

ТАРАНЕНКО АРСЕНІЙ

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

<https://orcid.org/0009-0004-9043-3252>e-mail: arsengov1886@gmail.com**ФЕДІН ВАДИМ**

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

<https://orcid.org/0009-0001-4016-2042>e-mail: vadimfedin00@gmail.com**ТРУС ІННА**

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

<https://orcid.org/0000-0001-6368-6933>e-mail: inna.trus.m@gmail.com

ДОСЛІДЖЕННЯ МОЖЛИВОСТІ ЗАСТОСУВАННЯ МОДЕЛІ ЛІНІЙНОЇ РЕГРЕСІЇ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ СТАБІЛІЗАЦІЙНОЇ ОБРОБКИ ВОДИ ПРИ ВИКОРИСТАННІ ОЕДФК ТА НТМФК

В роботі наведено результати досліджень стабілізаційної обробки водопровідної та природної води при застосуванні ОЕДФК та НТМФК. Встановлено, що дані реагенти забезпечують стабілізаційний та протинакипний ефекти на рівні 81-96 %. Було проведено моделювання за допомогою методу ЛР, отримані прогнозовані результати близькі до експериментальних, в більшості випадків знаходяться в межах 3%.

Ключові слова: антискаланти, стабілізація води, моделювання, накипоутворення, лінійна регресія

TARANENKO ARSENI**FEDIN VADYM****TRUS INNA**

Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute

EXPLORING APPLICABILITY OF LINEAR REGRESSION MODEL FOR PREDICTION OF THE EFFICIENCY OF WATER STABILIZATION TREATMENT USING HEDP AND ATMP

Stabilization water treatment is a crucial stage in water preparation for industrial and municipal systems. Its primary goal is to prevent scale formation, which negatively affects the efficiency of water supply and heating systems. This paper addresses the problem of improving the effectiveness of stabilization water treatment and proposes modern approaches to solving it. The study presents the results of stabilization treatment of tap and natural water with a hardness of 5.9–9.9 mg-eq/dm³ using HEDP and ATMP reagents. The impact of various doses of these reagents (0.50–2.00 mg/dm³) on the residual water hardness was investigated, and their stabilization and anti-scaling properties were evaluated. The findings demonstrated that using HEDP and ATMP significantly reduces sediment formation, contributing to the efficient operation of water treatment systems. To predict the efficiency of antiscalants, the linear regression method was applied, enabling the evaluation of their performance based on concentration. Thus, the proposed approaches help optimize stabilization water treatment technologies and reduce water purification costs. The study is primarily related to the use of the linear regression method for modeling the effectiveness of stabilization water treatment. The application of the least squares method provides an accurate determination of the parameters of the dependence between the dose of antiscalant and the stabilization effect. The Python programming language with pandas, numpy, scikit-learn libraries was used to automate the calculations. The modeling process includes data loading, sample separation, model training and accuracy assessment. The LR method is an effective model for statistical analysis and prediction of new values in the field of water stabilization treatment. It was established that these reagents provide stabilization and antiscaling effects at the level of 81–96%. Modeling was carried out using the LR method, the predicted results obtained are close to the experimental ones, in most cases within 3%. The LR method allows you to obtain linear dependencies for antiscaling and stabilization effects, which confirms its prospects for optimizing water stabilization treatment.

Keywords: antiscalants, water stabilization, modeling, scale formation, linear regression

Постановка проблеми

Накипоутворення це суттєва проблема для фактично будь яких підприємств, які працюють з великими обсягами води: теплоелектростанції, целюлозо-паперова промисловість, нафтогазова промисловість та міське водопостачання. Для запобігання накипоутворенню застосовують стабілізаційну обробку води. Для стабілізації води найчастіше використовують антискаланти, які запобігають утворення накипу на обладнанні, що продовжує його термін служби. Така обробка забезпечує нормальне протікання робочого процесу. Використання антискалантів зумовлює необхідність вирішення проблеми визначення їх оптимальної дози, яку доцільно застосовувати для стабілізації води. При виборі антискаланта варто віддавати перевагу недорогим реагентам, які забезпечують високий стабілізаційний ефект при мінімальних дозах. Використання антискалантів широко поширене та є ефективним методом контролю утворення накипу.

