

чинами: особенностями производства ПГМ (например, неоснащенность промышленными ситами нужного размера или надлежащего качества), неправильным хранением ПГМ на базе или в процессе транспортирования, в результате чего продукт слеживается.

Рассматриваемый для Москвы ассортимент включает в себя 5 наименований ПГМ на основе хлоридов и ацетатов (рисунок 2а): «ХКМ жидкость», «Антиснег-1 жидкость», «Нордикс-П жидкость», «ХКФ твердый» и «Биомаг твердый». Противогололедные материалы «Антиснег-1 жидкость» и «Нордикс-П жидкость» представляют собой 30% растворы ацетатов аммония и калия соответственно, имеют одинаковые нормы расхода 20-45 мл/м² и агрессивны только по отношению к бетону. ПГМ на основе хлористого кальция «ХКМ жидкость» и «ХКФ твердый» представляют собой 32% модифицированный раствор и хлористый кальций, ингибированный фосфатами, соответственно. Эти ПГМ агрессивно воздействуют как на сталь, так и на бетон и имеют нормы расхода 40-110 мл/м² и 20-70 г/м² соответственно. В рассматриваемый ассортимент также входит ПГМ «Биомаг твердый», представляющий собой хлористый магний модифицированный. Как и реагенты на основе хлористого кальция, «Биомаг твердый» агрессивно воздействует на сталь и бетон и имеет нормы расхода 30-80 г/м².

Ввод, редактирование и анализ информации по показателям качества проводился в комплексе PDM STEP Suite Enterprise Edition (PSS-EE), на который нами приобретена лицензия (APL-3451631-01). Применение CALS-стандарта (ISO 10303) при разработке информационной системы аналитического мониторинга позволяет повысить качество и оперативность аналитических исследований. В конечном итоге, выбранная информационная технология позволяет создать эффективную систему контроля качества химических ПГМ, соответствующую международным стандартам.

Литература

1. Платонов А.П. Меры снижения воздействия противогололедных материалов на придорожные территории // Наука и техника в дорожной отрасли. 1997. № 2. с. 11-17.
2. Bessarabov A.M., Zhdanovich O.A., Yaroshenko A.M., Zaikov G. E. Development of an analytical quality control system of high-purity chemical substances on the CALS concept basis // Oxidation Communications. 2007. Vol. 30, No 1. P. 206–214.
3. Bessarabov A.M., Zhdanovich O.A., Yaroshenko A.M., Zaikov G.E. Development of information CALS-technologies in the industry of chemical reagents and high-pure substances // Journal of the Balkan Tribological Association. 2005. Vol. 11, № 3. P. 429-437.
4. Глушко А.Н., Степанова Т.И., Подмарева О.Н., Бессарабов А.М. Анализ региональной транспортной инфраструктуры на примере противогололедных материалов // Сб. научных трудов X Межд. научно-практич. конф. «Партнерство бизнеса и образования в инновационном развитии региона». Тверь, ТФ МЭСИ, 27 октября 2011 г., с. 126-129.

CALS-технология для выбора аналитического оборудования на примере мониторинга ассортимента органических растворителей

д.т.н. проф. Бессарабов А.М., Трынкина Л.В., к.х.н. Трохин В.Е., к.х.н. Вендило А.Г.,
к.т.н. доц. Гордеева Е.Л.*

*Научный центр «Малотоннажная химия», * Университет машиностроения*

Аннотация. Разработана экспертная система для выбора аналитического оборудования и метода анализа особо чистых веществ (на примере ассортимента органических растворителей). Базы знаний разработаны на основе информационных CALS-технологий и структурированы по областям применения, анализируемым веществам, показателям качества, методам анализа и аналитическим приборам. В свою очередь, база знаний по аналитическим приборам структурирована по 4-м основным кластерам показателей качества: содержание основного вещества, ка-

тионы металлов, анионы и взвешенные частицы.

Ключевые слова: экспертная система, CALS-технология, аналитические приборы, органические растворители.

Высокочистые органические растворители широко востребованы в таких отраслях промышленности, как микроэлектроника, волоконная оптика, оптическое стекловарение, фармацевтика, тонкий органический синтез и др. К основным направлениям работ при получении органических растворителей относится комплекс аналитических исследований, представляющий собой многопараметрическую и многофакторную задачу. При этом, учитывая разнообразие ассортимента органических растворителей, следует унифицировать по возможности методы аналитического контроля, аналогичные для различных классов соединений, а также принять во внимание то, что некоторые вещества часто присутствуют в других продуктах в виде примесей. Это может позволить сократить время анализа и упростить подготовку персонала, сделав ее более универсальной.

