

3. Vozbas K. Biodiesel as an alternative motor fuel: Production and policies in the European Union // *Renew. Sust. Energ. Rev.* 2008. Vol. 12, iss. 2. P. 542–552.
4. Брагинский О. Б. Альтернативные моторные топлива: мировые тенденции и выбор для России // *Рос. хим. журн.* 2008. Т. 52, № 6. С. 137–146.
5. Маляренко В. А., Яковлев А. И. Биодизель – альтернатива диверсификации моторных топлив // *Энергосбережение. Энергетика. Энергоаудит.* 2006. № 3. С. 64–73.
6. Transesterification of vegetable oils with ethanol and characterization of the key fuel properties of ethyl esters / G. Anastopoulos [et al.] // *Energies.* 2009. Vol. 2, iss. 2. P. 362–376.
7. Bouaid A., Martinez M., Aracil J. A comparative study of the production of ethyl esters from vegetable oils as a biodiesel fuel optimization by factorial design // *Chem. Eng. J.* 2007. Vol. 134, iss. 1. P. 93–99.
8. Ethyl ester of rapeseed used as a biodiesel fuel – a case study / C. L. Peterson [et al.] // *Biomass and Bioenergy.* 1996. Vol. 10, iss. 5. P. 331–336.
9. Makareviciene V., Janulis P. Environmental effect of rapeseed oil ethyl ester // *Renewable energy.* 2003. Vol. 28, iss. 15. P. 2395–2403.
10. Experimental vapor pressures of five saturated fatty acid ethyl ester (FAEE) Components of biodiesel / M. Benziane [et al.] // *J. Chem. Eng. Data.* 2011. Vol. 56, iss. 12. P. 4736–4740.
11. Орехов А. И. Спиртовая промышленность Республики Беларусь: современное состояние и перспективы развития // *Пищ. пром.: наука и технологии.* 2011. № 1 (11). С. 3–6.
12. Габуев А. Б. О правовом режиме отходов спиртового производства // *Бизнес в законе.* 2009. № 3. С. 14–17.
13. Rubin E. M. Genomics of cellulosic biofuels // *Nature.* 2008. Vol. 454, iss. 7206. P. 841–845.
14. Способ рафинации серосодержащих растительных масел : пат. 1214746 СССР, МКИ С 11 В 3/04 / В. С. Стопский, А. Б. Рафальсон, Н. Н. Майорова, Н. Л. Меламуд, Т. А. Шургая, В. Н. Григорьева ; заявитель НПО «Масложирпром». № 3731734/28-13 ; заявл. 25.04.84 ; опубл. 28.02.86 // *Бюл. / ВНИИПИ Гос. ком. СССР по делам изобретений и открытий.* 1986. № 8.
15. Общий практикум по органической химии : пер. с нем. / под ред. А. Н. Коста. М., 1965. С. 623.
16. Максимук Ю. В., Антонова З. А. Характеристические особенности жидких биотоплив // *Энергоэффективность.* 2008. № 1. С. 2–5.
17. Смирский В. В., Антонова З. А., Крук В. С. Промышленная переработка рапсового масла // *Белорусское сельское хозяйство.* 2003. № 11. С. 36–38.
18. Воробьев А. Полиэфирные смолы // *Компоненты и технологии.* 2003. № 32. С. 182–185.
19. Кириченко В. И., Нездоровин В. П. Комплексная переработка растительных масел и производство смазочно-охлаждающих средств для обработки металлов. Сообщ. 2. Принципы технологии и рационального использования // *Вісник Хмельницького національного університету. Технічні науки.* 2013. № 5. С. 93–100.
20. Läubli M. W., Bruttel P. A. Determination of the oxidative stability of fats and oils: comparison between the active oxygen method (AOCS Cd 12-57) and the Rancimat method // *J. Am. Oil Chem. Soc.* 1986. Vol. 63, iss. 6. P. 792–795.

Поступила в редакцию 28.10.2014.

Зоя Арсеньевна Антонова – кандидат химических наук, заведующая лабораторией топлив, масел и кормов учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем».

Владимир Сергеевич Крук – научный сотрудник лаборатории топлив, масел и кормов учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем».

Вера Николаевна Курсевич – научный сотрудник лаборатории топлив, масел и кормов учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем».

