

ОПТИМІЗАЦІЯ УМОВ СИНТЕЗУ $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ РЕАКТИВНОЇ ЧИСТОТИ З ВИКОРИСТАННЯМ ФУНКЦІЇ БАЖАНОСТІ ХАРРІНГТОНА

Л.В. Войтенко, кандидат хімічних наук

В.А. Копілевич, доктор хімічних наук

Національний університет біоресурсів і природокористування України

З метою прискорення і оптимізації умов синтезу $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ реактивної чистоти виконано математичне планування експерименту за планом Бокса-Уїлсона. В якості критерію оптимізації трьох функцій відгуку використано функцію бажаності Харрінгтона, яка об'єднала різні за фізичним змістом вимоги до хімічного складу реактиву та технології його одержання. Вже при виконанні плану репліки, навіть без проведення пошуку оптимуму та складання поліноміальної моделі, було встановлено умови, що повністю задовольнили вимогам. Ступінь відповідності складу продукту вимогам до реактиву кваліфікації "хімічно чистий" доведено методами хімічного аналізу та РФА.

Вступ. Традиційні методи визначення умов синтезу хімічних речовин пов'язані з експериментами, які потребують значних витрат часу та зусиль, оскільки є переважно "пасивними", тобто базуються на варіюванні окремих незалежних змінних в умовах, коли решту намагаються зафіксувати незмінними. Експерименти, як правило, багатofакторні, пов'язані з одночасною оптимізацією кількох параметрів. Тому, незважаючи на значну кількість виконаних синтезів, через неможливість достатньо повно дослідити усі можливі комбінації факторів впливу, багато рішень приймаються на основі випадкової інформації і через це далекі від оптимальних. Виходом стали статистичні методи планування експерименту, запропоновані Р. Фішером, який показав доцільність одночасного варіювання усіх факторів впливу на про-

факторному експерименту [1]. Наступний етап – планування екстремального експерименту, вперше запропоноване Боксом та Уїлсоном [2]. Ідея полягала в послідовному проведенні невеликих серій дослідів, у кожній з яких усі фактори одночасно варіюються за певними правилами. Серії організуються таким чином, щоб після математичної обробки попередньої можна спланувати умови проведення наступної серії до досягнення області оптимуму. Важливою перевагою цього методу є універсальність, придатність для пошуку оптимуму різноманітних технологічних процесів [3], наприклад, у харчовій, мікробіологічній, сільськогосподарській, біотехнологічній галузях [4–7] і навіть у політиці [9]. Зручним способом консолідації різних за фізичним змістом критеріїв оптимізації в одну величину виступає об'єднана функція бажаності Харрінгто-

Таблиця 1. Базові значення психофізичної шкали бажаності Харрінгтона [10]

Кількісна позначка на шкалі бажаності Харрінгтона	Бажаність значення критерію Y
0,80 – 1,00	дуже добре
0,63 – 0,80	добре
0,37 – 0,63	задовільно
0,20 – 0,37	погано
0,00 – 0,20	дуже погано

на [10]. Вона виникла в результаті спостережень за реальними рішеннями експериментаторів і має такі корисні властивості, як неперервність, монотонність та згладжуваність. Математичний апарат перерахунку конкретних параметрів у абстрактні числові значення використовує логістичну функцію Харрінгтона – d – так звану "криву бажаності", яка визначає емпірично виведену функцію з двома ділянками насичення (в $d \rightarrow 0$ та $d \rightarrow 1$) і лінійну ділянку (від $d = 0,20$ до $d = 0,63$). Вісь Y – шкала часткових показників, а вісь d – шкала бажаності. Проміжок ефективних значень на шкалі часткових показників лежить в межах від -6 до +6, хоча можливі й інші варіанти. В табл. 1 показано принцип побудови шкали бажаності [10].

Такий вибір числових позначок пояснюється зручністю обчислень, оскільки $d = 0,6 \sim 1 - 1/e$, а $d = 0,37 \sim 1/e$.

