

Завдання на лабораторну роботу №12, 13

Тема: Перевірка відтворюваності дослідів. Використання методів повного факторного експерименту при плануванні складного хіміко-технологічного процесу
(Табличний редактор Excel)

Описати і знайти оптимальні умови перебігу хіміко-технологічного процесу $A \Rightarrow B$. Функцію відгуку Y – вихід кінцевого продукту B (в %). Фактори, що впливають на перебіг процесу: температура реакційної суміші в реакційному апараті – x_1 ($^{\circ}C$), тиск в реакційному апараті – x_2 (атм).

Умови проведення повного двофакторного експерименту:

Характеристика плану	x_1	x_2
Базисний рівень	500	300
Інтервал вар'ювання	20	10
Верхній рівень	520	310
Нижній рівень	480	290

Робота №12. Перевірка відтворюваності дослідів.

Перед тим, як приступити до планування експерименту, необхідно перевірити відтворюваність дослідів.

Вимоги проведення та результати серій паралельних дослідів:

№	X_1	X_2	паралельні дослідів			$Y_e(\text{сер})$	S_j^2
			Y_{j1}	Y_{j2}	Y_{j3}		
1	-1	-1	27,6	28,2	27,5	27,77	0,143
2	-1	+1	52,7	53,2	52,6	52,83	0,103
3	+1	-1	17,3	17,6	17,4	17,43	0,023
4	+1	+1	64,2	63,9	63,9	64,0	0,030

1. Необхідно розрахувати середнє значення функції відгуку в кожній серії ($Y_p(\text{сер})$), а також оцінку дисперсії серій паралельних дослідів (колонки 7,8).

2. Розрахункове значення критерію Кохрена складає $G_{\text{роз}}=0,4778$.

3. Граничне значення критерію Кохрена для $f=2$ і $N=4$ складає $G_{\text{кр}}=0,768$.

Так як розрахункове значення критерію Кохрена менше за граничне, то дослідів – **відтворювані**.

Робота №13. Планування експерименту методом повного двофакторного експерименту.

Рівняння, що описує повний двофакторний експеримент має вигляд:

$$Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_{12} X_1 X_2 \quad (1)$$

Матриця планування повного двофакторного експерименту:

№	X_1	X_2	Y експ	Y розр
1	-1	-1	27,77	27,9750
2	-1	+1	52,7	53,0417
3	+1	-1	17,43	17,2250
4	+1	+1	64,0	63,7917

Результати розрахунків:

Коефіцієнти регресії становлять:

$$b_0=40,5083 \quad b_1=17,9083 \quad b_2=0,2083 \quad b_{12}=5,3750$$

Середнє значення оцінок дисперсії: $S_y^2=0,1015$

Оцінка дисперсії визначення коефіцієнтів регресії: $S_b^2=0,0254$

Критерій Ст'юдента: $t = 4,3$ (для $f=2$).

Перевірка значимості коефіцієнтів регресії: так як $|b_2| < S_b * t$ (0.685), то він вважається "не значимим" і його виключаємо із рівняння регресії.

Результати розрахунків функції відгуку ($Y_{розр}$) за рівнянням (1) наведено в таблиці у 5-му стовпчику.

На основі одержаних значень коефіцієнтів регресії знайти за рівнянням (1) розрахункові значення функції відгуку ($Y_{розр}$, колонка 5).

Змінюючи значення впливаючих факторів X_1 та X_2 через 0,25 від -1 до $+1$ (відповідно температури через кожні 5°C , тиску через 2,5 атмосфери) розрахувати на основі рівняння (1) вихід продукту Y , побудувати зміну функції відгуку на факторному просторі і вибрати оптимальні значення впливаючих факторів, при яких вихід продукту хіміко-технологічного процесу буде максимальним.

Завдання на лабораторну роботу №14

Тема: Використання симплексних методів і контурно-графічного аналізу при плануванні хіміко-технологічного процесу
(Табличний редактор Excel)

Провести планування умов проведення хіміко-технологічного процесу з використанням $\{3,3\}$ –симплексної ґратки. Знайти залежність зміни виходу продукту реакції Y від концентрації вихідних речовин X_1 , X_2 , X_3 (мольні долі). Скласти програму для розрахунку мовою Basic, на її основі одержати значення функції відгуку Y (вихід кінцевого продукту). З використання методу контурно-графічного аналізу і трьохвимірної графіки програми Origin побудувати за допомогою ліній постійного рівня проекцію функції відгуку на факторний простір. Описати одержану поверхню, зробити висновок про найбільш оптимальні умови проведення даного хіміко-технологічного процесу.

Матриця планування на симплексі ($\{3,3\}$ –симплексна ґратка) наведена в таблиці:

№	X_1	X_2	X_3	відгук	Y (варіант 1)	Y (варіант 2)
1	1	0	0	Y_1	20	80
2	0	1	0	Y_2	50	20
3	0	0	1	Y_3	80	50
4	2/3	1/3	0	Y_{112}	30	60
5	1/3	2/3	0	Y_{122}	40	40
6	0	2/3	1/3	Y_{223}	60	30
7	0	1/3	2/3	Y_{233}	70	40
8	2/3	0	1/3	Y_{113}	40	70
9	1/3	0	2/3	Y_{133}	60	60
10	1/3	1/3	1/3	Y_{123}	100	100

Використовуючи метод контурно-графічного аналізу побудувати проекцію функції відгуку за допомогою ліній постійного рівня (при наступних значеннях Y : 20, 40, 60, 80).

