МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХЕРСОНСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
Медичний факультет
Кафедра хімії та фармації

СУЧАСНІ МЕТОДИ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ РЕСУРСОЗБЕРІГАЮЧИХ ПРОЦЕСІВ В ЕКОЛОГІЧНІЙ ХІМІЇ

Кваліфікаційна робота (проект)
на здобуття ступеня вищої освіти «магістр»

Виконала: здобувач 242 М групи
Спеціальності 102 Хімія
Освітньо-професійної програми
Хімія
Компаніченко Аліна Миколаївна

Керівник: кандидатка хімічних наук,
доцентка кафедри хімії та фармації
ВОЛКОВА Світлана Андріївна

Рецензентка: кандидатка технічних наук,
доцентка кафедри хімічних технологій,
експертизи та безпеки харчових продуктів
Херсонського національного
технічного університету
Семенченко Оксана Олександрівна

Івано-Франківськ, 2024

ЗМІСТ

ВСТУП……5

РОЗДІЛ 1. ТЕОРЕТИЧНІ АСПЕКТИ ПРОБЛЕМИ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ЕКОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ……9

1.1. Сутність та значення процесу моделювання……...9

1.2. Особливості моделювання хімічних процесів в екологічній хімії.....12

1.3 Проблеми та перспективи впровадження ресурсозберігаючих та екологічних технологій в Україні…….16

РОЗДІЛ 2. СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО МОДЕЛЮВАННЯ РЕСУРСОЗБЕРІГАЮЧИХ ПРОЦЕСІВ (НА ПРИКЛАДІ ВИРОБНИЦТВА ТВЕРДОГО БІОПАЛИВА)……21

2.1. Огляд сучасних підходів до комп'ютерного моделювання в екологічній хімії в контексті ресурсозбереження……...21

2.2. Особливості моделювання процесів виробництва твердого біопалива в екологічній хімії……..26

РОЗДІЛ 3. АНАЛІЗ МЕТОДІВ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ РЕСУРСОЗБЕРІГАЮЧИХ ПРОЦЕСІВ В ЕКОЛОГІЧНІЙ ХІМІЇ……...34

3.1. Аналіз основних програмних засобів та платформ для комп'ютерного моделювання ресурсозберігаючих процесів в екологічній хімії……...34

3.2. Імітаційне моделювання як найефективніший метод моделювання складних ресурсозберігаючих процесів.....38

3.3. Порівняльний аналіз комп'ютерних програмних пакетів з моделювання хіміко-екологічних систем……43

ВИСНОВКИ……...48

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ…….....50

ДОДАТКИ……58

ДОДАТОК А. Можливості MATLAB……..58

ДОДАТОК Б. Способи розрахування похибки в імітаційному комп’ютерному моделюванні……...64

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

ЕОМ – електронно-обчислювальна машина;

КМХП – комп’ютерне моделювання хімічних процесів;

КП – комп’ютерна модель;

НТП – науково-технічний прогрес;

НТД – нормативно-технічна документація;

АЗ – антропогенне забруднення;

ВСТУП

Актуальність теми. Моделювання є одним із основних методів дослідження, який дозволяє створювати складні хіміко-екологічні моделі за допомоги різних комп'ютерних програм. Комп'ютерне моделювання ґрунтується на основі зібраної початкової інформації та створенні пробної моделі будь-яких об'єктів та процесів в екологічній хімії.

Комп'ютерне моделювання дозволяє швидко прогнозувати можливі зміни у досліджуваній системі з урахуваннях їх екологічної безпечності. Поряд з цим створення комп'ютерної моделі будь-якої хіміко-екологічної системи дозволить швидко прогнозувати потенційні наслідки використання різних стратегій щодо впливу на екосистему; окреслить потенційні можливість подальшого використовувати природних ресурсів та дозволить глибоко проникнути у сутність явища та зрозуміти їхню справжню природу [9, с. 32].

Особливе місце у проектуванні ресурсозберігаючих процесів посідає імітаційне моделювання, через те , що воно здатне запропонувати велику кількість альтернативних шляхів розв'язання поставлених задач, поряд з цим дозволяє більш точно спрогнозувати їх наслідки. Метод імітаційного моделювання є методом системного аналізу, який використовують для проектування складних систем та процесів в екологічної хімії. Проте імітаційний метод моделювання щодо оцінки ресурсозберігаючих процесів на сьогодні є не досить поширеним, тому що має певні складності у відповідності математичного апарату та потребує здійснювати обробку значних масивів інформації.

Дослідження науково-методичної бази із обраної проблематики дозволяє говорити про важливість вивчення проблеми комп'ютерного моделювання та подальшої можливості прогнозування ресурсозберігаючих процесів на діючих засадах екологічної безпечності, що і зумовило вибір теми нашого дослідження: «Сучасні методи

комп’ютерного моделювання ресурсозберігаючих процесів в екологічній хімії».

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Роботи Курило А. О., Крекотень О. В. [24]; Лопатьєв А. О. [26]; Огурцов О. М. [32]; Толкачова В. О. [40]; Ютілова К. С. [43] внесли великий вклад у технологію прикладного комп’ютерного моделювання складних біологічних, хімічних та екологічних процесів. Проблемою впровадження імітаційного моделювання займалися наступні дослідники : Дьяконов О. В. & Полянський О. С. [11]; Кравець І. О. [23], Федорейко В. С., Рутило М. І. [41], Янковська Л. В. [44].

Зв’язок роботи з науковими програмами, планами та темами. Робота написана у відповідності до науково-дослідної роботи кафедри хімії та фармації за темою: «*Аналітичні дослідження та ресурсозберігаючі і екологічно чисті технології*».

Мета дослідження: аналіз та оцінка ефективності застосування комп’ютерного моделювання в екологічній хімії як ресурсозберігаючого процесу для зменшення антропогенного навантаження на природні об’єкти.

Завдання дослідження:

1. Здійснити аналіз загальних принципів моделювання хімічних процесів в екологічній хімії.
2. Розглянути проблеми та перспективи впровадження ресурсозберігаючих та екологічних технологій в Україні.
3. Ознайомитися з сучасними підходами комп’ютерного моделювання в екологічній хімії
4. Дослідити особливості комп’ютерного моделювання ресурсозберігаючого процесу виробництва твердого біопалива.
5. Здійснити аналіз основних програмних засобів та платформ комп’ютерного моделювання та провести їх порівняльний аналіз в контексті моделювання складних хіміко-екологічних систем.

Об'єкт дослідження: комп'ютерне моделювання в екологічній хімії.

Предмет дослідження: аналіз сучасних методів комп'ютерного моделювання ресурсозберігаючих процесів в екологічній хімії.

Серед *методів дослідження* теоретичного та практичного рівня, які використано нами з метою вирішення поставлених завдань, досягнення мети було обрано: системний аналіз науково-методичної літератури з обраної проблематики; метод систематизації; метод дедукції; методи сучасних комп'ютерних технологій із проектування екологічних процесів та прогнозування стану довкілля; метод графічно-статистичної обробки даних; метод аналізу та узагальнення представлені у вигляді висновків.

Наукова новизна дослідження: набуло подальшого розвитку питання щодо особливостей побудови математичних та імітаційних моделей на прикладі ресурсозберігаючого процесу виробництва твердого біопалива в екологічній хімії.

Практичне значення одержаних результатів. Матеріали дослідження можуть використовуватися в якості навчально-методичного матеріалу при викладанні освітньої компоненти «Основи хімічної технології» та «Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях» у закладах вищої освіти, з метою поглиблення теоретичних та практичних знань щодо методів моделювання різних екологічних процесів. Також проведені дослідження стануть корисними для здобувачів, що навчаються за освітньою програмою Хімія (102) та Середня освіта – Хімія (014) Бакалаврського рівня вищої освіти для набуття практичних навичок моделювання екологічних об'єктів та процесів хімічної технології, що є важливою компетентністю майбутнього фахівця хіміка.

Апробація результатів дослідження. За результатами нашого дослідження було опубліковано тезу: Компаніченко А. М., Пилипчук Л. Л., Корніловська Н. В., Волкова С. А. Сучасні методи комп'ютерного моделювання ресурсозберігаючих процесів в екологічній хімії. The 3rd

International scientific and practical conference “Scientific achievements of contemporary society” (October 10-12, 2024) Cognum Publishing House, London, United Kingdom. 2024. P.135-144. ISBN 978-92-9472-192-1

Структура роботи. Основний склад: вступна частина, три розділи, висновки, список використаних джерел та додатки. Обсяг кваліфікаційної роботи складає 64 сторінки (з додатками), основний зміст роботи викладений на 50 сторінках надрукованого тексту.

РОЗДІЛ 1
ТЕОРЕТИЧНІ АСПЕКТИ ПРОБЛЕМИ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО ЕКОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

1.1.Сутність та значення процесу моделювання

Під поняттям «моделювання» розуміють процес побудови та реалізацію моделі, яка допоможе краще дослідити об’єкт (явище) у реальному житті. При моделюванні будь-якого явища будується так звана «модель». Саме тому по суті кожна наукова робота містить у собі елементи моделювання, а саме: створення моделі засобами інформаційних технологій в штучних умовах; створення графічних схем виробничого процесу (явища); моделювання математичної моделі та побудова хіміко-екологічного процесу.

Під поняттям «модель» [8, с. 109] розуміють умовний об’єкт, який містить в собі комплекс найістотніших ознак (параметрів), які є обов’язковими для здійснення даного дослідження. Моделі комп’ютерного моделювання дозволяють: прогнозувати поведінку досліджуваної системи при різних зовнішніх впливах; оптимізувати та обирати більш оптимальні способи керування об’єктом.

При моделюванні до уваги приймаються лише важливі ознаки (параметри), а іншими просто нехтують. Тобто, яка всі дані подано за допомоги матеріальних об’єктів, то отримують «матеріальну модель», або коли модель подана за допомоги різних схем, креслень чи то графіків, тоді отримують «інформаційну» модель.

Під терміном «комп’ютерне моделювання» [12, с. 201] розуміють процес, який ґрунтується на перенесенні важливих оригінальних ознак на інший об’єкт. Підбір основних параметрів залежить від цілей моделювання, особливостей їх прояву, а також від можливостей програмного забезпечення.

Комп’ютерне моделювання дозволяє у досить короткі терміни спрогнозувати зміни у досліджуваній систему, а також вирахувати частоту виникнення ризикових ситуацій. Спроектовані моделі комп’ютерного моделювання дозволяють побачити можливі наслідки чи варіанти інших можливих сценаріїв розвитку досліджуваної системи. Результати моделювання подаються у двох форматах: якісні та кількісні висновки. Кількісні висновки мають здебільшого прагматичний характер, що дозволяє пояснити значення змінних, що характеризують систему. Тоді коли якісні висновки дозволять дослідити властивості, які не буди відомі, а саме: цілісність, структурність чи то динаміку перебігу процесів. Нижче представимо основні сфери використання комп’ютерного моделювання [10, с. 10]:



Рис. 1.1. Сфери використання систем моделювання

Комп’ютерне моделювання дозволяє вивчати ті об’єкти та явища, які не можливо вивчити в реальних лабораторних умовах, через низку проблем, серед яких: дороговартісність процесу; небезпечність для здоров’я людини). Комп’ютерне моделювання дозволяє значно економити природні матеріальні ресурси, а також уникнути можливості виникнення шкідливих наслідків під час проведення випробувань.

Основним предметом комп'ютерного моделювання може бути: промислова діяльність; хімічна діяльність; будь-яка виробнича діяльність. Досить часто моделювання є складним процесом, що містить у собі комплекс засобів, які направленні на прийняття важливих рішень (технологічних, економічних).

Серед основних переваг моделювання різних процесів, явищ та об'єктів навколишнього середовища варто виділити наступні [16, с. 441]:

1. Швидкість прогнозування наслідків спрямованих дій на великий проміжок часу і навіть століття;
2. Відсутність нанесення безпосередньої шкоди навколишньому середовищу.
3. Можливість спрощення реального об'єкта чи процесу, щоб ефективніше пропрацювати важливі для дослідника параметри та характеристики;
4. Можливість збільшення або зменшення за допомоги моделювання реального об'єкта;
5. Можливість побудови ідеальних моделей, які оптимізують процес дослідження та практичну діяльність науковця.

Побудова моделей базується на абстрагуванні від конкретної природи явищ та складається з двох етапів: спочатку створюється якісна модель, а потім створюється кількісна модель. Моделювання об'єктів, процесів потребує здійснення серії експериментальних досліджень. Основною метою цих досліджень є: аналіз досліджуваної системи; зіставлення отриманих результатів із реальною картиною перебігу процесу; інтерпретація даних; та удосконалення досліджуваного об'єкту. Моделювання дозволяє [17, с. 60]:

- вивчати явища, предмети об'єкти, які не можливо дослідити у реальних умовах;
- 3D візуалізація досліджуваного об'єкту;

- регулювання часу на його виконання (уповільнення чи то прискорення);
- можливість багаторазового здійснення експерименту, тобто присутня можливість багаторазового повернення досліджуваного об’єкту у її первинний стан;
- отримати інформацію про різні характеристичні об’єкти у графічному вигляді або числовому;
- можливість проведення досліджень без шкоди навколишньому середовищу.

Отже, процес «моделювання» вважається головним елементом у процесі пізнання навколишнього світу та важливим елементом у створенні збільшених чи зменшуваних копій реальних об’єктів; описом явищ, об’єктів та процесів за допомоги різних моделей та алгоритмів. Метою використання різних систем моделювання є: пізнання сутності досліджуваного процесу (явища), вивчення будови та механізмів взаємодії між досліджуваними суб’єктами; інтерпретація вже відомих результатів дослідження. Тобто комп’ютерне моделювання окреслює потенційні можливість подальшого використовувати природних ресурсів та дозволяє більш глибоко проникнути у сутність досліджуваного явища, зрозуміти їхню справжню природу, що є важливою частиною розгляду проблем в екологічній хімії [19, с. 180].

1.2.Особливості моделювання хімічних процесів в екологічній хімії

На сьогодні для моделювання хімічних процесів широко використовуються такі методи як: математичне моделювання; системне моделювання та натурно-експериментальне моделювання. Так як математичне моделювання має ряд труднощів при моделювання складних хімічних та біологічних об’єктів переважаючим методом моделювання є – системне моделювання.

Основні фактори, що враховують при моделюванні хімічних процесів в екологічній хімії поділяють на дві великі групи [21]:

а) фактори зовнішнього впливу, серед таких факторів виділяють кліматичні змін (опади);

б) фактори внутрішнього впливу: конкуренція, хижацтво, захворюваність та її поширення; ступінь забруднюваність та швидкість поширення.

