

жидкости человека // Бутлеровские сообщения. Казань. 2011. Т. 24, № 3. С. 133-137

References

1. Veresov A.G., Putlyaev V.I., Tretyakov Yu.D. Chemistry of inorganic materials based on calcium phosphate // *Rosssky khimichesky zhurnal*. – 2004. – Т. 48. – № 4. – С. 52 – 63.
2. Lemesheva S.A., Golovanova O.A., Turenkov S.V. Investigation of the features of human bone tissue // *Khimiya v interesakh ustoychivogo razvitiya*. 2009. № 3. S. 327-332.
3. GOST 17681 – 82. Muka zhivotnogo proiskhozhdeniya. Metody ispytany. – М.: Izd. standartov, 2000. – С. 3 – 4.
4. GOST 13496.4 – 93. Korma, kombikorma, kombikormovoye syro. Metody opredeleniya soderzhaniya azota i syrogo proteina. – М.: IPK Izd. Standartov.
5. Korago L.A. Introduction to biomineralogy. – Spb.: Nedra, 1992. – 280 s.
6. Mineralogical Encyclopedia / Pod red. Bulakha A.G., Krivovicha V.G. – Leningrad: Nedra, 1985. – 512 s.
7. Danilchenko S.N., Pokrovskiy V.A., Bogatyrov V.M., Sukhodub L.F., Sulkio-Cleff B. Carbonate location in bone tissue mineral by X-ray diffraction and temperature-programmed desorption mass spectrometry // *Crystal Research and Technology*. – 2005. – V. 40. – № 7. – P. 692 – 697.
8. Belskaya L.V. Dental and salivary stones – chemistry, genetic features: Dis. ... k.kh.n. – Omsk: OmGU im. F.M. Dostoyevskogo, 2009. – 158 s.
9. Golovanova O.A. Biomineralogy of urinary, biliary, dental and salivary stones from the human body: Dis. ... d.g.-m.n. – Omsk: OmGU im. F.M. Dostoyevskogo, 2009. – 333 s.
10. Golovanova O.A., Ponamareva Ye.Yu., Frank-Kamenetskaya O.V. The influence of the components of the biological matrix on the formation of hydroxyapatite // *Khimiya v interesakh ustoychivogo razvitiya*. – 2008. – Т. 16. – № 3. – С. 1-6.
11. Gabuda S.P., Gaydash A.A., Drebuschak V.A., Kozlova S.G. Physical properties and structure of water in the fibrous protein collagen type according to the scanning electron calorimetry // *Pisma v zhurnal eksperimentalnoy i teoreticheskoy fiziki*. – 2005. – Т. 82. – № 9. – С. 693 – 696.
12. Johnston S.S. Bone densitometry //SS. Johnston, L.J. Melton III // *Osteoporoz. Etiologiya, diagnostika, lecheniye*. – SPb., 2000. – С. 297 – 320.
13. Prokhonchukov A.A., Zhizhina N.A., Tigranyan R.A. Bone homeostasis in normal and extreme conditions. – М.: Nauka, 1984. – 200 s.
14. Königsberger Ye., Königsberger L. Biomineralization – Medical Aspects of Solubility / John Wiley & Sons Ltd. The Atrium, Southern Gate, Chichester, West Sussex PO19 8SQ, England, 2006. – 312 p.
15. Izmaylov R.R., Gerk S.A., Golovanova O.A., Panova T.V. Synthesis of hydroxyapatite by varying the parameters of synovial fluid // *Butlerovskie soobshcheniya*. – Kazan. № 3, 2011. – Т.24.- С. 133-137

УДК 548.5

Математическая модель образования малорастворимых соединений на основе уравнения Фоккера – Планка*

О.А. Голованова¹, С.А. Герк¹, А.Н. Куриганова², Р.Р. Измайлов¹

¹Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, пр. Мира 55а, Омск, Россия. E-mail: golovanoa2000@mail.ru

²НИИ «Нанотехнологии и наноматериалы», Южно-Российский государственный технический университет, ул. Просвещения 132, Новочеркасск, Ростовская обл., Россия

