

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ ОБСТАНОВКИ РАЗРАБОТАННОЙ ПРОГРАММОЙ ЭВМ ВЫЯВЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

В.В. Волшаник¹, Б.Д. Бабаев²

¹Московский государственный строительный университет
ул. Окская, д. 46, кв. 186, Москва, Россия, 109457

²Дагестанский государственный университет

В статье приведены методика выявления химических взаимодействий между n -компонентами участвующими в процессах и порядок работы с разработанной программой ЭВМ при прогнозировании экологической обстановки.

Ключевые слова: экология, многокомпонентные системы, термохимические реакции, тепловой эффект.

Проблема загрязнения природной среды является важнейшей экологической проблемой современности с точки зрения непосредственного загрязнения и влияния повышающейся концентрации парниковых газов в атмосфере на климат [1].

Разработка принципов и механизмов, обеспечивающих устойчивое развитие человеческого общества при сохранении биоразнообразия и стабильного состояния природной среды, при создании безопасной и комфортной среды жизнедеятельности является актуальной задачей [1].

Одним из основных вопросов экологии является выявление взаимодействия сообществ с абиотической средой обитания, в том числе созданной и измененной в результате строительной и хозяйственной деятельности и установление закономерностей превращений вещества и энергии в процессах биотического круговорота.

Установлено, что изменения, происходящие в природе, происходят закономерно, т.е. согласно законам взаимодействий многокомпонентных химических компонентов в зависимости от их свойств и температуры.

Направление протекания реакций (прогнозирование экологической ситуации) в зависимости от температуры производится функцией от температуры приведенной энергии Гиббса $\Phi(T)$ [2]:

$$\Phi(T) = -\frac{G(T) - H(0)}{T}, \quad (1)$$

где $\Phi(T)$ — приведенная энергия Гиббса в зависимости от температуры; $H(0)$ — энтальпия образования соединения при 0 К из элементов в стандартных состояниях.

Из (1) следует $\Phi(T) \cdot T = -G(T) + H(0)$.

Тогда для продуктов реакции (правых частей уравнений)

$$G(T)^{\text{прод}} = H(0)^{\text{прод}} - \Phi(T)^{\text{прод}} \cdot T. \quad (2)$$

Для исходных соединений (левых частей уравнений) энергия Гиббса равна

$$G(T)^{\text{исх}} = H(0)^{\text{исх}} - \Phi(T)^{\text{исх}} \cdot T. \quad (3)$$

Изменение энергии Гиббса в ходе реакции в зависимости от температуры можно определить по формуле

$$\begin{aligned} \Delta G(T)_{\text{реакц}} &= G(T)^{\text{прод}} - G(T)^{\text{исх}} = \\ &= H(0)^{\text{прод}} - H(0)^{\text{исх}} - \Phi(T)^{\text{прод}} \cdot T + \Phi(T)^{\text{исх}} \cdot T. \end{aligned} \quad (4)$$

Если в реакцию входят несколько соединений, то (4) можно преобразовать в следующий вид:

$$\begin{aligned} \Delta G_{\text{реакц}} &= \left[\sum_{i=1}^k X_i H(0)^{\text{прод}} + \frac{T}{1000} \sum_{i=1}^k X_i \Phi(T)^{\text{исх}} \right] - \\ &\quad - \left[\sum_{j=1}^n X_j H(0)^{\text{исх}} + \frac{T}{1000} \sum_{j=1}^n X_j \Phi(T)^{\text{прод}} \right], \end{aligned} \quad (5)$$

где X_i и X_j — стехиометрические коэффициенты уравнения для исходных соединений и продуктов реакции, соответственно; $1/1000$ — коэффициент преобразования, который вводится из-за того, что в справочниках [2] $H(0)$ дано в кДж/моль, а $\Phi(T)$ в Дж/(К моль).

Левые части уравнений химических реакций n -компонентных взаимных систем (n — количество компонентов не ограничивается) выявляются в соответствии со следующим общим правилом: необходимо осуществить перебор по $n - 1$, $n - 2$ компонентов строки и столбцов, которым соответствуют индексы «0» в матрице инцидентий при наличии в формируемых сочетаниях всех ионов, составляющих n -компонентные взаимные системы. Допускается наличие связей, т.е. «1» в перебираемых сочетаниях в количестве до $n - 2$. В зависимости от допуска связей задают «маски» 0-1, 00-11, 01-11 и т.д.