Прояв цих факторів залежить від: кумулятивних ефектів; ефектів запізнення та граничних ефектів. Зазначимо, що математичне моделювання хімічних процесів залежить від великої кількості взаємозалежних змінних, які пов'язанні між собою нелінійними співвідношеннями, що робить процес моделювання занадто складним, який потребує використання спеціалізованих програм.

При моделюванні хіміко-екологічних процесів використовують наступні принципи [22, с. 90]:

- Принцип системності – передбачає виникнення системних зв'язків між хіміко-екологічними процесами які відбуваються в єдинуій системі. Даний принцип передбачає злиття двох видів моделювання: методів математичного моделювання та методів системного аналізу, внаслідок чого виникає так званий «інтегральний метод системного моделювання» [22, с. 91]. Реалізація даного принципу передбачає усвідомлення цілісності досліджуваних об'єктів, їх стійкість та їх взаємозв'язок з навколишнім середовищем. Принцип системності органічно поєднує у собі якісні та кількісні результати, теорію та практику.
- Принцип єдності та структурності. Забезпечує наявність у моделі ієрархічних структур. Проблема структурування полягає у визначення істотних підсистем та елементів моделі, з усіма її взаємозв'язками.

- Принцип багатомодульного опису дозволяє створити множинні варіанти різних моделей, які отримали назву «взаємодоповнюючі». Обумовлено це тим, що на сьогодні не існує можливості побудувати єдину теорію соціоекосистеми у традиційній формі, та вивести з неї всі можливі наслідки.

- Принцип єдності «формалізованого та неформалізованого опису» [22, с. 91]. Єдиного формалізованого (математичного) опису недостатньо для адекватного моделювання хімічних процесів. Саме тому необхідно враховувати неформальні фактори та доповнювати їх неформалізованим описом.

- Принцип визнання фундаментальності процесів. Хіміко-технологічні процеси не можна привести до просто біологічних, екологічних чи хімічних процесів, тому що всі вони тісно пов'язані між собою. Принцип визнання фундаментальності забезпечує формування нових хімічко-технологічних процесів.

- Принцип єдності та практики. Хімічна технологія – це наука, яка вдало поєднує у собі екологічні та хімічні закономірності, з переносом їх використання у повсякденному житті.

При моделювання хімічних процесів в екологічній хімії переважаючим видом моделювання є імітаційне моделювання так як саме цей вид моделювання надає велику кількість варіантів розв'язання поставленої задачі, дозволяє більш точно спрогнозувати всі можливі побічні процеси та виділити умови, при яких можуть виникнути аварійні ситуації, тобто дозволяє уникати всіх небажаних результатів дослідження. Вид імітаційного моделювання активно використовується саме для моделювання хіміко-технологічних процесів, особливо тих процесів які загрожують тяжкими наслідками для навколишнього середовища [25, с. 62].

Серед особливостей використання імітаційного моделювання при моделюванні складних хіміко-екологічних процесів варто виділити [27, с. 167]:

- імітаційне моделювання дозволяє дослідити у повній мірі внутрішні взаємодії у складних системах або підсистемах, а також експериментувати з ними;
- імітаційне моделювання дозволяє оцінити ефекти зовнішніх впливів та оцінити їх вплив на поведінку системи;
- імітаційне моделювання є ефективним методом здійснення аналітичного аналізу;
- імітаційне моделювання дозволяє значно знизити витрати на досліджені хімічко-екологічних процесів, які можуть негативно впливати на довкілля.
- сучасні хімічні виробництва надзвичайно складні, тому їх дослідження проводять шляхом використання імітаційного моделювання.

Отже, розв’язання важливих проблем оцінки стану довкілля та основних процесів неможливе без знання основних методів дослідження екологічних процесів зокрема мова йде про методи математичного та імітаційного моделювання. Через те, що кількість техногенних катаклізм збільшується проблема щодо оцінювання та прогнозування міграцій забруднюючих хімічних речовин в довкіллі стає все актуальнішою.

Саме тому виникає нагальна проблема у прогнозуванні основних характеристик стану екосистеми, на основі яких вчасно приймаються рішення, щодо безпеки довкілля, а також розробляють ефективні ресурсозберігаючі заходи із захисту екосистем. Переважаючими методами є математичне та імітаційне моделювання. Математичне моделювання застосовують для тих процесів, які мають повільний еволюційний процес розвитку. Імітаційне моделювання є більш ефективним, так як дозволяє розглядати велике число альтернатив,

результати моделювання значно покращують якість технологічних рішень та дозволяють більш точніше прогнозувати їх наслідки [30, с. 111].

На основі здійсненого комп'ютерного моделювання розробляють різні стратегії, щодо оптимізації досліджуваного ресурсозберігаючого процесу, а також здійснюють глибокий аналіз щодо наслідків його використання в реальних умовах. Сам процес моделювання дозволяє зрозуміти сутність досліджуваного явища, а також дослідити його справжню природу.

1.3. Проблеми та перспективи впровадження ресурсозберігаючих та екологічних технологій в Україні.

Концепція сталого розвитку у впровадженні ресурсозберігаючих процесів є однією із найважливіших умов підвищення екологічного мікроклімату в Україні. Серед головних проблем, що заважають даному процесу: старе устаткування; переважання енергоємних процесів, що значно затримують введення інновацій. Головною проблемою гальмування процесу впровадження більш екологічно-чистих технологій є низький рівень матеріально-технічному забезпечення вітчизняних підприємств. Вміло підібрані стратегії щодо їх впровадження на виробництві дозволять швидко їх інтегрувати у технологічний процес, що зробить їх більш ефективними та підвищить рівень конкурентоспроможності [32, с. 144].

Необхідність удосконалення та використання ресурсозберігаючих виробництв в Україні визначенні у міжнародних документах: «Декларація тисячоліття» (2000 рік); документами Всесвітньої зустрічі в Йоганнесбурзі (2002 рік) та чинним вітчизняним законодавством, Закон України «Про пріоритетні напрямки розвитку науки та техніки» [7]; Закон України «Про пріоритетні напрямки розвитку інноваційної діяльності в Україні» [8] та інші документи, які містять основні зобов'язання України

щодо виконання вимог Міжнародної Декларації щодо чистих та екологічно безпечних технологій на вітчизняних підприємствах [29].

Вітчизняні підприємства майже не використовують у свій діяльності ресурсозберігаючі технології. Проте вони володіють відповідним інноваційно-новаторським потенціалом. Запропонуємо основні кроки у здійсненні цільового регулюванного ресурсозбереження: (а) цілеспрямовано працювати над формуванням методів, форм та прийомів реалізації ресурсозберігаючих процесів; (б) впроваджувати «інноваційні види діяльності» та сприймати її як основне міряло ефективного розвитку підприємства; (в) оптимізувати ресурсозберігаючу діяльність на вітчизняних підприємствах; (г) планувати інновації та визначати економічні показники задля реалізації ресурсозберігаючого проєкту [37, с. 301].

Впровадження ресурсозберігаючих технологій на вітчизняні підприємства є нагальним питанням, тому що підприємства функціонують на засадах витратності, а не на економічності ресурсів. Плинність та специфічність використання ресурсозберігаючих технологій відображається типовими характеристиками: наявність сучасної техніки; якісно новими властивостями продукту; змінами у організаційно-виробничому та матеріально-технічному забезпеченні; ступенем забезпечення сировиною [29, с. 120].

Позитивними факторами, які впливають на ефективне впровадження ресурсозберігаючих проектів, варто вважати: наявність запасного плану діяльності; впровадження програм заохочення; формування програм роботи, децентралізована автономія; самостійна обробка інформації щодо інноваційної діяльності (ефективний організаційно-управлінський аспект). Вітчизняні підприємства працюють над створенням дієвого механізму щодо впровадження ресурсозберігаючих технологій, які дозволить досягнути цільових показників виробництва на всіх рівнях одночасно [45, с. 10].

Ресурсозберігаючі технології повинні базуватися на загальному інноваційному принципі – повноцінній екологізації, що дозволить зберегти навколишнє середовища, а також зробить процес використання природних ресурсів більш економічно вигідним. Результатом дотримання інноваційного принципу є формування екологічної свідомості до раціонального та ощадливого використання навколишнього природного середовища. Нижче представимо схему перспектив розвитку інноваційних ресурсозберігаючих технологій на вітчизняних підприємствах (рис. 1.2.)

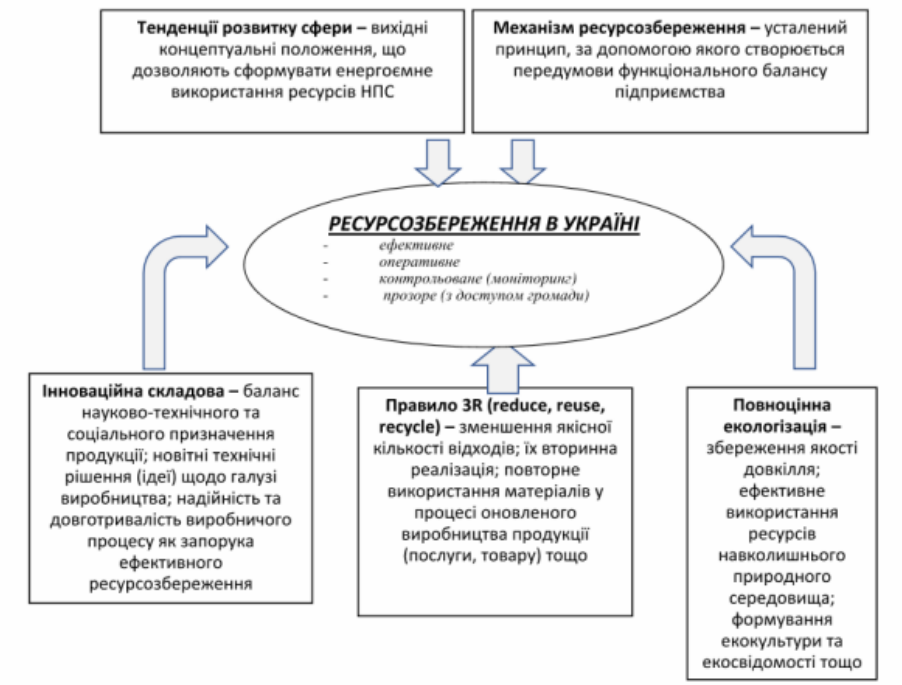


Рис. 1.2. Перспективи впровадження ресурсозбереження в Україні [18]

Найбільш характерними ознаками впровадження ресурсозберігаючих та інноваційних технологій є [20, с. 22]:

- інноваційний підхід до вирішення екологічних проблем протягом виробництва цілої лінії продукції;
- покращення екологічних параметрів довкілля;
- оптимізація технологічних схем виробництва: зменшення обсягів використання первинної сировини; процесі рециркуляції (на принципі повторного використання сировини).

- Переробка відходів та можливість їх вторинного використання.

Впровадження ресурсозберігаючих процесів на підприємства здійснюється на загальних засадах: використання безвідхідних технології; систематичний моніторинг обліку природних ресурсів; перевірки (плановані та непланові); можливість використання вторинних матеріалів; процес удосконалення кадрового потенціалу та здійснення фахового контролю підприємством.

Сучасні підходи до впровадження інноваційний технологій ґрунтуються на прийнятті ресурсозберігаючих рішень, які несуть як економічний (збільшення прибутковості виробництва) так і екологічний позитивний ефект (зменшення негативного впливу підприємства на природнє середовища) [33].

Ефективне впровадження ресурсозберігаючих та екологічних технологій потребує [26, с. 5]:

- відповідної нормативно-правової бази;
- розробки методичного інструментарію щодо реалізації таких технологій у відповідності до виду діяльності підприємства;
- формування ефективних економічних механізмів, щодо їх впровадження;
- Організація підготовки та перепідготовки кваліфікованих спеціалістів у сфері впровадження ресурсозберігаючих (екологічних) технологій

Нижче відмітимо економічний та екологічний ефекти від впровадження ресурсозберігаючих технологій на сучасних вітчизняних підприємствах (табл. 1.1.) [24, 31, 33]:

Таблиця 1.1.

Економічний та екологічний ефекти впровадження ресурсозбереження на сучасних вітчизняних підприємствах

Економічні перспективи	Екологічні перспективи
Мінімізація витрат та ефективне використання вторсировини	Зменшення техногенного впливу на довкілля.
Додаткове залучення інвестицій (як міжнародних так і вітчизняних).	Оздоровлення екологічного оточення навколо вітчизняних підприємств;
Зменшення економічних витрат та мінімізація екологічних ризиків.	Підвищення якості та безпечності продуктів виробництв;
Розвиток підприємств, які засновані на використанні екологічних технологій.	Розвиток екологічно безпечних видів діяльності на вітчизняних підприємствах.

Успішність впровадження екологічних або ресурсозберігаючих технологій сприятиме: удосконаленню організаційних заходів та створення систем екологічного менеджменту; удосконаленню технологічної та екологічної діяльності з метою скорочення викидів небезпечних токсичних речовин; створенню економічно-екологічного моніторингу проектів; створенню інтегрованих систем із управління довкіллям у відповідності до чинного законодавства країни.

Впровадження ресурсозберігаючих або екологічних технологій на сучасних виробництвах дозволить значно підвищити конкурентоспроможність та покращити екологічний ефектна навколишнє середовища, сприятиме модернізації та оновленню системи виробництв. Процес екологізації у контексті дії концепції сталого розвитку забезпечуватиме впровадження більш екологічно чистих технологій, поряд з цим удосконалюватиме технологію екологічної сертифікації. Тільки комплексний підхід до вирішення перерахованих проблем забезпечить сталий розвиток держави саме на інноваційній основі. Впровадження екологічних технологій дозволить підприємствам самовдосконалюватися власні технологічні процеси, а отриманні в результаті такої діяльності економічні показники сформують думку, про те, що саме ці технології із проблеми охорони довкілля є досить прибутковою справою [28, с. 140].

РОЗДІЛ 2
СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО МОДЕЛЮВАННЯ РЕСУРСОЗБЕРІГАЮЧИХ ПРОЦЕСІВ (НА ПРИКЛАДІ ВИРОБНИЦТВА ТВЕРДОГО БІОПАЛИВА)

2.1. Огляд сучасних підходів до комп'ютерного моделювання в екологічній хімії в контексті ресурсозбереження

Технологічні процеси є складними системами, які характеризується переважанням двоїстої детермінованої природи, які є змінними у часі та просторі. Хімічні процеси, в яких приймають участь речовини, як правило, багатофазові та багатокомпонентні. Весь процес у цілому протікає з конкретними геометричними характеристиками, що безпосередньо впливає на характер цього процесу. Істотна особливість всіх хіміко-технологічних процесів полягає в тому, що всі їх процеси мають двоїсту детерміновано-стохастичну природу, через це вони проявляються через процеси масо-, теплопереносу та хімічного перетворення [34, с. 518].