Статья поступила 19.07.2012, принята 2.11.2012

Кристаллизация является чрезвычайно сложным и многостадийным физико-химическим процессом, включающим в себя стадию нуклеации и рост образовавшихся зародышей. Установление кинетических закономерностей представляет собой актуальную задачу современных исследований. Одним из подходов определения кинетических параметров кристаллизации является математическое моделирование. В статье предлагается модель образования малорастворимых соединений в живых организмах, построенная на основе физической модели кристаллизации в почке. При построении математической модели были сделаны следующие допущения: рассматривается предельный режим гетерогенной кристаллизации при спонтанном образовании кристаллов и отсутствии вторичной нуклеации. Образующиеся кристаллы сохраняют свою форму, расклевывание, коагуляция и эволюция кристаллов во внимание не принимаются. Математическое описание процесса кристаллизации при сделанных допущениях основано на уравнении Фоккера – Планка. Для проведения вычислительного эксперимента была написана программа в среде Borland C++ Builder. Для численного решения системы уравнений исходными являются данные о составе кристаллизующегося вещества, молярных концентрациях ионов, пересыщении, минимальном и максимальном размере кристаллов. В результате получены зависимость количества образующихся кристаллов от времени и плотность распределения кристаллов по размерам в различные моменты времени. Для верификации полученных данных проведено экспериментальное изучение кристаллизации фосфатов и оксалатов кальция для проверки адекватности модели. Установлено, что уравнение Фоккера – Планка с принятыми допущениями может быть использовано для теоретического и экспериментального моделирования процессов фазообразования, в частности стадии нуклеации, в биологических жидкостях.

Ключевые слова: математическое моделирование, уравнение Фоккера – Планка, биоминерализация, мочевые камни, кинетика кристаллизации.

* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 12-03-98011-р_сибирь_а и № 10-05-00881-а) и в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 - 2013 годы (проект № 14.В37.27.2037).

Mathematical model of poorly soluble compounds formation based on Fokker – Plank equation

O.A. Golovanova¹, S.A. Gerk¹, A.N. Kuriganova², R.R. Izmaylov¹

¹Dostoevsky Omsk State University, 55a Mira av., Omsk, Russia. E-mail: golovanoa2000@mail.ru

²Research Institute «Nanotechnologies and Nanomaterials», South Russian State Technical University, 132 Prosveshcheniya str., Novocherkassk, Rostov region, Russia

The article received 19.07.2012, accepted 2.11.2012

Crystallization is an extremely complex and multi-step physical and chemical process including the stage of nucleation and growth of the generated nuclei. The ascertainment of kinetic laws is an actual problem of modern research. One of the approaches to determine the crystallization kinetic parameters is mathematical modeling. The article proposes the formation model of poorly soluble compounds in living organisms constructed on the basis of a physical model of crystallization in a kidney. While constructing the mathematical model, the following assumptions were made: the heterogeneous crystallization limiting behavior at crystals spontaneous formation and the absence of secondary nucleation are considered. The resulting crystals retain their shape, with cleavage, coagulation and evolution of crystals being ignored. The mathematical description of the crystallization process under these assumptions is based on the Fokker - Planck equation. To carry out a computing experiment, the computer simulation program was written in the Borland C++ Builder. For the numerical solution of the equations set, the source data are the ones on the crystallizing substance composition, molar ion concentration, supersaturation, minimum and maximum size of the crystals. As a result, we have obtained the dependence of the crystals formed on the time and density of crystal size distribution at different time points. To verify the data obtained, the experimental study of the phosphates and calcium oxalates crystallization to test the model adequacy has been carried out. It has been stated that the Fokker - Planck equation together with the assumptions made can be used for theoretical and experimental modeling of the phase formation processes in biological fluids, in particular the nucleation stage.

Keywords: mathematical modeling, Fokker – Plank equation, biomineralization, urinary stones, crystallization kinetics.

Введение. Изучение закономерностей кристаллизации является актуальным и перспективным направлением современных исследований. Интерес к данному явлению обусловлен тем, что, во-первых, образование твердой фазы из пересыщенных растворов является важным технологическим процессом, например, для получения и очистки неорганических соединений, требующим целенаправленного регулирования. Во-вторых, кристаллизация играет важную роль в процессах биоминерализации, вызывая образование физиогенных и патогенных минералов. Наиболее распространенным проявлением кристаллизации в живых организмах является образование мочевых камней.

Кристаллизация является чрезвычайно сложным физико-химическим процессом, состоящим из нескольких последовательных стадий. Первая стадия связана с возникновением микроскопических зародышей кристаллической фазы, способных к дальнейшему росту. На втором этапе происходит последующий рост образовавшихся частиц. Данные процессы описываются кинетическими параметрами нуклеации и роста, которые можно рассчитать, определяя какое-либо физическое свойство раствора, связанное с концентрацией кристаллизующегося вещества.

Одним из подходов к определению кинетических параметров кристаллизации является математическое моделирование.

Целью данного исследования является моделирование процессов нуклеации и роста физиогенных и патогенных кристаллов в биологических средах на основе уравнения Фоккера-Планка.

Методическая часть. Модель кристаллизации в почке. Рост минеральных фаз в таком «кристаллизаторе», как почка, определяется: высоким пересыщением в

нормальной моче, в 4-5 раз превышающем растворимость соединений, способных в ней образовываться [1]; удержание катионов и анионов в растворенном состоянии посредством их перевода из ионных форм в комплексные соединения лежит в основе механизма ингибирования роста минеральных фаз в мочевой системе (чаще всего ингибиторами камнеобразования выступают цитрат, пирофосфат, некоторые белки и магний [2]); дискретным характером поступления жидкости в почечную лоханку; краткостью периода наполнения и опорожнения почечной лоханки; максимально возможное выделение мочи почкой составляет 20 мл/мин, минимальное – 0,5 мл/мин; в среднем фаза наполнения лоханки мочой длится 10-15 сек, а опорожнения происходит за 2-3 сек; пауза между опорожнениями составляет от 20 до 120 сек [3 – 5].

