

Применяя данный метод для исследования пива, были получены положительные результаты, свидетельствующие о его эффективности и информативности. Применение данного метода позволяет быстро обнаружить и зафиксировать изменения, происходящие в пиве, что очень важно и для производителя, и для продавца, и для покупателя.

Предлагаемый метод может быть успешно использован для оценки качества готового продукта и с товароведческой точки зрения. Так как зачастую требуется за считанные минуты определить качество продукта, а это не всегда можно получить, применяя традиционные методы оценки качества пива. Применение данного метода позволяет зафиксировать изменения, происходящие в пиве, т.е. сделать предварительный вывод о пригодности или непригодности пива к дальнейшей реализации.

При разработке методики данного экспресс-метода необходимо определить все режимы и отработать технику его проведения для оценки качества пива. В ходе дальнейшего изучения разрабатываемого экспресс-метода может быть предложено и другое направление его применения.

К ОБОБЩЕННЫМ УРАВНЕНИЯМ СВЯЗИ В РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОМ АНАЛИЗЕ

Сорочинская М.А., Дубинина Ю.А.,

Дуймакаев Ш.И., Цветянский А.Л.

*Ростовский государственный университет
Ростов-на-Дону, Россия*

Изучением диаграмм состав-свойство физико-химии занимаются давно. Сейчас эта задача формулируется по-новому: нужно найти оптимальное в некотором смысле расположение точек в факторном пространстве для полиномиального описания диаграммы состав-свойство. Пионерской в этом отношении является широко известная работа Шеффе [1].

$$C_i = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i I_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} q_{ij} I_i I_j + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \gamma_{ij} I_i I_j (I_i - I_j) + \sum_{1 \leq i < j \leq q} q_{ijl} I_i I_j I_l, \quad (1)$$

где C_i - содержание i -го компонента пробы; β_i , q_{ij} , γ_{ij} , q_{ijl} - коэффициенты полинома, I_i , I_j , I_l - относительные интенсивности линий соответствующих компонентов (без рассеянного фона). Коэффициенты β_i , q_{ij} , γ_{ij} , q_{ijl} определяются практически независимо друг от друга. Кроме того, т.к. сумма величин относительных интенсивностей линий всех компонентов пробы - из-за близости к линейной зависимости между ними - в нулевом приближении постоянна, то этот полином является оптимальным и с точки зрения теории планирования эксперимента.

В начале 70-х гг. на кафедре ФТТ РГУ применительно к РСФА на основе планирования эксперимента по Шеффе были построены т. н. феноменологические уравнения связи [2]. Уравнения позволили получить высокую точность РСФА. Но требовалось на этапе непосредственного анализа решать систему нелинейных уравнений относительно искомым содержаниям компонентов. Переход - в процессе градуировки - к т. н. обобщенным уравнениям связи [3] решил проблему этапа непосредственного анализа. Но только в частном (3-компонентном) случае. Поэтому такие частные «обобщенные» уравнения не могли найти широкого практического применения. При планировании эксперимента имело место «управление» факторами - содержаниями. Но, как уже сказано выше, только в 3-компонентном случае.

В настоящей работе сразу рассмотрены обобщенные уравнения связи. А в качестве «управляемых» факторов выбраны интенсивности. Строго говоря, управлять интенсивностями в общем случае нельзя. Их нельзя «задавать». Так как интенсивность флуоресценции элемента зависит от общего (полного) состава образца. Т. е. от содержаний всех элементов образца.

Нами использована «абсолютная» тенденция: интенсивность элемента i в первом приближении пропорциональна содержанию элемента i . Это позволило в процессе градуировки планировать эксперимент на основе матрицы факторов - содержаний элементов (компонентов) i , но измерять интенсивности этих элементов i . И в итоге - построить обобщенные уравнения связи, которые можно применять в общем случае многоэлементного анализа.

Для описания 4-компонентной системы $1-Ni$, $2-Zn$, $3-Ge$, $4-Mo$ со значительными эффектами избирательного возбуждения выбраны обобщенные уравнения связи следующего вида

Современное состояние теории возбуждения рентгеновской флуоресценции достигло столь высокого уровня, что можно с достаточной точностью рассчитывать относительные интенсивности аналитических линий для гомогенных образцов известного элементного состава. Это позволяет проверить адекватность модели (1) с использованием теоретических интенсивностей.

Интенсивности аналитических линий элементов рассчитаны для следующих экспериментальных условий: рентгеновская трубка с W-анодом, напряжение - 40 кВ, толщина бериллиевого окна 0,125 мм, углы падения и выхода излучения - $\varphi = 35^\circ$, $\psi = 65^\circ$.