Комп'ютерне моделювання зазвичай ґрунтується на використанні спроектованої комп'ютерної моделі, яка містить якісні та кількісні результати досліджень. Якісні результати дозволяють розкрити невідомі досі властивості складаної системи, а саме: стійкість, цілісність, динаміку, структуру. Кількісні результати використання комп'ютерного моделювання носять переважно прогностичний характер, або обґрунтовує минулі значення змінних, що характеризують хіміко-екологічну систему.

Комп'ютерне моделювання при проектуванні складних хіміко-екологічних процесів дозволяє прискорити процес створення та вивчення моделей об'єктів, а також вивчати процеси та об'єкти, які не можливо спостерігати у реальних умовах.

Серед переваг комп’ютерного моделювання варто виділити [1]:

- ефективний інструмент для дослідження швидкоплинних та повільних процесів у екологічній хімії.
- передбачає вивчення явищ, подій та об’єктів, що передбачені будь-якими теоріями;
- екологічно безпечний метод, що не представляє небезпеки для природи та людини;
- дозволяє не лише спостерігати, але й передбачати результати експерименту;
- забезпечує наочність;
- доступне у використанні.

Найпоширенішими видами комп’ютерного моделювання які активно використовуються при вивченні еколого-хімічних процесів є: імітаційне моделювання; математичне моделювання; статистичне моделювання; фізичне та графічне моделювання.

Комп’ютерне моделювання класифікують за різними моделями, а саме [4]:

1. Моделі фізичні (комп’ютерні установки або комп’ютерні тренажери). Принцип роботи: за допомоги комп’ютера відбувається заміна показників, а також імітування роботи із реальною системою.
2. Моделі імітаційні покликані імітувати перебіг процесів у надскладних технологічних чи виробничих системах. Імітаційні моделі мають високу точність, тому їх використовують для дослідження біологічних, хімічних та екологічних процесів.
3. Модель статистична ефективна при багаторазовому проведенні наукового дослідження з подальшою обробкою отриманих результатів. Зазвичай статистичні моделі використовують при обробці великих масивів даних.
4. Моделі графічні використовуються для створення графічних та символічних даних, що у повній мірі відображають найвагоміші

параметри досліджуваного об’єкту. Графічні моделі бувають: (а) графічні моделі; анімаційні моделі; табличні моделі та наочні. Серед основних структурних одиниць графічних моделей виділяють: малюнки, графіки, різні анімації та таблиці, які побудовані безпосередньо за допомоги комп’ютера. Прикладами графічних моделей є: комп’ютерна модель земної поверхні; цифрова карто зоряного неба.

5. Модель обчислювальна – передбачає використання різних методів та способів обчислювання, та проведення на їх основі відповідного обчислювального експерименту під дією різних зовнішніх впливів. Обчислювальні моделі використовуються для різних фізичних, хімічних, біологічних та соціальних явищ.

6. Моделі знань – комп’ютерна модель, що будується на основі використання програм ШІ. Приклад моделей: комп’ютерна програма, яка вчить грати в шахи; комп’ютерна програма яка вчить правилам дорожнього руху. Такі комп’ютерні програми, повинні оперувати даними про «властивості» різних можливих конфігурацій та обов’язково опиратися на знання правил. Приклад моделей знань: логічні моделі знань; експертні системи; логічні ігри; семантичні мережі.

Основні етапи створення комп’ютерної моделі в екологічній хімії [2]:

- Формування мети та завдань експерименту;
- Обрання відповідного програмного забезпечення;
- Моделювання інформаційної моделі;
- Проведення комп’ютерного експерименту.

Комп’ютерна модель повинна відповідати наступним вимогам [5]:

- Відображати ті особливості оригіналу явища, об’єкту чи предмету, які є найвагомішими;
- повинна відповідати реальному об’єкту, в іншому випадку досліджуваний процес чи об’єкт будуть спотворенні.

Процес комп'ютерного моделювання складається із 4 основних етапів: якісний аналіз процесу; його математична реалізація (здійснення математичних розрахунків); перевірка створеної моделі та висновок, щодо її ефективності. Загальна схема створення комп'ютерної моделі для різних хіміко-екологічних процесів чи систем див. рис. 2.1.



Рис. 2.1. Схема моделювання хіміко-екологічних процесів

Джерело: 5

Перший етап моделювання. Основа будь-якого моделювання, що відповідає за формування завдань та вибору виду моделей. Вибір моделі ґрунтується на основі способу побудови та характеристик самого об'єкта. Моделі бувають двох видів:

- Матеріальні моделі – ті моделі, які максимально схожі із оригіналом, тобто вони можуть зберігати геометричну подібність

(тренажери, штучні замінники реальних об’єктів), можуть бути прообразами оригіналу, тобто натуральними моделями, також появляють значну подібність до фізичних процесів з оригіналом (наприклад: гідрологічна модель – течія води). Математичні моделі ідеально підходять до моделювання складних хіміко-екологічних процесів чи систем.

- Абстрактні моделі поділяються на три види: схематичні, вербальні та математичні. Схематичні моделі представлені у вигляді графіків, схем. Найбільше даний вид моделювання підходить для вивчення динаміки впливу екологічних факторів на довкілля та вивченні біохімічних процесів. Математичні моделі відображають структуру, динаміку та особливості функціонування хіміко-технологічних процесів, що дозволяє побудувати його математичну модель. Вербальні моделі використовуються для традиційного природничо-наукового опису хімічного процесу чи системи [28, с. 101].

Другий етап моделювання. Етап математичної реалізації створеної комп’ютерної моделі. Вона може бути аналітичною або комп’ютерною (імітаційною) моделлю. Аналітична модель будується на основі математичного апарату, тоді коли імітаційна модель здатна практично відображати всі взаємозв’язки в екосистемі. Поряд з цим вони не просто їх відображають, а здатні з великої точність в подальшому їх імітувати.

Третій етап моделювання. Передбачає верифікацію комп’ютерної моделі. Саме на цьому етапі дослідник впевнюється чи відповідає створена модель другій вимогі (адекватність створеної моделі). Для цього проводиться емпірична перевірка створеної моделі – зрівнюються отриманні результати із оригіналом. В разі відсутності емпіричних даних потрібно провести теоретичну верифікацію та визначити створеної моделі.

Четвертий етап модифікації. Етап комп'ютерного експериментування та екологічної інтерпретації створеної моделі. На даному етапі відбувається практична перевірка створеної комп'ютерної моделі.

Основна мета моделювання – ухвалення рішень, які повинні розроблені на основі всебічного аналізу результатів моделювання [31]:

- якщо, отримані результати відповідають поставленим цілям, то комп'ютерна модель вважається успішною;
- якщо отримані результати не відповідають поставленим цілям, то комп'ютерна модель вважається помилковою та невірною. Тоді потрібно корегувати спроектовану модель тобто повертатися до одного з попередніх етапів.

В основі комп'ютерного моделювання екологічних проектів обов'язково повинні бути математичні розрахунки матеріальних та теплових балансів, без яких не може обійтися жодне проектування в екологічній хімії. Тобто створення комп'ютерної моделі будь-якого хіміко-екологічного процесу зводиться до рішення системи нелінійних рівнянь, що представляють з себе досить трудомістку ітераційну процедуру. Комп'ютерне моделювання дозволяє швидко та логічно порахувати велику кількість варіантів розвитку складної еколого-хімічної системи [35, с. 295].

2.2. Особливості моделювання процесів виробництва твердого біопалива в екологічній хімії

Біопаливо – це вид пального, який отримують із біологічних матеріалів, таких як рослинна або тваринна сировина. Тверде біопаливо є одним із видів біомаси, що включають в себе різні типи матеріалів, що можуть бути перероблені або спалені для отримання тепла, електрики чи пального. Основною сировиною для виробництва твердого біопалива є [9, с. 58]:

- деревина та деревні відходи (дрова, обрізки з дерев, щепа);

- сільськогосподарські відходи (солома, лушпиння при обробці зернистих культур, кукурудзяні стебла);
- гній і тваринні відходи (торф та гній);
- садові відходи (листя, трав'яні залишки);
- відходи харчових виробництв (харчові відходи з переробних підприємств).

Тверде біопаливо має ряд переваг, найголовніші з яких: (а) відновлюваність – сировина для твердого біопалива є відновлювальним ресурсом, тому що утворення відходів має систематичний характер; (б) зменшення викидів – зменшення концентрації вуглекислого газу в повітрі; (в) використання відходів у якості додаткового джерела енергії дозволяє значно зменшити кількість відходів, що потрапляють на смітники; (г) енергетична безпека – може забезпечувати сталість енергозабезпечення населення, особливо актуально в реаліях сьогодення.

Виробництво твердого біопалива є важливою частиною стратегії сталого розвитку альтернативних джерел енергії, що дозволить значно зменшити залежність від викопних палив та зменшить негативний вплив на навколишнє середовища. Тверде біопаливо утворюється внаслідок переробки органічних матеріалів, сам процес перетворення складається з великої кількості фізико-хімічних процесів [16, с. 408].

Виробництво твердого біопалива є складним, багатоступеневим та технологічно об'ємним процесом, який включає в себе наступні стадії, як: подрібнення, сушіння, пресування, термічну обробку, етап додаткової обробки сировини, складання та пакування. Детально охарактеризуємо основні стадії утворення твердого біопалива з хімічної точки зору за стандартною технологічною схемою виробництва (див. табл. 2.1.) [23, 29, 30]

Таблиця 2.1.

Основні етапи утворення твердого біопалива

Етапи	Загальна характеристика	Хімізм процесу
Сушіння	Видалення вологи, що дозволяє зменшити вагу та обсяг сировини, покращує її енергетичну щільність.	Реакція дегідратація (відщеплення молекул води)
Пресування	Пресування сировини у компактні форми (брикети, пелети), що покращує щільність пального та зменшує його об'єм.	Утворення нових структур без істотних хімічних змін.
Термічна обробка	Піроліз проводять при температурі 400-700 C^0, внаслідок чого розкладається целюлоза та лігнін. Газифікую проводять при високій температурі без доступу кисню в результаті чого отримують синтез-газ CO та H_2, які використовують для генерації енергії.	Піроліз Газифікація (зміна хімічної структури)
Додаткові обробки	Додавання агломераційних агентів з метою поліпшення якості отриманого твердого біопалива	В залежності від вмісту добавок.

Тверде біопаливо переважно складається з таких компонентів, як: целюлоза ($C_6H_{10}O_5$); лігнін ($C_6H_{10}O_2$); геміцелюлоза; мінерали (кальцій, магній, калій). Хімічні реакції, які відбувається під час термічної обробки сировини (піроліз та газифікація) є ключовими у формуванні високоякісного твердого біопалива.

Піроліз – реакція відбувається в умовах присутності кисню за температури 300-700 $C^{0.}$ Основні хімічні реакції :

- розклад целюлози та лігніну з утворенням різних органічних сполук, газів (водень, вуглекислий газ) та рідних продуктів (наприклад древесний дьоготь) :

$C_6H_{10}O_5 \rightarrow C_5H_6O_5 + CO_2 + H_2O$

$C_6H_6O_2 \rightarrow C_6H_6 + CO_2 + H_2O$

- утворення піролізного газу: $C_6H_{10}O_5 \rightarrow CO + CH_4 + H_2 + CO_2$

Газифікація – реакція часткового згоряння біомаси з обмеженим доступом кисню при високих температурах (1000 C^0). Основні хімічні реакції, які протікають під час газифікації.

Поряд з цим варто відмітити, що даний процес є енерго- та матеріалозатратним, тому при розробці реальної технологічної схеми виробництва твердого біопалива людина стикається з цілим рядом труднощів серед яких [23, с. 80]:

- збір даних та їх аналіз (передбачення та врахування всіх фізико-хімічних характеристик біомаси – вологість, щільність, вміст лігніну та целюлози; обрання та врахування технологічних параметрів біомаси – розрахунки механічних, термічних та хімічних процесів; розрахування енергетичних витрат під час кожного етапу виробництва твердого біопалива).
- дороговартісність (великі затрати на лабораторні та промислові експерименти) та кратність використання ресурсів для тестування запропонованої схеми виготовлення твердого біопалива;
- відсутність деталізації та можливості прогнозувати можливі варіанти отримання твердого біопалива;
- відсутність можливості оптимально та швидко вивчати вплив різних параметрів (тиск, температура, наявність чи відсутність кисню, концентрації) на процес синтезу біопалива та знаходити в короткі терміни оптимальні умови для досягнення бажаних результатів [36, с. 50].

Вирішення перерахованих проблем можливе, але за умови використання комп’ютерного моделювання, що дозволить оптимізувати процеси, оцінити їх ефективність та зменшить витрати на стадії проектування та безпосередньої експлуатації запропонованої схеми виробництва. Комп’ютерна модель виробництва твердого біопалива забезпечить достатню точність отриманих результатів, поряд з цим дозволить зберегти складні взаємозв’язки між складними внутрішніми операціями та експлуатаційними параметрами досліджуваного процесу.

Комп’ютерна модель із виробництва твердого біопалива дозволить значно зменшити енерговитрати та покращить тепло-хімічні характеристики твердого біопалива, що зробить такий процес ресурсозберігаючим, тобто таким, який забезпечить економію використання первинної сировини та сприятиме зростанню якісної екологічно-чистої продукції при умові використання тієї кількості сировини, основних та допоміжних матеріалів [23, с. 92].

Проаналізувавши науково-методичну літературу, нижче представимо деякі приклади комп’ютерного моделювання процесу виробництва твердого біопалива з рослинних відходів:

1. Ресурсозберігаючий процес виробництва двокомпонентного твердого біопалива на основі використання качанів кукурудзи (сіна) шляхом використання імітаційно-математичного моделювання (рис. 2.1.) [41]

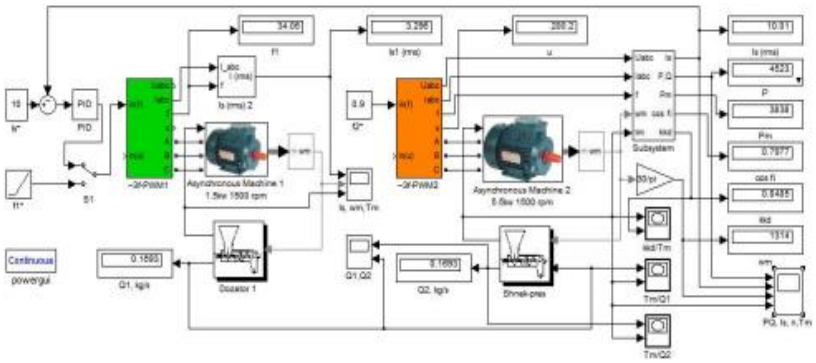


Рис. 2.1. Імітаційна модель технологічного процесу виробництва твердого біопалива *(робоче вікно MATLAB)*

В реальних умовах продуктивність даного технологічного процесу забезпечується засобами регульованого електроприводу апаратів технологічної лінії виробництва, що спричиняє невиконання умов балансу продуктивності технологічної лінії виробництва та виникненню нестабільних процесів в асинхронних двигунах, що призводить до отримання продукції досить низької якості із відносною вологістю приблизно 16 % [41, с. 72].

