

по этим точкам наличие линейной корреляции между F и скоростью растворения препарата, найденной по результатам опытов *in vitro* [1]. Недостаток: задача деконволюции численно неустойчива, и это не позволяет получать надежных результатов по наличию корреляции между F и скоростью растворения W_S

Расчеты IVIVC по уравнению (1) можно существенно упростить и сделать более устойчивыми, если использовать следующий подход. А priori допускаем наличие линейной корреляции между скоростью абсорбции F и скоростью растворения W_S :

$$F = a_0 + a_1 \cdot W_S, \quad (2)$$

Подставим уравнение (2) в (1):

$$\begin{aligned} C(t) = \int_0^t C_\delta(t - \tau) \cdot [a_0 + a_1 \cdot W_S(\tau)] d\tau &= a_0 \cdot \int_0^t C_\delta(t - \tau) d\tau + \\ + a_1 \cdot \int_0^t C_\delta(\tau) \cdot W_S(\tau) d\tau &= a_0 \cdot X_0(t) + a_1 \cdot X_1(t) \end{aligned} \quad (3)$$

В (3) в состав интегралов $X_1(t)$ и $X_2(t)$ входят только функции, которые известны из эксперимента. Поэтому задача нахождения неизвестных коэффициентов a_0 и a_1 – это задача нахождения коэффициентов линейной регрессии, которая легко выполняется методом наименьших квадратов. Определив эти коэффициенты и подставив их в уравнение (3), можно сопоставить между собой расчетные и экспериментальные значения концентрации в плазме крови $C(t)$, например, с помощью коэффициента детерминации R^2 , который указывает на долю отклонений от среднего, которая определяется наличием линейной связи по уравнению (3). Достоинством рассмотренного подхода является численная устойчивость вычислительных процедур и простота их компьютерной реализации. Подход проиллюстрирован на примере установления корреляции между F и W_S для метопролола по данным [2].

- 1) *Pithavala Y.K., Soria I., Zimmerman C.L.* Use of the Deconvolution Principle in the Estimation of Absorption and Pre-systemic Intestinal Elimination of Drugs // *Drug metabolism and disposition*, 1997 – V.25, № 11. - P. 1260-1265.
- 2) *Levitt D.G.* The use of a physiologically based pharmacokinetic model to evaluate deconvolution measurements of systemic absorption // *BMC Clin Pharm.*, 2003. - № 3. – P. 1-15.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАМКНУТОЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИСКРЕТНО НЕПРЕРЫВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Рыжов Д.А., Зиятдинов Н.Н., Лаптева Т.В., Островский Г.М.

Казанский государственный технологический университет, nnziat@yandex.ru

В докладе дается описание модифицированного метода ветвей и границ для решения задачи дискретно-непрерывной оптимизации замкнутой химико-технологической системы, включающей колонны ректификации. В задаче наряду с непрерывными режимными поисковыми переменными используются дискретные переменные – номера тарелок ввода питания в колонны. Причем, по условиям задачи, из всего множества возможных тарелок ввода питания для каждой колонны может быть выбрана только одна. Задача относится к классу задач смешанного дискретно-непрерывного программирования.

Критерии выбора оптимальных тарелок питания, предложенные во многих работах посвященных проектированию и расчету установок ректификации, так или иначе, связаны с минимизацией термодинамических потерь необратимых процессов смешения. При использовании данных критериев для оптимизации систем ректификационных колонн возникают серьёзные трудности, поскольку выбор оптимальной тарелки питания в задаче дискретно-непрерывной оптимизации даже для разомкнутой системы разделения приводит к задаче оптимизации с разрывной целевой функцией и разрывными ограничениями. Известно, что решение подобных задач крайне трудоемко. Поэтому, задача выбора оптимальных тарелок питания может быть сведена к перебору возможных вариантов ввода питания, решения для каждого из них задачи оптимизации по непрерывным режимным параметрам и выбору в конечном итоге наилучшего варианта. Однако, при большом числе колонн и множестве возможных точек ввода питания в эти колонны решение поставленной задачи становится исключительно трудоемким.

В связи с этим предлагается новый подход к решению задачи дискретно-непрерывной оптимизации разомкнутых и замкнутых систем ректификационных колонн, основанный на совместном использовании метода ветвей и границ (ВГ) и метода структурных параметров.

При использовании метода ВГ ищется нижняя граница минимизируемой функции. Для этого заменим дискретные переменные непрерывными используя подход предложенный ранее в работе [1]. В результате такого перехода задача дискретно-непрерывной оптимизации становится обычной задачей нелинейного программирования.

Алгоритм поиска удобно представить в виде дерева-графа. Каждой вершине будет соответствовать некоторый набор множеств, которые включают в себя множество возможных номеров тарелок питания соответствующих ректификационных колонн. Ветвление проводится по числу тарелок питания в каждом множестве, путем дробления выбранного на данной итерации множества на два подмножества. Верхняя оценка получается решением задачи, в которой максимальное значение поисковой переменной (доли потока) для каждой колонны, полученные при решении непрерывной задачи, округляются до 1. Остальные доли потоков приравниваются нулю. Поиск завершается, когда все множества, будут иметь по одной тарелке питания или когда нижняя и верхняя оценки будут близки с заданной точностью.

Для проверки эффективности работы предложенного алгоритма было проведено компьютерное моделирование химико-технологической системы узла разделения этилен-пропановой фракции производства этилена с использованием моделирующей программы ChemCad. При решении поставленной задачи критерий оптимальности (удельные энергозатраты) принял минимальное значение за 34 шага. Отметим, что простой перебор точек ввода питания потребовал бы 256 шагов.

- 1) *Островский Г.М., Волин Ю.М., Зиятдинов Н.Н.* Оптимизация в химической технологии. – Казань: Изд-во «Фэн» АН РТ, 2005. – 394 с.

РАСЧЕТ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ МОНОАММОНИЙ ФОСФАТ – НИТРАТ КАЛЬЦИЯ – НИТРАТ АММОНИЯ

Рыщенко И.М., Асеев Г.Г., Савенков А.С., Вещнер Ю.И.

Национальный технический университет "ХПИ", savenkov@kpi.kharkov.ua

Азотнокислотная переработка наиболее перспективна для обедненных фосфоритов, залежи которых достаточно в Украине. Содержание P_2O_5 в них составляет 5-10% масс. Проведенными нами исследованиями получена азотнокислотная вытяжка, обработана аммиачной водой и получены удобрения для различных сельскохозяйственных культур.

Основными компонентами полученного раствора являются, $NH_4H_2PO_4$, $Ca(NO_3)_2$ и NH_4NO_3 . Выбор рациональных методов переработки азотнокислотной вытяжки требует знаний термодинамики, кинетики и различных физико-химических параметров.