При этом необходимо отметить, что при кажущемся разнообразии требований к реактивам по перечню анализируемых примесей и их точности (от качественных испытаний до определения точности содержания с жесткими требованиями к статистической обработке результатов), вполне возможно не только выделение основных групп методов аналитического контроля (катионы металлов методом ISP-МС, газожидкостной хроматографии, жидкостной хроматографии, ионной хроматографии, лазерной дифракции), но и их сочетание. Это позволяет судить о формах состояния примесей, что имеет большое значение при разработке рассматриваемой в данной работе экспертной системы.

Для создания экспертной системы (ЭС) аналитического мониторинга были проведены работы по следующим направлениям: классификация и систематизация имеющейся информации; разработка интерфейса, создание и доработка программной оболочки ЭС; выработка системы понятий в рассматриваемой предметной области и определение множества правил для ее описания; заполнение базы знаний.

Основными элементами экспертной системы являются базы знаний (БЗ) и некоторая специализированная программа (оболочка системы), позволяющая вносить изменения в базу знаний и проводить консультации на основе имеющихся в ней правил. Оболочка в свою очередь включает четыре основных функциональных элемента: объявление и редактирование объектов, ввод и редактирование правил, проведение консультаций, подсистема объяснений полученных результатов [1].

База знаний состоит из двух частей: перечня объектов и базы правил. Объект – это специфическая единица информации ЭС, соответствующая некоторому понятию или явлению из предметной области и представляемому в машине в виде: объект–атрибут–значение атрибута. Совокупность объектов какой-либо ЭС с некоторыми значениями их атрибутов называется рабочей памятью ЭС и является как бы машинным отображением рассматриваемой предметной области со всеми ее составными частями и их параметрами. В свою очередь база правил – это совокупность правил, описывающих отношения между объектами в рабочей памяти. Прототипами этих правил можно считать взаимоотношение между предметами в реальном мире, закономерности, влияющие на их состояние и т.п. Цель работы ЭС – проведение процедуры логического вывода (или процедура принятия решений). Процедура логического вывода – это процесс применения правил из БЗ к описанным в БЗ объектам. В левой части каждого правила задается условие, связывающее атрибуты объектов с конкретными значениями с помощью знаков $>$, $<$, $=$ и логических выражений "и", "или". При истинности условия в левой части выполняется правая часть правила, которая представляет собой некоторое действие (например, изменение значения атрибута одного из объектов, поиск во внешней базе данных, запрос к пользователю, вывод на экран результатов работы).

Базы знаний экспертной системы аналитического мониторинга, также называемой системой компьютерного менеджмента качества (КМК-система), разрабатываются в рамках

наиболее современной и перспективной системы компьютерной поддержки – CALS-технологии (Continuous Acquisition and Life cycle Support – непрерывная информационная поддержка жизненного цикла продукта) [2]. В основе концепции CALS лежит комплекс единых информационных моделей, стандартизация способов доступа к информации и ее корректной интерпретации [2].

В предметной области базы знаний включают следующие основные информационные блоки: анализируемое вещество, показатели качества, методы анализа и аналитические приборы [3]. Проведенный системный анализ позволил структурировать эту задачу на основных уровнях иерархии.

На верхнем уровне рассматриваются анализируемые вещества, которые группируются по следующим 16 классам: кетоны; алифатические углеводороды; ароматические углеводороды; петролейные эфиры; простые эфиры; сложные эфиры; спирты, ароматические спирты; многоатомные спирты; хлорорганические растворители; ароматические хлорированные углеводороды; амиды; нитрилы; циклоалканы; алициклический амины; бифункциональные растворители. Кроме того на этом уровне некоторые классы растворителей могут включать в себя соответствующие подклассы. Например, бифункциональные растворители группируются по следующим 5 подклассам: эфир/спирт; амин/спирт; кетон/спирт; гетероцикл/амин; гетероцикл/амид. На 3-м подуровне находятся соответствующие анализируемые органические растворители. Например, для эфир/спирта рассматриваются три разрабатываемых нами растворителя: метилцеллозольв, этилцеллозольв и бутилцеллозольв.

На втором уровне иерархии проводится структурирование по каждому рассматриваемому веществу с целью группировки по кластерам анализируемых примесей. Нами проведена интеграция индикаторов качества с областями применения высокочистых растворителей. Например, для такого растворителя, как ацетон (подкласс – кетоны) рассматриваются 3 области применения: микроэлектроника, тонкий органический синтез и лакокрасочная промышленность. Для каждого потребителя существует свои требования к примесным характеристикам: микроэлектроника лимитируется катионами металлов на уровне 10^{-7} – 10^{-8} % масс.; тонкий органический синтез – анионами $1\text{--}5\cdot 10^{-4}$ % масс.; лакокрасочная промышленность – альдегидами и фенолами 10^{-4} % масс.