Шкала d – безрозмірна, тому за її допомогою будь-який відгук можна перетворити так, щоб інтерпретувати у термінах корисності або бажаності для будь-якої області – від хімічного синтезу до політології, медицини, екології [11] і навіть оцінки конкурентоспроможності виробництва [12].

Результати та їх аналіз. Синтез $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ здійснювали наступним чином: фіксований об'єм дистильованої води нагрівали до заданої температури. При постійному перемішуванні вносили розчин H_3PO_4 обраної концентрації до досягнення рН 3,0–3,3 та твердий по-

рошкуватий кобальт(II) гідроксокарбонат. Після змішування реагентів продовжували синтез протягом заданої тривалості синтезу. Об'єм суміші підтримували постійним додаванням дистильованої води, нагрітої до температури синтезу. Після закінчення суспензію охолоджували, відділяли осад фільтруванням на вакуумному фільтрі, промивали дистильованою водою і сушили до постійної маси за 40–60°C.

У продуктах синтезу визначали вміст CoO комплексонометричним методом [13]; P_2O_5 – ваговим хінолінмолібденовим методом [14]; H_2O – методом гравіметрії [15]; CO_2 – об'ємної газометрії [16]. Фільтрат (маточний розчин) збирали і визначали в ньому вміст P_2O_5 .

Розробка узагальненого параметра оптимізації процесу синтезу $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. При математичному моделюванні процесу одержання гідратованого кобальт(II) ортофосфату до розгляду прийнято три фактори, які впливають на якість готового продукту та його вихід. Оскільки вимоги до характеристик $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ базуються на його призначенні – реактив хімічно чистої кваліфікації "хч" (повинен містити не більше 0,1% домішок за вимогами ДСТУ 2216-93 "Реактиви та особливо чисті речовини. Позначення та методи визначення чистоти. Терміни та визначення"), а також вимог екологічності та економічності – маточний розчин повинен містити якомога менше залишків вихідних реагентів. Отже, перелік факторів оптимізації включає:



1. Мольне співвідношення $K=CoO:P_2O_5$ повинно бути максимально близьким до 3, що відповідає його теоретичному значенню в індивідуальній сполуці – Y_1 ;

2. Вміст домішки CO_2 (%) бути мінімальним (за вимогами до сполуки реактивної чистоти – не більше 0,1%) – Y_2 ;

3. Вихід готового продукту (%) за P_2O_5 повинен наблизитися до 100% або у маточному розчині повинен бути мінімальним вміст CoO – Y_3 . Цей чинник опосередковано характеризує також економічність процесу.

Схематичне зображення емпіричної моделі процесу – "чорного ящика" – зображене на рис. 1. У системному аналізі цим терміном називають систему у вигляді непрозорого "ящика", відокремленого від навколишнього середовища, але пов'язаного з ним через систему входів та виходів. При цьому припускається, що про внутрішній зміст системи нічого невідомо і досліджувати її немає сенсу або мети. Модель у цьому випадку відображає дві важливі та суттєві риси системи: цілісність та відокремленість від середовища. Не виключається, що можливим є вплив неврахованих чинників – збурюючих факторів, невідомих дослідників. Для з'ясування цього питання проводиться спеціальна процедура перевірки відтворюваності результа-

тів – функції відгуку за постійності управляючих факторів шляхом проведення паралельних експериментів.

Жоден параметр окремо (Y_1, Y_2, Y_3) не може бути використано як єдиний критерій оптимізації процесу синтезу, оскільки при цьому будуть враховуватися тільки односторонні вимоги до об'єкту дослідження. Для оптимізації процесу виникла необхідність об'єднати показники, що мають різний фізичний зміст та розмірність. Щоб одержати задовольняючий вказаним вимогам узагальнений показник, використали функцію бажаності Харрінгтона [10]. В основі такого методу узагальнення – перетворення натуральних значень часткових показників (y_1, y_2, y_3) у безрозмірні величини (y даній системі d_1, d_2 та d_3) з наступним об'єднанням їх за формулою:

$$D_{об.} = \sqrt[n]{\prod_{i=1}^n d_i} \quad (1)$$

Для визначення значення d_i , що відповідає y_1 , одержаному при хімічному аналізі зразку $Co_3(PO_4)_2 \cdot 8H_2O$ та маточного розчину, використовується наступна залежність:

$$d = \exp[-\exp(-y')], \quad (2)$$

$$d = \exp[-\exp(y')], \quad (3)$$

де $y' = -6 \div +6$, що відповідає граничним значенням $D_{об.}$ [10].