Аналіз останніх джерел

В якості основної стратегії захисту від утворення накипу на обладнанні зазвичай застосовується стабілізатори накипоутворення через його їх простоту використання, ефективність та мінімальну вартість. Їхня основна функція полягає у підтримці розчинності іонів у воді, що запобігає відкладенням на поверхнях обладнання. На вибір антискаланта впливають різні фактори: хімічний склад води, температура, pH, або ж тип обладнання яке використовується. Наприклад, якщо у воді високий рівень

кальцію кращим рішенням буде застосувати поліакрилати, а в разі якщо високий рівень сульфатів то поліфосфонати [1, 2].

Зараз доступна велика кількість антискалантів з різними хімічними властивостями та ціною, умовно їх можна поділити на неорганічні антискаланти (фосфати, фосфонати, силікати), полімерні (поліакрилати, поліфосфонати) та "зелені" (різноманітні екстракти з частин рослин, таких як листя інжиру чи шкіра гранату) [3]. На сьогодні маємо тенденцію розвитку саме в частині пошуку нових зелених антискалантів, що пов'язано із загальною екологізацією процесів у світі щоб зменшити антропогенний вплив на навколишнє середовище. Не зважаючи на таку увагу до екологічно безпечних антискалантів все ж таки найбільш вживаними залишаються фосфатні або поліакрилатні антискаланти через свою ефективність та порівняно не високу вартість [3, 4].

Метою роботи є: дослідження ефективності стабілізаційної обробки водопровідної та природної води в залежності від дози ОЕДФК та НТМФК, встановлення можливості застосування методу Linear Regresion в Python для прогнозування даного процесу.

Виклад основного матеріалу

Як середовище застосовували водопровідну та природну воду з жорсткістю 5,9 і 9,9 мг-екв/дм³ відповідно. Серед фосфонатів, як антискаланти, найбільше визнання отримали нітрилотриметилфосфонова кислота (НТМФК) та оксиетилendisфосфонова кислота (ОЕДФК) з їх похідними [5]. Тому як антискаланти, використовували дані реагенти. Ці сполуки мають високу ефективність в запобіганні утворенню накипу та збереженні стабільності систем, де використовуються.

Проби по 0,1 дм³ витримували при температурі 95°C протягом 4-5 годин. Дози антискалantu становили 0,50 – 2,00 мг/дм³. Проби охолоджували та фільтрували і вимірювали залишкову жорсткість води. Жорсткість води визначали методом трилонометрії з індикатором еріохромом чорним Т.

Для розрахунку стабілізаційного ефекту (СЕ, %) використовували формулу:

$$СЕ = \left(1 - \frac{Ж - Ж_i}{Ж - Ж_{зал.}} \right) \cdot 100\%, \quad (1)$$

Для розрахунку протинакипного ефекту (ПЕ, %) використовували формулу:

$$ПЕ = \frac{Ж}{Ж_{зал.}} \cdot 100\%, \quad (2)$$

де СЕ – стабілізаційний ефект, %; ПЕ – протинакипний ефект, %; Ж початкова жорсткість води, мг-екв/дм³; Ж_{зал.} – залишкова жорсткість в холостій пробі, мг-екв/дм³; Ж_і – залишкова жорсткість в пробі зі стабілізатором, мг-екв/дм³

Для регресійного аналізу традиційно застосовується метод найменших квадратів (МНК), який є одним з найбільш використовуваних і перевірених підходів у статистиці. Цей метод забезпечує точне визначення параметрів моделі, зводячи до мінімуму суму квадратів відхилень між фактичними і передбаченими значеннями. Однак, при зростанні обсягу даних або кількості змінних ручне використання МНК може ускладнитися.

