

ленных выше задач планирования, включенных в подсистему обработки и представления данных.

СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ И СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ: МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Виноградова М.Г., Артемьев А.А., Папулов Ю.Г.
*Тверской институт экологии и права, Тверь,
Клинский институт экономики и права, Клин,
Тверской государственный университет, Тверь*

Разработка теории и методов расчета свойств веществ, исходя из сведений о строении молекул, составляет фундаментальную научную задачу химии [1].

Наличие надежных расчетных методов позволяет предсказывать характеристики вещества (прежде, чем оно синтезировано, а свойство измерено) и тем самым выбрать из многих (еще не изученных и даже не полученных) соединений те, которые (согласно прогнозу) удовлетворяют поставленным требованиям. Это закладывает научные основы создания новых веществ и материалов с заранее заданными свойствами.

В принципе все физико-химические свойства можно вывести из фундаментальных положений квантовой механики и физической статистики. Однако полные неэмпирические расчеты (*ab initio*) весьма трудоемки и дорогостоящи. Различные же упрощения (на полуэмпирическом уровне) не всегда дают должную количественную информацию (из-за низкой точности). Ясно, что нужны феноменологические методы, которые более просты в обращении и успешно справляются с решениями задач массового расчета и прогнозирования, хотя и требуют для своего использования определенное количество исходных (реперных) данных.

Без таких методов невозможно создание информационно-поисковых систем, полноценных баз и банков данных по свойствам органических соединений (число которых исчисляется миллионами), целенаправленный поиск новых структур, решение задач молекулярного дизайна. Всё это требует дальнейшего развития теории, связывающей свойства веществ со строением молекул, расширения исследований по математической химии (теории графов, комбинаторному анализу) и математическому моделированию.

Основной задачей работы является разработка расчетных методов исследования, явно (или неявно) основывающихся на идее разложения данного свойства вещества (молекулы) по свойствам, приходящимся непосредственно на внутримолекулярные валентные и невалентные взаимодействия атомов (атом-атомное представление).

Выбор этих методов определили следующие обстоятельства. Во-первых, ясные и глубокие исходные предпосылки, дающие возможность строить обоснованные расчётные схемы и тем самым избежать произвола в выборе параметров, не имеющих физического смысла; во-вторых, широта применения, позволяющая охватить такие мало изученные ряды соединений, как замещенные метана и его аналогов - силана, моногермана, станнына и т.д., где многие традици-

онные аддитивные схемы (например, схемы Бенсона или Лайдлера) ограничено применимы и неприменимы вовсе.

За последние десятилетия в теоретической химии широкое распространение получили представления топологии и теории графов. Они полезны при поиске количественных соотношений "структура - свойство" (КССС) и количественных соотношений "структура-активность" (КССА), а также в решении теоретико-графовых и комбинаторно-алгебраических задач, возникающих в ходе сбора, хранения и обработки информации по структуре и свойствам веществ. Поэтому важное значение имеет развитие расчетных методов исследования, получение с помощью них новой (ранее недоступной) информации.

Для решения поставленных задач использовались: методы линейной алгебры, в частности, матричного исчисления, методы комбинаторного анализа и теории перечисления графов, связанные, в свою очередь, с методами теории групп (групп симметрии и групп подстановок), методы статистической обработки численных данных и методы регрессионного анализа. Широко использовался метод наименьших квадратов (МНК), позволяющий находить наилучшие (наиболее вероятные) значения параметров и др.

Нами разработаны эффективные методы расчета физико-химических свойств веществ на основе концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов [1, 2]. Специальное внимание обращено на обоснование методов, их алгоритмическую и вычислительную реализуемость, определение параметров схем. Выявлены также взаимоотношения с другими методами, встречающимися в литературе.

Проведены численные расчеты энтальпий образования ($\Delta_f H^\circ_{298}$) X-замещенных этана (X = CH₃, Cl) и метилсилана (X = CH₃), а также энергий разрыва Э-Э связей в ряде замещенных. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными. Предсказаны новые значения.

Проведен анализ экспериментальных (и расчетных) данных по энергиям связей в различных классах органических (частично неорганических и элементо-органических) соединений. Проведена систематизация средних энергий связей и энергий разрыва связей в этих соединениях. Выявлены определенные закономерности.

Полученные результаты могут найти применение:

§ в промышленных производствах (по мере технологических запросов), связанных с переработкой углеводородов и их производных, позволят оптимизировать производственные процессы и снизить отходы сырья, повышая экономическую эффективность ряда отраслей и предприятий нефте, газо-химической промышленности.

