

Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут»
Хіміко-технологічний факультет

ЕЛЕКТРОННЕ НАВЧАЛЬНЕ ВИДАННЯ

ІНФОРМАЦІЙНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

**МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
ДО ВИКОНАННЯ РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ**

для студентів хіміко-технологічного факультету.
спеціальності 8.05130101
«Хімічні технології неорганічних речовин»

Рекомендовано Вченою радою ХТФ НТУУ «КПІ»

Київ НТУУ «КПІ»

2013

Методичні вказівки до виконання розрахункової роботи з дисципліни «Інформаційне забезпечення наукових досліджень» для студентів хіміко-технологічного факультету. Укладачі: І.В. Косогіна, Г.В. Кримець. Київ: НТУУ «КПІ», 2013. – 64 с.

*Гриф надано Вченою радою ХТФ НТУУ «КПІ»
(Протокол № від 2013 р.)*

Укладачі:

І.В. Косогіна, канд. техн. наук, ст. викладач.

Г.В. Кримець, канд. техн. наук, асистент.

Відповідальний редактор

А.Л. Концевой, канд. техн. наук, доцент.

Рецензент:

С.Г Бондаренко, канд. техн. наук, доцент
кафедри кібернетики хіміко-
технологічних процесів

За редакцією укладачів

ЗМІСТ

	стор.
ВСТУП	4
1 ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	5
1.1 Завдання на розрахункову роботу	5
1.2 Зміст та критерії оформлення розрахункової роботи.....	5
1.3 Критерії оцінювання розрахункової роботи	7
2 ВКАЗІВКИ ДО ВИКОНАННЯ РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ.....	8
2.1 Методологія пошуку наукової інформації у мережі Internet.....	8
2.2 Вимоги до змісту наукової складової розрахункової роботи.....	13
3 РОЗРАХУНОК ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ТА КІНЕТИЧНИХ ЗАКОНОМІРНОСТЕЙ З ВИКОРИСТАННЯМ СУЧАСНИХ ПРОДУКТІВ	19
3.1 Розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових з використанням метода Караша.....	19
3.2 Розрахунок кінетичних закономірностей кислотного розчинення ферумвмісного осаду в середовищі Excel	21
3.3 Розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових та їх просторове моделювання з використанням програмного продукту HyperChem Professional.....	22
3.4 Приклади розрахунку термодинамічних характеристик в програмному продукті HyperChem	25
4 ФОРМАТУВАННЯ ТЕКСТОВИХ ДОКУМЕНТІВ	39
5 ОСНОВИ СТВОРЕННЯ НАУКОВОЇ ПРЕЗЕНТАЦІЇ	41
6 РОЗРОБКА ПРОГРАМИ В СЕРЕДОВИЩІ VBA ДЛЯ НАУКОВО- ТЕХНІЧНИХ РОЗРАХУНКІВ	46
СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	48
ДОДАТКИ	49

ВСТУП

Дисципліна “Інформаційне забезпечення наукових досліджень” викладається згідно навчального плану підготовки магістрів 2-го року навчання і призначена навчити використанню найсучасніших методів майбутніми науковцями для пошуку, зберігання і обробки інформації з хімічної технології неорганічних речовин.

Метою розрахункової роботи (РР) з дисципліни «Інформаційне забезпечення наукових досліджень» є засвоєння матеріалу курсу та набуття практичних навичок виконання розрахункових завдань з тем, які пов'язані з темами наукових досліджень магістрантів 2-го року навчання, формування вмінь і навичок пошуку і аналізу інформації стану проблеми за тематикою наукової роботи (в т. ч. з використанням INTERNET) і творчого, продуктивного рішення проблемних питань наукових досліджень при використанні Internet ресурсів і сучасних програмних продуктів.

1 ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ

Темою розрахункової роботи є пошук, обробка та збереження інформації за запропонованою керівником темою з використанням сучасних програмних продуктів.

До розрахункової роботи входить пояснювальна записка та комплект ілюстративних документів (презентація PowerPoint), виконані студентом у відповідності до індивідуального завдання.

Розрахункова робота виконується під контролем керівника. Приймає розрахункову роботу комісія.

До захисту розрахункової роботи студент подає:

- пояснювальну записку;
- комплект ілюстративних документів (презентація PowerPoint);
- лістинг розробленої програми для науково-технічних розрахунків в середовищі VBA з результатами розрахунків.

1.1 Завдання на розрахункову роботу

Завдання 1. Методологія пошуку наукової інформації у мережі Internet

Представити наукову складову за тематикою магістерської дисертації у вигляді презентації у PowerPoint. Приклад оформлення ;

Завдання 2. Оформити запит на проведення та виконання науково-дослідної роботи за зразком у середовищі Microsoft Word;

Завдання 3. Провести розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових з використанням метода Караша у середовищі Microsoft Word та здійснити розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових і їх просторове моделювання з використанням програмного продукту HyperChem Professional;

Завдання 4. Створити програму для науково-технічних розрахунків у середовищі VBA.

Завдання: Розрахувати за методом Караша теплоту утворення наступних сполук: бензол C_6H_6 , фенол C_6H_5OH , толуол $C_6H_5CH_3$, бензосульфо кислота $C_6H_5SO_3H$, нітробензосульфо кислота $C_6H_4NO_2SO_3H$, Na-сіль нітробензосульфо кислоти $C_6H_4NO_2SO_3Na$

1.2 Зміст та критерії оформлення розрахункової роботи

Пояснювальна записка виконується на аркушах формату А4 українською мовою, сторінки РР виконують без рамки й мають поля: верхнє й нижнє - 20, ліве - не менше 25, праве - не менше 10 мм;

- текст РР виконують шрифтом 14 пт Times New Roman з полуторним міжрядковим інтервалом; заголовки можуть бути виділені шрифтом 16 пт. Абзаци в тексті відступають від границі тексту на 1-1,27 см;
- нумерацію сторінок РР проставляють у правому верхньому куті арабськими цифрами без крапки. Нумерація сторінок - наскрізна, включає ілюстрації (рисунки) і таблиці, розташовані на окремих сторінках, а також додатки з нумерацією А, Б, В...
- всі розділи РР починають з нової сторінки;
- заголовки структурних елементів і розділів РР пишуть прописними (заголовними) буквами без крапки наприкінці, не підкреслюючи. Заголовки підрозділів, пунктів і підпунктів пишуть малими літерами, починаючи із заголовної, розташовуючи номер підрозділу (пункту, підпункту) з абзацного відступу, без крапки наприкінці. Структурні елементи РР - ВСТУП, ВИСНОВКИ, СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ - не нумерують.

Пояснювальна записка повинна мати таку структуру:

- титульний аркуш;
- завдання на розрахункову роботу;
- зміст;

1. Пошук інформації: основні наукові праці за тематикою розрахункової роботи в пошуковій системі Академії Google.

2. Оформлення документації: оформлення запиту на проведення та виконання науково-дослідної роботи.

3. Розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових.

3.1 Розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових з використанням метода Караша.

3.2 Розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових та їх просторове моделювання з використанням програмного продукту HyperChem Professional.

4. Кінетика кислотного розчинення ферумвмісного осаду.

Список використаних джерел.

Додаток А: Наукову презентацію за темою розрахункової роботи.

Додаток Б: Програма для науково-технічних розрахунків в середовищі VBA.

Приклад титульного аркушу і завдання наведено в додатку А.

1.3 Критерії оцінювання розрахункової роботи

Ваговий бал – 12 балів.

Критерії оцінювання

11-12 балів «відмінно»: безпомилкове вирішення розрахункової роботи і бездоганне оформлення відповідей на завдання при наявності елементів продуктивного (творчого) підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних знань з хімії при здійсненні розрахунків;

9-10 балів «добре»: вирішення РР з незначними, непринциповими помилками (в т.ч. математичного характеру);

наявність 1-2 помилок при оформленні РР;

8 балів «задовільно»: здійснення розрахункових вправ з РР зі значущими помилками хімічного, стехіометричного чи математичного характеру, та неточності в оформленні РР;

7 балів «достатньо»: вирішення РР з 1–2 грубими помилками щодо програмної чи інформаційно-програмної суті завдання;

0 балів «незадовільно»: розрахунок РР здійснено помилково та не оформлено за необхідними вимогами

2 ВКАЗІВКИ ДО ВИКОНАННЯ РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ

2.1 Методологія пошуку наукової інформації у мережі Internet

Етап 1. Підготовчий

Перш ніж починати шукати інформацію потрібно чітко усвідомлювати, що потрібно знайти. Для цього необхідно:

- прочитати класичне формулювання наукових питань у підручниках, звертаючи увагу на термінологію і бібліографічні посилання (заголовки статей, монографій і т.д.);
- прочитати кілька профільних статей, в яких виділити ключові слова.

Як виділяти ключові слова?

Ключове слово - слово в тексті, здатне в сукупності з іншими ключовими словами представляти суть тексту. В Інтернеті такі слова використовуються головним чином для пошуку.

Набір ключових слів документа називають пошуковим виглядом документа. Набір ключових слів близький до анотації, плану і конспекту, які теж представляють документ з меншою деталізацією, але позбавлений синтаксичної структури.

У науковій літературі ключовими словами найчастіше є:

- спеціальні терміни;
- слова з назв та рефератів статей;
- назви таблиць, малюнків;
- слова, зосереджені у висновках статей;
- слова, що зустрічаються в документі частіше інших.

Для виділення ключових слів можна провести найпростіший лінгвістичний аналіз тексту - підкреслити слова, які часто зустрічаються в тексті.

Етап 2. Пошук в неспеціалізованих пошукачах.

Рекомендується починати пошук за вибраними ключовими словами в загальновідомих пошукових системах: Google, Yandex, Yahoo.

Так як простий пошук всім більш-менш відомий, зупинимося на функціях розширеного пошуку в найбільш популярній системі Google (інші системи працюють аналогічно).

За допомогою пошукової системи Google можна не тільки вводити запити, але і робити безліч інших речей. Функція розширеного пошуку дозволяє обмежити пошук сторінками наступних типів:

- містять ВСІ задані умови пошуку;
- містять фразу, зазначену в запиті;
- містять принаймні одне слово з перерахованих у запиті;
- НЕ містять жодного слова з перерахованих у запиті;
- написані на конкретній мові;
- мають певний формат файлу;
- оновлені в певний період;

Крім того, пошук можна зробити більш цілеспрямованим, включивши в пошуковий запит, який вводиться у вікні пошуку Google, оператори або вибравши їх на сторінці Розширений пошук.

Оператори розширеного пошуку:

- пошук альтернатив ("OR");
- пошук доменів;
- пошук в числовому діапазоні;
- пошук з використанням знаку "+".

Пошукова система Google ігнорує слова, які часто зустрічаються і символи (наприклад, де, як, коли), а також цифри і букви, які сповільнюють пошук і не впливають на якість результатів.

Якщо загальне слово необхідно для отримання потрібних результатів, то його можна включити в запит, поставивши перед ним знак "+". Перед знаком "+" обов'язково повинен стояти пробіл.

Пошук домену

Пошукова система Google дозволяє обмежити область пошуку певним веб-сайтом. Для цього потрібно ввести пошуковий запит, а потім додати слово "site", ввести двокрапку і вказати ім'я домену.

Пошук в числовому діапазоні

Ця функція дозволяє отримати результати пошуку, які містять числа в заданому діапазоні. Просто додайте в вікні пошуку до заданого слова два числа і поставте між ними дві крапки без пробілів. Таким чином, можна задавати діапазони для будь-яких значень. Однак при цьому слід обов'язково вказувати одиниці вимірювання або який-небудь інший індикатор, який дозволяє дізнатися, що являє собою той чи інший діапазон чисел.

Етап 3. Пошук в спеціалізованих пошукових системах

Академія знань Google Scholar

Ресурс знаходиться за адресою: www.scholar.google.com

Кожен результат пошуку Google Академії представляє собою сукупність наукових робіт. Куди може входити одна або кілька взаємопов'язаних статей або навіть кілька варіантів однієї статті. Наприклад, результат пошуку може складатися з групи статей, в тому числі препринти, тез конференції, статті в журналі та оглядової статті. Всі ці матеріали повинні відноситись до однієї і тієї ж наукової тематики. Сукупність цих статей дозволяє більш точно оцінити значення дослідження і краще представити результати різних науково-дослідних робіт в тій чи іншій області.

Кожен результат пошуку містить бібліографічну інформацію: назва статті, імена і прізвища співавторів, джерело публікації. З усією сукупністю наукових праць пов'язаний один набір бібліографічних даних, який найкраще описує статті, що входять в дану групу. Ці бібліографічні дані засновані на інформації, отриманій з статей даної групи, а також на цитуванні цих статей іншими науковими роботами.

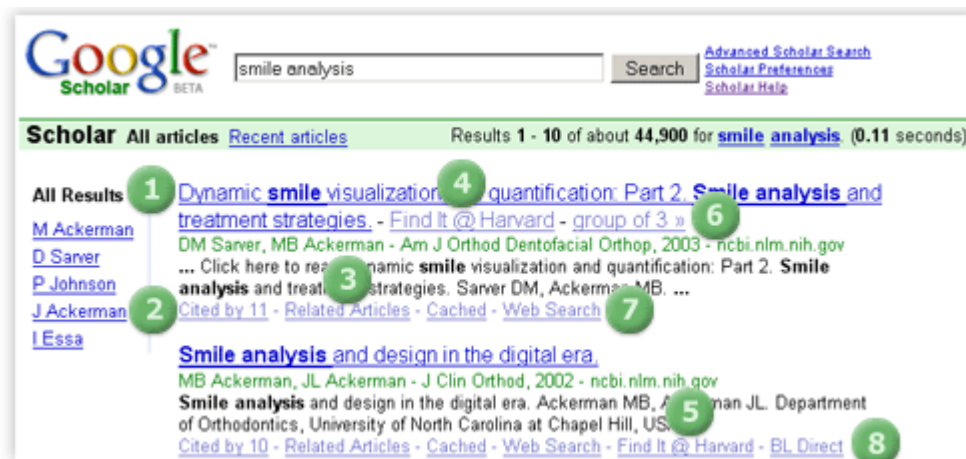


Рис. 2.1 Результати пошуку в Google Академії

Пояснення посилань:

1. Заголовок - посилання на реферат або на повний текст статті, якщо він доступний в мережі.
2. Цитується - роботи, що цитують статті з даної групи.
3. Схожі статті - інші матеріали, схожі на статті з цієї групи.
4. Посилання на бібліотеки (в Інтернеті) - пошук електронної версії статті в бібліотеках, що беруть участь у програмі Google Академії. Ці посилання з'являються автоматично, якщо ви підключені до локальної мережі свого навчального закладу.
5. Посилання на бібліотеки (автономні) - пошук бібліотек, в яких є друкований примірник даної роботи.
6. Група-пошук інших (можливо, попередніх) статей, що входять в дану групу наукових праць, до яких можна отримати доступ. Як приклад можна навести препринти, реферати, тези доповідей на конференціях і інші варіанти публікацій.
7. Веб-пошук - пошук інформації про дану роботу в Google.
8. BL Direct - замовлення повного тексту статті в Британській бібліотеці. Google не отримує жодної плати за дану послугу.

Пошук в Google Академії

Як зробити пошук за автором?

Введіть ім'я та прізвище автора, взявши їх в лапки: "д батіг". Для збільшення числа результатів використовуйте замість повного імені ініціали.

Якщо в результаті буде знайдено занадто багато документів із згадкою даного автора, можна використовувати оператор "author:" для пошуку певних авторів. Наприклад, можна використовувати наступні запити: [author: батіг], [author: "д батіг"] або [author: "Дональд Батіг"].

Результат вас все ще не влаштовує? Спробуйте використовувати сторінку розширеного пошуку. Для отримання додаткової інформації дивіться поради щодо розширеного пошуку.

Як провести пошук за назвою?

Введіть назву роботи, взявши її в лапки: "Історія Росії". Академія Google автоматично знайде цю працю, а також інші документи, в яких згадується про неї.

Як знайти останні результати досліджень з певної теми?

Виберіть посилання "Останні статті" у правій частині сторінки результатів, і результати будуть відсортовані за новизною дослідження. При упорядкуванні враховуються такі фактори, як популярність автора та попередні публікації в журналах, а також повний текст кожної статті і частота її цитування.

Для чого потрібне посилання "Схожі статті"?

