

Scientific and technical journal «Technogenic and Ecological Safety»

RESEARCH ARTICLE
OPEN ACCESS

МЕТОД ВИЗНАЧЕННЯ ПОСЛІДОВНОСТІ РЕАКЦІЙ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ НАСЛІДКІВ ТЕХНОГЕННОГО ЗАБРУДНЕННЯ

П. А. Козуб¹, С. М. Козуб², В. А. Лук'янова¹, Г. М. Резніченко³, Ю. В. Колошко³, Н. Саїдоглу⁴¹Харківський національний університет радіоелектроніки, Харків, Україна²Харківський національний медичний університет, Харків, Україна³Національний університет цивільного захисту України, Харків, Україна⁴INA consulting LLC, Ешберн, Сполучені Штати Америки

УДК 504.5, 546.78

DOI: 10.52363/2522-1892.2022.1.5

Отримано: 21 листопада 2021

Прийнято: 7 квітня 2022

Cite as: Kozub P., Kozub S., Lukianova V., Reznichenko G., Koloshko U., Saidoglu N. (2022). Method for determining the sequence of reactions to predict the consequences of technogenic pollution. Technogenic and ecological safety, 11(1/2022), 34–39. doi: 10.52363/2522-1892.2022.1.5

Анотація

Для прогнозування негативних наслідків техногенного забруднення шкідливими речовинами розроблено метод визначення можливих шляхів хімічних реакцій з урахуванням хімічних та термодинамічних властивостей заданого набору компонентів, розглянуто теоретичні основи хімічної стехіометрії та термодинаміки, закономірності впливу термодинамічних показників на напрямок хімічних реакцій та послідовність їх перебігу.

У зв'язку з цим, хімічні об'єкти було представлено у вигляді багатовимірних векторів з урахуванням термодинамічних показників, для розрахунків яких використовували методи хімічної термодинаміки. Генерацію хімічних реакцій здійснювали за допомогою методів математичної статистики та комбінаторики, а для визначення послідовностей хімічних реакцій методи теорії графів.

Запропоновано хімічну сполуку записувати вигляді суми базисних векторів, що дозволило зображувати сполуки та взаємодію між ними у n-мірному просторі та за допомогою головних принципів роботи з цілочисельним векторним простором визначити можливі хімічні взаємодії. З'ясовано три умови можливості хімічної взаємодії за даним методом та введено значення ентальпії та енергії Гібса кожної реакції, які визначаються допомогою значень відповідних потенціалів для кожної зі сполук. Для зручності зображення та подальших розрахунків використовували окремо простір елементо-ентальпійний та елементо-гібсовий.

Створено та перевірено алгоритм для цього методу, вивчено особливості для різних граничних умов його використання, перевірено його дієвість на реальних хімічних реакційних системах. Запропоновано алгоритм визначення можливостей протікання хімічних реакцій в багатокомпонентних системах для визначення їх техногенного навантаження на довкілля.

Ключові слова: система, хімічна реакція, вектор, термодинамічні потенціали, послідовність.

Постановка проблеми

Одним з факторів техногенного навантаження на навколишнє середовище та здоров'я людини є наявність в атмосфері або повітрі робочої зони хімічних речовин, що негативно впливають на стан довкілля та можуть викликати професійне захворювання, тимчасове або стійке зниження працездатності, призвести до порушення здоров'я нащадків, тощо[1]. Найчастіше у технологічному циклі будь-якого виробництва, а також під час зберігання та транспортування сировини або готового продукту хімічні сполуки знаходяться в складних системах, тому визначити їх вміст проблематично, складно та інколи зовсім неможливо[2, 3].

Прогнозування можливих хімічних взаємодій у складних реакційних системах, пошук маршрутів хімічних перетворень, дозволить отримувати дані щодо якісного вмісту речовин та проводити розрахунки процесів техногенного забруднення довкілля [4, 5, 6].

Аналіз останніх досліджень і публікацій

Сучасний стан досліджень складних систем дозволяє встановити лише загальний перелік реагентів [7, 8], але не з'ясовує реакції між ними. Тобто потрібно не просто вирахувати коефіцієнти хімічних рівнянь, але й визначити такі рівняння. За

умови, що у системі, яка вивчається невелика кількість реагентів, це можливо зробити з урахуванням практичного досвіду, але більш складні системи вже потребують використання системного підходу. І саме такого підходу на цей час в стехіометрії не існує.

Основні дослідження в цій сфері зосереджені на вивченні складних хімічних систем (Chemical Reaction Network) в першу чергу для прогнозування кінетики хімічних взаємодій у цих системах [9–10]. Слід зазначити, що в більшості такі дослідження мають свою вузькоспеціалізовану спрямованість (біохімічні системи, системи напівпровідникових сполук, кристалохімічні системи). Зустрічаються і інші напрямки публікацій – використання стехіометричних розрахунків у освітній діяльності [11–13] різні методи вдосконалення математичних підходів до пошуку стехіометричних коефіцієнтів [14].

