

Підставивши рівняння (6) у рівняння (5), отримаємо залежність ступеня перетворення (X) від основних параметрів процесу відновлення Cr^{6+} , а саме від початкової концентрації Cr^{6+} , витрати реагенту, значеннями окисно-відновного потенціалу (Eh). Дана залежність буде мати вигляд:

$$X = -0.002 \cdot [0,11 \cdot C(Cr^{6+}_{\text{поч}})^2 - 1,126C(Cr^{6+}_{\text{поч}})] + 3,5 + 0.001 \cdot Eh + 1.001. \quad (7)$$

Розкривши дужки у рівнянні (7), отримаємо:

$$X = (-0.00022 \cdot C(Cr^{6+}_{\text{поч}})^2 - 0.00225 \cdot C(Cr^{6+}_{\text{поч}}) - 3.49) + 0.001 \cdot Eh + 1.001. \quad (8)$$

За допомогою отриманої моделі процесу відновлення Cr^{6+} в помірно концентрованих та концентрованих стічних водах можливо передбачити хід та характер перебігу даного процесу при динамічній роботі.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ СИНТЕТИЧНОГО ПАЛИВА З СИРОВИНИ РОСЛИННОГО ПОХОДЖЕННЯ

Бондаренко С.Г., Степанов М.Б., Василькевич О.І., Хоменко А.О.

Національний технічний університет України «КПІ», sgb@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Нині очевидна необхідність попередження або ж послаблення екологічної кризи та її наслідків. Один із шляхів у вирішенні цієї глобальної проблеми є пошук альтернативної сировини для виробництва різних видів енергії. Розвиток в Україні енергетики, заснованої на використанні відновлюваних джерел енергії, стимулюється дефіцитом традиційних паливно-енергетичних ресурсів і рухом в захист екології. Виснаження родовищ корисних копалин і необхідність заміни невідновлюваних джерел енергії відновлюваними привело до відродження інтересу до сировинних ресурсів рослинного і тваринного походження.

Важливою перевагою палив на основі рослинних олій являється їх більш висока екологічність як під час виробництва, так і застосування. Саме цей факт вказує на велику перспективність їх використання в недалекому майбутньому.

В роботі розглянуто технологію виробництва біодизельного палива, що передбачає переробку рослинних олій у біодизель шляхом переестерифікації за присутності лужного каталізатору з отриманням гліцерину як побічного продукту.

На схемі очищена олія поступає в нагрівач, де підігрівається до 60°C, а потім – у реактор, де змішується у розчині лугу у метиловому спирті. У реакторі відбувається процес переестерифікації олії - жири вступають у реакцію з метиловим спиртом за наявності каталізатора (лугу), внаслідок чого утворюються складні ефіри, а також гліцеролова фаза. Гліцеролова фаза складається на 56% з гліцерину, 13% з жирних кислот, 10% ефірів, 9% неорганічних солей, 8% з води. Суміш поступає на розділювач, де біопаливо відділяється від гліцерину та поступає на остаточну очистку.

Для якісного проведення реакції переестерифікації в реактор потрібно додати надлишок метанолу, а саму реакцію проводити при заданих значеннях тиску і температури з використанням оптимальної кількості каталізатора.

На кінцеву якість біодизельного палива суттєво впливає кількість води у вихідній сировині, забрудненість олії вільними жирними кислотами, якість метилового спирту, кількість каталізатора, температура і тиск, наявність операції промивання біопалива, термін проведення процесу переестерифікації, наявність системи очищення палива від сторонніх включень тощо.

Найбільш ефективним шляхом розрахунку параметрів технологічної схеми являється комп'ютерне моделювання за допомогою програм-симуляторів, але процес симулювання даного виробництва ускладнений відсутністю у бібліотеці речовин необхідних параметрів, і дає невірні результати. Тому для розрахунку параметрів технологічної схеми обране середовище MathCad.