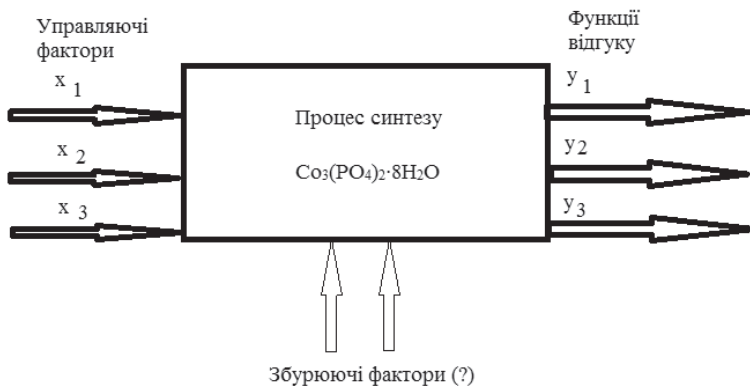


Рис. 1. Математична модель процесу синтезу

Таблиця 2. Приклад розрахунку коефіцієнтів V_{ok} та V_{1k} для фактора з одностороннім (Y_2) та двостороннім обмеженням (Y_1)

Номер інтервалу k	Мольне співвідношення $K = CoO:P_2O_5 - Y_1$			Вміст домішки CO_2 (%) – Y_2		
	Фізичні значення меж інтервалів	V_{ok}	V_{1k}	Фізичні значення меж інтервалів	V_{ok}	V_{1k}
1 (дуже добре)	2,97 – 3,03	-54,282	18,0941	0,10 – 0	-6,00	45,00
2 (добре)	2,95 – 2,97	-28,3607	9,3663	0,20 – 0,10	-2,23	7,28
	3,03 – 3,05	-27,8572	9,3663			
3 (задовільно)	2,90 – 2,95	-15,3086	5,1452	0,30 – 0,20	-2,32	7,72
	3,05 – 3,10	-14,9628	5,1452			
4 (погано)	2,90 – 2,80	-7,5558	2,2650	0,50 – 0,30	-0,75	2,50
	3,10 – 3,20	-6,0339	2,2650			
5 (дуже погано)	2,70 – 2,80	-51,2245	17,8609	1,00 – 0,50	-5,00	11,00
	3,20 – 3,30	-55,9448	17,8609			

Значення d_i можна визначити графічно, однак, враховуючи низьку точність такого методу, було використано аналітичний метод визначення d_i , а потім – D_{00} . Оскільки приймається, що в межах окремих інтервалів y' ділянки шкали Y_i – рівномірні, перехід від Y_i до y' здійснювали за допомогою поліному першого порядку:

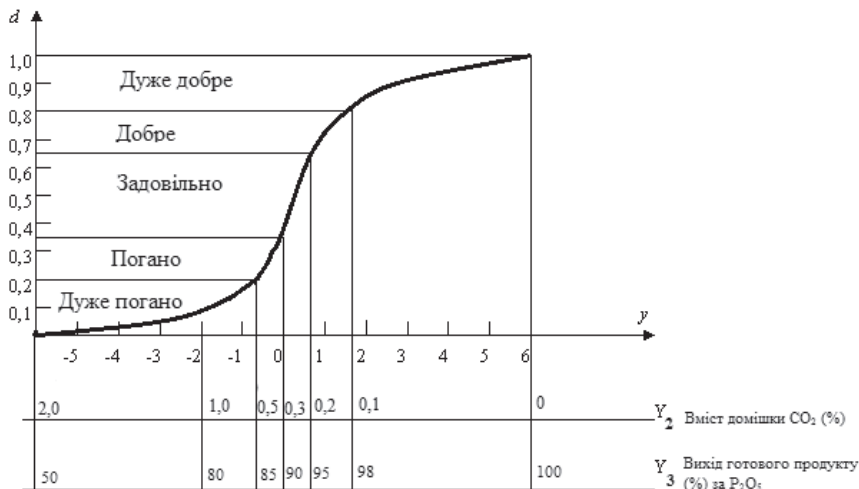
$$y' = V_{ok} + V_{1k} \cdot Y_i, \quad (4)$$

