 кн. Книга 2. Электрохимия. Физическая кинетика и катализ / К. С. Краснов, Н. К. Воробьев, И. Н. Годнев и др. – Москва : Высшая школа, 1995. – 319 с.

178. Филоненко Ю. Я. Торкретирование и повышение стойкости футеровки металлургических агрегатов / Ю. Я. Филоненко, С. И. Шулико // Кокс и химия. – 1989. – № 4. – С. 57–59.

179. Хабарова Г. В. Екологічний ризик забруднення атмосферного повітря викидами теплових електростанцій при використанні кам'яного вугілля: автореф. дис. ... канд. техн. наук: 21.06.01 / Г. В. Хабарова; [Український науково-дослідний інститут екологічних проблем]. – Харків, 2016. – 24 с.

180. Хакен Г. Синергетика. Иерархия неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах / Г. Хакен. – Москва : Мир, 1985. – 423 с.

181. Хвесик М. А. Актуальные проблемы охраны и воспроизводства водных ресурсов Украины / М. А. Хвесик, В. В. Файфура // Актуальные вопросы охраны окружающей среды от антропогенного воздействия : материалы международной научно-практической конференции, 18 – 20 мая 1997 г. – Кременчуг, 1997. – С. 85–93.

182. Цхай А. А. Математическое моделирование качества воды в проектируемом водохранилище на основе РК-БПК / А. А. Цхай // Известия Алтайского государственного университета. – 2012. – Т. 2, Вып. № 1 (73). – С. 123–126.

183. Чемарда Н. А. Состояние, перспективы и сохранность коксового печного фонда / Н. А. Чемарда, В. И. Швецов, В. И. Сухоруков // Кокс и химия. – 2003. – № 3. – С. 18–24.

184. Швецов В. И. Об эффективности горячих ремонтов огнеупорной кладки коксовых батарей / В. И. Швецов, Н. А. Чемарда // Кокс и химия. – 1999. – № 9. – С. 12–14.
185. Шеннон Р. Имитационное моделирование систем – искусство и наука / Р. Шеннон. – Москва : Наука, 1978. – 418 с.
186. Штейнберг З. А. Методы ремонта печных камер / З. А. Штейнберг, А. А. Лобов // Кокс и химия. – 1986. – № 9. – С. 18–28.
187. Эйген М. Гиперцикл. Принципы самоорганизации макромолекул / М. Эйген, П. Шустер. – Москва : Мир, 1982. – 270 с.
188. Экологический риск при загрязнении атмосферного воздуха выбросами Бурштынской ТЭС Украины. / В. В. Витько, В. В. Карташев, Г. Д. Коваленко, А. В. Хабарова // Екологічна безпека: проблеми і шляхи вирішення : XII Міжнародна наук.-практ. конференція, Харків, 5 – 9 вересня 2016 р. : зб. наук. ст. – Харків : Райдер, 2016. – С. 65–70.
189. Экология города : учебник / под общ. ред. д-ра тех. наук, профессора Ф. В. Стольберга. – Киев : Либра, 2000. – 464 с. – ISBN 966-7035-29-8.
190. Ядерно-физические методы в материаловедении / Н. А. Азаренков, В. Г. Кириченко, В. В. Левенец, И. М. Неклюдов. – Харьков : ХНУ, 2013. – 300 с.
191. Яремчук Ф. П. Алгебра и элементарные функции : справочник / Ф. П. Яремчук, П. А. Рудченко. – Киев : Наукова думка, 1976. – 686 с.
192. Anderson R. M. Seasonal variation in the population dynamics of caryophylliens laticeps / R. M. Anderson // Parasitology. – 1976. – Vol. 72. – P. 281–305.
193. Anderson R. M. The regulation of host population growth by parasites specie / R. M. Anderson // Parasitology. – 1978. – Vol. 76. – P. 119–157.
194. Chapra S. C. QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality / S. C. Chapra, G. J. Pelletier // Documentation and Users Manual. – 2000. – P. 232–246.
195. Chapra S.C. Surface Water Quality Modelling / S. C. Chapra. – New York : McGraw-Hill, 1997. – 835 p.
196. Georeferenced Water Quality Model / S. Marsili-Libelli, E. Caporali, S. Arrighi, C. Becattelli // Water Science and Technology. – 2001. – No. 43 (7). – P. 223–230.
197. Kamal M. R. Kinetics and thermal characterization of thermoset cure / M. R. Kamal, S. Sourour // Polymer Engineering of Science. – 1973. – Vol. 13, No. 13. – P. 59–64.