Для кожного результату пошуку Google Академії автоматично визначаються найбільш тісно пов'язані статті. Побачити список цих статей можна, натиснувши на посилання "Схожі статті", яке розташоване поруч із більшістю результатів пошуку. Список схожих статей сортується в першу чергу за ступенем їх схожості з початковим результатом, але при цьому враховується і релевантність кожного документа. Пошук пов'язаних документів і статей - часто кращий спосіб для першого знайомства з новою темою. Однак часом навіть експерти з подивом виявляють якусь роботу, пов'язану з їх сферою діяльності.

Як виконати пошук робіт в певних виданнях?

На сторінці розширеного пошуку можна вказати ключові слова, які повинні з'являтися як в статті, так і в її назві.

На сторінці розширеного пошуку можна шукати наукову літературу з семи основних областей досліджень. Для цього необхідно встановити прапорці поряд із потрібними вам предметними областями.

Зліва від сторінки результатів показуються імена авторів, пов'язаних з вашим запитом. Необхідно просто натиснути на прізвище автора, який вас зацікавить, і буде виведений список його праць. Пошук авторів, які публікують свої праці в області, яка вас цікавить, часто є відмінним способом краще познайомитися зі сферою досліджень і роботами, які було б важко знайти іншим способом.

Пошукова база патентних документів

Ресурс знаходиться за адресою: <http://www.google.com/patents>

Ресурс працює як і звичайний пошукач Google, але базою пошуку є добірка патентних документів

3. Пошук літератури

Ресурс знаходиться за адресою: <http://books.google.com/>

4. Пошук в спеціалізованих базах Sciencedirect

2.2 Вимоги до змісту наукової складової розрахункової роботи

Назва роботи

Назва роботи повинна охоплювати галузь використання та завдання стосовно вирішення задачі дослідження.

Вступ

Розкриває сутність і стан наукової проблеми (задачі) та її значущість, підстави та вихідні дані для розроблення теми, обґрунтування необхідності

проведення дослідження.

Актуальність теми

Шляхом критичного аналізу та порівняння з відомими рішеннями проблеми (наукової задачі) обґрунтовують актуальність і доцільність роботи для розвитку відповідної галузі науки чи виробництва, особливо на користь України.

Висвітлення актуальності не повинно бути багатослівним. Досить висловити головне – сутність проблеми або наукового завдання.

Мета і задачі дослідження

Об'єкт дослідження

Це процес або явище, що породжує проблемну ситуацію й обране для вивчення.

Предмет дослідження міститься в межах об'єкта

Об'єкт і предмет дослідження як категорії наукового процесу співвідносяться між собою як загальне і часткове. В об'єкті виділяється та його частина, яка є предметом дослідження. Саме на нього спрямована основна увага магістранта, оскільки предмет дослідження визначає тему дисертаційної роботи.

Наукова новизна отриманих результатів

Це коротка викладка нових наукових положень (рішень), запропонованих магістрантом особисто. Необхідно показати відмінність одержаних результатів від відомих раніше, описати ступінь новизни (вперше одержано, удосконалено, дістало подальший розвиток).

Кожне наукове положення чітко формулюють, відокремлюючи його основну суть і зосереджуючи особливу увагу на рівні досягнутої при цьому новизни.

Сформульоване наукове положення повинно сприйматися легко і однозначно.

Не можна наводити опис нових прикладних (практичних) результатів.

Висновки

Викладаються найважливіші наукові та практичні результати, які повинні містити формулювання розв'язаної наукової проблеми (задачі), її значення для науки і практики. Далі формулюють висновки та рекомендації щодо наукового та практичного використання здобутих результатів.

У висновках розкривають якісні і кількісні показники здобутих результатів, обґрунтувати їх достовірність та викласти рекомендації щодо їх використання.

До наукової складової розрахункової роботи відноситься оформлення запиту на проведення та виконання науково-дослідної роботи. Форма запиту наведена у додатку Б.

Приклад: Представлення наукової складової розрахункової роботи

Назва:

Маловідходна технологія водоочищення коагуляційним методом

Актуальність теми

Недосконалість існуючих технологій очищення стічних вод, забруднених барвниками й поверхнево-активними речовинами, та регенерації цінних складових осадів очищення стічних вод призводить до неповного знешкодження токсичних інгредієнтів, що містяться в промислових стоках. Безперервне накопичення шкідливих для довкілля шламових осадів очищення стічних вод і необхідність вилучення з земельного фонду досить значних площ для складування цих осадів обумовлює актуальність роботи у напрямі вирішення перелічених проблемних питань шляхом знешкодження та часткової утилізації токсичних складових відходів, регенерації феруму з осадів водоочищення та зменшення їх кількості у відвалах.

Мета і задачі дослідження

Метою роботи є розроблення маловідходної технології очищення

стічних вод, яка включає часткову утилізацію складових коагуляційних осадів з поверненням ферумвмісного коагулянту, знешкодження токсичних компонентів шламів, обґрунтування і виявлення закономірностей процесу регенерації коагулянту з осадів водоочищення для його подальшого використання в технології очищення стічних вод.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити наступні задачі:

- теоретично обґрунтувати вибір методу ефективного очищення стічних вод, забруднених барвниками та поверхнево-активними речовинами, характерними для текстильної промисловості;
- встановити фізико-хімічні умови коагуляційного очищення стічних вод та дослідити їх вплив на морфологію утворених осадів водоочищення;
- обґрунтувати метод регенерації коагулянту з осадів очищення стічних вод;
- розробити метод знешкодження токсичних компонентів осадів водоочищення;
- виявити фізико-хімічні, кінетичні і термодинамічні закономірності сульфатно-кислотного розчинення осадів, та встановити механізм кислотного розчинення осадів;
- визначити закономірності очищення стічних вод регенованим з осадів коагулянт при його багатоциклічному використанні;
- розробити технологічну схему маловідходної технології очищення стічних вод та провести її випробування.

Об'єкт дослідження:

Об'єкти дослідження – реальні та модельні зразки стічних вод, забруднених барвниками та поверхнево-активними речовинами, характерними для текстильної промисловості; осади водоочищення; регенований розчин коагулянту.

Предмет дослідження – механізм і закономірності коагуляційного очищення стічних вод, сульфатно-кислотного розчинення осадів очищення стічних вод, забруднених барвниками і поверхнево-активними речовинами, та окисної обробки регенованого розчину коагулянту зі знешкодженням

токсичних компонентів.

Наукова новизна

- Вперше запропоновано і теоретично обґрунтовано маловідходну технологію коагуляційного очищення стічних вод, забруднених поверхнево-активними речовинами та барвниками, з наступним поверненням компонентів у рецикл.
- Встановлено механізм процесу коагуляційного очищення стічних вод від поверхнево-активних речовин і барвників, та сульфатно-кислотного розчинення утвореного в результаті водоочищення ферумвмісного осаду, що перебігає у внутрішній дифузійній області. Виявлено фізико-хімічні та кінетичні закономірності розчинення металовмісного осаду сульфатною кислотою.
- Вперше розраховані термодинамічні характеристики барвника й поверхнево-активних речовин, характерних для стічних вод текстильної промисловості та утворених в результаті коагуляційного очищення стічних вод феруморганічних сполук, що дало змогу обґрунтувати термодинамічну ймовірність перебігу процесу коагуляційного очищення промислових стічних вод від органічних забрудників ферумвмісним коагулянтом та кислотного розчинення осадів водоочищення.
- Вперше виявлено та підібрано умови поєднання окисної обробки з ультрафіолетовим опроміненням в присутності мангану (IV) оксиду, на основі чого доведена ефективність повного видалення присутніх в розчині органічних сполук, і тим самим підвищення економічності застосування коагулянтів при очищенні стічних вод, забруднених поверхнево-активними речовинами та барвниками. Встановлено, що мангану (IV) оксид виступає в окисній системі як каталізатор, оскільки не зафіксовано наявності продуктів його відновлення.

Висновки

- Реалізовано очищення стічної води, забрудненої поверхнево-активними речовинами та барвниками, коагуляційним методом. Ступінь знебарвлення

варіювався від 70 до 99 % в залежності від типу барвника, присутнього у стічних водах. При дозі коагулянту феруму (II) сульфату 250 мг/дм³ ступінь знебарвлення стічної води, яка містила сумарно до 15 мг/дм³ поверхнево-активних речовин (лудигол, метаупон, синтанол) та барвник «активний яскраво-червоний 5 СХ» до 6 мг/дм³, склав 95 %.

– Встановлено, що присутність барвника впливає на процес вилучення поверхнево-активних речовин зі стічних вод коагуляційним методом. Молекула барвника сприяє утворенню пластівців аквакомплексу феруму (III) гідроксиду з більш розвиненою поверхнею.

– Встановлено раціональні умови перебігу процесу сульфатно-кислотного розчинення: концентрація сульфатної кислоти більше 32 %, надлишок сульфатної кислоти 1,0, температура 35 °C та тривалість проведення процесу не менше 20 хв. Ступінь вилучення феруму з осаду склав 90–95 % в залежності від характеристик осаду.

– Вперше розраховані термодинамічні характеристики поверхнево-активних речовин і барвника, присутніх у стічних водах текстильних виробництв, та феруморганічних комплексів, які утворюються в результаті коагуляційного очищення стічних вод, що дозволило встановити термодинамічну ймовірність перебігу процесу.

– Розроблено маловідходну технологічну схему очищення стічних вод текстильних виробництв, яка включає коагуляційну обробку ферумвмісним коагулянтом стічних вод, забруднених поверхнево-активними речовинами та барвниками, і подальші процеси кислотного розчинення одержаного ферумвмісного осаду та окисної обробки утвореного регенованого розчину коагулянту феруму (III) сульфату. Технологія пройшла випробування на обладнанні ТОВ «ЕКОХІМ-ІНЖИНІРІНГ».

3. РОЗРАХУНОК ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ТА КІНЕТИЧНИХ ЗАКОНОМІРНОСТЕЙ З ВИКОРИСТАННЯМ СУЧАСНИХ ПРОГРАМНИХ ПРОДУКТІВ

3.1 Розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових з використанням метода Караша

Розрахунок термодинамічних та кінетичних закономірностей на основі експериментальних даних з використанням сучасних програмних продуктів дозволить обґрунтувати механізм процесів покладених в основу наукової роботи.

За розрахованими теплотами згоряння можна визначити теплоту утворення сполуки, виходячи з закону Геса, за наступною формулою:

$$\Delta H^{утв} = \sum p \Delta H_{ел}^{32} - \Delta H_{сп}^{32}, \quad (3.1)$$

де $\Delta H^{утв}$ – теплота утворення сполуки, кДж/(моль);

p – кількість однойменних атомів у молекулі;

$\Delta H_{ел}^{32}$ – теплота згоряння 1 атома елемента, кДж;

$\Delta H_{сп}^{32}$ – теплота згоряння сполуки, кДж/(моль).

Тоді, за формулою Караша, теплота згоряння сполуки має наступний вигляд:

$$\Delta H_{сп}^{32} = 109 \cdot \rho + \sum \Delta_i \cdot k, \quad (3.2)$$

де ρ - кількість електронів, міцно зв'язаних з атомами, які заміщають в органічній сполуці атоми водню;

Δ_i - структурна поправка для замісника (таблиця 3.1);

k - число однакових замісників.

Частково заміщати в молекулі сполуки атоми водню можуть тільки атоми сильних окисників (кисень, галогени), причому кількість таких частково заміщених електронів зазвичай відповідає валентності атома окисника в даній молекулі. Значення теплових поправок та теплоти згоряння окисників наведені в таблицях 3.1 і 3.2.

Таблиця 3.1

Теплоти згоряння ΔH_{el}^{32} окисників, присутніх у об'єкті дослідження

Елемент	Теплота згоряння атому елемента ΔH_{el}^{32} , кДж
Вуглець	394,9
Водень	143,0
Азот	0
Кисень	0
Сірка	289,9

Таблиця 3.2

Значення теплових поправок

Характер групувань, замісників та зв'язків	Теплова поправка, Δ_i , кДж/моль
NO ₂	+54,4
SO ₃ H	-97,9
подвійний зв'язок	+54,4
R _{ap} NHCOCH ₃	-14,6
ОН	+14,6
Первинний спирт	+54,4
R-O-R	+81,6
NHN	+27,2

Приклад 1: Розрахувати теплоту утворення нітробензолу C₆H₅NO₂;

Для цієї сполуки з рівняння 3.2 знаходимо P

$$P = C_4 \cdot 4e^- + C_3 \cdot 3e^- + C_2 \cdot 2e^- + C_1 \cdot 1e^- + H_1 \cdot 1e^- ,$$

де P – кількість однойменних атомів у молекулі;

(C_n – кількість атомів вуглецю здатних віддавати n електронів при згорянні органічної сполуки атому кисню, H_1 – кількість атомів вуглецю здатних віддавати 1 електрон при згорянні органічної сполуки атому кисню)

$$p = 5 \cdot 4 + 1 \cdot 3 + 5 \cdot 1 = 28,$$

$$\Delta_i(\text{NO}_2) = 54,4; k = 1.$$

Тоді, рівняння 2 має наступний вигляд:

$$\Delta H_{\text{сп}}^{32} = 109 \cdot 28 + 1 \cdot 54,4 = 3106,4 \text{ кДж/моль}.$$

Тоді теплота утворення розраховується з теплоти спалювання:

$$\Delta H^{\text{утв}} = 394,9 \cdot 6 + 143,0 \cdot 5 + 289,9 \cdot 1 - 3106,4 = -22 \text{ кДж/моль}.$$

Табличне значення теплоти утворення нітробензолу:

$$\Delta H^{\text{утв}} = 15,9 \text{ кДж/моль}.$$

Приклад 2: Розрахувати теплоту утворення тринітробензолу $\text{C}_6\text{H}_3(\text{NO}_2)_3$;

Для цієї сполуки з рівняння 3.2 знаходимо p

$$p = \text{C}_4 \cdot 4e^- + \text{C}_3 \cdot 3e^- + \text{C}_2 \cdot 2e^- + \text{C}_1 \cdot 1e^- + \text{H}_1 \cdot 1e^-$$

де p – кількість однойменних атомів у молекулі;

(C_n – кількість атомів вуглецю здатних віддавати n електронів при згорянні органічної сполуки атому кисню, H_1 – кількість атомів вуглецю здатних віддавати 1 електрон при згорянні органічної сполуки атому кисню

$$p = 3 \cdot 4 + 3 \cdot 3 + 3 \cdot 1 = 24$$

$$\Delta_i(\text{NO}_2) = 54,4; k = 3.$$

Тоді, рівняння 3.2 має наступний вигляд:

$$\Delta H_{\text{сп}}^{32} = 109 \cdot 24 + 3 \cdot 54,4 = 2779,2 \text{ кДж/моль}$$

Тоді теплота утворення розраховується з теплоти згоряння:

$$\Delta H^{\text{утв}} = 394,9 \cdot 6 + 143,0 \cdot 5 + 289,9 \cdot 1 - 2779,2 = -349,2 \text{ кДж/моль}.$$

3.2 Розрахунок кінетичних закономірностей кислотного розчинення ферумвмісного осаду в середовищі Ehel

Характерні інтегральні та диференційні криві кислотного розчинення осаду представлені на рисунку 3.2. Для визначення швидкості розчинення

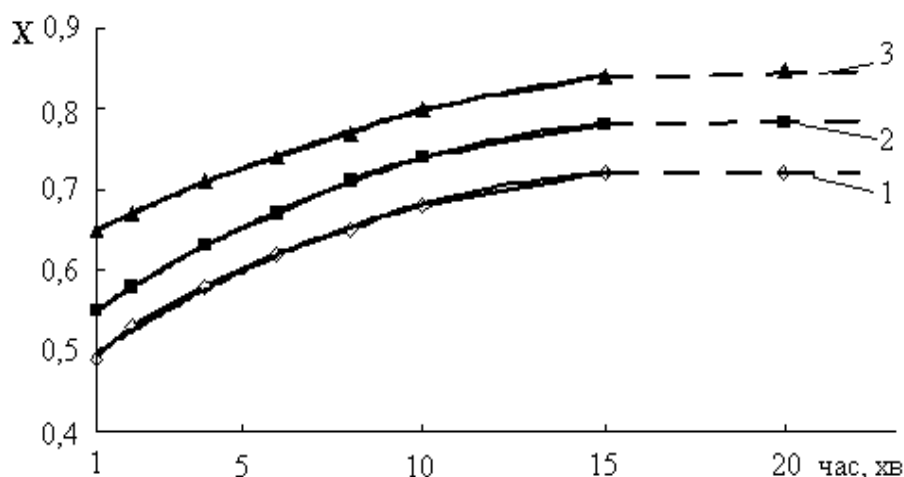


Рис. 3.2 – Ізотермічна кінетика кислотного розчинення осаду при температурі, К:
1 - 293; 2 - 298; 3 - 303; концентрація і норма (від стехіометричної) H_2SO_4 : 12% і 1,6 відповідно.
ферумвмісного осаду сульфатною кислотою проведена апроксимація залежності впливу тривалості процесу розчинення осаду на ступінь вилучення феруму у розчин $X = f(\tau)$ рівнянням другого порядку.