де k – номер інтервалу, в якому знаходиться значення Y_i .

Чисельні значення коефіцієнтів V_{ok} та V_{1k} визначили із системи двох рівнянь для кожного інтервалу (приклад зображено в табл. 2).

Графіки $d=f(y')$ для одностороннього і двостороннього варіантів обмежень зображено на рис. 1 і 2. На цих же графіках наведено шкали Y_1, Y_2, Y_3 у фізичних одиницях з якісною оцінкою їх границь.

При формуванні шкал враховано ре-


Рис. 2. Функція бажаності Харрінгтона $d=f(y')$ для факторів з одностороннім обмеженням (Y_2 та Y_3)



зультати попередніх дослідів та вимоги до якості $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ та процесу його одержання.

У випадку двостороннього обмеження для значень Y_i використовується наступне рівняння для переходу до d_i :

$$d = \exp [-(y')^n], \quad (5)$$

де n – додатне число ($0 < n < \infty$).

Показник n можна розрахувати, надавши деякій величині у значення d (віддавши перевагу інтервалу $0,6 < d < 0,9$) за формулою:

$$n = \frac{\ln \ln \frac{1}{d}}{\ln |y'|}, \quad (6)$$

а y' розраховується за формулою:

$$y' = \frac{2Y - (Y_{\max} + Y_{\min})}{Y_{\max} - Y_{\min}} \quad (7).$$

У випадку, який розглядається в даному дослідженні, двостороннє обмеження стосується параметра оптимізації Y_1 – мольного співвідношення $K = \text{CoO}:\text{P}_2\text{O}_5$. Хімічна природа такого явища пов'язана з тим фактом, що у цільовому ортофосфаті можуть бути присутні різні сполуки в якості небажаних домішок, – гідроксофосфат складу CoHPO_4 , в якого мольне співвідношення $K = \text{CoO}:\text{P}_2\text{O}_5 = 2$, і гідроксофосфат складу Co_2OHPO_4 , в якого $K = \text{CoO}:\text{P}_2\text{O}_5 = 4$. Можна передбачити, що цей критерій оптимізації буде залежати від кількості H_3PO_4 у синтезі. При її надлишку більш ймовірна домішка кислій солі CoHPO_4 , а при недостатці – основної солі Co_2OHPO_4 .

