

УДК 66.011

## АКТУАЛЬНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПО ИНЖИНИРИНГУ ЭНЕРГОРЕСУРСΟΣБЕРЕГАЮЩИХ ВЫСОКОНАДЕЖНЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ<sup>1</sup>

© 2021 г. В. П. Мешалкин<sup>a, b, \*</sup>

<sup>a</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

<sup>b</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия

\*e-mail: vpmeshalkin@gmail.com

Поступила в редакцию 18.03.2021 г.

После доработки 22.03.2021 г.

Принята к публикации 23.03.2021 г.

Кратко изложена история становления и развития новой области научных исследований в химической технологии — теории инжиниринга химико-технологических систем, включающей методы анализа, оптимизации и синтеза химико-технологических систем (ХТС). Дана классификация основных видов современного инжиниринга. Описаны способы и методы интенсификации химико-технологических процессов (ХТП) и химико-технологических систем; методы цифровизованного физико-химического инжиниринга и компьютерного моделирования текстуры нанокмозитов и компьютерной химической диагностики в материаловедении. Изложены методы и алгоритмы анализа фрактально-статистических характеристик нестационарных газовых потоков в сложных газопроводах. Кратко описаны способы и приемы энергоресурсосбережения в химико-технологических системах; изложены основные концепции логистики ресурсоэнергосбережения. Дана краткая характеристика принципов автоматизированного синтеза оптимальных энергоресурсоэффективных химико-технологических систем. Кратко изложена сущность цифровой трансформации и автоматизированного управления эксплуатацией производств химического, нефтехимического и топливно-энергетического комплекса. Изложена сущность многоуровневой подготовки кадров химиков-технологов по инжинирингу энергоресурсосберегающих экологически безопасных химико-технологических систем. Предложены основные актуальные приоритетные направления научных исследований по инжинирингу энергоресурсоэффективных экологически безопасных химико-технологических систем.

*Ключевые слова:* автоматизированное управление, анализ, биологическое разнообразие, высшее химико-технологическое образование, жизненный цикл, инжиниринг, интенсификация, искусственный интеллект, логистика, материаловедение, многомасштабное моделирование, надежность, нейронная сеть, нанокмозит, окружающая среда, отходы, синтез, химико-технологическая система, химик-технолог, химический комплекс, цепь поставок, цифровизация, цифровой двойник, экологическая безопасность, энергоресурсоэффективность

DOI: 10.31857/S0040357121040126

### ВВЕДЕНИЕ

Предприятия химического комплекса (ХК), нефтегазохимического комплекса (НГХК) и топливно-энергетического комплекса (ТЭК) потребляют для производства товарных продуктов огромные количества разнообразных видов природного сырья и топливно-энергетических ресурсов (ТЭР). При эксплуатации производства ХК, НГХК и ТЭК, представляющие собой различного уровня сложности химико-технологические системы (ХТС), оказывают вредное воздействие на окружающую среду (ОС) за счет образования боль-

шого количества отходов (газообразных, жидких, твердых и тепловых), включая выбросы парниковых газов. Важнейшими показателями экономической эффективности экологической безопасности и снижения уровня вредного воздействия на ОС промышленных предприятий являются показатели энергоресурсосбережения [1–5].

Энергоресурсосбережение — это совокупность разнообразной научно-исследовательской, образовательной, проектно-конструкторской, производственно-хозяйственной, организационно-экономической, управленческой и любой предпринимательской деятельности, выполняемой на основе наиболее полного использования интеллектуальных и информационных ресурсов общества, по

<sup>1</sup> Специальный выпуск: “К юбилею Академика РАН Валерия Павловича Мешалкина”.

обеспечению оптимальных удельных расходов всех видов природных и материальных ресурсов (минеральное и углеводородное сырье, ТЭР, вода, воздух), а также трудовых ресурсов, которые необходимы для выпуска в требуемом месте в требуемое время требуемого вида требуемого качества и требуемого количества продукции с соблюдением условий национального и международного законодательства, а также требований по охране ОС от химических загрязнений, включая выбросы парниковых газов.

Инжиниринг как современное понятие в широком смысле – это комплексная техническая, расчетно-графическая, организационно-техническая, технико-экономическая и консультативно-техническая деятельность, которая реализует выполнение разнообразной научно-исследовательской, проектно-конструкторской, расчетно-аналитической, организационно-управленческой и технико-экономической работы на всех этапах жизненного цикла (предпроектные исследования, технико-экономическое обоснование; бизнес-планирование; управление проектированием; разработка технических и рабочих проектов; строительство и пуск в эксплуатацию; управление эксплуатацией и техническим обслуживанием) любых производственных систем, в том числе ХТС, технических и социально-экономических систем [6–8].

Успешное решение важнейших задач инжиниринга энергоресурсосберегающих экологически безопасных высоконадежных ХТС (Chemical Process Systems) [9–11], стало возможным в результате широкого применения ЭВМ, методов кибернетики, методов информатики и математического моделирования техногенно-природных систем, а также бурного развития с конца 1960 и начала 1970 гг. нового научного направления в области теоретических основ химической технологии, впервые сформулированного выдающимся ученым Robert H. Sargent – инжиниринг ХТС (Process Systems Engineering) (в ряде случаев употребляется также название – Process Engineering; в немецкой технической литературе – Systemverfahrenstechnik) [10–12].

Объектом изучения этой новой области научных исследований являются ХТС (Chemical Process, Process System, Process, Chemical Processing Systems, Processing System; по-немецки Verfahrenstechnische Systeme). Необходимо подчеркнуть, что научное направление – инжиниринг ХТС использует результаты научных исследований по процессам и аппаратам (оборудованию) химических производств (английские понятия: “unit operation”, “unit equipment”), которые являются объектом изучения традиционного научного направления “процессы и аппараты химической технологии” – по-английски Chemical Engineering (немецкое название: Verfahrenstechnik).

В Советском Союзе в начале 1970-х годов в связи с необходимостью срочного решения актуальных задач оптимизации технологических режимов построенных в СССР импортных крупнотоннажных агрегатов большой единичной мощности (аммиака, азотной кислоты, карбамида, первичной нефтепереработки, этилена и др.) начал активно развиваться научные исследования в области инжиниринга ХТС академик АН СССР Кафаров В.В. – основоположник нового научного направления в СССР “кибернетика химико-технологических процессов”, который поставил важную научную проблему перед аспирантом Московского химико-технологического института (с 1982 г. – Российского химико-технологического университета) имени Д.И. Менделеева Мешалкиным В.П. – активное изучение и развитие методов инжиниринга ХТС, включающих методы анализа и синтеза энергоресурсоэффективных ХТС. Определенный вклад в развитие методов анализа нефтеперерабатывающих и нефтехимических производств с позиций теории инжиниринга ХТС внес академик АН Азербайджана Нагиев М.Ф. Первая в СССР статья по новым принципам анализа и синтеза ХТС была опубликована в журнале “Теоретические основы химической технологии” в 1970 г. [2].

Важнейшим интеллектуальным фактором успешного выполнения экономических, социальных и экологических целей устойчивого развития (ЦУР) человечества, провозглашенных в 2000 г. Генеральной Ассамблеей ООН, являются научно-обоснованные методы теории инжиниринга ХТС, включающей методы анализа оптимизации и синтеза ХТС, промышленная реализация и цифровизированное управление эксплуатацией энергоресурсосберегающих экологически безопасных высоконадежных ХТС.

Высоко интенсивные химико-технологические процессы (ХТП) и энергоресурсосберегающие экологически безопасные ХТС обеспечивают для реализации ЦУР рациональное использование природных ресурсов, охрану ОС от загрязнений, сохранение биологического разнообразия природных систем, социально-культурную гармонизацию общества, повышение экономической эффективности промышленности предприятий и цепей поставок (ЦП), улучшение качества и увеличение продолжительности жизни людей в условиях промышленной революции “Индустрия 4.0” и развивающегося “Общества 5.0” с широким использованием современных инструментов информационно-коммуникационных технологий (ИКТ) и цифровизации.

В работе [8] подробно рассмотрены сущность и основные виды, методы и компьютерные инструменты инжиниринга технологической структуры, технологических процессов и бизнес-процессов энергоресурсосберегающих ХТС, а также предприятий и ЦП конкурентоспособной продукции (веществ и материалов) ХК, НГХК и ТЭК.

Указана необходимость соответствия оптимальных характеристик ХТС и показателей качества производимой продукции требованиям Национальных и Международных стандартов, а также показателям Наилучших Доступных Технологий (BAT-BREF).

Понятие инжиниринга технических систем тесно взаимосвязано с понятием “логистика” как комплексного вида организационно-технической, инжиниринговой и управленческой деятельности (в широком понимании) и означает “подробное планирование любой сложной операции”, которое, безусловно, включает разнообразную логистическую деятельность и логистическое управление ЦП, обеспечивающих оптимальное управление не только материальными потоками разнообразной промышленной продукции, товаров и услуг, но и интеллектуальными потоками компетентностей, представляющих собой различные знания, навыки и умения, как важнейшей интеллектуальной продукцией в условия современной цифровой экономики и экономики знаний [8–11]. Кроме того, указанная тесная лингвистическо-семантическая взаимосвязь понятия “инжиниринг” с понятием “логистика” также логически подтверждается толкованием понятия слова “logistike”, которое в переводе с греческого языка означает “искусство вычислять”, “искусство принимать решения”, “правильное рассуждение”, “способность к рассуждению”.

В настоящее время классифицируют следующие основные виды инжиниринга: функционально-производственный, комплексный технический, строительный, эксплуатационный, международный и компьютеризированный инжиниринг [8–10].

Выделяют следующие основные виды функционально-производственного инжиниринга по отраслям и сферам деятельности экономики, а также по отраслям техники [8]: систематика (System Engineering); химический инжиниринг (Chemical Engineering); инжиниринг ХТС (Process System Engineering); энергетика или энергетический инжиниринг (Power Engineering); теплотехника (Heat Engineering); логистический инжиниринг (Logistics Engineering); инжиниринг знаний (Knowledge Engineering).

В повышении эффективности инженерно-технических разработок важное значение имеют инструменты автоматизированного инжиниринга (Computer-Aided Engineering) – инструменты мультидисциплинарных, многомасштабных (многоуровневых) и многоэтапных разработок и проектных исследований с широким применением ЭВМ, обеспечивающие автоматизированное выполнение всех видов инженерно-технических разработок по созданию технических систем и промышленных объектов на основе широкого использования программных средств и оборудования вычислительной техники, а также науко-

емких средств ИКТ, включая инструментальные комплексы технических и программных средств: автоматизированного проектирования (Computer-Aided Design – CAD-технологий); автоматизированной логистической поддержки (Computer-Aided Logistics Support – CALS-технологий), по мере совершенствования которых существенно расширяется спектр выполняемых ими функций. В настоящее время оставшаяся неизменной аббревиатура CALS получила новую расшифровку – непрерывное накопление информации и поддержка жизненного цикла (ЖЦ) (Continuous Acquisition (Information) and Life-cycle Support) [8].

Для успешного решения задач оптимального управления эксплуатацией энергоресурсоэффективных промышленных производств и ЦП промышленных предприятий осуществляется инжиниринг следующих видов автоматизированных систем: системы планирования ресурсов предприятия (Enterprise Resource Planning Systems – ERP-Systems), системы управления ЦП (Supply Chain Management Systems – SCM-Systems), системы управления отношениями с покупателем (Customer Relation Management Systems – CRM-Systems), а также системы управления ЖЦ продукта (Product Life-cycle Management Systems – PLM-System).

#### КРАТКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ОСНОВНЫХ ПРИНЦИПОВ И СПОСОБОВ ИНТЕНСИФИКАЦИИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Для обеспечения высоких показателей энергоресурсосбережения, надежности и экологической безопасности при инжиниринге различных ХТС производства конкурентоспособной высококачественной химической продукции [6–8] в соответствии с техническими требованиями и спецификациями, руководящими принципами инжиниринга и характеристиками наукоемких производственных систем, технических устройств, бизнес-процессов, продукции и услуг, устанавливаемыми Национальными стандартами России и Международной организации по стандартизации, ИСО (International Organization for Standardization, ISO) в области ресурсосбережения, энергосбережения, энергетического и экологического менеджмента, а также характеристиками нормативно-правовых актов по Наилучшим Доступным Технологиям (НДТ) (Best Available Techniques REferences “BAT-BREF”), необходимо при проектировании, строительстве и эксплуатации энергоресурсосберегающих ХТС применять разнообразные виды и методы цифровизированного инжиниринга [8].

Для получения научно-обоснованных результатов цифровизированного инжиниринга оптимальных энергоресурсосберегающих высоконадежных ХТС и ЦП необходимо широко использовать методы и алгоритмы теории анализа, оптимизации и синтеза ХТС; методы логистики ресурсоэнерго-

сбережения и организационно-функционального проектирования оптимальных энергоресурсоэффективных ЦП [9–11].

Применение способов и методов интенсификации отдельных ХТП и ХТС в целом вносит существенный вклад в обеспечение устойчивого развития химической промышленности и представляют важную область научных исследований по инжинирингу ХТС [11–13].

Основные способы и направления интенсификации ХТП и ХТС для обеспечения инновационного устойчивого развития химической промышленности изложены в работах [12–14]: повышение качества и эффективности использования сырья, снижение капитальных затрат, миниатюризация размеров единиц оборудования (ЕО), повышение надежности и снижение рисков экологической безопасности ХТС.

В ряде работ [15, 16] подробно рассмотрены способы и методы интенсификации ХТП (Process Intensification – PI) в инжиниринге ХТС. Одним из важных способов интенсификации ХТС является способ объединения (комбинирования) отдельных типовых технологических операций в одной ЕО (хеморектификация, хемокстракция, хемосорбция и др., таких как химическая реакция и процесс разделения). Это комбинирование технологических операций, или типовых ХТП в одной ЕО, приводит к инжинирингу более энергоресурсоэффективных ХТС и ЦП.

В условиях глобализации и перехода к устойчивому развитию выделяют пять основных теоретико-экспериментальных направлений интенсификации ХТС, используемых при инжиниринге энергоресурсоэффективных высоконадежных ХТС:

1. Повышение производительности и селективности ХТП за счет интенсификации (например, применение нано- или микроструктурных катализаторов) и системного многоуровневого подхода к управлению ХТС.

2. Создание новых миниатюрных комбинированных ЕО, основанных на научных принципах и новых методах производства: интенсификация ХТС (PI) за счет использования многофункциональных комбинированных реакторов и высокоэффективных катализаторов, комбинированных процессов хемо-ректификации и хемосорбции.

3. Инжиниринг энергоресурсоэффективных и экологически безопасных ХТС с использованием методологии тройного инжиниринга (кратко – методология 3Р-3Е) “Process Engineering (Инжиниринг молекул) – Process Engineering (инжиниринг ХТС) – Plant Engineering (Инжиниринг завода)” для получения необходимого конечного высококачественного продукта.

4. Применение методов многомасштабного компьютерного моделирования для любых ХТП и явлений, реальных физико-химических ситуаций от молекулярного, микро-, макроуровня до производственного масштаба.

5. Применение методов цифровизации ХТС и ЦП.

В настоящее время получены интересные новые научные результаты в области многомасштабного моделирования ХТП, цифровизации концептуального инжиниринга энергоресурсосберегающих ХТС, логистического управления ХТС и ЦП, оптимизации ХТС. Цифровизация – это современное направление принципиального повышения показателей энергоресурсосбережения, экологической безопасности и надежности ХТС и ЦП с использованием инструментов “Индустрии 4.0”, “Общества 5.0” и цифровой экономики. Компании используют цифровизацию как важнейшее направление преобразований их бизнес-процессов и ХТП, а также стимулирования развития инноваций, реинжиниринга бизнес-процессов и ХТП. Крупные химические компании (BAYER, BASF, Shell, Dupont, СИБУР) применяют все инструменты цифровизации с высокой скоростью. Важным направлением цифровизации ХК, НГХК и ТЭК являются компьютеризированное управление ХТП и ХТС, цифровизированное логистическое управление ЦП.

Несмотря на прогресс в теории инжиниринга энергоресурсоэффективных высоконадежных ХТС, существует, к сожалению, разрыв в понимании и применении теории инжиниринга ХТС между сообществом ученых и сообществом инженерно-технических специалистов в промышленности [7]. Интенсификация ХТС (PI) обещает новые решения актуальных проблем повышения энергоресурсоэффективности в промышленности, что приводит к быстрому росту интереса к этой области исследований. Существуют различные методы автоматизированного синтеза интенсивных энергоресурсосберегающих ХТС, большинство из которых основаны на методах теории синтеза и оптимизации ХТС [7, 8, 11, 12, 17].

В настоящее время с позиции методологии системного подхода в химической технологии и теории инжиниринга энергоресурсосберегающих ХТС предложены четыре основных принципа микроуровневой интенсификации ХТП:

1. Принцип максимизации эффективности внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий (пример: динамически изменяющиеся условия для достижения кинетических режимов с более высокой конверсией и селективностью).

2. Принцип обеспечения всем молекулам, участвующим в химической реакции, одинаковых условий по времени и маршрутам взаимодействия (пример: реакция в потоке идеального вытеснения с равномерным безградиентным нагревом).