У сучасних умовах для полегшення таких обчислень доцільно використовувати програмне забезпечення, яке автоматизує процес побудови моделей та отримання результатів. Вибір інструментів залежить не лише від їх функціональності, а й від вартості. Комерційні програми, такі як SPSS або SAS, хоча й забезпечують потужні інструменти для статистичного аналізу, часто мають високу вартість, що робить їх менш доступними для тих, хто працює в навчальних закладах або займається дослідженнями.

Тому все більше популярності набирають безкоштовні інструменти, що базуються на високорівневих мовах програмування. Зокрема, Python та R є одними з найпоширеніших засобів у "Науці про дані" завдяки їх гнучкості, потужним бібліотекам для аналізу даних (наприклад, NumPy, pandas, scikit-learn для Python) та активній підтримці спільноти.

Вибір Python як платформи для моделювання надає можливість не лише застосовувати методи лінійної регресії, а й інтегрувати результати аналізу з іншими інструментами для візуалізації, складання звітів чи автоматизації процесів. Це робить Python оптимальним вибором для моделювання результатів експерименту по стабілізації води.

Для оцінки впливу дози реагентів на ефективність стабілізаційної обробки води та моделювання нових значень використовувався метод Linear Regression (LR). Задачею лінійної регресії при стабілізаційній обробці води в даному процесі є знаходження лінійної залежності між початковими характеристиками процесу та кінцевими значеннями. Іншими словами, лінійна регресія займається пошуком прямої, яка пройде найближче до всіх отриманих даних в даному процесі. Проста лінійна регресія має одну характеристику, тому виглядає наступним чином:

$$y = w_0 + w_1 \cdot x, \quad (3)$$

Для реалізації даного процесу в Python необхідно імпортувати бібліотеки: pandas для роботи з даними, numpy для числових операцій, train_test_split для розділення даних на навчальну та тестову вибірки, LinearRegression з бібліотеки scikit-learn для побудови моделі, та mean_squared_error для оцінки точності моделі. Після цього в pandas треба завантажити дані з якими відбувається робота, вибираємо стовпці з даними для побудови моделі. Переконаємося, що незалежні змінні (X) та залежна змінна (Y) правильно визначені. (X) у даному випадку виступає дозою антискалantu, а (Y) стабілізаційним або протинакипним ефектом. Дані ділимо на навчальну та тестову вибірки, щоб потім

перевірити модель на нових, невідомих даних. Використовуємо метод `fit` для навчання моделі лінійної регресії. Передбачаємо значення для тестових даних. Робимо оцінку точності. Приклад виконання кроків:

```
# Імпорт бібліотек
import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.linear_model import LinearRegression
from sklearn.metrics import mean_squared_error, r2_score

# Крок 1: Завантаження даних
# Приклад: завантажуюмо CSV файл
data = pd.read_csv('your_data.csv')

# Крок 2: Підготовка даних
# Припустимо, що у нас є дві колонки: 'X' (незалежна змінна) і 'Y' (залежна змінна)
X = data[['X']] # Незалежні змінні (наприклад, "X")
y = data['Y']   # Залежна змінна (наприклад, "Y")

# Крок 3: Розділення даних на навчальну та тестову вибірки
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=42)
# Крок 4: Створення та навчання моделі лінійної регресії
model = LinearRegression()
model.fit(X_train, y_train)

# Крок 5: Передбачення результатів на тестових даних
y_pred = model.predict(X_test)

# Крок 6: Оцінка точності моделі
# Визначимо середню квадратичну помилку (MSE) і коефіцієнт детермінації (R^2)
mse = mean_squared_error(y_test, y_pred)
r2 = r2_score(y_test, y_pred)

print(f'Mean Squared Error: {mse}')
print(f'R-squared: {r2}')

# Крок 7: Виведення коефіцієнтів моделі
print(f'Intercept (b0): {model.intercept_}')
print(f'Coefficient (b1): {model.coef_[0]}')
```

Результати по ефективності стабілізаційної обробки води при застосуванні антискалантів ОЕДФК та НТМФК представлені на рис. 1 - 4.