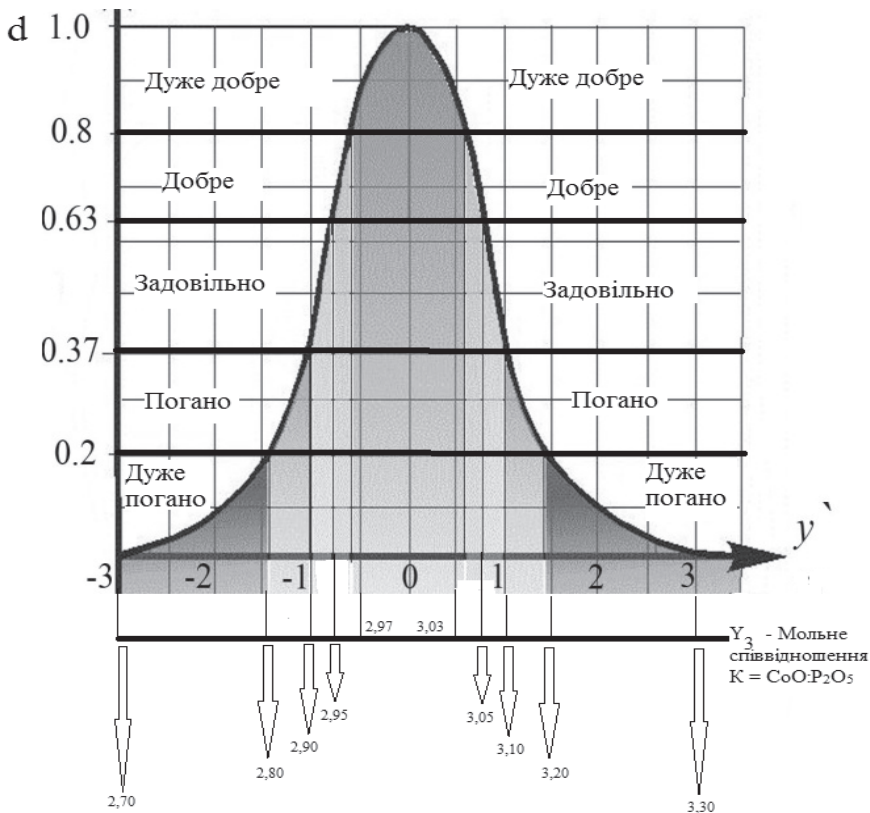


Рис. 3. Функція бажаності Харрінгтона $d=f(y')$ для фактора з двостороннім обмеженням (Y_1)



Таблиця 3. Результати оцінювання відтворюваності результатів

Результати дослідів			$Y_1 - \bar{Y}_1$	$Y_2 - \bar{Y}_2$	$Y_3 - \bar{Y}_3$
Склад продуктів синтезу		Вихід готового продукту (%) за $P_2O_5 - Y_3$			
Мольне співвідношення $K = CoO:P_2O_5 - Y_1$	Вміст домішки CO_2 (%) – Y_2				
1. 2,97	0,10	95,19	-0,0125	-0,015	0,10
2. 2,99	0,13	95,27	0,0075	0,015	0,18
3. 2,98	0,11	94,97	-0,0025	-0,005	-0,12
4. 2,99	0,12	94,93	0,0075	0,005	-0,16

Продовження табл. 3

$(Y_1 - \bar{Y}_1)^2$	$(Y_2 - \bar{Y}_2)^2$	$(Y_3 - \bar{Y}_3)^2$	d_1	d_2	d_3	$D_{об.}$
0,000156	0,000225	0,0100	0,8000	0,8000	0,9666	0,6186
0,000056	0,000225	0,0324	0,9851	0,7576	0,9684	0,7227
0,000006	0,000025	0,0144	0,9209	0,7866	0,9612	0,6963
0,000056	0,000025	0,0256	0,9851	0,7725	0,9601	0,7306
0,000274	0,000500	0,0824				

Закінчення табл. 3

$\bar{D}_{об.}$	$D_{об.} - \bar{D}_{об.}$	$(D_{об.} - \bar{D}_{об.})^2$	$(\bar{D}_{об.} - D_{об.})$	$(\bar{D}_{об.} - D_{об.})^2$
0,6921	-0,07345	0,0053950	-0,00015	0,0078313
	0,03060	0,0009364		
	0,00420	0,0000176		
	0,03850	0,0014820		

Перед дослідженням залежності загального критерію оптимізації від факторів, що визначають технологію одержання $Co_3(PO_4)_2 \cdot 8H_2O$, потрібно оцінити відтворюваність результатів синтезу та якість експериментальної установки.

Оцінка відтворюваності експериментальних результатів та якості лабораторної установки. Для оцінки відтворюваності результатів експериментальних

досліджень виконано чотири паралельних досліди, результати яких наведено в табл. 3. Умови проведення дослідів відповідали центру плану часткової репліки по методу Бокса-Уїлсона: температура – 50°C; концентрація розчину H_3PO_4 – 30 мас. %; тривалість синтезу – 2 год.