Постановка завдання та його вирішення

Для розробки методики визначення можливих шляхів хімічних реакцій з урахуванням хімічних та термодинамічних властивостей заданого набору речовин було розглянуто теоретичні основи хімічної стехіометрії та термодинаміки, закономірності впливу термодинамічних показників на напрямок хімічних реакцій та послідовність їх перебігу.

Для цього хімічні об'єкти було представлено у вигляді багатовимірних векторів з урахуванням термодинамічних показників, для розрахунків яких використовували методи хімічної термодинаміки. Для генерації хімічних реакцій використовувались методи математичної статистики та комбінаторики, а для визначення послідовностей хімічних реакцій методи теорії графів.

Проведені раніше дослідження показали, що відображення реакцій у вигляді формул є символьним відображенням, якому відповідає графічне відображення сполук та реакцій у вигляді векторів [15].

Оскільки, будь-яку хімічну сполуку можна зобразити у вигляді вектору, то з законів стехіометрії випливає, що з одних і тих саме елементів може складатися декілька сполук. І навпаки, одна й та ж сполука може бути представлена сумою різних векторів.

Такий набір лінійно незалежних векторів, на основі якого визначається розмірність простору та за допомогою якого можна зобразити усі інші вектори називається базисом векторного простору. У n -мірному просторі може бути n базисних векторів, а будь-який вектор можна записати у вигляді набору базисних векторів.

На даний момент існує всього 118 хімічних елементів, тому у 118-мірному елементному просторі буде усього 118 базисних векторів, і в цьому просторі ми маємо набір базисних векторів $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3, \dots, \vec{e}_n)$ на основі якого можна визначити будь-який вектор у вигляді такої рівності:

$$\vec{A}(a_1, a_2, a_3, \dots, a_n) = k_1 \cdot \vec{e}_1 + k_2 \cdot \vec{e}_2 + k_3 \cdot \vec{e}_3 + \dots + k_n \cdot \vec{e}_n.$$

При цьому $\{k_1, k_2, k_3, \dots, k_n\} \in N_0$.

Якщо перейти до хімічних сполук, то сполуку $A(N_a H_b \dots O_g)$ можна записати у вигляді суми базисних векторів, а саме:

$$\vec{A}(a, b, \dots, c) = a \cdot \vec{e}_1(1, 0, \dots, 0) + b \cdot \vec{e}_2(0, 1, \dots, 0) + \dots + c \cdot \vec{e}_n(0, 0, \dots, 1).$$

Таким чином базисом хімічної системи називаються вектори, через які можна виразити будь-яку хімічну сполуку, яка міститься в цій системі.

Це дає змогу не тільки зображувати сполуку у n -мірному просторі, а й зображувати взаємодії між певними хімічними сполуками. Для зображення хімічної взаємодії між векторами використовуються лише дві операції над векторами, а саме додавання векторів та множення вектора на число. Розв'язаною хімічною реакцією називається реакція, яка у векторному зображенні виглядає, як розходження векторів з однієї точки і потім їх сходження в іншій точці, відмінній від попередньої (рис. 1).

Особливістю векторного підходу є те, що він дозволяє відображати реакції будь-якої складності, а також набори реакцій, тому він може бути використаний для відображення систем хімічних рівнянь.

В залежності від задач такі системи можуть містити в собі різні набори хімічних рівнянь. Так, при розрахунку термодинамічних показників системи, достатніми є рівняння, які однозначно пов'язують між собою всі реагенти. Більша кількість рівнянь буде призводити до додаткових розрахунків, але для кінетичних розрахунків необхідно враховувати всі можливі маршрути реакцій, тому така система в ідеалі повинна мати всі можливі хімічні рівняння між всіма реагентами. Для наглядного відображення хімічного процесу серед цих рівнянь виділяють найбільш важливі, і така система рівнянь називається схемою хімічного процесу. Для малої кількості реагентів системи хімічних рівнянь можуть бути складені вручну, але при кількості реагентів більше 10 це вже стає дуже складною задачею.