198. Lancet J. Low doses of ionizing radiation: direct estimates of cancer risk / J. Lancet // NCBI. – 1994. – Vol. 344. – P. 1039–1043.
199. Lotka A. J. Elements of mathematical biology / A. J. Lotka. – New York : Dover Publications Inc., 1956. – P. 88–94.
200. Marsili-Libelli S. Parameter estimation of ecological systems / S. Marsili-Libelli // Ecological Modelling. – 1998. – No. 62. – P. 233–258.
201. Optimal orientation of non tracking solar concentrator in northern region / D. S. Strebkov, A. E. Irodionov, V. P. Tarasov, E. G. Bazarova // 11-th International Conference on Solar Energy at High Latitudes. – Riga, 2007. – P. 62.
202. Pearl R. On the rate of growth of the population of the United States since 1790 and its mathematical representation / R. Pearl, L. Reed // Proceeding of the National of Academy Sciences. – 1930. – No. 6. – P. 257–288.
203. River Water Quality Model : Modelling approach / P. Shanahan, D. Borchart, M. Henze et al. // IWA Series of Scientific and Technical Reports. – 2001. – No. 11. – P. 11–30.
204. Simmonds J. R. Methodology for assessing the radiological consequences of routine releases of radionuclides to the environment. Radiation Protection / J. R. Simmonds, G. Lawson, A. Mayall. – NRPB, 1995. – 353 p.
205. Verhulst P. F. Notice sur la que la loi population suit dans son accroissement / P. F. Verhulst // Correspondance Mathematique et Physique – 1838. – No. 10. – P. 113–121.
206. Модельний закон про оцінку впливу на навколишнє середовище СНД; Модель, Міжнародний документ : Закон від 28.10.2010 р. Документ 997_n19, поточна редакція [Електронний ресурс]. – Режим доступу : http://zakon3.rada.gov.ua/laws/show/997_n19.
207. Постанова Кабінету Міністрів України "Про затвердження переліку особливо важливих об'єктів електроенергетики, які підлягають охороні відомчою воєнізованою охороною у взаємодії із спеціалізованими підрозділами інших центральних органів виконавчої влади" від 28.07.2003 р. № 1170 [Електронний ресурс]. – Режим доступу : <http://zakon5.rada.gov.ua/laws/show/1170-2003-п>.
208. Список теплових электростанций Украины [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <https://ru.wikipedia.org/wiki/>.
209. Суркова С. А. Эколого-экономические аспекты научно-технической политики. URL [Электронный ресурс]. – Режим доступа : uran.ru/reports/2005/3dic_2004/section1.

210. Щинников П. А. Конспект лекций. Улавливание твердых веществ из дымовых газов ТЭС [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <http://www.studfiles.ru/preview/1193529/>.

211. Экологический паспорт. Ивано-Франковская область [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <http://www.menr.gov.ua/protection/protection1/ivanofrankivska>.

212. Экологический паспорт. Харьковская область [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <http://www.menr.gov.ua/protection/protection1/kharkivska>.

213. Air quality guidelines for particulate matter, ozone, nitrogen dioxide and sulfur dioxide: Global update 2005. Summary of risk assessment : [Electronic resource] / World Health Organization, 2006. – Access mode : <http://apps.who.int/iris/handle/10665/69477>.

214. ALICE Technical Design Report of the Inner Tracking System. CERN/LHCC 99-12. ALICE TDR 4. 18 June 1999 [Electronic resource]. – Access mode : <http://inspirehep.net/record/1614095/files/ALICE-TDR-019.pdf>.

215. Climatology Resource for Agroclimatology Daily Averaged Data (Evaluation Version) [Electronic resource]. – Access mode : <http://power.larc.nasa.gov>.

216. Fedra K. Water Resources Simulation and Optimization: a web based approach [Electronic resource] / K. Fedra. – IASTED/SMO 2005, Oranjestad, Aruba, August 2005. – Access mode : <https://pdfs.semanticscholar.org/7a76/5f2172bc1d4b3a18d8b1b2d171139ac91e0d.pdf>.

217. ICRP 103. Radiation protection. ICRP Publication 103, 2007 Recommendations of the International Commission on Radioecological Protection (ICRP). N.Y., Pergamon Press, 334 [Electronic resource]. – Access mode : [http://www.icrp.org/docs/ICRP_Publication_103-Annals_of_the_ICRP_37\(2-4\)-Free_extract.pdf](http://www.icrp.org/docs/ICRP_Publication_103-Annals_of_the_ICRP_37(2-4)-Free_extract.pdf).

218. Reid Rosnick. CAP88-PC Version 4.0. June 13, 2016. User Guide. Trinity Engineering Associates, Inc. 8832 Falmouth Dr. Cincinnati, OH 45231-5011. – 276 p. – Access mode : <https://www.epa.gov/sites/production/files/2015-06/documents/cap88pcv4testingreportrev1.pdf>.

219. Surface meteorology and Solar Energy [Electronic resource]. – Access mode : <https://eosweb.larc.nasa.gov>.

220. U.S. Environmental Protection Agency (EPA). Integrated Risk Information System (IRIS) [Electronic resource]. – Access mode : <http://www.epa.gov/iris>.