3. Принцип оптимизации движущей силы (ДС) процесса и максимизации удельной площади межфазной поверхности на каждом уровне взаимодействия в одном аппарате (пример: увеличение

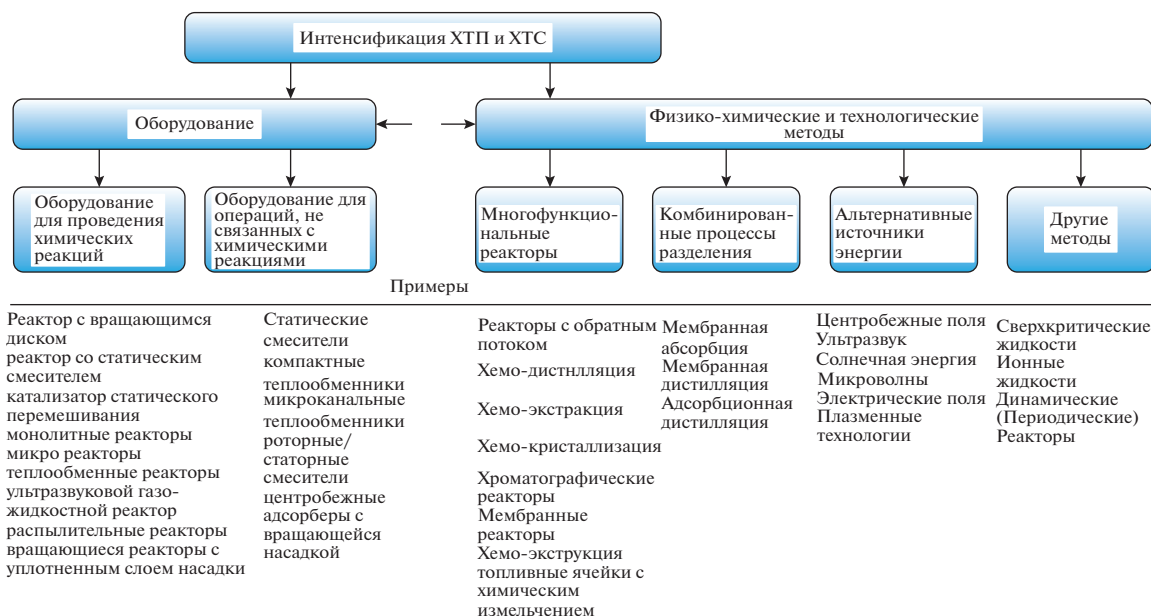


Рис. 1. Классификация способов интенсификации ХТП: Виды оборудования, физико-химические и технологические методы интенсификации ХТП.

площади поверхности массопередачи через микроканальные конструкции).

4. Принципы максимизации синергетического эффекта от взаимодействия отдельных элементарных явлений или типовых ХТП (пример: многофункциональные реакторы, хемодистилляция, мембранная абсорбция).

На молекулярном уровне для интенсификации ХТП можно использовать следующие способы модификации: маршрута химического синтеза, химической кинетики, топологической структуры носителей катализатора (формо-селективные структуры, функционализация поверхности, оптимальное распределения радиусов пор и связности пор). Все эти принципы и способы интенсификации на микроуровне ХТП тесно взаимосвязаны с катализом.

Одинаковые условия по взаимодействию молекул могут быть достигнуты, например, с применением статических смесителей, которые обеспечивает для массообмена почти идеальный поршневой поток с очень интенсивным перемешиванием и повышением специфической межфазной поверхности. Структурированные упаковки в реакторах, такие как монолиты, сетки, пены и различные конструкции микросмесителей, также могут улучшить процессы местного перемешивания.

Практическая аппаратно-технологическая реализация указанных принципов микроуровневой интенсификации ХТС для одного аппарата ХТС (микроуровень ХТС) осуществляется по двум направлениям: 1. Применение специального оборудования для ХТП. 2. Применение специальных физико-химических технологических мето-

дов преобразований вещества в аппаратах химической технологии.

Классификация способов интенсификации ХТП и ХТС на макроуровне (двух основных направлений интенсификации ХТП): виды специального оборудования, физико-химические и технологические методы интенсификации ХТП представлены на рис. 1.

### ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА СПОСОБОВ И ПРИЕМОВ ЭНЕРГОРЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЯ В ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

Разработка научно обоснованных решений по инжинирингу энергоресурсосберегающих высоконадежных ХТС методологически базируется на применении следующих основных физико-химических и технологических способов энергоресурсосбережения в ХТС: способа наилучшего использования ДС химико-технологических процессов; способа наиболее полной переработки сырья; способа рационального использования ТЭР; способа наилучшего функционально-структурного использования ЕО (аппаратов и машин); способа замкнутого водоснабжения; способа обеспечения и повышения надежности ХТС; способа рациональной пространственной компоновки производства; способа оптимизации технологических режимов.

Для осуществления любого ХТП переработки сырья необходимо наличие ДС процесса – первоисточника всех химических и физико-химических преобразований вещества и энергии. Ско-

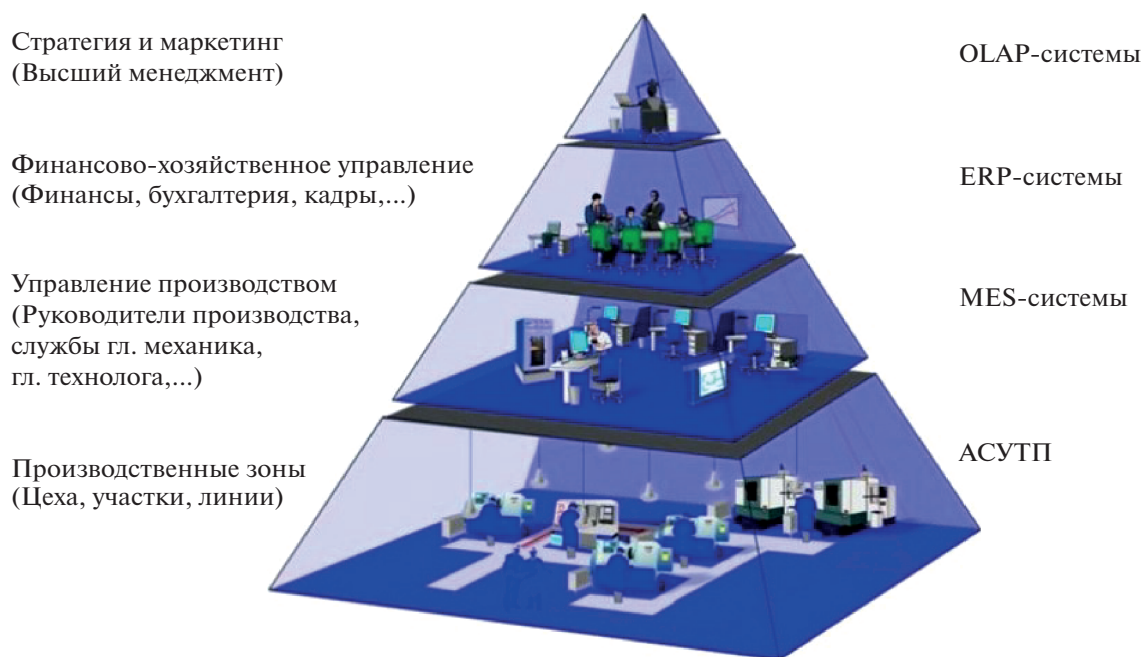


Рис. 2. Иерархия информационных систем управления промышленными предприятиями.

рость ХТП, которая зависит от величины ДС, определяет производительность аппаратов, их число в технологической схеме ХТС. Интенсивность работы аппарата ХТС – это удельная производительность аппарата на единицу объема или площади его сечения. В технологические схемы энергоресурсосберегающих ХТС должны входить высокоинтенсивные ХТП и аппараты химической технологии. Интенсификация работы аппаратов достигается в результате повышения эффективности ХТП и улучшения их инженерно-аппаратурного оформления, т.е. улучшения и миниатюризации конструкций аппаратов.

Способ наилучшего использования ДС химических–технологических процессов – это основополагающий способ энергоресурсосбережения, принципиально позволяющий значительно повышать степень переработки материальных ресурсов, резко снижать потери сырья, ТЭР, а также существенно сокращать удельные затраты конструкционных материалов при производстве химической продукции. Все другие способы энергоресурсосбережения в ХТС, в частности, способы наиболее полной переработки сырья и рационального использования ТЭР, направлены на всестороннее обеспечение и реализацию основополагающего способа – способа наилучшего использования ДС [1–5].

Для практической реализации различных способов энергоресурсосбережения в ХТС применяют разнообразные режимно-параметрические, технологические, аппаратурно-конструкционные и организационно-технические приемы и операции.

Одним из важных способов энергоресурсосбережения в ХТС является способ оптимизации технологических режимов производства с использованием иерархических распределенных АСУТП и АСУП химической промышленности. Иерархическая структура АСУ современных промышленных предприятий ХК, НГХК и ТЭК представлена на рис. 2.

Классификация способов энергоресурсосбережения на различных иерархических уровнях промышленных предприятий (от микроуровня (молекулярного) до мета- и мегауровня) представлена на рис. 3.

При разработке научно-обоснованных способов и приемов энергоресурсосбережения в ХТС и методов интенсификации ХТП необходимо широко использовать принципы зеленой химии [1–5].

### ПРИМЕНЕНИЕ ОСНОВНЫХ КОНЦЕПЦИЙ ЛОГИСТИКИ РЕСУРСОЭНЕРГОСБЕРЕЖЕНИЯ

Важнейшими направлениями научных исследований в области логистики ресурсоэнергосбережения являются создание и применение:

- методов организации и управления инжинирингом инновационной продукции (молекулярной структуры) с оптимальной удельной ресурсоэнергоемкостью;
- методов организации и управления инжинирингом энергоресурсосберегающих производств для выпуска инновационной высококачественной продукции;





Рис. 3. Классификация способов энергоресурсосбережения на различных иерархических уровнях промышленного предприятия.

- организационно-управленческих методов, способов и средств снижения материало-, ресурсо- и энергоемкости продукции в промышленности и в сфере услуг во всех звеньях ЦП "добыча сырья—транспортровка—складирование—материально-техническое обеспечение—производство—распределение продукции";
- методов разработки экономически эффективной организационно-функциональной структуры (ОФС) энергоресурсосберегающих экологически безопасных, или "зеленых", ЦП предприятий ХК, НГХК и ТЭК на основе глубокого изучения физико-химической сущности всех ХТП, и использования стратегий логистики и методов теории оптимизации;
- методов минимизации товарно-материальных запасов (ТМЗ) и методов разработки "строительных" промышленных производств и ЦП;
- методов оптимального планирования и управления потребностями в материалах, сырье и ТЭР при производстве продукции;
- методов организации проектирования и управления оптимальными системами водопотребления на производстве, методов минимизации сточных вод и организации замкнутого водооборота на предприятиях;
- разработка методологии минимизации отходов, организации переработки и управления движением обратных потоков отходов (отходопотоков), образующихся во всех звеньях "прямой" ЦП предприятия, и разработка оптимальной ОФС "обратной" ЦП;

- методов оптимального управления технологическими, экологическими и предпринимательскими рисками при инжиниринге и эксплуатации ЦП высококачественной продукции;
- методов всеобщего управления качеством продукции, всех ХТП и бизнес-процессов, а также всех материалопотоков и отходопотоков во всех звеньях ЦП и всех видов продукции (изделий и услуг);
- методов интегрированного экономико-экологического управления предприятиями ЦП и методов компьютерной оценки воздействия на ОС как отдельных предприятий, так и цепей поставок в целом;
- методов стратегического и оперативно-тактического управления корпоративным сотрудничеством между всеми предприятиями, входящими в ЦП, на основе партнерской концепции "долевого разделения прибыли" (концепции "WIN-WIN" – "Моя прибыль—Твоя прибыль") для обеспечения устойчивого развития и конкурентоспособности ЦП в целом.

При решении научно-практических задач логистики ресурсоэнергосбережения необходимо широко использовать современные информационные "CALS"—технологии управления всеми этапами ЖЦ инновационных продуктов и технологических установок, а также для решения задач организации и управления действующими производствами инструментальные программные комплексы, реализующие стандарты планирования потребности в материалах (MRP), планирования

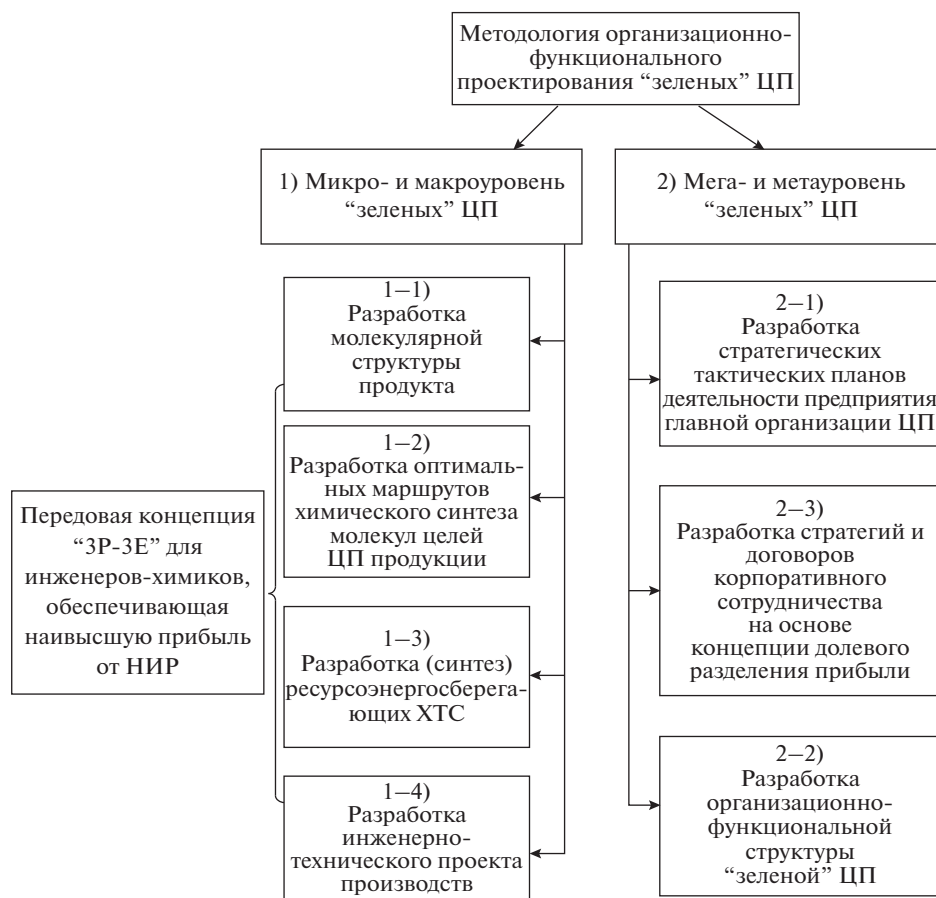


Рис. 4. Блок-схема двухуровневой методологии организационно-функционального проектирования "зеленых" цепей поставок.

производственных ресурсов (MRP-II), планирования ресурсов предприятий (ERP) и планирования потребностей распределения (DRP); для проектирования оптимальных технологических схем ХТС – инструментальные программные комплексы "CALS"-технологий, "CASE"-технологий и "CAPE"-технологий.

На рис. 4. представлена блок-схема современной методологии организационно-функционального проектирования энергоресурсоэффективных экологически безопасных, или "зеленых", ЦП.

Обобщенная физико-химическая и аппаратурно-техническая структура ЦП химической продукции с учетом двухуровневой методологии организационно-функционального проектирования (см. рис. 4) представлена на рис. 5.

При решении задач разработки и управления эксплуатацией энергоресурсосберегающих высоконадежных ХТС необходимо использовать основные термодинамические, химические и физические принципы зеленой химии [1–5].

При разработке рациональной ОФС "зеленых" предприятий ХК, НГХК и ТЭК, а также методологии ситуационного управления эксплуата-

цией "зеленых" ЦП необходимо широко использовать не только принципы зеленой химии, но также международные стандарты серии ISO–9000, ISO–14000, ISO–19000 и OHSAS–18000, информационно-технические справочники по НДТ и, кроме того, учитывать мероприятия по реализации международной общественной программы "Ответственная забота" (Responsible Care), а также "REACH"-законодательство.

#### КРАТКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ПРИНЦИПОВ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО СИНТЕЗА ОПТИМАЛЬНЫХ ЭНЕРГОРЕСУРСОЭФФЕКТИВНЫХ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В настоящее время применяются четыре принципа автоматизированного синтеза оптимальных энергоресурсоэффективных экологически безопасных ХТС: композиционно-поисковый, эвристическо-декомпозиционный, интегрально-гипотетический, эволюционный. Указанные принципы комплексно отражают эвристические, технологические и математические положения



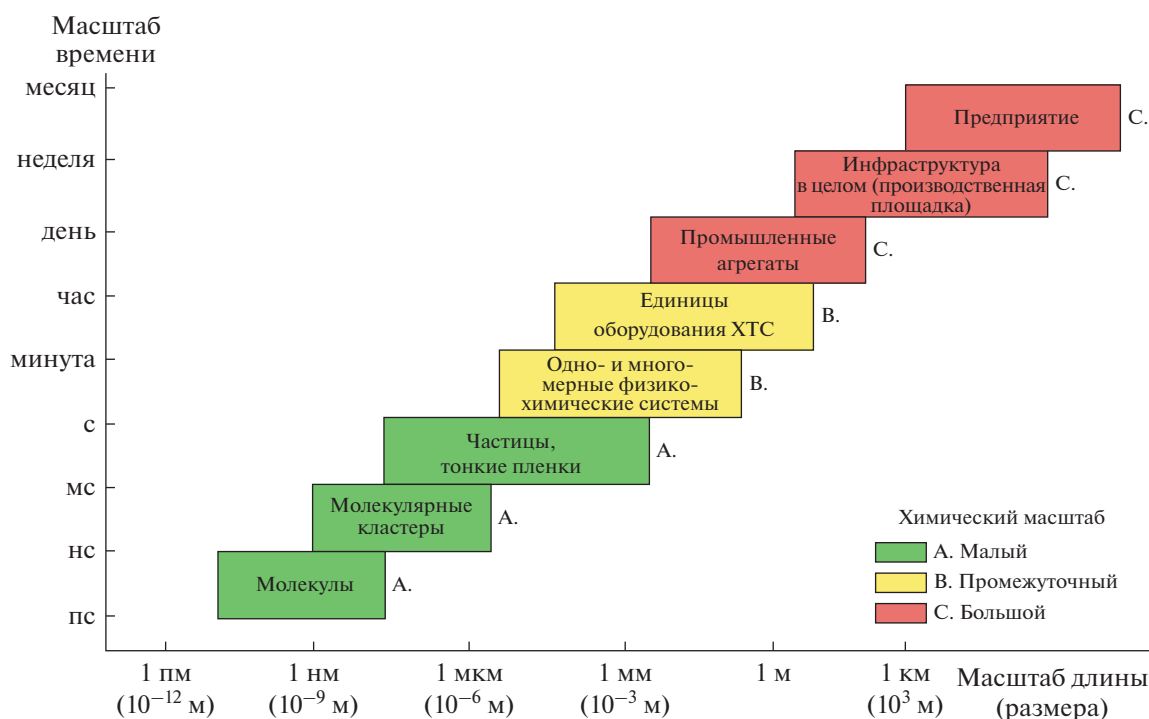


Рис. 5. Физико-химическая и аппаратно-техническая (технологическо-организационная) структура цепи поставок.

