



ÚŘAD PRO VYNÁLEZY
A OBJEVY

POPIS VYNÁLEZU

K AUTORSKÉMU OSVĚDČENÍ

209 307

(11)

(B 1)

(61)

(23) Výstavní priorita
(22) Přihlášeno 14. 12. 79
(21) PV 8804-79

(51) Int. Cl. G 01 N 33/00

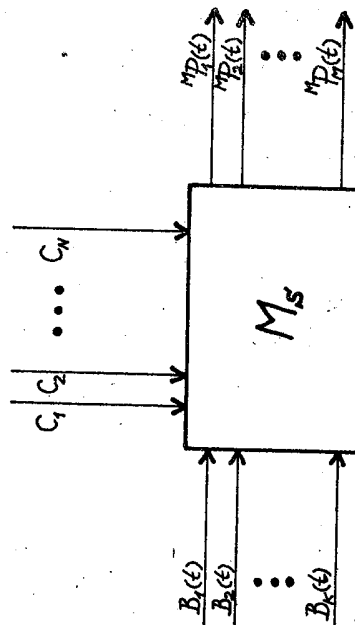
(40) Zveřejněno 30. 01. 81
(45) Vydáno 30. 11. 81

(75)

Autor vynálezu ŠARGON FRANTIŠEK ing., CSc., BRNO

(54) Způsob analýzy materiálů modelem

Způsob analýzy materiálů modelem podle vynálezu umožňuje současně kvantitativní stanovení všech důležitých parametrů materiálů nalezením totožných průběhů přechodových charakteristik reagující soustavy s analyzovaným materiálem a přechodových charakteristik modelu reagující soustavy, kdy neznámé parametry reagující soustavy s analyzovaným materiálem se rovnají ve své velikosti pro tento případ na modelu nastaveným hodnotám parametrů reagující soustavy.



Vynález se týká způsobu analýzy materiálů modelem, který spočívá ve využití znalosti naměřených přechodových charakteristik reagující soustav s analyzovanými materiály ke stanovení jejich fyzikálních konstant a chemického složení.

Dosavadní způsoby analýzy materiálů buď přechodovou charakteristiku vůbec nepoužívají, například acidimetrická titrace, radiometrická metoda a podobně, nebo používají přechodovou charakteristiku pouze k relativnímu stanovení reakčních vlastností materiálů, bez možnosti kvantitativního určení hodnot jejich fyzikálních konstant a chemického složení, tj. parametrů, které mají vliv na průběh příslušné přechodové charakteristiky. Je pochopitelné, že hodnoty parametrů materiálů, které byly stanoveny různými metodami, se od sebe mohou podstatně lišit.

Za parametr lze považovat každou konstantní veličinu, která má vliv na průběh přechodové charakteristiky reagující soustavy s analyzovaným materiálem. Při fyzikálním ději se jedná o fyzikální parametry, při chemické reakci o fyzikální a chemické parametry, poněvadž chemická reakce vždy probíhá v nějakém aparátu s fyzikálními parametry.

Uvedené nevýhody odstraňuje způsob analýzy materiálů modelem podle vynálezu, jehož podstata je v tom, že se z analyzovaného materiálu, vhodných přídavných materiálů nebo energií a aparátu vytvoří reagující soustava, která pro daný vektor vstupních veličin, vektor neznámých hodnot parametrů reagující soustavy a daný vektor stavových veličin reagující soustavy, má měřitelný vektor přechodových charakteristik reagující soustavy, načež se vytvoří model reagující soustavy, který pro stejné hodnoty vektoru vstupních veličin, vektor zvolených hodnot parametrů reagující soustavy a vektor zvolených hodnot počátečních podmínek stavových veličin reagující soustavy, má vektor přechodových charakteristik modelu reagující soustavy, má vektor přechodových charakteristik modelu reagující soustavy, pak se provede kvantitativní stanovení neznámých hodnot vektoru parametrů reagující soustavy nalezením hodnot vektoru těchto parametrů pro souhlasné průběhy vektorů změřených přechodových charakteristik reagující soustavy a přechodových charakteristik modelu reagující soustavy zjišťovaných opakovaně na modelu reagující soustavy při různých zvolených hodnotách vektoru parametrů reagující soustavy tak dlouho, až platí, že oba vektory přechodových charakteristik reagující soustavy a jejího modelu se od sebe liší méně než povoluje předem zadané kritérium, kdy se neznámé hodnoty vektoru parametrů reagující soustavy ve své velikosti rovnají pro tento případ na modelu nastaveným hodnotám vektoru parametrů reagující soustavy.

