

УДК 631.841

**И.М. Рыщенко**, канд. техн. наук, доц.,  
**А.С. Савенков**, д-р техн. наук, проф.,  
**М.В. Вельд**, д-р техн. наук, проф.,  
**И.С. Белогур**, канд. техн. наук,  
Нац. техн. ун-т “ХПИ”

## НЕЙРОСЕТЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ТЕХНОЛОГИИ NP-УДОБРЕНИЙ

*И.М. Рыщенко, А.С. Савенков, М.В. Вельд, И.С. Белогур.* **Нейросіткове моделювання в технології NP-добрив.** Запропоновано під час аналізу переробки низькосортної сировини і перебігу реакцій у таких багатокомпонентних системах враховувати іонну рівновагу в нейтралізованих розчинах. Шляхом зміни рН середовища можна керувати іонним складом розчинів і напрямком процесів, що реалізуються в системі, а також характером речовин, що утворюються. Наведено дослідження, які дають можливість обґрунтувати фізико-хімічні основи технології та отримувати добрива заданого складу.

*Ключові слова:* низькосортний фосфорит, азотна кислота, моделювання, нейтралізація, технологія.

*И.М. Рыщенко, А.С. Савенков, М.В. Вельд, И.С. Белогур.* **Нейросетевое моделирование в технологии NP-удобрений.** Предложено при анализе переработки низкосортного сырья и протекания реакций, в таких многокомпонентных системах, учитывать ионное равновесие в нейтрализованных растворах. Посредством изменения рН среды можно управлять ионным составом растворов и направлением реализующихся в системе процессов, а также характером образующихся веществ. Приведены исследования, которые позволяют обосновать физико-химические основы технологии и получать удобрения заданного состава.

*Ключевые слова:* низкосортный фосфорит, азотная кислота, моделирование, нейтрализация, технология.

*I.M. Ryshchenko, A.S. Savenkov, M.V. Ved, I.S. Belogur.* **Neuronetwork modeling in the technology of NP-fertilizers.** It is proposed to take into account the ionic equilibrium in the neutralized solutions when analyzing low-grade raw material processing and reactions occurring in such multicomponent systems. By varying pH of the environment it is possible to manage the ionic composition of solutions and the direction of the processes realized in the system, as well as the character of the substances formed. The studies which allow to ground the physical and chemical bases of technology, and to get the fertilizers of the set composition, are adduced.

*Keywords:* low-grade phosphorite, nitric acid, modeling, neutralization, technology..

Ефективність створення нових видів добрив обумовлюється широким спектром фізико-хімічних властивостей розчинів, на які впливають тиск, температура, концентрація, рН розчину. Крім того, необхідно врахувати також всю сукупність іонних рівноваг у розчинах, які визначаються співвідношенням констант дисоціації, ступенем розчинності, констант гідролізу.

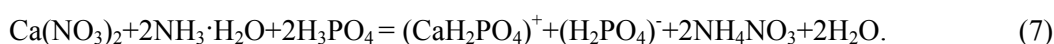
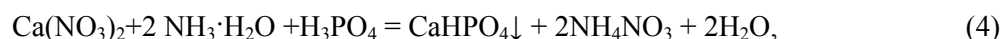
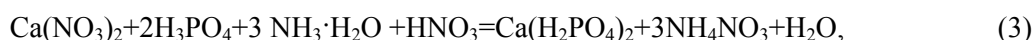
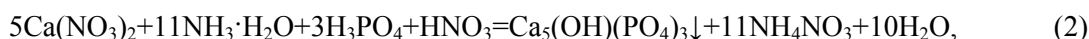
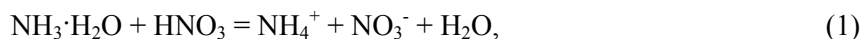
Математичне описання, знаходження взаємозв'язку “властивість — склад” і прогнозування складу мінеральних добрив є складним і неоднозначним завданням. Найбільш перспективним напрямком для розв'язання завдань прогнозування, як окремих характеристик, так і динаміки складних хіміко-технологічних систем, наприклад мінеральних добрив під впливом багатовекторних показувачів, є метод, який базується на використанні одного з способів сучасних інформаційних технологій — штучних нейронних мереж. Завдяки можливості побудови нелінійних моделей будь-якого рівня складності з'явилася можливість обобщення фізико-хімічних властивостей вихідних речовин у розчині, впливу технологічних параметрів і передбачити склад отримуваних речовин, в результаті протікання хімічних реакцій по багатьох маршрутах.

Для пошуку залежностей “властивість — склад” використовували багаторівневу нейронну мережу прямого розповсюдження, навчаючу по методу зворотного розповсюдження помилки.

При этом обобщение и аппроксимация данных происходят с высокой точностью и обрабатываются большие массивы разрозненной информации. Основные принципы нейросетевого моделирования, способы описания различных систем исследуемых химических соединений и реакций, алгоритмы их реализации разработаны ранее [1, 2].