На этом основании наиболее вероятной представляется гетерогенная нуклеация минеральных индивидов в почках, поскольку индукционный период, не превышающий двух минут, мал для осуществления самопроизвольного (гомогенного) зарождения микрокристаллитов даже в высококонцентрированных средах. Фактором, принципиально важным для формирования почечного камня, следует признать возможность удержания «затравки» и прикрепления ее к мягким тканям. Очевидно, что удаление микрокристаллов или органических ассоциатов из мочевого тракта с током жидкости делает разрастание конкремента невозможным. Теория «прикрепленной частицы», предложенная автором [6] на основании учета скорости движения мочи, степени ее пересыщения и анатомических особенностей почки, констатирует крайне малую вероятность формирования в почке свободно перемещающихся камней, исходно не имевших мест прикрепления.

На основании вышеизложенного можно предположить, что кристаллизация возникает в дистальных отделах нефрона, имеющих ограниченный объем V , где в момент времени $t=0$ содержится однородно пересыщенный раствор оксалата кальция. Если концентрация C превышает растворимость частиц оксалата кальция, то происходит зарождение и рост частиц твердой дисперсной фазы. При протекании кристаллизации часто наблюдается образование нескольких кристаллических и аморфной модификаций частиц дисперсной твердой фазы. Пренебрегая теплом химической реакции, примем, что в нефроне поддерживается постоянная температура раствора. Считаем, что перемешивание не приводит к раскалыванию частиц.

На первоначальном этапе была разработана математическая модель, позволяющая при сопоставлении с экспериментальными данными оценить основные параметры и факторы процесса кристаллизации патогенных органоминеральных агрегатов.

Математическая модель кристаллизации мало-растворимых соединений. Математическое моделирование кристаллизации солей из пересыщенных растворов осуществляется успешно, если оно основано на достаточно полной модели кристаллизации. Такая модель сложна, поэтому прибегают к исследованию частных случаев и предельных режимов, каждый из которых описывает связь с одним из элементарных процессов, а все они дают полное представление о процессе [7 – 13].

Применительно к массовой кристаллизации из растворов возможность моделирования возникает при определении условий пересыщения и образования кристаллических модификаций различных солей [14, 12].

Для описания процессов, происходящих по нуклеационному механизму, часто используют феноменологическую теорию Джонсона и Мела [15], Аврами и Колмогорова [16]. Аналитические решения в рамках этой теории получены для простейших случаев, таких, как нуклеация с постоянной или непрерывно изменяющейся скоростью в свободном пространстве. Для более сложных условий, а также в присутствии пространственных ограничений для роста, в последнее время исследователи используют метод Монте-Карло и клеточного автомата [17].

Как было отмечено выше, при кристаллизации мало-растворимых соединений из сильно пересыщенных растворов выделяются микроскопические кристаллы различной формы, нормально распределенные по размеру. Распределение кристаллов по размеру согласуется с представлением об одновременном появлении центров кристаллизации и их флуктуативном росте в соответствии с уравнением Фоккера-Планка [18]. При выводе уравнения Фоккера-Планка в теории стохастических процессов предполагается существование вероятностей перехода из одного состояния динамической системы в другое [19]. Согласно работе [15], отличительной особенностью биообъектов является их способность удерживать свои параметры в определенных пределах, не допуская неограниченного роста дисперсии, вызванного действием термодинамических флуктуаций и (или) внешней среды. В терминах уравнения Фоккера-Планка это свойство интерпретируется как

нерасплывание плотности вероятности с течением времени, его локализованности в некоторой ограниченной области неограниченного фазового пространства.

В натуральных экспериментах наблюдаются сложные механизмы эволюции дисперсной фазы, такие, как образование метастабильных промежуточных твердых фаз и медленная эволюция частиц твердой фазы в конце процесса. Проведенные исследования нелинейных моделей позволяют объяснить механизм этих превращений и определить кинетику процессов. В исследовании основное внимание уделяется рассмотрению нелинейности процессов кристаллизации при наличии флуктуаций скорости роста частиц для закрытой системы.

При построении математической модели были сделаны следующие допущения: рассматривается предельный режим гетерогенной кристаллизации при спонтанном образовании кристаллов и отсутствии вторичной нуклеации; образующиеся кристаллы сохраняют свою форму; раскалывание, коагуляция и эволюция кристаллов во внимание не принимаются.