На основі отриманих експериментальних даних встановлено, що збільшення дози антискалантів, як ОЕДФК, так і НТМФК, в межах від 0,3 до 2,0 мг/дм³ дозволяє підвищити ефективність стабілізаційної обробки води. При застосуванні ОЕДФК для водопровідної води при дозі 0,5 мг/дм³ стабілізаційний ефект становить 26,3%, що свідчить про значне зниження утворення накипу та корозійної активності води. Збільшення дози до 1,0 мг/дм³ забезпечує СЕ на рівні 52,6%. Максимальний стабілізаційний ефект, рівний 78,9%, досягається при дозі 2,0 мг/дм³, що демонструє високу ефективність запропонованого методу для стабілізаційної обробки водопровідної чи природної води, протинакипний ефект при цьому становить 93,2 % (рис. 1).

На рисунках 1 та 3 наведено графіки що демонструють залежність стабілізаційного ефекту від дози ОЕДФК для водопровідної (а) та природної (б) води, що була отримана експериментально (1) та за допомогою моделювання (2). Для кожної дози антискаланту, яка змінювалася від 0,3 до 2 мг/дм³, вимірювалися значення залишкової жорсткості та розраховувались показники СЕ (%) та ПЕ (%). Як видно з рисунка 1, для водопровідної води відхилення змодельованих результатів від експериментальних є не значними, похибка вкладається в діапазон від 1,8% до 8,9%, для природної води показники точності вищі, діапазон похибки складає від 1,7% до 5,1%. При значенні дози ОЕДФК 1 мг/дм³, змодельовані значення для водопровідної води становили 45,96%, а для природної води 71,1%, оскільки при вихідних значеннях 52,6% та 76,2% відповідно, можна спостерігати відхилення початкових значень від модельованих, які становлять 6,64% для водопровідної води та 5,1% для природної води.

Краща ситуація представлена на рисунку 3, де всі змодельовані значення як для, водопровідної води так і для природної води, накладаються на експериментальні із похибкою не більш як 3%. Але слід зазначити

про те, що при значенні дози ОЕДФК 1 мг/дм^3 порівнюючи початкові та змодельовані значення для водопровідної та природної води, спостерігаються більш точніші значення у природній воді порівнюючи з водопровідною водою, 1.05% і 2.1% відповідно. На рисунку 2 та 4, зображено графіки залежності протинакипного ефекту від дози НТМФК для водопровідної води (а) та природної (б) води, що була отримана експериментально (1) та за допомогою моделювання (2). Порівнюючи змодельовані точки із отриманими у лабораторії, спостерігається відносна відповідність, найближчі результати мають похибку у 2-3 %.

На рисунку 2 суттєве відхилення від початкових даних та змодельованих має водопровідна вода в порівнянні з природною водою при значеннях 1,93% та 9,18% відповідно. Розглядаючи рисунок 4, слід зазначити що, при початкових даних та змодельованих значеннях, показники точності у природній воді дещо кращі ніж у водопровідній, відхилення яких становить 2,8% та 1,2% відповідно.

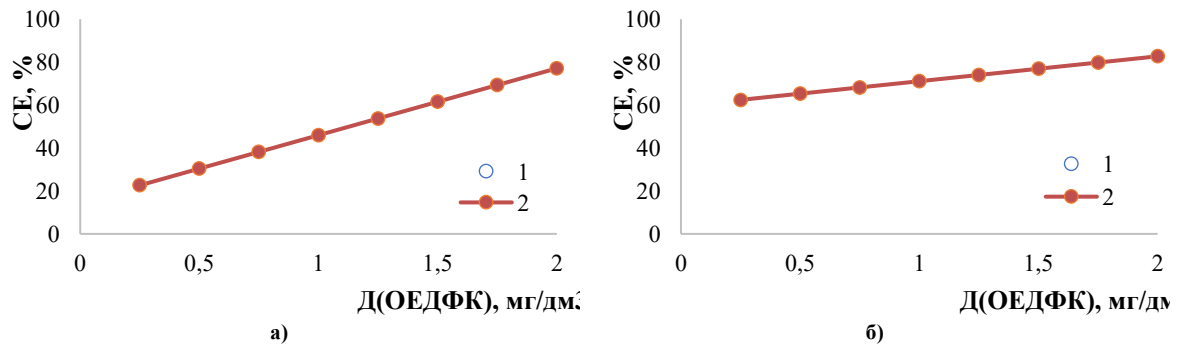


Рис. 1. Вплив дози ОЕДФК на стабілізаційний ефект водопровідної (а) та природної (б) води, визначений експериментально (1) та шляхом моделювання (2)

