

SCI-CONF.COM.UA

**MODERN DIRECTIONS
OF SCIENTIFIC RESEARCH
DEVELOPMENT**



**PROCEEDINGS OF XV INTERNATIONAL
SCIENTIFIC AND PRACTICAL CONFERENCE
AUGUST 10-12, 2022**

**CHICAGO
2022**

MODERN DIRECTIONS OF SCIENTIFIC RESEARCH DEVELOPMENT

Proceedings of XV International Scientific and Practical Conference

Chicago, USA

10-12 August 2022

Chicago, USA

2022

UDC 001.1

The 15th International scientific and practical conference “Modern directions of scientific research development” (August 10-12, 2022) BoScience Publisher, Chicago, USA. 2022. 482 p.

ISBN 978-1-73981-126-6

The recommended citation for this publication is:

Ivanov I. Analysis of the phaunistic composition of Ukraine // Modern directions of scientific research development. Proceedings of the 15th International scientific and practical conference. BoScience Publisher. Chicago, USA. 2022. Pp. 21-27. URL: <https://sci-conf.com.ua/xv-mizhnarodna-naukovo-praktichna-konferentsiya-modern-directions-of-scientific-research-development-10-12-08-2022-chikago-ssha-arhiv/>.

Editor

Komarytskyy M.L.

Ph.D. in Economics, Associate Professor

Collection of scientific articles published is the scientific and practical publication, which contains scientific articles of students, graduate students, Candidates and Doctors of Sciences, research workers and practitioners from Europe, Ukraine, Russia and from neighbouring countries and beyond. The articles contain the study, reflecting the processes and changes in the structure of modern science. The collection of scientific articles is for students, postgraduate students, doctoral candidates, teachers, researchers, practitioners and people interested in the trends of modern science development.

e-mail: chicago@sci-conf.com.ua

homepage: <https://sci-conf.com.ua>

©2022 Scientific Publishing Center “Sci-conf.com.ua” ®

©2022 BoScience Publisher ®

©2022 Authors of the articles

УЛЬТРАСТРУКТУРНОГО АНАЛІЗУ В ПРЕНАТАЛЬНОМУ ПЕРІОДІ ОНТОГЕНЕЗУ ЛЮДИНИ

PHARMACEUTICAL SCIENCES

12. *Razyniuk A. Yu., Kliiiko A. A.* 62
THE IMPACT OF PHARMACEUTICAL INDUSTRY ON MODERN LIFE

CHEMICAL SCIENCES

13. *Козуб П. А., Мірошніченко Н. М., Лук'янова В. А., Козуб С. М., Мігунов В. Л.* 65
ВИКОРИСТАННЯ ВЕКТОРНОГО ПІДХОДУ ДЛЯ БАЛАНСУВАННЯ ХІМІЧНИХ РІВНЯНЬ