Последний 3-й уровень иерархии связан с аналитическим контролем соответствующих примесей (групп примесей). Для аналитического контроля качества органических растворителей особой чистоты применяется современное аналитическое оборудование. Для его выбора используется база данных аналитических приборов, используемых в технологии получения химических реактивов и особо чистых веществ. Совокупность рассматриваемых приборов нами структурирована по следующим 4-м основным кластерам показателей качества: содержание основного вещества, катионы металлов, анионы и взвешенные частицы [4].

Основными методами определения основного вещества в особо чистых материалах являются газовая хроматография, высокоэффективная жидкостная хроматография и масс-спектрометрия. Все эти 3 метода являются подкатегориями CALS-системы, по которым сгруппированы соответствующие им аналитические приборы (рисунок 1).

Газовая хроматография – метод разделения летучих компонентов, при котором подвижной фазой служит инертный газ (газ-носитель), протекающий через неподвижную фазу с большой поверхностью. Этот метод можно использовать для анализа газообразных, жидких и твердых веществ с молекулярной массой меньше 400, которые должны удовлетворять определенным требованиям, главные из которых — летучесть, термостабильность, инертность, лёгкость получения. Этим требованиям в полной мере удовлетворяют, как правило, органические вещества (органические растворители), поэтому газовую хроматографию широко используют как серийный метод.

Высокоэффективная жидкостная хроматография – наиболее эффективный метод анализа органических проб сложного состава. Отличительной особенностью ВЭЖХ от остальных

Раздел 6. Инженерная экология и смежные вопросы

методов жидкостной хроматографии является применение высокого давления при пропускании подвижной фазы через колонку (<250 бар) и микрочернистого сорбента (размер частиц порядка мкм) для разделения вещества в колонке длиной от 2 до 30 см.

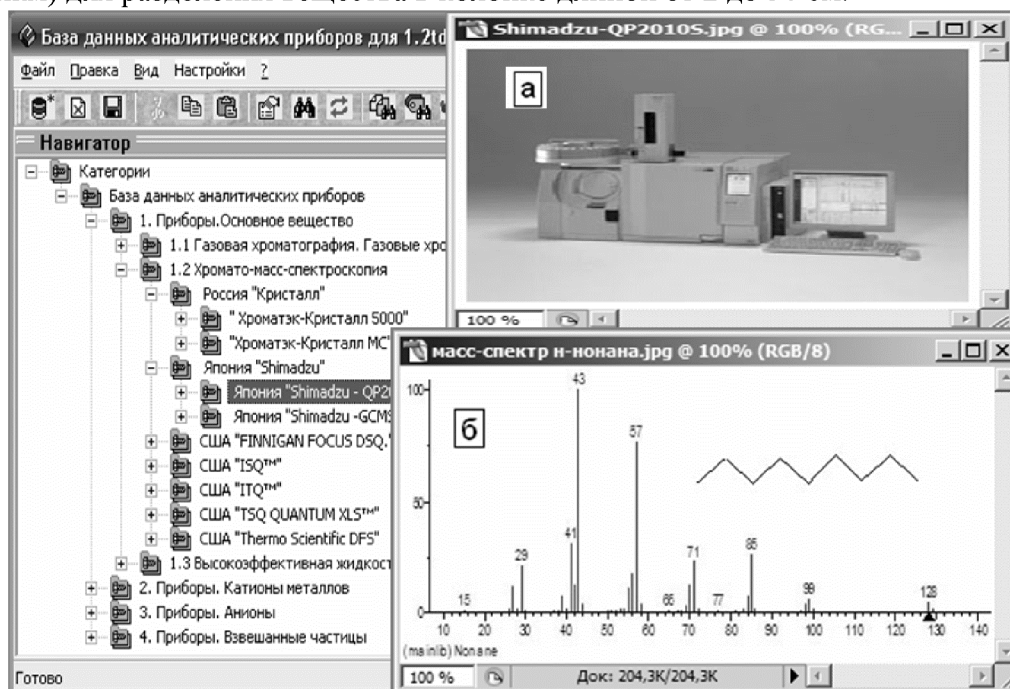


Рисунок 1 – CALS-система базы данных аналитических приборов.

Хромато-масс-спектрометрия: а – Shimadzu-QP2010S; б – масс-спектр н-нонана

Хромато-масс-спектрометрия – метод анализа смесей, главным образом органических веществ, и определения следовых количеств веществ в объеме жидкости, основанный на комбинации двух самостоятельных методов: хроматографии и масс-спектрометрии. С помощью первого осуществляют разделение смеси на компоненты, с помощью второго – идентификацию и определение строения вещества, количественный анализ. Приборы, в которых масс-спектрометрический детектор скомбинирован с газовым хроматографом, называются хромато-масс-спектрометрами («Хромасс»). Все приборы в базе данных хромато-масс-спектрометров также разбиты по подкатегориям: «Страна производитель/Фирма» (рисунок 1). Из всей совокупности разработчиков только 2 производителя предлагают серии приборов: Япония (Shimadzu) – QP2010S (рисунок 1-а), GCMS-QP2010; Россия (Кристалл) – Хроматэк-Кристалл 5000» с масс-спектрометрическим детектором (МД) DSQII, Хроматэк-Кристалл МС. Все остальные 5 из рассматриваемых основных приборов производятся в США различными фирмами: Thermo Scientific «DFS», TSQ QUANTUM XLS™, ITQ™, ISQ™, FINNIGAN FOCUS DSQ.