Юрий Владимирович Максимук – кандидат химических наук, заведующий сектором лаборатории топлив, масел и кормов учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем».

Марина Григорьевна Кривова – кандидат химических наук, старший преподаватель кафедры физической химии химического факультета БГУ, научный сотрудник лаборатории топлив, масел и кормов учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем».

УДК 630.432

В. В. БОГДАНОВА, Т. В. ЛАКТЮШИНА, К. В. ДОБРЕГО, О. В. ЖИЛИНСКИЙ, О. И. КОБЕЦ, А. Н. ЛАКТЮШИН

РЕГУЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ СИНТЕТИЧЕСКИХ СРЕДСТВ ОГНЕЗАЩИТЫ И ТУШЕНИЯ ПРИРОДНЫХ ГОРЮЧИХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ МНОГОМЕРНОГО КОМПЬЮТЕРНОГО СИНТЕЗА

Разработана рецептура синтетического средства, обладающего наилучшим устойчивым огнезащитным и огнетушащим действием по отношению к древесине и торфу, методом многомерного компьютерного синтеза с учетом коллективного влияния химических компонентов на свойства азот-, фосфорсодержащих замедлителей горения. Применение предложенного подхода обеспечило корректную системную интерпретацию результатов огневых испытаний, а также сокращение временных, материальных и трудовых затрат на создание технического оптимального варианта рецептуры огнезащитно-огнетушащего средства для предупреждения и тушения лесных и торфяных пожаров.

Ключевые слова: огнезащитно-огнетушащее средство; азот-, фосфорсодержащее; математическая модель; оптимизация рецептуры; многомерный компьютерный синтез.

Optimization of synthetic composition to obtain the best stable flame retardant and fire extinguishing action for wood and peat was carried out. The work was done by means of the multidimensional computer synthesis method in view of group effect of chemical components on the properties of nitrogen-, phosphorous-containing fire retardants. The application of the proposed approach has ensured the proper systemic interpretation of fire tests, as well as reduction of time, material and labor expenditures for the creation of technically optimal variant of fire-retardant agent for the prevention and extinguishing of forest and peat-bog fires.

Key words: fire-resistant; fire-extinguishing synthetic agents; nitrogen-, phosphorous-containing; mathematical model; optimization of receipt; the multidimensional computer synthesis.

Разработка рецептуры огнезащитно-огнетушащего состава (ОЗТС) на основе синтетических фосфатов двух- и трехвалентных металлов – аммония, обладающего высокоэффективным воздействием на торф и древесину, сегодня очень актуальна [1]. Выбор концентрационного соотношения реагентов, обеспечивающего выполнение требований к показателям качества получаемого продукта, обуславливает постановку и решение обратной задачи синтеза, относящейся к классу задач со многими критериями. К их решению часто подходят следующим образом: из множества характеристик выбирают одну, наиболее важную в рассматриваемом случае и определяют ее экстремум. Остальные параметры либо подпадают под категорию ограничений, либо их значения принимаются соответствующими экстремуму основной характеристики. Если же величины других характеристик оказываются неприемлемыми, то данный подход теряет смысл [2].

Другим известным направлением является многокритериальная оптимизация, когда отдельные свойства, характеризующие качество объекта, рассматриваются как частные критерии. Разработано множество принципов формирования из них составных или обобщенных критериев, с помощью которых многокритериальные задачи приводятся к однокритериальным [3]. В таком превращении имеется определенная привлекательность, поскольку оно позволяет в полном объеме использовать достижения однокритериальной оптимизации – области, оставшейся длительное время наиболее разработанной и, что особенно важно, наиболее формализованной [4, 5]. Тем не менее трудности, существующие на этом пути, преодолеть в полной мере не удалось до сих пор. Обязательное выполнение процедуры ранжирования частных критериев качества по важности и формирование составного критерия – как комбинации частных критериев на принципах формальной математической логики – являются основными источниками субъективизма, который во многих случаях отрицательно сказывается на качестве конечного результата.