TECHNICAL SCIENCES

14. *Avdieieva L., Turchina T., Makarenko A.* 74
STUDY OF THE INFLUENCE OF GLUCOSE AS A STRUCTURING ADDITIVE ON THE KINETICS OF DRYING OF LECITHIN AQUEOUS SOLUTIONS
15. *Geldimyradov A. G., Deryaev A. R.* 81
EXPERIENCE OF DRILLING WELLS FOR FIELD DEVELOPMENT BY DUAL COMPLETION OPERATION
16. *Rachenko Ye., Dotsenko N.* 87
ARTIFICIAL INTELLIGENCE USE IN AEROSPACE COMMUNICATIONS TEAM BUILDING
17. *Sakhnenko M. D., Karakurkchi H. V., Korohodska A. M., Yermolenko I. Yu., Maiba M. V., Indykov S. M.* 91
HETEROOXIDE COMPOSITES FOR PHOTOCATALYTIC DISINTEGRATION OF TOXICANTS: SYNTHESIS AND APPLICATION
18. *Гончар Ю. М.* 98
ТЕХНОЛОГІЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ НАПОЇВ НА ОСНОВІ ВТОРИННОЇ МОЛОЧНОЇ СИРОВИНИ
19. *Псахис Б. И., Псахис И. Б.* 103
ПУТИ ОЧИСТКИ ПИТЬЕВОЙ ВОДЫ
20. *Романишин І. М., Семак П. М., Семак С. І.* 109
КОНСТРУКТИВНІ МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ АКУСТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПРИПОВЕРХНЕВИХ ШАРІВ МАТЕРІАЛУ
21. *Склярєнко Є. В., Воробйов Л. Й.* 119
ТЕХНОЛОГІЯ ЗНЕШКОДЖЕННЯ ШАХТНОГО МЕТАНУ
22. *Човнюк Ю. В., Кравчук В. Т., Чередніченко П. П.* 123
АНАЛІЗ ВЗАЄМОДІЇ КІНЦЕВОМІРНИХ ПОВЕРХНЕВИХ ВІБРОДЖЕРЕЛ З УЩІЛЬНЮВАНИМ ЛІНІЙНО-В'ЯЗКОПРУЖНИМ СЕРЕДОВИЩЕМ. І.

CHEMICAL SCIENCES

УДК 536.632

ВИКОРИСТАННЯ ВЕКТОРНОГО ПІДХОДУ ДЛЯ БАЛАНСУВАННЯ ХІМІЧНИХ РІВНЯНЬ

Козуб Павло Анатолійович,

к.т.н., доцент

Харківський національний університет радіоелектроніки

Мірошніченко Наталія Миколаївна

к.т.н., доцент

Національний технічний університет

«Харківський політехнічний інститут»

Лук'янова Вікторія Анатоліївна,

к.пед.н., доцент

Харківський національний університет радіоелектроніки

Козуб Світлана Миколаївна,

к.т.н., доцент

Харківський національний медичний університет

Мігунов Володимир Лаврент'євич

Заступник директора

Художня школа Харківської міської ради

м. Харків, Україна

Анотація: Показано, що використання векторного підходу дозволяє наглядно відображати хімічні взаємодії і розробити надійний, універсальний, наглядний, простий та ефективний універсальний алгоритм розрахунків стехіометричних коефіцієнтів для хімічних реакцій, який не має обмежень як за кількістю елементів, так і за кількістю реагентів. Встановлено, що такий алгоритм дозволяє отримувати набір рішень у вигляді мінімального набору лінійно незалежних хімічних рівнянь. Наведено приклади використання алгоритму для розрахунків системи збалансованих рівнянь реакцій трьох різних за складністю хімічних систем.

Ключові слова: хімічні реакції, рівняння, балансування, стехіометричні коефіцієнти, вектори, алгоритм розрахунків.

Поняття хімічної реакції, хімічного рівняння, його рішення є одним із ключових моментів сучасної хімії.

Пошук стехіометричних коефіцієнтів є одним із перших кроків при навчанні основам хімії і для більшості учнів та викладачів спочатку здається досить простим завданням [1-3].

Дійсно, прості хімічні рівняння можуть бути збалансовані майже інтуїтивно без використання особливо складних математичних методів, але хімічні рівняння для окиснювально-відновлювальних процесів, для процесів з іонами вже потребують більш складних методів розрахунків [4-6]. Причому, навіть вони не гарантують правильне або єдине рішення.

На сьогоднішній день ця хімічна задача зводиться до рішення системи лінійних рівнянь, які формуються з умов матеріального балансу. Це з одного боку дозволяє використовувати універсальні математичні методи, але з іншого призводить до нехтування простими хімічними закономірностями [7-9].

Як було показано нами раніше, вектора у багаторозмірному просторі хімічних елементів можуть наглядно відображати хімічні взаємодії, а тому і можуть надати надійний, універсальний, наглядний і простий інструмент для роботи з ними [10-12].