Způsob analýzy materiálů modelem podle vynálezu umožňuje současně kvantitativní stanovení všech důležitých parametrů materiálů a jejich vazbu na průběh jejich přechodových charakteristik, bez ohledu na použitou aparaturu, ve které byly přechodové charakteristiky naměřeny a na použité zařízení, kterým je realizován model, čímž je dosaženo vyloučení vlivu konstrukce aparatury, tepelných ztrát do okolí, termostátování a podobně.

Vynález je dále podrobněji popsán a vysvětlen pomocí výkresu, na kterém je znázorněn model reagující soustavy, a na příkladech.

Na výkresu je uveden model M_S reagující soustavy S , který má: vektor vstupních veličin závislých na čase t $B(t) = [B_1(t), B_2(t), \dots, B_k(t)]$; vektor parametrů reagující soustavy, což jsou veličiny na čase nezávislé $C = [C_1, C_2, \dots, C_N]$; a vektor přechodových charakteristik modelu reagující soustavy $M_P(t)$, které jsou funkcí času t , vektoru vstupních veličin $B(t)$, vektoru parametrů C , vektoru stavových veličin reagující soustavy $X(t)$ a modelu M_S : $M_P(t) = [M_{P_1}(t), M_{P_2}(t), \dots, M_{P_M}(t)] = M_S[B(t), C, X(t)]$ kde $X(t) = [X_1(t), X_2(t), \dots, X_R(t)]$.

Model reagující soustavy M_S lze realizovat např. vhodným fyzikálním zařízením - výsledkem je fyzikální model, nebo počítačem - výsledkem je počítačový model.

Každý model reagující soustavy M_S má svou blokovou strukturu, která definuje příčinné závislosti mezi vektory veličin $B(t)$, C , $X(t)$, $M_P(t)$ a umožňuje tak výpočet vektoru přechodových charakteristik $M_P(t)$.

Reagující soustava S vykazuje pro zadané vektory vstupních veličin $B(t)$ a počátečních podmínek $X_P(t) = [X_{1P}(t), X_{2P}(t), \dots, X_{RP}(t)]$ zcela jednoznačný vektor přechodových charakteristik $S_P(t) = [S_{P_1}(t), S_{P_2}(t), \dots, S_{P_M}(t)]$, který lze stanovit měřením.

Blokovou strukturu pro model reagující soustavy M_S lze sestavit s využitím zákonů fyziky a chemie pro přeměnu hmoty při reakci, kinetiku reakce, výměnu tepla při reakci, případně dalších zákonitostí podle konkrétního případu reagující soustavy S .

Jestliže se položí $X_P(t) = X(t)$ při stejném $B(t)$, pak pro blokovou strukturu modelu reagující soustavy M_S existuje množina vektorů přechodových charakteristik $M_P(t)$, které jsou funkcí vektoru parametrů C . Pro každou zvolenou kombinaci hodnot složek $[C_1, C_2, \dots, C_N]$ vektoru parametrů C se zjistí (například v případě počítačového modelu výpočtem blokové struktury na počítači) vektor přechodových charakteristik $M_P(t)$ a porovná se s vektorem přechodových charakteristik $S_P(t)$. Podle odchylek $M_P(t)$ od $S_P(t)$ se řídí strategie změn hodnot složek parametrů $[C_1, C_2, \dots, C_N]$. Postup se opakuje tak dlouho, až se dosáhne souhlasného průběhu obou vektorů přechodových charakteristik $M_P(t)$ a $S_P(t)$, který bude lepší než vyžaduje předem zadané kritérium. Zde postup končí a hodnoty $[C_1^*, C_2^*, \dots, C_N^*]$, při kterých je splněna podmínka souhlasného průběhu vektorů $M_P(t)$ a $S_P(t)$, udávají hodnoty parametrů analyzované reagující soustavy.

Sestavení a realizaci modelu reagující soustavy M_S lze pokládat za cejchovnou část; nalezení hodnot vektoru parametrů $C = [C_1^*, C_2^*, \dots, C_N^*]$ za měřicí část způsobu analýzy materiálů modelem podle vynálezu.

V dalším je uvedeno několik příkladů různých reagujících soustav, jejich vektorů přechodových charakteristik a měřených parametrů.

1. příklad

Ohřívání, vypařování a chlazení vody.