Математическое описание процесса кристаллизации при сделанных допущениях основано на уравнении Фоккера-Планка [18]. Для описания процесса кристаллизации использовалась математическая модель, основанная на изменении функции ϕ распределения кристаллов по размеру L во времени t . Все макропараметры, такие, как температура и концентрация, считаются постоянными во всем объеме раствора. Эволюция функции распределения описывается уравнением Фоккера-Планка [18]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\partial(\phi G)}{\partial L} + \frac{\partial}{\partial L} \left(p \frac{\partial(\phi G)}{\partial L} \right). \quad (1)$$

Причем $L \geq L_0$, где L_0 является минимально возможным размером кристалла. Функция G является линейной скоростью роста грани кристалла, параллельно самой себе, p – коэффициент флуктуации скорости роста.

Определим пересыщение раствора γ следующим образом:

$$\gamma = \frac{C}{C_s}, \quad (2)$$

где $C(t)$ – концентрация, а C_s – концентрация насыщенного раствора. Тогда

$$G = \beta(\gamma^n - 1), \quad (3)$$

где β – кинетический коэффициент скорости роста; n – порядок реакции. Уравнение (1) должно быть дополнено краевыми условиями:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \phi(L, t) = 0, \quad (4)$$

которое означает отсутствие бесконечно больших кристаллов. На левом крае задается условие смешанного типа:

$$\phi(L_0)G - p \frac{\partial(\phi(L_0)G)}{\partial L} = k(\gamma^m - 1), \quad (5)$$

$$M_0 = C(t) \cdot V + \int_{L_0}^{L_1} \phi(L, t) L^3 dL. \quad (6)$$

где k – кинетический коэффициент; m – порядок реакции нуклеации.

Систему уравнений необходимо дополнить начальным условием и уравнением баланса масс. Рассматривался процесс спонтанной нуклеации (т. е. в начальный момент времени в растворе отсутствуют кристаллы), что выражается формулой $\phi(L, 0) = 0$. Уравнение баланса массы описывает сохранение вещества:

Ограничимся рассмотрением пространственно-одномерной нелинейной задачи кристаллизации в закрытой системе. Изучаются нелинейные свойства уравнения Фоккера-Планка при заданных соотношениях баланса массы. Это приводит к рассмотрению задачи, в которой нелинейность определяется зависимостью граничных условий и коэффициентов уравнения от предыстории развития процесса кристаллизации. Такие нелинейные явления могут являться основой самоорганизации дисперсной твердой фазы на завершающей стадии ее формирования.

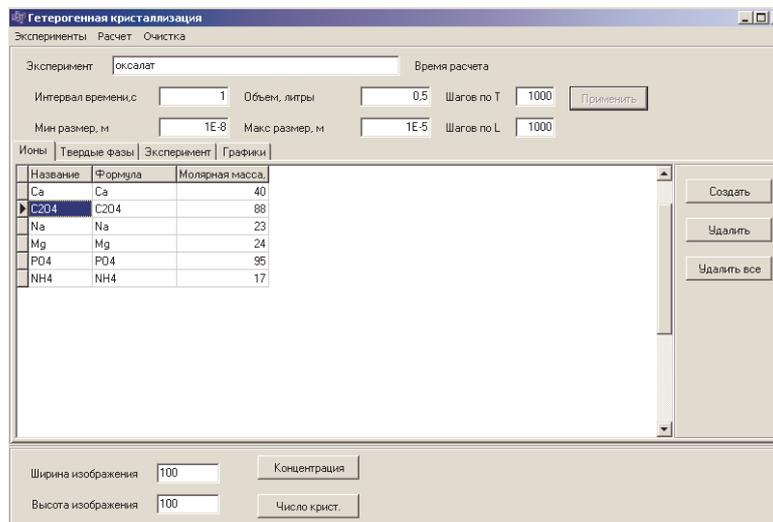


Рис. 1. Диалоговое окно программы «Гетерогенная кристаллизация». Исходные данные.

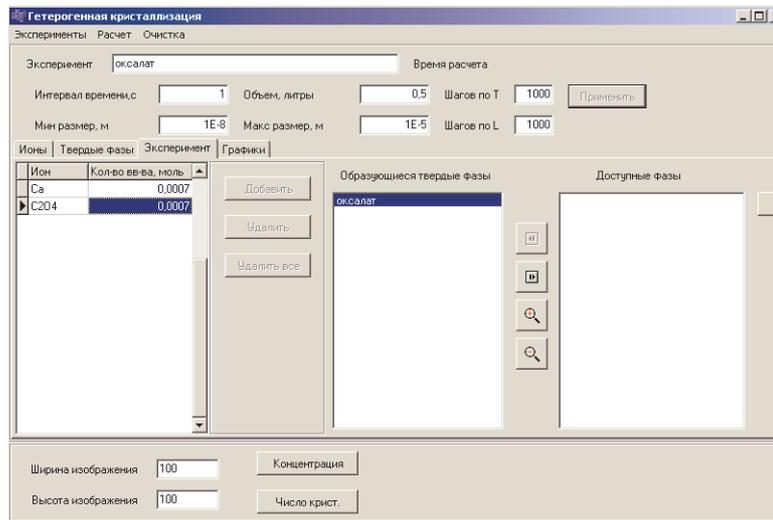


Рис. 2. Диалоговое окно программы «Гетерогенная кристаллизация». Данные о пересыщении.