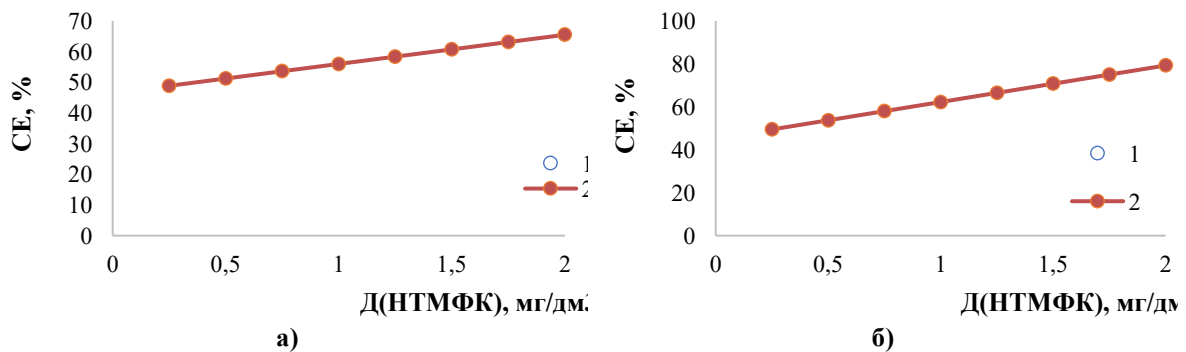


Рис. 2. Вплив дози НТМФК на стабілізаційний ефект водопровідної (а) та природної (б) води, визначений експериментально (1) та шляхом моделювання (2)

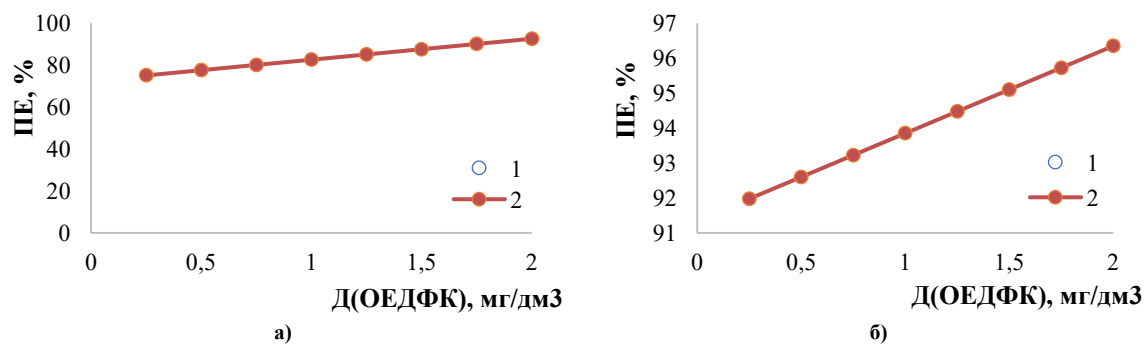


Рис. 3. Вплив дози ОЕДФК на протинакипний ефект водопровідної (а) та природної (б) води, визначений експериментально (1) та шляхом моделювання (2)