Čistě fyzikální reagující soustava, kdy do skleněné kádinky naplněné vodou je ponořen elektrický ponorný vařič, teploměr a míchadlo. Kádinka je postavena na váze. V určitém čase je zapnut vypínač ponorného vařiče a přiváděným konstantním elektrickým příkonem se

voda ohřívá až na předem určenou teplotu, např. 80°C . Při dosažení této teploty se vypínač vypne, čas vypnutí se zaznamená a voda počne chladnout. Reakce končí, až voda opět dosáhne přibližně teploty okolí. Při tomto ději se elektrický příkon mění v ponorném vařiči v teplo, které ohřívá vodu. Ztráty tepla představuje přestup tepla z vody do aparátu a z aparátu do okolí. Další ztráty tepla i vody jsou způsobeny vypařováním vody do okolí. Aparát zde tvoří skleněná kádinka, teploměr, míchadlo a ponorný vařič. Model této reagující soustavy má následující vektory veličin (viz obr.):

Vektor vstupních veličin $B(t)$, $K = 7$:

- $B_1(t)$ - teplota okolní atmosféry
- $B_2(t)$ - počáteční teplota aparátu
- $B_3(t)$ - počáteční hmotnost vody
- $B_4(t)$ - počáteční teplota vody
- $B_5(t)$ - relativní vlhkost okolní atmosféry
- $B_6(t)$ - efektivní plocha pro odpařování vody
- $B_7(t)$ - teplo dodávané ponorným vařičem

Vektor parametrů neznámých hodnot C , $N = 5$:

- C_1 - konstanta tepelných ztrát z aparátu do okolní atmosféry
- C_2 - konstanta tepelných ztrát z vody do aparátu
- C_3 - měrná odpařivost vody při 30°C
- C_4 - měrná odpařivost vody při 80°C
- C_5 - tepelná kapacita aparátu

Vektor stavových veličin $X(t)$, $R = 4$:

- $X_1(t)$ - celkové tepelné ztráty z aparátu do okolní atmosféry
- $X_2(t)$ - celkové tepelné ztráty z vody do aparátu
- $X_3(t)$ - celková hmotnost odpařené vody
- $X_4(t)$ - celková ztráta tepla pro odpařování vody

Vektor přechodových charakteristik $S_P(t)$, $M = 2$:

- $S_{P_1}(t)$ - měřená teplota vody
- $S_{P_2}(t)$ - měřená hmotnost vody

Pro určité konkrétní provedení reagující soustavy byly stanoveny tyto hodnoty parametrů dané reagující soustavy v jednotkách SI:

- $C_1^* = 1,14$
- $C_2^* = 4,20$
- $C_3^* = 4,80 \cdot 10^{-8}$
- $C_4^* = 6,20 \cdot 10^{-8}$
- $C_5^* = 400$

2. příklad

Hydratace práškového vápna.

Jedná se o fyzikálně-chemickou reagující soustavu, kdy do skleněné kádinky opatřené kor-

kovou zátkou, míchadlem a teploměrem je nalita voda. Po nasypání práškového vápna do vody začíná hydratace vápna. Při tomto ději reaguje volný kysličník vápenatý s vodou na vápenný hydrát za uvolňování tepla, kterým se ohřívá reagující směs. Po dokončení hydratace, kdy všechen volný kysličník vápenatý již zreagoval, způsobí tepelné ztráty do okolí chladnutí zreagované směsi. Reakce končí, až zreagovaná směs opět dosáhne přibližně teploty okolí. Aparát zde tvoří skleněná kádinka, teploměr, míchadlo a korková zátká.

Model této reagující soustavy má následující vektory veličin (viz. obr):

Vektor vstupních veličin $B(t)$, $K = 6$:

$B_1(t)$ - hmotnost dávkovaného práškového vápna

$B_2(t)$ - počáteční teplota vápna

$B_3(t)$ - počáteční teplota dávkované vody

$B_4(t)$ - hmotnost dávkované vody

$B_5(t)$ - počáteční teplota aparátu

$B_6(t)$ - teplota okolní atmosféry

Vektor parametrů neznámých hodnot C , $N = 7$:

C_1 - poměrná část hmotnosti volného kysličníku vápenatého ve vápně

C_2 - exponent diferenciální rovnice pro kinetiku hydratace z intervalu hodnot 0,5 až 2

C_3 - hydratační konstanta vápna

C_4 - základ mocniny v exponenciální funkci pro závislost rychlosti hydratace vápna na teplotě reagující směsi z intervalu hodnot 1,01 až 1,04

C_5 - konstanta tepelných ztrát z hydratující směsi do aparátu

C_6 - konstanta tepelných ztrát z aparátu do okolní atmosféry

C_7 - tepelná kapacita aparátu

Parametry C_1 až C_4 závisí mimo jiné na lokalitě a způsobu výpalu vápence. Pro stanovení volného kysličníku vápenatého (parametr C_1) dosud neexistuje jiná měřicí metoda. Parametry C_5 až C_7 závisí na použitém aparátu.