Так, графічно, задача балансування хімічних реакцій може бути зведена до задачі збігу кінцевих точок суми різних наборів векторів багатовимірного елементного простору.

Як і для хімічної реакції, кожен з таких наборів не може мати однакові вектори, а також їх кількість може бути тільки позитивним числом (для класичної хімії - цілим позитивним).

Це корінним чином відрізняє цей підхід від традиційного рішення систем лінійних рівнянь, які дозволяють рішення з від'ємними коефіцієнтами.

Використання багатовимірних векторів також призводить до ще одного важливого висновку - можливості спрощення рішення при використанні проєкцій та розрізів простору.

Важливою особливістю цього підходу є те, що кількість векторів є цілою не від'ємною величиною, це призводить до кінцевої кількості рішень, які обмежені складністю хімічної системи.

Так, очевидним є те що будь яка проєкція загального рішення буде також мати рішення. Саме тому загальними рішеннями будуть такі які будуть мати рішення у всіх проєкціях (для всіх елементів). І навпаки, якщо немає рішення хоча б у одній з проєкцій (хоча б для одного елементу), то рішення не існує і для загальної хімічної системи.

Такий підхід дозволив розробити простий, але ефективний універсальний алгоритм вирішення хімічних рівнянь.

1. Задається початковий набір реакцій, що включає всі сполуки, і не менший ніж кількість сполук.

2. Методом лінійної комбінації рівнянь отримується набір реакцій збалансованих тільки за одним елементом.

3. Реакції які не можуть бути збалансовані виключаються з розгляду.

4. Повторюються пункти 2 та 3 для інших елементів.

В результаті, при відсутності рішень збалансованих реакцій не буде взагалі. При наявності декількох рішень кількість реакцій буде більше однієї. При наборі первинних реакцій тільки з одним реагентом результатом є незалежні реакції, комбінація яких дає весь набір кінцевих продуктів.

З математичної точки зору алгоритм розрахунків може бути описаний, як перелік операцій з векторами та матрицями на їх основі:

1. Кожну сполуку реакційної суміші представляють у вигляді вектору у багатовимірному елементному просторі

$$\vec{c} = \{e_1, e_2, e_3, \dots, e_i\}$$

i - кількість елементів у реакційній системі;

e_i - кількість атомів елементу у сполуці.

2. Формується вектор реагентів та продуктів реакції, які беруть участь у хімічній взаємодії

$$\bar{c} = \{c_1, c_2, c_3, \dots, c_j\}$$

j - кількість сполук у реакційній системі.

3. Задається кількість реагентів та кількість продуктів реакції у вигляді векторів для кожної із сполук. При відсутності відповідної сполуки в переліку, кількість її приймають нульовою.

$$\bar{r} = \{n_1, n_2, n_3, \dots, n_j\}$$

$$\bar{p} = \{n_1, n_2, n_3, \dots, n_j\}$$

4. З цих двох векторів формується вектор напрямку реакції, необхідний для формування початкового набору реакцій

$$\bar{k} = \bar{r} - \bar{p}$$

5. Для початкової реакції ненульове значення стехіометричних коефіцієнтів задається тільки для одного із реагентів

$$o = \{0, n_m, 0, \dots, 0\}, 1 \leq m \leq j$$

m - індекс реагенту, який бере участь у реакції.

6. Таким чином, формується вектор початкових реакцій з значеннями стехіометричних коефіцієнтів для кожного з реагентів

$$w = \{o_1, o_2, o_3, \dots, o_j\}$$

7. Розраховується значення відхилення матеріального балансу для кожної з початкових реакцій i для кожного з елементів

$$s \times o_m = \{d_{m1}, d_{m2}, d_{m3}, \dots, d_{mi}\}, 1 \leq l \leq i$$

m - індекс реакції в загальному переліку реакцій;

l - індекс елемента, для якого розраховується відхилення від балансу.

