

Библиографический список

1. Ефремов Р.Г., Шайтан К.В. Молекулярное моделирование нано- и биоструктур: учебно-методический комплекс для магистров по дисциплине. – М.: Институт АйТи. 2011. 127 с.
2. Пырков Т.В., Озеров И.В., Балицкая Е.Д., Ефремов Р.Г. Молекулярный докинг: роль невалентных взаимодействий в образовании комплексов белков с нуклеотидами и пептидами // Биоорганическая химия. Т. 36. № 4. 2010. С.482–492.
3. Lebedev A., Katalevich A., Malinina V., Menshutina N. Supercritical drying: equipment, experiment, modeling // 6th Nordic Drying Conference: Proceedings of Conference, электр. ресурс (CD-ROM). Taastrup. Denmark. 2013.

УДК 502.173/174

А. М. Сверчков, А. В. Дементиенко, А. Ф. Егоров

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

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА ПРОМЫШЛЕННЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ

Разработан программный модуль прогнозирования загрязнения атмосферного воздуха постоянно действующими источниками выбросов промышленных предприятий и в результате аварий с выбросами опасных химических веществ.

A software module forecasting of air pollution from permanent sources of emissions of industrial enterprises and accidents as a result of emissions of hazardous chemicals is developed.

Для решения задач экологического мониторинга и прогнозирования состояния окружающей среды (ОС) в настоящее время широко используются информационно-моделирующие системы (ИМС).

Для реализации основных задач ИМС разработана функциональная структура, в которой выделено пять основных подсистем:

- подсистема обработки исходных данных, предназначенная для анализа, определения достаточности и непротиворечивости исходных данных;
- подсистема хранения данных, представляющая собой систему управления базами данных, в которой хранится ряд баз данных (БД);
- информационно-моделирующая подсистема, предназначенная для прогнозирования, идентификации источников выбросов, нейросетевого моделирования, оценки и классификации опасности химической продукции;
- подсистема поддержки принятия решений предназначена для определения мер по снижению экологической опасности выбросов опасных веществ и отходов;
- подсистема выдачи рекомендаций и генерации отчетов содержит шаблоны отчетов и предназначена для представления информации в удобной для пользователя форме.

В данной работе приведены результаты разработки одного из программных модулей ИМС, предназначенного для оперативного и долгосрочного прогнозирования загрязнения атмосферного воздуха.

В результате разработки были реализованы различные сценарии развития аварии с мгновенным выбросом опасных химических веществ (ОХВ), воздействующим на ОС и атмосферный воздух, также с учетом выбросов от постоянно действующих источников загрязнения, по которым производится прогнозирование загрязнения атмосферного воздуха:

- последствия выброса ОХВ при полном разрушении оборудования, содержащего опасное вещество в газообразном состоянии;
- последствия выброса ОХВ при нарушении герметичности (частичном разрушении) оборудования, содержащего опасное вещество в газообразном состоянии;
- последствия выброса ОХВ при полном разрушении оборудования, содержащего опасное вещество в жидком состоянии;
- расчет концентраций в атмосферном воздухе опасных веществ, содержащихся в выбросах предприятий.

Данный модуль реализован таким образом, что он может быть использован для прогнозирования загрязнения атмосферного воздуха, как отдельный программный продукт, то есть в нем реализован полный цикл

проведения расчетов, начиная от ввода исходных данных об оборудовании, опасном веществе, условиях его хранения и метеоданных, и заканчивая получением результатов, так и совместно с информационно-моделирующей системой. Совместное использование программного модуля прогнозирования загрязнения атмосферного воздуха и информационно-моделирующей системы заключается в его подключении к системе, с целью использования подсистемы хранения данных, а именно баз данных (БД) с информацией по источникам выбросов промышленных предприятий, свойств химических веществ и отходов химических и других опасных производственных объектов и другие. Данные из ИМС программный модуль прогнозирования загрязнения атмосферного воздуха может использовать, как целиком, так и частично, например, только данные по опасному веществу. Остальные же, либо недостающие данные, необходимые для проведения конкретного расчета, конечный пользователь вводит самостоятельно.

