

**SCI-CONF.COM.UA**

# **MODERN SCIENCE: INNOVATIONS AND PROSPECTS**



**ABSTRACTS OF XII INTERNATIONAL  
SCIENTIFIC AND PRACTICAL CONFERENCE  
AUGUST 21-23, 2022**

**STOCKHOLM  
2022**

# **MODERN SCIENCE: INNOVATIONS AND PROSPECTS**

Proceedings of XII International Scientific and Practical Conference

Stockholm, Sweden

21-23 August 2022

**Stockholm, Sweden**

**2022**

## UDC 001.1

The 12<sup>th</sup> International scientific and practical conference “Modern science: innovations and prospects” (August 21-23, 2022) SSPG Publish, Stockholm, Sweden. 2022. 308 p.

**ISBN 978-91-87224-02-7**

The recommended citation for this publication is:

*Ivanov I. Analysis of the phaunistic composition of Ukraine // Modern science: innovations and prospects. Proceedings of the 12th International scientific and practical conference. SSPG Publish. Stockholm, Sweden. 2022. Pp. 21-27. URL: <https://sci-conf.com.ua/xii-mizhnarodna-naukovo-praktichna-konferentsiya-modern-science-innovations-and-prospects-21-23-08-2022-stokholm-shvetsiya-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:** [sweden@sci-conf.com.ua](mailto:sweden@sci-conf.com.ua)

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

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

©2022 SSPG Publish ®

©2022 Authors of the articles

11. *Шевченко О. О., Левон М. М., Назар П. С., Левон В. Ф.* 59  
ЗАКОНОМІРНОСТІ РОЗВИТКУ КРОВОНОСНИХ КАПІЛЯРІВ СОМАТИЧНОГО ТИПУ В ПРЕНАТАЛЬНОМУ ПЕРІОДІ ОНТОГЕНЕЗУ ЛЮДИНИ.
12. *Ячник І. М., Біляєв А. В., Чернишук С. С., Карпенко Н. П., Мельник В. А.* 63  
ДІАГНОСТИКА НЕБАКТЕРІАЛЬНОЇ ПНЕВМОНІЇ У ДІТЕЙ ВІДДІЛЕННЯ ІНТЕНСИВНОЇ ТЕРАПІЇ.

#### CHEMICAL SCIENCES

13. *Shuvakin S., Pendyukh V. V., Ivonin S. P.* 65  
FEATURES OF THE INTERACTION OF DIAZOMETHANE WITH THE ACTIVATED DOUBLE BOND.
14. *Козуб П. А., Мірошніченко Н. М., Лук'янова В. А., Козуб С. М., Мартинюк М. М.* 67  
МАТЕМАТИЧНІ АСПЕКТИ ВИКОРИСТАННЯ ВЕКТОРНОГО ПІДХОДУ ДЛЯ БАЛАНСУВАННЯ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ.
15. *Чепинська О. О., Нефедов В. Г., Матвеев В. В.* 75  
ОСОБЛИВОСТІ РОЗЧИНЕННЯ ЗАЛІЗНОГО АНОДУ В РІЗНИХ РОЗЧИНАХ.

#### TECHNICAL SCIENCES

16. *Karakurkchi H., Sakhnenko M., Stepanova I., Zyubanov S.* 78  
USING THE ACHIEVEMENTS OF MODERN ELECTROCHEMICAL MATERIALS SCIENCE FOR INDUSTRY NEEDS.
17. *Коваль М. Г., Феценко Н. В.* 84  
ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ ФАРБУВАННЯ БАВОВНЯНИХ ТКАНИН БАРВНИКОМ ПРЯМИМ СИНІМ DIRECT B2RL З ВИКОРИСТАННЯМ СТИЧНОЇ ВОДИ.
18. *Псахис Б. И., Псахис И. Б.* 89  
КОНДИЦИОНИРОВАНИЕ ПИТЬЕВОЙ ВОДЫ В МНОГОЭТАЖНОМ ДОМЕ.
19. *Радовенчик Я. В., Гордієнко К. Ю., Крисенко Т. В., Радовенчик В. М.* 93  
ВІДСТОЮВАННЯ СУСПЕНЗІЇ ФОСФАТУ КАЛЬЦІУ В ПРОЦЕСАХ ПОМ'ЯКШЕННЯ ВОДИ.
20. *Расюн В. Л.* 99  
ДЕЯКІ ПИТАННЯ ОБРОБКИ ПОЛЬОВОЇ ІНФОРМАЦІЇ ПРИ ГЕОДЕЗИЧНИХ ВИМІРЮВАННЯХ.
21. *Сагун А. В., Гребенюк Б. В., Івченко І. О.* 103  
ВПЛИВ КРИПТОГРАФІЧНОЇ СОЛІ НА ЯКІСТЬ ХЕШ-ФУНКЦІЇ.