Для математичного опису процесу частина експериментальних даних була не врахована, оскільки після 15 хвилин контакту сульфатної кислоти з осадом процес сповільнюється, а потім практично досягає стану рівноваги (позначено на рисунку пунктирною лінією).

Для кожної з трьох кривих поліном та достовірність R^2 апроксимації наступні:

для кривої 1:

$$X = -0,0009\tau^2 + 0,0310\tau + 0,4666, R^2 = 0,9971;$$

для кривої 2:

$$X = -0,0009\tau^2 + 0,0307\tau + 0,5208, R^2 = 0,9997;$$

для кривої 3:

$$X = -0,0005\tau^2 + 0,0223\tau + 0,6279, R^2 = 0,9993.$$

Шляхом диференціювання отриманих поліномів при певних значеннях часу (τ) розраховані експериментальні значення швидкості $w_{\text{екс}}$ розчинення осаду кислотою, вираженої через зміну ступеня вилучення феруму з осаду (X):

$$w_{\text{екс}} = \frac{dX}{d\tau}. \quad (3.3)$$

Розрахункова швидкість процесу w_p може бути представлена наступним чином:

$$w_p = k \cdot (1 - X)^n,$$

де X – ступінь вилучення феруму з осаду;

n – порядок реакції;

k – константа швидкості процесу.

$$k = k_0 e^{\frac{-E}{RT}},$$

де k_0 – передекспоненційний множник;

E – енергія активації, Дж/(моль·К).

Тоді рівняння для опису кінетики кислотного розчинення осаду має наступний вигляд:

$$w_p = k_0 e^{\frac{-E}{RT}} \cdot (1 - X)^n. \quad (3.4)$$

При розрахунках рівняння (3.4) перетворювалось до виду:

$$w_p = \ln k_0 - \frac{E}{R} \cdot \frac{1}{T} + n \ln(1 - X). \quad (3.5)$$

Розрахунок невідомих рівняння (3.5) здійснено в середовищі Excel за допомогою функції «ЛИНЕЙН».

Кінетичні параметри рівняння (4.2): $k_0 = 12355$; $E = 30300$ Дж/(моль·К); $n = 0,96$. Середня відносна похибка між експериментально визначеною та розрахованою швидкостями не перевищує $\pm 12,5\%$. Порядок реакції n та величина енергії активації E вказує на ймовірність протікання процесу кислотного розчинення ферумвмісного осаду у внутрішній дифузійній області.

3.3 Розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових та їх просторове моделювання з використанням програмного продукту HyperChem Professional

Методика розрахунку в середовищі HyperChem.

Відкриваємо програму **HyperChem Professional**.

Заходимо в меню **Build** і вибираємо **default Element**, для виклику таблиці елементів. Вибираємо потрібний елемент і наносимо його на поле. Після нанесення всіх елементів об'єднуємо їх.

Вигляд елементів можна змінити використовуючи меню

display → labels → Symbol.

В меню **display → Rendering** змінюється вигляд структури, колір зв'язків, елементів та їх вигляд.

Після побудови структури необхідно провести попередній розрахунок методом молекулярної механіки. Для цього необхідно в меню

Setap → Molecular Mechanics → MM⁺ виконати команду,

Compute → Geometry Optimization, що дозволить провести геометричну оптимізацію сполуки для якої проводиться визначення термодинамічних характеристик.

Далі вибираємо метод, яким буде проводитись обрахунок напів емпіричним методом з метою попереднього визначення характеристик.

Setap → Semi-empirical → PM3, AM1

Compute → Geometry Optimization

Після обрахунку можна подивитися розраховані значення сполуки

Compute → Properties (*Total Energy, Dipole Moment, RMS Gradient*).

Методика повторюється декілька разів з використанням різних методів квантово-механічного розрахунку.

3.4 Приклади розрахунку термодинамічних характеристик в програмному продукті HyperChem

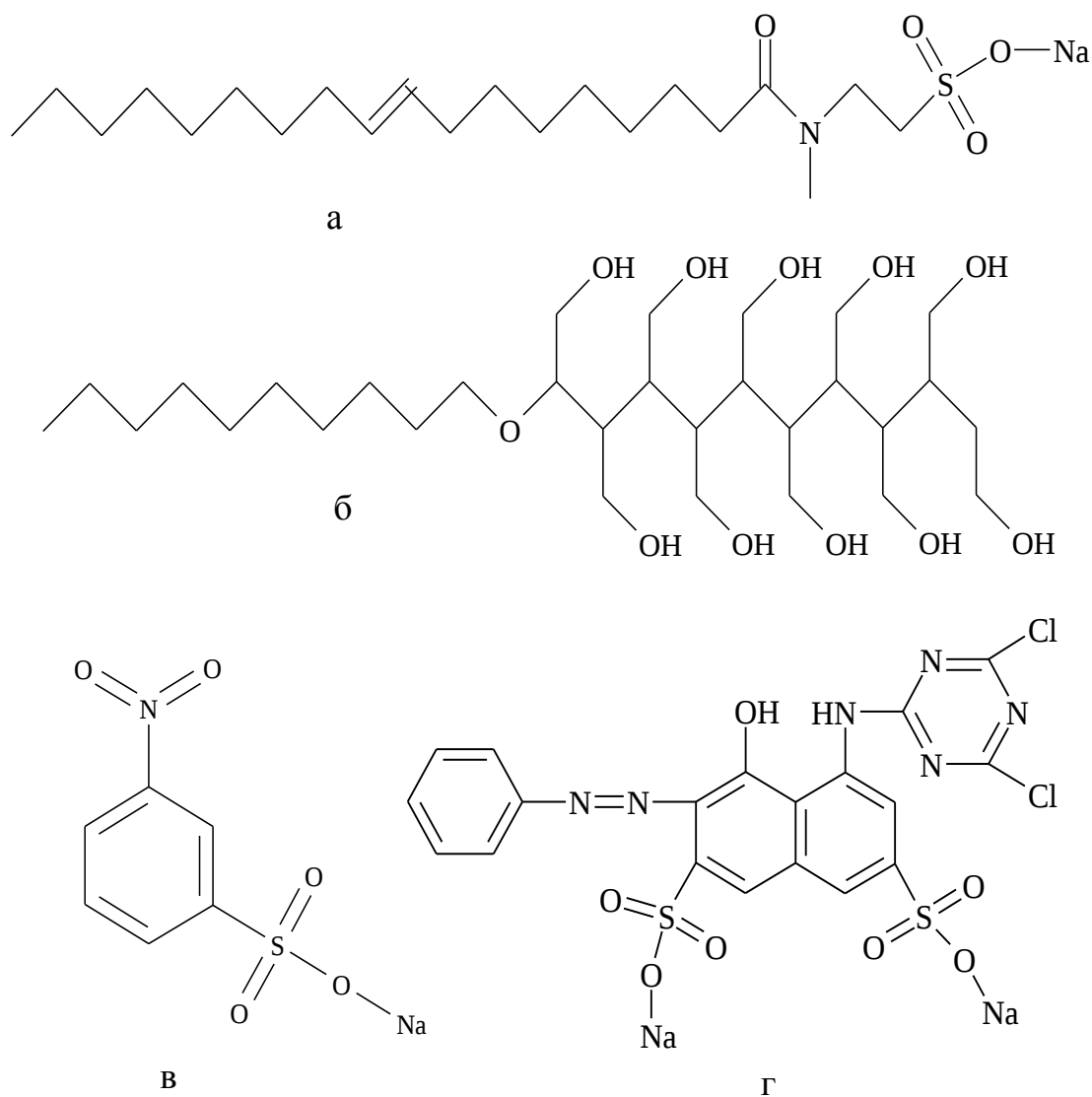


Рис. 3.3 Структури ряду забрудників стічних вод – ПАР метаупона (а), синтанола (б), лудигола (в) та барвника «активний яскраво-червоний 5 СХ» (г).

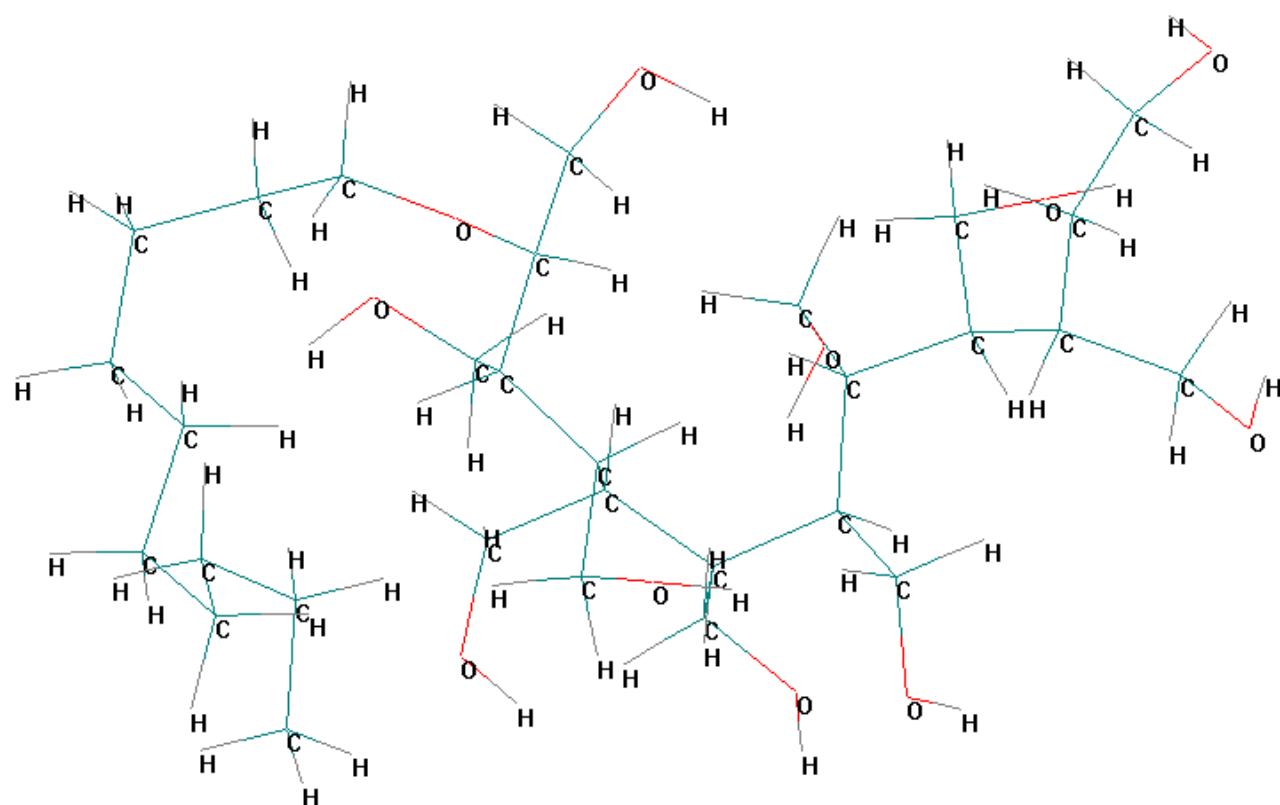
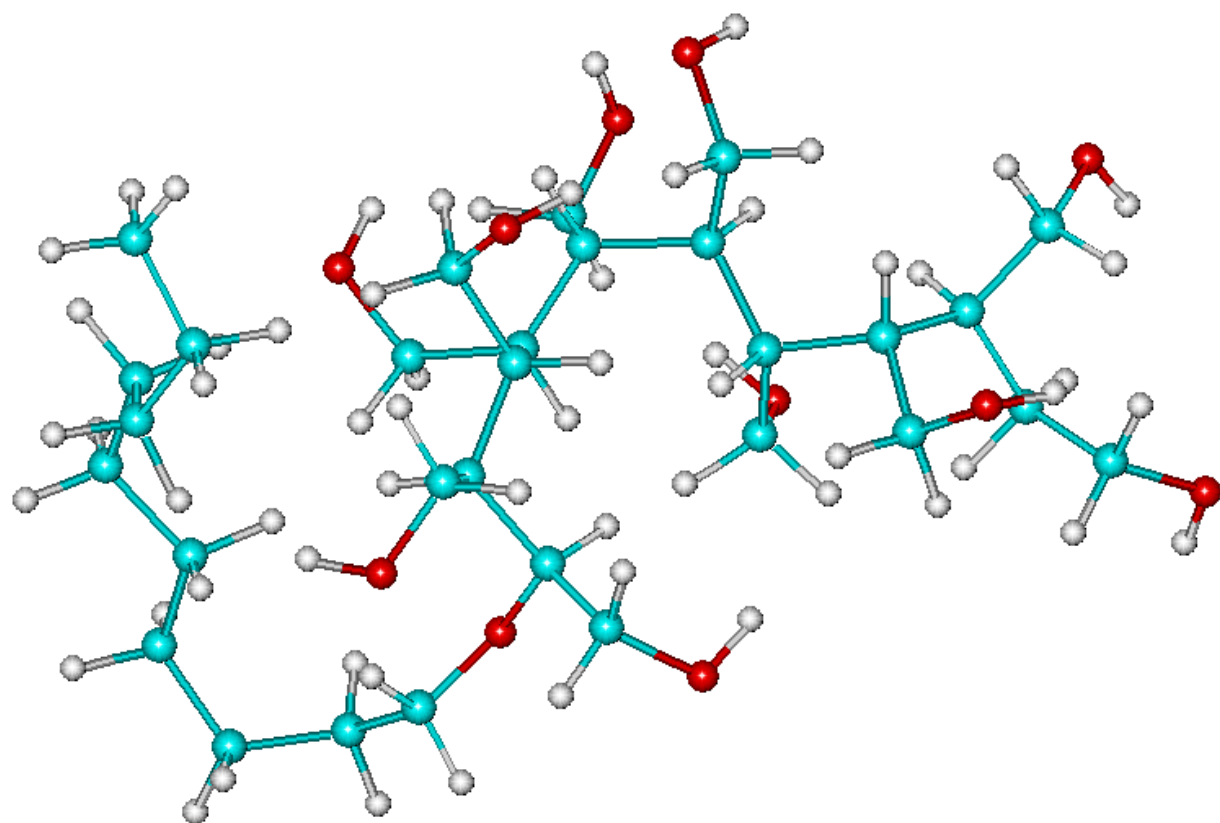


Рис. 3.4 Просторове зображення органічної сполуки «синтанол» в середовищі програмного продукту HyperChem Professional

**Розрахунок термодинамічних характеристик органічних сполук в
програмному продукті HyperChem Professional**

Sintanol (after MM+)

total energy	-178622.7 kcal/mol
dipole moment	4.82 D
RMS gradient	0.09949 kcal/(A mol)

(after PM3)

total energy	-178627 kcal/mol
binding energy	-9585.501 kcal/mol
heat of formation	-573.3281 kcal/mol
electronic energy	-2158471 kcal/mol
nuclear energy	1979844 kcal/mol
dipole moment	5.434 D
RMS gradient	0.09191 kcal/(A mol)