Похибку відтворюваності дослідів визначали за формулою розрахунку дисперсії паралельних результатів:

Таблиця 4. Матриця ПФЕ

Умови дослідів	x_1 , температура, °C	x_2 , концентрація H_3PO_4 , % (мас.)	x_3 , тривалість синтезу, год.
Основний рівень (x_i^0) – центр плану	50	30	2
Інтервал варіювання (Δx_i)	30	20	1
Верхній рівень ($x_{i,max}$)	80	50	3
Нижній рівень ($x_{i,min}$)	20	10	1



$$S_{Y_i} = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N (Y_{n_i} - \bar{Y}_i)^2}{N-1}}, \text{ де} \quad (8)$$

i – номер функції відгуку;

N – кількість паралельних дослідів.

Використовуючи одержані дані для розрахунків за формулою (8), одержано наступні величини дисперсій S_{Y_i} :

$$S_{Y_1} = 0,009557; S_{Y_2} = 0,0129073;$$

$$S_{Y_3} = 0,1657302.$$

Розрахунок коефіцієнта варіації V_i проведено за формулою:

$$V_i = \frac{S_{Y_i} \cdot 100}{\bar{Y}_i}, \% \quad (9)$$

Тоді $V_1 = \frac{0,009557 \cdot 100}{2,9825} = 0,31\%$,

$$V_2 = \frac{0,0129073 \cdot 100}{0,115} = 11,22\%$$
,

$$V_3 = \frac{0,1657302 \cdot 100}{95,09} = 0,17\%.$$

У випадку розгляду функцій відгуку Y_1 і Y_3 значення коефіцієнта варіації не перевищує 3%, що свідчить про добру відтворюваність результатів. При розгляді функції відгуку Y_2 (вміст CO_2 в продуктах) коефіцієнт варіації дорівнює 11,22%, що пов'язане з погрішністю визначення вмісту CO_2 методом газометрії, рівною 10% (відн.) [16]. Отже, спосіб синтезу може бути адекватно використаний для одержання $Co_3(PO_4)_2 \cdot 8H_2O$.

Аналогічно до описаного вище було оцінено дисперсність функції бажаності Харрінгтона за формулами:

$$V = \frac{S_{D_{об.}} \cdot 100}{D_{об.}}, \% \quad (10)$$

$$S_{D_{об.}} = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N (Y_{n_i} - \bar{Y}_i)^2}{N-1}} \quad (11)$$

$$S_{D_{об.}} = \sqrt{\frac{0,0078313}{4-1}} = 0,0511;$$

$$V = \frac{0,0511 \cdot 100}{0,6921} = 7,38 \%$$

Таблиця 5. Умови проведення і результати дослідів за планом Бокса-Уілсона типу 2^3 , виконані для оптимізації процесу одержання $Co_3(PO_4)_2 \cdot 8H_2O$

№ дослідів	Фізичні x_i				Умовні X_i			Результати дослідів – функції відгуку						
	x_1 температура,	x_2 концентрація $H_2PO_4^{4-}$ (% мас.)	x_3 тривалість синтезу, год.	x_4	X_1	X_2	X_3	Мольне співвідношення $K = CoO:P_2O_5 - Y_1$	Вміст домішок і CO_2 (%) – Y_2	Вихід готового продукту y (%) за $P_2O_5 - Y_3$	d_1	d_2	d_3	$D_{об.}$
1	80	50	3		+1	+1	+1	3,06	0,27	94,29	0,5793	0,4524	0,9383	0,24592
2	20	50	3		-1	+1	+1	2,97	0,03	98,18	0,8000	0,9905	0,9958	0,78910
3	80	10	3		+1	-1	+1	3,08	0,65	91,15	0,4773	0,0002	0,5632	0,00005
4	20	10	3		-1	-1	+1	3,03	0,53	96,48	0,8000	0,1000	0,9863	0,07960
5	80	50	1		+1	+1	-1	3,00	0,03	97,20	1,0000	0,9905	0,9917	0,98231
6	20	50	1		-1	+1	-1	3,00	0,30	96,43	1,0000	0,3676	0,9859	0,36273
7	80	10	1		+1	-1	-1	3,01	0,79	94,42	0,9851	0	0,9435	0
8	20	10	1		-1	-1	-1	3,08	0,90	92,63	0,4773	0	0,8157	0

Значення коефіцієнта варіації функції бажаності Доб., рівного 7,38%, свідчить про задовільну якість експериментальної установки [17].