Экспериментальная часть. Для проведения вычислительного эксперимента была написана программа в среде *Borland C++ Builder*. Для численного решения системы уравнений использовалась равномерная сетка с шагом h по размеру и t по времени. Перенос решения с j -го слоя на $j+1$ осуществляется чисто-неявной разностной схемой, после чего получается функция G , ха-

рактеризующая распределение кристаллов по размерам. При построении модели исходными являются данные о составе кристаллизующегося вещества, молярных концентрациях ионов, пересыщении, минимальном и максимальном размере кристаллов. Плотность распределения кристаллов по размерам в различные моменты времени приведена на рис. 3.



Рис. 3. Распределение кристаллов оксалата кальция по размеру.

Результаты и их обсуждение. При использовании в расчете данных по процессу кристаллизации оксалата кальция в соответствии с данной моделью были получены следующие результаты.

1. Зависимость количества образующихся кристаллов оксалата кальция от времени в процессе кристаллизации (рис. 4).

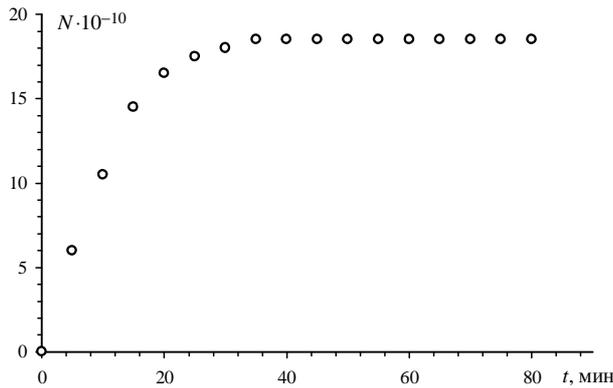


Рис. 4. Изменение количества кристаллов оксалата кальция в процессе кристаллизации.

Видно, что основная масса кристаллов образуется в течение 30-40 минут от момента начала кристаллизации. За этот же промежуток времени наблюдается спад концентрации ионов кальция и оксалата от исходного пересыщения до равновесной концентрации (рис. 5).

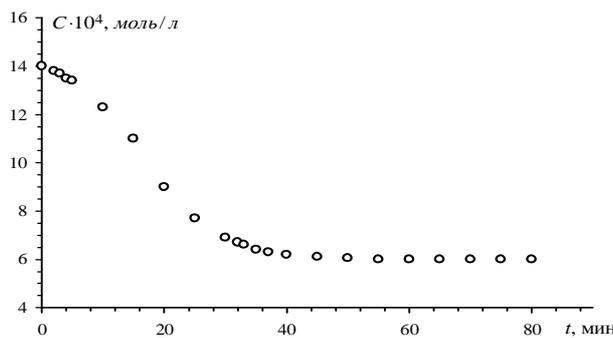


Рис. 5. Изменение концентрации ионов Ca^{2+} и $C_2O_4^{2-}$ во времени.

2. При дальнейшем протекании кристаллизации в условиях возобновления пересыщения наблюдается плавное снятие пересыщения при постоянном числе зародышей, что объясняется ростом уже существующих кристаллов. При этом происходит увеличение среднего размера образовавшихся кристаллов (рис. 6).

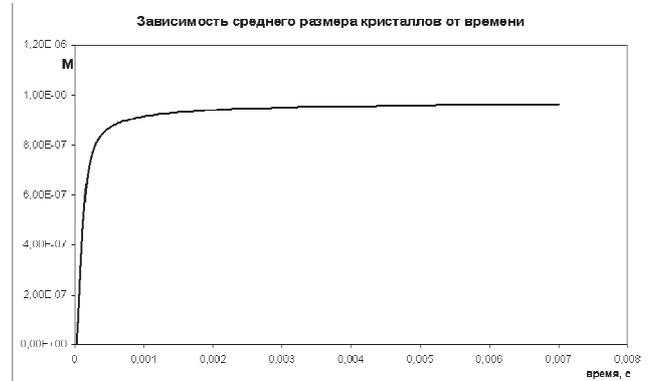


Рис. 6. Зависимость среднего размера оксалата кальция во времени.

После проведения расчета в объеме раствора восстанавливалась исходная концентрация. Кристаллы, размер которых был меньше порогового значения, убивались из системы, и вычислительный эксперимент повторялся, но теперь уже с полученным на предыдущей итерации начальным условием. Данный прием соответствует опорожнению и наполнению почки. Было установлено, что увеличение среднего размера кристалла пропорционально квадратному корню от числа итераций (повторений) эксперимента (рис. 7).