Информация о характере влияния концентрации компонентов на свойства ОЗТС в неявном виде содержится в адекватной многокритериальной математической модели объекта, однако извлечь ее без специальных методов трудно. Для решения обратной многокритериальной задачи в данной работе применяется метод многомерного компьютерного синтеза [6–8]. Задача формулируется следующим образом. Имеются результаты экспериментальных исследований или существует математическая модель разрабатываемой системы. Входные параметры определяются из условия выполнения заданных требований на характеристики материала при безусловной устойчивости системы, обеспечивающей необходимый уровень воспроизводимости требуемого качества. При этом принимается во внимание, что отклонение заданных физико-механических, функциональных и других характеристик материала от номинальных значений допускается только в определенных пределах. Задача решается с использованием стохастических подходов, учитывающих объективно существующую случайность входных параметров, влекущую за собой случайность характеристик. При выборе номиналов входных параметров учитывается влияние на них дестабилизирующих факторов и характеристики системы. В процессе решения определяются допустимые размеры полей рассеивания входных параметров, что обеспечивает выполнение требований по воспроизводимости свойств материала. В результате решения многокритериальной задачи синтеза материала с заданными свойствами устанавливаются номинальные значения входных параметров и допустимые границы их рассеивания.

Компьютерный синтез, выполняемый на многокритериальной математической модели, состоит в выделении в многомерном пространстве входных параметров области, в которой значения всех учитываемых характеристик одновременно удовлетворяют поставленным в техническом задании требованиям (область требуемого или заданного качества). Сведения о месте дислокации, форме и размерах этой области позволяют найти технически оптимальный вариант объекта, гарантирующий его работоспособность в условиях эксплуатации. Под работоспособностью объекта понимается такое его состояние, при котором он способен нормально выполнять заданные функции с параметрами, установленными в технической документации.

Компьютерный выбор технически оптимального варианта системы с учетом ее стохастичности определяется двумя условиями.

1. Необходимое условие. Номинальные значения входных параметров технически оптимального варианта должны выбираться на множестве вариантов объекта, удовлетворяющих требованиям на характеристики материала.

2. Достаточное условие. Для того чтобы номинальные значения входных параметров были решением задачи выбора технически оптимального варианта системы, уровень воспроизводимости заданных свойств материала должен быть равен или выше установленного в технической документации.

В настоящей работе для создания средства, обладающего устойчивым наилучшим огнезащитным и огнетушащим действием по отношению к древесине и торфу, решалась задача выбора рецептуры состава, обеспечивающего одновременное выполнение требований к огнезащитным, огнетушащим свойствам ОЗТС и к их воспроизводимости.

Разработка математической модели огнезащитно-огнетушащей эффективности ОЗТС по отношению к торфу и древесине

Особенности химических и физических превращений, происходящих во время горения твердых горючих материалов, не всегда достаточно полно могут быть представлены теоретическими моделями. Причина этого – в наличии сложных параллельно-последовательных процессов, протекающих в конденсированной и твердой фазах.

Информация об эффективности огнезащитно-огнетушащих свойств ОЗТС по отношению к торфу и древесине основывается в значительной степени на результатах эксперимента. Установлено [9], что огнезащитные и огнетушащие свойства синтетических продуктов зависят от химического состава и соотношения концентраций реагентов. Для оптимизации рецептуры ОЗТС, где определяющим фактором (входными параметрами состава), влияющим на их целевые свойства, является содержание в конечном продукте фосфора (входной параметр P_1), бентонита (входной параметр P_2) и азота (входной параметр P_3), были проведены эксперименты в пределах диапазонов варьирования содержания этих компонентов в реакционной смеси:

$$\text{фосфор } (P_1) = 5,48-6,7 \text{ г};$$

$$\text{бентонитовая глина } (P_2) = 2,52-3,08 \text{ г}; \quad (1)$$

$$\text{азот } (P_3) = 5,48-6,7 \text{ г}.$$

Нами определялись два свойства ОЗТС: K_1 – эффективность по отношению к торфу (потеря массы огнезащищенного торфа), %, и K_2 – эффективность по отношению к древесине (потеря массы огнезащищенной древесины), %. Результаты приведены в табл. 1.