Повнофакторний експеримент (ПФЕ) за планом Бокса-Уїлсона типу 2^k. Для планування експерименту з оптимізації одержання $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ складено матрицю, яка включала варіювання трьох управляючих факторів: x_1 – температура синтезу, °C; x_2 – концентрація H_3PO_4 , % (мас.); x_3 – тривалість синтезу, год.

Виходячи з даних, одержаних при оцінці відтворюваності результатів синтезу, сторонніх збурюючих факторів не виявлено і вказані параметри є достатніми для регулювання процесу синтезу. У табл. 4 наведено план ПФЕ.

У табл. 5 наведено результати ПФЕ та розрахункові дані часткових та об'єднаної функції бажаності Харрінгтона.

Аналіз одержаних результатів показав, що експеримент №5 характеризувався практично ідеальним значенням об'єднаної функції бажаності Харрінгтона – 0,98231. Це означає, що наступний пошук непотрібен, бо навіть без побудови поліноміальної моделі досягнуто поставленої мети – одержання реактиву кваліфікації "хч" – за таких умов синтезу: температура – 80°C; концентрація H_3PO_4 – 50% (мас.); тривалість синтезу – 1 год.

Додатковим підтвердженням якості одержанного продукту, що повністю відповідає встановленим вимогам до продукту реактивної чистоти, є результати досліджень методом рентгенографії. Вони показали, що рентгенограма сполуки, одержаної в досліді 5, повністю відповідає еталону [18].

Отже, методом ПФЕ за планом Бокса-Уїлсона проведено 8 синтезів $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ з урахуванням трьох управляючих факторів та трьох функцій відгуку з метою використання одержаних результатів для побудови поліноміальної моделі. Функції відгуку, різнорідні за фізичним змістом та розмірністю, було об'єднано за допомогою функції бажаності Харрінгтона, що одночасно враховувала вимоги як до хімічного складу продукту синтезу, так і виходу готового продукту. Показано, що ще на стадії виконання ПФЕ вдалося одержати продукт, що на 98,23% відповідав максимально можливому значенню функції бажаності Харрінгтона, тому необхідності побудови поліноміальної моделі та наступного пошуку її екстремуму вже не було. Значно скорочено тривалість пошуку та матеріальні витрати на проведення експерименту з пошуку умов синтезу $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$.

Література

1. Fisher R.A. The Design of Experiments // London: 6-th edition, Oliver and Boyd, 1951. – 244 p.
2. Box G.E.P. Wilson K.B. On the Experimental Attainment of Optimum Conditions // J. Roy. Statist. Soc. – 1951. – 13, Ser.B, №1. – P. 1–45.
3. Сидяев Н.И., Вилисова Н.Т. Введение в теорию планирования эксперимента: Учеб. пособие. – М.: Из-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2011. – 463 с.
4. Островский Г.М., Бережинский Т.А. Оптимизация химико-технологических процессов. Теория и практика. – М: Химия, 1984. – 240 с.
5. Дерканосова Н.М., Журавлев А.А., Сорокина И.А. Моделирование и оптимизация технологических процессов пищевых производств. – Воронеж: ВГТА, 2011. – 195 с.
6. Майоров А.А. Математическое моделирование биотехнологических процессов производства сыров. – Барнаул: АлтГТУ, 1999. – 247 с.
7. Optimizing a culture medium for biomass and phenolic compounds production using *Ganoderma lucidum* / Z?rate-Chaves C.A., Romero-Rodr?guez M.C., Ni?o-Arias F.C. et al. //