теории упорядоченного поиска оптимальных решений разнообразных неформализованных исходных задач синтеза (ИЗС) энергоресурсоэффективных ХТС. Содержательная, или инженерно-технологическая постановка любой исходной неформализованной задачи синтеза ХТС определяется множеством данных – {P}, отображающим желаемые цели, параметры и свойства функционирования синтезируемой ХТС, которыми являются энергоресурсоемкость, надежность, устойчивость, чувствительность, управляемость и др., а также основные физико-химические и технологические предпосылки, обеспечивающие возможность выполнения ХТС поставленной цели функционирования [1–3, 7].

Для каждой ИЗС–P существует оптимальное смысловое инженерно-технологическое решение в виде технологической схемы ХТС, где  $P^* \in \{P\}$ , где {P} – множество всех решений в виде альтернативных вариантов структуры синтезируемой ХТС. Решение  $P^*$  представляет собой такую оптимальную структуру ХТС, для которой величина критерия эффективности функционирования –  $\psi$  экстремальна. В качестве критерия эффективности –  $\psi$ , который комплексно учитывает стоимость всех затрат сырья, ТЭР и конструктивных материалов при создании и эксплуатации ХТС, имеющей определенный уровень надежности и экологической безопасности, используют обобщенный экономический критерий в виде чистого приведенного дохода  $D_{np}$  – для неоднородных

ХТС ( $\psi_1^* = opt \psi_1 = \max D_{np}$ ) или в виде приведенных затрат – П для однородных систем (теплообменные системы, системы ректификации, выпарные системы и др.) ( $\psi_2^* = opt \psi_2 = \min П$ ).

Сущность декомпозиционно-поискового принципа состоит в том, что трудоемкость многомерного поиска  $P^* \in \{P\}$  сокращают как за счет декомпозиции многомерной ИЗС на совокупность более простых подзадач, так и за счет перебора только лишь перспективных или рациональных вариантов решения ИЗС.

Сущность эвристическо-декомпозиционного принципа синтеза ХТС состоит в том, что поиск оптимального решения ИЗС проводится путем упорядоченного перебора множества эвристических решений, которые получены в результате заданного числа попыток синтеза структуры системы. При одной попытке получают некоторое эвристическое решение ИЗС на основе элементарной декомпозиции ИЗС.

Любая элементарная задача синтеза образуется в соответствии с выбранным эвристическим правилом (или эвристикой), входящим в определенный набор эвристик. Эвристика, или эвристическое правило, – это утверждение, являющееся результатом обобщения существующих научных знаний в области теоретических основ химической технологии, кибернетики ХТП и инжиниринга ХТС либо неоднократно проверенное экспериментально установленное решение, либо некото-

рое интуитивное или эмпирическое предположение исследователя, которое может привести к рациональному решению задачи синтеза ХТС. Выбор эвристики на каждом этапе поиска решения ИЗС осуществляется случайным образом по величине ее весового коэффициента, значение которого изменяется в зависимости от результатов предыдущих попыток синтеза ХТС с использованием адаптивных алгоритмов обучения.

Рассмотренные декомпозиционные принципы синтеза ХТС обеспечивают методологию генерации оптимальных энергоресурсоэффективных технологических структур ХТС, которая осуществляется как в диалоговом, так и в автоматизированном режиме.

**Интегрально-гипотетический принцип синтеза ХТС включает следующие этапы:**

1. Разработка и анализ альтернативных рациональных вариантов технологической структуры ХТС.

2. Создание гипотетической обобщенной технологической структуры (ГОТС) путем функционально-логического объединения всех альтернативных вариантов структуры данной ХТС. Каждая структурная взаимосвязь между  $n$ -м и  $m$ -м элементами в ГОТС отображается коэффициентом структурного разделения потоков —  $\delta_{n-m}$ .

3. Компьютерный анализ ГОТС. Для проведения компьютерного анализа ГОТС необходимо иметь математические модели всех ХТП системы и рекомендуется применять быстродействующие методы расчета многоконтурных ХТС с использованием комплексов программ моделирования и управления ХТС, так называемых, компьютерных имитаторов ХТС (Aspen, HYSYS, PRO, CHEMCAD, ARIS, SAP и др.).

4. Вычленение из ГОТС оптимальной структуры синтезируемой ХТС путем решения многомерной дискретно-непрерывной задачи нелинейного программирования.

Интегрально-гипотетический принцип рекомендуется применять для разработки методов решения ИЗС неоднородных ХТС на заданном множестве альтернативных вариантов ХТП и структурных связей между ними.

Эволюционный принцип состоит из следующих итерационно повторяемых этапов:

1. Анализ некоторого исходного варианта технологической структуры ХТС.

2. Определение наименее эффективного элемента в исходном варианте системы. Исключение этого элемента из системы.

3. Модификация выделенного элемента ХТС.

4. Ввод модифицированного элемента в исходный вариант системы и коррекция структуры технологических связей ХТС. Практическая реализация 2–4 этапов связана с необходимостью использования различных эвристик, а также

многоуровневых методов оптимизации и методов теории чувствительности.

5. Анализ и оптимизация полученного, варианта технологической схемы ХТС.

В инжиниринге оптимальных энергоресурсоэффективных экологически безопасных ХТС широкое применение получили методы интеграции (комбинирования) процессов и, в частности, методы тепловой интеграции с использованием термодинамического метода пинч-анализа [18–20]. Задача и методы комплексной оценки энергоэффективности производств ХК, НГХК и ТЭК с использованием пинч-анализа изложены в работах [18–20].

При использовании метода пинч-анализа [1, 5] в качестве эталона энергоэффективности ХТС принимается производство или установка с системой рекуперации тепловой энергии, имеющей заданное оптимальное значение ДС для процессов теплопередачи. Для минимального использования внешних энергоносителей необходимо определять значение минимального сдвига составных тепловых кривых исходной ХТС [5]. Дополнительно необходимо рассчитать индекс энергоэффективности ХТС с учетом исключения потерь тепла в ОС. Для этого разработан упрощенный метод оценки тепловых потерь от нагреваемых поверхностей ЕО [21]. Предложена оригинальная методика проведения сравнительного анализа энергоэффективности ХТС на основе метода комплексной оценки Anselm для различных предприятий ХК, НГХК и ТЭК [22].

Важным этапом в оценке энергоэффективности ХТС и времени задач синтеза оптимальных энергоресурсоэффективных рекуперативных теплообменных систем (ТС) и систем ректификации многокомпонентных смесей с тепловой интеграцией внутренних технологических потоков является первоначальный этап сбора и обработки исходных данных о технологических потоках ХТС [20–22]. Разработано специальное программное обеспечение Anselm DR, автоматизирующее процедуры сбора и обработки большого массива исходных данных при использовании пинч-анализа.

В работе [23] предложены методы оптимальной интеграции теплоты в рекуперативных ТС. Применение метода пинч-анализа при реконструкции установок гидроочистки дизельного топлива позволило сократить энергопотребление на 50% [24, 25]. В работе [26] развиты методы теплоэнергетической межцеховой интеграции в пределах больших промышленных территорий предприятий (Total Site Integration). Наивысший уровень тепловой интеграции на предприятии достигается в результате использования общезаводской системы внешних энергоносителей для оптимального снабжения отдельных ХТС [18–20].

## МЕТОДЫ ЦИФРОВИЗИРОВАННОГО ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО ИНЖИНИРИНГА И КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕКСТУРЫ СИНТЕЗИРУЕМЫХ КОМПОЗИТОВ И КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

В последнее время опубликованы интересные аналитические обзоры по методике цифровизованного физико-химического инжиниринга [8] текстуры композиционных материалов с требуемыми свойствами для химии, биохимии и фармацевтики [27], а также по созданию специальных аналитических микрофлюидных устройств химической диагностики [28] на основе применения 3D-принтеров, методов компьютерного анализа “структуры-свойства” композитов и методов разработки цифровых двойников технических объектов.

В работе рассмотрены [27] типичные примеры применения 3D-печати и аддитивных технологий в органическом синтезе, в биохимии, биотехнологии, аналитической химии, фармацевтике и химическом образовании, а также отмечены новые перспективы применения 3D-принтеров для развития этих областей науки.

Рассмотрены примеры применения широко используемых методов 3D-печати (моделирование методом наплавления – наслоения и стереолитография). Отмечено, что ключевой особенностью этих методов является широкая доступность технологий 3D-печати и различных исходных специальных материалов для физико-химического инжиниринга инновационных композитов.

Трехмерная печать (3D) стала инновационной технологией для инжиниринга и изготовления микрофлюидных устройств при решении различных задач физико-химического инжиниринга и химической диагностики [28]. Приведены результаты экспериментального сравнения трех видов 3D-принтеров, используемых в микрофлюидике; рассмотрено применение микрожидкостного устройства с Y-образным переходом, конструкция которого оптимизирована для каждого из трех видов 3D-принтеров: с использованием формования методом наплавления (FDM), принтера Polyjet и принтера, применяющего стереолитографию с цифровой обработкой света (DLP-SLA) [28].

В работах [29–32] предложены методика, алгоритмы и комплекс программ компьютерного анализа микрофотоизображений (МФИ) структуры функциональных нанокompозитов (НК), которые позволяют устанавливать для синтезируемого НК зависимость структура–свойства. Текстура нанокompозита – это особенность внутреннего строения твердого материала, которая обусловлена не только характером расположения в структуре различных его составных компонентов, но и их свойствами (зерен, кристаллов и др.), например, горных пород [29–32].

МФИ получают с помощью современных приборов микроскопии материалов (оптические, просвечивающие, сканирующие и атомно-силовые микроскопы; рентгеновские томографы). С использованием этих приборов возможно получение разнообразных МФИ структуры исследуемых образцов НК очень крупного масштаба для величины малоразмерных объектов (вплоть до атомарного) и высокого разрешения (до нескольких мегапикселей). Это делает возможным проводить структурно-фазовый анализ этих текстур НК с большой точностью [33]. Указанные научные исследования весьма актуальны для материаловедения, химии, химической технологии, физики, электроники, машиностроения и др. [29–32].

Компьютерный анализ МФИ текстуры НК позволяет определить статистическо-морфометрические, текстурно-кластерные и фрактально-вейвлетные характеристики получаемых материалов. Морфометрический анализ МФИ позволяет с использованием фрактально-вейвлетного анализа вычислять средние размеры микрообъектов текстуры НК, их количество, величину занимаемой ими площади, т.е. общие геометрические характеристики МФИ [29–32].

Фрактальный анализ МФИ позволяет определять уникальную характеристику МФИ – фрактальную размерность (ФР), используемую при изучении свойств лакуарности (меры неоднородности заполнения объектом пространства), самоподобия строения текстуры, а также для прогнозирования областей и направлений роста микрообъектов текстуры вещества (при анализе последовательности МФИ сечений нанокompозитов на различных стадиях процесса их получения) [33]. Текстурно-кластерный анализ НК позволяет выделять и классифицировать на МФИ области с одинаковыми характеристиками мозаики пикселей, в том числе, кластеры микрообъектов [34].

При выполнении многолетних научных исследований по компьютерному материаловедению получены следующие основные научные результаты [29–32]:

1. Разработан логико-статистический алгоритм идентификации открытых пор в структуре НК по анализу последовательности послойных МФИ композиционных наноматериалов позволяет рассчитывать коэффициент сквозной пористости наноматериала по последовательности МФИ без применения трудоемких физических методов порометрии [29–32].

2. Предложены модифицированные клеточный и бинаризованный алгоритмы, а также алгоритм расчета ФР по показателям самоподобия спектров мощности МФИ, который позволяет не только оценить с различной точностью фрактальные размерности исследуемых МФИ, но и визуализировать характер лакуарности в конкретных областях МФИ [30, 32].

3. Обоснованно применение в качестве новой характеристики анализа последовательностей МФИ функции производной для кривой ФР при изменении температуры, времени или другой физической переменной, в зависимости от поставленной задачи исследования НК, что позволяет характеризовать мгновенное изменение текстуры МФИ от изменяющейся независимой физической переменной [30].

4. Разработан вейвлетно-морфологический нейросетевой алгоритм анализа текстуры МФИ структуры НК, который позволяет автоматизировано решать задачу оптимальной классификации групп пикселей при анализе МФИ для распознавания наличия в текстуре НК различных физико-химических фаз или других микрокомпонентов исследуемого вещества [29, 32].

5. Разработаны архитектура, программно-информационное обеспечение и режимы функционирования проблемно-ориентированного комплекса программ “FRA\_VA\_T”, который можно практически применять для анализа МФИ различных функциональных наноконструкций [30].

#### МЕТОДЫ ЦИФРОВИЗИРОВАННОГО ИНЖИНИРИНГА ЭНЕРГОРЕСУРСООБЪЕКТИВНЫХ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ ХИМИКО- ЭНЕРГОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ ПЕРЕРАБОТКИ ГОРНОРУДНЫХ ОТХОДОВ

В настоящее время актуальной фундаментальной теоретико-экспериментальной проблемой является разработка методов цифровизированного инжиниринга энергоресурсоэффективных экологически безопасных многостадийных химико-энерго-технологических систем (ХЭТС) переработки отходов обогащения руд на горно-обогатительных комбинатах (ГОК) в обжиговых машинах конвейерного типа для производства из отходов окатышей, а также в агломерационных машинах для создания агломерата с последующим их использованием в рудотермических печах. Данная проблема непосредственно связана с разработкой фундаментальных методов цифровизированного управления энергоресурсоэффективностью многостадийных комплексных энергоёмких ХТП, входящих в ХЭТС на основе иерархических многомасштабных моделей тепломассообмена, химических превращений с учетом свойств перерабатываемого сложного техногенного сырья и необходимости рационального использования вторичных энергетических ресурсов в создаваемых ХЭТС, комплексных алгоритмов оптимального управления взаимосвязанными ХТП, реализуемыми в обжиговых и агломерационных машинах, представляющих собой ХЭТС и рудотермических печах, с учетом параметров партий исходного мелкодисперсного сырья и требований к готовой продукции на выходе ХЭТС.

Технологии переработки твердых техногенных отходов обогащения руд на ГОК предложены рядом российских и зарубежных ученых [35–40]. Зарубежные авторы [39, 40] предложили развитие методов моделирования процессов термообработки окатышей на основе исследования сложных процессов теплообмена в движущемся слое окатышей при перекрестном движении газ-теплоносителя и материала в ХЭТС.

Работы [41, 42] посвящены актуальной научно-практической проблеме энерго- и ресурсосбережения при сушке дисперсного материала в плотном слое окатышей на основе использования многомасштабной математической модели тепломассообмена. Решена задача оптимизации энергозатрат на основе интенсификации энергоёмкого процесса сушки слоев окатышей посредством формирования затухающей тепловой волны. Установлен потенциал ресурсо- и энергосбережения в комплексной технологии термической подготовки дисперсного сырья в ХЭТС.

В [43–45] разработаны оригинальные многомасштабные математическая и компьютерная модели сложного многостадийного процесса обжига окатышей, включающего реакцию диссоциации карбонатов и процесс спекания движущейся плотной многослойной массы фосфоритовых окатышей в сложной ХЭТС. В работе [46] предложены и исследованы математические модели различных физико-химических характеристик техногенного сырья и внешнего потока газа-теплоносителя в ХЭТС.

В работах [47, 48] изложена содержательная инженерно-технологическая постановка задачи инжиниринга многостадийной ХЭТС производства фосфоритовых окатышей из техногенных отходов апатит-нефелиновых руд ГОК. Разработана обобщенная многомасштабная математическая модель ХЭТС производства фосфора с использованием нотации международного стандарта функционального моделирования IDEF0, конкретизированы параметры многостадийных ХЭТС, использование которых целесообразно в дальнейшем для решения задач оптимизации энергоресурсоэффективности производства фосфорных окатышей.

#### ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ ИНЖИНИРИНГ ЭНЕРГОРЕСУРСООБЪЕКТИВНЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ ПЕРЕРАБОТКИ ТИТАНОВЫХ РУД

Проблема энергоресурсоэффективной переработки титановых руд России – это основное препятствие к устойчивому развитию титановой отрасли. Решить проблему импортозамещения для титановой продукции возможно только за счет освоения крупнейшего в России Ярегского нефтетитанового месторождения. В недрах Яреги залегает более половины общероссийских запасов титана. На месторождении осуществляется

добыча высоковязкой нефти, при этом титановая составляющая руды — кварц-лейкоксеновый концентрат является отходом добычи нефти и, к сожалению, не используется. Причиной невосребованности российской титановой руды является ее уникальный минеральный состав, отличающийся повышенным содержанием кварца.

В последние годы российскими учеными проведены интенсивные научные исследования по поиску новых способов переработки титановой руды. В работе [49] показано, что в сравнение с другими видами титанового сырья, кварц-лейкоксеновый концентрат обладает наименьшей реакционной способностью при хлорировании титанового сырья. Однако предварительная обработка концентрата раствором щелочи, приводящая даже к незначительному снижению содержания кремнезема в сырье, существенно увеличивает его активность в ХТС дальнейшей его переработки в тетрагидрид титана [50]. Продолжив исследования [51], авторы разработали оригинальную кинетическую модель ХТП выщелачивания, а также определили технологические параметры ХТП получения высококачественного концентрата заданного состава [52]. В дальнейших исследованиях [53] установлены оптимальные технологические параметры нового энергоресурсоэффективного ХТС хлорирования Ярегских концентратов в реакторах кипящего слоя с получением тетрагидрида титана, пригодного как для получения важнейшего сырья — высококачественной титановой губки, так и пигментного диоксида титана.

С учетом полученных результатов [52, 53] обоснован вывод, что Ярегские концентраты должны стать основным источником титанового сырья в России. Вовлечение в промышленную переработку титановой руды Ярегского месторождения позволит не только полностью покрыть потребности России в титановом сырье, но также существенно повысить рентабельность добычи высоковязкой нефти.

#### ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ ИНЖИНИРИНГ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ НАНЕСЕНИЯ ПОКРЫТИЙ, КОМБИНИРОВАННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОБРАБОТКИ ПРОМЫШЛЕННЫХ СТОКОВ И ЭНЕРГОРЕСУРСОЭФФЕКТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОЧИСТКИ ПОЧВ ОТ НЕФТЕПРОДУКТОВ

С использованием системного подхода выполнен анализ масштабов и внутренней структуры гальванического производства в России [54] и за рубежом [55–57]. Проведен системный анализ эффективности и конкурентоспособности технологий хромирования [58] предложен новый модифицированный непараметрическо-статистический метод SWOT-анализа [58, 59] для сравне-

ния эффективности различных технологий или предприятий.

