

Методичні вказівки до лабораторних занять з дисципліни «Методи досліджень хіміко-технологічних систем і процесів»

У підготовці магістрів за спеціальністю “Хімічні технології та інженерія” дисципліна «Методи досліджень хіміко-технологічних систем і процесів» є важливим світоглядним курсом, мета якого полягає в наданні теоретичних і практичних знань з методів математичного планування експерименту, моделювання хіміко-технологічних процесів на різних масштабних рівнях хіміко-технологічних систем, основ системного аналізу в хімічній технології, розрахунку, аналізу, синтезу, оптимізації і керуванню процесами хіміко-технологічних систем.

Лабораторні заняття з даної дисципліни – важливий етап підготовки студентів до самостійного рішення інженерних задач. Її виконання дозволить студентам закріпити і поглибити отримані в процесі навчання теоретичні і практичні знання про методологію експерименту, сформувані вміння та навички планування експерименту у хімії та хімічній технології та вирішення питань оптимізації хімічних процесів або складу багатокомпонентних продуктів.

Вирішення більшості проблем у хімії і хімічній технології пов'язане із проведенням складних і дорогих експериментів. Звідси зрозуміле значення методів оптимального планування експерименту, що дозволяють у ряді випадків істотно скоротити витрати часу і матеріальних ресурсів на виконання дослідницьких робіт.

Довгий час порядок проведення експерименту цілком визначався особистим досвідом і інтуїцією дослідників. Перші спроби застосування математичних методів для оптимального планування експерименту були зроблені англійським математиком Р. Фішером на початку 20-х років минулого сторіччя. Особливо швидкими темпами теорія планування експерименту стала розвиватися після 1951 р. в зв'язку з роботами Д. Бокса і К. Уілсона.

У сучасній математичній теорії оптимального планування експерименту існують два основних розділи:

1. Планування експерименту для вивчення механізмів складних процесів і властивостей багатокомпонентних систем;
2. Планування експерименту для оптимізації технологічних процесів і властивостей багатокомпонентних систем.

Приставаючи до виконання експерименту в лабораторії, хіміки завжди визначають програму дій, що називається **плануванням експерименту**. Мета любого експерименту полягає в отриманні певного об'єму нової інформації про досліджувану речовину або про певний хіміко-технологічний процес її отримання. У ході виконання досліду використовується дороге обладнання, реактиви. Для того, щоб експеримент проходив оптимально, необхідно звести до мінімуму всі витрати на його здійснення. Тому, складаючи програму експериментальних досліджень, насамперед планується кількість дослідів та умови їх проведення.

Важливою задачею планування експерименту є мінімізація витрат при проведенні досліджень. При цьому, як правило, ставиться завдання одержання даних з максимальною точністю. Однак це вимагає підвищення числа експериментів, а виходить, збільшується і його вартість. Внаслідок цього виникає задача **оптимізації постановки експерименту**.

Методично експерименти можуть бути проведені різними способами. Традиційний метод постановки експериментів полягає в тому, що змінюють який-небудь із параметрів, а інші підтримують постійними. Цей прийом зветься однофакторним експериментом. Очевидно, що така постановка експериментів вимагає проведення великої кількості експериментів.

Метод багатфакторного експерименту передбачає дослідження спільної дії основних параметрів і дозволяє при правильній організації процесу дослідження істотно скоротити загальне число експериментів у порівнянні з однофакторним експериментом. Так, у випадку одночасного вивчення впливу чотирьох параметрів серіями із шести паралельних експериментів при

однофакторному експерименті потрібно провести 1440 експериментів, а при багатофакторному експерименті для досягнення тих же результатів – 96 експериментів, тобто в 15 разів менше.

Для постановки задачі по плануванню експерименту необхідно, насамперед, визначитися з вибором типу моделі досліджуваного процесу – статистичної або детермінованої. При складності досліджуваного процесу, множинності факторів впливу і неочевидності вибору серед них основних факторів, що впливають на нього найбільш значимим образом, перевага віддається моделі **«чорного ящика»**. Для побудови такої моделі необхідно визначитися з вибором функції відгуку, що повинна бути величиною кількісної, з яким фізичним змістом і ефективно описувати властивості об'єкта дослідження. Також важливо визначитися з вибором факторів (параметрів) досліджуваного процесу – деякі незалежні змінні, які можна задати і фіксувати з достатнім ступенем точності.