Работа с программным модулем происходит в несколько этапов. На первом этапе пользователь создает (или загружает имеющиеся в БД ИМС) объект. Для данного объекта задается оборудование. На втором этапе работы с программой, пользователь выбирает те сценарии, по которым необходимо произвести расчет, причем список доступных сценариев формируется автоматически, исходя из оборудования, имеющегося у конкретного объекта. После выбора необходимых сценариев, пользователь переходит, непосредственно, к заполнению необходимых исходных данных, после чего можно проводить расчеты. Каждый конкретный сценарий можно сохранять в отдельном файле с целью его дальнейшего использования данной программой, либо другой копией программы, установленной на другом персональном компьютере.

По своим функциональным возможностям программный модуль прогнозирования загрязнения атмосферного воздуха может служить, как инструментом для оперативной оценки воздействия опасных веществ на ОС от конкретного опасного объекта, так и структурированным средством хранения информации об объектах, оборудовании и последствиях негативного воздействия на ОС опасных веществ, использующихся на данном оборудо-

вании. Также данный программный модуль может быть использован как инструмент по долгосрочному управлению экологической безопасностью конкретных территорий, прилегающих к опасным производственным объектам. Интерфейс рабочей области программного модуля (области задания исходных данных) представлен на рис. 1, на котором отображена область ввода исходных данных для сценария с полным разрушением оборудования, содержащего опасное вещество в жидком виде. После проведения расчетов, пользователь может видеть протокол, часть которого приведена ниже.

Сценарий 1. Разрушение емкости, содержащей опасное вещество в газовой фазе.

Параметры окружающего пространства:

Температура воздуха: 293 К

Шероховатость поверхности: 0,05 м

Класс устойчивости атмосферы: Инверсия – F

Скорость ветра на высоте 10 метров: 1 м/с

Давление в оборудовании 4000000 Па

Температура в оборудовании: 273 К

Общая масса газообразного ОВ в оборудовании: 1000 кг

Масса газовой фазы в первичном облаке: 1E003 кг

Плотность газовой фазы в оборудовании: 125 кг/куб.м

Плотность газовой фазы ОВ в первичном облаке в начале рассеяния: 7,39 кг/куб.м

Температура смеси в начале рассеяния в первичном облаке: 117 К

Радиус первичного облаке ОВ в начале рассеяния: 3,51 м

Высота первичного облаке ОВ в начале рассеяния: 3,51 м

Результатами расчета по данному программному модулю являются:

– количество поступивших в атмосферу ОХВ при различных сценариях аварии, причем ОХВ, используемые для расчетов, при нормальных условиях находятся либо в газообразном, либо в жидком состоянии. В технологическом оборудовании ОХВ могут находиться как в газообразном, так и в жидком состоянии. В последнем случае ОХВ может быть сжижено путем повышения давления или понижения температуры;