Для уменьшения воздействия на ОС разработаны новые ресурсоэнергоэффективные комбинированные технологии нанесения конверсионных покрытий токсичных соединений шестивалентного хрома [60–63]. С учетом сложной химии соединений хрома [64–66], реакций комплексообразования и кинетики электрохимических процессов [67, 68], предложены различные физико-химические [69–71] и математические [72, 73] модели выбора компонентов ресурсосберегающих составов технологических растворов для нанесения на различные изделия защитно-функциональных покрытий хромом и сплавами.

Проведен сравнительный анализ изменения показателей ресурсосбережения (концентрации ионов металлов ( $c$ ) и суммарная концентрация всех компонентов ( $c$ )) технологических растворов, используемых в процессах электроосаждения покрытий [74–76]. Определены количественные концентрационные критерии классификации рациональных составов растворов по показателям ресурсосбережения ( $c < 0.71$  моль/л;  $c < 2.32$  моль экв/л) и ресурсоемкости ( $c > 0.96$  моль/л;  $c > 2.78$  моль экв/л). Полученные теоретико-экспериментальные результаты положены в основу оригинальной инфологической модели [77] создания базы данных (БД) для выбора ресурсосберегающих составов растворов для получения защитно-функциональных покрытий с заданными характеристиками [78]. Предложены научные и технологические основы физико-химического инжиниринга и улучшения показателей ресурсоэффективности электрофлотационной очистки промышленных стоков и извлечения из них ценных компонентов [78–82].

Разработана [83] оригинальная логико-информационная модель энергоресурсосберегающей химической технологии утилизации сероводорода и низкомолекулярных алкантиолов, токсичных и труднодоступных для удаления сернистых компонентов из остатков топлива (мазута). Разработан способ утилизации нежелательных серных примесей, содержащихся в мазуте, путем объединения процессов электрохимического и микроволнового синтеза в комбинированную “зеленую” ХТС, что позволяет получать полезные биологически активные органические соединения серы. Показано, что использование одноэлектронного окислителя тиолов и сероводорода в органических средах при очистке стоков приводит к синтезу органических дисульфидов и элементарной серы. Непрямой (с использованием медиаторов) процесс электросинтеза обеспечивает инжиниринг циклического ХТП с высокой эффективностью и малыми энергозатратами по сравнению с прямым процессом (на электродах) окисления сернистых компонентов.

Разработаны физико-химические и технологические основы инжиниринга энергоэффективного электрохимического процесса очистки грунтов от нефти и нефтепродуктов. Экспериментально-теоретически определены основные закономерности протекания ХТП, предложены варианты инженерно-аппаратурного оформления, разработана методика технико-экономических расчетов, а также выполнен анализ изменения свойств загрязненной почвы [84].

Предложена высокоэффективная электрохимическая технология утилизации растворов, образующихся при производстве кальцинированной соды. Использование для этих целей мембранных электролизеров позволяет получать гидроксид кальция, гидроксид натрия и соляную кислоту требуемого качества [85]. Показано, что для инжиниринга комплексных систем очистки стоков важное значение имеют системы электродиализа [86, 87].

#### МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ АНАЛИЗА ФРАКТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НЕСТАЦИОНАРНЫХ ГАЗОВЫХ ПОТОКОВ В СЛОЖНЫХ ГАЗОПРОВОДАХ

Турбулентные газовые потоки в сложных газопроводах (СГ), образующиеся при распространении по СГ импульсов высокого давления, оказывают колебательно-ударные воздействия на стенки газопроводов. Это является опасным механическим явлением, в особенности, при возникновении частотных резонансов между колебаниями газовых потоков и собственной частотой механических колебаний конструкции СГ. Эти важные гидромеханические процессы в СГ детально исследованы в работах [88–97]. К задачам, играющим важную роль для анализа и прогнозирования степени воздействия турбулентных пульсаций газовых потоков на стенки СГ, следует отметить задачу разработки специальных интегральных гидродинамических показателей, характеризующих ударно-колебательное воздействие газовых потоков на стенки СГ.

В работах [88, 89] предложены четыре класса интегральных гидродинамических статистическо-энтропийных показателей: гидродинамические, статистические, фрактальные и потенциальные. В качестве новых статистических показателей предложено использовать: среднюю по объему величину пульсаций давления и стандартное отклонение по объему средней величины пульсаций давления на заданном участке СГ. В качестве фрактальных показателей предложено использовать фрактальные и мультифрактальные размерности. Также предложены эффективные интегральные показатели на основе потенциалов Изинга и Кулона [96, 98].

Фрактальный характер нестационарных турбулентных газовых потоков в СГ хорошо отобра-

жается на вейвлет-спектрах непрерывных вейвлет преобразований изображений газовых потоков. В работах [89, 91] показано, что при распространении импульса давления в СГ в вейвлет-спектрах модельных газовых потоков в конфузоре – важном потливном узле в структуре СГ имеется множество подобных гидродинамических фигур, что указывает на наличие иерархической структуры и фрактального характера газовых потоков [99].

В результате исследования потенциальных преобразований модельных изображений газовых потоков в СГ установлено, что потенциальное преобразование является новым инструментом детального анализа стохастической пульсационной структуры газовых потоков в СГ [96, 98].

В работе [96] изложены результаты большого числа компьютерных экспериментов, полученных с помощью случайных полей для различных МФИ, включая и аэрокосмические снимки. Важным результатом работы [101] является предложенный метод и алгоритм генерации текстур на основе природовдохновленных алгоритмов управляемого отжига (Controllable Simulated Annealing (CSA)) и Метрополиса (Metropolis).

Современным методом компьютерного анализа текстуры МФИ посвящена монография [102], в которой детально рассмотрены основные вопросы изображения гидродинамических текстур, обусловленные влиянием на формирование изображений реальных физико-химических процессов. Важное значение для решения проблемы оценки воздействия колебательной структуры газовых потоков на вибрацию СГ имеют бинарные текстуры [102]. Следует отметить также предложенные в [102] двухмерные Булевские модели и методика их применения для идентификации бинарных текстур на МФИ.

В настоящее время разработка алгоритмов визуализации текстуры газовых потоков – это перспективное направление газодинамических компьютерных исследований пульсационно-колебательной структуры газовых потоков в СГ. Алгоритм визуализации для изучения пульсационно-колебательной структуры газовых потоков позволяет создать большие базы знаний, накопленных в результате последних достижений в теории цифровой обработки изображений. Результаты применения спектральных методов, полученных с помощью фрактального и вейвлет-анализов МФИ и разработанные для исследования структуры наноматериалов [103–108], позволили прогнозировать развитие высокочастотной нестационарной турбулентности при распространении импульсов высокого давления в СГ.



## МЕТОДЫ ЭКОЛОГО-ЭКОНОМИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ПРОИЗВОДСТВ, ЦЕПЕЙ ПОСТАВОК ПРЕДПРИЯТИЙ И СИСТЕМ ГАЗОСНАБЖЕНИЯ

Задача эколого-экономической и организационно-структурной оптимизации цепей поставок (ЦП) ХК, НГХК и ТЭК математически сформулирована как задача смешанного целочисленного линейного программирования (СЦЛП) с учетом режима многопериодного функционирования ЦП, что позволило обосновать экономическую целесообразность строительства в ЦП газового сырья нового завода по переработке широкой фракции легких углеводородов [109].

В последние годы появились научно-технические разработки по оптимизации ЦП и СГ в ХК, НГХК и ТЭК, пищевой и фармацевтической промышленности с использованием различных математических моделей, учитывающих специфику и перспективы развития различных отраслей реального сектора экономики.

Необходимость успешного решения проблемы ОС и обеспечения экологической безопасности ХТС обусловил резкий рост публикаций по “зеленым” цепям поставок НГХК, которые включают добычу природного газа (ПГ), транспортировку, распределение и переработку ПГ в продукты с высокой добавленной стоимостью [9, 109, 110]. Одна из первых статей по математическому моделированию и оптимальной организации функциональных ЦП природного газа с использованием методов СЦЛП опубликована в начале 1960-х [111], затем авторы предложили алгоритмы для решения все более сложных задач оптимизации ЦП и ССГ.

Общая математическая модель СГ представлена в работе [112], а в работе [113] предложен алгоритм одновременной оптимизации процессов добычи и транспортировки нефти и газа, т. е. рассмотрена вся ЦП природного газа. Для оптимального управления ЦП по подводным трубопроводам в реальном масштабе времени разработана оригинальная упрощенная компьютерная модель нестационарного газового потока в протяженном многослойно-изолированном подводном газопроводе высокого давления [114, 115].

Методы оптимальной эксплуатации в условиях неопределенности данных для производств НГХК представлены в работе [116], а использование метода нелинейного программирования для проектирования сложных СГ изложено в работе [117]. При решении задачи невыпуклой оптимизации для распределительной СГ применены нелинейные математические модели [118] с использованием алгоритма поиска глобального экстремума для задач нелинейного программирования и СЦЛП [119]. В работах [120] и [121] предложены алгоритмы оптимального управления ССГ в стационарных и нестационарных режимах.

В работе [122] изложены методы оптимизации производственных и бизнес-процессов на нефтяных месторождениях, а в работе [123] авторы расширили постановку задачи оптимизации для операции добычи природного газа в ЦП. В работе [124] предложена математическая постановка задачи минимизации затрат для проектируемых ССГ.

Задача организации технического обслуживания и ремонта инфраструктуры ССГ при различных собственниках предприятий – участников ЦП, изложена в статье [125]. В работе [126] предложен общий алгоритм для решения задач экономической оптимизации структуры ЦП.

Необходимость учета факторов воздействия на ОС обусловила разработку новых методов эколого-экономической оптимизации ССГ и ХТС. Некоторые фундаментальные понятия эколого-экономической оптимизации предложены в работах [127–129], обширный аналитический обзор по этой теме представлен в работе [130]. Конкретные особенности цепей поставок в НГХК рассмотрены в работах [131–133], в то время как учет оценки ЖЦ при описании комплексной модели цепи поставок НГХК предложен в работе [134]. Постановка и методы решения задачи оптимизации “зеленых” ЦП в НГХК представлены в работах [9, 109, 110]. Оригинальный алгоритм оптимизации “зеленой” ЦП производств биогаза из отходов ферм изложен в [135].

Впервые обосновано, что при решении общей задачи комплексной экономико-экологической оптимизации ЦП в связи с существенным воздействием выбросов парниковых газов на глобальное потепление, необходимо учитывать утечки метана при разработке общей математической модели ЦП природного газа [9, 136–140]. Это первая математическая модель, которая позволяет комплексно решать указанные две взаимосвязанные проблемы при оптимизации структуры и режимов многопериодного функционирования ССГ.

## МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ ОЦЕНКИ И ПРЕДОТВРАЩЕНИЯ ОПАСНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ОКРУЖАЮЩУЮ СРЕДУ ХИМИЧЕСКИХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ ПРОМЫШЛЕННЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ

Одним из организационных инструментов реализации Целей устойчивого развития ООН [141] на предприятиях НГХК является мировая общественная добровольная программа Ответственная Забота (англ. Responsible Care [142] (далее RC)), направленная на то, чтобы побудить предприятия добровольно применять различные инициативы и бизнес-процессы для минимизации негативного воздействия на ОС и человека [143]. Большую организационно-разъяснительную работу по добровольному применению программы RC на различных предприятиях химического комплекса Российской Федерации осуществляет Рос-

сийский Союз Химиков. Основным инструментом реализации контроля выполнения программы РС является система показателей производительности предприятия (КРІ), но так как отчетность по программе РС представляется добровольно, как правило, в собранных больших массивах данных предприятия имеются пробелы, что затрудняет оценку эффективности предприятия [144]. Поскольку непосредственное сравнение фактических КРІ не дает достоверных оценок эффективности от реализации программы РС научным коллективом сотрудников академика РАН Мешалкина В.П. [145] с использованием системного подхода разработан оригинальный алгоритм для анализа больших массивов неоднородных экологических КРІ для компаний.

Методы комплексного анализа эффективности ХТС с использованием КРІ применены для оценки результативности соответствия показателям ЦУР и принципам “зеленой” химии, в частности, сложных физико-химических процессов химической иммобилизации ртути в отходах с использованием оригинальных цифровых инструментов многовариантной визуализации [146]. Интерес именно к процессам иммобилизации ртути обусловлен отнесением ртути к приоритетным глобальным загрязнителям ОС, а процессы иммобилизации ртути и других тяжелых металлов в отходах за счет их адсорбции твердыми веществами или осаждения в виде малорастворимых соединений, являются одним из эффективных процессов снижения опасности химических веществ для загрязнения ОС [147].

Для успешного решения научно- и финансово-емкой проблемы инжиниринга эффективных биохимических технологий восстановления биоразнообразия загрязненных опасными химическими отходами почв [184, 185] промышленных регионов, включая территории шлакоотстойников на промышленных предприятиях и полигонов отходов, а также почв мегаполисов с длительным накопительным экологическим ущербом определены новые микроорганизмы-деструкторы [184, 185]. Эти микроорганизмы-деструкторы, выделенные и изолированные из многолетних загрязненных почв Лондона, разрушают загрязняющие токсичные органические вещества, а также обладают к ним положительным хемотаксисом.

На основе предложенных оригинальных технологий ускоренного компостирования, изучения разнообразия биоты компоста и спектра разрушаемых биотой субстратов разработана эффективная технология переработки крупнотоннажных отходов, загрязненных полициклическими ароматическими углеводородами (УГВ), минеральными маслами и нефтепродуктами [184, 185]. Выделены новые виды бактерий, разрушающих ядовитое вещество-фенантрен в чистом виде, которые без разбавления изолированы из химически загрязненных почв г. Дзержинска и Лондона.

Одним из опасных источников загрязнения недр УГВ являются аварии на нефтепроводах, утечки из подземных или заглубленных резервуаров и трубопроводов, разгрузочно-погрузочные работы на нефтеналивных эстакадах и ряд других процессов, что приводит к образованию техногенных отложений и появлению аномальных геохимических зон. Различные микробиологические условия загрязненных почв и земель, водных сред определяют направленность многостадийных реакций трансформации УГВ [148] и усложняют процесс выявления соответствующих геохимических аномалий и источников их формирования.

В работе [149] использованы методы геохимического моделирования для выявления и ликвидации подповерхностных нефтяных загрязнений на основе единой автоматизированной сети наблюдательных и нагнетательных скважин с принудительной циркуляцией взвешенной смеси микроорганизмов. В качестве количественного биоиндикатора выбрана суммарная микробиологическая активность почвы.

Результаты многофакторного геохимического моделирования с использованием данных натуральных экспериментов позволили не только разработать комплексную систему знаний о характере распределения УГВ загрязнения почв, но и делать долгосрочные прогнозы, а также адаптировать меры по выявлению и ликвидации этого загрязнения. В работе [150] предложен биокомпозитный материал на основе полимерной матрицы с инкорпорированными биогенными элементами и иммобилизованными штаммами бактерий или ассоциацией бактерий, выделенных из зараженных нефтепродуктов и показана высокая активность созданного материала в процессах очистки морской воды от УГВ.

#### ИНЖИНИРИНГ ПРОБЛЕМНО-ОРИЕНТИРОВАННЫХ КОМПЬЮТЕРНЫХ СИСТЕМ, ЭВРИСТИЧЕСКО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ И АЛГОРИТМОВ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ ИНТЕГРИРОВАННОЙ ЛОГИСТИЧЕСКОЙ ПОДДЕРЖКИ ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА ОБОРУДОВАНИЯ

Системный анализ ЖЦ оборудования производств НГХК выполнен с использованием инструментов CALS-технологий [151]. Предложена концепция создания проблемно-ориентированной компьютерной системы (КС) интегрированной логистической поддержки оборудования, включая логистическую поддержку бизнес-процессов технического обслуживания и ремонта [152–158]. Разработана специализированная проблемно-ориентированная система автоматизированного решения задач организации интегрированной поддержки оборудования на всех этапах его жизненного цикла, описаны структура и ре-

жимы функционирования указанной системы [159, 160]. Предложена процедура реализации автоматизированного обмена данными между участниками ЖЦ оборудования НГХК. Разработаны встроенные графические редакторы, позволяющие создавать изометрические и 3D-схемы трубопроводов, а также принципиальные схемы аппаратов НГХК. Обоснована актуальность практического применения проблемно-ориентированной системы интегрированной логистической поддержки для предприятий НГХК. На следующем этапе НИОКР планируется разработать режимы функционирования проблемно-ориентированной системы интегрированной логистической поддержки оборудования различных промышленных предприятий и производств.

Сформулирована постановка задачи автоматизации процедур принятия интеллектуальных решений по интегрированной логистической поддержке оборудования НГХК [159, 160]. Подробно описаны интеллектуальные модели представления знаний [155–157] о конструкции оборудования в виде фреймов и продукционных правил, а также эвристическо-вычислительные алгоритмы, автоматизации определения характеристик оборудования НГХК [158–160]. Планируется продолжить НИОКР по созданию интеллектуальных моделей и алгоритмов поддержки ЖЦ динамического оборудования [161], а также оборудования теплотехнических станций.

#### ТЕОРЕТИЧЕСКО-ПРИКЛАДНЫЕ МЕТОДЫ ИНЖИНИРИНГА В ОБЛАСТИ ЦИФРОВОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ЭНЕРГО- РЕСУРСООЭФФЕКТИВНЫХ ХИМИКО- ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ ПРОИЗВОДСТВА ВЫСОКОКАЧЕ- СТВЕННОЙ ПРОДУКЦИИ

Одной из важных инжиниринговых и организационно-управленческих проблем промышленных предприятий является аналитическая оценка готовности предприятий к бизнес-планированию и организации цифровой трансформации всех технологических и бизнес-процессов. В работе [162] предложена методика разработки и реализации проектов в области интеллектуального анализа данных (ИАД) (Data mining) о существующих на предприятиях бизнес-процессах в условиях Индустриальной революции 4.0 (Industry 4.0).

Деятельность инжиниринговых центров и конструкторских бюро в настоящее время имеет важнейшее значение для успешного решения задач повышения энергоэффективности и цифровизации предприятий НГХК, атомной энергетики, оборонно-ракетной и космической промышленности, которые потребляют огромные объемы материальных, экономических, технологических и других ресурсов.