(after MINDO)

total energy	-190513 kcal/mol
binding energy	-9489.715 kcal/mol
heat of formation	-477.542 kcal/mol
electronic energy	-2073975 kcal/mol
nuclear energy	1883462 kcal/mol
dipole moment	4.055 D
RMS gradient	0.08754 kcal/(A mol)

orbital energy -10.44 eV

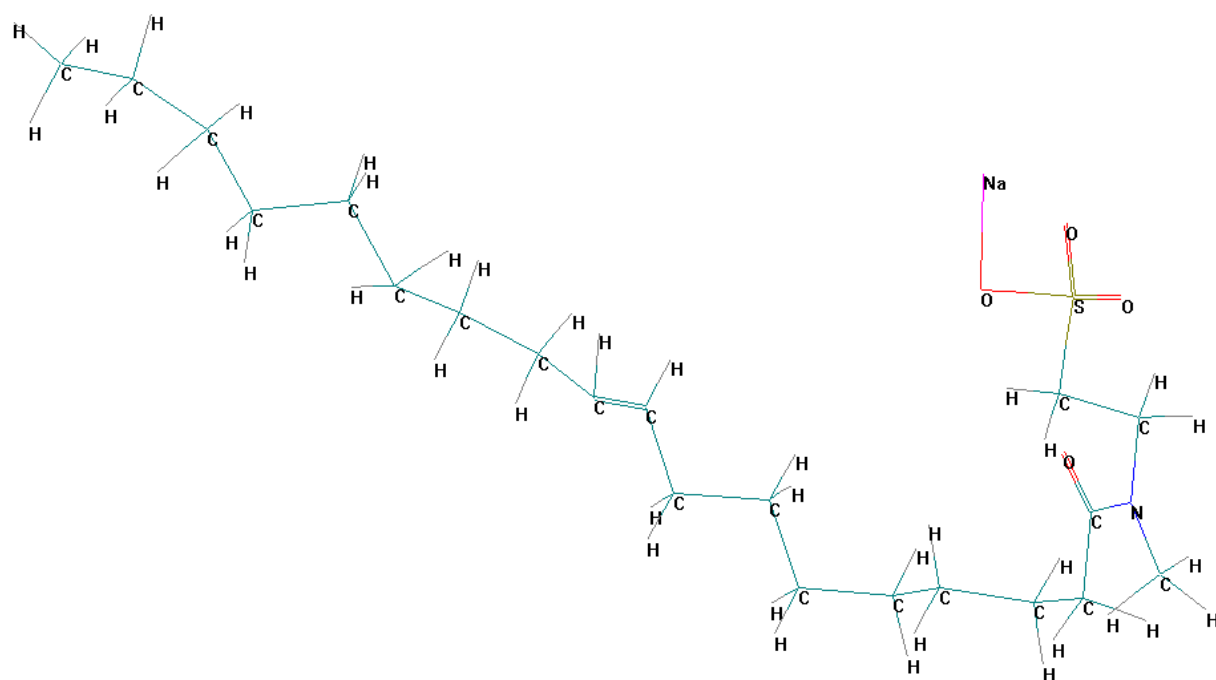
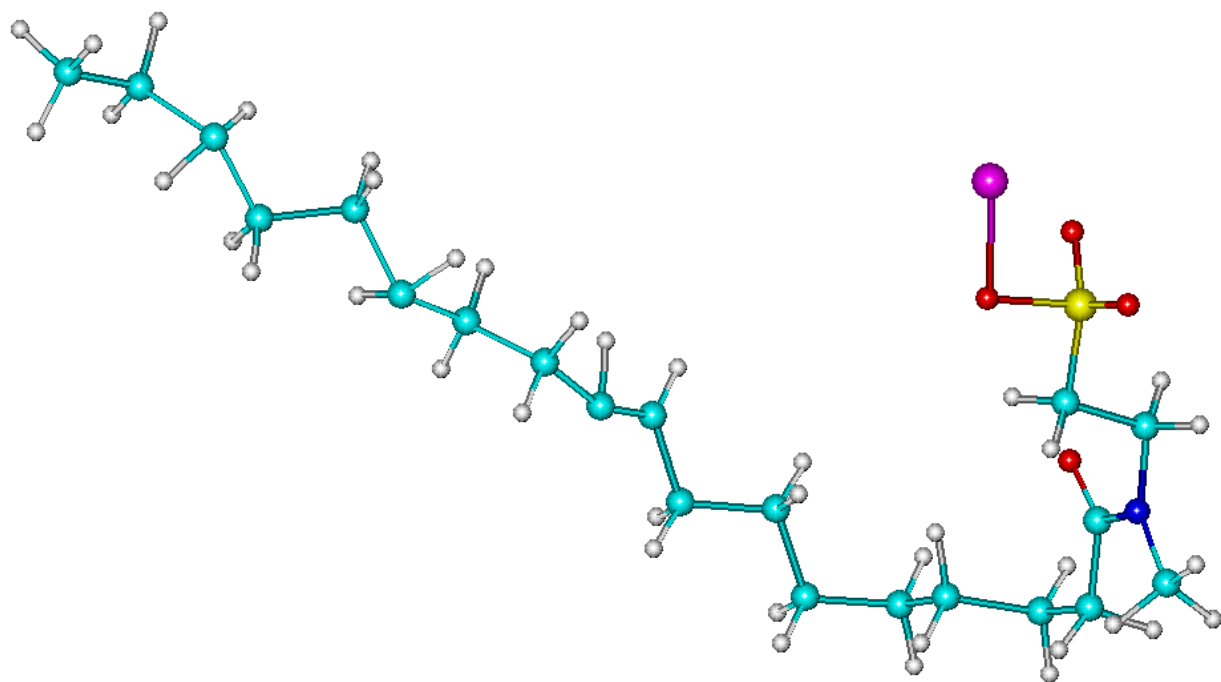


Рис. 3.5 Просторове зображення органічної сполуки «метаупон» в середовищі програмного продукту HyperChem Professional методом MM+

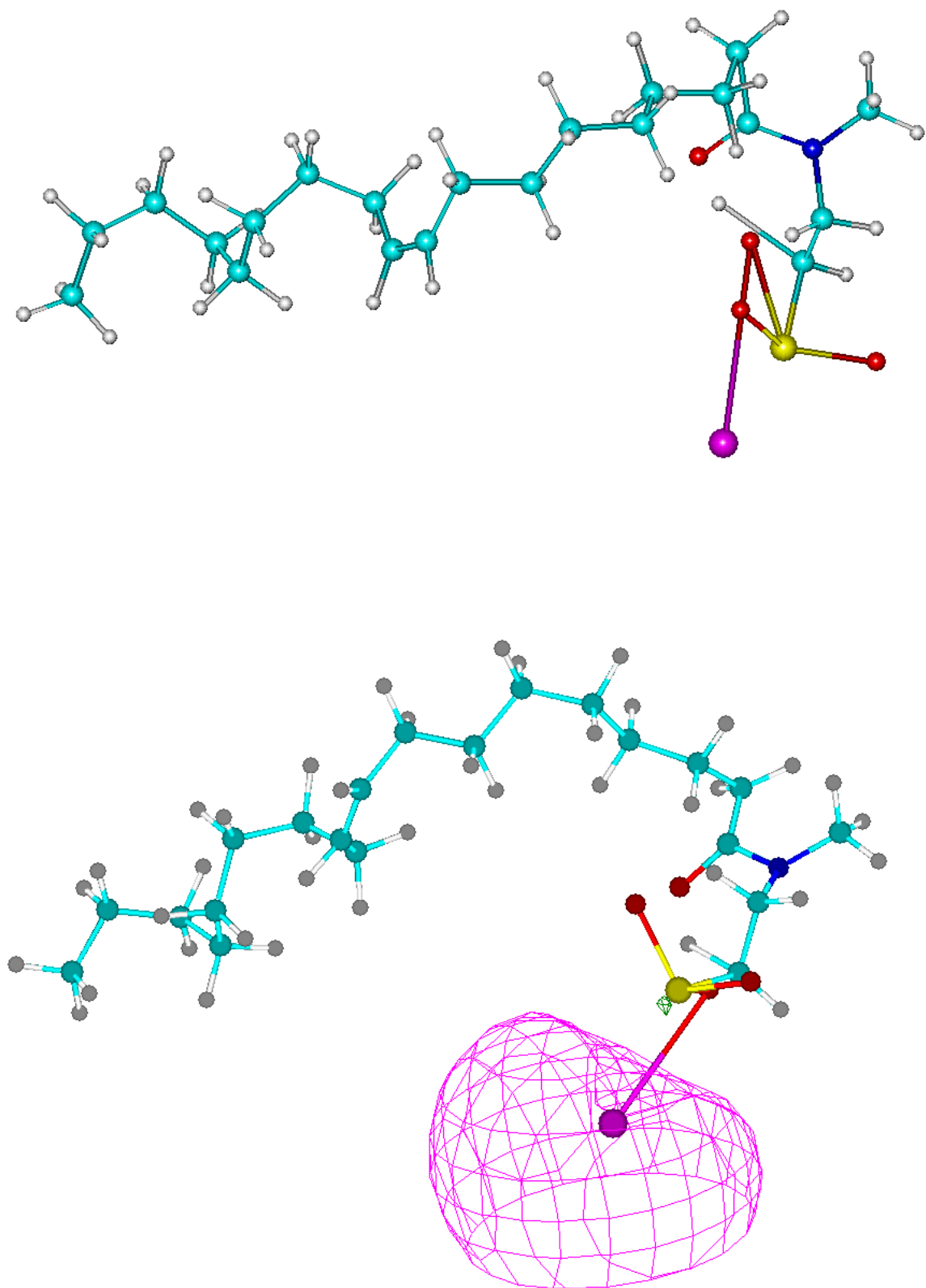


Рис. 3.6 Просторове зображення органічної сполуки «метаупон» в середовищі програмного продукту HyperChem Professional методом INDO

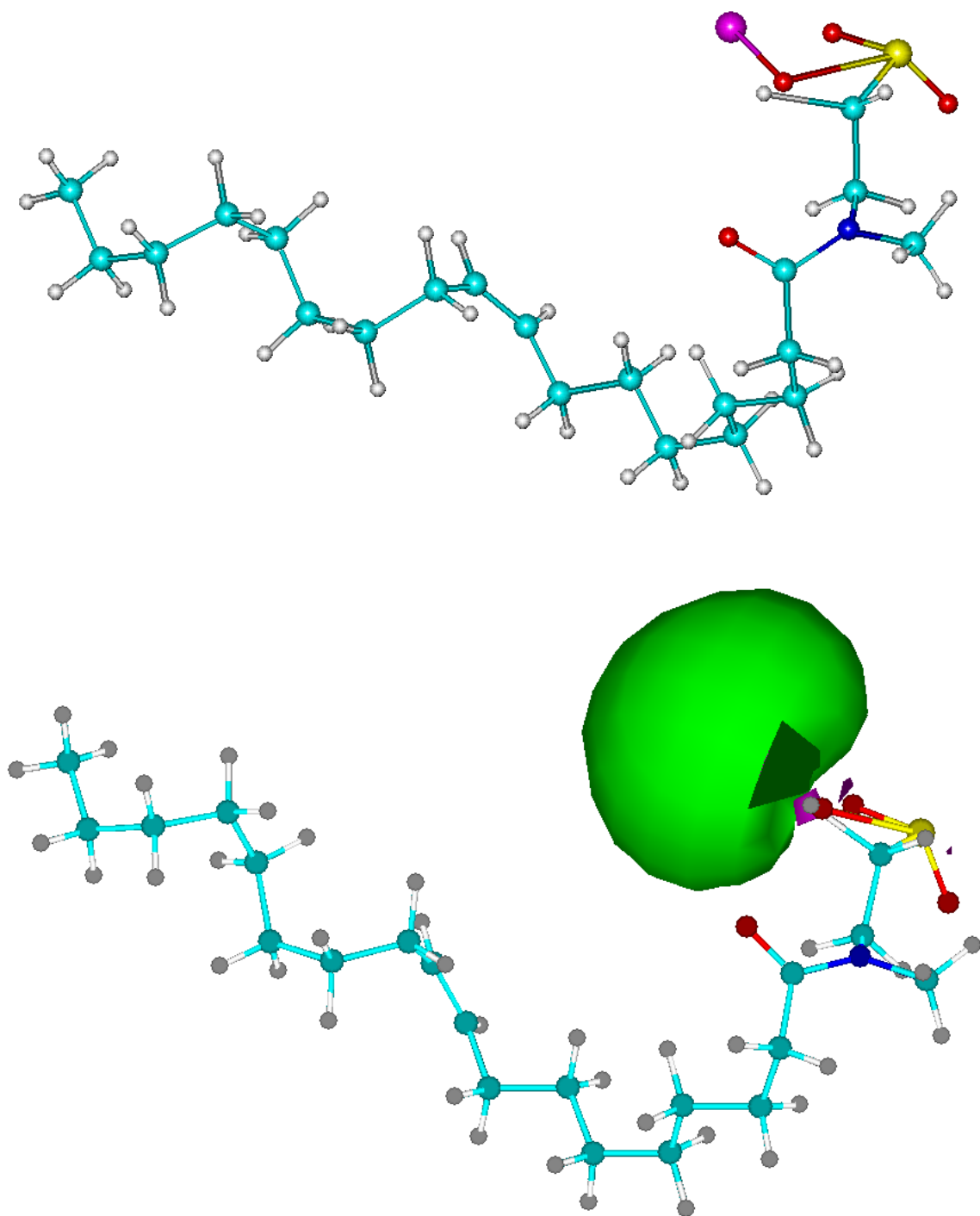


Рис. 3.7 Просторове зображення органічної сполуки «метаупон» в середовищі програмного продукту HyperChem Professional методом MNDOd

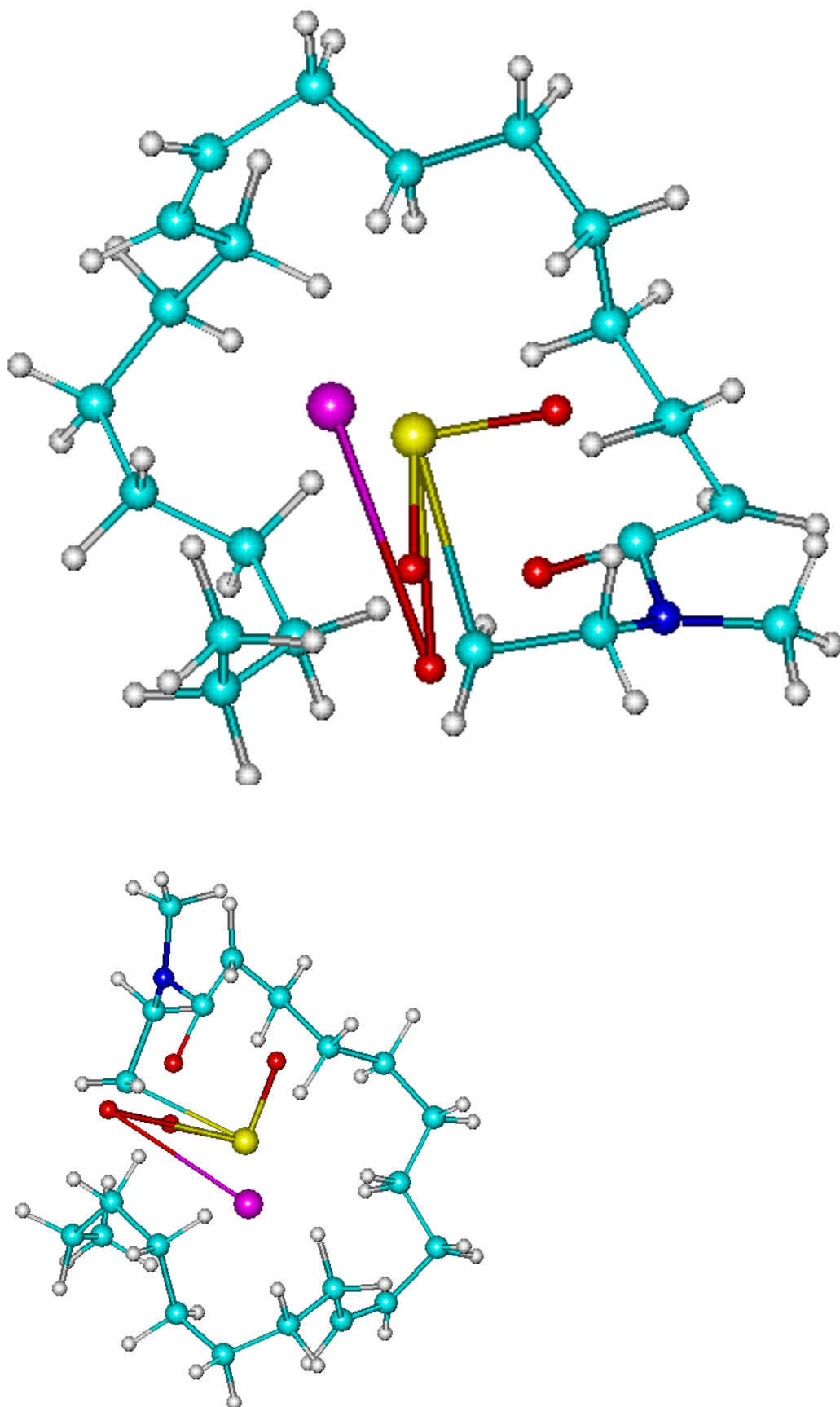


Рис. 3.8 Просторове зображення органічної сполуки «метаупон» в середовищі програмного продукту HyperChem Professional методом ZINDO1

**Розрахунок термодинамічних характеристик органічних сполук в
програмному продукті HyperChem Professional**

«МЕТАУПОН»