Труднощі натурального експерименту: значні витрати струму, що направленні на стабілізацію процесів в асиметричних двигунах; отримання твердого біопалива з надлишковою вологістю, що безпосередньо впливає на якість отриманої продукції.

Переваги комп'ютерного моделювання: запропонована технологічна схема виробництва, за якою можливо розширити діапазон вологи базової сировини до 35 %, що позитивно впливає на виробництва якісного біопалива.

2. «Ресурсозберігаючий процес переробки сировини та утилізації деревних відходів в тверде біопаливо гнучкими технологіями» [11] за допомоги створення імітаційної моделі, що враховує точний час, потоку сировини, етапи обробки сировини, обсяг та склад сировини та обсяги утворення готової продукції (рис. 2.2.). [11, с. 10]

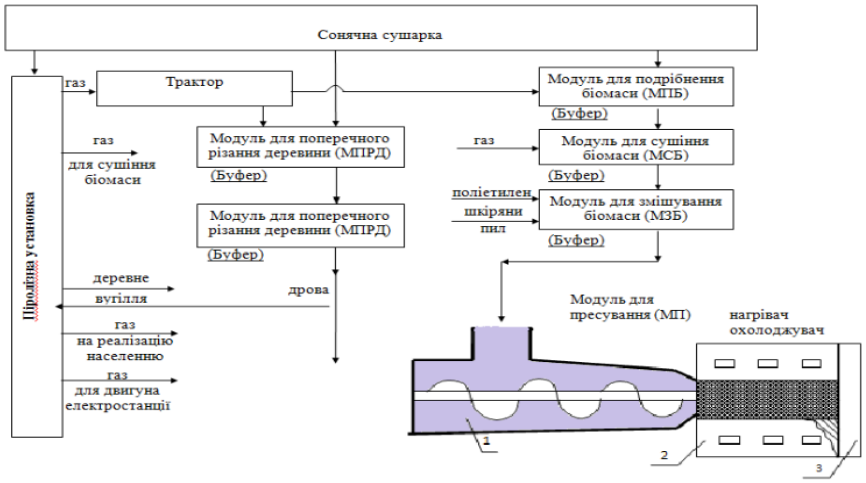


Рис. 2.2. Імітаційна модель виробництва твердого біопалива з деревних відходів

Представлена імітаційна модель забезпечує гнучкість лісообробного процесу та достатню точність отриманих результатів, відображає складні взаємозв'язки між виконуваними операціями, що впливає на продуктивність виробництва: коефіцієнти завантаження обладнання; продуктивність верстатів; обсяги виходу готової продукції та відходів.

Труднощі реального експерименту: лінія виробництва є складною та розгалуженою, що не дозволяє враховувати показники стахостичності надходження сировини та стахостичність її обробки.

Переваги комп'ютерного експерименту: врахування розмірно-якісних параметрів сировини, на основі яких створюються гнучкі лісообробні процеси, які на практиці досить легко переобладнуються з урахуванням виду підібраної сировини.

Отже, дивлячись на представлені комп'ютерні моделі виробництва твердого біопалива вітчизняними дослідниками, запропонуємо загальний алгоритм розробки комп'ютерної моделі для виробництва твердого біопалива [38, с. 178]:

1. Встановити мету та ключові цілі моделювання (оптимізація процесу; зменшення витрат та енергії на його виробництво; оцінка впливу різних факторів на продуктивність отримання біопалива; розрахунок економічної вигоди).

2. Збір та аналіз даних (властивості сировини, процеси переробки, енергетичні затрати процесу).

3. Моделювання основних хімічних, термічних та механічних процесів .

4. Вибір та налаштування програмного забезпечення (обирати серед наступних програмних продуктів: CFD (при моделювання термічних процесів); DEM (при моделювання механічних процесів – подрібнення, сушка), MATLAB/Simulink (для розробки та аналізу складних технологічних процесів); ChemCAD (для моделювання складних технологічних процесів / економічний аналіз процесу виробництва).

5. Побудова моделі (створення геометричної моделі на основі всіх заданих параметрів, запуск симуляції з метою отримання даних про ефективність та продуктивність).

6. Аналіз результатів (оцінка фізичних властивостей готового біопалива; оцінка енергетичних витрат).

7. Оптимізація запропонованої схеми виробництва твердого біопалива.

8. Моніторинг перебігу реальних процесів та перегляд результатів моделювання з метою подальшого вдосконалення процесу.

Тому з метою підвищення енергоефективності процесу виробництва твердого біопалива варто обов’язково використовувати програми комп’ютерного моделювання, які дозволять краще розрахувати показники для оптимальної роботи апаратів технологічної лінії виробництва, а поряд з цим забезпечать високі показники якості отриманої продукції.

РОЗДІЛ 3

АНАЛІЗ МЕТОДІВ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ РЕСУРСОЗБЕРІГАЮЧИХ ПРОЦЕСІВ В ЕКОЛОГІЧНІЙ ХІМІЇ

3.1. Аналіз основних програмних засобів та платформ для комп'ютерного моделювання ресурсозберігаючих процесів в екологічній хімії

Для розробки комп'ютерних моделей застосовують наступні підходи: програмування комп'ютерної моделі мовами програмування, а саме: Lisp, PROLOG, DeLPHI та мови моделювання Smalltalk, MIMISE, Tcl та інші; користуються спеціалізованими стандартними комп'ютерними оболонками для побудови комп'ютерних моделей та реалізації імітаційного моделювання (SDML, CORMAS, SDML); користуються засобами імітаційного моделювання, які включенні до стандартних комп'ютерних систем, таких як: MATHEMATICA, MATLAB [4, с. 649].

Результати комп'ютерного моделювання екосистем та комп'ютерна оцінка дозволяє вивчити вплив на навколишнє середовища техногенних систем, поряд з цим дозволяє розробити заходи для вирішення завдань управління охороною довкілля. Комп'ютерна модель повинна неодноразово тестуватися та удосконалюватися до тих пір поки не буде достатньо накопичено точних глибоких знань про реальну екосистему. Лише після перевірки адекватності розробленої комп'ютерної моделі вона може бути застосована для аналізу подібних систем, які безпосередньо не були предметом вивчення при створенні даної комп'ютерної моделі [44, с. 199].

Зазначені універсальні моделюючі програми мають великі бібліотеки технологічних модулів, та досить великі банки фізико-хімічних властивостей, зручні інтерфейси для користування. Тому їх

активно використовують при проектуванні нових хімічко-екологічних систем та при реконструкції вже існуючих [40].

Програмна реалізація комп'ютерних моделей можлива за допомоги алгоритмічних мов загального призначення; спеціалізованих мов моделювання; засобів автоматизації прогнозування систем моделювання; пакетів прикладних програм для моделювання та інтелектуальних систем моделювання (табл.3.1.) [38, 44, 45]

Таблиця 3.1.

Сучасні рішення у побудові комп'ютерних моделей

Ручний спосіб опису комп'ютерної моделі	Універсальні мови програмування високого рівня: C++, Visual Basic, DELPHI, GPSS. Спеціальні мови моделювання (STELLA).
Автоматичний спосіб опису комп'ютерної моделі	Передбачає використання спеціального графічного конструктора. Популярними системи для комп'ютерного (переважно для імітаційного моделювання) є: - MathWorks - AnyLogic - NS-2 - Simplex3 - SimuI8
Сучасні системи моделювання	
STATGRAPHICS URL: https://www.statgraphics.com/ [38] SPSS URL: https://www.udemy.com/ [44] BMDP URL:https://foldoc.org/BioMeDical+Package [45] SYSTAT URL:https://systatsoftware.com/ [44] Chemcad URL: https://www.chemstations.com/CHEMCAD/ [38] Mathcad URL: https://mathcad.com.ua/ [38]	

Здійснено аналіз найбільш популярних засобів та платформ, що використовуються для моделювання складних хіміко-екологічних процесів, які включають в себе розгляд наступних змістовних компонентів: функціональні можливості, зручність використання,

точність моделювання. можливості інтеграції з іншими програмними платформами. Аналіз представлений в таблиці за трьома основними блоками: Блок А – Засоби моделювання хімічних процесів; Блок Б – Засоби моделювання екологічних процесів; Блок В – Спеціалізовані інструменти моделювання складних еколого-хімічних процесів [30, 32].

Таблиця 3.2.

Аналіз програмних засобів та платформ для здійснення моделювання процесів в екологічній хімії

Блок А – Комп'ютерні засоби для моделювання хімічних процесів			
Назва	Можливості	Переваги	Недоліки
COMSOL Multiphysics	Моделювання складних мультифізичних, хімічних, транспортних процесів	Гнучкість та інтеграція з іншими програмними продуктами	Висока вартість. Складність розуміння інтерфейсу.
DWSIM	Застосовують для термодинамічних та кінетичних розрахунків	Безкоштовний. Інтеграція з іншими програмними засобами.	Складність інтерфейсу
Aspen Plus	Застосовують для процесного моделювання та оптимізації хімічних процесів	Широкій набір інструментів. Підтримка різних типів хімічних процесів.	Складність інтерфейсу. Висока вартість
HYSYS	Застосовують для стимуляції та оптимізації хімічних процесів в хімічній промисловості.	Простий інтерфейс. Інтеграція з іншими програмними засобами.	Дорога вартість
Блок Б Програмні засоби для екологічного моделювання			
GAMS	Моделювання та вирішення складних математичних задач.	Великий набір інструментів	Складний інтерфейс

Продовження таблиці 3.2.

	Аналіз екологічних та економічних моделей.	Гнучкість у створенні моделей.	
MATLAB / Simulink	Платформа для складних технічних обчислень, моделювань та симуляцій систем.	Великий набір інструментів	Висока вартість
ArcGIS	Платформа для просторового аналізу та моделювання	Великий набір інструментів. Інтеграція з іншими програмними засобами.	Висока вартість. Складність інтерфейсу.
Блок В – Спеціальні програмні для моделювання ресурсозберігаючих процесів			
EcoWin	Платформа для моделювання ресурсозберігаючих процесів	Орієнтована на екологічні аспекти	Малий арсенал інструментів
OpenLCA	Відкрите програмне забезпечення для оцінки життєвого циклу.	Безкоштовна Підтримка різних баз даних та методологій.	Складність опанування інтерфейсу програми

Здійснивши аналіз, ми дійшли висновку, що найпоширенішими системи для проектування хіміко-екологічних процесів є система Mathcad (побудова математичних моделей), для прогнозування динаміки природних процесів варто використовувати утиліт Matlab-Simulink, проте він є досить складним у технологічному плані та потребує значних затратах часу. Не зважаючи на великі можливості пакету він не може бути використаний для моделювання складних хіміко-екологічних систем.

Альтернативним підходом в комп’ютерному моделюванні є використання готових агрегатів та типових фізико-хімічних процесів. Найпопулярнішою та досить зручною вважається програма Chemcad. Дана програма є ефективним інструментом у комп’ютерному

моделюванні хіміко-екологічних процесів при розробці, моделюванні та оптимізації створеної моделі. Дана система дозволяє розраховувати технологічні схеми з потоками органічних та неорганічних речовин, а також енергетичних потоків. Програма Chemcad вирішує проблему автоматичного управління процесами, а також підвищує ефективність розробленої моделі, фіксує оптимальні режимні та конструкційні параметри природнього об'єкта.

На основі аналізу програмних пакетів із моделювання хіміко-екологічних процесів встановлено, що загальні пакети моделювання не підходять для опису хіміко-технологічних процесів тому потрібно використовувати спеціальні пакети моделювання. Використання програмних пакетів комплексного моделювання дозволить оперувати різними стратегіями, щодо перебігу хіміко-екологічних процесів, вивчати їх вплив на довкілля, шукати шляхи для оптимізації даної хіміко-екологічної системи. Сучасні програмні проекти дозволяють краще зрозуміти природу хіміко-екологічних процесів [42, с. 10].

Вибір програмного забезпечення залежить від специфічних потреб проекту, бюджету та рівня знань дослідника. Також важливо враховувати такі фактори як: точність моделювання системи, можливість її інтеграції з іншими програми засобами, зручність користування інтерфейсом програми та доступність підтримки [25, с. 64].

3.2. Імітаційне моделювання як найефективніший метод моделювання складних ресурсозберігаючих процесів в екологічній хімії

Імітаційне моделювання є універсальним методом дослідження та оцінки екологічних систем, основні параметри яких залежать від випадкових факторів. Імітаційні моделі є досить хорошим засобом прогнозування перебігу процесів у екологічній системі. До імітаційного моделювання вдаються, у випадках коли [11, с. 7]:

- Досить дорого здійснювати експеримент у лабораторії;
- Не можливо побудувати аналітичну модель, через те що система містить причинно-наслідкові зв’язки;
- Неможливо дослідити поведінку системи упродовж певного періоду часу.

Основна задача імітаційного моделювання полягає у декомпозиції складних систем на більш прості блоки, які піддаються вхідним впливам на систему у вигляді послідовності числових значень, що надходять з певним інтервалом та перетворюються відповідно до математичних залежностей, що здатні описувати послідовність та зміст перетворення сигналів у реальній системі. При відборі засобів імітаційного моделювання варто обов’язково враховувати всі можливості досліджуваного процесу (системи), а саме: основні параметри; статистичні можливості; звіти із графіками та вихідними даними; відповідне програмне забезпечення [7, с. 20].

Імітаційна система здатна реалізувати алгоритми рішення поставлених завдань та надає користувачеві сервісні можливості по керуванню досліджуваного процесу. З врахуванням етапності системного аналізу та технологічних завдань, варто виділити набір засобів імітаційної системи, що відповідають за автоматизацію ряду функцій. Імітаційний експеримент включає в себе [15, с. 22]:

1. Створення імітаційної моделі (за допомоги компіляторів з алгоритмічною мовою високого рівня, або конверторних моделей, які перетворюють модель одного виду на іншу);
2. Перевірка адекватності створеної імітаційної моделі (за допомоги програм обчислення характеристик складності моделі або за допомоги програм обчислення ресурсних показників методом рішення поставленого завдання).