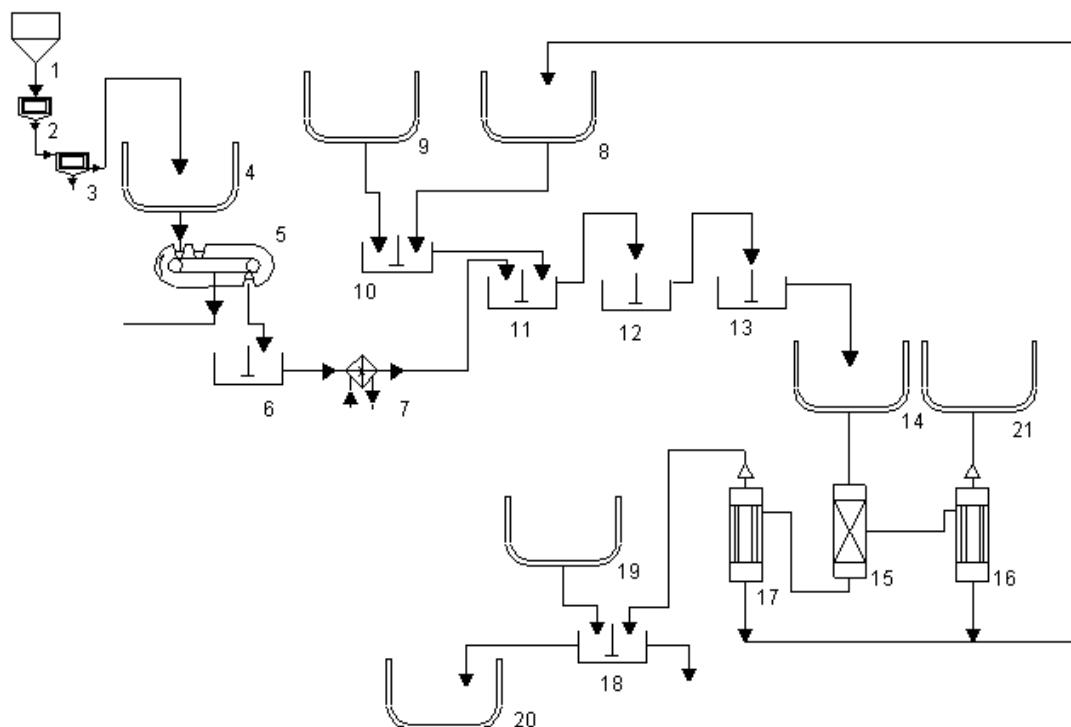


Рис. 1 Технологічна схема процесу виробництва синтетичного палива із сировини рослинного походження:

1 – бункер заправки сировини; 2 – олійний прес; 3 – фільтр грубої очистки; 4 – проміжна ємність для олії; 5 – фільтр очистки олії; 6 – збірник очищеної олії; 7 – проточний підігрівач олії; 8 – бак з метиловим спиртом (метанолом); 9 – бак з лугом (KOH); 10 – бак приготування метоксиду (розчин KOH у метанолі); 11, 12, 13 – блок реакційних апаратів (гідродинамічних змішувачів); 14 – буферна ємність для ефірно-гліцеринової суміші; 15 – гравітаційний сепаратор (відстійник для ефірно-гліцеринової суміші); 16, 17 – рекуперативні випарні апарати (для випаровування метанолу); 18 – апарат кінцевої очистки біодизелю; 19 – бак з присадкою; 20, 21 – збірники готових продуктів (біодизелю та гліцерину).

Для розрахунку матеріального балансу були враховані тільки ті апарати, у яких присутні матеріальні перетворення. Отже, схема для розрахунку матеріального балансу матиме вигляд, як показано на рис.2.

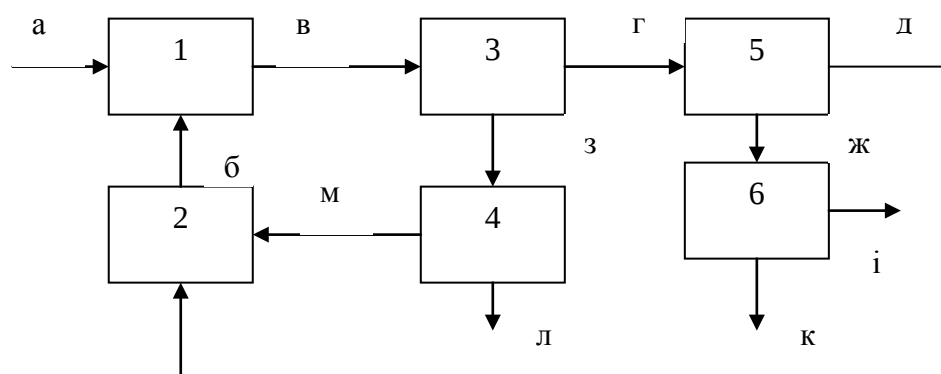


Рис. 2 – Схема процесу для розрахунку матеріального балансу технологічної схеми: 1 – реакційний змішувач; 2 – ємність з метоксидом; 3 – гравітаційний сепаратор; 4, 5 – рекуперативні випарні апарати; 6 – апарат кінцевої очистки біодизелю.