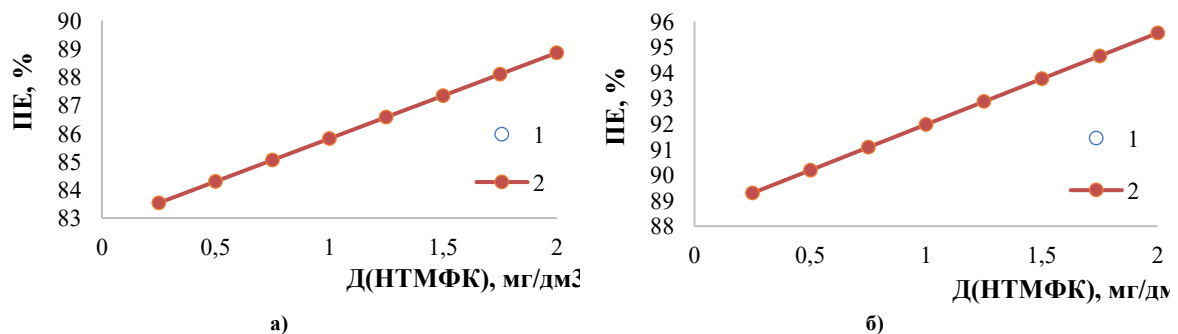


Рис. 4. Вплив дози НТМФК на протинакипний ефект водопровідної (а) та природної (б) води, визначений експериментально (1) та шляхом моделювання (2)

В цілому, використання методу LR надає можливість змодельовати значення близькі до експериментальних. Є певні відхилення значень при концентрації антискалantu в діапазоні від 0,5 до 1 мг/дм³, але похибка там складає до 3 %, лише у двох випадках похибка сягнула 9 %.

Таким чином, результати дослідження підтверджують доцільність використання ОЕДФК чи НТМФК для стабілізаційної обробки води в оптимальних дозах, які становлять 2,0 мг/дм³ для досягнення максимальної ефективності СЕ та ПЕ на рівні 76,1% та 93,5% відповідно. Отже, запропонований спосіб стабілізаційної обробки води є досить перспективним для застосування.

Висновки

Вивчено процеси стабілізаційної обробки водопровідної та природної води в залежності від дози ОЕДФК та НТМФК та встановлено можливості застосування методу LR для моделювання даного процесу. З отриманих даних можна сказати, що НТМФК як антискалтант проявив себе краще ніж ОЕДФК, як у значеннях протинакипного ефекту, так і стабілізаційного ефекту. Значення СЕ та ПЕ для природної води є дещо вищими, оскільки це пов'язано з більшою жорсткістю води. Найближчі до лабораторно отриманих, змодельовані значення, вийшли для антискалantu НТМФК у водопровідній воді, середня похибка для СЕ 1,49 % для ПЕ 0,6 %.

Визначено що, запропонований спосіб стабілізаційної обробки води є досить перспективним для застосування. В цілому, використання методу LR надає максимально наближене до експериментальних вихідних точок прогнозування для ПЕ та СЕ для ОЕДФК та НТМФК при різних дозах антискалantu від 0,50 до 2,00 мг/дм³ водопровідної та природної води. Отримані результати знаходяться, в середньому в межах похибки 3%, і отже це свідчить про те, що для цієї системи метод LR є ефективним.

References

1. Anyanwu U., Oluyemi G. Effect of Produced Sand Particles and Fines on Scale Inhibitor: A Review. *Colloids and Interfaces*. 2021. № 5 (3). P. 1-16. <https://doi.org/10.3390/colloids5030035>
2. Darton E. Membrane chemical research: centuries apart. *Desalination*. 2000. № 132 (1-3). P. 1-11. [https://doi.org/10.1016/S0011-9164\(00\)00141-7](https://doi.org/10.1016/S0011-9164(00)00141-7)
3. Ahmed M., Mohamed, A. Evaluation and optimization of antiscalant substances for enhanced reverse osmosis performance. *Journal of Saudi Chemical Society*. 2024. № 28 (5). P. 1-25. <https://doi.org/10.1016/j.jscs.2024.101923>
4. Hu Y., Chen C., Liu S. State of art bio-materials as scale inhibitors in recirculating cooling water system: a review article. *Water Science and Technology*. 2022. № 85 (5). P. 1500-1521. <https://doi.org/10.2166/wst.2022.027>
5. Orestov E., Mitchenko T. Physical and chemical principles of action of reverse osmosis membrane fouling inhibitors and methods of optimal usage thereof. *Water and water purification technologies scientific and technical news*. 2013. № 12 (2). P. 1-25. <https://doi.org/10.20535/2218-93001222013138220>