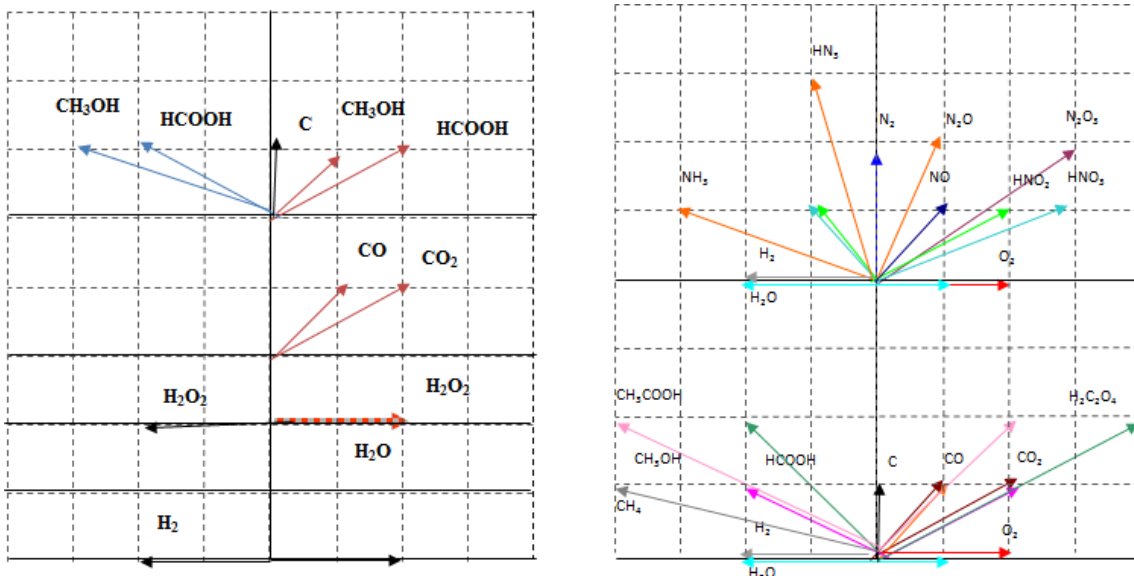


Рисунок 1 – Відображення хімічних сполук у векторній формі

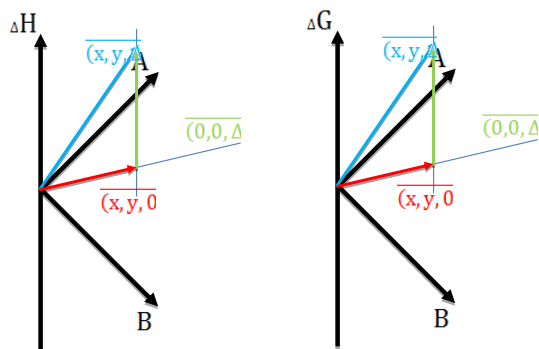


Рисунок 2 – Зображення сполук у двох елементно-енергетичних просторах: «елементи – ентальпія» та «елементи – енергія Гіббса»

Основи методу визначення можливих хімічних взаємодій впливають з головних принципів роботи з цілочисельним векторним простором.

Так, якщо будь-яку хімічну сполуку можна зазначити у вигляді суми базисних векторів, то можна сказати, що будь-яка хімічна сполука, яка складається з декількох базисних векторів, що не належать одній лінійній підмножині векторного простору, лежить на перетині цих самих підмножин.

З цього випливає **перша умова можливості хімічної взаємодії**, а саме: якщо між собою взаємодіють дві сполуки, що лежать на перетині підмножин А і В, і при цьому утворюються сполуки, що лежать на перетині підмножин В і С, то ця реакція є неможливою, оскільки в лівій частині рівняння відсутня підмножина С (яка присутня в правій частині рівняння), а в правій частині відсутня множина А (яка присутня в лівій частині), а це порушує закон збереження маси.

Кожна реакція складається з двох частин, а саме продуктів та реагентів, при цьому реагенти внаслідок реакції повинні бути трансформовані у продукти. Таким чином, **другою умовою** виникнення реакції є повна відмінність набору речовин для лівої та правої частин реакції.

Третя умова можливості хімічної взаємодії – якщо вектори реагентів ніколи не зійдуться в одній точці з векторами продуктів, при будь-яких значеннях (натуральних) коефіцієнтів, то ця реакція є не можливою.

Для визначення ймовірності перебігу хімічних реакцій застосовують значення ентальпії та енергії Гібса кожної реакції [16], для кожної реакції їх можна визначити за допомогою значень відповідних потенціалів для кожної зі сполук.

Раніше у роботі [15], ми зображували вектори будь-якої сполуки у елементному просторі, тобто вектор будь-якої сполуки описувався тільки **елементними координатами**. Тепер, коли ми вводимо термодинамічні розрахунки, постає необхідність введення **енергетичних координат**. Отже тепер загальний вигляд вектору будь-якої сполуки у елементно-енергетичному просторі буде таким:

$$\vec{A}(a_1; a_2; a_3; \dots; a_n; \Delta H; \Delta G).$$

Але для зручності зображення та подальших розрахунків ми будемо використовувати окремо простір елементно-ентальпійний та елементно-гібсовий, тоді вектор сполуки можна записати так:

$$\vec{A}(a_1; a_2; a_3; \dots; a_n; \Delta H);$$

$$\vec{A}(a_1; a_2; a_3; \dots; a_n; \Delta G).$$

Розглянемо для прикладу сполуку $A_x B_y$. Як було сказано раніше, ми цю сполуку зображуємо у вигляді двох векторів:

$$(x; y; \Delta H), (x; y; \Delta G).$$

Зобразимо ці вектори у двох елементно-енергетичних просторах (рис. 2).