В работе [163] предложены новые модели, методы и алгоритмы, а также цифровые платформы для разработки приложений по интеллектуальной поддержке принятия решений при управлении проектами, управлении бизнес-процессами технического обслуживания, ремонта и обновления оборудования с целью увеличения эффективности производств на всех этапах ЖЦ.

В работе [164] предложена логико-информационная модель поддержки процесса создания любых инновационных инжиниринговых и организационно-управленческих решений (или артефактов) – проектное предложение, бизнес-план, бизнес-решение, отчет по НИОКР и др. В модели использованы высокопроизводительные семанτικο-вычислительные процедуры. Указанная модель позволяет проверять степень инновационности идеи и выдает полезные рекомендации по библиографическим источникам, а также генерирует исследовательские предложения на основе этой идеи.

ХТС производства высококачественных упаковочных полимерных материалов (ПМ) (пленок и листов) для химической, фармацевтической и пищевой промышленности на экструзионных и каландровых линиях являются сложными объектами управления (ОУ). Эти ОУ характеризуются сложными взаимосвязями между переменными показателями сырья, параметрами оборудования, технологического режима и показателями качества продукции, совокупность которых представляет собой большие массивы накопленных данных (миллиарды значений контролируемых переменных и параметров производств). В связи с этим основным трендом международного развития ХТС производств ПМ в условиях цифровой трансформации являются инжиниринг и применение проблемно-ориентированных КС автоматизированного управления ХТС, которые помогают операторам принимать оптимальные решения по энергоэффективности и планированию ХТС производства на основе сбора и обработки больших массивов промышленных данных (БМПД) с использованием инструментов системного и природоинспирированных алгоритмов оптимизации (в частности, генетических алгоритмов) [165–167].

Задача оптимального энергоресурсоэффективного управления ХТС производства ПМ состоит в определении оптимальных значений управляющих воздействий на ключевых стадиях производства, которые в условиях действия возмущений (прежде всего подачи возвратных потоков отходов) обеспечивают заданные значения показателей качества ПМ при выполнении требований к производительности и энергоэффективности ХТС для различных типов ПМ и конфигураций производственных линий.

Для комплексной оценки производительности, времени пребывания и параметров состояния процесса экструзии в производстве ПМ, от

которых зависят показатели теплового состояния и материальной однородности экструдата, предложен комбинированный алгоритм, учитывающий аппаратную гибкость экструдеров, сложную структуру технологических потоков и разнообразие протекающих в них процессов [168].

Результаты тестирования разработанных КС по данным ХТС производства плоских поливинилхлоридных и рукавных полиэтиленовых пленок на заводах России и Германии подтвердили адекватность предложенных математических моделей и алгоритмов, работоспособность КС и возможность их использования в качестве системы-советчика операторов при определении энергоресурсоэффективных режимов работы ХТС производства высококачественных ПМ. Применение разработанных КС позволяет сократить время принятия оптимальных управленческих решений, повысить производительность ХТС, уменьшив невозвратные отходы и энергозатраты.

Различные инструменты CALS-технологий обеспечивают на различных этапах инжиниринга ХТС цифровое отображение продукции, единиц оборудования и производств НГХК в целом в виде различных компьютерных моделей, чертежей и визуальных 3D-изображений (или цифровых двойников) промышленных объектов на всех этапах их жизненного цикла [169–171]. Цифровые двойники являются перспективными цифровыми инструментами анализа и повышения безопасности производств и цепей поставок НГХК и ТЭК. Комплексное использование всех видов цифровых двойников обеспечивает успешное решение задач логистического управления качеством готовой продукции, повышения надежности и безопасности производств на всех этапах ЖЦ. В наибольшей степени цифровые двойники производства востребованы на опасных производствах НГХК и ТЭК, на которых протекают экзотермические химические реакции, процессы окисления и процессы при высоком давлении. Нарушение оптимальных технологических режимов функционирования таких ХТС и предприятий могут вызывать аварийные ситуации со значительным не только техногенным и экологическим ущербом, но и угрозой жизни людей [172].

В работах [173, 174] предложены оригинальные интеллектуально-вычислительные алгоритмы технической диагностики качества специального стекла. В работе [173] решена задача инжиниринга КС автоматизированного управления температурой, влажностью, однородностью и степенью соответствия рецепту состава исходной стекольной шихты с применением моделей теории искусственного интеллекта в виде искусственных нейронных сетей с глубоким обучением и адаптивного программно-информационного комплекса компании Siemens для анализа и повышения качества специального листового стекла.

В работе [174] выполнен системный анализ основных типов дефектов листового стекла при его производстве; предложен оригинальный комплексный вейвлетно-нейронно-эвристический алгоритм технической диагностики точечных дефектов листового стекла, подробно описан анализ диагностики дефекта “Закрытый пузырь”. Разработаны оригинальные интеллектуальный алгоритм и программно-информационное обеспечение для АСУ (MES) многостадийного производства высококачественного листового стекла.

Для повышения безопасности производств и цепей поставок НГХК необходимо разрабатывать модели представления знаний [169] с применением так называемых хроник, описывающих все предыдущие неисправные состояния оборудования с учетом их причинно-следственных связей. Эти модели представления знаний должны входить в интеллектуальное программно-информационное обеспечение цифрового двойника производства [175]. Диагностика неисправностей технологического оборудования особенно важна при запуске и останове технологических процессов ХТС.

Инжиниринг цифровых двойников ХТС с использованием CALS-технологий является важной операцией инжиниринга информационной системы управления проектом производства, что позволит сократить время проектирования, уменьшить количество проектных ошибок и необоснованных проектных решений. На стадии создания технического задания и технико-экономического обоснования разработка предварительного цифрового двойника производства позволит более точно определить показатели энергопотребления, времени производственного цикла, показатели качества продукции и безопасности производства.

#### МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ ПОКАЗАТЕЛЕЙ НАДЕЖНОСТИ, ЦИФРОВИЗИРОВАННОГО УПРАВЛЕНИЯ РИСКАМИ И БЕЗОПАСНОСТЬЮ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В решении задач инжиниринга энергоресурсоэффективных экологически безопасных ХТС принципиальное значение имеет применение научно-обоснованных комплексных методов как обеспечения оптимальных показателей надежности и технологической безопасности ХТС и территориальных систем газоснабжения [176], так и цифровизированного управления и минимизации различного вида рисков производств и цепей поставок НГХК, биохимического и химико-металлургического комплекса [177].

В работе [178] развиты теоретические основы анализа и оценки риска, а также цифровизируемого управления безопасностью ХТС. Предложены логико-информационные, логические и вероятностные модели анализа и оценки риска возник-

новения аварий для различных классов объектов НГХК. Сформулирована формализованная постановка задач управления безопасностью ХТС и разработаны производственные правила принятия решений [169] по оперативному управлению безопасностью ХТС на основе предотвращения возникновения отказов и аварийных ситуаций на ХТС [176]. Развита методика цифровизированного управления безопасностью ХТС с использованием современных программно-информационных инструментов, методов системного анализа ХТС, методов и принципов создания интеллектуальных интегрированных систем управления безопасностью производств НГХК [178].

В работе [179] предложено использовать системный подход к управлению безопасным обращением с химической продукцией на всех ее стадиях жизненного цикла и по всей ЦП предприятий НГХК. Разработана функциональная структура информационно-аналитической системы управления безопасным обращением с химической продукцией, предложен алгоритм классификации видов опасностей химической продукции в условиях неопределенности.

В последние годы предложена методология инжиниринга надежных и экологически безопасных ХТС на основе принципов самоорганизации. Предложены основные принципы и методология самоорганизации (СО) свойств надежности и безопасности энергоресурсоэффективных ХТС на основе эвристического алгоритма, включающего последовательность процедур обработки исходных данных декларативным методом.

Для синтеза ХТС с оптимальными показателями надежности и безопасности разработана интеллектуальная КС, которая включает, интеллектуальный планировщик, решатель мультидисциплинарных задач, базы знаний и данных, онтологию, экспертные системы (ЭС) и вычислительные модули (ВМ). Эта КС обеспечивает *самоадаптацию и взаимосвязанность* структуры ЭС, ВМ и БД, релевантных конкретной задаче синтеза высоконадежных ХТС [180, 181].

#### СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МНОГОУРОВНЕВОЙ ПОДГОТОВКИ КАДРОВ ХИМИКОВ-ТЕХНОЛОНОВ ПО ИНЖИНИРИНГУ ЭНЕРГО- РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ ХИМИКО- ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В 2001 г. по инициативе академика РАН П.Д. Саркисова – ректора Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева (РХТУ), при активном научно-методическом участии академика РАН В.П. Мешалкина и при большой учебно-методической работе профессора, д. т. н. Е.А. Дмитриева было открыто в

системе высшего химико-технологического образования Российской Федерации новое направление многоуровневой подготовки кадров: “Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии нефтехимии и биотехнологии” [182]. В настоящее время по этому направлению успешно ведется подготовка бакалавров и магистров в РХТУ, Казанском национальном исследовательском университете, Ивановском государственном химико-технологическом университете, Уфимском государственном нефтяном технологическом университете, в Санкт-Петербургском государственном технологическом институте.

Начиная с 2001 г. кафедра Логистики и экономической информатики (ЛогЭКИ), созданная в РХТУ по инициативе академика РАН В.П. Мешалкина при одобрении академика РАН П.Д. Саркисова и при организационно-методической поддержке специальной программы TEMPUS, учрежденной Европейской Комиссией, успешно обучает бакалавров и магистров, используя при составлении основных образовательных программ (ООП) по направлению “Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии нефтехимии и биотехнологии”, изложенные в настоящем аналитическом обзоре современные теоретические методы и цифровизированные инструменты инжиниринга энергоресурсосберегающих экологически безопасных высоконадежных ХТС и цепей поставок ХК, НГХК и ТЭК.

Следует особо подчеркнуть, что основные разделы ООП по уникальной специальности “Chemical Process Engineering” (Инжиниринг химико-технологических систем), которые разработаны и активно используются в ряде ведущих университетов мира: Imperial College (London, UK), University Polytechnic of Catalonia (Spain), South Bank Polytechnic University (London, UK), The University of Manchester (UK), Carnegie Mellon University (USA), в значительной степени совпадают с ООП по направлению “Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии нефтехимии и биотехнологии”.

Выпускники кафедры ЛогЭКИ – бакалавры и магистры, получая один диплом, приобретают фактически три квалификации – “технолог”, “логист” и “управленец–организатор”, что позволяет им успешно решать следующие сложные задачи повышения экономической эффективности и конкурентоспособности ХТС, предприятий и ЦП химического и нефтегазохимического комплекса в условиях цифровой экономики:

- инжиниринг оптимальных технологических схем и автоматизированных систем управления эксплуатацией энергоресурсосберегающих производств и цепей поставок; управление проектами по инжинирингу энергоресурсосберегающих

экологически безопасных производств и цепей поставок;

- анализ и управление производственными, финансовыми и экологическими рисками промышленных предприятий и цепей поставок, методы интенсификации ХТС;
- составление планов стратегического, тактического и оперативного управления энергоресурсосбережением на промышленных предприятиях и в ЦП;
- организация цифровизации производства НГХК;
- организация и проведение энергетического аудита на промышленных, коммерческих и коммунально-бытовых предприятиях;
- оптимизация энергоресурсоэффективности производств и ЦП предприятий малотоннажной химии;
- выбор и практическое использование корпоративных информационных систем логистического управления технологическими процессами, бизнес–процессами и материальными ресурсами предприятий, инжиниринг логистических систем управления “зелеными” ЦП продукции.

Все выпускники кафедры ЛогЭКИ, завершив обучение, практически могут в условиях цифровой экономики эффективно работать в различных отраслях и сферах деятельности экономики России и индустриально развитых государств. В области инжиниринга и организационно-технической деятельности: на производственных предприятиях, в инжиниринговых центрах и консультативных центрах, в проектных организациях и научно-исследовательских институтах, в вертикально-интегрированных компаниях нефтегазохимического, топливно-энергетического и химического комплекса. В области логистики и управления цепями поставок, организационно-экономической и административно–управленческой деятельности в сфере: производства; материально–технического обеспечения; цифрового предпринимательства; логистики складирования и транспорта; цифровой коммерции; оказания услуг; государственного и муниципального управления.

**Международные контакты кафедры ЛогЭКИ** в области образования и научных исследований по инжинирингу энергоресурсосберегающих ХТС: Генуэзский университет и Римский университет (Италия), Технический университет Панония (г. Веспрем, Венгрия), Университет Манчестера (Великобритания), Империял колледж (Лондон, Великобритания), Каталонский политехнический университет (Барселона, Испания).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ. ПРИОРИТЕТНЫЕ АКТУАЛЬНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ ПО ИНЖИНИРИНГУ ЭНЕРГОРЕСУРСООБЪЕКТИВНЫХ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Для успешной реализации основных целей устойчивого развития человечества и создания безотходной, или “круговой”, цифровой экономики в условиях промышленной революции “Индустрия 4.0” с учетом концепции конвергенции “Нано-Био-Информационно-Когнитивно-Социальных” (НБИКС) технологий необходимо особое внимание уделять проведению фундаментальных и прикладных НИР в области инжиниринга высокоинтенсивных энергоресурсосберегающих высоконадежных экологически безопасных ХТС, по следующим приоритетным направлениям, принятым в решении XXI Менделеевского съезда [183], по предложению секции Съезда “Энергоресурсоэффективность, экологическая безопасность и управление рисками производств, предприятий и цепей поставок НГХК”:

- методы интенсификации, комбинирования и минитюаризации ХТП;
- методы цифровизированного инжиниринга и логистического управления эксплуатацией энергоресурсоэффективных экологически безопасных наукоемких ХТС и ЦП предприятий химического, нефтегазохимического, биохимического, фармацевтического и химико-металлургического комплекса;
- методы и способы рационального природопользования с широким применением возобновляемых природных ресурсов;
- методы комбинированной энергоресурсоэффективной экологически безопасной переработки промышленных и коммунальных бытовых отходов и стоков;
- методы захоронения отходов в геофизических образованиях;
- методы цифровизированного инжиниринга безотходных природоподобных ХТП и ХТС и инжиниринга “зеленых” ЦП в реальном секторе экономики;
- методы многомасштабного компьютерного моделирования ХТП, структуры веществ и композиционных материалов;
- методы компьютерной оптимизации и автоматизированного синтеза энергоресурсоэффективных ХТС и ЦП;
- методы инжиниринга цифровизированных робото-кибернетических интеллектуальных производств и предприятий;
- методы цифровизированного мониторинга производств, предприятий и полигонов отходов с применением дронов и других беспилотных средств;



- методы логистического управления экологически безопасным обращением с отходами;
- методы компьютерной оценки воздействия на ОС техногенных систем;
- методы оценки энергоресурсоэффективности этапов ЖЦ продукции;
- методы минимизации экологических, производственных, предпринимательских и финансовых рисков для промышленных предприятий химического, нефтегазохимического, биохимического, фармацевтического и химико-металлургического комплекса.

Ученые химики, химики-технологи и материаловеды должны особое внимание уделять постоянному совершенствованию и актуализации на основе всестороннего использования современных достижений теоретической и прикладной химии, теории анализа и синтеза энергоресурсоэффективных ХТС, методологии конвергенции НБИКС-технологий, а также инструментов промышленной революции “Индустрия 4.0” ООП многоуровневого химического и химико-технологического образования при подготовке высококвалифицированных компетентных кадров для успешного решения задач инжиниринга энергоресурсоэффективных экологически безопасных устойчивых производств, предприятий и ЦП химического, нефтегазохимического, топливно-энергетического, биохимического, фармацевтического и химико-металлургического комплекса.

Автор благодарит магистранта кафедры Логистики и экономической информатики РХТУ им. Д.И. Менделеева Баранову Я.П. за большую помощь при техническом оформлении текста обзора.

Глубокую благодарность автор выражает своим коллегам-сподвижникам: профессору, д. х. н. Е.Г. Винокурову, профессору, д. т. н. В.И. Бобкову, профессору, д. х. н. Н.Т. Берберовой, профессору, д. т. н. А.В. Гарабджиу, профессору, д. т. н. М.И. Дли, старшему научному сотруднику, к. т. н. К.Л. Занавескину профессору, д. т.н . А.Г. Кравец, профессору, д. т. н. А.С. Макаровой, профессору, д. т. н. Е.Р. Мошеву, доценту, к. т. н. С.В. Остаху, доценту, к. т. н. Д.Ю. Петрову, профессору, д. т. н. Т.Б. Чистяковой, профессору, д. т. н. А.И. Шулаеву, за участие в подборе оригинальных исходных материалов для написания текста аналитического обзора.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-79-30029).