Правые части уравнений химических реакций n -компонентных взаимных систем выявляются в соответствии со следующим общим правилом: необходимо осуществить перебор по $n - 1$, $n - 2$ компонентов строки и столбцов, которым соответствуют индексы «1» в матрице инцидентий при наличии в формируемых сочетаниях всех ионов, составляющих n -компонентные взаимные системы.

Необходимым и достаточным условием принадлежности формируемых согласно данному правилу сочетаний к левым и к правым частям уравнений химических реакций n -компонентной взаимной системы является наличие всех ионов, входящих в данную n -компонентную взаимную систему отдельно в левой и в правой частях уравнений.

Выявление уравнений химических реакций осуществляется сопоставлением выявленных наборов левых и правых частей.

При сопоставлении выявленных наборов левых и правых частей уравнений химических реакций должны соблюдаться следующие условия:

- наличие в обеих сопоставляемых частях одних и тех же ионов;
- отсутствие в сопоставляемых левых и правых частях одинаковых фаз;
- возможность уравнивания смоделированных реакций.

Уравнивание описываемых реакций осуществляется решением систем математических уравнений с $2(n - 1)$, $2(n - 2)$ неизвестными — коэффициентами перед соединениями, составляющими левые и правые части уравнений.

Математические уравнения, из которых составляется система, составляются методом уравнивания ионного баланса исходных веществ и продуктов реакции. Стехиометрические коэффициенты находят решением систем линейных уравнений (СЛАУ) методом Жордана—Гаусса. СЛАУ составляются по каждому катиону и аниону, принимая за неизвестные стехиометрические коэффициенты [3].

Если количество неизвестных больше ионов, участвующих в химической реакции, то система математических уравнений решается, придавая значения неизвестным коэффициентам, стоящим перед одним или двумя соединениями до первого минимального значения, при котором система будет иметь целочисленное решение. Верхний предел придаваемых значений неизвестным коэффициентам задается в программе ЭВМ и ее можно увеличить до бесконечности, только при этом программа будет работать медленно.

Предложенную методику и программу [4], которая прошла апробацию, можно использовать для прогнозирования экологической ситуации вокруг предприятий с вредными выбросами, если известны химические соединения, участвующие в процессе. Для этого при участвующих в процессе или вредных выбросах состоящих, например, из катионов А, В, С, Д, анионов Х, У, которые образуют восемь компонентов и четыре двойных соединения ABX_2 , A_2XY , ACU_2 , C_2XU , вводят входную информацию отдельным файлом, который включает:

- 1) число соединений, число катионов, число анионов; 12,4,2;
- 2) катион 1, катион 2, катион 3, катион 4; А,В,С,Д;
- 3) анион 1, анион 2; Х,У.

Приводятся все компоненты и соединения в порядке их расположения в матрице смежности; В2Х2, В2У, А2Х2, А2У, СХ2, СУ, ДХ2, ДУ, АВХ2, А2ХУ, АСУ2, С2ХУ;

Приводится матрица смежности, где «1» означает, что между этими компонентами реакции не протекают, «0» означает, что между двумя этими соединениями протекают реакции (правильность их проставления можно проверять программой по тепловым эффектам)

```

-1,0,0,0,1,1,0,0,0,0,1,1;
0,-1,1,1,0,0,1,0,1,0,0,1;
0,0,-1,1,0,0,0,1,1,1,0,1;
0,0,0,-1,0,0,1,0,1,1,0,1;
0,0,0,0,-1,1,0,0,0,1,1,1;
0,0,0,0,0,-1,0,1,0,1,1,1;
0,0,0,0,0,0,-1,1,1,0,1,1;
0,0,0,0,0,0,0,-1,1,1,1,1;
0,0,0,0,0,0,0,0,-1,1,1,0;
0,0,0,0,0,0,0,0,0,-1,0,1;
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-1,1;
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-1.
    
```

Приводятся теплоты образования соединений в той же последовательности, в какой приводятся соответственно и соединения

136,91:351,1:146,91:363,53:291,8:368,8:283,6:365,96:158:158:158:158.