Слід зазначити, що модель чорного ящика дозволяє одержати математичний опис процесу (тобто його математичну модель) навіть при відсутності відомостей про його механізм. При цьому до цієї моделі можна застосовувати методи оптимального планування експерименту.

В теорії математичного планування експерименту незалежні змінні величини, що впливають на перебіг хіміко-технологічного процесу називають **впливаючими факторами**. Так, впливаючими факторами можуть бути температура, тиск, склад вихідної реакційної суміші і т.д. Дані величини при плануванні експерименту позначають літерами x_1, x_2, x_n . Фактори, які характеризуються певними цифровими значеннями (температура, тиск, концентрація), називаються **кількісними**. Фактори, які не характеризуються цифровими значеннями (наприклад, наявність або відсутність каталізатору), називаються **якісними**.

Перебіг хіміко-технологічного процесу кількісно характеризується однією або декількома величинами (наприклад продуктивністю обладнання, собівартістю продукції і т.д.), що в теорії планування експерименту

називають **функціями відгуку** та позначають, наприклад, літерами y_1, y_2, y_n . Функції відгуку залежать від впливаючих факторів.

Геометричний образ, що відповідає функції відгуку, називають **поверхнею відгуку** (рис.1), а координатний простір, по осях якого відкладені впливаючі фактори – **факторним простором**.

Для зручності поверхня відгуку може бути зображена на площині в координатах x_1 та x_2 лініями, що відповідають постійним значенням функції відгуку. Це робиться аналогічно до зображення рельєфу на географічних картах.

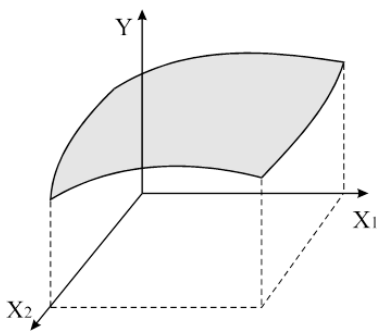


Рис.1. Поверхня відгуку та її проекція на факторний простір.

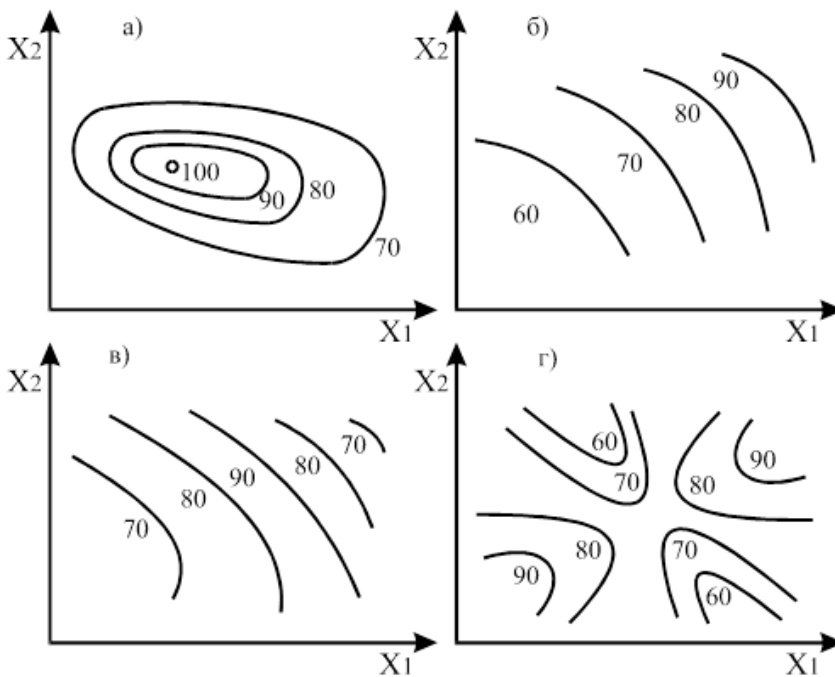


Рис.2. Типи поверхонь відгуку.