СПИСОК ОСНОВНЫХ АББРЕВИАТУР

CAD-технология	технология автоматизированного проектирования
CALS-технология	технология компьютеризированной интегрированной логистической поддержки (новое название: непрерывная интегрированная информационная поддержка жизненного цикла изделия)
KPI	Ключевые индикаторы производительности предприятия (Key Performance Indicators)
НК	нанокompозиты
SWOT-анализ (SWOT analysis)	анализ “Сильные стороны-Слабые стороны-Возможности-Угрозы”
БД	база данных
ГОК	горно-обогажительный комбинат
ЕО	единица оборудования (аппарат)
ЖЦ	жизненный цикл
ИКС	интеллектуальная компьютерная система
ИКТ	информационно-коммуникационные технологии
ИНС	искусственные нейронные сети
ЛогЭки	Логистика и Экономическая Информатика
МФИ	микрофотоизображения
НГХК	нефтегазохимический комплекс
НИОКР	научно-исследовательские работы и опытно-конструкторские разработки
ООП	Основная образовательная программа
ОС	окружающая среда
РАН	Российская Академия Наук
РНС	рекуррентные нейронные сети
РХТУ	Российский Химико-Технологический Университет им. Д.И. Менделеева
СГ	сложный газопровод
СЦЛП	смешанное целочисленное линейное программирование
ТП	типовой процесс, единичная технологическая операция
ТС	теплообменные системы
УГВ	углеводороды
ХТП	химико-технологический процесс
ХТС	химико-технологическая система
ХЭТС	химико-энерготехнологическая система
ЦП	цепь поставок
ЦУР	цели устойчивого развития

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мешалкин В.П. Введение в инжиниринг энергоресурсосберегающих химико-технологических систем. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2020. 208 с.
2. Жаворонков Н.М., Кафаров В.В., Перов В.Л., Мешалкин В.П. Новые принципы анализа и синтеза химико-технологических систем // Теорет. основы хим. технологии. 1970. Т. 4. № 2. С. 152–167.
3. Кафаров В.В., Мешалкин В.П. Анализ и синтез химико-технологических систем. М.: Химия, 1991. 432 с.
4. Meshalkin V.P. Energy-saving technology performance and efficiency indexes // Chem. Eng. Transactions. 2009. V. 18. P. 953–958.
5. Мешалкин В.П., Товажнянский Л.Л., Капустенко П.А. Основы энергоресурсоэффективных экологически безопасных технологий нефтепереработки. Харьков: НТУ “ХПИ”, 2011. 616 с.
6. Meshalkin V.P. Energy-saving technology performance and efficiency indexes // Chemical Engineering Transactions. 2009. V. 18. P. 953. <https://doi.org/10.3303/CET0918156>
7. Grossmann I.E., Harjunkoski I. Process Systems Engineering: Academic and industrial perspectives // Computers and Chemical Engineering. 2019. V. 126. P. 474. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.04.028>
8. Meshalkin V.P., Khodchenko S.M. The nature and types of engineering of energy- and resource-efficient chemical process systems // Polymer Science. Series D. 2017. V. 10. P. 347. <https://doi.org/10.1134/S1995421217040128>
9. Мешалкин В.П. Ресурсоэнергоэффективные методы энергообеспечения и минимизации отходов нефтеперерабатывающих производств: основы теории и наилучшие практические результаты М., Генуя: Химия, 2009.
10. European Roadmap for process Intensification URL: [https://efce.info/efce\\_media/-p-531.pdf](https://efce.info/efce_media/-p-531.pdf) [Retrieved 21.01.2021].
11. Harmsen J. Process intensification in the petrochemicals industry: Drivers and hurdles for commercial implementation Chemical Engineering and Processing: Process Intensification. 2010. V. 49. P. 70. <https://doi.org/10.1016/j.ccep.2009.11.009>
12. Becht S., Franke R., Geißelmann A., Hahn H.A. An industrial view of process intensification // Chemical Engineering and Processing: Process Intensification. 2009. V. 48. P. 329. <https://doi.org/10.1016/j.ccep.2008.04.012>
13. CEFIC, Chemical Industry Image 2004, Pan-European survey (2004) ECN, 12 July, p. 27.
14. Mills P.L., Quiram D.J., Ryley J.F. Microreactor technology and process miniaturization for catalytic reactions—A perspective on recent developments and emerging technologies. Chemical Engineering Science. 2007. V. 62. P. 6992. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.09.021>
15. Segovia-Hernández J.G., Bonilla-Petriciolet A. in Process Intensification in Chemical Engineering: Design Optimization and Control. 2016. P. 1–336. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-28392-0.J.G>
16. Aboelazayem O., Gadalla M., Saha B. Design and simulation of an integrated process for biodiesel production from waste cooking oil using supercritical methanolysis // Energy. 2018. V. 161. P. 299. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.07.139>
17. Sitter S., Chen Q., Grossmann I.E. An overview of process intensification methods // Current Opinion in Chemical Engineering. 2019. V. 25. P. 87. <https://doi.org/10.1016/j.coche.2018.12.006>
18. Klemeš J., Varbanov P.S., Walmsley T.G., Jia X. New directions in the implementation of Pinch Methodology (PM) // Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2018. V. 98. P. 439. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.09.030>
19. Klemeš J.J., Varbanov P.S., Kravanja Z. Recent developments in Process Integration // Chemical Engineering Research and Design. 2013. V. 91. P. 2037. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2013.08.019>
20. Meshalkin V.P., Tovazhnyansky L.L., Ulyev L.M., Mel'nikovskaya L.A., Khodchenko S.M. Teoreticheskie osnovy khimicheskoy tekhnologii. 2012. V. 46. № 5. P. 491. (in Russian) [Мешалкин В.П., Товажнянский Л.Л., Ульев Л.М., Мельниковская Л.А., Ходченко С.М. Энергоресурсоэффективная реконструкция установки нефтепереработки на основе пинч-анализа с учетом внешних тепловых потерь // Теорет. основы хим. технологии. 2012. Т. 46. № 5. С. 491]
21. Ulyev L.M., Kanishev M.V., Chibisov R.E. Determination of Energy Efficiency Features of Oil Refinery Units and Their Complexes // Chemical Engineering Transactions. 2020. V. 81. P. 283. <https://doi.org/10.3303/CET2081048>
22. Kanishev M.V., Ulyev L.M., Chibisov R.E., Vasilyev M.A. Benchmarking for Refinery Units // Chemical Engineering Transactions. 2018. V. 70. P. 1099. <https://doi.org/10.3303/CET1870184>
23. Ulyev L.M., Kanishev M.V., Vasilyev M.A., Maatouk A. Energy Efficiency Retrofit of Two-Flow Heat Exchanger System // Chemical Engineering Transactions. 2018. V. 70. P. 1513. <https://doi.org/10.3303/CET1870253>
24. Chibisov R.E., Kanishchev M.V., Meshalkin V.P., Ul'ev L.M., Vasil'ev M.A. Energoberezhenie i Vodopodgotovka. 2019. № 2(118). P. 31. (in Russian)
25. Chibisov R.E., Kanishchev M.V., Meshalkin V.P., Ul'ev L.M., Vasil'ev M.A. Energoberezhenie i Vodopodgotovka. 2019. № 5(121). P. 9. (in Russian)
26. Meshalkin V.P., Ul'ev L.M., Kanishchev M.V., Chibisov R.E., Vasil'ev M.A. Energoberezhenie i vodopodgotovka. 2019. № 3(119). P. 19. (in Russian)
27. Gordeev E.G., Ananikov V.P. Widely accessible 3D printing technologies in chemistry, biochemistry and pharmaceuticals: applications, materials and prospects // Russ. Chem. Rev. 2020. V. 89. P. 1507. <https://doi.org/10.1070/RCR4980>
28. Macdonald N.P., Calot J.M., Smejkal P., Guijt R.M., Paull B., Breadmore M.C. Comparing Microfluidic Performance of Three-Dimensional (3D) Printing Platforms // Analytical Chemistry. 2017. V. 89. P. 3858. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.7b00136>
29. Butusov O.B., Meshalkin V.P., Popov D.V., Tyukaev D.A. Computer-aided simulation of radioactive pollution of environment upon destruction of geologic repositories of radioactive wastes with allowance for uncertainty // Theor. Found. Chem. Eng. 2013. V. 47. № 6. P. 702. <https://doi.org/10.1134/S0040579513060031> [Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Попов Д.В., Тюкаев Д.А. Компьютерное моделирование радио-

- активного загрязнения окружающей среды при разрушениях геологических хранилищ радиоактивных отходов с учетом неопределенности // Теорет. основы хим. технологии. 2013. Т. 47. № 6. С. 639. <https://doi.org/10.7868/S0040357113060031>
30. *Sarkisov P.D., Butusov O.B., Meshalkin V.P.* Computer-aided tools for molecular systems engineering and wavelet-morphometric analysis of the texture of nanomaterials // *Theor. Found. Chem. Eng.* 2011. V. 45. № 1. P. 1. <https://doi.org/10.1134/S004057951101009X> [Саркисов П.Д., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П. Компьютерные инструментальные средства молекулярной инженерии и вейвлетно-морфометрический анализ текстуры наноматериалов // Теоретические основы химической технологии. 2011. Т. 45. № 1. С. 3–14.]
  31. *Sarkisov P.D., Butusov O.B., Meshalkin V.P., Sevastianov V.G., Galaev A.B., Vinokurov E.G.* Wavelet morphometric neural network algorithm for analyzing nanomaterial porous texture // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering.* 2012. V. 46. № 4. P. 329. <https://doi.org/10.1134/S004057951204015X> [Саркисов П.Д., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Севастьянов В.Г., Галаев А.Б., Винокуров Е.Г. Вейвлетно-морфометрический нейросетевой алгоритм анализа пористой текстуры наноматериалов // Теоретические основы химической технологии. 2012. Т. 46. № 4. С. 386.]
  32. *Butusov O.B., Meshalkin V.P., Orlova L.A., Shchegoleva N.E., Kabanov A.N.* Texture and fractal analysis of silica-alumina glass ceramics // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering.* 2016. V. 50. № 2. P. 188. <https://doi.org/10.1134/S0040579516020020> [Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Орлова Л.А., Шеголева Н.Е., Кабанов А.Н. Текстурно-фрактальный анализ алюмосиликатной стеклокерамики // Теоретические основы химической технологии. 2016. Т. 50. № 2. С. 194.]
  33. *Asvestas P.A.* J. Visual Communication and Image Representation. 1998. V. 9. P. 392.
  34. *Annadhasan A.* International J. Computer Science and Information Technology & Security (IJCSITS). 2012. V. 2. P. 166.
  35. *Bustillo R.M.* Mineral Resources: From Exploration to Sustainability Assessment. 2018. V. 96. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-58760-8>
  36. *Mayer B.K., Baker L.A., Boyer T.H., Drechsel P., Gifford M., Hanjra M.A., Parameswaran P., Stoltzfus J., Westerhoff P., Rittmann B.E.* Total Value of Phosphorus Recovery // *Environmental Science and Technology.* 2016. V. 50. P. 6606. <https://doi.org/10.1021/acs.est.6b01239>
  37. *Elgharbi S., Horchani-Najfer K., Ferid M.* Investigation of the structural and mineralogical changes of Tunisian phosphorite during calcinations // *J. Thermal Analysis and Calorimetry.* 2015. V. 119. P. 265. <https://doi.org/10.1007/s10973-014-4132-5>
  38. *Chen Y.Q., Zhao H.L., Wang C.Y.* Two-stage reduction for the preparation of ferronickel alloy from nickel laterite ore with low Co and high MgO contents // *International J. Minerals, Metallurgy and Materials.* 2017. V. 24. P. 512. <https://doi.org/10.1007/s12613-017-1432-3>
  39. *Wen M., Zhang T.-A., Dou Z.-H.* Dongbei Daxue Xuebao (Ziran Kexue Ban). 2016. V. 960. <https://doi.org/10.3969/j.issn.1005-3026.2016.07.011>
  40. *Yuan S., Zhou W., Han Y., Li Y.* Efficient enrichment of low-grade refractory rhodochrosite by preconcentration-neutral suspension roasting-magnetic separation process // *Powder Technology.* 2019. V. 361. P. 529. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.11.082>
  41. *Bobkov V.I., Borisov V.V., Dli M.I., Meshalkin V.P.* Intensive technologies for drying a lump material in a dense bed // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering.* 2017. V. 51. № 1. P. 70. <https://doi.org/10.1134/S0040579517010031> [Бобков В.И., Борисов В.В., Дли М.И., Мешалкин В.П. Интенсивные технологии сушки кускового материала в плотном слое // Теоретические основы химической технологии. 2017. Т. 51. № 1. С. 72–77.]
  42. *Bobkov V.I., Borisov V.V., Dli M.I., Meshalkin V.P.* Study of the thermal characteristics of phosphate raw materials in the annealing temperature range // Intensive technologies for drying a lump material in a dense bed // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering.* 2017. V. 51. № 3. P. 307. <https://doi.org/10.1134/S0040579517030022> [Бобков В.И., Борисов В.В., Дли М.И., Мешалкин В.П. Исследование тепловых характеристик фосфатного сырья в диапазоне температур обжига // Теоретические основы химической технологии. 2017. Т. 51. № 3. С. 295–300.]
  43. *Meshalkin V.P., Bobkov V.I., Dli M.I., Khodchenko S.M.* Computer-aided modeling of the chemical process of drying of a moving dense multilayer mass of phosphorite pellets // *Doklady Chemistry.* 2017. V. 475. P. 188. <https://doi.org/10.1134/S0012500817080031>
  44. *Meshalkin V.P., Bobkov V.I., Dli M.I., Khodchenko S.M.* Computer modeling of the chemical-power engineering process of roasting of a moving multilayer mass of phosphorite pellets // *Doklady Chemistry.* 2017. V. 477. P. 282. <https://doi.org/10.1134/S0012500817120023>
  45. *Bobkov V.I., Borisov V.V., Dli M.I., Meshalkin V.P.* Modeling the calcination of phosphorite pellets in a dense bed // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering.* 2015. V. 49. № 2. P. 176. <https://doi.org/10.1134/S0040579515020025> [Бобков В.И., Борисов В.В., Дли М.И., Мешалкин В.П. Моделирование процессов обжига фосфоритовых окатышей в плотном слое // Теоретические основы химической технологии. 2015. Т. 49. № 2. С. 182.]
  46. *Meshalkin V.P., Bobkov V.I., Dli M.I., Dovi V.* Optimization of Energy and Resource Efficiency in a Multistage Drying Process of Phosphate Pellets // *Energies.* 2019. V. 12. P. 3376. <https://doi.org/10.3390/en12173376>
  47. *Meshalkin V.P., Bobkov V.I., Dli M.I., Khodchenko S.M.* Optimizing the energy efficiency of the chemical and energy engineering process of drying of a moving dense multilayer mass of phosphorite pellets // *Doklady Chemistry.* 2017. V. 477. P. 286. <https://doi.org/10.1134/S0012500817120059>
  48. *Meshalkin V.P., Puchkov A.Y., Dli M.I., Bobkov V.I.* Generalized Model for Engineering and Controlling a Complex Multistage Chemical Energotechnological System for Processing Apatite-Nepheline Ore Wastes //

- Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2019. V. 53. № 4. P. 463.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579519040237>  
 [Мешалкин В.П., Пучков А.Ю., Дли М.И., Бобков В.И. Обобщенная модель инжиниринга и управления сложной многостадийной химико-энерготехнологической системой переработки отходов апатит-нефелиновых руд // Теоретические основы химической технологии. 2019. Т. 53. № 4. С. 363–371.]
49. *Zanaveskin K.L., Maslennikov A.N., Zanaveskina S.M., Vlasenko V.I.* Reaction ability of titanium-bearing raw materials during the titanium tetrachloride obtaining // *Tsvetnye Metally*. 2017. № 4. P. 47.  
<https://doi.org/10.17580/tsm.2017.04.07>
  50. *Zanaveskin K.L., Zanaveskina S.M., Maslennikov A.N., Politova E.D., Vlasenko V.I., Zanaveskin L.N.* Activation of quartz-leucoxene concentrate for processing into titanium tetrachloride // *Russian J. Applied Chemistry*. 2016. V. 89. P. 1733.  
<https://doi.org/10.1134/S107042721611001X>
  51. *Zanaveskin K.L., Maslennikov A.N., Zanaveskina S.M., Dmitriev G.S., Zanaveskin L.N., Politova E.D., Vlasenko V.I.* Leaching SiO<sub>2</sub> and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Impurities from Leucoxene from the Yaregskoe Deposit by Sodium Hydroxide Solution // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2019. V. 53. № 4. P. 669.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579519040110>
  52. *Zanaveskin K.L., Maslennikov A.N., Zanaveskina S.M., Dmitriev G.S.* The Yaregskoye deposit leucoxene processing by means of autoclave leaching // *Obogashchenie Rud*. 2016. № 6. P. 14.  
<https://doi.org/10.17580/or.2016.06.03>
  53. *Zanaveskin K.L., Meshalkin V.P.* Chlorination of Quartz-Leucoxene Concentrate of Yarega Field // *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science*. 2020. V. 51. P. 906.  
<https://doi.org/10.1007/s11663-020-01810-2>
  54. *Vinokurov E.G., Burukhina T.F., Guseva T.V.* *Tekhnologiya metallov*. 2020. № 7. P. 2.  
<https://doi.org/10.31044/1684-2499-2020-0-7-2-6>
  55. *Larson C.* Global comparisons of metal finishing sectors: Part 2, some technology and operational variations // *Transactions of the Institute of Metal Finishing*. 2012. V. 90. P. 232.  
<https://doi.org/10.1179/0020296712Z.00000000054>
  56. *Larson C.* Surface finishing industry – where is it all being done? // *Transactions of the Institute of Metal Finishing*. 2017. V. 95. P. 233.  
<https://doi.org/10.1080/00202967.2017.1351642>
  57. *Larson C.* Comparisons of metal finishing sectors revisited: variations in some economic and structural factors // *Transactions of the Institute of Metal Finishing*. 2019. V. 97. P. 109.  
<https://doi.org/10.1080/00202967.2019.1608711>
  58. *Vinokurov E.G., Meshalkin V.P., Vasilenko E.A., Nevmyatullina K.A., Burukhina T.F., Bondar' V.V.* System analysis of the efficiency and competitiveness of chroming technologies // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2016. V. 50. № 5. P. 730.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579516050389>  
 [Винокуров Е.Г., Мешалкин В.П., Василенко Е.А., Невмятулина Х.А., Бурухина Т.Ф., Бондар' В.В. Системный анализ эффективности и конкурентоспособности технологий хромирования // Теоретические основы химической технологии. 2016. Т. 50. № 5. С. 551–560.]
  59. *Vinokurov E.G., Meshalkin V.P., K.A. Nevmyatullina K.A., Burukhina T.F., Bondar' V.V., Khodchenko S.M.* *Ekonomika i Matematicheskie Metody-Economics and Mathematical Methods*. 2019. V. 55. P. 43.  
<https://doi.org/10.31044/1684-2499-2020-0-7-2-6>
  60. *Meshalkin V.P., Vagramyan T.A., Mazurova D.V., Grigoryan N.S., Abrashov A.A., Khodchenko S.M.* Development of a Power-and-Resource-Saving Combined Low-Temperature Chemical Engineering Process of Crystalline Phosphatizing // *Doklady Chemistry*. 2020. V. 490. P. 19.  
<https://doi.org/10.1134/S001250082001005X>
  61. *Meshalkin V.P., Abrashov A.A., Vagramyan T.A., Grigoryan N.S., Utochkina D.S.* Development of Composition and Investigation of Properties of a New, Environmentally Friendly Molybdenum-Containing Decorative Protective Conversion Coating on Zinc-Plated Surfaces // *Doklady Chemistry*. 2018. V. 480. P. 132.  
<https://doi.org/10.1134/S0012500818060046>
  62. *Meshalkin V.P., Abrashov A.A., Vagramyan T.A., Grigoryan N.S., Utochkina D.S.* Development of composition and study of properties of a new high-efficiency silicon-containing protective conversion coating on zinc-plated surfaces // *Doklady Chemistry*. 2017. V. 475. P. 196.  
<https://doi.org/10.1134/S0012500817080067>
  63. *Abrashov A.A., Grigoryan N.S., Vagramyan T.A., Zheludkova E.A., Meshalkin V.P.* Passivation of zinc coatings in cerium-containing solutions // *Russian J. Applied Chemistry*. 2015. V. 88. P. 1594.  
<https://doi.org/10.1134/S1070427215100067>
  64. *Vinokurov E.G., Kudryavtsev V.N.* Protection of Metals. 1992. V. 28. P. 255.
  65. *Vinokurov E.G., Kudryavtsev V.N.* *Zashchita Metallov*. 1992. V. 28. P. 331.
  66. *Vinokurov E.G., Kuznetsov V.V., Bondar' V.V.* *Russian J. Coordination Chemistry*. 2004. V. 30. P. 496.  
<https://doi.org/10.1023/B:RU-CO.0000034791.29424.1b>
  67. *Kuznetsov V.V., Vinokurov E.G., Azarko O.E., Kudryavtsev V.N.* *Russian J. Electrochemistry*. 1999. V. 35. P. 698.
  68. *Kuznetsov V.V., Vinokurov E.G., Kudryavtsev V.N.* Effect of hydrodynamic electrolysis conditions on the kinetics of cathodic processes in chromium(III) sulfate electrolytes // *Russian J. Electrochemistry*. 2000. V. 36. P. 756.  
<https://doi.org/10.1007/BF02757676>
  69. *Vinokurov E.G., Demidov A.V., Bondar' V.V.* Physicochemical model for choosing complexes for chromium-plating solutions based on Cr(III) compounds // *Russian J. Coordination Chemistry*. 2005. V. 31. P. 14.  
<https://doi.org/10.1007/s11173-005-0027-0>
  70. *Vinokurov E.G.* Thermodynamic probability model of ligand selection in solutions designed for electrodeposition of alloys and multivalent metals // *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces*. 2010. V. 46. P. 615.  
<https://doi.org/10.1134/S2070205110050205>
  71. *Vinokurov E.G., Mukhametova G.M., Burukhina T.F., Skopintsev V.D., Meshalkin V.P.* Physicochemical Model of Selection of Complex Compounds for Electroless Metal Plating // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2020. V. 54. № 3. P. 474.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579520030136>

