



6. Как нам преобразовать образование? (материалы круглого стола) / А.Я. Данилюк [и др.] // Педагогика. – 2010. – № 6. – С. 98-112.
7. Масюкова, Н.А. Формирование стратегии обучения в виде дидактических сценариев уроков / Н.А. Масюкова // Столичное образование. – 2010. – № 6. – С. 16-22.
8. Масюкова, Н.А. Модель дидактических сценариев уроков в условиях современной образовательной среды / Н.А. Масюкова // Столичное образование. – 2010. – № 7. – С. 18-30.
9. Пальчевский, Б.В. Учебно-методический комплекс: структура, содержание, готовность авторов к разработке / Б.В. Пальчевский // Столичное образование. – 2010. – № 7. – С. 5-17.
10. Фельдштейн, Д.И. Приоритетные направления психолого-педагогических исследований в условиях значимых изменений ребенка и ситуации его развития / Д.И. Фельдштейн // Педагогика. – 2010. – № 7. – С. 3-11.
11. Химия: учеб. пособие для 10-го кл. учрежд, обесп получение общ.сред.образования, с рус.яз. обучения с 12-л сроком обуч (баз и повыш. ур.) / А.П. Ельницкий [и др.]. – 2-е изд. – Минск.: Нар. света, 2007. – 319 с.

УДК 519.6

А.С. НЕВЕРОВ

*УО «Белорусский государственный университет транспорта»,
г. Гомель*

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА СИМПЛЕКС-РЕШЕТЧАТОГО ПЛАНИРОВАНИЯ В ПРАКТИКЕ ПРОВЕДЕНИЯ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО ХИМИИ

В последнее время большое внимание уделяется использованию вычислительной техники и методов математического планирования в учебном процессе. Однако, в лабораторном практикуме по химии, где до сих пор основное применение находит пробирочный эксперимент, эти методы практически не используются. Одной из причин этого является многофакторный характер реакционных систем, сложный состав исходных реагентов и продуктов реакции.

Тем не менее, состав любой многокомпонентной системы можно свести к системе из трех и даже двух компонентов, объединяя компоненты в группы с определенным соотношением компонентов в каждой из групп. Это позволяет использовать сравнительно простые методы математического планирования при реализации химического эксперимента, доступные для практического осуществления даже для студентов младших курсов.

Однако планирование эксперимента при изучении даже тройных систем связано с известными трудностями, поскольку переменные величины (относительное содержание компонентов x_i) не являются независимыми ($\sum x_i = 1$). В



этих случаях симплекс-решетчатые планы, предложенные Шеффе, обеспечивают равномерный разброс экспериментальных точек по $(q-1)$ – мерному симплексу. Экспериментальные точки представляют (q, n) решетку на симплексе, где q – число компонентов, а n – степень полинома. Опыт использования нами таких планов для исследования трехкомпонентных систем на основе полимеров показал, что моделирование зависимостей физико-механических характеристик материалов от состава композиций полиномами низших степеней (1-я, 2-я, 3-я степени), как правило, не отвечает требованиям адекватности вследствие сложности поверхности отклика. Удовлетворительные результаты получены при использовании полинома 4-й степени. Применение полиномов более высоких степеней нежелательно, поскольку объем и сложность вычислений при этом существенно возрастают. Общий вид полинома 4-й степени может быть представлен следующим уравнением:

$$Y = \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{12} X_1 X_2 + \gamma_{12} X_1 X_2 \cdot (X_1 - X_2) + \gamma_{13} X_1 X_3 \cdot (X_1 - X_3) + \gamma_{23} X_2 X_3 \cdot (X_2 - X_3) + \delta_{12} X_1 X_2 \cdot (X_1 - X_2)^2 + \delta_{13} X_1 X_3 \cdot (X_1 - X_3)^2 + \delta_{23} X_2 X_3 \cdot (X_2 - X_3)^2 + \beta_{1123} X_1^2 X_2 X_3 + \beta_{1223} X_1 X_2 X_2^2 + \beta_{1233} X_1 X_2 X_3,$$

где Y – расчетное значение функции; X_1, X_2, X_3 – количество компонентов композиции в долях единицы; δ, β, γ – расчетные коэффициенты.