УДК 536.632

**МАТЕМАТИЧНІ АСПЕКТИ ВИКОРИСТАННЯ ВЕКТОРНОГО ПІДХОДУ  
ДЛЯ БАЛАНСУВАННЯ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ**

**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

**Мартинюк Микола Михайлович**

старший викладач

Харківський національний університет радіоелектроніки

м. Харків, Україна

**Анотація:** На основі загального алгоритму розрахунків стехіометричних коефіцієнтів для хімічних реакцій з використанням векторного підходу розроблено детальний алгоритм розрахунків у вигляді математичних та логічних рівнянь, який дозволяє значно зменшити кількість розрахунків у порівнянні з теоретично виведеними математичними конструкціями і тому дозволяє значно пришвидшити розрахунки. Практична перевірка запропонованого алгоритму балансування на практиці показала, що він може бути використаний для створення програми розрахунків на будь якій мові програмування.

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

Використання векторного підходу для аналізу хімічних процесів дозволяє значно спростити не тільки розуміння загальних принципів (закон збереження маси, маршрути хімічних реакцій), але й дозволяє створити нові підходи для рішення дуже розповсюджених хімічних задач (балансування хімічних реакцій, генерація реакційних систем) [1-5].

Методи матричної алгебри дають можливість використання стандартних математичних методів та програмних бібліотек для них, але як показує практика їх використання, такі теоретично-орієнтовані розрахунки на основі чистих математичних методів без врахування особливостей реальних об'єктів та умов використання математичних методів при створенні реальних алгоритмів для реальних мов програмування призводять до надлишкових витрат часу та ресурсів і тому перешкоджають використанню таких методів спеціалістами в інших галузях науки [6-9].

Це є справедливим і для задачі балансування хімічних рівнянь. При відносній простоті та прозорості математичного рішення, воно призводить до великої кількості непотрібних або повторюваних розрахунків при використанні на практиці [10-12].

Але практичне вирішення поставленої задачі показало, що саме використання векторного підходу дозволяє створити простий та ефективний алгоритм придатний для реалізації розрахунків для всіх мов програмування.

Так, хімічна формула сполуки є загально-прийнятним та зручним способом відображення складу, в якій відображено кількості атомів-елементів для кожної із сполук. Тому основною одиницею вихідних та кінцевих даних є вектора-сполуки, та стехіометричні коефіцієнти хімічного рівняння

$$n_1A_2B + \dots + n_jBC_2 = \dots + n_mABC_2 \quad (1)$$

При цьому, необхідно враховувати, що відсутність елемента у формулі означає її кількість рівну 0, а відсутність підстрочного індексу - кількість рівну 1. Крім того, назва елемента є по суті визначенням порядкового номеру у векторі цієї кількості і в деяких сполуках може зустрічатися декілька раз або мати різне місце у формулі ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NaOH}$ ). Тому для проведення

розрахунків необхідно попереднє приведення хімічних формул до єдиного вигляду.

$$v_1 A_2 B_1 C_0 + \dots + v_j A_{a_{j1}} B_{a_{ji}} C_{a_{jn}} = \dots + v_m A_{a_{m1}} B_{a_{mi}} C_{a_{mn}} \quad (2)$$

Тоді кожна із сполук може бути визначена як вектор кількостей атомів у сполуці

$$C \in N^n : C_1 = [2,1,0] \dots C_j = [a_{j1}, a_{ji}, a_{jn}] \dots C_m = [a_{m1}, a_{mi}, a_{mn}] \quad (3)$$