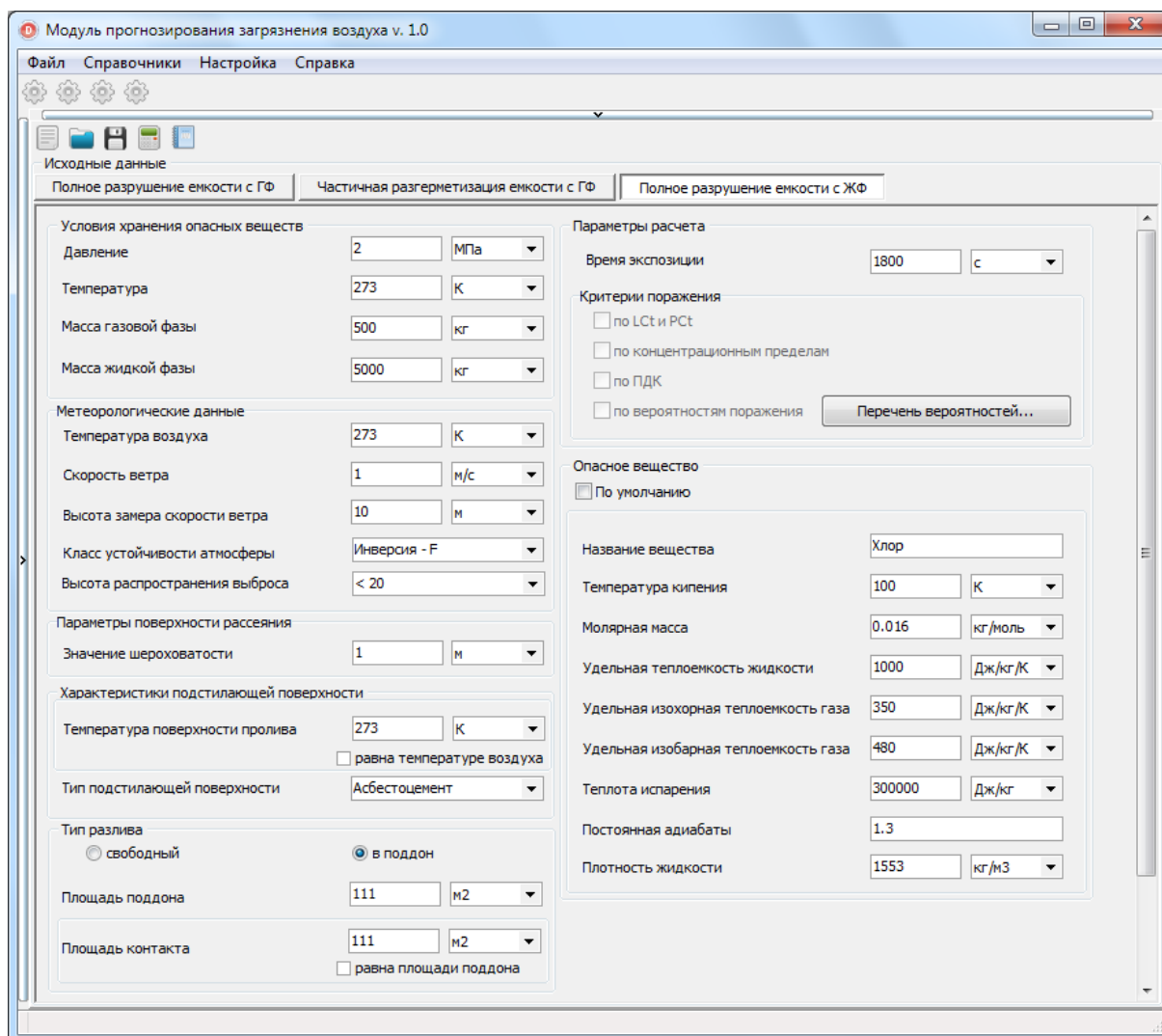


Рис. 1. Область задания исходных данных

– размеры зон химического заражения, соответствующие различной степени поражения людей, определяемой по ингаляционной токсодозе.

Данный программный модуль реализован в интегрированной среде разработки программного обеспечения для Microsoft Windows – Delphi.

Пользователями программного модуля прогнозирования загрязнения атмосферного воздуха могут являться:

– руководители различных структурных подразделений (предприятия, цехов и т.д.) и служб предприятия (экологической, аварийно-спасательной и т.п.);

– руководители и ответственные работники территориальных экологических служб, служб ГО и ЧС.

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 14.В37.21.0662 «Разработка технологий и информационно-моделирующей системы мониторинга и прогнозирования состояния окружающей среды и предотвращения ее загрязнения в результате негативных воздействий опасных химических веществ и техногенных отходов».

УДК 536.212.3

А. М. Каталевич, А. С. Абросименкова, С. А. Спиркин, А. Е. Лебедев,
В. В. Бусыгин

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НА ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ

В работе представлены результаты экспериментальных и аналитических исследований полученных наноструктурированных материалов на основе диоксида кремния. Рассмотрено влияние структурных характеристик на теплопроводность пористых материалов.

Results of experimental and analytical studies of obtained nanostructural materials based on silicon dioxide are presented in this work. The effect of structural characteristics on the thermal conductivity of porous materials are considered.

За несколько последних десятилетий наноструктурированный материал на основе диоксида кремния стал неотъемлемой частью многих сегментов промышленности. Среди них: термо- и шумоизоляционные технологии, электроника, химия, медицина, биология, фармацевтика, охрана окружающей среды, производство сенсоров и высокотехнологичных инструментов, энергетика, аэрокосмическая промышленность, исследования космоса, потребительские товары и военные технологии [1].

В зависимости от метода получения наноструктурированный материал на основе диоксида кремния имеет различные структурные характеристики (аэрогель, ксерогель, криогель). Отличие методов получения за-