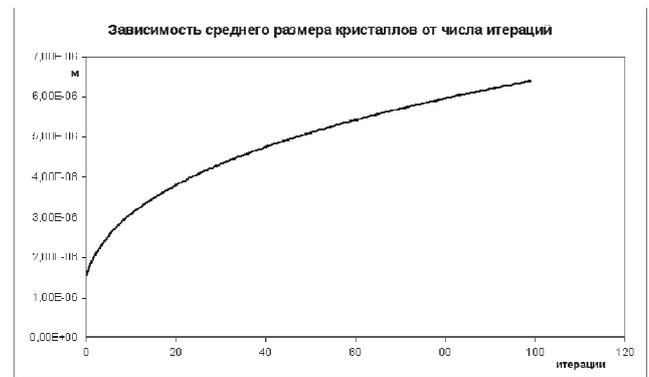


Рис. 7. Зависимость среднего размера оксалата кальция от числа итераций.

Далее было проведено экспериментальное изучение кристаллизации фосфатов и оксалатов кальция. Кривые, полученные в результате математического моделирования, отличаются от экспериментальных тем, что для них характерен полный спад пересыщения, а в эксперименте наблюдаются высокие остаточные пересыщения (рис. 8-10). Причем с увеличением пересыщения различие становится более явным. Данное обстоятельство можно объяснить тем, что разработанная математическая модель не учитывает процессы, связанные с отравлением роста кристаллов примесями, кроме того, при больших пересыщениях в значительной степени проявляются процессы агрегации частиц, что также не учитывалось при разработке математической модели.

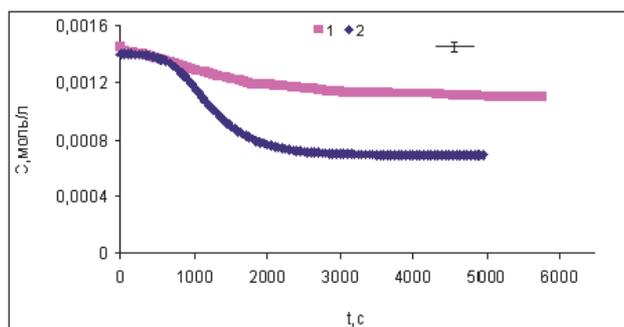


Рис. 8. Изменение концентрации одноводного оксалата кальция во времени ($\gamma = 5$; 1 – эксперимент, 2 – компьютерное моделирование).

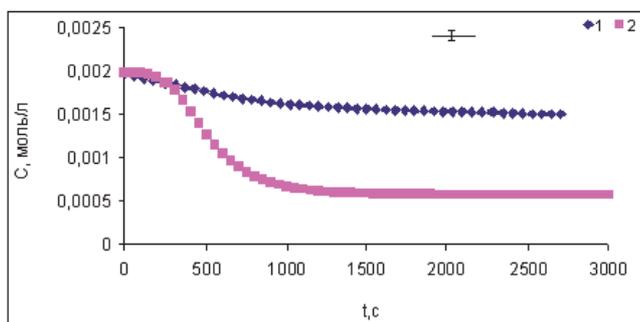


Рис. 9. Изменение концентрации одноводного оксалата кальция во времени ($\gamma = 7$; 1 – эксперимент, 2 – компьютерное моделирование).

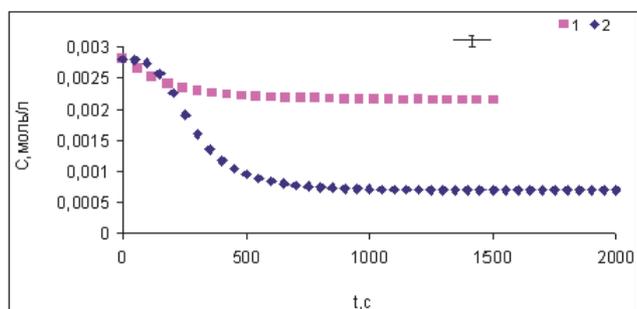


Рис. 10. Изменение концентрации одноводного оксалата кальция во времени ($\gamma = 10$; 1 – эксперимент, 2 – компьютерное моделирование).

При этом важно отметить, что ход экспериментальных и расчетных кривых одинаков. Основные закономерности процесса кристаллизации одноводного оксалата кальция, полученные в ходе эксперимента, и данные математической модели (размер частиц, распределение кристаллов по размерам, общее время кристаллизации и др.) совпадают. Следовательно, разработанную математическую модель можно использовать для оценки процессов массовой кристаллизации, а именно стадии нуклеации.