В хімічній системі, яка складається з декілька хімічних рівнянь, розмір вектору визначається кількістю елементів у всій хімічній системі, а не у окремо взятій хімічній реакції, а вектор всіх можливих сполук, які входять в хімічну систему можуть бути представлені у вигляді матриці розміром  $m \times n$ .

$$L \in N^{m \times n} = \left\{ \begin{matrix} C_1 \\ \vdots \\ C_j \\ \vdots \\ C_m \end{matrix} \right\} = \left[ \begin{matrix} a_{11}, \dots, a_{1i}, \dots, a_{1n} \\ \vdots \\ a_{j1}, \dots, a_{ji}, \dots, a_{jn} \\ \vdots \\ a_{m1}, \dots, a_{mi}, \dots, a_{mn} \end{matrix} \right] \quad (4)$$

Ця матриця дозволяє розрахувати кількість кожного з  $i$ -елементів у хімічному рівнянні, якщо відома кількість сполуки в ньому, яка в свою чергу визначається стехіометричним коефіцієнтом перед сполукою. Слід зазначити, що його величина завжди є позитивним цілим числом (на відміну від традиційного матричного методу), оскільки частина сполуки або від'ємна сполука не існують фізично. Таким чином, кількість сполук, що беруть участь у хімічній реакції може бути визначена вектором стехіометричних кількостей сполук

$$N \in N^m : N = [v_1, \dots, v_j, \dots, v_m] \quad (5)$$

З точки зору векторного підходу, права та ліва частини рівняння є різними векторами, які мають однакову кінцеву точку, або їх різниця буде нульовим вектором. Визначення цього факту забезпечується використанням вектору напрямку трансформації (участі), значення елементів якого приймають всього три значення: -1 для сполук справа від знаку рівняння, +1 - зліва від знаку рівняння, та 0 якщо сполука не приймає участі в реакції

$$T \in Z^m : T = [t_1, \dots, t_j, \dots, t_m] \quad t \in \{-1, 0, +1\} \quad (6)$$

Вектор коефіцієнтів реакції враховує напрямок реакції, тому має як позитивні так і негативні значення

$$K \in Z^m : K = T \times N = [k_1, \dots, k_j, \dots, k_m] \quad (7)$$

Цей вектор за фізичною сутністю відповідає різниці кількостей елементів у правій та лівій частинах хімічного рівняння і дозволяє визначити координату кінця вектору сполук з їх кількостями

$$D \in Z^n : D = L \times K = [d_1, \dots, d_i, \dots, d_n] \quad d_i = \sum_{j=1}^{j=m} k_j a_{ji} \quad (8)$$

Повністю збалансоване рівняння буде мати нульові значення відхилень для всіх елементів, а нульове значення відхилення по одному елементу буде відповідати балансу тільки по цьому елементу.

Суттю векторного методу балансування хімічних реакцій є вибір збалансованих реакцій з загального набору можливих реакцій, тому на практиці це може бути реалізовано у вигляді вектору (переліку) реакцій із змінними розмірами, а для розрахунків більш практичним є його використання у вигляді двовимірного масиву (матриці) розміром  $w \times m$

$$R \in Z^{w \times m} : R = [K_1, \dots, K_x, \dots, K_w] = \begin{bmatrix} k_{11} & \dots & k_{x1} & \dots & k_{w1} \\ \vdots & & & & \\ k_{1j} & \dots & k_{xj} & \dots & k_{wj} \\ \vdots & & & & \\ k_{1m} & \dots & k_{xm} & \dots & k_{wm} \end{bmatrix} \quad (9)$$

