

УДК 574.5

Цыгута Анна Николаевна¹, старший преподаватель,
e-mail: anna.tsyguta@mail.ru

Головацкая Леся Ивановна¹, доцент, к.т.н., профессор
e-mail: li_golova@mail.ru

¹Каспийский институт морского и речного транспорта им. ген.-адм. Ф.М. Апраксина – филиал ФГБОУ ВО «ВГУВТ», г. Астрахань, Россия.

АНАЛИЗ ОСНОВНЫХ СОСТАВЛЯЮЩИХ КОМПОНЕНТОВ ФИЛЬТРОВ И ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ ОЧИСТКИ БАЛЛАСТНЫХ ВОД

Аннотация. В статье рассматривается экологическая проблема загрязнения акваторий нефтепродуктами, переноса инвазивных микроорганизмов и вирусов балластными водами. Приведен перечень основных фильтрующих материалов, используемых в фильтрах и загрязняющие вещества которые они удаляют. В процессе работы рассматриваются программные комплексы: GAMESS, MOPAC, ChemCraft, Chemission. В результате исследования был сделан вывод, что необходимо создать метод компьютерного моделирования для подбора фильтрующих материалов. Данный метод позволит выбрать наполнитель для фильтра по оптимальным характеристикам.

Ключевые слова: балластная вода, транспорт, инвазивные виды, вирусы, нефтепродукты, фильтры, фильтрующий материал, математическое моделирование, программные комплексы.

Балласт – это вода с взвешенными в ней веществами, принимаемая на борт судна. Транспортные суда оснащаются балластной системой, которая позволяет регулировать деферент, крен, остойчивость, осадку, и напряжение судна в таких условиях, как изменение грузоподъемности. Количество загружаемой балластной воды напрямую зависит от типа судна и составляет до половины водоизмещения. Основной объем балластной воды закачивается в балластные танки, с помощью балластных насосов через магистраль трубопроводов балластных систем. Балласт также используется для увеличения нагрузки, чтобы судно могло погрузиться в воду на нужную осадку, для прохождения под арками мостов и другими сооружениями. Основной объем балластной воды закачивается в балластные танки при отправке судна, затем «транспортируется» на большие расстояния и сбрасывается на месте при достижении конечного маршрута. В связи с этим возникает необходимость очистки и мониторинга балластных вод для предотвращения экологической катастрофы.

Одной из основных проблем является перенос чужеродных микроорганизмов, растений и живых организмов балластными водами в неестественные для их обитания акватории. В экологическом плане перенос организмов из различных областей земного шара является катастрофой. В связи с этим с 2004 года в силу вступила «Международная Конвенция о контроле судовых балластных вод и осадков, и управления ими» [1], она включает нормативы, которые разрабатывались более 15 лет.

Перенос специфических вирусов вызывает различные инфекционные заболевания, как у человека, так и у живых организмов в целом. Примером может служить внесение токсигенного штампа в 1991 и 1992 гг. *Vibrio cholerae* O1 *El Tor* с балластной водой грузовыми судами, прибывших в порты Мексиканского залива США [2].

Перенос загрязняющих веществ, попадающих в балластную воду при ее эксплуатации (нефть и нефтепродукты). Примером может служить забор морской воды в танкер, сразу после разгрузки минуя этап мойки.

В связи с этим необходимо подвергать очистке балластные воды с помощью специального оборудования непосредственно на борту судна [3].

Выделяют несколько методов очистки балласта которые применяют на судне.(перечислить)

Данные методы не гарантируют решение поставленной проблемы, поэтому остро стоит вопрос нахождения фильтрующего материала, который не только решит проблему с вышеперечисленными факторами, а также не вызовет коррозию металлических труб, негативное воздействие на экипаж судна, загрязнение окружающей среды при сбросе балластной воды и будет экономически выгоден для судовладельцев.

На рисунке 1 приведена схема наиболее распространенных фильтрующих материалов для очистки воды и загрязнители, которые они удаляют. Данная схема показывает, что нет универсального фильтрующего материала, который очистит воду одновременно от нефтепродуктов, микроорганизмов и вирусов. Поиск такого материала опытным путем займет большое количество времени и потребует дополнительных затрат, из этого следует что необходимо использовать компьютерные методы.