Таблица 1

Данные огневых испытаний огнезащитно-огнетушащих составов

№ п/п	Содержание фосфора (P_1), %	Содержание бентонитовой глины (P_2), %	Содержание азота (P_3), %	Потеря массы огнезащищенного торфа, %		Потеря массы огнезащищенной древесины, %	
				Фактические значения	Среднее значение	Фактические значения	Среднее значение
1	5,48	2,52	5,48	3,62; 3,98; 3,8	3,8	11,4; 12,9	12,15
2	5,48	2,52	6,7	2,71; 3,06; 2,89	2,887	9,8; 10,9	10,35
3	5,48	3,08	5,48	2,68; 3,13; 3,10	2,97	11; 12,7	11,85
4	5,48	3,08	6,7	1,35; 1,17; 1,18	1,233	10,5; 9,3	9,9
5	6,7	2,52	5,48	3,51; 2,61; 2,8	2,973 3	15,1; 6,8	10,95
6	6,7	2,52	6,7	2,51; 2,37; 2,48	2,453 3	11,6; 14,4	13,0
7	6,7	3,08	5,48	1,64; 1,91; 1,70	1,75	8,7; 10,5	9,6
8	6,7	3,08	6,7	1,06; 0,83; 0,94	0,943 3	10,6; 14,0	12,3
9	6,09	2,8	6,09	2,2; 1,45; 2,377	2,009	4,284; 4,541; 4,247; 3,808	4,22
10	6,13	2,84	6,13	0,78; 1,547; 0,783; 1,154; 0,846	1,022	3,086; 3,846; 3,75; 2,5; 5,839	3,804 2
11	6,17	2,87	6,17	0,401; 0,413; 0,305	0,373	2,548; 2,516; 2,247; 3,067; 3,871	2,850
12	6,22	2,91	6,27	3,367; 1,526; 2,89; 2,224; 1,831	2,367 6	5,405; 5,921; 4,605; 4,268; 4,667	4,973

Фактические диапазоны свойств ОЗТС и соответствующие им диапазоны средних значений в опытах составили:

$$K_1 = 0,305 - 3,98 \% ; K_{1\text{cp}} = 0,373 - 3,8 \% ; \quad (2)$$

$$K_2 = 2,24 - 14,4 \% ; K_{2\text{cp}} = 2,85 - 13,0 \% . \quad (3)$$

Для создания уравнений связи между входными параметрами рецептуры и свойствами ОЗТС применен метод аппроксимации опытных данных в классе полиномиальных базисных функций, позволяющий разрабатывать формализованные описания, вычислять характеристики ОЗТС для различных рецептур.

Характер зависимостей эффективности продукта по отношению к торфу и древесине от концентрационных соотношений компонентов априори неизвестен, поэтому виды полиномов для одного и другого свойства ОЗТС не постулировались заранее, а выбирались исходя из анализа погрешностей расчета и физической адекватности в виде рассчитанных по моделям диапазонов свойств [10].

Погрешности расчетов определялись по величине среднеквадратического отклонения Δ , %. Физичность аппроксимации оценивалась по степени близости обеспечиваемого ею диапазона значений каждой характеристики ОЗТС к соответствующим экспериментальным диапазонам (2) или (3). Для каждого свойства ОЗТС было протестировано 12 типов полиномов первой и второй степени со взаимодействием входных параметров состава в различных комбинациях. Общий вид тестированных полиномов, погрешности расчетов и пределы значений свойств, достигаемые в пространстве эксперимента, представлены в табл. 2.

Таблица 2

Тестированные аппроксимации экспериментальных результатов

№ полинома	Общий вид аппроксимирующих полиномов K_i , $i = 1, 2$	Потеря массы огнезащищенного торфа, %		Потеря массы огнезащищенной древесины, %	
		Δ , %	Диапазон значений, %	Δ , %	Диапазон значений, %
1	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3$	27,48	0,563–3,582	37,02	7,468–10,69
2	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3 + a_6P_1^2$	14,48	0,025–3,681	3,98	3,093–12,61
3	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3 + a_6P_1^2 + a_7P_1^3 + a_8P_1^2P_2 + a_9P_1^2P_3$	15,03	–0,647–3,886	3,18	2,160–12,71
4	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3 + a_6P_3^2$	14,71	0,242–3,695	4,35	2,996–12,63
5	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3 + a_6P_1^2 + a_7P_1^3$	19,35	–0,12–3,8	5,26	2,886–12,93
6	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3 + a_6P_1^2 + a_7P_1^3 + a_8P_1P_2P_3$	39,61	0,005–4,381	5,58	2,891–13,13
7	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3 + a_6P_1^2 + a_7P_1P_2P_3$	14,44	0,018–3,659	3,71	3,087–12,71
8	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3 + a_6P_1^2 + a_7P_1P_2P_3 + a_8P_1^2P_2$	14,23	0,048–3,612	3,58	3,125–12,66
9	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3 + a_6P_1^2 + a_7P_1P_2P_3 + a_8P_1^2P_2 + a_9P_1^2P_3$	13,83	–0,521–3,513	3,09	2,330–12,56
10	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3 + a_6P_1^2 + a_7P_1P_2P_3 + a_8P_1^2P_2 + a_9P_1^3P_2$	12,97	–0,977–4,057	2,54	1,933–12,66
11	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3 + a_6P_1^2 + a_7P_1P_2P_3 + a_8P_1^2P_2 + a_9P_1P_3^2$	29,78	–2,769–6,577	3,59	3,268–12,63
12	$K_i = a_0 + a_1P_1 + a_2P_2 + a_3P_3 + a_4P_1P_3 + a_5P_2P_3 + a_6P_1^2 + a_7P_1P_2P_3 + a_8P_1^2P_2 + a_9P_1^2P_3^2$	12,49	–3,455–6,95	3,07	3,208–12,26