Для початку розрахунків, кількість можливих реакцій повинно бути не менше кількості сполук, які беруть участь у реакції, а с точки зору лінійної алгебри вони повинні бути лінійно незалежними. Цим умовам відповідають значення коефіцієнтів, які представляють собою діагональну матрицю із значеннями діагональних елементів із значеннями вектору напряму трансформації  $T$



$$R_0 \in Z^{w \times m}, w = m: R_0 = I \times T = \begin{bmatrix} 1 \cdots 0 \cdots 0 \\ \vdots \\ 0 \cdots 1 \cdots 0 \\ \vdots \\ 0 \cdots 0 \cdots 1 \end{bmatrix} \times [t_1, \dots, t_j, \dots, t_m] = \begin{bmatrix} t_1 \cdots 0 \cdots 0 \\ \vdots \\ 0 \cdots t_j \cdots 0 \\ \vdots \\ 0 \cdots 0 \cdots t_m \end{bmatrix}, \quad (10)$$

Всі подальші обчислення повторюються для кожного з і-елементу у вигляді циклу розрахунків від 1 до n-елементу. Слід зауважити, що такі розрахунки не проводяться для всіх елементів одночасно, а тільки для поточного елементу, що зменшує кількість розрахунків.

1. Для виявлення збалансованих реакцій по поточному елементу вектор відхилень для кожної з реакцій по і-елементу. Розмір вектору співпадає з кількістю реакцій у реакційній системі

$$E \in Z^w: E = [d_1, \dots, d_x, \dots, d_w], d_x = \sum_{j=1}^{j=m} k_{xj} a_{ji} \quad (11)$$

2. Оскільки передбачається, що тільки частина рівнянь є збалансованими, список реакцій доповнюється новими рівняннями, які розраховуються як лінійна комбінація вже існуючих рівнянь. Теоретично кількість таких комбінацій може бути дуже великою для складних систем (кількість комбінацій двох величин). Але з векторного підходу випливає, що нове рівняння буде лінійно незалежним та збалансованим лише у випадку, якщо будуть відхилення від балансу у обох рівнянь, причому їх знаки будуть протилежними, тому перевірка на цю умову значно скорочує кількість необхідних обчислень. Умовою можливості отримання нового рівняння є від'ємне та ненульове значення добутків відхилень.

$$F: K_x, K_y \rightarrow K_z \in Z^m, K_z = F(K_x, K_y), k_{zj} = k_{xj} \cdot |d_{yj}| + k_{yj} \cdot |d_{xi}|: d_x \cdot d_y < 0 \wedge y > x \quad (11)$$

3. З формули (11) випливає, що абсолютні значення нових коефіцієнтів можуть тільки зростати, що може приводити до появи рішень, які будуть лінійно залежними один від одного та мати великі значення. Для цього необхідно провести приведення отриманих рівнянь до класичного вигляду: спочатку зменшити коефіцієнти до найменшого кратного, а потім вилучити всі реакції які мають рівні коефіцієнти.

З практичної точки зору, найбільш ефективним рішенням першої задачі є приведення коефіцієнтів до значень кратних мінімальному коефіцієнту (потім можна зробити їх цілими).

$$k_{zj} = \frac{k_{zj}}{\min k_{zj}} : j \in [1, m] \quad (12)$$

4. Це дає можливість вилучити з розгляду однакові рівняння. Як загальне рішення можна використовувати для порівнювання весь масив попередніх рівнянь, але з точки зору ефективності використання алгоритму є доцільним порівняння розпочинати з останніх отриманих реакцій. При наявності різниці хоча б для одного з коефіцієнтів у двох рівняннях означає унікальність рівняння.

$$u = \sum_{j=1}^{j=m} |k_{zj} - k_{xj}| : \forall x \in [1; z-1] \quad (13)$$

І тому таке рівняння додається до списку можливих лінійно незалежних рівнянь.

$$A : R \rightarrow R', R' \in Z^{w+1 \times m} : R' = A(R, K_z), R' = \begin{bmatrix} k_{11} \cdots k_{x1} \cdots k_{y1} \cdots k_{w1}, k_{z1} \\ \vdots \\ k_{1j} \cdots k_{xj} \cdots k_{yj} \cdots k_{wj}, k_{zj} \\ \vdots \\ k_{1m} \cdots k_{xm} \cdots k_{ym} \cdots k_{wm}, k_{zm} \end{bmatrix}, u > 0 \quad (14)$$