Зміст

Вступ.....	3
Розділ 1. Основні види моделювання процесів та принципи системного підходу до побудови моделей	5
1.1. Актуальність моделювання хімічних, екологічних та ергономічних процесів.....	5
1.2. Відображення об'єктів і процесів у моделях	10
1.3. Принципи системного аналізу в розробленні моделей процесів	18
Розділ 2. Наукові основи і пріоритети моделей в ергономіці, екології та хімічній технології	22
2.1. Елементарні математичні функції та їх застосування	22
2.2. Тригонометричні функції в додатку до моделювання періодичних процесів.....	33
2.3. Методи середніх величин та найменших квадратів у побудові емпіричних формул	36
2.4. Основи методу теорії диференціальних рівнянь у побудові моделей складних процесів	45
2.5. Аналіз традиційних моделей в екології.....	53
Розділ 3. Застосування моделей для управління складними процесами	75
3.1. Масообмінні процеси в матеріалознавстві	75
3.1.1. Моделі дифузії під час твердофазних реакцій у технології тугоплавких неметалічних матеріалів.....	75
3.1.2. Механізми масообміну в оксидних керамічних матеріалах.....	83
3.1.3. Топологічні моделі твердофазних реакцій.....	92
3.1.4. Кінетичні моделі спікання гетерофазних оксидних матеріалів.....	96
3.2. Моделювання релаксії геосистем, породжених надзвичайними ситуаціями пірогенного характеру	105
3.3. Математичне моделювання в оцінюванні впливу забруднень на екологічний стан поверхневих вод.....	111
3.4. Управління процесом протидії джерелам екологічної небезпеки в умовах діючих станцій підготовки питної води	119

3.5. Моделювання екологічних характеристик геліо-водневих енергетичних комплексів	141
3.6. Методологія оцінювання екологічного ризику для теплових електростанцій України	154
3.6.1. Загальна характеристика теплових електростанцій України	156
3.6.2. Характеристика викидів в атмосферне повітря теповими електростанціями	158
3.6.3. Розсіювання шкідливих речовин в атмосферному повітрі	163
3.6.4. Оцінювання величин екологічного ризику.....	166
3.7. Моделювання в ергономіці	177
3.7.1. Стрес: визначення і класифікації.....	179
3.7.2. Стресостійкість як системне поняття	181
3.7.3. Моделювання під час оцінювання стресостійкості оператора	184
3.7.4. Використання ентропійної моделі для розроблення методу оцінювання стресостійкості оператора	200
3.7.5. Використання ентропійної моделі для розроблення способів оцінювання впливу стрес-чинників на формування стресостійкості оператора	201
3.7.6. Візуалізація результатів.....	206
3.7.7. Валідність ентропійної моделі	210
3.8. Моделювання розвитку еколого-економічних систем у цілях зеленої економіки	211
3.8.1. Природні ресурси як основа економічного зростання	211
3.8.2. Еколого-економічне моделювання на локальному, регіональному та глобальному рівнях	216
3.8.3. Когнітивне моделювання соціо-еколого-економічної системи в межах регіонального розвитку	219
3.9. Математичне моделювання забруднення атмосфери.....	223
3.9.1. Теоретичні основи забруднення атмосфери	223
3.9.2. Характеристика моделей та методів моделювання забруднення атмосфери.....	227
3.9.3. Модель турбулентної дифузії.....	231
3.9.4. Модель розсіяння Гауса	235

3.9.5. Модель розрахунку максимального приземного забруднення атмосферного повітря	238
3.9.6. Статистичні моделі рівня забруднення атмосфери	243
3.10. Моделювання процесу спікання керамічних матеріалів з використанням відходів промисловості	246
3.11. Математичне моделювання складів вогнетривких матеріалів.....	253
3.11.1. Застосування методу повного факторного експерименту для оптимізації технологічних параметрів виробництва периклазовуглецевих матеріалів	254
3.11.2. Застосування методу симплекс-ґратчастого методу планування експерименту для оптимізації зернового складу периклазовуглецевих матеріалів	257
3.12. Математичне моделювання процесу окислення гранули екзотермічної суміші в процесі гарячого ремонту вогнетривкої футерівки.....	260
3.12.1. Обґрунтування вибору виду горючого компонента	262
3.12.2. Дослідження впливу виду окиснювача на процес СВС в екзотермічних сумішах	266
3.12.3. Математичне моделювання процесу окиснення гранули екзотермічної суміші	269
3.13. Моделювання аудіовізуального супроводження конструкторсько-технологічних рішень	282
Висновки.....	299
Використана література	304

НАУКОВЕ ВИДАННЯ

Логвінков Сергій Михайлович
Коваленко Григорій Дмитрович
Скородумова Ольга Борисівна та ін.

ОСНОВИ МОДЕЛЮВАННЯ В ЕРГОНОМІЦІ, ЕКОЛОГІЇ І ХІМІЧНІЙ ТЕХНОЛОГІЇ

Монографія

*За загальною редакцією
д-ра техн. наук, професора С. М. Логвінкова*

Самостійне електронне текстове мережеве видання

Відповідальний за видання *С. М. Логвінков*

Відповідальний редактор *М. М. Оленич*

Редактор *О. В. Анацька*

Коректор *О. В. Анацька*

План 2017 р. Поз. № 30-ЕНВ. Обсяг 326 с.

Видавець і виготовлювач – ХНЕУ ім. С. Кузнеця, 61166, м. Харків, просп. Науки, 9-А

*Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до Державного реєстру
ДК № 4853 від 20.02.2015 р.*