Выводы. Таким образом, рассмотрение процесса кристаллизации показало, что данная модель, основанная на уравнении Фоккера-Планка, описывает процесс нуклеации; изучение же процесса роста кристаллов с ее помощью затруднительно, поскольку основная часть растворенного вещества поглощается при нуклеации, и

рост кристаллов практически не наблюдается. Экспериментальное изучение кристаллизации фосфатов и оксалатов кальция показало, что разработанная модель адекватна полученным экспериментальным данным по распределению размеров образующихся кристаллов во времени и по достижении их среднего размера при заданных условиях.

Литература

1. Москалев Ю.И. Минеральный обмен. М.: Медицина, 1985. 288 с.
2. Билобров В.М., Богдан Н.М. Особенности нормальных и патологических биоминералов // Минералогия и жизнь: материалы к межгос. минерал. семинару. Сыктывкар, 1993. С. 52–54.
3. Пытель Ю.А., Борисов В.В., Симонов В.А. Физиология человека. Мочевые пути. М., 1986. 238 с.
4. Пытель Ю.А., Золотарев А.Г. Неотложная урология. М.: Медицина, 1985. 320 с.
5. Тиктинский О.Л., Уитверис С.В. Синдром Бурнетта и камнеобразование в почках // Урология и нефрология. 1987. № 3. С. 7–9.
6. Folk R.L. Bacteria and carbonate precipitation in sulfurous hot springs // Vitebro Lazio Italy Jn 13 th International Seminantological Congress. 1990. P. 172.
7. Айзин С.М., Жеребович А.С., Фомин В.А. Метод исследования и моделирования процессов растворения и роста кристаллов // ТОХТ. 1982. Т. 16, № 5. С. 619–630.
8. Бицадзе А.В. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1976. 184 с.
9. Мелихов И.В. Моделирование вариабельности кристаллизации // Хим. пром-сть. 1992. № 8. С. 21–25.
10. Мелихов И.В., Белоусова М.Я., Руднев Н. Флуктуации скорости роста микрокристаллов // Кристаллография. 1974. Т. 19. Вып. 6. С. 1263–1266.
11. Мелихов И.В., Берлинер Л.Б. Влияние флуктуаций на кинетику кристаллизации // Докл. Акад. наук СССР. 1979. Т. 245, № 5. С. 1159–1164.
12. Мелихов И.В., Берлинер Л.Б. К вопросу о прогнозировании работы кристаллизатора // ТОХТ. 1978. Т. 12, № 6. С. 826–830.
13. Мелихов И.В., Берлинер Л.Б. Кристаллизация солей из пересыщенных растворов. Кинетический режим // ТОХТ. 1979. Т. 13, № 4. С. 530–537.
14. Дуров В.А., Бурсулая Б.Д., Новиков А.И. Математическое моделирование химических равновесий в прототипах биологических сред // ЖФХ. 1993. Т. 67, № 12. С. 2339–2344.
15. Ноаров А.И. Проблемы локализации решений уравнения Фоккера – Планка и устойчивость биологических систем // Вычислительная математика и математическая физика. 1997. Т. 137, № 5. С. 587–598.
16. Колмогоров А.Н. Теория вероятности и математическая статистика. М.: Наука, 1986. 536 с.
17. Wolfram S. Cellular Automata and Complex. Collected Papers, 1994. 596 p.
18. Горбачевский А.Я. Численное исследование нелинейных моделей кристаллизации // Математическое моделирование. 1999. Т. 11, № 8. С. 23–31.
19. Зубарев Д.Н. Обобщенное уравнение Фоккера – Планка в теории необратимых процессов // Кинетические уравнения: сб. ст. М.: Наука, 1987. С. 132–141.

References

1. Moskalev Yu.I. Mineral metabolism. M.: Meditsina, 1985. 288 s.
2. Bilobrov V.M., Bogdan N.M. Features of normal and pathological biominerals // Mineralogiya i zhizn: Materialy k mezghosudarstvennomu mineralogicheskomu seminaru. Syktyvkar, 1993. S. 52–54.
3. Pytel Yu.A., Borisov V.V., Simonov V.A. Human physiology. Urinary tract. M., 1986. 238 s.
4. Pytel Yu.A., Zolotarev A.G. Emergency urology. M.: Meditsina, 1985. 320 s.
5. Tikitsky O.L., Uitveris S.V. Burnett's syndrome and kidney stone formation // Urologiya i nefrologiya. 1987. № 3. S. 7–9.
6. Folk R.L. Bacteria and carbonate precipitation in sulfurous hot springs // Vitebro Lazio Italy Jn 13 th International Seminantological Congress. 1990. P. 172.
7. Ayzin S.M., Zherebovich A.S., Fomin V.A. The method of investi

gation and modeling of the processes of dissolution and crystal growth // ТОКХТ. 1982. Т. 16. № 5. С. 619–630.