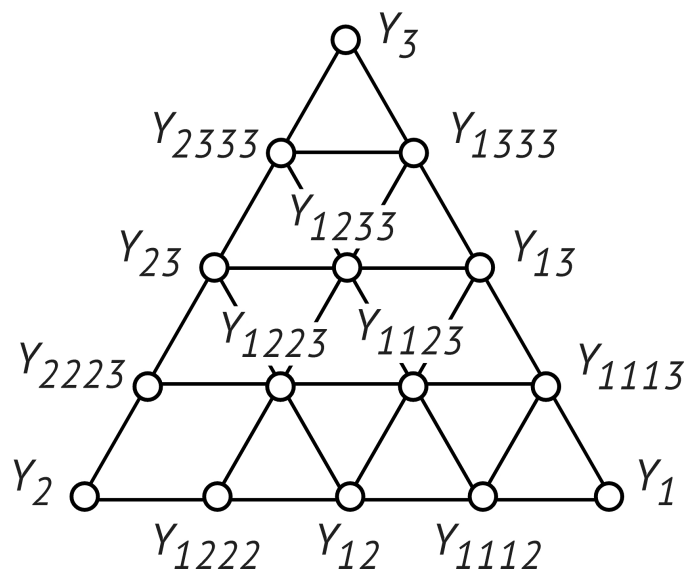


Рисунок 1 – Решетка 4-й степени, используемая в симплекс-решетчатом планировании, с обозначением откликов

В соответствии с этим методом планирование эксперимента осуществляют на симплексе (треугольной диаграмме состояния, рис. 1) с использованием планов, обеспечивающих равномерный разброс по нему экспериментальных точек. Точками таких планов являются узлы симплексных решеток. В каждой точке плана реализуют по два параллельных эксперимента и вычисляют среднее значение исследуемого параметра \hat{Y} . Индексы и обозначения свойства смеси (Y)



указывают на относительное содержание каждого компонента в смеси. Например, если смесь состоит из $\frac{1}{4}$ компонента X_1 , $\frac{1}{2}$ компонента X_2 и $\frac{1}{4}$ компонента X_3 , свойство в этом случае обозначается Y_{1223} .

Используя предложенную Шеффе математическую модель можно по результатам сравнительно небольшого количества экспериментов, реализованных для каждой точки плана, рассчитать значение исследуемого параметра для любого соотношения компонентов тройной системы.

Этот метод планирования можно использовать для анализа любой многокомпонентной системы, составные части которой можно объединить в три группы по тому или иному признаку. В частности, с помощью разработанной нами компьютерной программы, можно находить оптимальное соотношение реагентов в химических реакциях третьего порядка, обеспечивающее максимальную скорость их протекания. Лабораторная работа по исследованию кинетики химических реакций с использованием этого метода включена в рабочую программу дисциплины «Физическая химия», и уже четвертый учебный год успешно апробируется на кафедре химии БелГУТа [1]. В процессе выполнения работы студенты варьируют соотношение реагентов в соответствии с определенным симплексным планом и в каждой точке плана определяют скорость реакции. Полученные данные вводятся в компьютер, который распечатывает треугольную диаграмму с нанесенной на ней системой изолиний. Широкие перспективы открываются для использования методики и в других учебных дисциплинах. Нами симплекс-решетчатое планирование применено в строительной химии для анализа и оптимизации технологических и эксплуатационных характеристик материалов на основе полимерцементных композиций. Используя компьютерную программу, рассчитывали координаты линий постоянного значения всех исследуемых свойств. Затем на симплекс наносили изолинии предельных значений нескольких наиболее существенных для эксплуатации данного материала параметров (например, удобоукладываемость, прочность, твердость), ограничивающих область оптимального состава материала.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Неверов, А.С. Физическая и коллоидная химия: учебное пособие / А.С. Неверов, О.А. Стоцкая, О.А. Ермолович и др. – Гомель: БелГУТ, 2009. – 126 с.