- [Винокуров Е.Г., Мухаметова Г.М., Бурухина Т.Ф., Скопинцев В.Д., Мешалкин В.П. Физико-химическая модель выбора комплексных соединений при химическом осаждении металлических покрытий // Теоретические основы химической технологии. 2020. Т. 54. № 3. С. 354–361.]
72. *Vinokurov E.G., Bondar' V.V.* Logistic model for choosing ligands for alloy electrodeposition // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2007. V. 41. № 4. P. 384.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579507040070>  
[Винокуров Е.Г., Бондарь В.В. Вероятностная модель выбора лигандов для электроосаждения сплавов // Теоретические основы химической технологии. 2007. Т. 41. № 4. С. 407–414.]
73. *Vinokurov E.G., Mukhametova G.M., Vasil'ev V.V., Burukhina T.F., Skopintsev V.D.* Influence of Characteristics of Nickel Complex Compounds on the Rate of Chemical Deposition and Composition of Nickel–Phosphorus Alloy // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2019. V. 53. № 4. P. 544.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579519040286>  
[Винокуров Е.Г., Мухаметова Г.М., Васильев В.В., Бурухина Т.Ф., Скопинцев В.Д. Влияние характеристик комплексных соединений никеля на скорость химического осаждения и состав сплава никель–фосфор // Теоретические основы химической технологии. 2019. Т. 53. № 4. С. 446–451.]
74. *Vinokurov E.G., Burukhina T.F., Napedenina E.Yu.* Analysis of the Distribution and the Criteria of the Resource Consumption of Electrolytes at a Total Concentration Of Concentration Of Compounds // *Galvanotekhnika i Obrabotka Poverkhnosti*. 2019. V. 27. P. 43.  
[https://doi.org/10.47188/0869-5326\\_2019\\_27\\_1\\_43](https://doi.org/10.47188/0869-5326_2019_27_1_43)
75. *Vinokurov E.G., Burukhina T.F., Kolesnikov V.A., Fadina S.V.* Concentration criterion for classifying resource-saving compositions of solutions for metal electroplating // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2012. V. 46. № 5. P. 486.  
<https://doi.org/10.1134/S004057951205020X>  
[Винокуров Е.Г., Бурухина Т.Ф., Колесников В.А., Фаина С.В. Концентрационный критерий классификации ресурсосберегающих составов растворов для электроосаждения металлических покрытий // Теоретические основы химической технологии. 2012. Т. 46. № 5. С. 569–575.]
76. *Fadina S.V., Vinokurov E.G., Burukhina T.F., Kolesnikov V.A.* Total concentration of main components in solutions for metal electroplating as a criterion for classifying and choosing resource-saving compositions of solutions // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2013. V. 47. № 5. P. 593.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579513040222>  
[Фаина С.В., Винокуров Е.Г., Бурухина Т.Ф., Колесников В.А. Суммарная концентрация основных компонентов растворов для электроосаждения металлических покрытий как критерий классификации и выбора ресурсосберегающих составов растворов // Теоретические основы химической технологии. 2013. Т. 47. № 5. С. 573.]
77. *Vasilenko E.A., Vinokurov E.G., Semenov G.N., Pomogaev V.M., Bondar' V.V.* Nauchno-tehnicheskaja informacija. Serija 2. Informacionnye processy i sistemy. 2016. № 1. P. 21.
78. *Kolesnikov A.V., Meshalkin V.P., Davydкова T.V., Kolesnikov V.A.* Scientific and Technological Foundations of Improvement of the Resource Efficiency of Electroflotation Recovery of Poorly Soluble Inorganic Compounds (Oxides, Carbides, Hydroxides) from Aqueous Electrolyte Solutions // *Doklady Physical Chemistry*. 2020. V. 494. P. 133.  
<https://doi.org/10.1134/S001250162009002X>
79. *Meshalkin V.P., Kolesnikov A.V., Gaidukova A.M., Achkasov M.G., Kolesnikov V.A., Belozerskii A.Y., Men'shova I.I.* Experimental Investigation of the Efficiency of the Electroflotation Recovery of a Mixture of a Poorly Soluble Cerium Group Metal Compounds from Aqueous Solutions // *Doklady Physical Chemistry*. 2019. V. 487. P. 99.  
<https://doi.org/10.1134/S0012501619080025>
80. *Meshalkin V.P., Kolesnikov A.V., Savel'ev D.S., Kolesnikov V.A., Belozerskii A.Y., Men'shova I.I., Maslyannikova D.V., Sycheva O.V.* Analysis of the Physicochemical Efficiency of the Electroflotation Recovery of Titanium Tetrachloride Hydrolysis Products from Industrial Waste // *Doklady Physical Chemistry*. 2019. V. 486. P. 83.  
<https://doi.org/10.1134/S0012501619060034>
81. *Meshalkin V.P., Kolesnikov V.A., Desyatov A.V., Milyutina A.D., Kolesnikov A.V.* Physicochemical efficiency of electroflotation of finely divided carbon nanomaterial from aqueous solutions containing surfactants // *Doklady Chemistry*. 2017. V. 476. P. 219.  
<https://doi.org/10.1134/S001250081709004X>
82. *Meshalkin V.P., Kolesnikov A.V., Kovalenko V.S., Gaidukov E.N.* *Doklady Chemistry*. 2016. V. 467. P. 105.
83. *Meshalkin V., Shinkar E., Berberova N., Pivovarova N., Ismagilov F., Okhlobystin A.* Logical-Information Model of Energy-Saving Production of Organic Sulfur Compounds from Low-Molecular Sulfur Waste Fuel Oil // *Energies*. 2020. V. 13. P. 5286.  
<https://doi.org/10.3390/en13205286>
84. *Meshalkin V.P., Shulayev N.S., Pryanichnikova V.V.* Experimental and Theoretical Engineering of Energy-Efficient Electrochemical Process of Soil Remediation to Remove Oil Contaminants // *Doklady Chemistry*. 2020. V. 491. P. 61.  
<https://doi.org/10.1134/S0012500820040023>
85. *Meshalkin V.P., Shulayev N.S., Bykovsky N.A., Arisov V.M.* Physicochemical Foundations of an Energy and Resource Efficient Combined Technology for Processing of Soda Ash Production Wastewater // *Doklady Chemistry*. 2020. V. 494. P. 145.  
<https://doi.org/10.1134/S0012500820090025>
86. *Mohammadi R., Tang W., Sillanpää M.* A systematic review and statistical analysis of nutrient recovery from municipal wastewater by electro dialysis // *Desalination*. 2021. V. 498. P. 114626.  
<https://doi.org/10.1016/j.desal.2020.114626>
87. *Kruglikov S.S.* Application of Electromembrane Processes for the Stabilization and Control of Process Solutions in Electrolytic Cells // *Galvanotekhnika i Obrabotka Poverkhnosti*. 2018. V. 26. P. 41.  
[https://doi.org/10.47188/0869-5326\\_2018\\_26\\_2\\_41](https://doi.org/10.47188/0869-5326_2018_26_2_41)
88. *Butusov O.B., Meshalkin V.P.* Computer simulation of unsteady flows in complex pipelines. M.: Fizmatlit Publishing House, 2005 (In Russian).
89. *Butusov O.B., Meshalkin V.P.* Texture and fractal methods for analyzing the characteristics of unsteady gas flows in pipelines // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2006. V. 40. № 3. P. 291.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579506030109>  
[Бутусов О.Б., Мешалкин В.П. Текстуры и фрактальные методы анализа характеристик не-

- стационарных газовых потоков в трубопроводах // Теоретические основы химической технологии. 2006. Т. 40. № 3. С. 313–327.]
90. *Butusov O.B., Meshalkin V.P.* Computer simulation of transient gas flows in complex round pipes // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2008. V. 42. № 1. P. 85.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579508010119>  
[Бутусов О.Б., Мешалкин В.П. Компьютерное моделирование нестационарных газовых потоков в сложных трубопроводах кругового сечения // Теоретические основы химической технологии. 2008. Т. 42. № 1. С. 88–99.]
  91. *Butusov O.B., Meshalkin V.P.* Computation of the integral parameters of turbulent structures for the transient gas flows in pipes using wavelet transforms // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2008. V. 42. № 2. P. 160.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579508020073>  
[Бутусов О.Б., Мешалкин В.П. Компьютерный расчет интегральных показателей турбулентной структуры нестационарных газовых потоков в трубопроводах с использованием вейвлет-преобразований // Теоретические основы химической технологии. 2008. Т. 42. № 2. С. 170–175.]
  92. *Sarkisov P.D., Butusov O.B., Meshalkin V.P.* Reconstruction of the attractor of the turbulent structure of model gas flows in process pipelines // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2009. V. 43. № 5. P. 583.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579509050017>  
[Саркисов П.Д., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П. реконструкция аттрактора турбулентной структуры модельных газовых потоков в технологических трубопроводах // Теоретические основы химической технологии. 2009. Т. 43. № 5. С. 483.]
  93. *Butusov O.B., Gimranov R.K., Kantyukov R.A., Meshalkin V.P., Popov A.G., Rizhenkov I.V.* Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Seriya Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya, (In Russian). 2015. V. 58. P. 78.
  94. *Gimranov R.K., Kantyukov R.A., Butusov O.B., Meshalkin V.P., Popov A.G., Kantyukov R.R.* Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Seriya Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya, (In Russian). 2015. V. 58. P. 82.
  95. *Kantyukov R.A., Butusov O.B., Meshalkin V.P.* Bulletin of the Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences (In Russian). 2017. V. 19. P. 171. (*Kantyukov R.A., Butusov O.B., Meshalkin V.P.* Izvestija Samarskogo nauchnogo centra RAN).
  96. *Kantyukov R.R., Meshalkin V.P., Butusov O.B.* A Potential-Integral-Index Algorithm for Analyzing the Pressure Fluctuations of Gas Flows in Complex Pipeline // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2020. V. 54. № 6. P. 1229.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579520060056>  
[Кантюков Р.Р., Мешалкин В.П., Бутусов О.Б. Потенциально-интегрально-индексный алгоритм анализа пульсаций давления газовых потоков в сложных трубопроводах Теоретические основы химической технологии. 2020. Т. 54. № 6. С. 720–725.]
  97. *Butusov O.B., Kantyukov R.A., Meshalkin V.P.* Computer analysis of hydrodynamics of unsteady flows in gas transmission systems (In Russian). 2014. SPb, Publisher “Nedra”.
  98. *Meshalkin V.P., Butusov O.B., Kantyukov R.A., Belozersky A.Yu.* Doklady Chemistry. 2020. V. 495. P. 199.
  99. *Mallat S.* Wavelet A, Tour of Signal Processing, The Sparse Way. Amsterdam, Boston, London, Elsevier, 2009.
  100. *Heilbronner R., Barrett S.* Image Analysis in Earth Sciences: Microstructures and Textures of Earth Materials, Berlin Heidelberg, Springer-Verlag, 2014.
  101. *Georgy L.* Gimel’farb. Image Textures and Gibbs Random Fields, N.Y.: Kluwer Academic Publishers, 1999.
  102. *Petrou M., Sevilla P.G.* Image Processing: Dealing with Texture. London: John Wiley & Sons, Ltd, 2006.
  103. *Sarkisov P.D., Butusov O.B., Meshalkin V.P., Sevast’yanov V.G., Galaev A.B.* Computer-aided method of analysis of nanocomposite structure on the basis of calculations of isolines of fractal dimensionality // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2010. V. 44. № 6. P. 838.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579510060023>  
[Саркисов П.Д., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Севастьянов В.Г., Галаев А.Б. Компьютерный метод анализа текстуры нанокompозитов на основе расчета изолиний фрактальных размерностей // Теоретические основы химической технологии. 2010. Т. 44. № 6. С. 620–625.]
  104. *Sarkisov P.D., Butusov O.B., Meshalkin V.P., Sevast’yanov V.G., Pashaev V.B.* Computer molecular-dynamics simulation of the structure of crystal nanomaterials // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2013. V. 47. № 2. P. 83.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579513020073>  
[Саркисов П.Д., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Севастьянов В.Г., Пашаев В.Б. Компьютерное молекулярно-динамическое моделирование структуры кристаллических наноматериалов // Теоретические основы химической технологии. 2013. Т. 47. № 2. С. 115.]
  105. *Butusov O.B., Meshalkin V.P., Popov D.V., Tyukaev D.A.* Computer-aided simulation of radioactive pollution of environment upon destruction of geologic repositories of radioactive wastes with allowance for uncertainty // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2013. V. 47. № 6. P. 702.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579513060031>  
[Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Попов Д.В., Тюкаев Д.А. Компьютерное моделирование радиоактивного загрязнения окружающей среды при разрушениях геологических хранилищ радиоактивных отходов с учетом неопределенности // Теоретические основы химической технологии. 2013. Т. 47. № 6. С. 639.]
  106. *Sarkisov P.D., Butusov O.B., Meshalkin V.P.* Computer-aided tools for molecular systems engineering and wavelet-morphometric analysis of the texture of nanomaterials // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2011. V. 45. № 1. P. 1.  
<https://doi.org/10.1134/S004057951101009X>  
[Саркисов П.Д., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П. Компьютерные инструментальные средства молекулярной инженерии и вейвлетно-морфометрический анализ текстуры наноматериалов // Теоретические основы химической технологии. 2011. Т. 45. № 1. С. 3–14.]
  107. *Sarkisov P.D., Butusov O.B., Meshalkin V.P., Sevast’yanov V.G., Galaev A.B., Vinokurov E.G.* Wavelet morphometric neural network algorithm for analyzing nanomaterial porous texture // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2012. V. 46. № 4. P. 329.  
<https://doi.org/10.1134/S004057951204015X>  
[Саркисов П.Д., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П.,