8. Починаючи з першого елемента, створюється вектор відхилень для кожної із реакцій, який дозволяє відібрати збалансовані за цим елементом реакції або знайти коефіцієнти для нового рішення

$$D_m = \{d_{1l}, d_{2l}, d_{3l}, \dots, d_{jl}\}$$

9. При наявності відхилення від балансу ($d_{xl} \neq 0$) проводиться пошук другої реакції з відхиленням від балансу, але з іншим знаком відхилення і розраховується новий набір стехіометричних коефіцієнтів, як сума векторів-реакцій. Така сума автоматично відповідає нульове відхилення матеріального балансу для даного елемента

$$o_z = o_x \cdot |d_{yl}| + o_y \cdot |d_{xl}|$$

10. Після перевірки всіх реакцій на можливість балансування згідно п.7, викреслюються реакції з ненульовим значенням балансу із переліку реакцій та розраховується матеріальний баланс для оновленого переліку реакцій для наступного елемента (повторюються п.5-7).

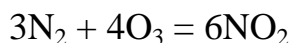
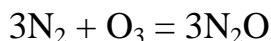
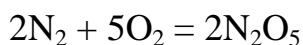
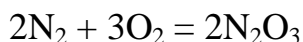
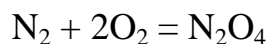
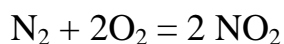
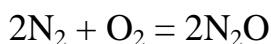
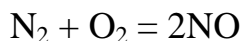
11. В результаті розрахунків залишається перелік збалансованих реакцій. При неможливості рішення реакцій в переліку не залишається.

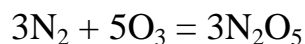
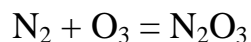
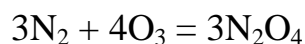
Особливістю даного алгоритму є можливість його використання для реакцій будь-якої розмірності та отримання набору можливих рішень для складних реакцій.

В якості ілюстрації використання векторного підходу можна привести розрахунок стехіометричних коефіцієнтів для можливих хімічних рівнянь в системі Кисень - Нітроген, яка складається з 9 сполук на основі 2х елементів:

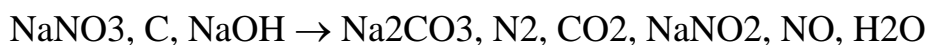


в результаті розрахунків можливо існування 12 незалежних реакцій між реагентами

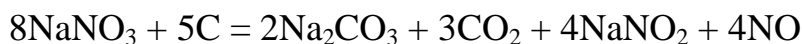
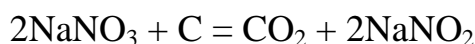
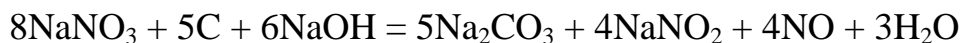
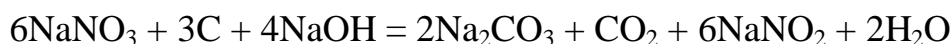
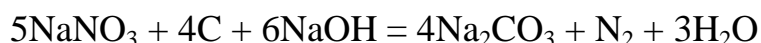
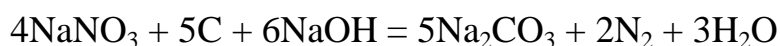
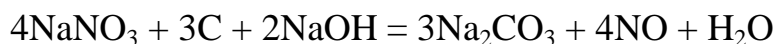
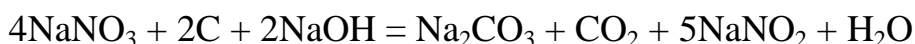
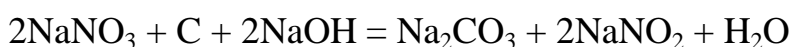