З двох вищевказаних зображень на рисунку 2 видно, що загальний вектор сполуки дорівнює сумі двох векторів:

$$(x; y; \Delta H) = (x; y; 0) + (0; 0; \Delta H);$$

$$(x; y; \Delta G) = (x; y; 0) + (0; 0; \Delta G).$$

Тепер варто зазначити, чому буде дорівнювати сумарний енергетичний вектор реакції у елементно-енергетичному просторі. Для цього розглянемо таку реакцію:

$$\vec{A} + \vec{B} = \vec{C} + \vec{D};$$

$$\vec{A}(x_1; y_1; \Delta H_1); \vec{B}(x_2; y_2; \Delta H_2);$$

$$\vec{C}(x_3; y_3; \Delta H_3); \vec{D}(x_4; y_4; \Delta H_4).$$

Для лівої половини сумарний вектор:

$$\vec{R}_l = \vec{A} + \vec{B} = (x_1 + x_2; y_1 + y_2; \Delta H_1 + \Delta H_2).$$

Для правої:

$$\vec{R}_r = \vec{C} + \vec{D} = (x_3 + x_4; y_3 + y_4; \Delta H_3 + \Delta H_4).$$

Виходячи з формули для ентальпії реакції, нам необхідно знайти різницю правої та лівої частин:

$$\vec{R} = \vec{R}_r + \vec{R}_l = (x_3 + x_4; y_3 + y_4; \Delta H_3 + \Delta H_4) - (x_1 + x_2; y_1 + y_2; \Delta H_1 + \Delta H_2).$$

Оскільки

$$x_1 + x_2 = x_3 + x_4; y_1 + y_2 = y_3 + y_4,$$

то

$$\vec{R} = (0; 0; \Delta H_3 + \Delta H_4 - \Delta H_1 - \Delta H_2) = (0; 0; \Delta_r H).$$

Аналогічно отримуємо, що $\vec{R} = (0; 0; \Delta_r G)$.

Таким чином, можна визначити, що сумарний енергетичний вектор не має жодних елементних координат. Це можна вважати візуалізацією закону Гесса. Також це допоможе нам візуально оцінити напрямок та тепловий ефект реакції, що є одним із завдань векторного підходу. Розглянемо, як саме візуально можна визначити напрямок та тепловий ефект реакції. Якщо **вісь $0\Delta H \uparrow \vec{R}$** , то реакція є **ендотермічною**, а якщо **вісь $0\Delta H \downarrow \vec{R}$** , то реакція є **екзотермічною**. Якщо **вісь $0\Delta G \uparrow \vec{R}$** , то протікає **зворотна реакція**, а якщо **вісь $0\Delta G \downarrow \vec{R}$** , то протікає **пряма реакція**.

Також варто зазначити, що оскільки енергетична вісь є незалежною, то елементні координати не змінюються при будь-яких перетвореннях елементного простору.

Таким чином, виходячи з вищезазначеного, можна зробити висновок, що:

1) енергетичні координати є інваріантними до будь-яких перетворень елементного простору;

2) енергетичний вектор реакції не залежить від елементних координат.

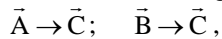
Далі окремо визначимо енергетичний вектор сполуки, або реакції взагалі. Саме цей вектор у елементно-гібсовому просторі нас й буде цікавити. Отже ми будемо працювати з такими векторами:

$$\vec{A}(a_1; a_2; a_3; \dots; a_n; \Delta H);$$

$$\vec{A}(0; 0; 0; \dots; 0; \Delta G).$$

Перший вектор використовується для перевірки ймовірності стехіометричних умов, а другий для визначення найімовірнішої реакції.

Отже, розглянемо два хімічних перетворення:



де \vec{A} , \vec{B} , \vec{C} – компоненти реакції такі, що:

$$\vec{A} = (x_1; y_1; \Delta G_1); \quad \vec{B} = (x_2; y_2; \Delta G_2);$$

$$\vec{C} = (x_3; y_3; \Delta G_3).$$

Із закону збереження маси видно, що

$$x_1 = x_2 = x_3; \quad y_1 = y_2 = y_3.$$

Отже, усі три реакції виражені однією точкою, а тому ці реакції є рівними. Тобто, будь-які дві (або більше) реакції можна назвати рівними, якщо вони виражені однією точкою.