Для определения температурной зависимости реакций вводятся функции $\Phi(T)$ данные в [2] для каждого соединения в порядке их расположения

$$\begin{aligned}
 &166.3086+45.568*\ln(x)-0.0014935*pw(x,-2)+0.61499*pw(x,-1)+96.965*x \\
 &169.2035+40.706*\ln(x)+0.0006025*pw(x,-2)+0.24144*pw(x,-1)+130.27*x \\
 &-2275.2930-644.732*\ln(x)+17658.99*x-93478.93*pw(x,2)+261998.92*pw(x,3) \\
 &201.7959+60.378*\ln(x)-0.0045775*pw(x,-2)+1.20239*pw(x,-1)-81.885*x \\
 &188.0223+47.121*\ln(x)+0.0001045*pw(x,-2)+36.095*x+185.933*pw(x,2) \\
 &191.7939+43.845*\ln(x)+0.00066*pw(x,-2)+0.19415*pw(x,-1)+101.455*x \\
 &383.4142+108.829*\ln(x)-0.006049*pw(x,-2)+1.81938*pw(x,-1)+550.4*x \\
 &182.3441+48.273*\ln(x)-0.0014035*pw(x,-2)+0.59117*pw(x,-1)+64.98*x \\
 &184.6593+0.29529*pw(x,-1)+165.825*x-599.85*pw(x,2)+1904.17*pw(x,3) \\
 &199.7439+43.241*\ln(x)+0.0013035*pw(x,-2)+0.07464*pw(x,-1)+105.585*x \\
 &377.7506+96.928*\ln(x)-0.0020245*pw(x,-2)+1.06491*pw(x,-1)+655.495*x \\
 &242.7936+77.81*\ln(x)-0.0077475*pw(x,-2)+1.8656*pw(x,-1)+20.25*x.
 \end{aligned}$$

После ввода входной информации например, для пятикомпонентной взаимной системы A, B, C, D/X, Y, для которой надо прогнозировать направления протекания реакций (рис. 1), и нажатия кнопки Generate программа выдает 38 термодимических реакций с расчетными значениями тепловых эффектов реакций при $T = 500$ К (знаки перед значениями тепловых эффектов показывают направления протекания взаимодействий при данной температуре) и температур T , при которых реакции достигают максимальных значений тепловых эффектов (рис. 2).

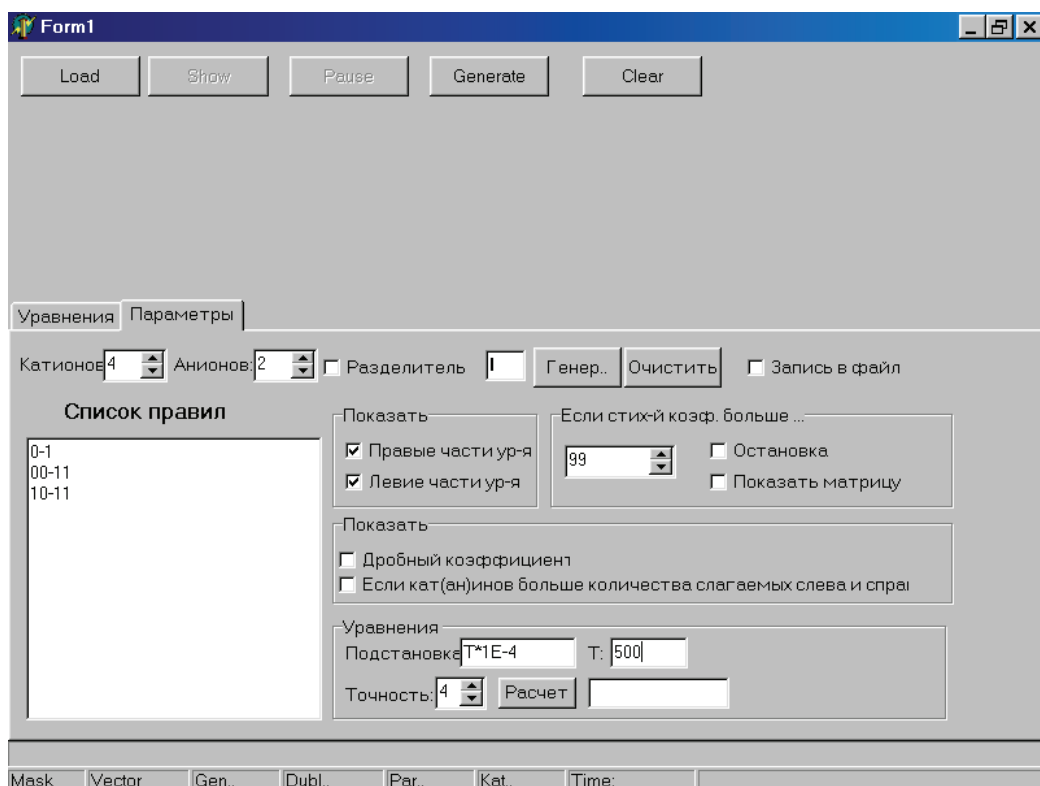


Рис. 1. Экран программы при загрузке входной информации и задании условий выявления уравнений реакций