- Braz. J. Microbiol. — 2013. — 44, Issue 1. — P. 215–223.
8. Дисперсійний і кореляційний аналіз результатів польових дослідів: Монографія / В.О. Ушкаренко, В.Л. Нікішенко, С.П. Голобородько та ін. — Херсон: Айлант, 2009. — 372 с.
 9. Польовий М.А. Сутність імітаційного моделювання політичних процесів. — [Електронний ресурс] — Режим доступу: http://archive.nbuv.gov.ua/portal/soc_gum/Perspekt/2011_2/Polyovuj.pdf
 10. Использование функции желательности Харрингтона при решении оптимизационных задач в химической технологии: Учебно-метод. пособие / Сост.: С.Л.Ахназарова, Л.С.Гордеев. — М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2003. — 76 с.
 11. Зазнобина Н.И. Оценка экологической обстановки в крупном промышленном центре с помощью обобщенной функции желательности (на примере города Нижнего Новгорода) // Вестник Нижегород. ун-та им. Н.И. Лобачевского. — 2007, № 2. — С. 115–118.
 12. Борисенко З.М. Основи конкурентної політики: Підручник. — К.: Таксон, 2004. — 704 с.
 13. Шварценбах Г., Флашка Г. Комплексонометрическое титрование. — М.: Химия, 1970. — С. 240–244.
 14. ГОСТ 20851.2-75 (ИСО 5316-77, ИСО 6998-85, ИСО 7497-84) Удобрения минеральные. Методы определения фосфатов. — М.: ИПК Изд-во стандартов, 1977. — С. 23–25.
 15. Аналитическая химия. Количественный анализ. Физико-химические методы анализа: Учеб. пособие / Ю.Я. Харитонов, Д.Н. Джабаров, В.Ю. Григорьева. — М., 2012. — С. 98–101.
 16. Анализ минерального сырья / Под ред. Ю.Н. Книпович, Ю.В. Морачевского. — Л.: ГХИ, 1969. — С. 381–382.
 17. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. — М.: Наука, 1976. — 279 с.
 18. Powder Diffraction File JCPDS. Published by International Center of Diffraction Data. — Swarthmore, USA, 1986. — К. 1-0121.

АННОТАЦІЯ

Войтенко Л.В., Копілевич В.А. Оптимізація умов синтезу $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ реактивної чистоти з використанням функції желательности Харрингтона // Біоресурси і природопольовання. — 2014. — 6, № 3–4. — С. 27–35.

С целью ускорения и оптимизации условий синтеза $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ реактивной квалификации выполнено математическое планирование эксперимента по плану Бокса-Уилсона. В качестве критерия оптимизации трех функций отклика использовали функцию желательности Харрингтона, которая позволила объединить разные по физическому содержанию требования к объекту исследования и технологии его получения. Уже при выполнении плана реплики, даже без поиска оптимума и составления полиномиальной модели, были определены условия, полностью удовлетворяющие поставленным требованиям. Степень соответствия состава полученного продукта требованиям к реактиву квалификации "химически чистый" доказана методами химического анализа и РФА.

SUMMARY

L. Voitenko, V. Kopilevych. Optimization of the analytical reagent (AR) $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ synthesis conditions using the Harrington's desirability function // Biological Resources and Nature Management. — 2014. — 6, № 3–4. — P. 27–35.

The Box-Wilson experiment design for the acceleration and optimization of the analytical reagent (AR) $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ synthesis conditions was made. As optimization criteria of the three callback functions the Harrington's desirability function, which unites the different (of physical content) requirements to the examining object and conditions of its preparation was used. On the stage of replica executing of Box-Wilson Central Composite Design (CDD) the optimal conditions completely corresponded to the specified requirements were determined. So, it wasn't need to design the polynomial model and finding local extrema for this multivariable function. The correspondence degree of the chemical composition of isolated salt to the requirements "chemically pure" chemical (AR) by chemical analysis and X-ray method was demonstrated.