5. Оскільки частина із цих рівнянь ще на початку розрахунків були незбалансованими, вони видаляються із цього списку. Ознакою для видалення є ненульове відхилення балансу по і-елементу. Для скорочення обчислень, перевірку можна проводити тільки для рівнянь, які були в початковому векторі хімічних рівнянь (нові вже є збалансованими).

$$del : R \rightarrow R', R' \in Z^{w-1 \times m}, R' = del \left( \begin{bmatrix} k_{11} \cdots k_{x1} \cdots k_{w1} \\ \vdots \\ k_{1j} \cdots k_{xj} \cdots k_{wj} \\ \vdots \\ k_{1m} \cdots k_{xm} \cdots k_{wm} \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} k_{11} \cdots k_{x+11} \cdots k_{w-11} \\ \vdots \\ k_{1j} \cdots k_{x+1j} \cdots k_{w-1j} \\ \vdots \\ k_{1m} \cdots k_{x+1m} \cdots k_{w-1m} \end{bmatrix} : d_x \neq 0 \quad (15)$$

6. Сформований новий вектор хімічних рівнянь має тільки збалансовані по і-елементу рівняння і використовується як початковий для розрахунків для

наступного елементу (розрахунки з п.1. по п.5)

$$R = R^{\wedge}, i = i + 1 : i < n, w > 0 \quad (16)$$

При відсутності збалансованих рівнянь у векторі хімічних рівнянь вказує на відсутність рішень, тому подальші розрахунки припиняються.

Таким чином, на основі запропонованого загального алгоритму розрахунків стехіометричних коефіцієнтів для хімічних реакцій розроблено детальний алгоритм розрахунків у вигляді математичних та логічних рівнянь, який дозволяє значно зменшити кількість розрахунків у порівнянні з теоретично виведеними математичними конструкціями і тому дозволяє значно пришвидшити розрахунки. Практична перевірка запропонованого алгоритму балансування на практиці показала, що він може бути використаний для створення програми розрахунків на будь якій мові програмування.

## ВИКОРИСТАНА ЛІТЕРАТУРА

1. 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.
2. 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
3. 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.
4. Козуб П. А., Мірошніченко Н. М., Лук'янова В. А., Козуб С. М., Мігунов В. Л. Використання векторного підходу для балансування хімічних

рiвнянь //Proceedings of the 15th International scientific and practical conference. BoScience Publisher. Chicago, USA. 2022. Pp. 65-73. URL: <https://sci-conf.com.ua/xv-mizhnarodna-naukovo-praktichna-konferentsiya-modern-directions-of-scientific-research-development-10-12-08-2022-chikago-ssha-arhiv/>.

5. Козуб П. А., Мiрошнiченко Н. М., Лук'янова В. А., Козуб С. М., Гурiна Г. I. Використання векторного пiдходу для задач хiмiчної стехiометрiї // Modern scientific research: achievements, innovations and development prospects. Proceedings of the 15th International scientific and practical conference. MDPC Publishing. Berlin, Germany. 2022. Pp. 80-87. URL: <https://sci-conf.com.ua/xv-mizhnarodna-naukovo-praktichna-konferentsiya-modern-scientific-research-achievements-innovations-and-development-prospects-14-16-08-2022-berlin-nimechchina-arhiv/>.

6. Берг Л. Г. Способы подбора коэффициентов в химических уравнениях / Берг Л. Г., Громаков С. Д., Зороцкая И. В., Аверко-Антонович И. Н. - Казань: Изд-во Казанского ун-та, 1959. -148 с.

7. Zeggeren V. F.; Storey S. H. The Computation of Chemical Equilibria, Cambridge Univ. Press, London, 1970

8. Smith W. R.; Missen R. W. Chemical Reaction Equilibrium Analysis: Theory and Algorithms, Wiley, New York 1982.

9. Gabriel C. I. and Onwuka G. I. (2015) Balancing of Chemical Equations Using Matrix Algebra/ Journal of Natural Sciences Research , 3, pp.29-36.

10. 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.

11. 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

12. Risteski I. B. (2012). A new algebra for balancing special chemical reactions, *Chemistry: Bulg. J. Sci. Educ.*, 21, 223-234