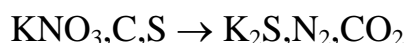
Більш складною є хімічна система, яка створюється в процесі лужного окиснення графіту. Вона складається з трьох початкових реагентів і передбачає можливе утворення 6 продуктів реакції



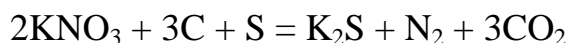
після розрахунків отримуємо 14 незалежних хімічних рівнянь, 10 з яких протікають з участю всіх трьох початкових реагентів



Ще одним прикладом розрахунків може бути відомий всім процес горіння димного пороху, в якому всього 3 початкових реагенти. Якщо обмежити кількість продуктів реакції всього трьома речовинами,



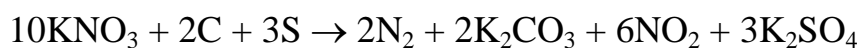
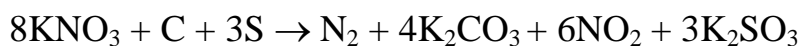
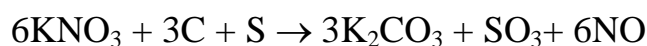
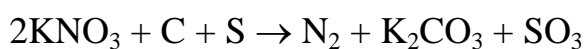
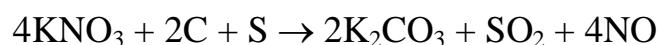
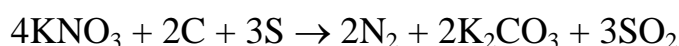
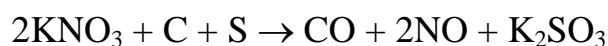
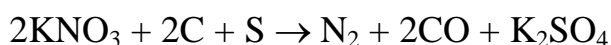
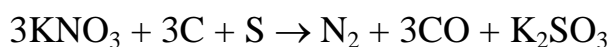
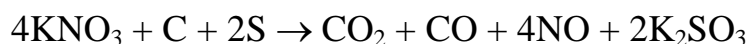
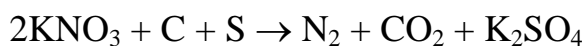
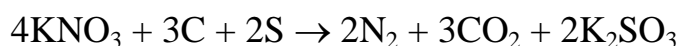
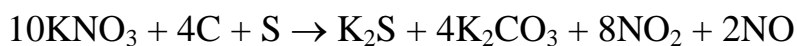
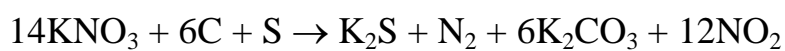
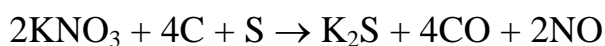
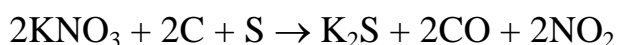
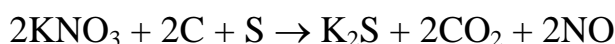
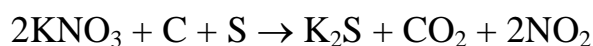
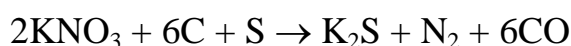
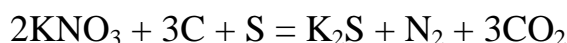
то можливо лише одне хімічне рівняння

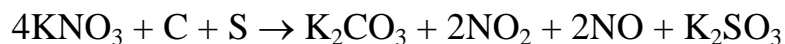
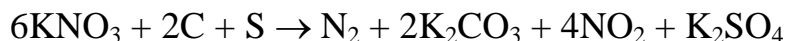
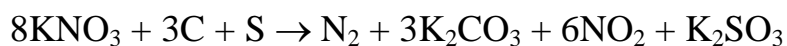


але враховуючи можливість утворення продуктів реакції з іншими ступенями окиснення Сірки, Нітрогену та Вуглецю можна розраховувати як мінімум на ще 9 додаткових речовин

$\text{KNO}_3, \text{C}, \text{S} \rightarrow \text{K}_2\text{S}, \text{N}_2, \text{CO}_2, \text{CO}, \text{K}_2\text{CO}_3, \text{SO}_2, \text{SO}_3, \text{NO}_2, \text{NO}, \text{KNO}_2, \text{K}_2\text{SO}_3, \text{K}_2\text{SO}_4$

В результаті, після розрахунків за запропонованим алгоритмом знаходимо 86 можливих хімічних реакцій між реагентами, з яких 25 включають всі початкові реагенти.