§ при проведении дальнейших теоретических исследований по данной теме,

§ при подготовке справочных изданий по соответствующим свойствам и др.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 04-03-96703p2004Центр-а)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Папулов Ю.Г., Левин В.П., Виноградова М.Г. Стрoение вещества в естественнонаучной картине мира: Молекулярные аспекты. Учебное пособие, 2-ое издание. Тверь: ТвГУ, 2005. 208 с.
2. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчетные методы в атом-атомном представлении: Монография. Тверь: ТвГУ, 2002. 232 с.

ОПТИМИЗАЦИЯ ДОБЫЧИ И ЭФФЕКТИВНОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ГЕОТЕРМАЛЬНЫХ РЕСУРСОВ

Джаватов Д.К.

*Институт проблем геотермии ДНЦ РАН,
Махачкала*

Перспективы использования и высокая эффективность геотермальных вод в качестве энергетических ресурсов сегодня не вызывают сомнения, в связи с чем проблемы повышения эффективности их использования являются очень актуальными.

Одним из путей решения данной проблемы является разработка и исследование математических моделей соответствующих геотермальных систем.

Разработан ряд математических термодинамических моделей различных геотермальных систем (геотермальная циркуляционная система, комбинированная система геотермального теплоснабжения с пиковым отопителем, геотермальное месторождение и др.). На основе построенных моделей решен ряд оптимизационных задач, позволяющие улучшить их технико-экономические показатели (количество получаемой полезной тепловой энергии, удельные капитальные затраты и др.).

В частности, методами теории оптимального управления определен ряд технологических параметров этих систем: режим изменения давления нагнетания насосов, режим наращивания мощности пикового отопителя, время функционирования системы и др.

Численные расчеты, проведенные для геотермальных месторождений: Кизляр, Тарки, Тернаир, Ачису показали, что эффективность систем увеличивается на 10-40% при их эксплуатации в оптимальных режимах.

При использовании геотермальных теплоносителей в теплоснабжении более эффективны комбинированные системы, когда для покрытия пиковых нагрузок параллельно с геотермальной используется тепловая энергия, полученная на основе традиционных видов энергии (газ, мазут, электроэнергия).

Разработанные модели для такой системы и задачи, решенные методами теории оптимального управления, позволяют существенно снизить издержки ее эксплуатации и повысить эффективность. Проведенные расчеты для действующих систем геотермального теплоснабжения г. Кизляра показали, что эффективность комбинированных систем при их эксплуатации в оптимальном режиме может увеличиться на 20-40%, в зависимости от параметров системы.

Задачи оптимального управления, решенные на основе построенной математической термодинамиче-

ской модели геотермального месторождения, позволяют оптимизировать режим его разработки.

Резкого улучшения технико-экономических показателей можно достичь при получении больших дебитов с единичных скважин. Одним из путей интенсификации добычи термальной воды является создание дополнительных каналов в пласте для значительного увеличения поверхности фильтрации и зоны дренирования. Это достигается созданием горизонтального ствола, который расходуется на сотни метров по пласту.

Модели, построенные для геотермальных систем с горизонтальными стволами позволяют определить оптимальные значения таких параметров как диаметр скважины и длина горизонтального ствола, при минимуме функции удельных капитальных затрат.

Численные расчеты показывают, что производительность горизонтальных скважин растет более интенсивно, чем их стоимость.

Таким образом, оптимизация эксплуатации систем освоения ресурсов термальных вод, а также строительство горизонтальных геотермальных скважин является важными практическими задачами на пути улучшения технико-экономических показателей геотермальной отрасли, способными повысить ее рентабельность и конкурентоспособность по сравнению с традиционными энергетическими отраслями.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЦИКЛА ДЕМИНГА И ПРОЦЕССНОГО ПОДХОДА ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА ВЫПУСКАЕМОЙ ПРОДУКЦИИ

Дмитриева Н.С.

*Рязанская государственная
радиотехническая академия,
Рязань*

Для повышения технического уровня и качества выпускаемой продукции организация должна идентифицировать, внедрять, управлять и постоянно повышать результативность процессов, которые необходимы для системы менеджмента качества, а также управлять взаимодействием этих процессов.

Один из восьми принципов менеджмента качества, на которых основана серия стандартов ИСО 9000:2000, относится к «Процессному подходу»: желаемый результат достигается более эффективно, когда деятельностью и соответствующими ресурсами управляют как процессом [1]. Непрерывность управления является основным преимуществом процессного подхода, которое он обеспечивает на стыках между отдельными процессами внутри системы процессов, а также при их соединении и взаимодействии [2].

Ко всем процессам может быть применена концепция «Планируйте – Делайте – Проверьте – Воздействуйте» или «Цикл Деминга». В системе менеджмента качества данный цикл может быть применен внутри каждого процесса организации, а также по отношению к системе процессов в целом. Он тесно связан с планированием, внедрением, управлением и постоянным улучшением как процессов создания продукции, так и других процессов системы менеджмента качества. Управление следует организовывать