Тепер, маючи три однакові реакції, нам необхідно визначити найімовірніші взаємодії. Як відомо, будь-яка система прагне до мінімуму потенціальної енергії. У нашому випадку, потенціальною енергією системи буде вважатися вільна енергія Гібса. Отже, нам необхідно порівнювати значення енергій Гібса кожної із реакцій. Найголовнішим принципом є те, що **чим більше значення ізобарно-ізотермічного потенціалу, тим сильніше система прагне його знизити** [16].

Припустимо, що $\Delta G_1 > \Delta G_2 > \Delta G_3$ та для зручності вважатимемо, що $\Delta G_1 > 0$, $\Delta G_2 > 0$, $\Delta G_3 > 0$. Розрахуємо для кожного з перетворень значення енергії Гібса:

$$\Delta G_{AC} = \Delta G_3 - \Delta G_1 < 0;$$

$$\Delta G_{BC} = \Delta G_3 - \Delta G_2 < 0.$$

Найімовірнішим перетворенням будемо вважати те, де найсильніше зменшилося значення ізобарно-ізотермічного потенціалу реакційної системи. З цього випливає, що перше перетворення є більш імовірним, ніж друге. У випадку, якщо $|\Delta G_{AC}| \gg |\Delta G_{BC}|$, будемо вважати, що в системі буде йти тільки перетворення $\vec{A} \rightarrow \vec{C}$. Якщо для перетворення виконується умова, що $\Delta G > 0$, то це означає, що для цього процесу відбувається зворотне перетворення, але це насправді не впливає на його ймовірність у порівнянні з іншими.

Таким чином, ми маємо можливість визначити ймовірність перетворення, якщо в реакційній

системі є декілька однакових реакцій. Для цього необхідно користуватися такими правилами:

– найімовірнішим є перетворення, в ході якого найсильніше зменшилося значення ізобарно-ізотермічного потенціалу реакційної системи;

– якщо $|\Delta G_{AC}| \gg |\Delta G_{BC}|$, то в системі буде йти тільки перетворення $\vec{A} \rightarrow \vec{C}$.

Розглянемо цей метод на реальній реакційній системі. Для того, щоб показати, що вже відомі нам реакційні системи можуть бути набагато складнішими, ніж нам здається, ми вирішили розглянути реакцію горіння метану в кисні. Розглянемо основні сполуки, які будуть у нашій реакційній системі, записуючи сполуки у вигляді векторів виду $(n_C, n_H, n_O, \Delta H)$ та $(n_C, n_H, n_O, \Delta G)$, де ΔH та ΔG взяті для температури 298 К, тобто:

$$\text{CH}_4 : (1; 4; 0; -130,33) \text{ та } (1; 4; 0; -74,85);$$

$$\text{C} : (1; 0; 0; -1,71) \text{ та } (1; 0; 0; 0);$$

$$\text{CO} : (1; 0; 1; -169,39) \text{ та } (1; 0; 1; -110,52);$$

$$\text{CO}_2 : (1; 0; 2; -457,19) \text{ та } (1; 0; 2; -393,51);$$

$$\text{O}_2 : (0; 0; 2; -61,1) \text{ та } (0; 0; 2; 0);$$

$$\text{H}_2 : (0; 2; 0; -38,89) \text{ та } (0; 2; 0; 0);$$

$$\text{H}_2\text{O} : (0; 2; 1; -298,06) \text{ та } (0; 2; 1; -241,82).$$

Як ми можемо побачити, наша реакційна система є трьохелементною та містить сім речовин.

Згідно з теорією кількість комбінацій у двох- та трьохелементних системах може бути розраховано згідно формул:

$$N_k = \frac{n^2 + n}{2} \text{ – для двохелементних систем;}$$

$$N_k = \sum_1^n \frac{n^2 - n + 2}{2} \text{ – для трьохелементних систем,}$$

де n – кількість сполук у системі.

Оскільки ми досліджуємо трьохелементну систему, яка містить сім сполук, то $N_k = 63$.

Кількість реакцій для будь-якої системи можна визначити за такою формулою:

$$N_R = \frac{N_k(N_k - 1)}{2}.$$

Таким чином, скориставшись цією формулою, можна зрозуміти, що усього нам необхідно розглядати 1953 перетворень.

Наступним кроком у прогнозуванні реакційної системи є відбір за трьома умовами можливості хімічних взаємодій за наступним алгоритмом:

1) визначимо всі можливі комбінації хімічних сполук, які будуть знаходитися по обидва боки знаку;

2) обираємо комбінації, в яких ліворуч та праворуч не можуть знаходитися однакові комбінації сполук;

3) залишаємо тільки комбінації, в яких склад елементів ліворуч та праворуч співпадають;

4) розраховуємо стехіометричні коефіцієнти для кожної комбінації і залишаємо тільки такі комбінації, що мають розв'язок.