3. Корекція створеної імітаційної моделі виконують за допомоги програм еквівалентних перетворень алгоритмічних та математичних моделей заданого класу.

4. Створення алгоритму рішення поставлених завдань виконують за допомоги інформаційних систем та конструктивним алгоритмам рішення завдань.

5. Складання схеми рішення завдань виконують за допомоги вбудованих редакторів обчислювальних схем.

В основі агрегатного принципу лежить статистичне моделювання, що містить наступні етапи [23, с. 88]:

1. Моделювання випадкових впливів на досліджувану систему у вигляді числових послідовностей, що характеризуються заданою кореляцією та законом розподілення ймовірностей;

2. Моделювання перетворених сигналів у досліджуваному об’єкті, процесі чи системі;

3. Статистична обробка отриманих результатів моделювання досліджуваного об’єкта.

Генерування вхідних впливів на досліджуваний об’єкт, процес чи систему є доволі складним процесом. Імітаційне моделювання дозволяє значно спростити цей процес. Саме методика генерування вхідних впливів базується на принципі нормальної числової послідовності із заданою кореляційною функцією, що здатні генерувати стандартні програмні генератори. Методика генерування складається з наступних етапів [23, с. 90]:

Підготовчий етап дослідження:

1. Знаходження спектральної щільності заданої кореляційної функції (формула 1)

$$G_{xx\,(jw)=\frac{1}{2\pi}}\int_{0}^{\infty} R_{xx}\,(\tau)e^{-i\omega t}d\tau$$

2. Знаходження амплітудно-частотної характеристики потрібного фільтру (формула 2):

$$A(\omega) = |W(j\omega)| = \frac{|G_{xx}(j\omega)|}{D_x/2\pi}$$

3. Знаходження відповідного дискретного перетворення.

Моделювання [24]:

1. Генерування початкової послідовності даних із заданою дисперсією.

2. Перетворення даних (на основі формули дискретної фільтрації) на вихідну послідовність даних для імітаційної моделі.

3. Створення імітаційної моделі.

4. Обробка отриманих результатів імітаційного моделювання.

Обробка результатів імітаційного моделювання здійснюється за тими самими методиками, що і обробка результатів реальних експериментів. Тобто, якщо моделями вхідних сигналів є випадкові числові послідовності, тоді для обробки результатів варто використовувати дисперсійні, кореляційні та регресивні методи аналізу. Особливе місце в імітаційному моделюванні займають похибки, які виникають в залежності від вигляду статистичних характеристик вихідних сигналів імітаційної моделі. Формули для розрахунку похибки створення імітаційної моделі наведенні – представлені у додатку Б.

З метою спрощення розрахунку похибки імітаційного моделювання та використання форми у загальному вигляді варто відмітити, що імітаційний експеримент краще проводити у два етапи: (а) спочатку необхідно згенерувати мінімальну кількість даних та попередньо визначити тип розподілу ймовірностей результатів; (б) уточнити розрахунок необхідної кількості даних та провести додаткове моделювання досліджуваного об’єкту [41, с. 72].

Детально проаналізуємо програмні засоби імітаційного моделювання, які використовують при моделювання ресурсозберігаючих процесів (табл. 3.3.) [6, 23, 41]

Таблиця 3.3.

Програмні засоби імітаційного моделювання ресурсозберігаючих процесів

Програма	Призначення	Область використання
Any Logic	Імітаційне моделювання динамічних систем	Екологічна хімія, логістика, транспорт та системах охорони здоров'я.
MATLAB / Simulink	Для математичного моделювання, аналізу динамічних систем. Simulink – інструмент для моделювання систем із графічним середовищем	Екологічна хімія, фізика, механіка.
Arena	Моделювання хімічних виробничих процесів	Механіка, хімія, мережа постачання
FlexSim	Для тривимірного моделювання систем та процесів у реальному часі.	Хімія, фізика, механіка, моделювання логічних ланцюгів та транспорту.
OpenModelica	Для моделювання складних фізичних, екологічних та хімічних систем	Хімія, фізика, механіка, моделювання логічних ланцюгів та транспорту.
Dymola	Для моделювання банатофізичних та багатохімічних та механічних систем із використанням мови Modelica.	Екологічна хімія, фізика, механіка.

Кожна із представлених програмних засобів має свої унікальні особливості та сфери використання, що дозволяє досліднику обрати оптимальний інструмент залежно від завдань та вимог до моделювання. Імітаційне моделювання дозволить відтворити властивості реальних об'єктів за допомоги віртуальних об'єктів. Всі розрахунки виконуються комп'ютерною програмою та відображаються в реальному часі

функціонування досліджуваного об’єкту чи системи у певному часовому масштабі.

На основі аналізу системи програмних засобів щодо імітаційного моделювання ресурсозберігаючих процесів в екологічній хімії виділені основні його переваги:

- Оптимізація використання енергетичних ресурсів;
- Мінімізація матеріальних витрат (використання вторинної сировини);
- Оптимізація процесів переробки відходів, що дозволяє зменшити забруднення на навколишнє середовища;
- Підвищення ефективності виробництва (моделювання ефективних виробничих процесів);
- Візуалізація та демонстрація ресурсозберігаючих процесів;
- Можливість швидкого тестування нових рішень.

Головною перевагою імітаційного моделювання є процес спрощення отримання результатів дослідження через використання агрегатного принципу.

Отже, створена імітаційна модель будь-якого виробничого процесу дозволить якомога повніше відобразити взаємозв’язки між досліджуваними процесами, які дозволяють у повному обсязі відобразити реальні ситуації, критерії та встановити обмеження. Проте використання імітаційного моделювання в екологічній хімії не досить поширене, тому що має певні складності у відповідності математичного апарату та потребує здійснювати обробку значних масивів інформації.

3.3. Порівняльний аналіз комп’ютерних програмних пакетів з моделювання хіміко-екологічних систем

Комп’ютерне моделювання на сьогодні є одним із найпотужніших інструментів дослідження складних хімічних процесів (об’єктів). На

ринку програмного забезпечення нараховують близько 150 програмних засобів саме комп'ютерного моделювання, десь приблизно 50 програмних застосунків відносять до імітаційного моделювання.

Найпростіші програмні засоби моделювання «С», «C^{++}», «Java».

Класичні програми для здійснення комп'ютерного моделювання: «GPSSW», «SSF», «AnyLogic», «HYSYS», «ChemCAD»; «AspenPlus».

Програми для імітаційного моделювання: «MatLab (Simulink)», «SIMUL8»,«MathCad».

Більш детально проаналізуємо та здійснимо порівняльну характеристику найпоширеніших програмних засобів комп'ютерного (імітаційного) моделювання (див. табл. 3.4. – табл. 3.5.) [4, 5, 40, 41, 45]

Таблиця 3.4.

Порівняльний аналіз програмних засобів комп'ютерного моделювання складних процесів та систем

Характеристики/ Програмні продукти	GPSSW	Arena	EXTEND	POWERSI M
Область використання	Моделювання систем масового обслуговування, виробництва та транспорту	Моделювання виробничих хіміко-технологічних систем	Моделювання економічних та екологічних систем	Моделювання складних ситуаційних процесів
Можливість використання графічних компонентів	Ні не містить	Має зручний графічний інтерфейс	Містить палітру стандартних шаблонів	Містить спеціалізований графічний редактор
Підтримка анімацій	Так	Так	Так	Так
Можливість інтеграції з CASE-засобами	Ні	Так	Ні	Ні

Продовження таблиці 3.4.

Переваги використання	Ефективна при моделюванні великої кількості процесів	Створення двовимірної та тривимірної анімації; Число потоків випадкових чисел не обмежений;	Швидкість моделювання складних систем; Зручний інтерфейс програмного засобу.	Інноваційний інтерфейс програмного продукту; Створення точних та ефективних звітів щодо розробленої моделі; Гнучкий процес виявлення та усунення похибок; Висока швидкість моделювання.
Недоліки використання	Моделює лише один пристрій; Відсутність графічних даних.	Складність використання програмного забезпечення	Відсутність графічних даних.	Відсутність графічних даних; Складність використання програмного засобу.

Таблиця 3.5.

Порівняльний аналіз програмних засобів комп’ютерного моделювання складних процесів та систем

Характеристики/ Програмні продукти	MatLab Simulink	Aspen Plus	ChemCAD	HYSYS

Продовження таблиці 3.5.

Область використання	Можливість моделювання складних хіміко-технологічних процесів	Моделювання складних виробничих процесів	Моделювання хіміко-екологічних процесів та систем	Моделювання складних технологічних ліній виробництва
Можливість використання графічних компонентів з метою візуалізації моделі	Містить стандартні графічні блоки та моделі	Містить набір графічних шаблонів	Містить набір графічних шаблонів	Має розвинений графічний інтерфейс
Підтримка анімацій	Так	Так	Так	Так
Можливість інтеграції з CASE-засобами	Так	Ні	Так	Так
Переваги використання	Висока швидкість моделювання.	Точність моделювання технологічних апаратів	Точність моделювання технологічних апаратів	Зручний інтерфейс програми;
Недоліки використання	_____	Складність роботи у програмному застосунку	Число потоків випадкових чисел обмежено;	Складний інтерфейс програмного засобу

Перспективи використання перерахованих вище програмних засобів є досить радужними, особливо тому, що всі вони представлені на ринку як відкриті системи, що дозволяє науковцям включати власні програмні модулі користувача. Проте не дивлячись на всі позитивні сторони використання комп’ютерного моделювання, виникає чимало проблем, з якими потрібно боротися, а саме [43, с. 44]:

- залишається важливість проведення розрахунків з використанням універсальних обчислювальних методів;
- залишається потреба у використанні більш точних моделей в окремих апаратах;
- реальні процеси протікають не системно та порушують стабільність розробленої моделі. Саме такі процеси досить важко врахувати при створенні комп'ютерної моделі об'єкта, процесу чи системи;
- користування тим чи іншим програмним продуктом потребує високої кваліфікації користувачів, що не завжди вдається забезпечити;
- користувачі не використовують у повній мірі всі можливості, що представленні у вибраному програмному засобу. Можливості програм використовуються зазвичай фрагментарно;
- якісні програмні засоби зазвичай дорогі, тому їх використання є досить обмеженим.

Вдало підібраний програмний засіб дозволить досить швидко та ефективно спрогнозувати можливі зміни у досліджуваній системі з урахуваннях їх екологічної безпечності на навколишнє середовища. Поряд з цим створення комп'ютерної моделі будь-якої хіміко-екологічної системи наддасть можливість швидко прогнозувати потенційні наслідки використання різних стратегій щодо впливу на екосистему; окреслить потенційні можливість подальшого використовувати природних ресурсів та дозволить глибоко проникнути у сутність явища та зрозуміти їхню справжню природу [20, с. 48].

ВИСНОВКИ

1. Здійснено аналіз загальних принципів моделювання хімічних процесів в екологічній хімії. Встановлено, що комп'ютерне моделювання при проектуванні складних хіміко-екологічних процесів дозволяє прискорити процес створення та вивчення моделей об'єктів, а також вивчати процеси та об'єкти, які не можливо спостерігати у реальних умовах. Досліджено особливості використання імітаційного моделювання та виявлено, що результати такого моделювання здатні значно покращувати якість технологічних рішень та дозволяють більш точніше прогнозувати їх наслідки на довкілля.

2. Розглянуто проблеми та перспективи впровадження ресурсозберігаючих та екологічних технологій в Україні. Серед основних проблем виділено: застаріла техніка та переважання традиційних енергоємних способів господарювання, що значно гальмують інновації. Процес екологізації, який запущений на вітчизняних виробництва, по-перше лежить в основі концепції сталого розвитку, по-друге сприятиме впровадженню інноваційних ресурсозберігаючих технологій, які відповідатимуть за збереження якості довкілля та зроблять процес використання природних ресурсів більш ефективним.

3. Ознайомилися з сучасними підходами комп'ютерного моделювання на прикладі ресурсозберігаючого процесу виробництва твердого біопалива. Встановлено, що комп'ютерне моделювання реалізується за допомоги алгоритмічних мов загального призначення; спеціалізованих мов моделювання; засобів автоматизації прогнозування систем моделювання; пакетів прикладних програм для моделювання та інтелектуальних систем моделювання. Серед найпопулярніших програмних засобів виділено: Aspen Plus, Hysys, Chemcad, Matlab-Simulink.

4. Досліджено особливості комп’ютерного моделювання ресурсозберігаючого процесу виробництва твердого біопалива. Встановлено, що процес виробництва твердого біопалива є складним, багатостадійним та технологічно об’ємним процесом, який в лабораторних умовах виконувати важко. Саме тому з метою підвищення енергоефективності та ресурсозбережуваності даного процесу варто користуватися програмами комп’ютерного моделювання, які дозволяють краще розрахувати показники для оптимальної роботи апаратів технологічної лінії виробництва, а також забезпечать високі показники якості отриманої продукції.

5. Здійснено аналіз основних програмних засобів та платформ комп’ютерного моделювання. Встановлено, що при відборі програмних засобів імітаційного моделювання варто обов’язково враховувати всі можливості досліджуваного процесу на основі якого обирати відповідне програмне забезпечення. Приведено їх порівняльний аналіз та виявлено, що стандартні пакети моделювання не підходять для опису хіміко-технологічних процесів, саме тому потрібно використовувати більш інноваційні пакети моделювання, які дозволяють у розгорнутому часі показати повноцінне функціонування досліджуваної системи із урахуванням всіх можливих її взаємодії із зовнішніми чинниками навколишнього середовища.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Communication From the Commission to the European Parliament, the Council, the European Economic and Social Committee and the Committee of the Regions. *Connectivity for a Competitive Digital Single Market – Towards a European Gigabit Society.* URL: https://ec.europa.eu/digital-single-market/en/news/communication-connectivity-competitivedigital-single-market-towards-european-gigabitsociety (дата зведення 19. 07. 2024).

2. Korotun O. V., Vakaliuk T. A. Oleshko V. A. Development of a web-based system of automatic content retrieval database. *Proceedings of the 2nd Student Workshop on Computer Science & Software Engineering.* 2019. № 2546. pp. 182-197. URL: http://ceur-ws.org/Vol2546/paper13.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

3. Kunnath B., Kriek J. Exploring effective pedagogies using computer simulations to improve Grade 12 learners` understanding of the photoelectric effect. *African Journal of Research in Mathematics, Science and Technology Education.* 2018. № 22. pp. 329-339. URL: https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/18117295.2018.1531500 (дата зведення 19. 07. 2024).