8. Bitsadze A.V. Equations of mathematical physics. М.: Nauka, 1976. 184 s.

9. Melikhov I.V. Modeling the variability of crystallization // Khim. prom. 1992. № 8. С. 21–25.

10. Melikhov I.V., Belousova M.Ya., Rudnev N. Fluctuation rate of growth of microcrystals // Kristallografiya. 1974. Т. 19. Вып. 6. С. 1263–1266.

11. Melikhov I.V., Berliner L.B. The effect of fluctuations on the kinetics of crystallization // Dokl. AN SSSR. 1979. Т. 245. № 5. С. 1159–1164.

12. Melikhov I.V., Berliner L.B. To the question of prediction of the crystallizer operation // ТОКХТ. 1978. Т. 12. № 6. С. 826–830.

13. Melikhov I.V., Berliner L.B. Salt crystallization from supersaturated solutions. Kinetic regime // ТОКХТ. 1979. Т. 13. № 4. С. 530–537.

14. Durov V.A., Bursulaya B.D., Novikov A.I. Mathematical modeling of chemical equilibria in the prototypes of biological matrix // ZhFKh. 1993. Т. 67. № 12. С. 2339–2344.

15. Noarov A.I. The problem of localization of solutions of Fokker – Plank and stability of biological systems // Vychislitel'naya matematika i matematicheskaya fizika. 1997. Т. 137. № 5. С. 587–598.

16. Kolmogorov A.N. Probability theory and mathematical statistics. М.: Nauka, 1986, 536 s.

17. S. Wolfram. Cellular Automata and Complex. Collected Papers, 1994. 596 s.

18. Gorbachevsky A.Ya. Numerical study of nonlinear models of crystallization // Matematicheskoye modelirovaniye. 1999. Т. 11. № 8. С. 23–31.

19. Zubarev D.N. Generalized Fokker – Plank equation in irreversible processes theory // Kineticheskiye uravneniya. М.: Nauka, 1987. С. 132–141.

УДК 69.036

Гармонизация оболочки здания по критериям энергоэффективности для условий г. Братска

Т.А. Потапова¹, Е.В. Нестер¹

¹Братский государственный университет, ул. Макаренко 40, Братск, Россия. E-mail: Elena_nester@mail.ru

Статья поступила 14.08.2012, принята 17.11.2012

Рассматриваются вопросы влияния объемно-планировочных решений здания на показатели его энергетической эффективности. Анализируются расчетные данные оптимизации оболочки здания для условий города Братска. На энергоэкономичность здания могут влиять как абсолютные размеры (длина, высота, ширина, этажность), так и соотношения отдельных параметров (удельная площадь наружных ограждений, удельный периметр наружных стен, соотношение площади оконных проемов к площади наружных стен). Определена оптимальная форма здания, рассчитано соотношение ширины корпуса к его длине по величине удельного теплопотребления. Этот показатель определяется как отношение тепловых потерь здания к полезной площади его ограждающих конструкций. Удельный расход энергии на отопление q изменяется в зависимости от этажности и ширины зданий. Максимальные значения этого показателя наблюдаются в одноэтажных зданиях, с увеличением этажей q снижается, причем, наиболее значительно – в интервале с первого по третий этаж. Доказано, что уменьшение энергопотребления достигается также в результате проектирования и строительства многоэтажных зданий, занимающих большую площадь в плане. С увеличением ширины корпуса жилых зданий, приводящим к сокращению на 20-30 % удельной площади ограждающих конструкций на 1 м² жилья, теплопотери снижаются на 15-20 %.

Ключевые слова: энергоэффективность здания, энергопотребление зданий, инфильтрация воздуха, теплопотери.

Building envelope harmonisation according to the energy efficiency criteria in Bratsk

T.A. Potapova¹, E.V. Nester¹

¹Bratsk State University, 40, Makarenko str., Bratsk, Russia. E-mail: Elena_nester@mail.ru

The article received 14.08.2012, accepted 17.11.2012

The article examines the impact of space planning decision of a building on the characteristics of its energy efficiency. The design data for the building envelope optimization applied in the conditions of Bratsk are analysed. The building energy efficiency can be influenced by both the absolute size (length, width, height, number of storeys) and the certain parameters ratio (outer shell specific area, exterior walls specific perimeter, the ratio of the window openings area to the exterior walls). The optimum shape of the building has been determined, the ratio of housing length to its length as to the specific heat consumption has been calculated. This indicator is determined as the ratio of heat loss to the outer shell rentable space. The specific heating energy consumption q varies with the width and number of storeys. Maximum values of this index are observed in one-storey buildings; when the number of storeys increases q goes down and most considerably in the interval from the first to the third floor. It has been proved that the reduction in energy consumption is achieved as a result of design and construction of multi-storey buildings occupying a large area on the plan. With the increase in the residential buildings housing length leading to the reduction of the outer shell specific area by 20 - 30% per 1 m², heat losses are reduced by 15 - 20%.

Keywords: energy efficiency of buildings, energy consumption, air infiltration, heat loss.