(after MM+)

total energy	172.7171 kcal/mol
dipole moment	5.876 D
RMS gradient	0.08949 kcal/(Å mol)

(after INDO)

total energy	-168027.4 kcal/mol
binding energy	-16646.46 kcal/mol
heat of formation	-10530.21 kcal/mol
electronic energy	-1042323 kcal/mol
nuclear energy	874295.3 kcal/mol
dipole moment	0 D
RMS gradient	0.2694 kcal/(Å mol)

(after MND0d)

total energy	-114054.3 kcal/mol
binding energy	-6320.626 kcal/mol
heat of formation	-204.37 kcal/mol
electronic energy	-887788.7 kcal/mol
nuclear energy	773734.4 kcal/mol
dipole moment	7.245 D
RMS gradient	0.1009 kcal/(Å mol)

orbital energy -0.52 eV

(after ZINDO1)

total energy	-159329.9 kcal/mol
binding energy	-18277.73 kcal/mol
heat of formation	-12161.47 kcal/mol
electronic energy	-1180447 kcal/mol
nuclear energy	1021117 kcal/mol
dipole moment	9.717 D
RMS gradient	0.09954 kcal/(Å mol)

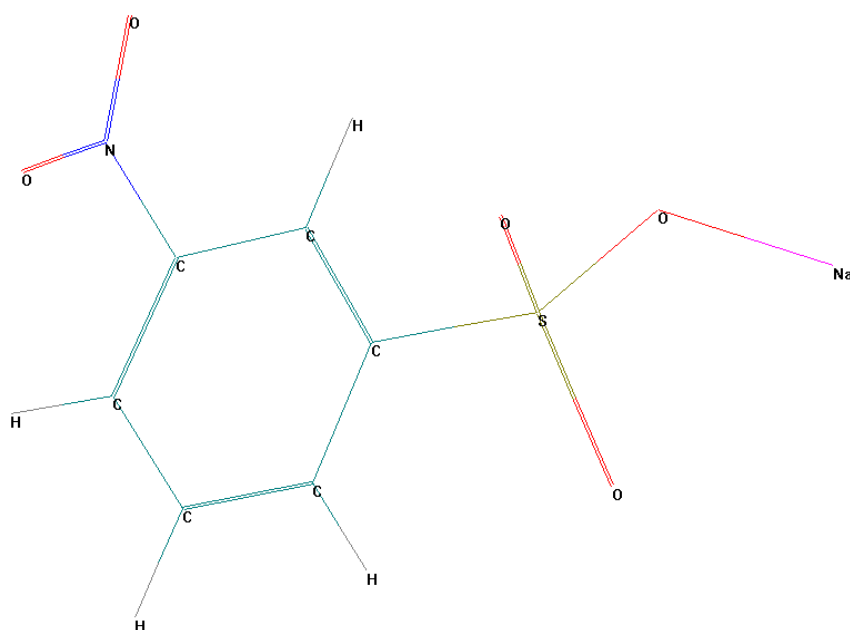
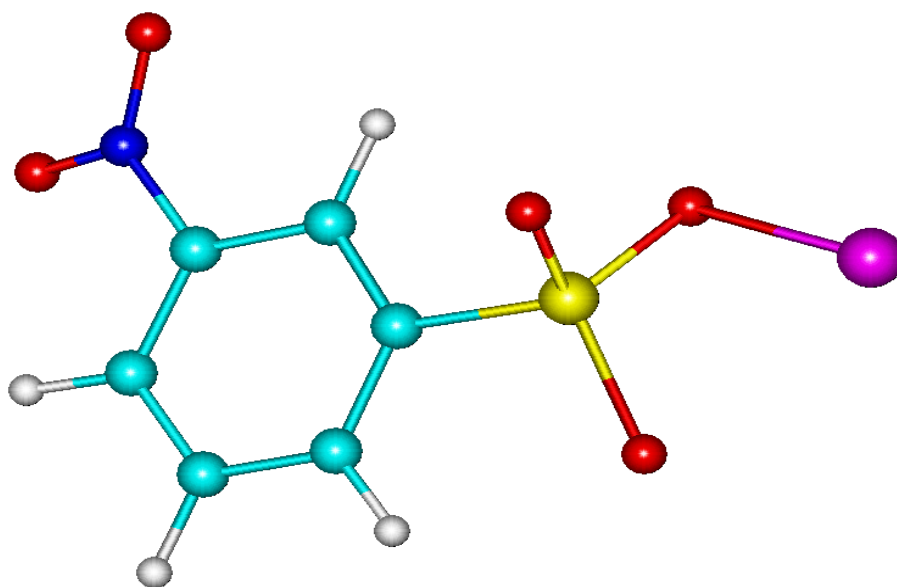


Рис. 3.9 Просторове зображення органічної сполуки «лудигол» в середовищі програмного продукту HyperChem Professional

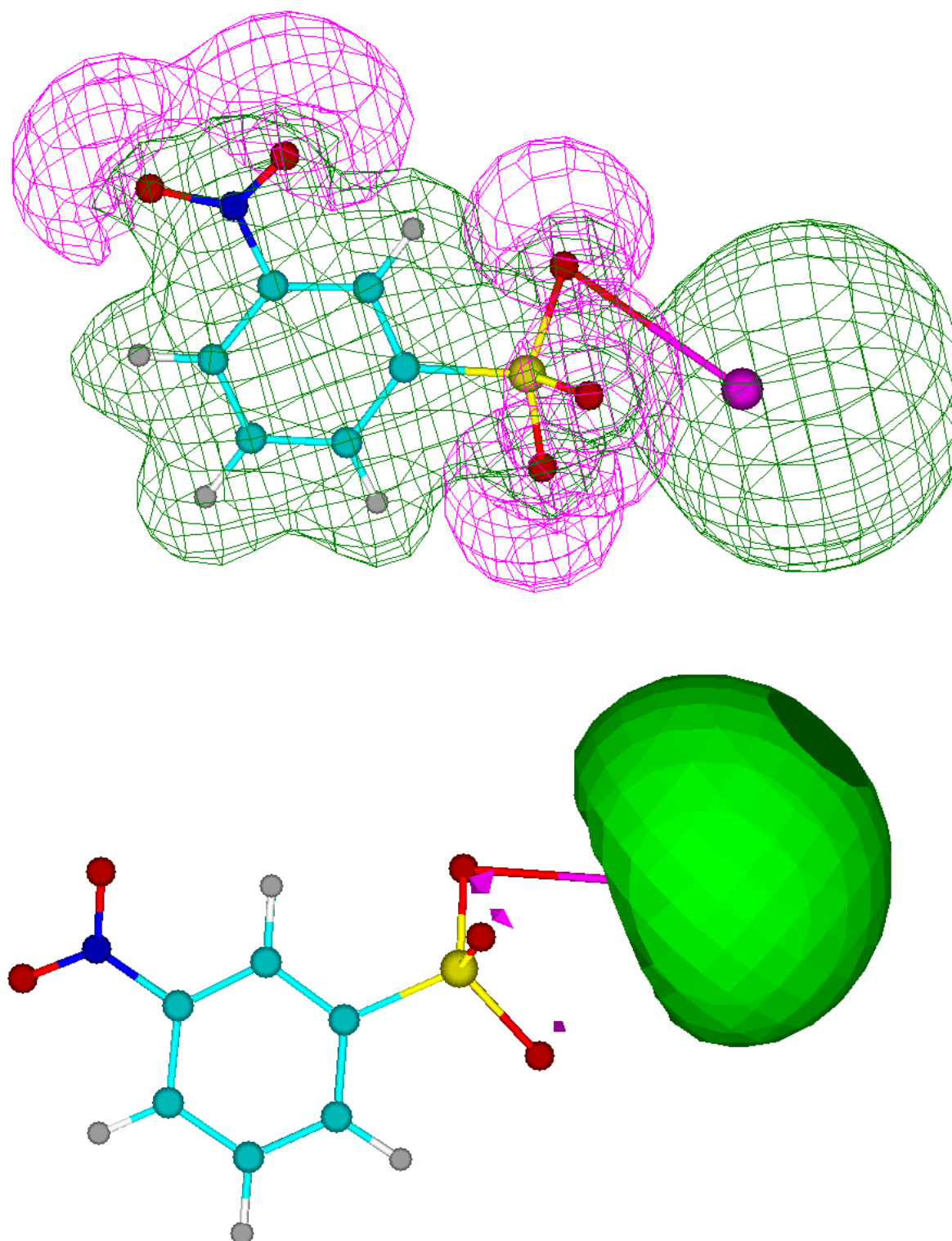


Рис. 3.10 Просторове зображення органічної сполуки «лудигол» в середовищі програмного продукту HyperChem Professional

**Розрахунок термодинамічних характеристик органічних сполук в
програмному продукті HyperChem Professional**

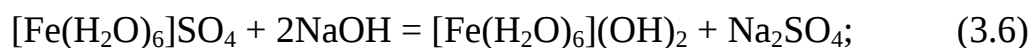
(after ZINDO 1)

total energy	-92427.2 kcal/mol
binding energy	-4742.918 kcal/mol
heat of formation	-3006.125 kcal/mol
electronic energy	-338776.4 kcal/mol
nuclear energy	246349.3 kcal/mol
dipole moment	9.117 D
RMS gradient	0.0783 kcal/(Å mol)
orbital energy	0.117 eV

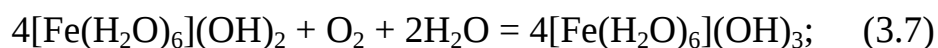
**Приклад використання отриманих результатів термодинамічного
розрахунку**

Механізм очищення СВ від ПАР та барвника ферумвмісним коагулянтном можна представити наступним чином:

1 стадія – утворення аквакомплексу феруму (II):

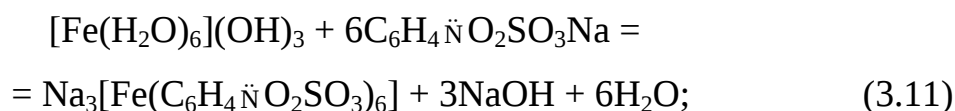
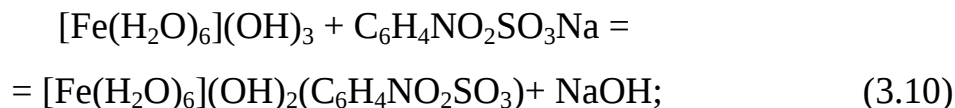


2 стадія – утворення феруму (III) гідроксиду:



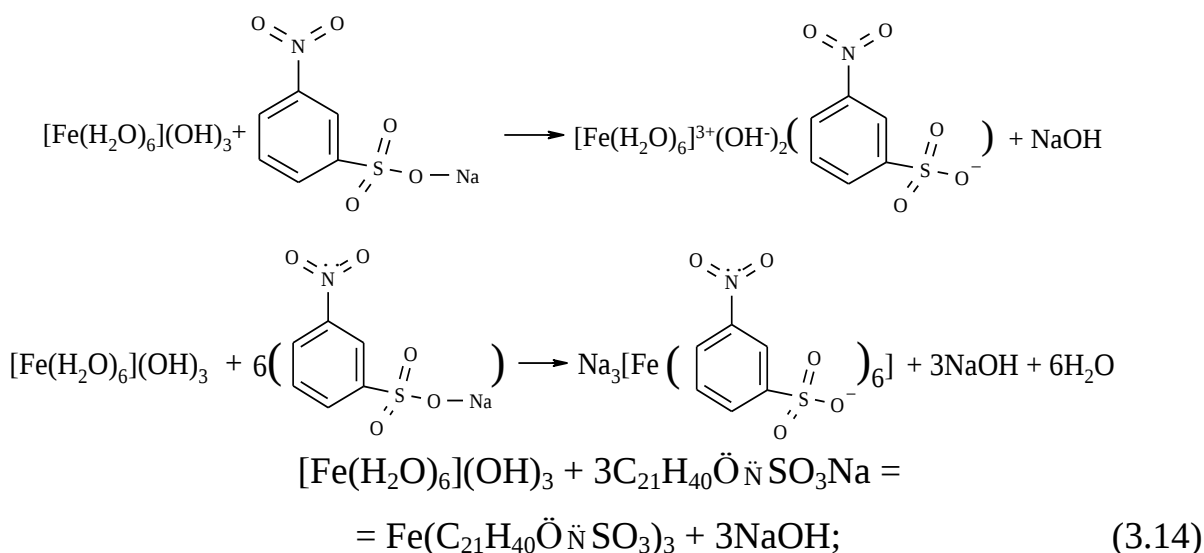
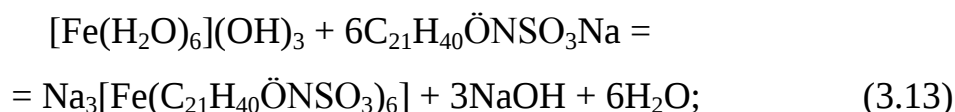
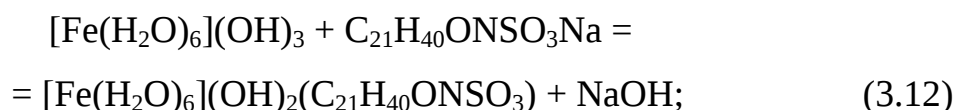
3 стадія – взаємодія феруму (ІІІ) гідроксиду з ПАР та барвниками, присутніми у СВ:

з лудиголом:

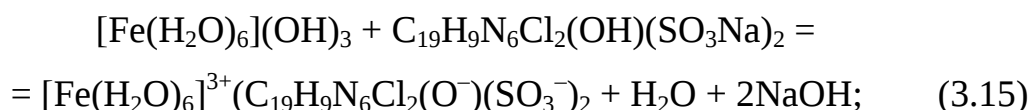


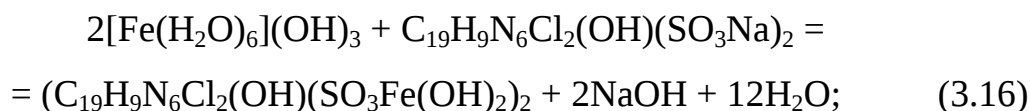
або в структурному вигляді:

з метаупоном:

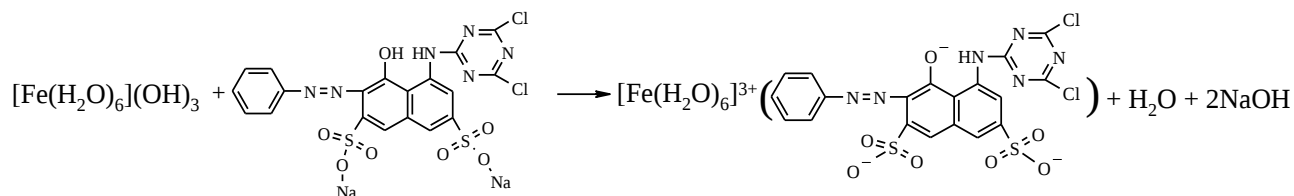


з барвником активним яскраво-червоним 5 CX:





або в структурному вигляді:



Визначення достовірності запропонованого механізму очищення СВ від ПАР та барвника ферумвмісним коагулянтном підтверджено термодинамічно з розрахунком теплоти перебігу реакції з використанням термодинамічних характеристик вихідних речовин та продуктів реакції (табл. 3.3).

Таблиця 3.3

Розрахункові термодинамічні характеристики реагентів

Забрудник	$\Delta H^{умв}$, кДж/моль
Лудигол ($\text{C}_6\text{H}_4\text{NO}_2\text{SO}_3\text{Na}$)	-523,8
$\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{C}_6\text{H}_4\text{NO}_2\text{SO}_3)$	-1382,3
Метаупон ($\text{C}_{21}\text{H}_{40}\text{ONSO}_3\text{Na}$)	-840,0
$\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{C}_{21}\text{H}_{40}\text{ONSO}_3)$	-2002,8
барвник активний яскраво-червоний 5 CX ($\text{C}_{19}\text{H}_9\text{N}_6\text{Cl}_2(\text{OH})(\text{SO}_3\text{Na})_2$)	-838,0
($\text{C}_{19}\text{H}_9(\text{OH})\text{N}_6\text{Cl}_2(\text{SO}_3\text{Fe}(\text{OH})_2)_2$)	-3078,0
$\text{Fe}(\text{OH})_3$	-825,4
NaOH	-427,4

Зміну ентальпії в ході реакції розраховуємо за формулою:

$$\Delta H_{xp} = \sum \Delta H_{прод}^{умв} - \sum \Delta H_{вих.реч.}^{умв}, \quad (3.17)$$

де ΔH_{xp} – зміна ентальпії в ході хімічної реакції, кДж/моль;

$\Sigma \Delta H_{prod}^{утв}$ – сума ентальпій утворення продуктів реакції, кДж/моль;

$\Sigma \Delta H_{вихреч}^{утв}$ – сума ентальпій утворення вихідних речовин реакції, кДж/моль.