4. Lytvynova S. & Melnyk O. Professional Development of Teachers Using Cloud Services During Non-formal Education. Proceedings of the 13 International Conference on ICT in Education, Research and Industrial Applications. *Integration, Harmonization and Knowledge Transfer.* 2016. № 1614. pp. 648-655. URL: http://ceur-ws.org/Vol-1614/paper_51.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

5. Oscar N. Ventura, Marc E. Segovia Computational Chemistry and Biology Group. Detema, Faculty of Chemistry, Universidad de la Republica. 2024. pp. 1157-1180. URL: https://www.researchgate.net/publication/321251417_Computational_Chemis

try_Tools_for_the_Study_of_Environmental_Chemistry_Problems (дата зведення 19. 07. 2024).

6. The age of Digital Interdependence Report of the UN Secretary-General`s Highlevel Panel on Digital Cooperation. 2019. URL: http://d-russia.ru/wp-content/uploads/HLP-onDigital-Cooperation-Report-ExecutiveSummary-ENG.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

7. Бараннік В. О. Конспект лекцій з дисципліни «Моделювання та прогнозування стану довкілля» (для студентів денної та заочної форм навчання спеціальності 101-Екологія). Харків: ХНУМН ім. О. М. Бекетова, 2017. 46 с. URL: https://eprints.kname.edu.ua/46510/1/2016_%D0%BF%D0%B5%D1%87_37%2825%29Л_Бараннік_лекції%28Екологія%29%20авторск%20вариант.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

8. Бахрушин В. Є. Математичні основи моделювання систем: навчальний посібник для студентів. Запоріжжя: Класичний приватний університет, 2009. 224 с. URL: file:///C:/Users/pc/Downloads/Посібник_7.pdf (дата зведення 18. 07. 2024).

9. Бондар О. І., Шевченко Р. Ю. Моніторинг навколишнього середовища засобами ГІС: навчально-методичні та практичні рекомендації. Київ, ДЕА, 2018. 72 с. ISBN 502.45:528:9 (дата зведення 19. 07. 2024).

10. Вавіленкова А. І. Методи та алгоритми автоматизованого формування логіко-лінгвістичних моделей текстової інформації: автореф. дис. канд. філол. Наук: спец. 05.13.06 – Інформаційні технології. К., 2010. 19 с. URL: https://int-konf.org/ru/2013/suchasnist-nauka-chas-vzaemodiya-ta-vzaemovpliv-18-20-11-2013-r/618-kand-filol-nauk-vyalikova-o-o-teoriya-modelyuvannya-tekstu (дата зведення 19. 07. 2024).

11. Дьяконов О. В., Полянський О. С. Імітаційне моделювання переробки сировини та утилізації деревних відходів в тверде біопаливо гнучкими технологіями. *Енергозбереження та альтернативна*

енергетика. 2015. № 1. С. 6-11. URL: https://repo.btu.kharkov.ua/bitstream/123456789/3053/1/3.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

12. Екологічний ризик: методологія оцінювання та управління: навч. посібник / за заг. ред. Ю. Є. Тищенко; Г. А. Хміль. К.: наук. думка, 2014. 328 с. ISBN 978-966-00-1417-6 (дата зведення 20. 07. 2024).

13. Закон України «Про охорону навколишнього природного середовища від 25. 06. 1991. URL: https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/1264-12 (дата зведення 18. 07. 2024).

14. Закон України «Про стратегічну екологічну оцінку» від 20. 03. 2018. URL: https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/2354-19 4 (дата зведення 19. 07. 2024).

15. Збірник задач з моделювання та прогнозування стану довкілля / уклад. І. В. Хом'як-Житомир: Вид-во ЖДУ ім. І. Франка, 2022. 42 с. URL: http://eprints.zu.edu.ua/34122/1/Моделюваня_збірник%20задач.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

16. Зеркалов Д. В., Ткачук К. Н., Ткачук К. К. Інженерна екологія: проблеми, моніторинг, управління. Монографія. К.: Основа, 2011. 580 с. URL: https://opcb.kpi.ua/wp-content/uploads/201201/ІНЖЕНЕРНА-ЕКОЛОГІЯ.-Монографія.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

17. Іванов В. Г. Екологічна хімія: конспект лекцій. Х.: Вид. ХНЕУ, 2013. 108 с. URL: http://repository.hneu.edu.ua/jspui/bitstream/123456789/11964/1/Екологічна%20хімія%20%20конспект%20лекцій%20для%20студентів%20напряму%20підг.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

18. Компаніченко А. М., Пилипчук Л. Л., Корніловська Н. В., Волкова С. А. Сучасні методи комп'ютерного моделювання ресурсозберігаючих процесів в екологічній хімії. *The 3rd International*

scientific and practical conference "Scientific achievements of contemporary society" (October 10-12, 2024) Cognum Publishing House, London, United Kingdom, 2024. С. 135-143. URL: https://sci-conf.com.ua/wp-content/uploads/2024/10/SCIENTIFIC-ACHIEVEMENTS-OF-CONTEMPORARY-SOCIETY-10-12.10.24.pdf (дата зведення 15.10.2024).

19. Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і сталий розвиток: тези доп. міжнар. наук.-практ. конф. Київ: НТУ «КПІ», 2010. 208 с. URL: https://kxtp.kpi.ua/common/kmxt-2010.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

20. Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і сталий розвиток: тези доп. міжнар. наук.-практ. з міжнародною участю (Черкаси, 12-16 травня 2008 р.). Черкаси: Вид-во «Черкаський ЦНТЕІ». 2008. 284 с. URL: https://er.chdtu.edu.ua/bitstr eam/ChSTU/3232/1/11.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

21. Конспект лекцій з дисципліни «Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології для студентів спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія», напрямку / укл. Іванченко А. В. Кам'янське: ДДТУ, 2016. 48 с. URL: https://www.dstu.dp.ua/Portal/Data/5/7/5-7-kl11.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

22. Конспект лекцій на тему «Особливості комп'ютерного моделювання» для студентів спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія». URL: https://kegt.rshu.edu.ua/images/dustan/mpos.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

23. Костік В. В. Екологічна хімія: конспект лекцій. Одеса: Одеський державний екологічний університет, 2019. 127 с. URL: http://eprints.library.odeku.edu.ua/id/eprint/6207/1/KostikVV_Ekologichna_ximiya_KL_2019_ISBN.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

24. Кравець І. О. Імітаційне моделювання: навчальний посібник до виконання практичних робіт із дисциплін «Моделювання систем» та

«Ситуаційні моделі». Миколаїв: Вид-во ЧДУ ім. Петра Могили, 2010. 108 с. ISBN 978-966-336-178-9.

25. Курило А. О. & Крекотень В. М. Моделювання та прогнозування оцінки стану навколишнього середовища. 2021. URL: https://moodle.znu.edu.ua/pluginfile.php/467313/mod_resource/content/1/Моделювання.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

26. Лаврик В. І. & Боголюбов В. М. Впровадження методів математичного моделювання в екологічну освіту. *Вісник Харківського національного університету ім. В. Н. Каразіна.* 2010. № 893. С. 62-64. URL: https://elc.kpi.ua/index.php/1992-4259/article/view/23484 (дата зведення 19. 07. 2024).

27. Лопатьєв А. О. Моделювання як методологія пізнання. *Physical Education Theory and Methodology.* № 8. С. 4-10. URL: https://tmfv.com.ua/journal/article/view/334 (дата зведення 18. 07. 2024).

28. Максименко Н. В. Організація управління в екологічній діяльності: підручник / за заг. ред. В. Ю. Некоса – 2-е вид. перероблене і доповнене. Х.: ім. В. Н. Каразіна. 2008. 339 с. URL: https://core.ac.uk/download/pdf/46591364.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

29. Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології: метод. вказівки до виконання лабораторних робіт для студентів напрямку підготовки 6.051301 «Хімічна технологія» / уклад. Бойко Т. В., Абрамова А. О. Київ: 2014. 162 с. URL: https://kxtp.kpi.ua/common/mm(mv_3k_xtf).pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

30. Моделювання і прогнозування стану довкілля: підручник для студентів вищих навчальних закладів / за заг. ред. М. М. Біляєв, В. В. Біляєва. Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту ім. академіка В. Лазаряна. МОН України: Кривий Ріг. Вид. Р. А. Козлов, 2016. 207 с. URL: https://kpdi.edu.ua/biblioteka//%D0%9C/Моделювання%20і%20прогнозува

ння%20стану%20довкілля%20Біляєв%20М..pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

31. Моделювання та прогнозування стану довкілля: курс лекцій. Для студентів денної форми навчання. Спеціальність 101 «Екологія». Освітньо-кваліфікаційний ступінь «бакалавр» / укладач: О. В. Рибалова. Х.: НУЦЗУ, 2016. 221 с. URL: http://repositsc.nuczu.edu.ua/bitstream/123456789/5281/1/ПРОГНОЗУВАННЯ%20СТАНУ%20ДОВКІЛЛЯ%20-%20ІІ%20ЧАСТИНА.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

32. Національний план дій з охорони навколишнього природного середовища на 2020-2025 роки. URL: https://menr.gov.ua/news/33731.html (дата зведення 19. 07. 2024).

33. Огурцов О. М. Комп'ютерне моделювання хімічних процесів, що стимульовані реакційно-активними нітрогенвмісними сполуками. *Комп'ютерне моделювання в хімії і технологіях та системах сталого розвитку:* зб. наук. ст. 5-ї міжнар. наук.-практ. конф., 18-20 травня 2016 р. / ред. кол. Т. В. Бойко, Л. М. Бугаєва. Київ : Інтерсервіс, 2016. С. 143-149. URL: https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/50489 (дата зведення 19. 07. 2024).

34. Основні засади (стратегія) державної екологічної політики України на період до 2030 року. URL: https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/2697-19 (дата зведення 19. 07. 2024).

35. Пилипчук Л. Л., Волкова С. А. Попович Т. А. Використання інформаційних технологій при висвітлені питань колоїдної хімії. *Актуальні проблеми в середній освіті: заклад загальної середньої освіти – доуніверситетська підготовка – заклад вищої освіти.* 2023. С. 515-524. URL: http://ekhsuir.kspu.edu/123456789/19324 (дата зведення 19. 07. 2024).

36. Пилипчук Л. Л., Волкова С. А., Попович Т. А. Решнова С. Ф. Засвоєння екологічної компоненти в хімії за допомогою інформаційних технологій. *Дистанційна освіта в Україні: інноваційні, нормативно-*

правові, педагогічні аспекти. 2023. № 1. С. 292-297. URL: http://ekhsuir.kspu.edu/123456789/19325 (дата зведення 19. 07. 2024).

37. Роман Л. Ю., Марійчук Р. Т. Методичні вказівки до лабораторного практикуму з дисципліни «Моделювання та прогнозування стану довкілля» для студентів хімічного факультету, спеціальності 6.101 Екологія. Ужгород. 2021. 54 с. URL: https://dspace.uzhnu.edu.ua/jspui/bitstream/lib/52463/1/Моделювання%20та%20прогнозування%20стану%20довкілля.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

38. Стеценко І. В. Моделювання систем: навч. посіб; М-во освіти і науки України, Черкас. держ. технол, ун-т. Черкаси: ЧДТУ, 2010. 399 с. URL: https://web.kpi.kharkov.ua/auts/wp-content/uploads/sites67/2017/02/MOCS_Kachanov_posobie.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

39. Сухенко Ю. Г., Сухенко В. Ю. Ресурсозберігаючі технології в харчових і переробних виробництвах / за ред. проф. О. О. Серьогіна. К.: ЦП «КОМПРИНТ». 2016. 338 с. URL: https://er.chdtu.edu.ua/bitstream/ChSTU/3635/1/ПІДРУЧНИК_Ресурсозберігаючі%20технології.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

40. Сучасні технології у промисловому виробництві: матеріали та програма VIII Всеукраїнської науково-технічної конференції (м. Суми, 20-23 квітня 2021 р.) / редкол. О. Г. Гусак, І. В. Павленко. Суми: Сумський державний університет, 2021. 291 с. URL: https://conf.teset.sumdu.edu.ua/wp-content/uploads/2021/04/stpv-2021.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

41. Толкачова В. О. Комп'ютерне моделювання в екології. *Міжнародний науковий журнал.* 2020. № 9. URL: http://eoi.citefactor.org/10.11232/2663-4139.09.30 (дата зведення 19. 07. 2024).

42. Федорейко В. С., Рутило М. І. Імітаційне моделювання системи керування потоковою лінією виробництва твердого біопалива. *Праці ТДАТУ*. 2020. № 13. С. 71-77. URL: https://nauka.tsatu.edu.ua/print-journals-tdatu/13-4/13_4/10.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

43. Федулова Л. І. Тенденції розвитку та впровадження цифрових технологій для реалізації цілей сталого розвитку. *Економіка природокористування та сталий розвиток.* 2020. № 7. С. 6-14. URL: http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/166840 (дата зведення 19. 07. 2024).

44. Ютілова К. С. Комп'ютерне моделювання хімічних процесів: навч. посібник. Вінниця: ДонНУ ім. Василя Стуса, 2019. 56 с. URL: https://r.donnu.edu.ua/bitstream/123456789/1161/1Комп'ютерне%20моделювання%20хімічних%20процесів.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

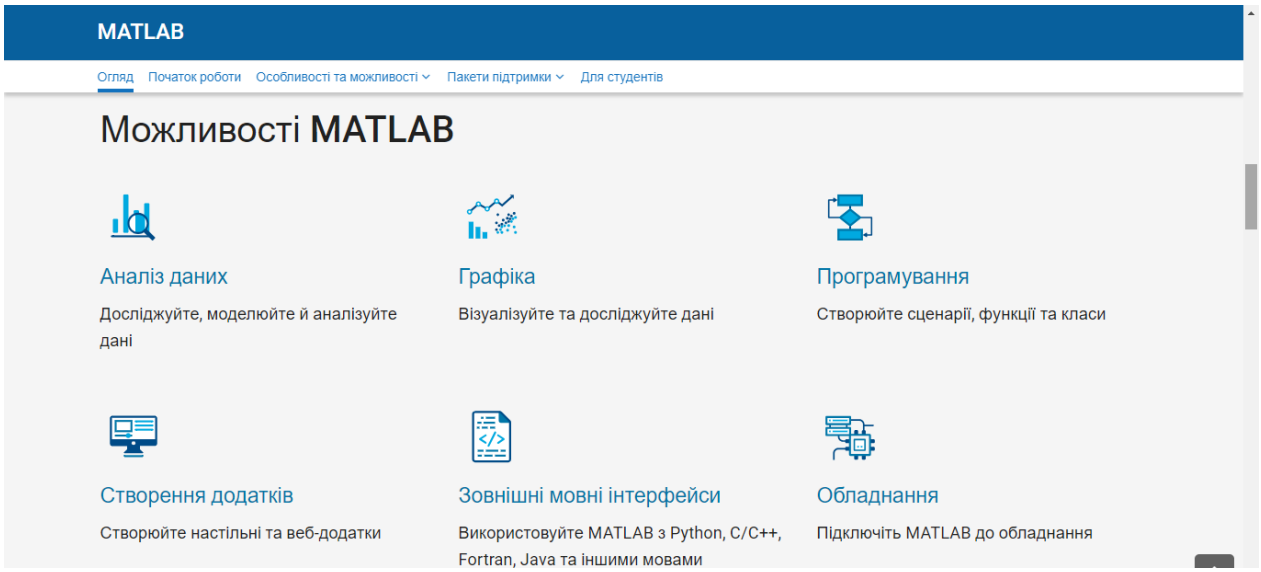
45. Янковська Л., Яворівський Р. Наукові підходи до моделювання екологічних процесів та систем. *Міжнародна науково-практична конференція учених та студентів «Цифрова економіка як фактор інновацій та сталого розвитку суспільство».* 2023. № 1. С. 198-200. URL: https://elartu.tntu.edu.ua/bitstream/lib/44207/2/DEFISDS_2023_Yankovska_L-Scientific_approaches_198-200.pdf (дата зведення 19. 07. 2024).