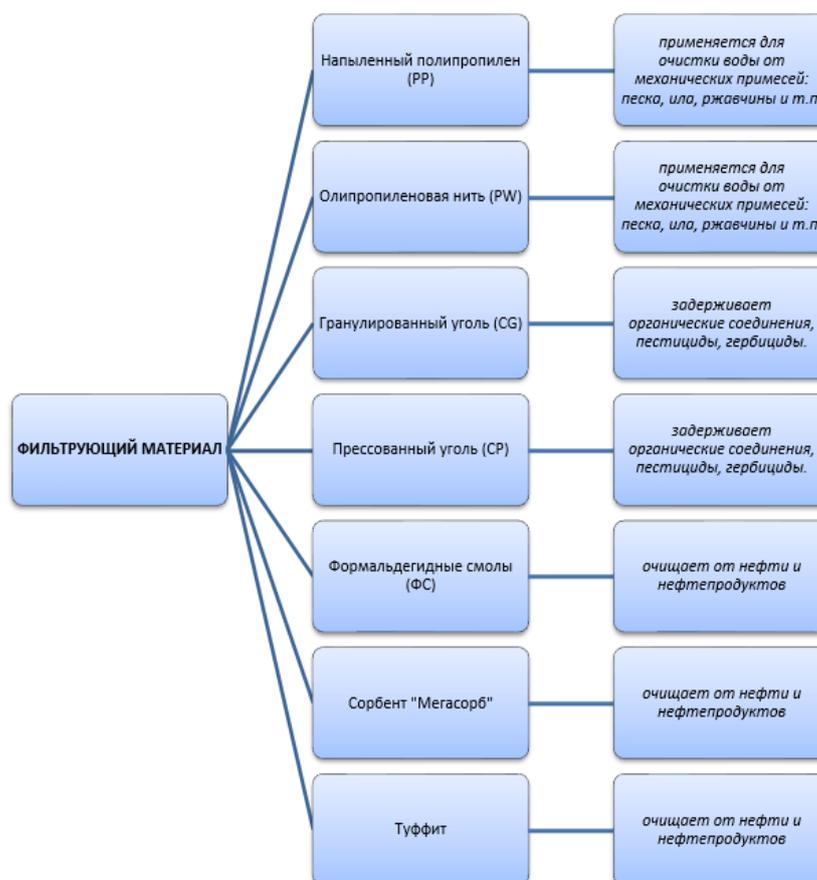


Рисунок 1 - Материалы, используемые для фильтров при очистке воды
Прочитать все и пронумеровать

На данный момент не существует программных продуктов, которые позволяют находить фильтры таким способом. Мы предлагаем разработать новый метод, при котором рассмотрим разложение загрязняющих веществ на молекулы затем на атомы и их взаимодействия с водой. Для этого будут использоваться различные квантово-химические программы.

Изучив материалы [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10] можно сделать заключение, что для расчета квантово-химических связей между молекулами можно выделить несколько универсальных программ: GAMESS, MOPAC, ChemCraft, Chemissian.

GAMESS относится к числу некоммерческих программ, предоставляя пользователю почти те же самые возможности, что и аналогичные программные комплексы квантовой химии. Способен производить расчеты при помощи разных методов вычислительной квантовой химии, включая метод Хартри-Фока, теорию функционала плотности (DFT), теорию валентных связей (GVB) и т.д. Еще один немаловажный фактор состоит в том, что GAMESS сохраняет расчет в текстовый файл специального формата, что позволяет работать с данными, преобразовывать их и использовать в других программах. Пакет предлагает широкий спектр квантово-механических волновых функций, способных обрабатывать системы, начиная от молекул с закрытой оболочкой и заканчивая видами, участвующими в сложных механизмах реакций. Доступность широкого спектра методов корреляции обеспечивает необходимую функциональность для решения ряда важных с химической точки зрения задач, начиная от оптимизации геометрии и локализации переходного состояния и заканчивая обработкой эффектов сольватации и прогнозированием спектров возбужденного состояния.

MOPAC Универсальный полуэмпирический молекулярно-орбитальный пакет для изучения химических структур и реакций. Полуэмпирические гамильтонианы MNDO, MINDO/3, AM1 и PM3 используются в электронной части расчета для получения молекулярных орбиталей, теплоты образования и ее производной по отношению к молекулярной геометрии. Используя эти результаты, MOPAC вычисляет колебательные спектры, термодинамические величины, эффекты изотопного замещения и силовые константы для молекул, радикалов, ионов и полимеров. Входные данные максимально упрощены, чтобы пользователи могли уделить свое внимание соответствующей химии и не беспокоиться о квантовой и термодинамической экзотике.

