

Экспериментально полученные изотермы сорбции ряда алкилсульфатов натрия хитином относятся к L – типу согласно классификации Гильса. Из всех рассмотренных уравнений для описания сорбции АСН, кроме уравнения Лэнгмюра (на первоначальном участке изотерм), применимы уравнения Хилла – де Бура и БЭТ в более широком интервале концентраций. Уравнение Хилла – Де Бура выполнимо при степенях заполнения сорбента от 0,2 до 0,7. Прямолинейная зависимость в линеаризованных координатах уравнения БЭТ наблюдается в интервале концентраций от 3,0 до  $9,0 \cdot 10^{-5}$  моль/л. Выбор сорбционной модели позволил рассчитать параметры, характеризующие процесс сорбции. Параметр  $k_1$ , учитывающий взаимодействие молекул АСН с поверхностью хитина, лежит в пределах 0,18 - 0,23, с увеличением длины углеводородного радикала АСН незначительно усиливается взаимодействие молекул ПАВ с поверхностью сорбента. Параметр  $k_2$ , характеризующий ассоциацию молекул на поверхности сорбента, рассчитанный по уравнению Хилла – де Бура, изменяется от 5,32 до 7,25 в зависимости от размера молекулы сорбируемого ПАВ, что соответствует когезии средней силы. Для этих систем использование программы «Langmuir» дает удовлетворительное соответствие величин констант сорбционного равновесия  $k_1$  и предельной сорбции  $A_\infty$ , рассчитанных различными методами.

Изотермы сорбции ряда хлоридов алкилпиридиния относятся к изотермам S-типа и L-типа по классификации Гильса, что ограничивает возможность использования представленных уравнений, поскольку дает существенные отрицательные отклонения величин  $k_1$  и  $A_\infty$ . В ряде случаев удовлетворительно описывает сорбцию хлоридов алкилпиридиния уравнение Хилла – де Бура. Рассчитанный параметр  $k_2$  выше, чем для анионных ПАВ, и составляет 9,67. В поверхностном слое наблюдается ассоциация молекул ПАВ, которая определяется их строением, что подтверждается наличием плато на изотермах в областях концентраций гораздо меньших критической концентрации мицеллообразования.

Таким образом, формальное применение уравнений сорбции с использованием компьютерных расчетов показывает, что целесообразно использовать несколько уравнений, учитывающих как дополислойную, так и полислойную сорбцию, наблюдающуюся в исследуемых системах.

## РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМОВ ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ РАДИОЛОГИЧЕСКОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПРОДУКТОВ ПИТАНИЯ

Унрод В.И., \*Матвиенко Д.Г., \*\*Яцишин А.В., \*\*Белоусов В.Ф., \*\*Савченко А.Н.

Черкасский государственный технологический университет, unrod@mail.ru

\*Черкасский государственный центр стандартизации, метрологии и сертификации

\*\*Харьковский национальный фармацевтический университет

В условиях усиленного техногенного загрязнения территории Украины актуальными являются работы по исследованию и прогнозированию сложных экологических ситуаций методами математического моделирования и многомерного статистического анализа, реализованных в программных средствах. При этом актуальными является разработка и исследование алгоритмов оценок влияния техногенных нагрузок на окружающую среду и человека.

На основе факторного анализа с помощью метода главных компонент был проведен многомерный анализ данных по содержанию радиоактивных металлов ( $^{137}\text{Cs}$  и  $^{90}\text{Sr}$ ) в основных продуктах питания (рыбе, мясе, молоке, хлебе, крупах) в 11 районах Черкасской области за четыре года (2000-2003г.г.) [1, 2], в результате которого мы получили интегральные показатели (факторы 1 и 2) с накопленной дисперсией около 80%. Эти интегральные показатели дают возможность определить структуру взаимосвязей между экологическими данными Черкасского региона, то есть сделать их классификацию [3]. Потом с помощью кластерного анализа проводилось районирование территории Черкасской области по радиоэкологическим показателям содержания  $^{137}\text{Cs}$  и  $^{90}\text{Sr}$  в основных продуктах

питания и строились карты, которые отражают динамику загрязнения продуктов радионуклидами за последние несколько лет (начиная с 2000-го года) Все данные брались из Радиологической лаборатории центра испытаний пищевой продукции и промышленного сырья, ГП "Черкасыстандартметрология" [<http://www.chdcsms.neosm.com>].