Слід зазначити, що аналіз реакцій показує, що при деяких співвідношеннях реагентів питома кількість газоподібних продуктів може бути більша за основну реакцію.

Таким чином, на основі векторного підходу для опису хімічних систем було розроблено алгоритм розрахунків стехіометричних коефіцієнтів для хімічних реакцій, який не має обмежень щодо розмірів як за кількістю елементів, так і за кількістю реагентів. Встановлено, що такий алгоритм дозволяє отримувати набір рішень у вигляді мінімального набору лінійно незалежних хімічних рівнянь. Наведено приклади використання алгоритму для трьох різних за складністю хімічних систем.

Список літератури

1. Берг Л. Г. Способы подбора коэффициентов в химических уравнениях / Берг Л. Г., Громаков С. Д., Зороацкая И. В., Аверко-Антонович И. Н. - Казань: Изд-во Казанского ун-та, 1959. -148 с.
2. Zeggeren, V. F.; Storey, S. H. The Computation of Chemical Equilibria, Cambridge Univ. Press, London, 1970
3. W. L. Yaroch, Student understanding of chemical equation balancing, J. Res. Sci. Teach., 22 (1985), pp. 449-459.
4. Smith, W. R.; Missen, R. W. Chemical Reaction Equilibrium Analysis: Theory and Algorithms, Wiley, New York 1982.
5. Степанов Н. Ф. Методы линейной алгебры в физической химии / Степанов Н. Ф., Ерлыкина М. Е., Филиппов Г. Г. - М.: Изд-во МГУ, 1976. - 362с.
6. Gabriel, C.I. and Onwuka, G.I. (2015) Balancing of Chemical Equations Using Matrix Algebra/ Journal of Natural Sciences Research , 3, pp.29-36.

7. Risteski, I. B., 2009. "A new singular matrix method for balancing chemical equations and their stability." *Journal of the Chinese Chemical Society*, vol. 56, pp. 65-79.
8. Thorne, Lawrence R. (2010). "An Innovative Approach to Balancing Chemical-Reaction Equations: A Simplified Matrix-Inversion Technique for Determining the Matrix Null Space". *Chem. Educator*. 15: 304–308. arXiv:1110.4321
9. Risteski, I.B. (2012). A new algebra for balancing special chemical reactions, *Chemistry: Bulg. J. Sci. Educ.*, 21, 223-234
10. Використання векторів для проведення та наглядного представлення стехіометричних розрахунків у хімії/ Козуб П.А., Козуб С.М., Бердо Р.В., Печерська В.І., Романов М.Д. / Актуальні проблеми сучасної хімії: Матеріали Всеукраїнської науково-практичної конференції студентів, аспірантів та молодих науковців , 20-22 квітня 2017р. – Миколаїв: НУК, 2017. - 41-43 с.
11. Козуб П.А., Козуб С.М., Присяжний О.В.. Вдосконалення стехіометричних методів аналізу складних хімічних систем / *Science and society. Proceedings of the 9th International conference. Accent Graphics Communications & Publishing. Hamilton, Canada. 2019. Pp. 1095–1105*
12. P. Kozub, V. Lukianova, S. Kozub Vector approach for modeling, research and optimization of complex chemical systems. Abstracts of international conference of natural sciences and technologies (ICONAT-2021). Turkish Republic of Northern Cyprus. 18-20 AUGUST 2021 . P. 28.