Результати розрахунку схеми у середовищі MathCad представлені у табл.1.

Таблиця 1 – Матеріальний баланс схеми

Речовини, кг / потоки	а	б	в	г	д	ж	з	і	к	л	м
Олія	1040,0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Метанол	0	144,0	18,4	9,2	9,2	0	9,2	0	0	0	9,2
КОН	0	19,0	19,0	19,0	0	0	0	0	0	0	0
Глицерин	0	0	150,9	0	0	0	150,9	0	0	150,9	0
Біопаливо	0	0	1000,0	1000,0	0	1000,0	0	0	1000,0	0	0
Вода	0	0	14,7	14,7	0	14,7	0	14,7	0	0	0

Проведені розрахунки показали, що з 1040 кг олії можливо отримати до 1000 кг біопалива, а також 150,9 кг гліцерину, який знаходить широке застосування у фармацевтичній практиці та косметичі.

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДІВ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ В РОЗРОБЦІ ІНГІБІТОРІВ ПРОТЕЇНКІАЗИ FGFR1

Грищенко А. А., Бджола В. Г., Кухаренко О. П., Ярмолюк С. М.

Інститут молекулярної біології та генетики andrey.grisch@gmail.com

Кіназа рецептору фактору росту фібробластів 1 (FGFR1) належить до родини рецепторних тирозинових протеїнкіназ. FGFR1 виконує численні функції в організмі в ході ембріонального розвитку. В дорослих організмів кіназа бере участь в регуляції об'єму м'язової та жирової тканин і процесах репарації [1]. Основна роль FGFR1 в постнатальному розвитку – регуляція процесу ангиогенезу [2], який необхідний для росту пухлин. Відповідно інгібітори даної кінази можна використовувати для ефективного лікування ряду хвороб, в тому числі і онкогенних. Тому метою нашої роботи був пошук інгібіторів протеїнкінази FGFR1.

Для пошуку інгібіторів використовувався метод рецептор-орієнтованого віртуального скринінгу з перевіркою результатів тестуванням *in vitro*. Віртуальний скринінг проводили за допомогою пакету програм DOCK та AutoDock. Доковані ліганди сортувались по показникам енергії зв'язування і перевірялись візуально. Інгібіторні властивості відібраних лігандів тестувались на рекомбінантній кіназі з використанням радіоактивної мітки γ - 32 P-АТФ. Для активних інгібіторів визначалося значення IC_{50} .

В результаті віртуального скринінгу 3500 хромонів для тестування було відібрано 25 флавонових сполук. Тести *in vitro* показали наявність інгібіторних властивостей в 6 сполук в мікромолярному діапазоні. Найбільшу активність (IC_{50} 3,6 мкМ) мала сполука 6-метил-2'-етокси-3-флавонол (рис.1).

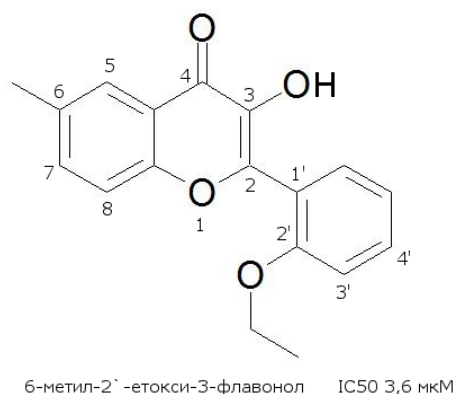


Рис. 1. Структура активного інгібітора FGFR1

Досліджено вплив замісників в фенільному кільці та хромоновому гетероциклі флавонолів на ефективність інгібування FGFR1. Найвищу інгібіторну активність мали