Vektor stavových veličin $X(t)$, $R = 3$:

$X_1(t)$ - celkové tepelné ztráty z aparátu do okolní atmosféry

$X_2(t)$ - celkové tepelné ztráty z reagující směsi do aparátu

$X_3(t)$ - celková hmotnost zreagovaného volného kysličníku vápenatého

Vektor přechodových charakteristik $S_P(t)$, $M = 1$:

$S_{P1}(t)$ - měřená teplota reagující směsi

Pro určité konkrétní provedení reagující soustavy a použité vápno byly stanoveny tyto hodnoty parametrů dané reagující soustavou - v jednotkách SI:

$$C_1^* = 0,79$$

$$C_6^* = 5,86$$

$$C_2^* = 1,5$$

$$C_7^* = 1640$$

$$C_3^* = 0,65 \cdot 10^{-6}$$

$$C_4^* = 1,03$$

$$C_5^* = 23,02$$

3. příklad

Rozpouštění hliníku v alkalickém prostředí.

Jedná se o fyzikálně-chemickou reagující soustavu, kdy do kovové nádoby opatřené zátkou a teploměrem je nalit vápenný hydrát. Po nasypání hliníku, ve formě šupinek nebo pasty, do vápenného hydrátu začíná rozpouštění hliníku za vzniku vodíku a uvolňování tepla, kterým se ohřívá reagující směs. Mezi složky vektoru vstupních veličin $B(t)$ patří hmotnosti a počáteční teploty dávkovaných hmot, počáteční teplota aparátu a teplota okolní atmosféry. Mezi složky vektoru parametrů neznámých hodnot C patří poměrná část hmotnosti volného hliníku v dávkovaném hliníku, rozpouštěcí konstanta hliníku a parametry použitého aparátu.

Vektor přechodových charakteristik $S_P(t)$ může být dán těmito dvěma složkami:

$S_{P_1}(t)$ - měřená teplota reagující směsi

$S_{P_2}(t)$ - měřený tlak vodíku a vodní páry.

4. příklad

Hydratace cementové pasty.

Jedná se o fyzikálně-chemickou reagující soustavu, kdy do nádoby opatřené zátkou, teploměrem a prostředím s nasycenými vodními parami se vloží forma, do které je nadávkována cementová pasta, to je voda + slínec + sádrovec. Cementová pasta hydratuje za uvolňování tepla, přičemž současně tvrdne. Mezi složky vektoru vstupních veličin $B(t)$ patří hmotnosti a počáteční teploty dávkovaných hmot, počáteční teplota aparátu a teplota okolní atmosféry. Mezi složky vektoru parametrů neznámých hodnot C patří poměrné části hmotností minerálů ve slínku, fázové složení, hydratační konstanty jednotlivých minerálů, poměrný obsah sulfitu SO_3 v sádrovci, a parametry použitého aparátu.

Vektor přechodových charakteristik $S_P(t)$ může být dán těmito dvěma složkami:

$S_{P_1}(t)$ - měřená teplota reagující hmoty

$S_{P_2}(t)$ - měřená pevnost reagující hmoty

Způsob analýzy materiálů modelem podle vynálezu je použitelný ve fyzice, chemii, stavebnictví, případně v jiných oblastech, kde analyzovaný materiál a případné přídavné materiály nebo energie vytváří s aparátem reagující soustavu, na které lze měřit vektor přechodových charakteristik.

Vynález je zvláště vhodný pro průběžnou vstupní kontrolu kvality surovin pro výrobní technologie, které jsou závislé na průběhu přechodových charakteristik při reakcích těchto surovin, například při výrobě pórobetonu.

PŘEDMĚT VYNÁLEZU

Způsob analýzy materiálů modelem, vyznačující se tím, že se z analyzovaného materiálu, vhodných přídavných materiálů nebo energií, a aparátu vytvoří reagující soustava, která pro daný vektor vstupních veličin, vektor neznámých hodnot parametrů reagující soustavy a daný vektor stavových veličin reagující soustavy, má měřitelný vektor přecho-

dových charakteristik reagující soustavy, načež se vytvoří model reagující soustavy, který pro stejné hodnoty vektoru vstupních veličin, vektor zvolených hodnot parametrů reagující soustavy a vektor zvolených hodnot počátečních podmínek stavových veličin reagující soustavy, má vektor přechodových charakteristik modelu reagující soustavy, pak se provede kvantitativní stanovení neznámých hodnot vektoru parametrů reagující soustavy nalazením hodnot vektoru těchto parametrů pro souhlasné průběhy vektorů změřených přechodových charakteristik reagující soustavy a přechodových charakteristik modelu reagující soustavy zjišťovaných opakovaně na modelu reagující soustavy při různě volených hodnotách vektoru parametrů reagující soustavy tak dlouho, až platí, že oba vektory přechodových charakteristik reagující soustavy a jejího modelu se od sebe liší méně než povoluje předem zadané kritérium, kdy se neznámé hodnoty vektoru parametrů reagující soustavy ve své velikosti rovnají pro tento případ na modelu nastaveným hodnotám vektoru parametrů reagující soustavy.

1 výkres