Таблиця 3.4

Розрахункові теплові ефекти реакцій

Номер реакції	ΔH_{xp} , кДж/моль
Реакція (3.7)	–591,8
Реакція (3.9)	–760,0
Реакція (3.10)	–1444,0

Можна припустити, що в процесі утворення сильно гідратованої речовини в водній фазі не відбувається значної зміни ентропії, тоді зміна енергії Гіббса відповідає тільки зміні ентальпії. Зважаючи на це, припускаємо, що розраховані теплові ефекти реакцій вказують на термодинамічну ймовірність перебігу запропонованого механізму сорбції органічних барвників на поверхні пластівців феруму (III) гідроксиду.

4 ФОРМАТУВАННЯ ТЕКСТОВИХ ДОКУМЕНТІВ

Засвоєння основ форматування текстових документів дозволить правильно представити отримані результати наукової роботи в РР та зберегти однаковий формат всього документу.

Стилі та форматування

Для використання стилю форматування необхідно у вкладці «Формат» здійснити команду:

Формат → «стили и форматирование».

При цьому доступні:

Мій заголовок

Мій підзаголовок

Мій пункт

Мій підпункт

Мій текст

Для створення стилів необхідно користуватись вкладками:

Шрифт

Абзац (обов'язково виставити рівні від 1 до 4 та положення на сторінці)

Формування автозмісту

Для створення автозмісту необхідно користуватись вкладками:

«Вставка → ссылка → оглавление и указатели → оглавление»

Створення гіперпосилання

Для створення посилання на інший документ (файл) в тексті необхідно вибрати частину тексту, що відповідає посиланню та знайти на панелі налаштувань

«вставка → гиперссылка»

і вибрати вкладку « зв'язатися з файлом (вебсторінкою)» та вибрати необхідний файл.

Для створення гіперпосилання в тексті необхідно створити

закладку

виділити слово в тексті, яке буде відповідати початку посилання та увійти в надстройку

«вставка →закладка»,

потім ввести назву (одним словом без розривів) та натиснути

«добавить»

для переходу по гіперпосиланню необхідно увійдіть в надстройку

«вставка →гиперссылка», а потім натиснути комбінацію клавіш ctrl+ клік лівою клавішею мишки.

5 ОСНОВИ СТВОРЕННЯ НАУКОВОЇ ПРЕЗЕНТАЦІЇ

Доповідь за результатами РР повинна тривати 5–10 хвилин і бути доповненою матеріалами створеної презентації. Доповідачу необхідно зосередитися на постановці задачі основних результатах та їх обговоренні. Рекомендується в доповіді кольором або жирним шрифтом виділити ті ключові фрагменти, на яких доповідач зупиняється при обговоренні. Наприклад, доповідач говорить: «в даному функціоналі введено штрафний доданок, який дозволяє...». Штрафний доданок можна виділити кольором; але пояснювати саму формулу — зайва деталізація і марна трата дорогоцінного часу. Якщо вона когось зацікавить, то він запитав або звернеться за деталями до основного тексту роботи. На захисті обов'язково потрібно підкреслити, що саме запропоновано особисто автором в роботі. Вітається строгий стиль презентації (оптимально — чорний на білому фоні) і чітка промова без зайвих слів.

В презентації повинно бути чітко виділено предмет досліджень, мету роботи та основні наукові здобутки.

Основні етапи підготовки презентації :

1. Складання плану презентації, виділення основних ідей першого і другого рівня. Структура наукової презентації приблизно така ж, як і структура наукової статті:
 - постановка задачі;
 - відомі результати і проблеми;
 - критерії, за якими передбачається оцінити якість рішення;
 - цілі даної роботи;
 - умови і результати експериментів;
 - основні результати автора;
 - на останньому слайді — перерахунок основних результатів роботи.

2. Макет кожного слайда (для початку це можна робити вручну на папері), при цьому потрібно відповісти на запитання:

- яка ідея цього слайда розкриває основну ідею всієї презентації?
- що буде на слайді?
- що буде говоритися?
- як буде зроблений перехід до наступного слайду?

3. Підготовка презентації за допомогою Power Point.

Основні вимоги до презентацій :

1. Інформація на слайдах повинна добре читатися:

Слід уникати великої кількості тексту, захаращених слайдів і занадто дрібного або занадто великого шрифту.

Слід обмежити кількість використовуваних шрифтів, стилів фону, і графічних тем у слайд-шоу.

2. Обрані засоби візуалізації повинні бути адекватними змісту.

3. Кількість і зміст слайдів повинні бути адекватні змісту й тривалості виступу.

Приклад правильного оформлення презентації наведено в додатку В.

Приклади типових помилок

Далі наведені приклади слайдів, що містять помилки, які зустрічаються найчастіше.

REDLAB

Учебный центр REDCENTER

Год основания – **1992**

Корпоративный спектр услуг по обучению

- Реализация комплексных программ обучения
- Разнообразные формы обучения (ILT:дневная, вечерняя; ELT, смешанная, у заказчика)
- Управление проектами по обучению персонала
- Поддержка после обучения

Авторизованное обучение

- Партнерство с ведущими корпорациями-вендорами
- Качество обучения гарантируется поставщиком технологии

Обучение в форме тренинга

Форма обучения, целью которой является практическое освоение продуктов и технологий

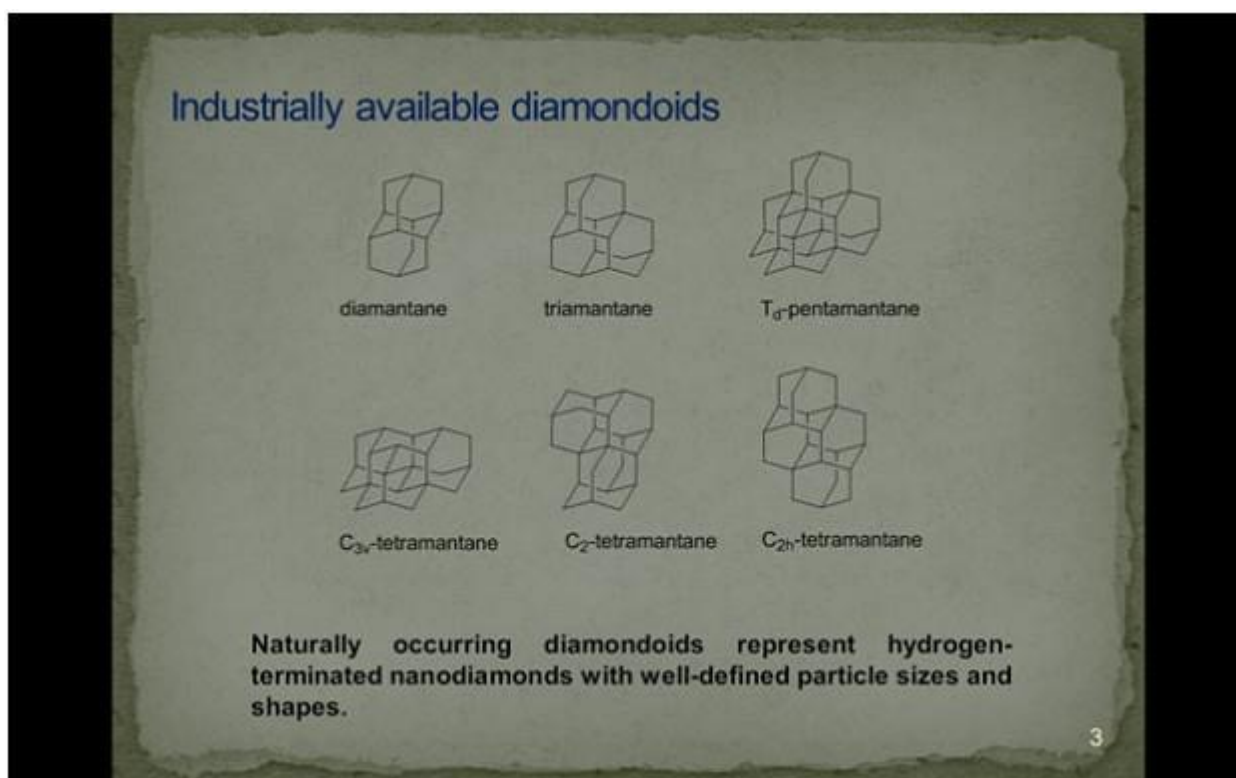



Рис. 5.1 Характеристика помилков: занадто темний фон

Для розробки промислового сушильного агрегата була вибрана конструкція сушарки фонтанучого шару з локальними ділянками фонтанування, з'єднаними послідовно, які створюють направлений рухомий шар, гідродинамічна структура якого близька до ідеального витіснення. Присутність ретурного шару і інтенсивного перемішування попереджає грудкування бішофіту. Вологі кристали бішофіту дуже крихкі. Їх транспортування і завантаження в сушарку вимагало нових рішень, які були втілені в конструкції сушильного агрегата (мал. 2).

- Вологі кристали бішофіту із центрифуги 1 подаються похилим транспортером 2 в завантажувальний пристрій 3 сушарки 4, яке розподіляє його в завантажувальній зоні сушарки. Вологий бішофіт інтенсивно змішується з частково висушеним, який виконує роль ретура. Цим попереджується утворення грудок.
- Під дією гідралічного напору зони завантаження шар бішофіту, який обдувається гарячим повітрям, інтенсивно сохне і переміщується в зону охолодження, где охолоджується холодним повітрям. Охолоджений бішофіт пневмотранспортом 6 подається в бункер-накоплювач 7, відпрацьоване транспортує повітря поступає на всас вентилятора 8 і разом з відпрацьованим теплоносієм сушарки, попередньо очищеним в циклоні 5, подається вентилятом 8 в скруббер 9 на кінцеву очистку. Очищене повітря із скрубера викидається в атмосферу. Початковий теплоносій підігрівається в камері спалювання 10 і подається вентилятором 11 в сушарку 4.

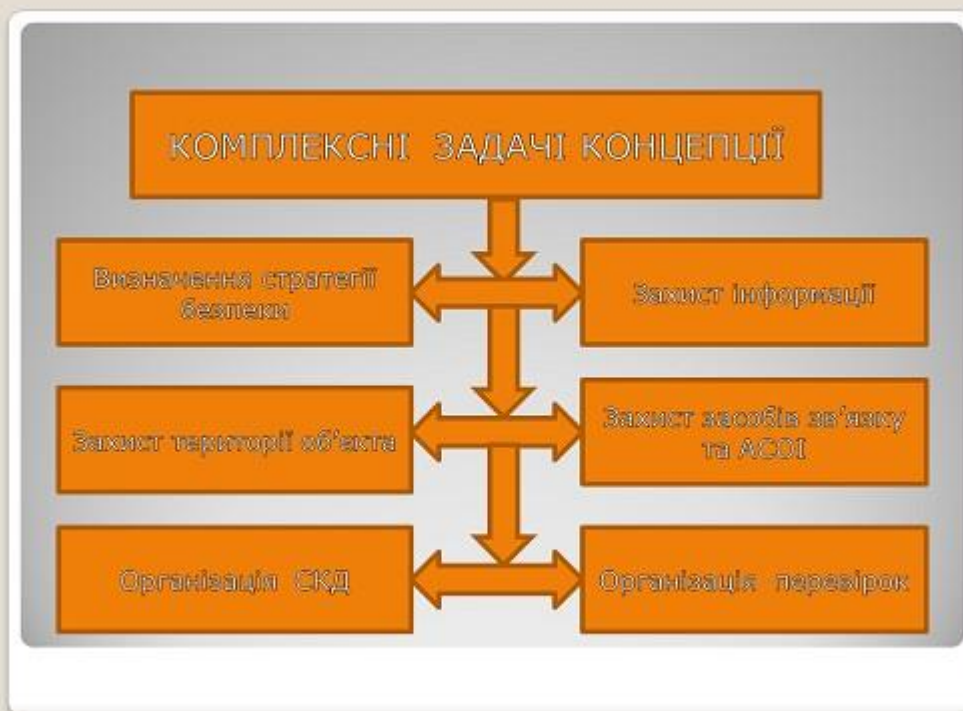
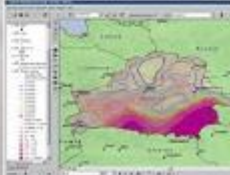


Рис. 5.2 Характеристика помилок: забагато текстової інформації

Для решения многих задач часто удачными оказываются нетривиальные пространственные решения. Это касается и категории задач устойчивого развития (Повестка 21):	 
Производство и поддержка пространственной (географической) информации (по определению)	
Поддержка широкого доступа к (экологический) информации (т.е., инфраструктуре пространственных данных)	
Решение пространственных проблем (т.е., пространственный анализ и экологическое моделирование)	
Поддержка партнерского принятия решения (т.е., группового решения пространственных задач)	
Поддержка общественного участия в принятии решений	
 WORLD DATA CENTER	

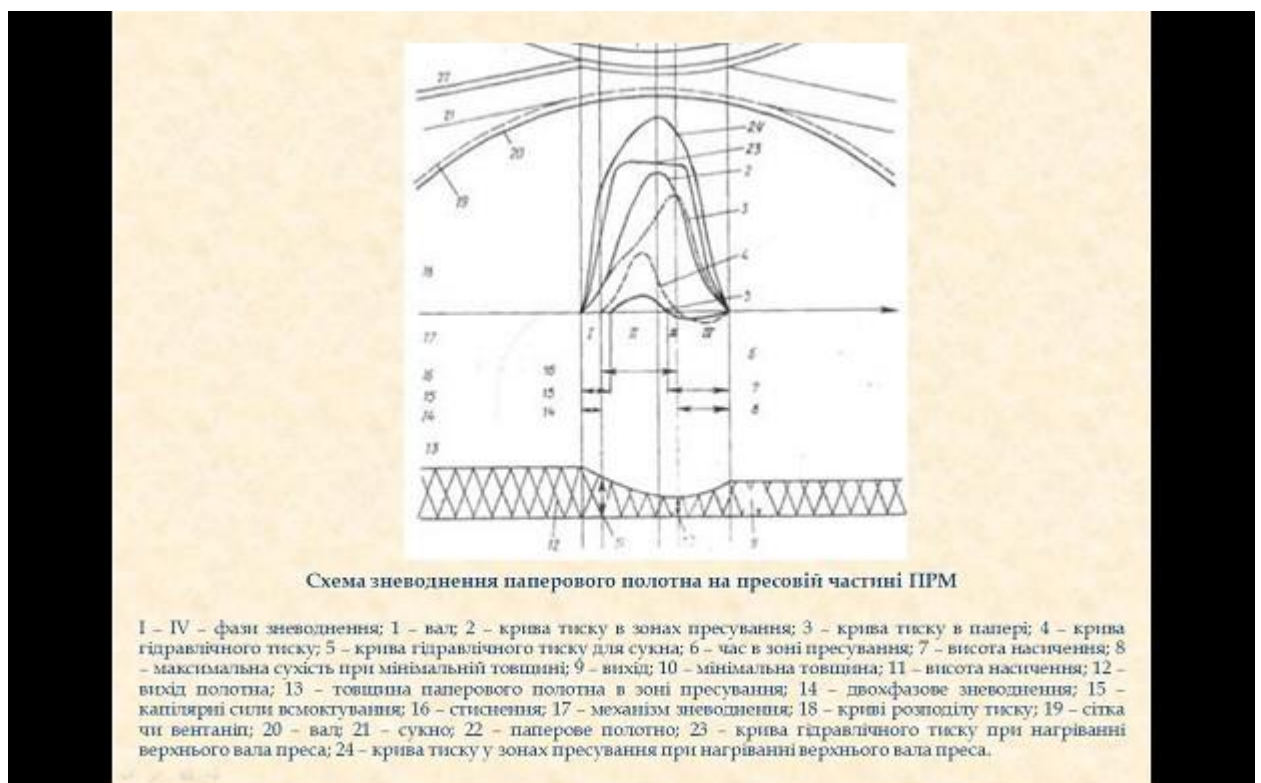


Рис. 5.3 Характеристика помилок: графічний матеріал не інформативний або містить забагато інформації

6 РОЗРОБКА ПРОГРАМИ В СЕРЕДОВИЩІ VBA ДЛЯ НАУКОВО-ТЕХНІЧНИХ РОЗРАХУНКІВ

Важливою частиною виконання даного завдання є закріплення навичок створення програм в середовищі VBA для потреб науково-технічних розрахунків. За основу використовують або програму створену в MS Basic або алгоритм розрахунку.