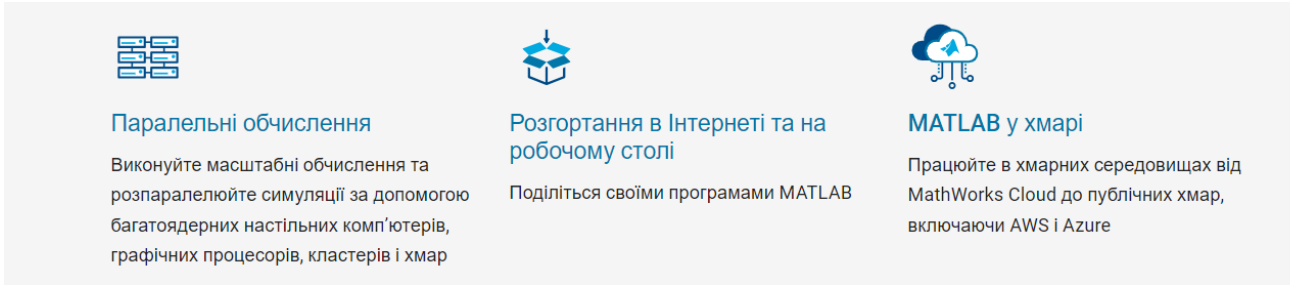
46. Янковська Л. В. Історія моделювання екологічних систем і процесів. *Наукові записки Тернопільського національного педагогічного університету ім. Володимира Гнатюка. Серія: Географія*. 2009. № 1. С. 8-13. URL: http://dspace.nbuv.gov.ua/bitstream/handle/123456789/166840/4-Fedulova.pdf?sequence=1 (дата зведення 19. 07. 2024).

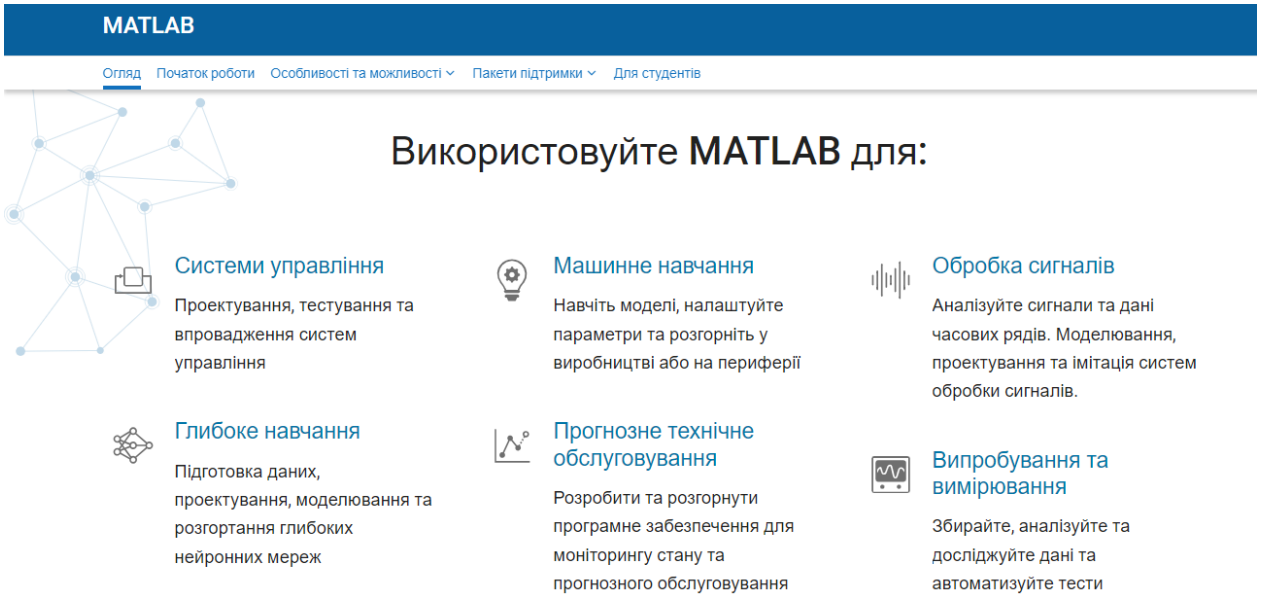
ДОДАТКИ

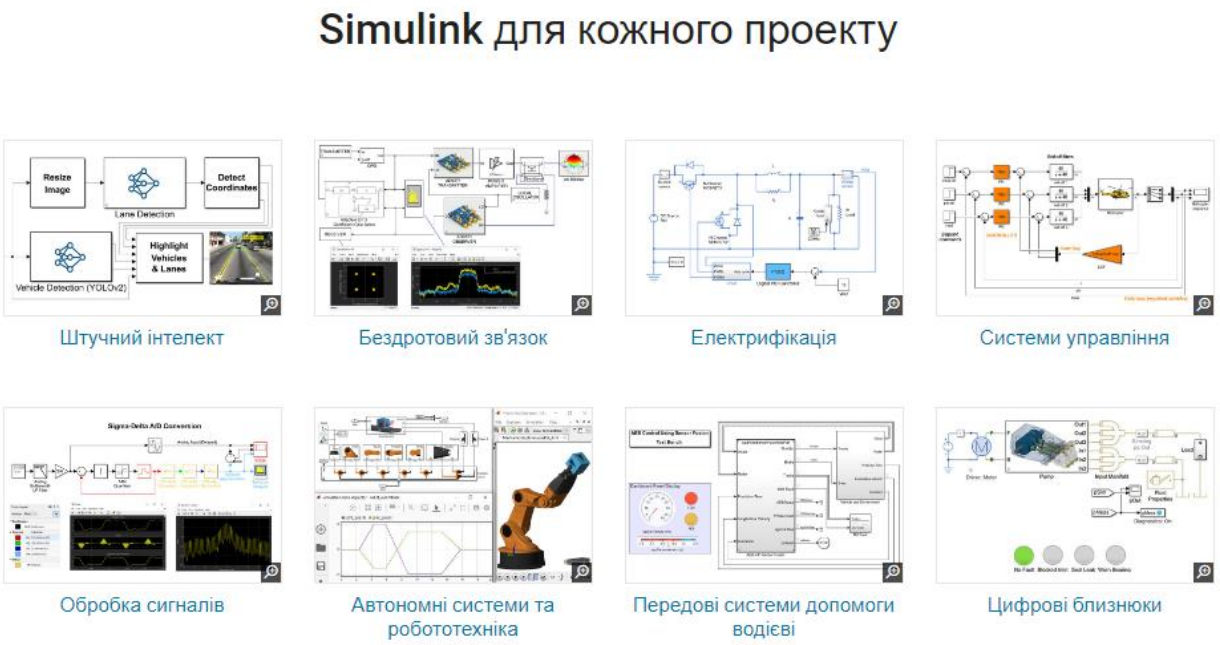
Додаток А

Можливості MATLAB







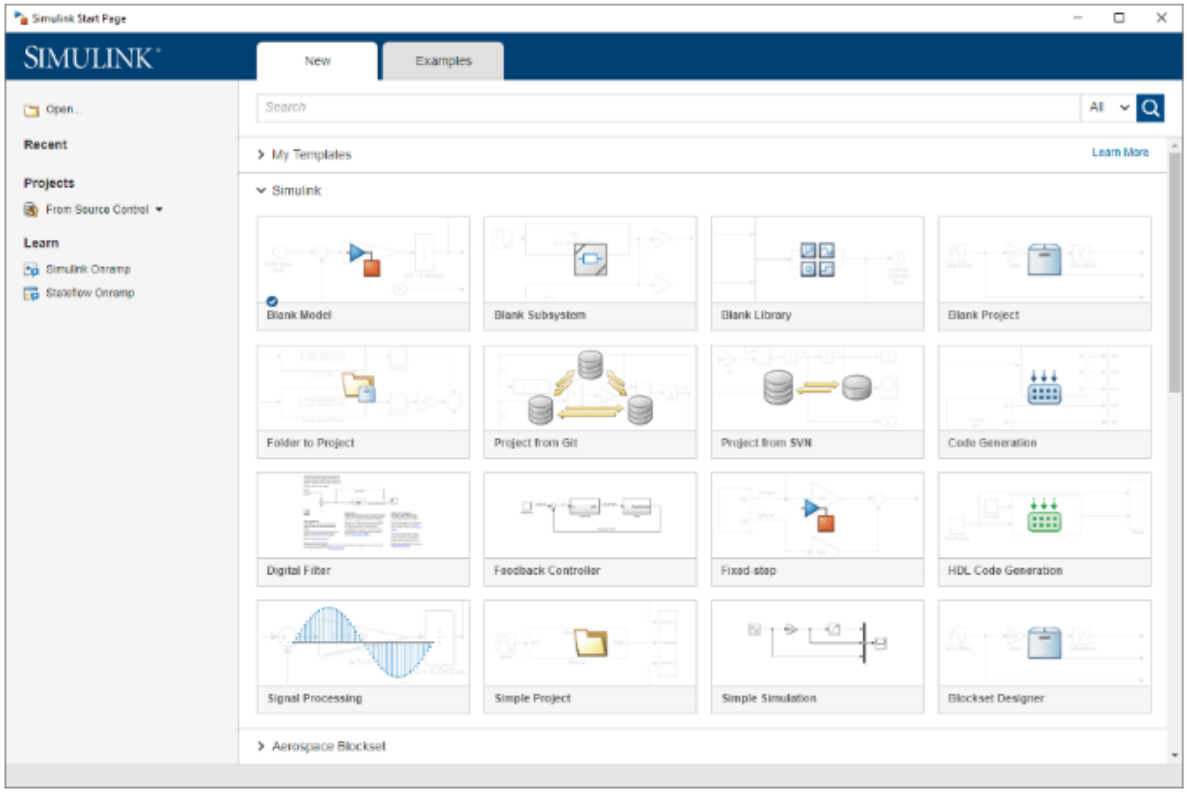


Інструкція створення імітаційної моделі

Відкрийте нову модель

Використовуйте редактор Simulink для створення моделей.

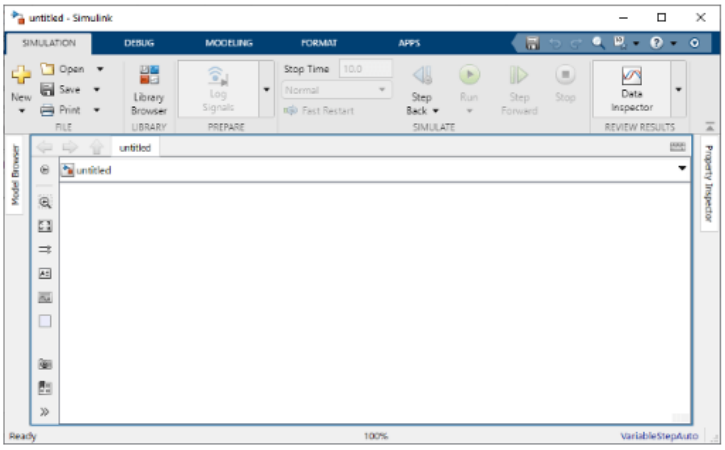
1. Запустіть MATLAB®. На панелі інструментів MATLAB натисніть **Simulink**.



2. Клацніть шаблон **«Порожня модель»** .

   Відкриється редактор Simulink.

   Щоб уникнути затінення, редактор Simulink перевіряє завантажені моделі та файли на шляху та створює модель із наступною доступною назвою `untitled`, `untitled1`, `untitled2`тощо.



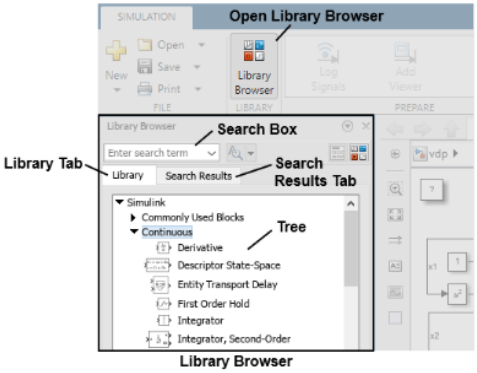
3. На вкладці **Simulation** виберіть **Save > Save as** . У текстовому полі **«Ім'я файлу»** введіть назву своєї моделі. Наприклад, `simple_model`. Натисніть **Зберегти** . Модель зберігається з розширенням файлу `.slx`.

Відкрийте браузер бібліотек Simulink

Simulink надає набір бібліотек блоків, упорядкованих за функціями в браузері бібліотек . Наступні бібліотеки є спільними для більшості робочих процесів:

- Continuous — Блоки для систем із безперервними станами
- Discrete — Блоки для систем з дискретними станами
- Математичні операції — блоки, які реалізують алгебраїчні та логічні рівняння
- Приймачі — блоки, які зберігають і показують сигнали, що підключаються до них
- Джерела — блоки, які генерують значення сигналу, які керують моделлю

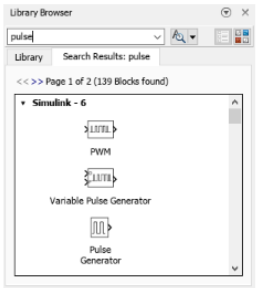
Щоб відкрити браузер бібліотеки, на панелі інструментів Simulink на вкладці **Simulation** клацніть **Library Browser** .



Щоб переглянути бібліотеки блоків, у дереві бібліотек розгорніть категорію, а потім функціональну область.