Використовуючи програму, виконану на базі VBA MS Excel, було виконано перевірку для першої та другої умов. В результаті цього в нас залишилося всього лише 153 можливих перетворення.

З них після перевірки на співпадіння елементного складу лівої та правої частин залишилося всього 89 перетворень, які можливі стехіометрично. Тепер нам необхідно дослідити термодинамічні властивості кожного перетворення та всіх реакцій, яких ми маємо 178.

Розміщення реакційних систем в координатах Н–С–О можна побачити на рисунку 3, з якого видно, що деякі системи знаходяться на гранях координатної решітки, оскільки в реакції відсутні реагенти, які мають один із елементів.

Слід зазначити, що без розрахунків термодинамічних потенціалів визначення напрямку реакції є неможливим, тому для кожного з перетворень було розраховано значення енергії Гібса. При значеннях, більших нуля, реакції було переписано в зворотньому напрямку, для зручності ми беремо всі реакції так, щоб $\Delta G > 0$.

В результаті таких розрахунків стало можливим створити послідовність хімічних перетворень, яка є об'єктивно обумовленою термодинамічними показниками.

Висновки

Для розробки методики визначення можливих шляхів хімічних реакцій з урахуванням хімічних та термодинамічних властивостей заданого набору речовин було розглянуто теоретичні основи хімічної стехіометрії та термодинаміки, закономірності впливу термодинамічних показників на напрямки хімічних реакцій та послідовність їх перебігу.

Це дозволило розробити методику визначення послідовності хімічних рівнянь, які найбільш вірогідні у визначеній системі хімічних реагентів, створити та перевірити алгоритм для цієї методики, вивчити його особливості для різних граничних умов його використання, перевірити його дієвість на реальних хімічних реакційних системах.

Проведені дослідження дозволили запропонувати алгоритм визначення можливостей протікання хімічних реакцій в багатокомпонентних системах:

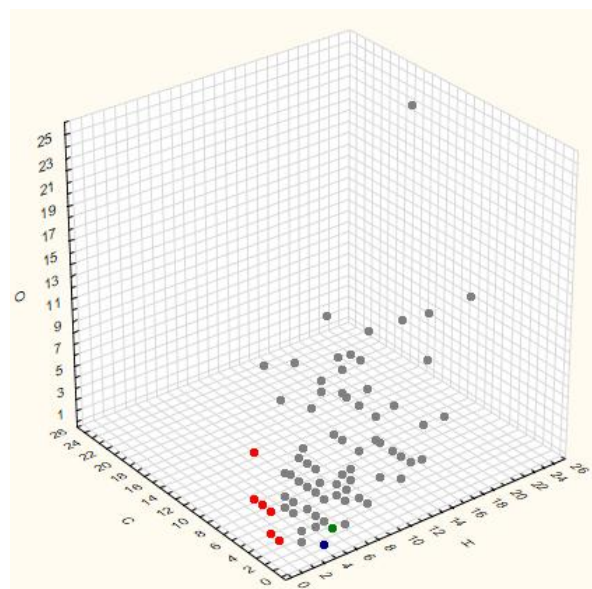


Рисунок 3 – Розміщення реакцій в координатах Н–С–О

1. Визначаємо елементи, з яких складаються речовини: реагенти та продукти реакцій.
2. Визначаємо перелік речовин, які є в реакційній системі.
3. Визначаємо всі можливі комбінації між реагентами.
4. Визначаємо можливі перетворення між такими комбінаціями.
5. Визначаємо термодинамічні показники реакцій.
6. При додатному значенні енергії Гібса змінюємо напрямки реакцій.
7. Сортуємо реакції в порядку збільшення або спадання енергії Гібса.

Таким чином, запропонований метод дає змогу прогнозувати будь-які реакційні системи, візуалізувати процеси та їх енергетичні властивості, а також полегшує розрахунок теплових ефектів усіх перетворень, які є в заданій системі. Застосування цього методу на реальних об'єктах дозволить визначити ймовірність існування шкідливих речовин незалежно від складності системи та запропонувати заходи зі зменшення негативного впливу на довкілля.