Математическая модель была сформирована из двух полиномиальных уравнений для расчета эффективности ОЗТС по торфу (K_1) и по древесине (K_2) при различных сочетаниях значений входных параметров состава (P_1, P_2, P_3) из заданных диапазонов их варьирования. Сравнительный анализ указанных в табл. 2 свойств протестированных аппроксимаций позволил выбрать для K_1 – эффективности по отношению к торфу (потере массы огнезащищенного торфа) – полином № 4 и для K_2 – эффективности по отношению к древесине (потере массы огнезащищенной древесины) – полином № 9:

$$K_1 = 126,747 - 3,258 P_1 + 2,690 P_2 - 36,644 P_3 + 0,438 P_1P_3 - 0,837 P_2P_3 + 2,912 P_3^2; \quad (4)$$

$$K_2 = -445,512 + 152,957 P_1 + 16,908 P_2 + 204,304 P_3 - 68,294 P_1P_3 - 5,295 P_2P_3 - 12,446 P_1^2 + 0,925 P_1P_2P_3 - 0,541 P_1^2P_2 + 5,627 P_1^2P_3. \quad (5)$$

Математическая модель (4), (5) предназначена для проведения многомерного компьютерного синтеза рецептур ОЗТС по торфу и древесине.

Процедурная модель компьютерного синтеза технически оптимальной рецептуры ОЗТС

Последовательность процедур, выполняемых при компьютерном синтезе технически оптимального варианта рецептуры ОЗТС, следующая: 1) разработка технического задания (ТЗ); 2) выделение вариантов рецептуры ОЗТС с требуемыми по ТЗ свойствами; 3) выбор технически оптимального варианта рецептуры ОЗТС; 4) экспериментальная проверка соответствия требованиям технического задания уровней эффективности ОЗТС по отношению к торфу и древесине в производственных условиях.

Разработка технического задания. Специалистами по средствам огнезащиты и тушения горючих материалов и по системному компьютерному синтезу были сформулированы следующие требования к свойствам рецептуры ОЗТС:

$$\text{потери массы образцов торфа } K_1 \leq 0,6 \% \quad (6)$$

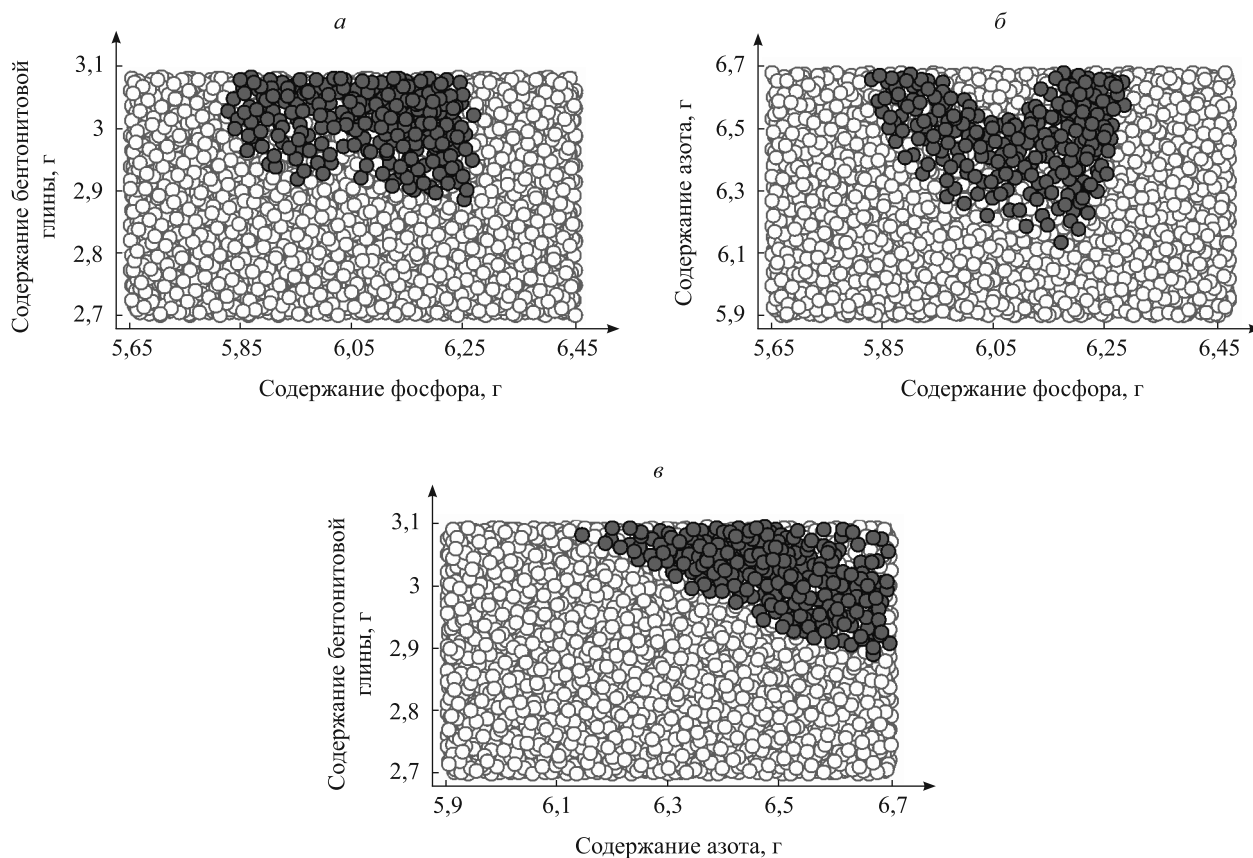
$$\text{потери массы образцов древесины } K_2 \leq 3,5 \% \quad (7)$$

при воспроизводимости свойств ОЗТС, равной единице.

Пространство входных параметров состава ОЗТС ограничено экспериментальными диапазонами варьирования концентраций компонентов исходной смеси (1).

Выделение вариантов рецептуры ОЗТС с требуемыми по техническому заданию свойствами. Выделение в трехмерном виртуальном пространстве входных параметров состава вариантов рецептуры ОЗТС, качественные показатели которых одновременно соответствуют требованиям (6) и (7), осуществлялось методом многомерного компьютерного синтеза в автоматическом бездиалоговом режиме.

Результаты представлены в виде диаграмм *a* – *в* в трех проекциях исследованного трехмерного виртуального пространства входных параметров состава. На диаграмме *a* изображена проекция пространства на плоскость (P_1, P_2) , на диаграмме *б* – проекция на плоскость (P_1, P_3) , на диаграмме *в* – проекция на плоскость (P_3, P_2) .



Диаграммы расположения в пространстве входных параметров состава области рецептур с заданными требованиями к свойствам ОЗТС (в трех проекциях): ● – варианты состава, обеспечивающие одновременное выполнение требований по потерям массы огнезащитенных торфа и древесины; ○ – варианты состава вне заданных требований

Каждая точка в виртуальном пространстве (вариант рецептуры) характеризуется тремя координатами (P_1, P_2, P_3), определяющими содержание фосфора, бентонита и азота, а также соответствующими им рассчитанными по модели (4), (5) значениями эффективности ОЗТС для торфа и древесины. Светлыми и темными точками изображены все рассчитанные варианты рецептуры ОЗТС. Темные точки – варианты рецептуры, отвечающие условиям (6) и (7).