Завдання може бути виконане з використанням одного з 3 методів візуалізації програм в середовищі VBA:

- з використанням макрокоманд Excel;
- з використанням екранних форм;
- з використанням листа для вводу виводу даних;
- поєднання усіх вище перерахованих методів вводу – виводу даних.

Приклад виконання завдання

Лабораторна робота №1

Робота з макросами.

Знайомство з VBA на прикладі

розрахунку трубчатого реактора

конверсії природного газу

Роботу виконала студентка ХТФ
гр. ХН-32 ***Співак Вікторія***



Параметр	Значення
Час контактування, с	0,31682
Час контакту з ур.ст.вик.Kat	1,58408
Об'єм каталізатора, м куб	19,063
Число труб	195

Рис. 6.1 Форма виводу розрахункових даних

Текст програми наведено в додатку Г.

Список рекомендованой литературы

1. Основы расчётов в HyperChem/под. ред. Великанова Д. А. -Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук [Электронное издание]- Режим доступа:
www.kirensky.ru/books/Book/Program%20HyperChem/chapter_01.htm
2. Excel- это не сложно[электронный портал]- Режим доступа:
<http://www.excel-vba.ru/>
3. Зеликман А. Н. Теория гидрометаллургических процессов / Зеликман А. Н., Вольдман Г. М., Беляевская Л. В. – М. : Металлургия, 1983. – 424 с.
4. Полезные статьи - программирование на Visual Basic[электронный портал]- Режим доступа: <http://vbrus.narod.ru/Info2.htm>
5. Учебник по VBA - Курс лекций по основам информатики и программированию на VBA для начинающих. [электронный портал]- Режим доступа: <http://www.mini-soft.ru/soft/vba/index.php>

ДОДАТОК А Зразок оформлення титульного аркуша
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
"КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ"

Хіміко-технологічний факультет
Кафедра технології неорганічних речовин та загальної хімічної технології

РОЗРАХУНКОВА РОБОТА З ДИСЦИПЛІНИ

ІНФОРМАЦІЙНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

на тему:

Результат захисту ____ балів

Дата

Керівник:

_____/ст. викладач, к.т.н. Косогіна І.В.

підпис

посада, прізвище

_____/асистент, к.т.н. Кримець Г.В.

підпис

посада, прізвище

Виконавець:

Студент групи ХН -ХХ

_____/Петренко В.О./

підпис

прізвище

Київ 2013

ДОДАТОК А Зразок завдання

Хіміко-технологічний факультет НТУУ „КПІ”

Кафедра технології неорганічних речовин та загальної хімічної технології

ЗАВДАННЯ

на розрахункову роботу

з дисципліни „ Інформаційне забезпечення наукових досліджень ”

студента гр. ХН-ХХ _____

прізвище, ім'я, по батькові

Тема розрахункової роботи:

Завдання 1. Представити наукову складову за тематикою магістерської дисертації у вигляді презентації у PowerPoint;

Завдання 2. Оформити запит на проведення та виконання науково-дослідної роботи за зразком у середовищі Microsoft Word;

Завдання 3. Провести розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових з використанням метода Караша у середовищі Microsoft Word та здійснити розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових і їх просторове моделювання з використанням програмного продукту HyperChem Professional;

Завдання 4. Створити програму для науково-технічних розрахунків у середовищі VBA.

Термін подання РР до захисту 1 грудня 201_ р.

Дата видачі завдання 1 жовтня 201_ р.

Керівник

_____ / І.В.Косогіна /

_____ / Г.В. Крimeць /

підпис

П.І.Б.

Завдання прийняв до виконання

підпис

ДОДАТОК Б Форма запиту

ЗАПИТ

на здобуття гранту НТУУ "КПІ" для фінансової підтримки студентської (аспірантської) науково-дослідної роботи

(назва роботи)

1. Структурний підрозділ університету

2. Напрямок науково-дослідної роботи

☐ природничі науки; ☐ технічні науки; ☐ гуманітарні науки

3. Керівник та автор(и) науково-дослідної роботи

ПІБ керівника, автора(-рів), місце роботи (навчання)

Додаткові відомості (список наукових праць здобувача(-ів), інформація про здачу здобувачем(-ами) іспитів кандидатського мінімуму, отриманих іменних стипендіях та преміях, участі у конкурсах, конференціях та ін).

4. Опис науково-дослідної роботи

4.1. Мета науково-дослідної роботи

4.2. Актуальність та новизна науково-дослідної роботи

4.3. Основні завдання науково-дослідної роботи .

4.4. Галузь використання і очікувані результати.

5. Необхідність захисту об'єктів інтелектуальної власності за проблематикою проекту та можливість продажу ліцензій на їх використання.

Декан факультету /інституту/
_____/ печать

Керівник роботи
_____/

Керівник підрозділу

Автори : _____/

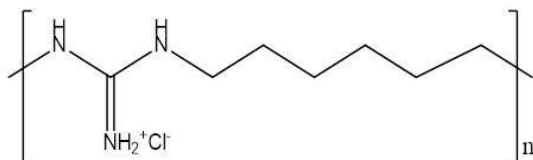
Куратор НДР

_____/

**Фізико-хімічні засади очищення води
від біоцидного препарату на основі
полігексаметиленгуанідину (ПГМГ)**

Магістрант: *Сусь Марія*
Науковий керівник: *Астрелін І. М.*
Науковий консультант: *Мітченко Т. Є.*

ПГМГ – катіонний поліелектроліт комплексної дії



Властивості ПГМГ

- широкий спектр біоцидної дії;
- флокулююча дія;
- здатний до комплексоутворення з іонами металів.

Використовується для дезінфекції та знезараження:

- інструментів медичного призначення;
- водозабірних споруд і технологічного обладнання;
- засобів зберігання і транспортування мінеральних вод;
- плавальних та лікувальних басейнів;
- стічних вод;
- води в системах централізованого господарсько-питного водопостачання;
- ліній розливу фасованих питних вод і контейнерів для їх зберігання.

Рекомендована залишкова концентрація ПГМГ в питній воді < 0,1 – 1,0 мг/дм³

Мета та завдання дослідження

Мета: вивчення фізико-хімічних основ процесу видалення ПГМГ з води іонообмінними смолами та визначення найбільш доцільних умов його перебігу

Завдання:

- Дослідити сорбційну здатність різних іонітів по відношенню до ПГМГ та вибрати оптимальний;
- Визначити механізм сорбційної взаємодії ПГМГ з іонітом;
- Визначити оптимальні умови проведення процесу видалення ПГМГ обраним іонітом;
- Визначити можливість і параметри глибокої очистки води від ПГМГ.

3

Об'єкти дослідження

Характеристики іонітів

Марка іоніту	Функціональний тип*	Природа матриці**	Тип пористої структури	Гранулометричний склад, мм
Dowex MAC-3	СЛК	АДВБ	Макропористий	0,35 – 1,2
Dowex HCR-S	СИК	СДВБ	Гелевий	0,3 – 1,2
Dowex Marathon C	СИК	СДВБ	Гелевий	0,585 ± 0,05
Dowex Marathon MSC	СИК	СДВБ	Макропористий	0,55 ± 0,05
Amberlite IRA-67	СЛО	АДВБ	Гелевий	0,5 – 0,75
Dowex 66	СЛО	СДВБ	Макропористий	0,3 – 1,2
Dowex MWA-1	СЛО	СДВБ	Макропористий	0,3 – 1,2
Amberlite IRA-458	СИО	АДВБ	Гелевий	0,6 - 0,9
Dowex Marathon MSA	СИО (I тип)	СДВБ	Макропористий	0,64 ± 0,05
Dowex Marathon A	СИО (I тип)	СДВБ	Гелевий	0,575 ± 0,05
Dowex Mono A2-500	СИО (II тип)	СДВБ	Гелевий	0,575 ± 0,05

4

* СЛК – слабкокислотний; СИК – сильнокислотний; СЛО – слабкоосновний; СИО – сильноосновний.

** АДВБ – акрил-дивінілбензольна матриця; СДВБ – стирол-дивінілбензольна матриця.

Умови експериментів

○ Статичні

$C(\text{ПГМГ}) = (5 \div 180) \text{ мг/дм}^3$

Маса наважки іоніту – $30 \div 60 \text{ мг}$;

Об'єм розчину – $0,1 \div 0,2 \text{ дм}^3$;

Час контакту - 48 год;

Періодичне струшування.

○ Динамічні

$C(\text{ПГМГ}) = 5 \text{ мг/дм}^3$;

Об'єм заправки катіоніту – 10 см^3 ;

Швидкість пропускання робочого розчину – $200 \text{ см}^3/\text{год}$

5

ПОРІВНЯЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ СОРБЦІЙНОЇ ЗДАТНОСТІ РІЗНИХ ІОНІТІВ ПО ВІДНОШЕННЮ ДО ПГМГ

Марка іоніту	Функціональна група	Вміст ПГМГ в іоніті, мг/г	Kd
КАТІОНІТИ			
Dowex MAC-3	карбоксильна	150	10956
Dowex HCR-S	сульфо-	14.6	269
Dowex Mararhon C	сульфо-	5.0	92
Dowex Marathon MSC	сульфо-	5.0	87
АНІОНІТИ			
Amberlite IRA-67	диметил амін	10.0	180
Dowex 66	диметил амін	13.1	239
Dowex MWA-1	диметил амін	5.0	87
Amberlite IRA-458	триметил амін	7.0	123
Dowex Marathon MSA	триметил амін	7.5	133
Dowex Marathon A	триметил амін	5.0	85
Dowex Mono A2-500	диметилетанол амін	7.0	123

6

Методи дослідження механізму взаємодії ПГМГ з катіонітом Dowex MAC - 3

Для встановлення механізму використовували
методи:

- ІЧ – спектроскопії;
- Стереомікроскопії;
- Атомно-абсорбційної спектроскопії;
- Комплексонометрії;

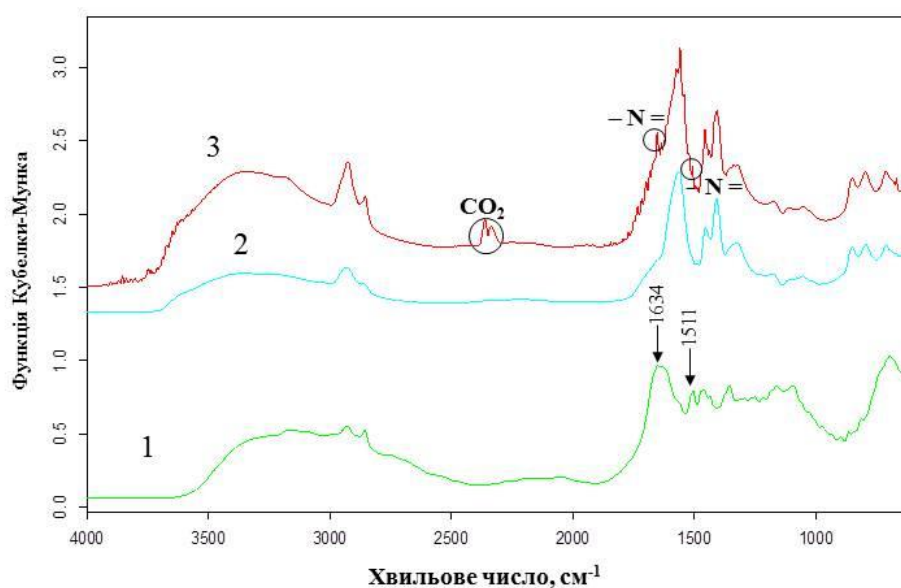
а також кінетичні та рівноважні характеристики
процесу сорбції ПГМГ катіонітом Dowex MAC-3.

7

ІЧ-спектроскопічні дослідження

ІЧ-спектри:

- 1 – ПГМГ
- 2 – свіжого катіоніту Dowex MAC-3
- 3 – імпрегнованого ПГМГ катіоніту Dowex MAC-3



8

Дослідження іонообмінного механізму взаємодії

(Система 1)

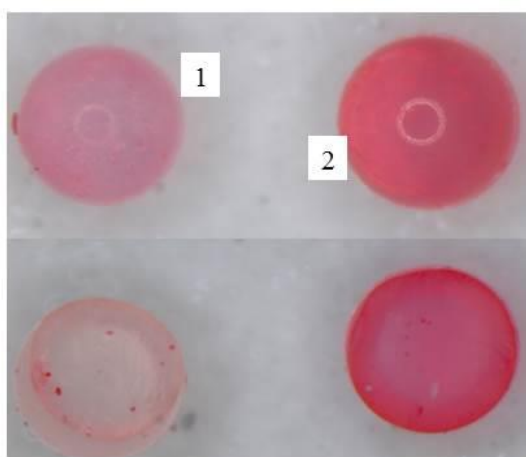


Система 1 (Dowex MAC-3/Na⁺)

Стан системи	Вміст компоненту, мг-екв			
	В розчині		В сорбенті	
	Na	ПГМГ	Na	ПГМГ
Вихідний стан	0	0.116	0.269	0
Рівноважний стан,	0.025	0.092	0.244	0.024
Сорбовано ПГМГ/ десорбовано Na	0.024		0.025	

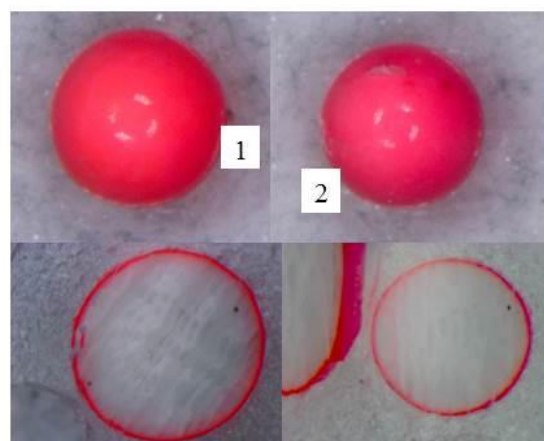
9

Стереомікроскопічні дослідження



Dowex MAC-3

1 – свіжий забарвлений еозином;
2 – імпрегнований ПГМГ і забарвлений еозином



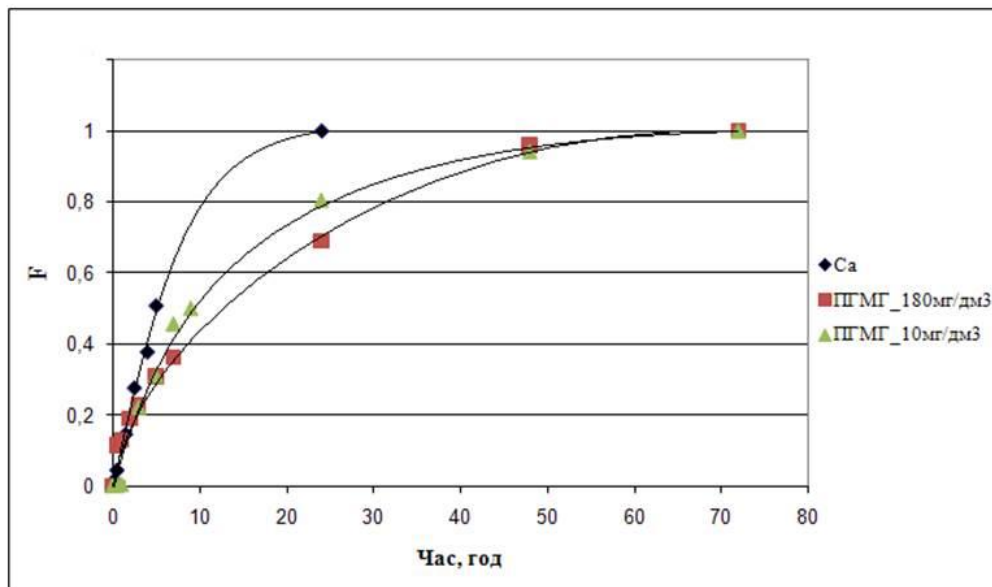
Dowex Marathon MSA

1 – свіжий забарвлений еозином;
2 – імпрегнований ПГМГ і забарвлений еозином

10

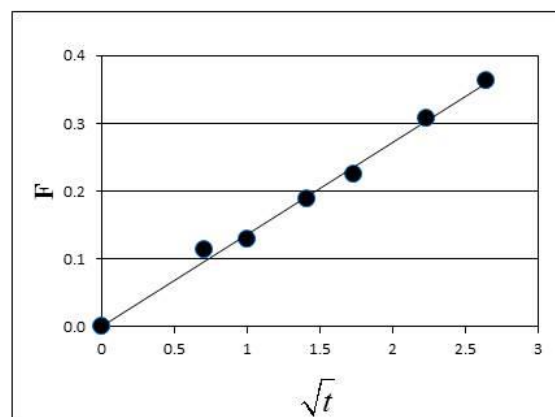
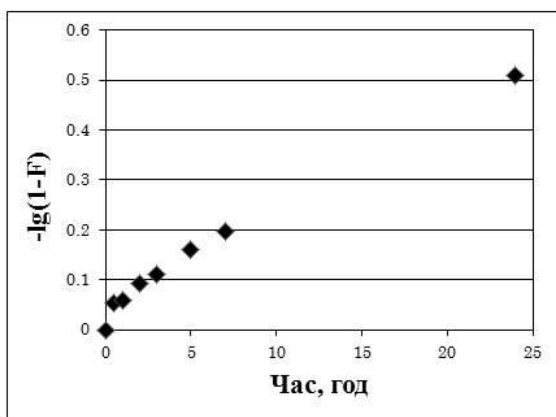
Дослідження кінетичних закономірностей процесу сорбції ПГМГ та Ca^{2+} з води