На рис.2 зображені деякі типи поверхонь відгуку. В якості прикладу функції відгуку беремо ступінь чистоти продукту хімічної реакції $A+B$, що надано у відсотках. На рис.2.а. поверхня відгуку має вигляд “**вершини**” та відповідає області значень факторів, де знаходиться максимум величини y . Аналогічний вигляд мають лінії постійного рівня у випадку мінімуму функції y (тип “**западина**”). Поверхня, що зображена на рис.2.б, характеризує повільне зростання функції відгуку зі збільшення значень факторів x_1 та x_2 . Такий тип поверхонь називають “**стаціонарним зростанням**” (протилежний випадок – “**стаціонарне зменшення**”). Поверхня, що наведена на рис.2.в називається “**хребтом**”. Його вершина відповідає найбільшим значенням функції відгуку. Аналогічно розташована лінія постійних значень функції відгуку у випадку типу поверхні “**яр**”, що відповідає мінімальним значенням функції відгуку. На рис.2.г зображено поверхню, що називається “**сідлом**”. На двох ділянках даної поверхні ми спостерігаємо зростання функції відгуку, а на двох інших - її зменшення. Слід зауважити, що на практиці зустрічаються поверхні відгуку більш складної форми, які являють собою комбінацію наведених типів поверхонь.

Отже, будь-який процес можна описати деякою математичною моделлю. У чому ж основна цінність такого математичного опису? У тім, що воно, по-перше, подає кількісну інформацію про вплив факторів; по-друге, дозволяє кількісно визначити значення функції відгуку при заданому режимі ведення процесу; по-третє, є основою для оптимізації процесу.

ЛАБОРАТОРНІ РОБОТИ

Лабораторна робота № 1

ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ ЗМ'ЯКШЕННЯ ВОДИ ВАПНЯНО-СОДОВИМ МЕТОДОМ

Мета роботи: Розробити математичну модель процесу зм'якшення води і оптимізувати його методом крутого сходження. В якості незалежних змінних

використати масу наважки $\text{Ca}(\text{OH})_2$ (x_1) та масу наважки Na_2CO_3 (x_2). Функція відгуку математичної моделі – загальна жорсткість води. Нульові рівні факторів та інтервали їх варіювання вказані в грамах на 500 мл води:

Варіанти завдань	1	2	3	4
Нульовий рівень фактора x_1	0,10	0,12	0,14	0,15
Інтервал варіювання фактора x_1	0,02	0,03	0,04	0,05
Нульовий рівень фактора x_2	0,03	0,05	0,07	0,09
Інтервал варіювання фактора x_2	0,01	0,02	0,03	0,04

Лабораторна робота № 2

ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ ТЕРМІЧНОЇ СТІЙКОСТІ ХАРЧОВОЇ СОДИ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ

Мета роботи: Розробити математичну модель процесу розкладання харчової соди NaHCO_3 при додаванні її в гарячі розчини. В якості незалежних змінних використати наважку харчової соди (x_1) та температуру води (x_2). Функція відгуку математичної моделі – ступінь розкладання харчової соди: $X = (C_0 - C)/C_0$. Нульовий рівень фактору x_1 та інтервал його варіювання вказані в грамах на 100 мл води:

Варіанти завдань	1	2	3	4
Нульовий рівень фактора x_1 , г	1,0	1,5	1,8	2,0
Інтервал варіювання фактора x_1 , г	0,1	0,1	0,2	0,3
Нульовий рівень фактора x_2 , °C	80	85	90	95
Інтервал варіювання фактора x_2 , °C	5	5	5	5

Рекомендована література

1. Бондарь А.Г. Математическое моделирование в химической технологии. – Киев: Выща школа, 1973. – 279 с.
2. Бондарь А.Г., Статюха Г.А. Планирование эксперимента в химической технологии. Основные положения, примеры и задачи – Киев: Вища школа, 1976. – 219 с.
3. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1982. – 288 с.
4. Рузинов Л.П., Слободникова Р.И. Планирование эксперимента в химической технологии. – М.: Химия, 1980. – 280 с.
5. Царева З.М., Орлова Е.И. Теоретические основы химической технологии. Учебное пособие. – Киев: Выща шк., 1986. – 260 с.
6. Расчеты химико-технологических процессов. Учебное пособие / Под ред. И.П. Мухленова. – Л.: Химия, 1982. – 248 с.