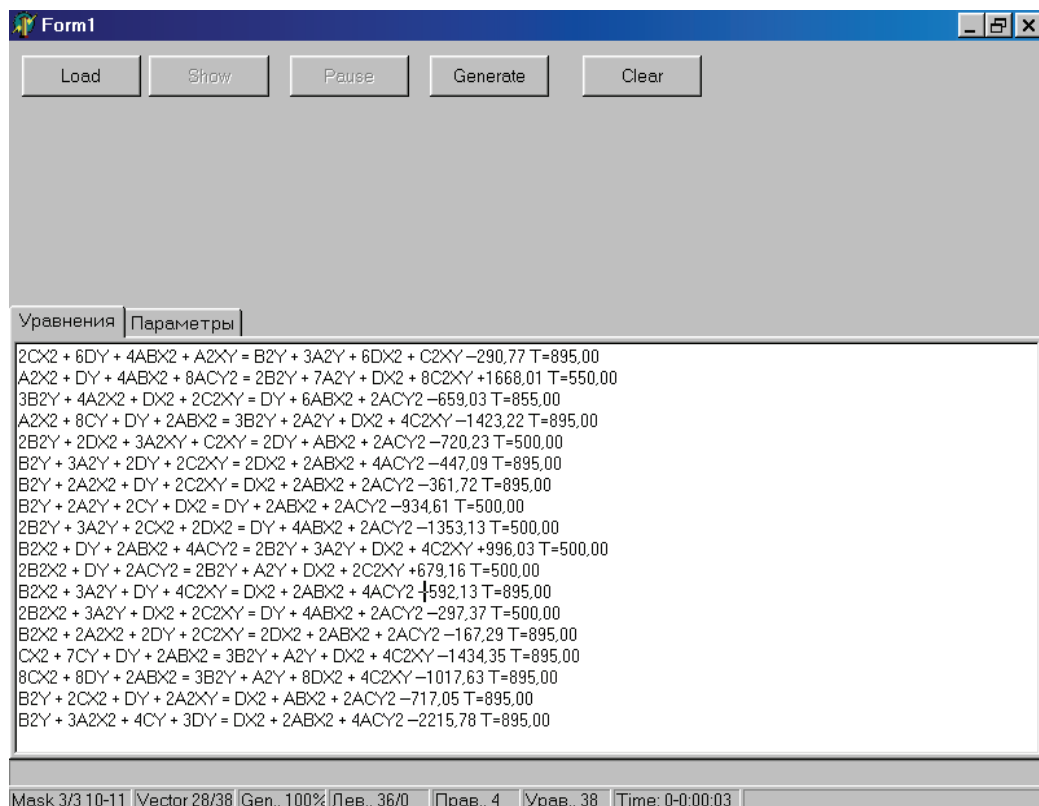


Рис. 2. Экран программы после выявления термохимических уравнений реакций протекающих в системе А, В, С, D//X, У при T = 500 К

Таким образом, разработанной программой ЭВМ можно выявить с минимальными трудозатратами направления протекания при данной температуре химических взаимодействий между участвующими в процессе n -компонентами (n — количество компонентов не ограничивается) и прогнозировать экологическую обстановку.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Волианик В.В. Экологические основы использования возобновляющихся источников энергии / В.В. Волианик, А.Г. Пешнин, У. Хаманджода, Г.Н. Щенникова // Вестник МГСУ. — 2010. — № 4. — Т. 2. — С. 108—119.
- [2] Термодинамические свойства индивидуальных веществ. — Изд. 3 // Под ред. В.П. Глушко. — М.: Наука, 1978. — Т. 1. — Кн. 1.
- [3] Бабаев Б.Д. Блок-схема описания химических реакций в многокомпонентных взаимных системах // Журн. неорганической химии РАН. — 2005. — Т. 50. — № 5. — С. 815—818.
- [4] Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2005610201 «Описание термохимических реакций в многокомпонентных взаимных системах „Тепловой эффект в зависимости от температуры“» / Б.Д. Бабаев, Г.М. Халилуллаев // Заг. рег. в Реестре программ для ЭВМ 21.01.05.

PROGRAM OF A COMPUTER OF DETECTION OF CHEMICAL INTERACTIONS

V.V. Volshanik¹, B.D. Babayev²

¹The Moscow state building university
Oskaja str., d. 46, sq. 186, Moscow, Russia, 109457

²The Dagestan state university

In the article are adduced a technique of detection of chemical interactions between n-components participating in processes and the operational procedure with the designed program of a computer at forecasting an environmental setting.

Key words: ecology, multicomponent systems, thermochemical reactions, heat effect.