ChemCraft Графическая программа для конструирования молекул и визуализации квантово-химических расчетов (GAMESS, Gaussian), предоставляющая удобный интерфейс для просмотра и анализа расчетных файлов и различные утилиты для подготовки новых заданий.

Chemissian - это инструмент для анализа электронной структуры и спектров молекул. Он позволяет строить и анализировать диаграммы уровней энергии молекулярных орбиталей (Хартри-Фока и Кона-Шэма), проанализировать рассчитанный экспериментальный электронный спектр UV-VIS и сравнить его с экспериментальным на том же графике, рассчитать и визуализировать естественные переходные орбитали, электронную и спиновую плотности и подготовить их к публикации. Chemissian имеет удобный графический интерфейс и позволяет просматривать и визуализировать данные из выходных файлов, сгенерированных Gaussian, US-Gamess, Firefly/PC-Gamess, Q-Chem, Molpro, NWCchem, ORCA и Turbomole.

В результате нашего исследования необходимо разработать метод, который позволит найти фильтрующий материал. При создании метода будут использоваться различные квантово-химические программы. Данный метод позволит наиболее эффективно

производить поиск материалов, а также накапливать базу данных для будущих исследований.

Список литературы:

1. Международная конвенция о контроле судовых балластных вод и осадков и управлении ими. – СПб.: ЗАО ЦНИИМФ, 2005. – 120 с.
2. Чемисова О.С., Сагакянц М.М., Голенищева Е.Н., Санамянц Е.М. Оценка бактерицидной активности дезинфекционных средств в отношении возбудителя холеры для деконтаминации судовых балластных вод // Инфекционные болезни: Новости. Мнения. Обучение. 2018. №3 (26).
3. Цыгута А.Н., Головацкая Л.И. Анализ технологий очистки балластной воды // I Международная научно-практическая конференция «Актуальные решения проблем водного транспорта». 2022.
4. Жарких Л.И., Ажмухамедов И.М. Алгоритм определения активных центров межмолекулярного взаимодействия // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. 2018. №1 (41). URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/algoritm-opredeleniya-aktivnyh-tsentrov-mezhmolekulyarnogo-vzaimodeystviya> (дата обращения: 08.05.2022).
5. Смирнова Ю.А., Жарких Л.И., Достоинства и недостатки программных комплексов в молекулярном моделировании
6. Колчина Г.Ю., Хасанов И.И., Логинова Е.А., Полетаева О.Ю., Бахтина А.Ю. Характеристика квантово-химических программ, предназначенных для расчета молекул, молекулярных систем и твердых тел // НефтеГазоХимия. 2018. № 4. С. 10–16. DOI:10.24411/2310-8266-2018-10402
7. Смирнова Ю.А., Жарких Л.И. Алгоритмы поиска активных центров межмолекулярного взаимодействия Вестник технологического университета. 2020. Т.23, №1 <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=42378895>
8. Тараскин Д.В., Жарких Л.И. Структура программного обеспечения для выявления потенциальных активных центров между двумя молекулами Вестник технологического университета. 2019. Т.22, №12
9. Батыров Э. Д., Жарких Л.И. Обзор программных комплексов для квантово-химического расчета оптимальных молекулярных структур
10. Колчина Г.Ю., Хасанов И.И., Логинова Е.А., Полетаева О.Ю., Бахтина А.Ю. Характеристика квантово-химических программ, предназначенных для расчета молекул, молекулярных систем и твердых тел // НефтеГазоХимия. 2018. № 4. С. 10–16. DOI:10.24411/2310-8266-2018-10402

ANALYSIS OF THE MAIN COMPONENTS OF FILTERS AND SOFTWARE FOR BALLAST WATER TREATMENT

Tsyguta A.N., Golovatskaya L.I.

Abstract. The article deals with the ecological problem of pollution of water areas with petroleum products, the transfer of invasive microorganisms and viruses by ballast water. The list of the main filtering materials used in filters and the pollutants they remove is given. In the process of work, software complexes are considered: GAMESS, MOPAC, ChemCraft, Chemission. As a result of the study, it was concluded that it is necessary to create a computer modeling method for the selection of filter materials. This method will allow you to choose a filler for the filter according to optimal characteristics.

Keywords: ballast water, transport, invasive species, viruses, petroleum products, filters, filtering material, mathematical modeling, software systems.