Применение вышеперечисленных методов для анализа данных медико-экологического и пищевого мониторингов может быть использовано при принятии одинаковых решений в области контроля данных пищевого мониторинга или здоровья населения.

- 1) Зухин Ю.В., Матвиенко Д.Г. Многомерные подходы к статистической обработке данных радионуклидного загрязнения пищевых продуктов Черкасской области // „Моделювання та інформаційні технології”: Зб. наук. пр. – Київ. – Вип. 28. – К., 2004. – с. 59-67.
- 2) Зухин Ю.В., Матвиенко Д.Г. Многомерные подходы к статистической обработке медико-экологических данных // Збірник тез XXIV науково-технічної конференції „Моделювання” – К., 11-12 січня 2005. – с. 32-33.
- 3) Матвиенко Д.Г., Яцишин А.В. Комбинированный алгоритм анализа экологической ситуации в регионе // Збірник наукових праць ІПМЕ НАН України, 2007.

### ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ДАННЫХ РАДИОЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА ЖИТОМИРСКОГО И ЧЕРКАССКОГО РЕГИОНА С ПОМОЩЬЮ ГИС

Унрод В.И., \*Яцишин А.В., \*\*Матвиенко Д.Г. \*Белоусов В.Ф., \*Почечуев А.М.

Черкасский государственный технологический университет, unrod@mail.ru

\*Харьковский национальный фармацевтический университет

\*\*Черкасский государственный центр стандартизации, метрологии и сертификации

Актуальность данных разработок заключается, прежде всего, в необходимости принятия решений в условиях многомерной постоянно изменяющейся информации о состоянии окружающей среды.

Основные задачи, которые решались на данной стадии первичной визуализации экологических данных:

- подключение к существующим медико-экологическим базам;
- отображение состояния экологических объектов в виде:
  - тематических карт экологического загрязнения;
  - изолиний и контурных поверхностей.

В работах [1-3] рассматривается архитектура математического пакета, разработанного для получения радиационных прогнозов. Этот пакет реализует модель процессов миграции радионуклидов как точечную модель. Здесь предлагается алгоритм пространственного распределения результатов моделирования с помощью ГИС технологий. Конкретным объектом приложения являются загрязненные после Чернобыльской аварии территории Житомирской области. Этот алгоритм состоит из следующих шагов:

1. Используется база данных паспортизации Житомирской области. В базу входят наиболее загрязненные, в радиационном смысле, районы: Овручский (44 села), Лугинский (49 села), Олевский (44 села), Народичский (46 сел) районы;
2. Данная выборка из базы подвергается нормировке по «наихудшему» эталону, в радиационном смысле, вычисляется коэффициент нормировки  $X$ ;
3. Нормируются начальные условия входных данных для радиационного пакета по каждому селу:  $X_1 = X \cdot 0,7/1,1$ ;  $X_2 = X \cdot 0,7/0,3$ ;  $X_3 = X \cdot 0,25/0,3$ ;  $X_4 = X \cdot 0,75/0,3$ ;  $X_5 = \dots = X_9 = 0$  и заносятся в электронные таблицы Microsoft Excel XP;
4. С помощью радиационного пакета получаем прогнозы по следующим компартаментам: «Наземная часть урожая» ( $X_1$ ), «Почва под посевами» ( $X_2$ ), «Пастбищная трава» ( $X_3$ ), «Почва на пастбище» ( $X_4$ ), «Подземная часть урожая» ( $X_5$ ),