Щоб виконати пошук у всіх доступних бібліотеках блоків, введіть пошуковий термін.

> **Підказка**
>
> Ви можете повернутися до перегляду дерева бібліотеки, натиснувши **вкладку «Бібліотека»** .



Отримати детальну інформацію про блок. На вкладці **«Результати пошуку»** клацніть правою кнопкою миші блок «Генератор імпульсів» , а потім виберіть **«Довідка» для блоку «Генератор імпульсів»** . Відкриється браузер довідки та відобразить довідкову сторінку для блоку.

Блоки зазвичай мають кілька параметрів. Ви можете отримати доступ до всіх параметрів блоку, двічі клацнувши блок.

Додати блоки до моделі

Щоб почати будувати модель, додайте блоки на полотно моделі. Ви можете додавати блоки за допомогою браузера бібліотеки або меню швидкого вставлення.

1. Почніть із додавання блоку генератора імпульсів із браузера бібліотеки.

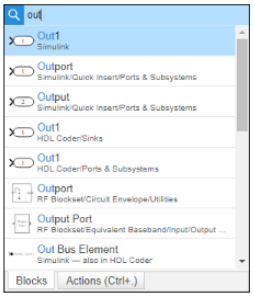
   З бібліотеки Sources перетягніть блок Pulse Generator у Simulink Editor. У вашій моделі з'явиться копія блоку «Генератор імпульсів» із текстовим полем для значення параметра **«Амплітуда»** . Введіть `1`

   Значення параметрів зберігаються протягом моделювання.

2. Додайте блок Gain за допомогою меню швидкого вставлення.

   Двічі клацніть будь-де на полотні моделі. У меню швидкого вставлення, що з'явиться, введіть `out` . З'явиться список блоків. Для кожного блоку в списку ім'я бібліотеки, яка містить блок, відображається під назвою блоку. Виберіть блок Out1 , що зберігається в бібліотеці Simulink, натиснувши **Enter** .

   Додаткову інформацію про меню швидкого вставлення див. у розділі Додавання блоків до моделей за допомогою меню швидкого вставлення .

3. Додайте ці блоки до моделі за допомогою браузера бібліотек або меню швидкого вставлення.

Блокувати	Бібліотека	Параметр
посилення	Simulink/математичні операції	посилення:2
Інтегратор другого порядку	Simulink/безперервний	Початковий стан: 0

   Додайте другий блок Outport , скопіювавши наявний і вставивши його в іншу точку за допомогою комбінацій клавіш.

   Тепер ваша модель має потрібні вам блоки.

4. Упорядкуйте блоки, клацаючи та перетягуючи кожен блок. Щоб змінити розмір блоку, перетягніть кут блоку.

Підключіть блоки

З'єднайте блоки, створивши лінії між вихідними портами та вхідними портами.

1. Клацніть вихідний порт у правій частині блоку генератора імпульсів .

   Вихідний порт і всі вхідні порти, придатні для підключення, позначені синім символом шеврона ❯ .

2. Вкажіть на ❯ щоб побачити сигнал підключення.

   Клацніть кий, щоб з'єднати блоки лінією та стрілкою, яка вказує напрямок потоку сигналу.

3. Підключіть вихідний порт блоку підсилення до вхідного порту блоку інтегратора другого порядку .

4. З'єднайте два виходи блоку інтегратора другого порядку з двома блоками виходу .

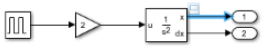
5. Збережіть вашу модель. На вкладці **«Моделювання»** натисніть « **Зберегти»** .

Додайте засіб перегляду сигналів

Щоб переглянути результати моделювання, підключіть перший вихід до засобу перегляду сигналів .

Натисніть сигнал. На вкладці **Simulation** у розділі **Prepare** натисніть **Add Viewer** . Виберіть **Область** . На сигналі з'являється піктограма перегляду та відкривається вікно області.

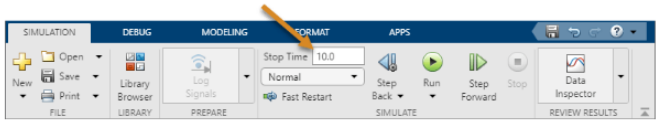


Ви можете будь-коли відкрити область, двічі клацнувши піктограму.

Запустіть моделювання

Вкажіть час зупинки моделювання. Потім змоделюйте модель.

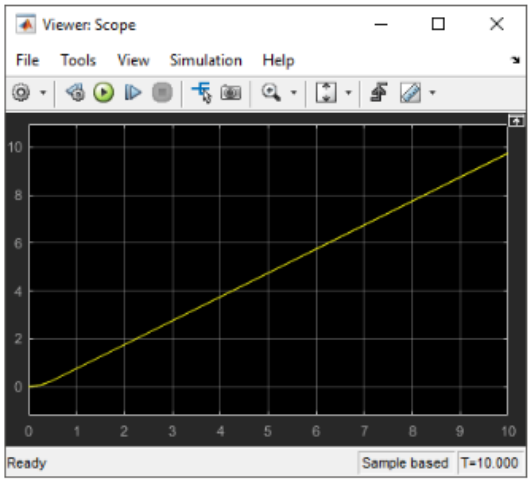
1. На вкладці **Симуляція** встановіть час зупинки симуляції. На панелі інструментів Simulink на вкладці **Simulation** введіть значення в поле **Stop Time** .

   Час зупинки за замовчуванням `10` , підходить для цієї моделі. Це значення часу не має одиниць. Одиниця часу в Simulink залежить від того, як побудовано рівняння. Цей приклад імітує спрощений рух автомобіля протягом 10 секунд — інші моделі можуть мати одиниці вимірювання часу в мілісекундах або роках.

2. Щоб запустити симуляцію, натисніть « **Запустити**» .

Симуляція запускається та створює вихідні дані у засобі перегляду області.



Уточнити модель

Зміна параметрів блоку

У цьому прикладі береться існуюча модель `moving_car.slx`і моделюється датчик наближення на основі цієї моделі руху.

Копіювати команду

У цьому випадку цифровий датчик вимірює відстань між автомобілем і перешкодою на відстані 10 м (30 футів). Модель виводить вимірювання датчика та положення автомобіля, враховуючи ці умови:

- Автомобіль різко зупиняється, коли він досягає перешкоди.
- У фізичному світі датчик вимірює відстань неточно, що опричиняє випадкові числові помилки.
- Цифровий датчик спрацьовує через фіксовані проміжки часу.

Для початку відкрийте `moving_car`модель. У командному рядку MATLAB введіть:

```
open_system( 'moving_car.slx' );
```

отримати

Спочатку потрібно змоделювати жорстку зупинку, коли автомобіль досягає положення `10`. Блок Integrator, Second-Order має параметр для цієї мети.

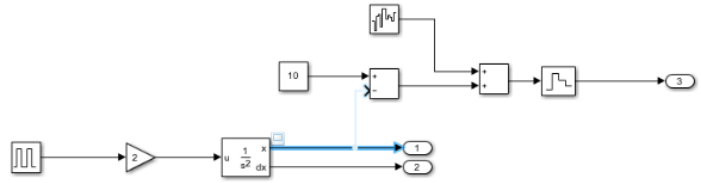
1. Двічі клацніть блок Integrator, Second-Order. З'явиться діалогове вікно «Параметри блоку».
2. Виберіть **Обмеження x** і введіть `10`Верхня **межа x** . Колір фону для параметра змінюється, щоб вказати модифікацію, яка не застосована до моделі. Натисніть **OK** , щоб застосувати зміни та закрити діалогове вікно.

Додайте нові блоки та з'єднання

Додайте датчик, який вимірює відстань до перешкоди.

1. Змінити модель. За потреби розгорніть вікно моделі, щоб розмістити нові блоки.
   - Знайдіть справжню відстань. Щоб знайти відстань між положенням перешкоди та положенням автомобіля, додайте блок Віднімання з `Math Operations`бібліотеки. Також додайте блок Constant з `Sources`бібліотеки, щоб встановити постійне значення `10`для положення перешкоди.
   - Змоделюйте недосконале вимірювання, типове для реального датчика. Генеруйте шум за допомогою блоку білого шуму з обмеженим діапазоном із `Sources`бібліотеки. Встановіть параметр **«Потужність шуму»** на `0.001`. Додайте шум до вимірювання за допомогою блоку Add з `Math Operations` бібліотеки.
   - Змоделюйте цифровий датчик, який спрацьовує кожні 0,1 секунди. У Simulink дискретизація сигналу через заданий інтервал вимагає вибірки та утримання. Додайте блок Zero-Order Hold з `Discrete`бібліотеки. Після додавання блоку до моделі змініть параметр **Sample Time** на `0.1`.
   - Додайте ще один вихідний порт для підключення до виходу датчика. Збережіть значення параметра **«Номер порту»** за замовчуванням .

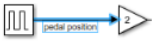
2. З'єднайте нові блоки. Вихід блоку інтегратора другого порядку вже підключений до іншого порту. Щоб створити розгалуження в цьому сигналі, клацніть сигнал лівою кнопкою миші, щоб виділити потенційні порти для підключення, і клацніть відповідний порт.



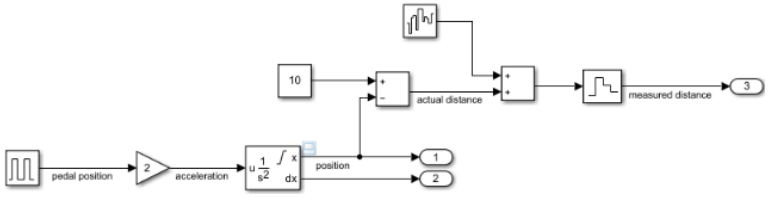
Анотуйте сигнали

Додайте назви сигналів до моделі.

1. Двічі клацніть сигнал і введіть назву сигналу.



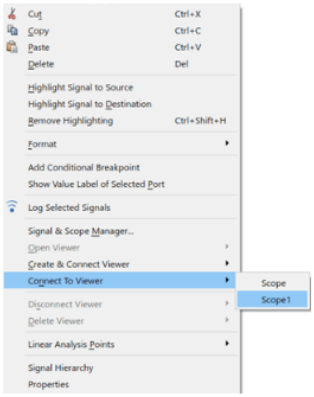
2. Щоб завершити, клацніть подалі від текстового поля.
3. Повторіть ці дії, щоб додати імена, як показано.



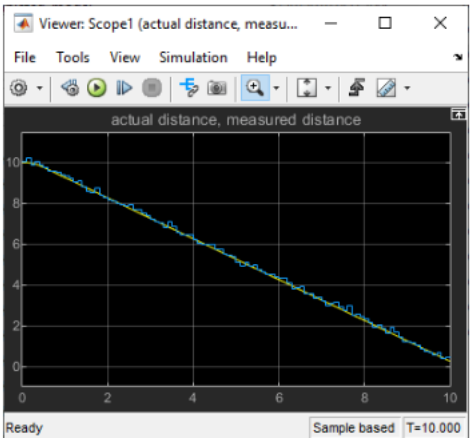
Порівняйте кілька сигналів

Порівняйте `actual distance`сигнал із `measured distance`сигналом.

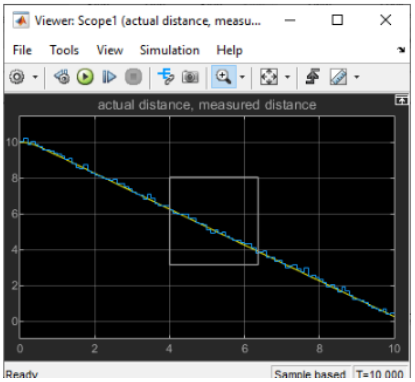
1. Створіть і підключіть Scope Viewer до `actual distance`сигналу. Клацніть сигнал правою кнопкою миші та виберіть **Створити та підключити засіб перегляду > Simulink > Область** . Назва сигналу відображається в заголовку переглядача.
2. Додайте `measured distance`сигнал до того самого переглядача. Клацніть сигнал правою кнопкою миші та виберіть **Connect to Viewer > Scope1** . Переконайтеся, що ви підключаєтесь до засобу перегляду, створеного на попередньому кроці.



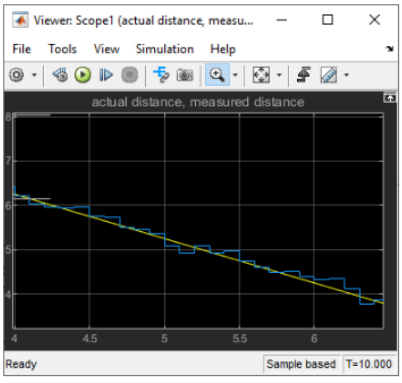
3. Змоделюйте модель. Переглядач осцилографа показує два сигнали, `actual distance`жовтий і `measured distance`синій.



4. Збільште графік, щоб спостерігати вплив шуму та вибірки. Натисніть **Збільшити** . Клацніть лівою кнопкою миші та перетягніть рамку навколо області, яку потрібно побачити ближче.



Ви можете повторити цю дію за потреби, щоб побачити деталі.



На графіку видно, що вимірювання можуть відхилятися від фактичного значення на 0,3 м. Ця інформація стає корисною під час розробки функцій безпеки, наприклад попередження про зіткнення.

Додаток Б

Способи розрахування похибки в імітаційному комп'ютерному моделюванні

Умови виникнення похибки	Формула
При оцінюванні розподілу ймовірностей способом підрахування даних, що потрапили у кожен інтервал розбиття діапазону можливих значень	$E_{p^{\cdot}}=\sqrt{(1-P_A)}$/N P_A= ймовірність потрапляння даного процесу у окремий інтервал; N – обсяг вибірки. $E_{p^{\cdot}}=\sqrt{\frac{2(1-P_A)\tau}{TP_A}}$ τ – інтервал надходження дискретних даних; T – загальний час
При оцінюванні середнього значення від усієї можливої множини результатів моделювання	$E_{m^{\cdot\cdot}}=\frac{1}{m_x}\sqrt{\frac{D_x}{N}}=\frac{\sigma_x}{m_x\sqrt{N}}$ σ_xі m_x– математичне співвідношення множини отриманих результатів
При оцінюванні дисперсії нормальної розподіленої послідовності та відсутності кореляції між окремими отриманими результатами	$E_D=\frac{\sigma_D}{D_x}=\sqrt{\frac{2}{N-1}}$
При оцінюванні коефіцієнта кореляції на основі зіставляння часу у двох корельованих послідовностей	E^2 p$=\frac{D[p^*x(\tau)]}{U^2p^2x(\tau)}=\frac{1}{\beta^*p}=\frac{[1-p^2x(\tau)]}{Np^2x(\tau)}$ $\beta^*p=\frac{U}{\sigma^*p(\tau)}$