Кінетичні криві сорбції ПГМГ та Ca^{2+} катіонітом Dowex MAC-3



11

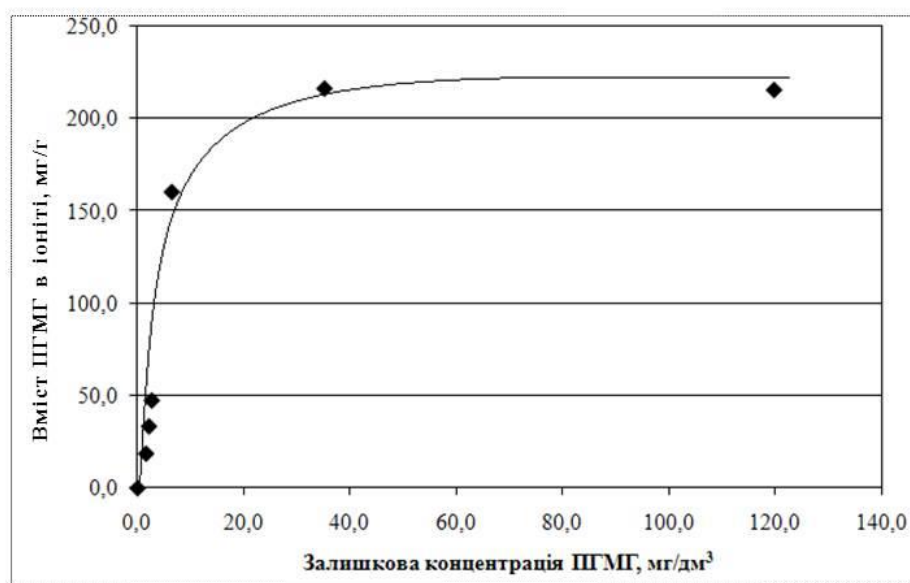
Визначення лімітуючої стадії та кінетичних параметрів процесу сорбції ПГМГ катіонітом Dowex MAC-3



Компонент	Кінетичні параметри сорбції	
	$D, \text{cm}^2/\text{c}$	$\tau_{1/2}, \text{хв}$
ПГМГ(180 мг/дм ³)	$4.7 \cdot 10^{-10}$	720
ПГМГ(10 мг/дм ³)	$5.63 \cdot 10^{-10}$	540
Ca^{2+} (2.2 мг/дм ³)	$1.05 \cdot 10^{-9}$	300

12

Рівноважні характеристики процесу сорбції ПГМГ катіонітом Dowex MAC-3



Ізотерма сорбції ПГМГ катіонітом Dowex MAC-3

$$\Gamma = 16480$$

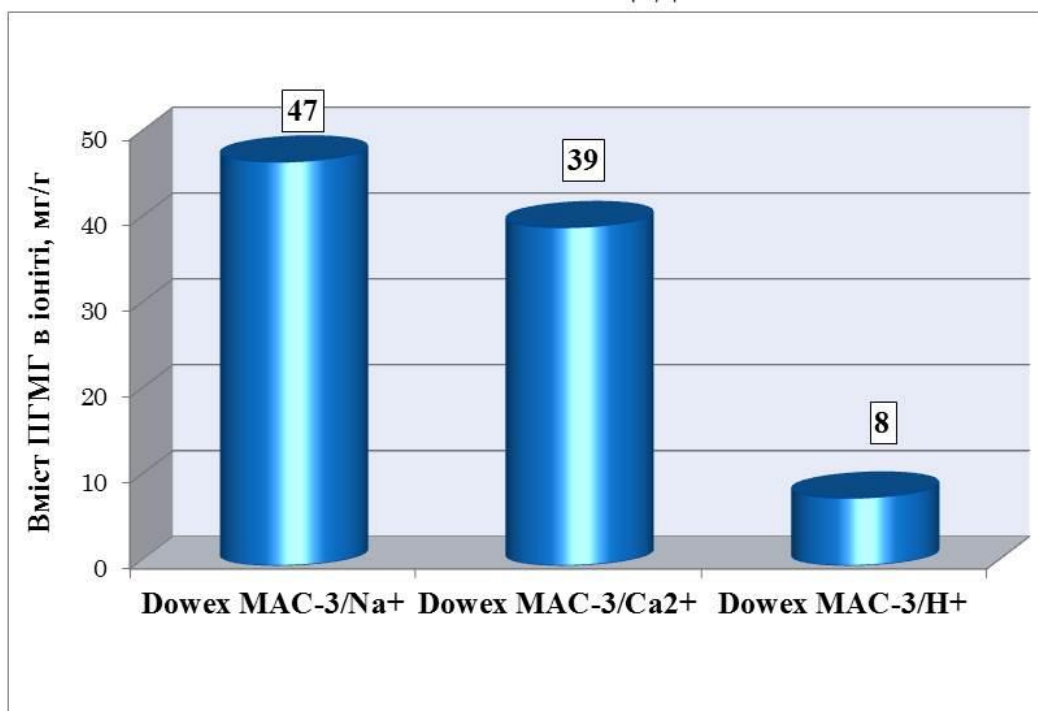
13

Дослідження впливу ряду факторів на сорбцію-десорбцію ПГМГ на катіоніті Dowex MAC-3/Na

- Іонна форма катіоніту Dowex MAC-3
- Присутність у розчині:
 - іонів жорсткості (Ca^{2+} , Mg^{2+});
 - хлориду натрію NaCl;
 - гідроксиду натрію NaOH;
 - кислота хлороводнева HCl.

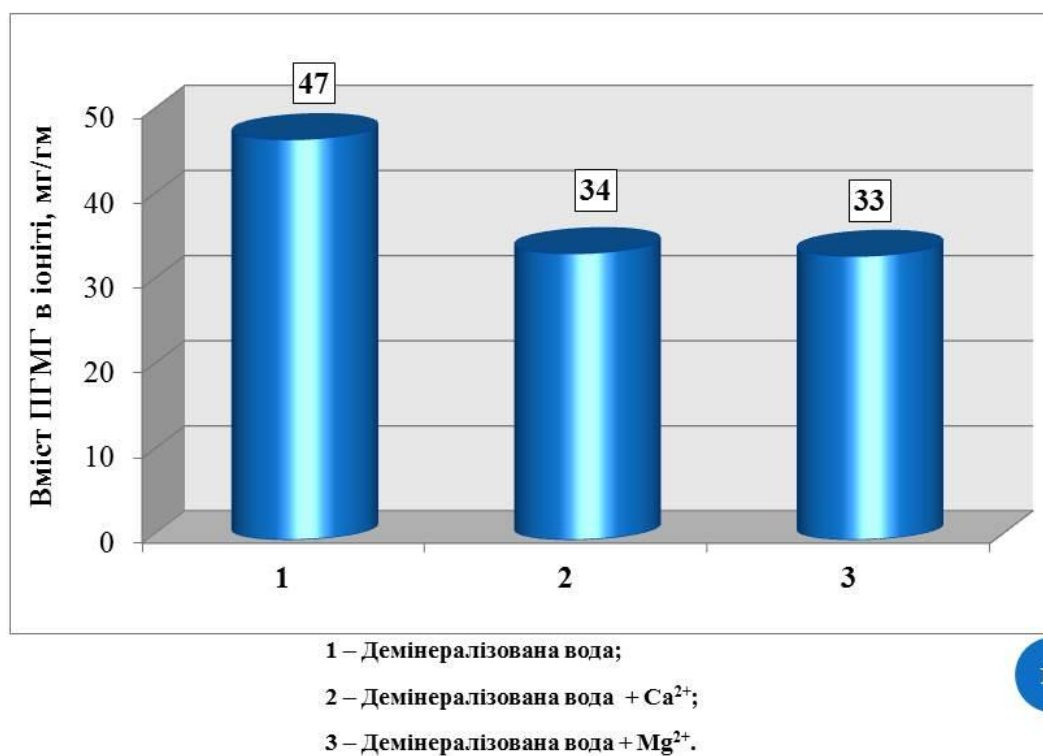
14

Сорбційна здатність різних іонних форм катіоніту Dowex MAC-3 щодо ПГМГ



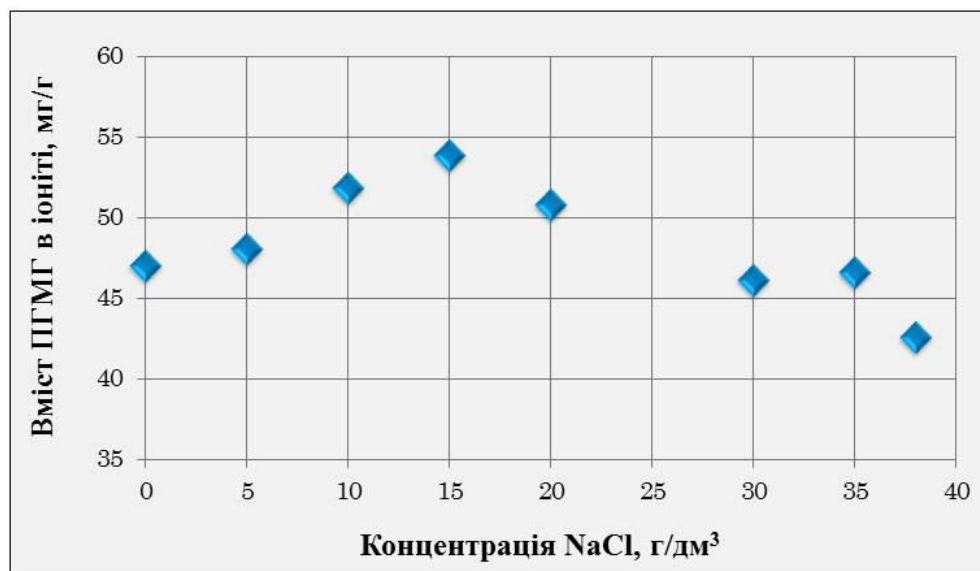
15

Вплив присутності іонів жорсткості на сорбцію ПГМГ катіонітом Dowex MAC-3/Na



16

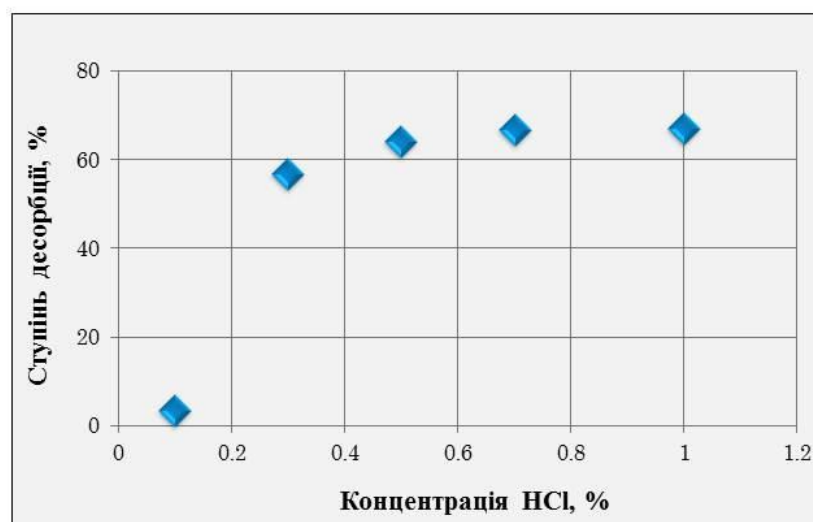
Вплив вмісту NaCl в водному розчині на сорбцію ПГМГ катіонітом Dowex MAC-3/Na



17

Дослідження десорбції ПГМГ з катіоніту Dowex MAC-3

Реагент	0.5% HCl	5% HCl	0.5% NaOH	5% NaOH
Ступінь десорбції, %	68.8	49.5	0.05	5.7



18

Визначення сорбційних характеристик процесу видалення надлишку ПГМГ з води в динамічних умовах



Вихідна крива сорбції ПГМГ катіонітом Dowex MAC-3

19

Висновки

- Встановлено, що ефективність сорбції ПГМГ катіонітом Dowex MAC-3 залежить від присутності різних катіонів в воді і збільшується в ряду:
$$\text{H}^+ < \text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+} < \text{Na}^+$$
- Визначені найбільш доцільні умови проведення процесу видалення ПГМГ з води катіонітом Dowex MAC-3:
 - Іонна форма катіоніту – Na;
 - Склад розчину – відсутність іонів жорсткості;
 - Вміст NaCl – не більше 15 г/дм³;
 - Десорбційний реагент – HCl з концентрацією 0.5-1.0%.
- Показано принципову можливість видалення надлишку ПГМГ з води після стадії дезінфекції до значень, передбачених нормами, за допомогою катіоніту Dowex MAC-3.

20

**ДЯКУЮ ЗА
УВАГУ!**

21

ДОДАТОК Г Приклад програмного елементу в середовищі VBA

```
Private Sub CommandButton2_Click()  
20 N = 100  
Q = Val(UserForm1.TextBox1.Value)  
R0 = Val(UserForm1.TextBox2.Value)  
A1 = Val(UserForm1.TextBox3.Value)  
P = Val(UserForm1.TextBox4.Value) * 10  
T = Val(UserForm1.TextBox5.Value)  
X2 = Val(UserForm1.TextBox6.Value)  
Y = Val(UserForm1.TextBox7.Value)  
B1 = Val(UserForm1.TextBox8.Value)  
B2 = Val(UserForm1.TextBox9.Value)  
B4 = Val(UserForm1.TextBox10.Value)  
C = Val(UserForm1.TextBox11.Value)  
A = Val(UserForm1.TextBox12.Value)  
K3 = Val(UserForm1.TextBox13.Value)  
K = -9840 / T + 8.343001 * Log(T) / Log(10) - 0.002059 * T + 0.000000178 * T ^  
2 - 11.96  
K1 = 10 ^ K  
T0 = 68.5 * B4 ^ 0.46 + 823  
K2 = 10 ^ (6.3 - 4720 / T0)  
S1 = 0  
X1 = 0  
H = (X2 - X1) / N  
140 X1 = X1 + H  
X3 = (X1 - X1 * Y) * (3 * X1 + X1 * Y) ^ 3 * P ^ 2  
X4 = K1 * (1 - X1) * (A1 - X1 - X1 * Y) * (1 + A1 + 2 * X1) ^ 2  
If X3 < X4 Then GoTo 190  
MsgBox "Завищена температура для даної X"  
GoTo 20
```

190 X5 = (3 * X1 + X1 * Y) / (1 - X1) / (1 - X3 / X4)

S1 = S1 + X5 * H

If (X2 - X1) > 0 Then GoTo 140

T1 = P * S1 / K2 / (1 + A1)

T2 = T1 / C

V0 = (R0 + 0.1 * R0) * Q / 24

V1 = T2 * V0 * (1 + A1) * T * K3 / 3600 / A / P / 273

N1 = (V1 * 4) / (B4 * 3.14 * (B1 - B2 * 2) ^ 2)

T1 = FormatNumber(T1, 3)

T2 = FormatNumber(T2, 3)

V1 = FormatNumber(V1, 3)

UserForm2.TextBox2 = T1

UserForm2.TextBox3 = T2

UserForm2.TextBox4 = V1

UserForm2.TextBox5 = CInt(N1)

UserForm2.Show

End Sub