На диаграммах темные точки («хорошие» рецептуры) образуют в исследуемом пространстве область заданного качества ОЗТС. В остальном пространстве одно из учитываемых свойств или оба не отвечают поставленным требованиям. Область темных точек занимает часть исходного пространства, ограничивая первоначальные диапазоны концентраций компонентов ОЗТС. В частности, очевидно, что желаемые свойства ОЗТС могут быть достигнуты при содержании фосфора от 5,85 до 6,25 г, бентонитовой глины – выше 2,89 г и азота – выше 6,2 г.

Выбор технически оптимального варианта рецептуры ОЗТС

Каждый из выделенных вариантов рецептуры является решением многокритериальной задачи синтеза, однако различное взаиморасположение темных точек в пространстве входных параметров состава говорит о том, что лишь немногие из них обладают необходимым уровнем реализуемости, так как погрешности дозирующего оборудования и другие объективно существующие дестабилизирующие факторы могут привести к неконтролируемым изменениям входных параметров состава, влекущим за собой выход одного или обоих свойств ОЗТС за установленные границы. Следствием этого может быть полный или частичный брак при получении ОЗТС.

Наилучшими возможностями для обеспечения устойчивого качества ОЗТС при его получении обладают технически оптимальный вариант рецептуры ОЗТС, полное количественное описание которого представлено в табл. 3, где содержатся сведения о номинальных значениях концентраций компонентов, и рассчитанные из условия выполнения заданных требований к свойствам ОЗТС максимально разрешенные диапазоны отклонений от номиналов. В табл. 3 указаны также значения свойств ОЗТС, соответствующие номиналам концентраций, и максимально возможные пределы разброса значений свойств ОЗТС. Это означает, что до тех пор, пока значения параметров состава остаются в рассчитанных для них пределах, любые их сочетания не выведут свойства ОЗТС за границы поставленных требований и система будет работать без брака. При этом обеспечивается воспроизводимость свойств материала, равная единице.

Таблица 3

Технически оптимальный вариант рецептуры ОЗТС и значения его характеристик

№ п/п	Наименование и размерность параметра	Номинальное значение	Граница рассеивания	
			нижняя	верхняя
1	Содержание фосфора, г	6,14	6,06	6,22
2	Содержание бентонитовой глины, г	3,035	3,00	3,07
3	Содержание азота, г	6,42	6,32	6,51
4	Огнетушащая эффективность по отношению к торфу, %	0,390	0,206	0,588
5	Огнетушащая эффективность по отношению к древесине, %	2,886	2,494	3,522

С предложенной рецептурой ОЗТС проведены химические синтезы и определена ее эффективность по отношению к торфу и древесине. Полученные результаты показали совпадение с расчетом, полностью удовлетворившее специалистов.

Таким образом, решена задача компьютерного синтеза рецептуры ОЗТС по двум заданным характеристикам: потере массы огнезащищенного торфа и потере массы огнезащищенной древесины. Определено множество рецептов, одновременно обеспечивающих заданные эффективности ОЗТС по отношению к торфу и древесине, и среди них выбран технически оптимальный вариант с воспроизводимостью свойств ОЗТС, равной единице.

Применение метода многомерного компьютерного синтеза обеспечило корректную системную интерпретацию результатов огневых испытаний, а также сокращение временных, материальных и трудовых затрат на разработку и внедрение варианта рецептуры ОЗТС, отличающегося надежной воспроизводимостью заданных свойств. В целом это уровень, соответствующий, согласно градации российского математика Г. Малинецкого, шестому технологическому укладу, главное преимущество которого, по сравнению с предыдущим, будет состоять в создании объектов с заранее заданными свойствами.

Положительные результаты экспериментальной проверки предложенного варианта рецептуры ОЗТС свидетельствуют о том, что метод многомерного компьютерного синтеза для направленного

