

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ДИАГРАММ СОСТАВ-СВОЙСТВО ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ WOLFRAM MATHEMATICA

Рукк Н.С., Замалютин В.В., Осипов Р.А., Скрыбина А.Ю., Грамма В.А.

Московский государственный университет тонких химических технологий
им. М. В. Ломоносова (МИТХТ им. М. В. Ломоносова),
Россия, 119571, Москва, проспект Вернадского, д. 86, тел. (495) 936-89-12
e-mail: roukkn@inbox.ru, r.a.osipov@gmail.com

Известно, что изучение диаграмм состояния многокомпонентных систем представляет собой сложную и трудоемкую задачу. Обычно при исследовании зависимостей состав-свойство экспериментальные данные известны не для всей области составов, а только для ее отдельных локальных областей. В этой связи, при изучении закономерностей изменения свойств в гомогенных системах, прибегают к методам планирования эксперимента, которые позволяют значительно уменьшить трудоемкость исследования при одновременном адекватном математическом описании поверхности отклика, при условии, что изучаемое свойство является непрерывной функцией аргументов и может быть представлено с необходимой точностью приведенным полиномом n -ого порядка [1].

Цель настоящей работы заключается в применении математического пакета **Wolfram Mathematica** [2] для обработки экспериментальных данных по растворимости в тройных системах методом симплексных решеток Шеффе [3].

В качестве примера рассмотрены области гомогенности в тройных системах $\text{LnI}_3 - \text{L} - \text{H}_2\text{O}$, ($\text{Ln} = \text{La-Lu}$; L – органический лиганд), для которых составлены матрицы планирования, а также получены полиномиальные уравнения различных порядков, описывающие растворимость образующегося в каждой системе комплексного соединения как функцию состава. Адекватность полученных уравнений проверена с использованием контрольных точек. Составлена также универсальная программа, позволяющая реализовывать данный метод планирования эксперимента для большого числа систем, а также представлять полиномы в аналитическом виде и визуализировать соответствующие поверхности отклика. Наглядно показана закономерность изменения растворимости соединений по ряду лантаноидов, а также ее уменьшение при увеличении концентрации лиганда.

Литература.

1. Scheffe H. Simplex – centroid design for experiments with mixtures // *J. Roy. Statist. Soc. B* **25**, 1963. P. 235-263.
2. <http://www.wolfram.com/mathematica>
3. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. – М.: Высшая школа, 1978. 319 стр.