Принципиальная совместимость масс-спектрометра с газовым хроматографом обусловлена тем, что в обоих случаях анализируемое вещество находится в газовой фазе, рабочие температурные интервалы одинаковы, пределы обнаружения (чувствительность) близки. Различие состоит в том, что в ионном источнике масс-спектрометра поддерживается высокий вакуум (10^{-5} – 10^{-6} Па). Для понижения давления используют молекулярный сепаратор, который одним концом соединен с выходом хроматографической колонки, а другим – с ионным источником масс-спектрометра. Молекулярный сепаратор удаляет из газового потока, выходящего из колонки, основную часть газа-носителя, а органическое вещество пропускает в масс-спектрометр. При этом давление на выходе колонки понижается до рабочего давления в масс-спектрометре.

Экспертная система разрабатывалась на основе PDM STEP Suite, представляющей собой трехуровневую информационную систему, состоящую из сервера СУБД (Oracle Server

8.i), сервера приложений (Oracle Client 8.i & PSSOraSrv) и клиентского модуля (PSS). Клиентский модуль обеспечивает диалоговое взаимодействие с БД через сервер приложений. Трехуровневая архитектура обеспечивает эффективное распределение вычислительной нагрузки при одновременной работе большого числа пользователей.

Применение концепции CALS при разработке экспертной системы существенно сокращает время аналитических исследований и повышает качество проводимых научных работ. Выбранная информационная технология позволяет создать не только эффективную систему контроля качества особо чистой продукции, соответствующую международным стандартам, но и успешно интегрироваться в систему управления производством на всех этапах жизненного цикла продукта с учетом специфики технологии особо чистых веществ (многоассортиментность, мало- и микротоннажность и т.д.).

Литература

1. Рябенко Е.А., Бессарабов А.М., Алексеева О.В. Применение экспертных систем при выборе метода глубокой очистки и аппаратурного оформления // *Высокочистые вещества*. 1994. № 1. с. 48-52.
2. Бессарабов А.М., Афанасьев А.Н. CALS-технологии при проектировании перспективных химических производств // *Химическая технология*. 2002. № 3. с. 26-30.
3. Bessarabov A.M. et al. Development of an analytical quality control system of high-purity chemical substances on the CALS concept basis // *Oxidation Communications*. 2007. Vol. 30, № 1. P. 206–214.
4. Бессарабов А.М. и др. Разработка базы данных аналитических приборов для CALS-системы компьютерного менеджмента качества химических реактивов и особо чистых веществ // *Промышленные АСУ и контроллеры*. 2011. № 11. с. 45-56.

Интенсификация флотационной очистки нефтезагрязненных вод с предварительной ультразвуковой активацией реагента

Аитова И.З., к.т.н. доц. Векслер Г.Б., к.т.н. доц. Гольберг Г.Ю.

Университет машиностроения

8(499) 267- 12-03, aitova.inzilya@gmail.com

д.т.н. доц. Муллакаев М.С.

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН (ИОНХ РАН)

8(495)955- 48-38, mullakaev@mail.ru

Аннотация. В статье рассмотрена возможность практического применения мощного ультразвука в комплексе с другими физико-химическими методами для очистки нефтезагрязненных стоков. В процессе экспериментальных исследований установлено существенное повышение степени очистки при предварительной ультразвуковой (УЗ) активации реагента. Проанализирован механизм полученного эффекта применительно к высокоэффективному алюмокремниевому флокулянту - коагулянту (АКФК).

Ключевые слова: *алюмокремниевый флокулянт - коагулянт (АКФК), ультразвук (УЗ), флотация, очистка нефтезагрязненных сточных вод.*

Год от года увеличивающиеся масштабы использования нефти делают все более актуальной проблему очистки сточных вод, загрязненных нефтепродуктами. Количество таких стоков увеличивается, а требования к степени очистки ужесточаются. Традиционно используемые методы очистки воды не в состоянии удовлетворить современным требованиям по охране окружающей среды, энерго- и ресурсосбережению [1].

Одним из наиболее эффективных способов очистки сточных вод является реагентная флотация с использованием алюмокремниевых флокулянтов – коагулянтов (АКФК), получае-