регулирования количественного содержания компонентов в исходной реакционной смеси является весьма плодотворным, открывающим широкие перспективы для решения проблем выбора составов многокомпонентных продуктов с гарантированно устойчивым набором свойств.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Богданова В. В., Кобец О. И. Регулирование физико-химических свойств композиций на основе фосфатов металлов – аммония, проявляющих огнезащитный и огнетушащий эффект // Свиридовские чтения : сб. ст. Минск, 2011. Вып. 6. С. 21–27.
2. Брахман Т. Р. Многокритериальность и выбор альтернативы в технике. М., 1984.
3. Вязгин В. А., Федоров В. В. Математические методы автоматического проектирования. М., 1989.
4. Быков В. П. Методическое обеспечение САПР в машиностроении. Л., 1989.
5. Солодовников В. В., Тумаркин В. И. Теория сложности и проектирование систем управления. М., 1990.
6. Laktiushin A. N., Laktiushina T. V. Application of a computer complex of synthesis-technologies for research and calculation design of plasma-technological systems : VII Int. Conf. on Plasma Physics and Plasma Technology (Minsk, Sept. 17–21, 2012). Minsk, 2012. Vol. II. P. 738–741.
7. Витязь П. А., Жилинский О. В., Лактюшина Т. В. Компьютерная методология выбора технически оптимального варианта в многокритериальных задачах проектирования материалов // Физическая мезомеханика. 2004. Т. 7. Спецвыпуск : в 2 ч. Ч. 1. С. 3–11.
8. Витязь П. А., Жилинский О. В., Лактюшина Т. В. Фундаментальные основы компьютерного проектирования материалов с заданными свойствами : сб. материалов Междунар. конф. по физической мезомеханике, компьютерному проектированию и разработке новых материалов (Томск, 19–22 сент. 2006 г.). Томск, 2006. С. 82–85.
9. Богданова В. В., Кобец О. И., Людко А. А., Кирлица В. П. Оптимизация огнезащитно-огнетушащих свойств состава для предотвращения и локализации пожаров в природном комплексе методом математического планирования эксперимента // Вестн. Командно-инженерного института МЧС Республики Беларусь. 2012. № 1 (15). С. 32–39.
10. Ящерицын П. И., Махаринский Е. И. Планирование эксперимента в машиностроении. Минск, 1985.

Поступила в редакцию 10.02.2014.

Валентина Владимировна Богданова – доктор химических наук, профессор, заведующая лабораторией огнетушащих материалов учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем».

Татьяна Владимировна Лактюшина – кандидат технических наук, старший научный сотрудник лаборатории плазменных технологий государственного научного учреждения «Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси».

Кирилл Викторович Доброго – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией химической физики государственного научного учреждения «Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси».

Олег Владимирович Жилинский – кандидат технических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории наноструктурных и алмазных материалов, технологий государственного научного учреждения «Объединенный институт машиностроения НАН Беларуси».

Ольга Игоревна Кобец – кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории огнетушащих материалов учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем».

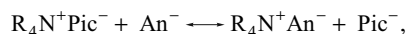
Александр Николаевич Лактюшин – кандидат технических наук, заведующий лабораторией плазменных технологий государственного научного учреждения «Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси».

УДК 542.61

О. И. КУКСА, А. Л. ГУЛЕВИЧ, Е. М. РАХМАНЬКО

ЭКСТРАКЦИОННО-ФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АМПИЦИЛЛИНА И ОФЛОКСАЦИНА В ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТАХ

Для экстракционно-фотометрического определения анионов антибиотиков (ампициллина и офлоксацина) предложено использовать анионообменную реакцию



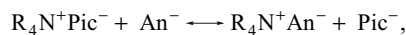
где R_4N^+ – катион тринилоктадециламмония; Pic^- – пикрат-анион; An^- – анион антибиотика.

В качестве растворителя высшей четвертичной аммониевой соли был применен толуол, а для сдвига равновесия анионообменной реакции вправо органическая фаза содержала сольватирующую добавку – 1-(3,5-динитро-4-хлорфенил)-2,2,2-трифторэтан-1-он.

Осуществлено моделирование экстракционной системы с целью нахождения оптимальных условий экстракции анионов антибиотиков. На основе проведенной оптимизации разработана экстракционно-фотометрическая методика определения ампициллина и офлоксацина в фармацевтических препаратах. Выполнен анализ таблеток и инъекционных порошков различных изготовителей и показана высокая воспроизводимость и правильность полученных результатов анализа.

Ключевые слова: антибиотики; ампициллин; офлоксацин; анионообменная экстракция; высшая четвертичная аммониевая соль.

For extraction-photometric determination of antibiotics anions (ampicillin and ofloxacin) the following anion-exchange reaction was proposed



where R_4N^+ – trinyloctadecyl ammonium cation; Pic^- – picrate anion; An^- – antibiotic anion.