Завдання на лабораторну роботу №15

Тема: Оптимізація хіміко-технологічних процесів з використанням методу ортогональних латинських квадратів та прямокутників (ОЛКП)
(Табличний редактор Excel)

Здійснити оптимізацію хіміко-технологічного процесу одержання амоніаку з використанням кількісних та якісних впливаючих факторів: X_1 – температура в реакційному апараті ($^{\circ}\text{C}$), X_2 – тиск в реакційному апараті (атм), X_3 – вміст ферум (II) оксиду в каталізаторі (%). Підібрати оптимальні умови перебігу процесу, коли вихід продукту реакції (амоніаку) буде максимальний. Розрахунки провести з використанням редактору електронних таблиць Excel.

Характеристика плану	Рівні варіювання		
X_1 – температура, $^{\circ}\text{C}$	500	520	540
X_2 – тиск, атм	300	310	315
X_3 – вміст FeO , %	26	30	40

Умови проведення експерименту з використанням схеми 3×3 :

№ досліду	X_1	X_2	X_3	Y_j
1	500	300	26	25
2	500	310	40	18
3	500	315	30	57
4	520	310	30	62
5	520	315	26	41
6	520	300	40	32
7	540	315	40	40
8	540	300	30	64
9	540	310	26	29
Середнє значення функцій відгуку:				40,89

Результати розрахунків:

Ефекти впливаючих факторів на відповідних рівнях			
Фактор	Рівень		
	1	2	3
X_1	-7,56	4,11	3,44
X_2	-0,56	-4,56	5,11
X_3	-9,22	20,11	-16,89

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	№ досліду	X ₁	X ₂	X ₃	Y _j				ефекти	
2	1	500	300	26	25		Фактор/рівень	1	2	3
3	2	500	310	40	18		X1	-7,56	4,11	3,44
4	3	500	315	30	57		X2	-0,56	-4,56	5,11
5	4	520	310	30	62		X3	-9,22	20,11	-16,89
6	5	520	315	26	41					
7	6	520	300	40	32					
8	7	540	315	40	40					
9	8	540	300	30	64					
10	9	540	310	26	29					
11			Середнє значення	40,89						
12										
13										
14										

Рис. Загальний вигляд вікна програми Excel з результатами розрахунків

Завдання на лабораторну роботу №16

Тема: Термодинамічний аналіз перебігу хімічних реакцій
(Табличний редактор Excel)

Дати аналіз перебігу хімічної реакції на основі розрахунку зміни значень енергії Гіббса та константи рівноваги від температури, якщо відомі значення ентальпії та ентропії при стандартних умовах для вихідних речовин і продуктів реакції. Розрахунки провести з використанням редактору електронних таблиць Excel. Одержані результати представити у вигляді таблиці і відповідних графіків температурної залежності (з використанням Origin).

1. Визначить енергію Гіббса реакції (ΔG_p) і константу рівноваги K_p при 298 K для реакцій.
2. Визначить зміну значень K_p в температурному інтервалі від 298 до 1098 K через кожні 100 K.
3. При яких температурних умовах можливий перебіг реакцій в прямому напрямку.
4. Як впливає зміна температури на стан рівноваги в системі, який фактор – ентальпійний або ентропійний – визначає можливість даної реакції.

Варіант 1. $\text{H}_2\text{O}_{(г)} + \text{CO}_{(г)} \rightleftharpoons \text{H}_{2(г)} + \text{CO}_{2(г)}$

Варіант 2. $\text{NH}_4\text{Cl}_{(к)} \rightleftharpoons \text{NH}_{3(г)} + \text{HCl}_{(г)}$

Необхідні термодинамічні характеристики, що використовуються при розрахунках (стандартні ентальпія та ентропія утворення) всіх речовин наведені в таблиці:

речовина	ΔH° , Дж/моль	ΔS° , Дж/мольК
CO (г)	-110520	197,54
H ₂ O (г)	-241820	188,72
CO ₂ (г)	-393510	213,68

H ₂ (г)	0	130,52
NH ₄ Cl (к)	-314200	95,8
NH ₃ (г)	-46190	192,6
HCl (г)	-91800	186,8

Результати розрахунків:

Т, К	Варіант 1		Варіант 2	
	ΔG_p	K _p	ΔG_p	K _p
298	-28636,4	105208,9	91337,19	$8,29 \cdot 10^{-17}$
398	-24430,14	1614,13	63337,19	$4,82 \cdot 10^{-9}$
498	-20224,14	132,551	34977,19	$2,13 \cdot 10^{-4}$
598	-16018,14	25,11	6617,19	0,2642
698	-118121,4	7,66	-21742,82	42,458
798	-7606,14	3,15	-50102,82	1911,06
898	-34000,14	1,58	-78462,82	36844,13
998	805,85	0,91	-106822,8	392579,3
1098	5011,85	0,58	-135182,8	2718428