Для получения нелинейной математической модели (в виде уравнений регрессии), описывающей системы “свойства — состав”, проведены серии экспериментов по нейтрализации азотно-кислотной вытяжки водными растворами аммиака. Раствор получали разложением фосфоритов Ново-Амвросиевского месторождения (Украина) азотной кислотой по методике [3, 4].

Анализ 10-ти компонентной системы показал, что во время химического взаимодействия в системе на стадии аммонизации протекают следующие реакции:



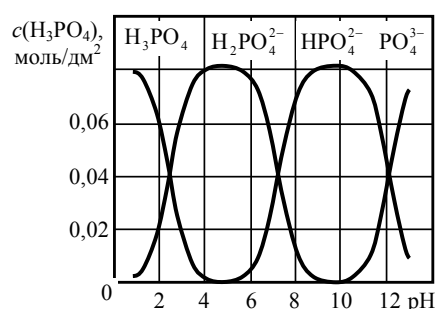
Для получения азотно-фосфорных удобрений наиболее благоприятна реакция (3), которая и определяет взаимодействие в системе. В полученном растворе имеют место ионные формы реагирующих веществ ((CaNO<sub>3</sub>)<sup>+</sup>, NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, Ca<sup>+2</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, (H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>)<sup>-</sup>, (CaH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>)<sup>+</sup>), и их количество связано с концентрацией вводимого гидрата аммиака (NH<sub>3</sub> · H<sub>2</sub>O) [4].

Полученные экспериментальные данные обработаны с использованием математического аппарата искусственных нейронных сетей.

Процедуру прогнозирования отработано на реальных растворах и распространено на растворы варьированного состава.

Найдено, что полученная математическая модель с относительной ошибкой при тестировании 1...3 % позволяет рассчитать составы образующихся веществ в зависимости от значения pH (см. рисунок).

Анализ полученных данных показал перспективность использования искусственных нейронных сетей для прогнозирования химических систем “свойства — состав” в растворах. Построенные нейронные сети являются адекватными экспериментальным данным и позволяют целенаправленно руководить процессом нейтрализации азотно-кислотной вытяжки водными растворами аммиака.



Зависимость молярной концентрации фосфат-ионов от pH

## Литература

1. Гальберштам, Н.М. Нейронные сети как метод поиска зависимостей структура-свойства органических соединений / Н.М. Гальберштам, И.И. Баскин, В.А. Палюхин // Успехи химии. — 2003. — Т. 72., № 7. — С. 706 — 725.
2. Вєдь, М.В. Каталітичні та захисні покриття сплавами і складними оксидами: електрохімічний синтез, прогнозування властивостей: моногр. / М.В. Вєдь, М.Д. Сахненко. — Харків: НТУ “ХПІ”, 2010. — 272 с.
3. Рыщенко, И.М. NP-удобрения. Моделирование взаимосвязей “свойства — состав” в технологии / И.М. Рыщенко, М.В. Вєдь, А.С. Савенков // Хім. пром-ть України. — 2011. — № 5. — С. 73 — 79.

- 
4. Рыщенко, И.М. Технология NP-удобрения. Управление ионными равновесиями / И.М. Рыщенко, М.В. Ведь, А.С. Савенков // Хім. пром-ть України. — 2012. — № 1. — С. 43 — 47.

### References

1. Gal'bershtam, N.M. Neyronnye seti kak metod poiska zavisimostey struktura-svoystva organicheskikh soedineniy [Neural networks as a method of searching for dependencies in structure and properties of organic compounds] / N.M. Gal'bershtam, I.I. Baskin, V.A. Palyukhin // Uspekhi khimii [Advances in Chemistry]. — 2003. — V. 72, # 7. — pp. 706 — 725.
2. Ved, M.V. Katalitychni ta zakhysni pokryttia splavamy i skladnymy oksydamy: elektrokhimichniy syntez, prohnozuvannia vlastyvostei: monohr. [Catalytic and protective coatings from alloys and complex oxides: electrochemical synthesis, prediction of properties: monograph] / M.V. Ved, M.D. Sakhnenko. — Kharkiv, NTU "KhPI", 2010. — 272 p.
3. Ryshchenko, I.M. NP-udobreniya. Modelirovanie vzaimosvyazey "svoystva — sostav" v tekhnologii [NP-fertilizers. Modeling of relationships "properties-composition" in the technology]. / I.M. Ryshchenko, M.V. Ved', A.S. Savenkov // Chemical Industry of Ukraine. — 2011. — # 5. — pp. 73 — 79.
4. Ryshchenko, I.M. Tekhnologiya NP-udobreniya. Upravlenie ionnymi ravnovesiyami [Technology of NP-fertilizers. Control of ion equilibria] / I.M. Ryshchenko, M.V. Ved', A.S. Savenkov // Chemical Industry of Ukraine. — 2012. — #1. — pp. 43 — 47.

Рецензент д-р хим. наук, проф. Одес. нац. политехн. ун-та Кожухарь В.Я.

Поступила в редакцию 9 октября 2013 г.