- Севастьянов В.Г., Галаев А.Б., Винокуров Е.Г. Вейвлетно-морфометрический нейросетевой алгоритм анализа пористой текстуры наноматериалов // Теоретические основы химической технологии. 2012. Т. 46. № 4. С. 386.]
108. *Butusov O.B., Meshalkin V.P., Orlova L.A., Shchegoleva N.E., Kabanov A.N.* Texture and fractal analysis of silica-alumina glass ceramics // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2016. V. 50. № 2. P. 188. <https://doi.org/10.1134/S0040579516020020> [Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Орлова Л.А., Шеголева Н.Е., Кабанов А.Н. Текстурно-фрактальный анализ алюмосиликатной стеклокерамики // Теоретические основы химической технологии. 2016. Т. 50. № 2. С. 194.]
  109. *Meshalkin V.P., Dovi V., Marsanich A.* Принципы промышленной логистики (Industrial logistics principles, in Russian), М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2002. (*Meshalkin V.P., Dovi V., Marsanich A.* Printsipy promyshlennoy logistiki).
  110. *Мешалкин В.П., Дови В., Марсанич А.* Стратегия управления логистическими цепями химической продукции и устойчивое развитие (Chemical Supply Chain Management Strategy and Sustainable Development, in Russian), М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2003. (*Meshalkin V.P., Dovi V., Marsanich A.* Strategiya upravleniya logisticheskimi tsepyami khimicheskoy produktsii i ustoychivoe razvitie)
  111. *Van Dam J. J.* Institute of Petroleum. 1968. V. 54. P. 55.
  112. *Nimmanonda P., Uraikul V., Chan C.W., Tontiwachwuthikul P.* Computer-Aided Simulation Model for Natural Gas Pipeline Network System Operations // Industrial and Engineering Chemistry Research. 2004. V. 43. P. 990. <https://doi.org/10.1021/ie030268+>
  113. *Barragán-Hernández V., Vázquez-Román R., Rosales-Marines L., García-Sánchez F.A.* Computers and Chemical Engineering. 2005. V. 30. P. 215.
  114. *Meshalkin V.P., Chionov A.M., Kazak A.S., Aristov V.M.* A computer model of the nonstationary gas flow in a long multilayer-insulated high-pressure subsea gas pipeline // Doklady Chemistry. 2016. V. 469. P. 241. <https://doi.org/10.1134/S0012500816080048>
  115. *Meshalkin V.P., Chionov A.M., Kazak A.S., Aristov V.M.* Applied computer model of the non-stationary gas flow in a long multilayer-insulated high-pressure subsea gas pipeline // Doklady Chemistry. 2016. V. 470. P. 279. <https://doi.org/10.1134/S0012500816090020>
  116. *Goel V., Grossmann I.E., El-Bakry A.S., Mulkay E.L.* A novel branch and bound algorithm for optimal development of gas fields under uncertainty in reserves // Computers and Chemical Engineering. 2006. V. 30. P. 1076. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2006.02.006>
  117. *Kabirian A., Hemmati M.R.* A strategic planning model for natural gas transmission networks // Energy Policy. 2007. V. 35. P. 5656. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2007.05.022>
  118. *Wu Y., Lai K.K., Liu Y.* Deterministic global optimization approach to steady-state distribution gas pipeline networks // Optimization and Engineering. 2007. V. 8. P. 259. <https://doi.org/10.1007/s11081-007-9018-y>
  119. *Floudas C.A., Aggarwal A., Ciric A.R.* Computers and Chemical Engineering. 1989. V. 13. P. 1117. [https://doi.org/10.1016/0098-1354\(89\)87016-4](https://doi.org/10.1016/0098-1354(89)87016-4)
  120. *Osiadacz A.J.* Steady State Optimisation of Gas Networks // Archives of Mining Sciences. 2011. V. 56. P. 335.
  121. *Osiadacz A.J., Chaczykowski M.* Dynamic Control for Gas Pipeline Systems // Archives of Mining Sciences. 2016. V. 61. P. 69. <https://doi.org/10.1515/amsc-2016-0006>
  122. *Jonsbråten T.W. J.* Oil field optimization under price uncertainty // Operational Research Society. 1998. V. 49. P. 811. <https://doi.org/10.1057/palgrave.jors.2600562>
  123. *Chermak J.M., Crafton J., Norquist S.M., Patrick R.H.* Energy Economics. 1999. V. 21. P. 67. [https://doi.org/10.1016/S0140-9883\(98\)00004-8](https://doi.org/10.1016/S0140-9883(98)00004-8)
  124. *Wu S., Ríos-Mercado R.Z.E., Boyd A., Scott L.R.* Mathematical and Computer Modelling. 2000. V. 31. P. 197.
  125. *Pindyck R.S.* The Dynamics of Commodity Spot and Futures Markets: A Primer // Energy J. 2001. V. 22. P. 1. <https://doi.org/10.5547/ISSN0195-6574-EJ-Vol22-No3-1>
  126. *Cremer H., Gasmi F., Laffont J.J. J.* Access to Pipelines in Competitive Gas Markets // Regulatory Economics. 2003. V. 24. P. 5. <https://doi.org/10.1023/A:1023943613605>
  127. *Бутусов О.Б., Ковнеристый Ю.К., Мешалкин В.П., Митин С.Г.* Эколого-экономический анализ промышленных предприятий (Ecological and economic analysis of industrial enterprises, in Russian), М.: Воскресенье, Рыбинский дом печати, 2003. (*Butusov O.B., Kovneristy Yu.K., Meshalkin V.P., Mitin S.G.* Ekologo-ekonomicheskiy analiz promyshlennykh predpriyatiy).
  128. *Мешалкин В.П., Бутусов О.Б.* Компьютерная оценка воздействия на окружающую среду магистральных трубопроводов (Computer-aided assessment of the environmental impact of trunk pipelines, in Russian). М.: ИНФРА-М, 2010. (*Meshalkin V.P., Butusov O.B.* Komp'yuternaya otsenka vozdeystviya na okruzhayushchuyu sredyu magistral'nykh truboprovodov).
  129. *Hugo A., Pistikopoulos E. J.* Cleaner Production. 2005. V. 13. P. 1471.
  130. *Srivastava S.* International J. Management Reviews. 2007. V. 9. P. 53.
  131. *Guillén-Gosálbez G., Grossmann I.* AIChE J. 2009. V. 55. P. 99.
  132. *Guillén-Gosálbez G., Grossmann I.* Computers and Chemical Engineering. 2009. V. 34. P. 42.
  133. *Ruiz-Femenia R., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Caballero J.* Chemical Engineering Science. 2013. V. 95. P. 1.
  134. *Bojarski A., Laínez J., España A., Puigjaner L.* Computers and Chemical Engineering. 2009. V. 33. P. 1747.
  135. *Bekkering J., Broekhuis A.A., Van Gernert W.J.T.* Bioresource Technology. 2010. V. 101. P. 450.
  136. *Alfaki M., Haugland D. J.* Global Optimization. 2013. V. 56. P. 897.
  137. *Kolodziej S., Castro P.M., Grossmann I.E. J.* Global Optimization. 2013. V. 57. P. 1039.
  138. *Midthun K.T., Mette B., Tomasgard A.* The Energy J. 2009. V. 30. P. 155.
  139. *Kall P., Wallace S.W.* Stochastic Programming. 1994. John Wiley & Sons, Chichester, UK.
  140. *Ferris M.C., Dirkse S.P., Jaglac J.H., Meeraus A.* Computers and Chemical Engineering. 2009. V. 33. P. 1973.

141. UN, The general assembly WG report on sustainable development goals. A / 68/970. 12.08.2014, N.Y., USA
142. *Khair N.K.M., Lee K.E., Mokhtar M., Goh C.T.* Integrating responsible care into quality, environmental, health and safety management system: A strategy for Malaysian chemical industries // *J. Chemical Health and Safety*. 2018. V. 25. P. 10. <https://doi.org/10.1016/j.jchas.2018.02.003>
143. *Krantzberg G., Theriault S.* Would Implementing Responsible Care® Principles Improve the Safety of the Fracking Industry? // *International J. Sciences*. 2017. V. 6. P. 55. <https://doi.org/10.18483/ijSci.1324>
144. *Finger S.R., Gamper-Rabindran S.* Does Industry Self-Regulation Reduce Accidents? Responsible Care in the Chemical Sector // *SSRN Electronic J.* 2012. <https://doi.org/10.2139/ssrn.2014386>
145. *Makarova A., Tarasova N., Meshalkin V., Kukushkin I., Kudryavtseva E., Kanyukov R., Reshetova E.* Analysis of the Management System in the Field of Environmental Protection of Russian Chemical Companies // *International J. Quality Research*. 2018. V. 12. P. 43. <https://doi.org/10.18421/IJQR12.01-03>
146. *Makarova A., Meshalkin V., Klemes J., Kudryavtseva E., Bulatov I.* Ecological and Economic Model of Performance Evaluation of the Companies Involved in the Responsible Care® Program // *Chemical Engineering Transactions*. 2017. V. 61. P. 1477. <https://doi.org/10.3303/CET1761244>
147. *Hagemann S.* Technologies for the stabilization of elemental mercury and mercury-containing wastes, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS). GRS Report 252. Cjlonе (Germany): Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH. 2009. 57 p. ISBN 978-3-939355-27-4
148. *Dedov A.G., Ivanova E.A., Sandzhiyeva D.A., Lobakova E.S., Kashcheeva P.B., Kirpichnikov M.P., Ishkov A.G., Buznik V.M.* New materials and ecology: Biocomposites for aquatic remediation // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2017. V. 51. № 4. P. 617. <https://doi.org/10.1134/S0040579517040042>
149. *Meshalkina V.P., Ostakhb S.V., Kusheeva V.S.* Multifactor Geochemical Modeling Of Biodegradable Subsurface Hydrocarbon Contamination // *Chemical Engineering Transactions*. 2020. V. 82. P. 403. <https://doi.org/10.3303/CET2082068>
150. *Ivanova E.A., Lobakova E.S., Idiatulov R.K., Shapiro T.N., Sandzhiyeva D.A., Kuznetsova O.V., Zaitseva Y.N., Dzhabrailova K.S., Dedov A.G.* Biocomposite Materials for Purification of Aqueous Media Contaminated with Hydrocarbons // *Petroleum Chemistry*. 2019. V. 59. P. 420. <https://doi.org/10.1134/S096554411904008X>
151. *Butusov O.B., Meshalkin V.P.* Computer simulation of transient gas flows in complex round pipe // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2008. V. 42. № 1. P. 85. <https://doi.org/10.1134/S0040579508010119> [Бутусов О.Б., Мешалкин В.П. Компьютерное моделирование нестационарных газовых потоков в сложных трубопроводах кругового сечения // *Теоретические основы химической технологии*. 2008. Т. 42. № 1. С. 88–99.]
152. *Yuan J., Elektorowicz M.* Advances in engineering software. 2013. V. 55. P. 56.
153. *Ghaisari J., Vatani M., Jannesari H.* Advances in engineering software. 2012. V. 45. P. 91.
154. *Guo F., Zou F., Liu J., Wang Z.* Working mode in aircraft manufacturing based on digital coordination model // *The international journal of advanced manufacturing technology*. 2018. V. 98. P. 1547. <https://doi.org/10.1007/s00170-018-2048-0>
155. *Russell S.J., Norvig P.* Artificial Intelligence: A Modern Approach, Third Edition. 2010. P. 1132.
156. *Kim H., Han S.* Multimedia tools and applications. 2018. V. 77(20). P. 27387.
157. *Meshalkin V.P., Stoyanova O.V., Dli M.I.* Project management in the nanotechnology industry: Specifics and possibilities of taking them into account // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2012. V. 46. № 1. P. 50. <https://doi.org/10.1134/S0040579512010101> [Мешалкин В.П., Стоянова О.В., Дли М.И. Управление проектами в сфере нанотехнологий: особенности и возможности их учета // *Теоретические основы химической технологии*. 2012. Т. 46. № 1. С. 56.]
158. *Meshalkin V.P., Bol'shakov A.A., Petrov D.Y., Petrov D.Y.* Algorithms and software system for controlling the quality of glass batch using artificial neural networks // *Theor. Found. Chem. Eng.* 2021. V. 46. № 3. P. 284–287. <https://doi.org/10.1134/S0040579512030062> [Мешалкин В.П., Большаков А.А., Петров Д.Ю., Крайнов О.А. Алгоритмы и комплекс программ управления качеством стекольной шихты с использованием искусственных нейронных сетей // *Теоретические основы химической технологии*. 2012. Т. 46. № 3. С. 329.]
159. *Meshalkin V.P., Moshev E.R.* J. Modes of functioning of the automated system “pipeline” with integrated logistical support of pipelines and vessels of industrial enterprises // *Machinery Manufacture and Reliability*. 2015. V. 44. P. 580. <https://doi.org/10.3103/S1052618815070109>
160. *Moshev E.R., Meshalkin V.P.* Computer-based logistics support system for the maintenance of chemical plant equipment // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2014. V. 48. P. 855. <https://doi.org/10.1134/S0040579514060074> [Мошев Е.Р., Мешалкин В.П. Автоматизированная система логистического обеспечения технического обслуживания оборудования химических производств // *Теоретические основы химической технологии*. 2014. Т. 48. № 6. С. 709.]
161. *Moshev E.R., Romashkin M.A.* Development of a Conceptual Model of a Piston Compressor for Automating the Information Support of Dynamic Equipment // *Chemical and Petroleum Engineering*. 2014. V. 49. P. 679. <https://doi.org/10.1007/s10556-014-9818-9>
162. *Shcherbakov M., Groumpos P.P., Kravets A.G.* A method and IR4I index indicating the readiness of business processes for data science solutions. *Commun. Comput. Info. Sci.* 2017. V. 754. P. 21–34.
163. *Kizim A.V., Kravets A.G.* On systemological approach to intelligent decision-making support in industrial cyber-physical systems. *Stud. Syst. Decis. Control*. 2020. V. 260. P. 167–83.
164. *Dascalu M.-I., Lazarou E., Constantin V.F.* Technology Model to Support the Initiation of Innovation Artefacts. *Commun. Comput. Info. Sci.* 2019. V. 1083. P. 278–287.
165. *Kohlert M., König A.* Advanced polymeric film production data analysis and process optimization by clustering and classification methods // *Frontiers in*

- Artificial Intelligence and Applications. 2012. V. 243. P. 1953.  
<https://doi.org/10.3233/978-1-61499-105-2-1953>
166. *Kohlert M., Hissmann O.* Kunststoffe International. 2015. № 6–7. P. 60.
  167. *Chistyakova T.B., Razygrayev A.S., Makaruk R.V., Kohlert C.* Decision support system for optimal production planning polymeric materials using genetic algorithms // Proceedings of the 19th International Conference on Soft Computing and Measurements. 2016. P. 257.  
<https://doi.org/10.1109/SCM.2016.7519746>
  168. *Chistyakova T.B., Polosin A.N.* Vestnik Yuzhno-Ural'skogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya "Matematicheskoe modelirovanie i programmirovaniye" [Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Softwar]. 2019. V. 12. № 4, 5. doi (in Russian).  
<https://doi.org/10.14529/mmp190401>
  169. *Мешалкин В.П.* Экспертные системы в химической технологии (Expert systems in chemical technology). М.: Химия, 1993. (*Meshalkin V.P.* Expert Systems in Chemical Technology (Khimiya, Moscow, 1993) (in Russian))
  170. *Petrov D.* Software for integrated modeling of industrial safety. Report / *Petrov D.* // Invitation- Virtual International Conference on "Natural Disasters and their Early Warning Systems (NEWS) 2020" during July 8–9th, 2020. Centre for Disaster Mitigation and Management, Vellore Institute of Technology (VIT), India.
  171. Сайт компании Siemens [Электронный ресурс]: Цифровой двойник. – URL: <https://www.plm.automation.siemens.com/global/ru/our-story/glossary/digital-twin/24465> Дата обращения 21.01.2021
  172. *Stauffer T., Sands N., Dunn D.* ALARM MANAGEMENT AND ISA-18 – A JOURNEY, NOT A DESTINATION" [Электронный ресурс]: deTexas A&M Instrumentation Symposium, 2000. – URL: [https://www.researchgate.net/figure/Safety-layers-of-protection-from-Stauffer-et-al-2000\\_fig1\\_319453633](https://www.researchgate.net/figure/Safety-layers-of-protection-from-Stauffer-et-al-2000_fig1_319453633) Дата обращения 22.01.2021.
  173. *Meshalkin V.P., Bol'shakov A.A., Petrov D.Y., Krainov O.A.* Algorithms and software system for controlling the quality of glass batch using artificial neural networks // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2012. V. 46. № 3. P. 284.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579512030062>  
 [Мешалкин В.П., Большаков А.А., Петров Д.Ю., Крайнов О.А. Алгоритмы и комплекс программ управления качеством стекольной шихты с использованием искусственных нейронных сетей // Теоретические основы химической технологии. 2012. Т. 46. № 3. С. 329.]
  174. *Meshalkin V.P., Petrov D.Y.* Wavelet-neuro-heuristics complex procedure of diagnostics of point defects of sheet glass // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2014. V. 48. № 3. P. 301. <https://link.springer.com/article/10.1134/S0040579514030129>  
 [Мешалкин В.П., Петров Д.Ю. Комплексная вейвлет-нейронно-эвристическая процедура диагностики точечных дефектов листового стекла // Теоретические основы химической технологии. 2014. Т. 48. № 3. С. 323.]
  175. *Vasquez Capacho J.W., Mayorga M.A., Cortez A., Bustos A.* Techniques for alarm management with fault diagnostic system in startups and shutdowns for industrial processes, Tecciencia, 9, no. 16 Bogotá Jan./June 2014 [Электронный ресурс]: – URL: [http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1909-36672014000100002](http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1909-36672014000100002) 1/17. Дата обращения 22.01.2021.
  176. *Gruhn G., Kafarov V.V., Meshalkin V.P., Neumann W.* "Zuverlässigkeit von Chemieanlagen", VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig. 1979. 257 p.
  177. *Roy A., Srivastava P., Sinha S.* Risk and reliability assessment in chemical process industries using Bayesian methods // Reviews in Chemical Engineering. 2014. V. 30. P. 479.  
<https://doi.org/10.1515/revce-2013-0043>
  178. *Egorov A.F., Savitskaya T.V.* Methods and models for the risk analysis and security management of chemical plants // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2010. V. 44. № 3. P. 326.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579510030127>  
 [Егоров А.Ф., Савицкая Т.В. Методы и модели анализа риска и управления безопасностью химических производств // Теоретические основы химической технологии. 2010. Т. 44. № 3. С. 341–353.]
  179. *Sarkisov P.D., Egorov A.F., Savitskaya T.V., Bachkala O.V., Kuz'mina Y.A.* System analysis of safe chemical handling: Methods and approaches to predicting and classifying chemical hazards // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2013. V. 47. № 1. P. 22.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579513010119>  
 [Саркисов П.Д., Егоров А.Ф., Савицкая Т.В., Бачкала О.В., Кузьмина Ю.А. Системный анализ безопасного обращения химической продукции: методы и подходы к прогнозированию и классификации опасностей // Теоретические основы химической технологии. 2013. Т. 47. № 1. С. 26.]
  180. *Berman A.F., Nikolaychuk O.A.* Self-organizing technology for substantiating the properties of strength reliability of complex mechanical systems // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering (MSE). 2020. P. 5.  
<https://doi.org/10.1088/1757-899X/919/5/052015>
  181. *Берман А.Ф., Николайчук О.А., Юрин А.Ю., Павлов А.И.* Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2019. V. 2. P. 5.  
<https://doi.org/10.25729/2413-0133-2019-2-01> [*Berman A.F., Nikolaichuk O.A., Yurin A. Yu., Pavlov A.I.* Informatsionnye i matematicheskie tekhnologii v nauke i upravlenii. 2019. V. 2. P. 5.  
<https://doi.org/10.25729/2413-0133-2019-2-01>]
  182. Научно-педагогические школы Менделеевского университета. / Под общ. Ред. В.А. Колесникова. М., 2008.
  183. *Решение XXI* Менделеевского съезда по общей и прикладной химии [Электронный ресурс] <https://drive.google.com/file/d/0BzUEvDRocHeQzhST1-JtQ2ROUmNHSENEZ1VjcvZUWkdiM25v/view> (Дата обращения: 21.01.2021)
  184. *Козлов Г.В., Гарабаджиу А.В., Соколов В.Н., Гунак А.И., Кочетков В.В., Оследкин Ю.С.* // Исследование процесса микробной деструкции полициклических ароматических углеводородов в составе древесины // Биотехнология. 1999. № 4. С. 63–67.
  185. *Kozlov G., Pushkarev M., Mokhna V.* Phenatrene biodestructors isolated from soils of large cities. E3S Web of Conferences. 2019. V. 135. P. 01052.  
<https://doi.org/10.1051/e3sconf/201913501052>