Стандартом служил образец (СО), содержащий 25% каждого компонента. Градуировка уравнений проводилась с использованием матрицы планирования Шеффе [1]. При этом коэффициенты обобщенных уравнений находили по составам, содержание каждого компонента в которых изменялось в пределах от 0 до 100%. Такой подход целесообразен при отсутствии каких-либо сведений о количественном составе анализируемых проб.

Коэффициенты влияния рассчитывали путем решения системы линейных уравнений (1) без привлечения метода наименьших квадратов (МНК), т.к. в схеме Шеффе регрессионный план жестко связан с формой уравнения и число градуировочных образцов совпадает с числом рассчитываемых коэффициентов.

По данным 20-ти определений каждого элемента без введения погрешности в величину рассчитываемой интенсивности (эксперимент на математической модели) получены относительные среднеквадратические погрешности соответственно 0,15%, 0,89%, 1,07%, 0,34% , в то время как, способ [2] дал 4,02%, 1,93%, 12,19%, 1,89%.

Так как в расчетах использовали теоретические значения интенсивностей, то результирующая погрешность \mathcal{E} не содержит ошибок, связанных с отбором, подготовкой и измерением проб, т.е. является чисто методической погрешностью соответствующего способа анализа.

На следующем этапе в теоретически рассчитанные значения интенсивностей $I_i^{теор}$ для проб случайным образом (с помощью генератора случайных чисел) вносят экспериментальную погрешность S (уровень среднеквадратической

погрешности 1%). В результате получают квазиэкспериментальные величины интенсивностей $I_i^{кэ}$

$$I_i^{кэ} = I_i^{теор} (1 + pS), \quad (2)$$

где p - случайный параметр, равномерно принимающий значения ± 1 .

Результаты анализа предложенным способом по квазиэкспериментальным данным составили 1,22%, 1,33%, 1,47%, 1,17% .

Использование математического планирования по Шеффе (т. е. матрицы планирования и формы уравнений Шеффе) позволило получить более высокую точность результатов РСФА на основе т. н. обобщенных уравнений связи по сравнению с анализом по уравнениям множественной регрессии (при градуировке последних с использованием матрицы планирования Шеффе и - тем более - при градуировке с использованием произвольно заданных составов).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Чемлева Т.А., Микешина Н.Г. В кн.: Новые идеи в планировании эксперимента. Под ред. В.В. Налимова. М.: Наука, 1969. С. 199-208.
2. Блохин М.А., Белов В.Т., Дуймакаев Ш.И., Цопова-Гречишина Л.Н. / Заводская лаборатория. 1973. №9. С. 1081-1085.
3. Белов В.Т., Дуймакаев Ш.И. / Заводская Лаборатория. 1974. №8. С. 958-960.
4. Гурвич Ю.М., Калинин Б.Д., Межевич А.Н. и др. – Аппаратура и методы рентгеновского анализа (АМРА). Вып. 13. Л.: Машиностроение, 1974. С. 122-128.

Экология и рациональное природопользование

ЭКОЛОГИЧЕСКОЕ СОПРОВОЖДЕНИЕ ПРИ РАЗРАБОТКЕ ОБОСНОВАНИЯ ИНВЕСТИЦИЙ В СТРОИТЕЛЬСТВО (НА ПРИМЕРЕ САРАТОВСКО-БЕРКУТОВСКОЙ ГРУППЫ МЕСТОРОЖДЕНИЙ РБ)

Беликова Н.Г., Клейменова И.Е., Донецкова А.А.
ООО «ВолгоУралНИПИгаз»
Оренбург, Россия

Основным элементом обоснования инвестиций в строительство является экологическое сопровождение, а точнее проведение оценки воздействия намечаемого строительства объектов на окружающую природную среду с целью предупреждения возможной деградации окружающей среды под влиянием намечаемой хозяйственной деятельности, обеспечения экологической стабильности района размещения объекта строительства, создания благоприятных условий жизни населения. Экологическая оценка территории предшествует принятию решения об инвестициях в реализацию проекта.

На начальном этапе работ по экологическому сопровождению намечаемой деятельности была проведена оценка современного состояния территории. В качестве источников исходной информации были использованы опубликованные и фондовые материалы, а также результаты проведенных в рамках этой работы рекогносцировочных исследований поверхностных и подземных вод, атмосферного воздуха и почв.

На следующем этапе экологического сопровождения были обозначены экологические требования и ограничения на ведение работ на данной территории. Эти ограничения должны быть учтены при проектировании объектов инфраструктуры:

- соблюдение 5-ти километрового размера санитарно-защитных зон для проектируемых объектов подготовки и переработки газа в соответствии с требованиями СанПиН 2.2.1/2.1.1.1200-03;
- запрещение размещения объектов добычи, подготовки и переработки газа в водоохраной