ЛІТЕРАТУРА

1. Михайлова Є. О., Панчева Г. М., Резніченко Г. М. Ефективні механізми поводження з твердими побутовими відходами в Україні. *Комунальне господарство міст*. 2019. Т. 5. Вип. 151. С. 37–44.
2. Резніченко Г. М., Бутенко А. М. Розробка екологічно-безпечної й ресурсозберігаючої технології переробки вторинної сировини зі складним вмістом полівалентних металів. *Науково-технічний журнал «Техногенно-екологічна безпека»*. 2017. Вип. 1. С. 61–67.
3. Резніченко Г. М., Бутенко А. М. Забезпечення захисту атмосферного повітря шляхом вдосконалення технології переробки вольфрамівмісної вторинної сировини. *Науково-технічний журнал «Техногенно-екологічна безпека»*. 2017. Вип. 2. С. 61–66.
4. Аналіз сучасних математичних засобів оцінки впливу місць зберігання золотшлакових відходів теплоенергетики на екологічний стан прилеглих територій / Яцишин А. В. та ін. *Науково-технічний журнал «Техногенно-екологічна безпека»*. 2019. Вип. 6(2/2019). С. 24–29.
5. Аналіз стану безпеки людини, довкілля та умов праці під час поводження з добривами / Михайлова Є. О., Протасенко О. Ф., Мороз М. О., Резніченко Г. М. *Комунальне господарство міст*. 2021. Т. 4. Вип. 164. С. 203–214.
6. Лобойченко В. М. Вирішення окремої задачі з ідентифікації небезпеки в рамках формування інженерно-технічного методу попередження надзвичайних ситуацій. *Dynamics of the development of world science. Abstracts of the 5th International scientific and practical conference (January 22-24, 2020)*. Vancouver, Canada: Perfect Publishing, 2020. P. 679–683.
7. Вамболь С. А., Колосков В. Ю., Деркач Ю. Ф. Оцінювання екологічного стану територій, прилеглих до місць зберігання відходів, на основі критерію екологічного резерву. *Науково-технічний журнал «Техногенно-екологічна безпека»*. 2017. № 2. С. 67–72.
8. Ukoň S. N. B., Akinola M. O., Njoku K. L. Comparative study on the growth response and remediation potential of panicum maximum and axonopus compressus in lead contaminated soil. *Науково-технічний журнал «Техногенно-екологічна безпека»*. 2019. Вип. 5(1/2019). С. 3–12.
9. Othmer H. G. Analysis of complex reaction networks. Lecture notes. School of Mathematics, University of Minnesota, December 9, 2003.
10. Angeli D. A tutorial on chemical reaction network dynamics. *European Journal of Control*. 2009. Vol. 15(3–4). P. 398–406.
11. Gabriel C. I., Onwuka G. I. Balancing of chemical equations using matrix algebra. *Journal of Natural Sciences Research*. 2015. Vol. 3. P. 29–36.

12. Yarroch W. L. Student understanding of chemical equation balancing, *Journal of Research in Science Teaching*, 1985. Vol. 22(5). P. 449–459.
13. Rao C. N. R. *University general chemistry: An introduction to chemistry science*. Rajiv Beri for Macmillan India Ltd., 2007.
14. Risteski I. B. A new singular matrix method for balancing chemical equations and their stability. *Journal of the Chinese Chemical Society*, 2009. Vol. 56. P. 65–79.
15. 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*. Hamilton, Canada: Accent Graphics Communications & Publishing, 2019. P. 1095–1104.
16. Чумак В. Л., Іванов С. В. Фізична хімія. Київ: Книжкове видавництво Національного авіаційного університету, 2007. 646 с.

Kozub P., Kozub S., Lukianova V., Reznichenko G., Koloshko U., Saidoglu N.

METHOD FOR DETERMINING THE SEQUENCE OF REACTIONS TO PREDICT THE CONSEQUENCES OF TECHNOGENIC POLLUTION

To predict the negative consequences of man-made pollution with harmful substances, a method for determining possible ways of chemical reactions taking into account the chemical and thermodynamic properties of a given set of components, the theoretical foundations of chemical stoichiometry and thermodynamics, patterns of influence of thermodynamic parameters on the direction of chemical reactions.

In this regard, chemical objects were presented in the form of multidimensional vectors, taking into account thermodynamic parameters, for the calculation of which used the methods of chemical thermodynamics. The generation of chemical reactions was carried out using the methods of mathematical statistics and combinatorics, and to determine the sequences of chemical reactions, the methods of graph theory.

It is proposed to write a chemical compound as the sum of basis vectors, which allowed to represent compounds and interactions between them in n-dimensional space and to determine possible chemical interactions with the help of the main principles of work with integer vector space. Three conditions for the possibility of chemical interaction by this method are clarified and the values of enthalpy and Gibbs energy of each reaction are introduced, which are determined by the values of the corresponding potentials for each of the compounds. For the convenience of the image and further calculations, the element-enthalpy and element-gibbs spaces were used separately.

An algorithm for this method is created and tested, features for different boundary conditions of its use are studied, its efficiency on real chemical reaction systems is checked. An algorithm for determining the possibilities of chemical reactions in multicomponent systems to determine their man-made load on the environment is proposed.

Key words: system, chemical reaction, vector, thermodynamic potentials, sequence.

REFERENCES

1. Mykhailova, E., Pancheva, G., & Reznichenko, A. (2019). Efektyvni mehanizmy povodzhennja z tverdymy pobutovymy vidhodamy v Ukraїni [Effective mechanisms of municipal solid waste management in Ukraine]. *Municipal economy of cities*, 5(151), 37–44. [in Ukrainian].
2. Reznichenko, A., & Butenko, A. (2017). Rozrobka ekologichno-bezpechnoi' j resursozberigajuchoi' tehnologij' pererobky vtroynnoi' syrovyny zi skladnym vmistom polivalentnyh metaliv [Development of environmentally friendly and resource saving technologies recycling composition containing polyvalent metal]. *Technogenic and ecological safety*, 1, 61–67. [in Ukrainian].
3. Reznichenko, A., & Butenko, A. (2017). Zabezpechennja zahystu atmosferного povitrya shljahom vdoskonalennja tehnologij' pererobky vol'framovnisnoi' vtroynnoi' syrovyny [Investigation of methods of protection of atmospheric air in processing of tunnel-containing secondary raw materials]. *Technogenic and ecological safety*, 2, 61–66. [in Ukrainian].
4. Iatsyshyn, A., Popov, O., Artemchuk, V., Kovach, V., & Kameneva, I. (2019). Analiz suchasnyh matematychnykh zasobiv ocinky vplyvu misc' zberigannja zoloshlakovyh vidhodiv teploenergetyky na ekologichnyj stan pryleglyh terytorij [Analysis of the modern mathematical means of assessment of the influence of storage sites of ash-slag waste heat power on the ecological state of the adjacent territories]. *Technogenic and ecological safety*, 6(2/2019), 24–29. [in Ukrainian].
5. Mykhailova, E., Protasenko, O., Moroz, M., & Reznichenko, A. (2021). Analiz stanu bezpeky ljudy, dovkillja ta umov praci pid chas povodzhennja z dobyvamy [Analysis of the safety condition of humans, the environment and working conditions during the fertilizers handling]. *Municipal economy of cities*, 4(164), 203–214. [in Ukrainian].
6. Loboychenko, V. M. (2020). Vyrishennja okremoi' zadachi z identyfikacii' nebezpeky v ramkah formuvannja inzhenerno-tehnichnogo metodu poperedzhennja nadzvychajnyh situacij [Solving a separate problem of hazard identification in the framework of the formation of engineering and technical method of emergency prevention]. *Dynamics of the development of world science. Abstracts of the 5th International scientific and practical conference (January 22-24, 2020)*, Perfect Publishing, Vancouver, Canada, 679–683. [in Ukrainian].
7. Vambol, S., Koloskov, V., & Derkach, Yu. (2017). Ocinjuvannja ekologichnogo stanu terytorij, pryleglyh do misc' zberigannja vidhodiv, na osnovi kryteriju ekologichnogo rezervu [Assessment of environmental condition of territories adjoined to wastes storage sites based on environmental reserve criterion]. *Technogenic and ecological safety*, 2, 67–72. [in Ukrainian].
8. Ukoh, S. N. B., Akinola, M. O., & Njoku, K. L. (2019). Comparative study on the growth response and remediation potential of panicum maximum and axonopus compressus in lead contaminated soil. *Technogenic and ecological safety*, 5(1/2019), 3–12.
9. Othmer, H. G. (2003). *Analysis of complex reaction networks*. Lecture notes. School of Mathematics, University of Minnesota, December 9, 2003.
10. Angeli, D. (2009). A tutorial on chemical reaction network dynamics. *European Journal of Control*, 15(3–4), 398–406.
11. Gabriel, C. I., & Onwuka, G. I. (2015). Balancing of chemical equations using matrix algebra. *Journal of Natural Sciences Research*, 3, 29–36.
12. Yarroch, W. L. (1985). Student understanding of chemical equation balancing, *Journal of Research in Science Teaching*, 22(5), 449–459.
13. Rao, C. N. R. (2007). *University general chemistry: An introduction to chemistry science*. Rajiv Beri for Macmillan India Ltd.
14. Risteski, I. B. (2009). A new singular matrix method for balancing chemical equations and their stability. *Journal of the Chinese Chemical Society*, 56, 65–79.
15. Kozub, P. A., Kozub, S. M., & Prysiaznyi, O. V. (2019). Vdoskonalennja stehiometrychnykh metodiv analizu skladnyh himichnyh system [Improvement of stoichiometric methods of analysis of complex chemical systems]. *Science and society. Proceedings of the 9th International conference*, Accent Graphics Communications & Publishing, Hamilton, Canada, 1095–1104. [in Ukrainian].
16. Chumak, V. L., & Ivanov, S. V. (2007). Fizychna himija [Physical chemistry]. Kyiv: Knyzhkove vydavnytstvo Nacional'nogo aviacijnogo universytetu, 646.