

ХІМІЧНІ НАУКИ

УДК 665.637.6

¹С.В. Іванов, д-р хім. наук, проф.²В.В. Трачевський, канд. хім. наук, доц.³Ю.П. Гетьманчук, д-р хім. наук, проф.⁴О.В. Мокринська, канд. хім. наук, наук. співроб.⁵З.В. Грушак, асист.ОПТИМІЗАЦІЯ СКЛАДУ ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИЦІЙ
МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧНОГО ПЛАНУВАННЯ^{1, 2, 5} НАУ, кафедра хімії та хімічної технології

E-mail: img@nau.edu.ua

^{3, 4} Київський національний університет ім. Тараса Шевченка

Показано можливість оптимізації складу полімерної композиції з наперед заданими експлуатаційними характеристиками методом математичного планування.

Opportunity of polyurethane composition structure with predetermined operational characteristics optimization by a method of mathematical planning is shown.

Постановка проблеми

Багато досліджень у хімічній технології зводяться до вирішення завдань, спрямованих на пошук оптимальних умов перебігу процесів або на оптимальний вибір складу багатокомпонентних систем.

З цією метою останнім часом широко застосовуються методи математичного планування, що дозволяє збільшити надійність і достовірність результатів роботи [1].

На практиці для оптимізації вмісту багатокомпонентних систем удаються до побудови діаграм склад – властивість [2; 3; 4].

Експериментальна частина

Оптимізацію складу полімерної композиції, що складається з полівінілового спирту, уретанового форполімеру, 2,4-толуїлендіізоціанату проведено за допомогою модифікованого плану Шеффе [1].

Склади досліджуваної композиції задаються симплексом у вигляді рівнобедреного трикутника (рис. 1).

Математична модель склад – властивість досліджуваної системи описується за допомогою канонічної форми полінома четвертого порядку для трикомпонентної системи {3,4} і має такий вигляд [1]:

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \delta_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2)^2 + \delta_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3)^2 + \delta_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3)^2 + \beta_{1123} x_1^2 x_2 x_3 + \beta_{1223} x_1 x_2^2 x_3 + \beta_{1233} x_1 x_2 x_3^2$$

за умови, що

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1.$$

Фактори полінома:

x_1 – відносний вміст полівінілового спирту;

x_2 – відносний вміст уретанового форполімеру СКУ-ПФЛ;

x_3 – відносний вміст 2,4-толуїлендіізоціанату.

План експерименту складався з урахуванням того, що діапазон варіювання факторами змінювався в межах:

$$0 \leq x_1 \leq 1; \quad 0 \leq x_2 \leq 1; \quad 0 \leq x_3 \leq 1.$$

За параметри оптимізації складу полімерної композиції було обрано її фізико-механічні параметри, які найсильніше впливають на її експлуатаційні характеристики:

A – адгезія полімерної композиції до металів;

U – стабільність параметрів (працездатність) в умовах впливу важких кліматичних факторів ($t = +40^\circ\text{C}$, відносна вологість = 98%);

C – зносостійкість полімерної композиції при динамічному режимі роботи.

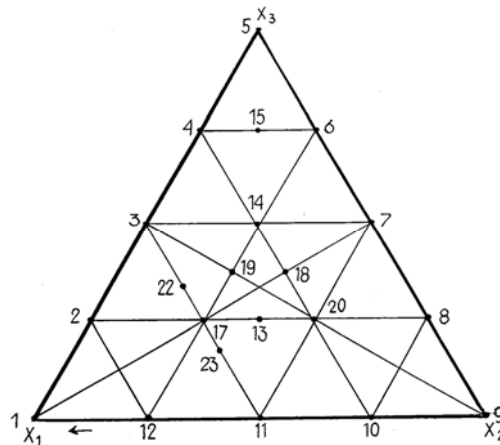


Рис. 1. Склад полімерної композиції

Для побудови математичної моделі використовували результати дослідів 1–12, 14, 17, 20 (рис. 2).

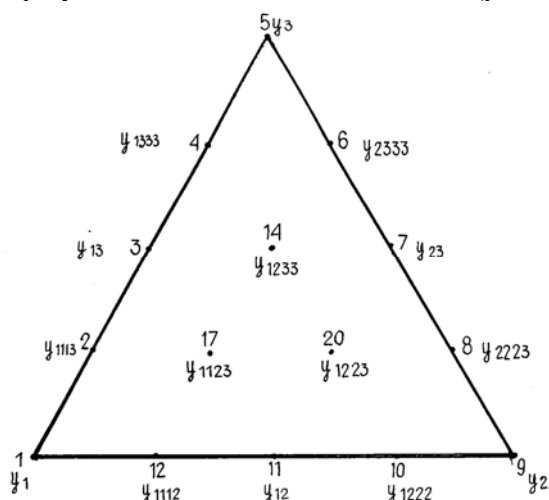


Рис. 2. Параметри полімерної композиції

У точках 13–16, 18, 19, 21–23 перевіряли адекватність математичної моделі.

Коефіцієнти моделі обчислювалися за експериментальними значеннями параметрів за такими рівняннями:

$$\beta_1 = y_1;$$

$$\beta_2 = y_2;$$

$$\beta_3 = y_3;$$

$$\beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2;$$

$$\beta_{13} = 4y_{13} - 2y_1 - 2y_3;$$

$$\beta_{23} = 4y_{23} - 2y_2 - 2y_3;$$

$$\gamma_{12} = 8/3(-y_1 + 2y_{1112} - 2y_{1222} + y_2);$$

$$\gamma_{13} = 8/3(-y_1 + 2y_{1113} - 2y_{1333} + y_3);$$

$$\gamma_{23} = 8/3(-y_2 + 2y_{2223} - 2y_{2333} + y_3);$$

$$\delta_{12} = 8/3(-y_1 + 4y_{1112} - 6y_{12} + 4y_{1222} - y_2);$$

$$\delta_{13} = 8/3(-y_1 + 4y_{1113} - 6y_{13} + 4y_{1333} - y_3);$$

$$\delta_{23} = 8/3(-y_2 + 4y_{2223} - 6y_{23} + 4y_{2333} - y_3);$$

$$\beta_{1123} = 32(3y_{1123} - y_{1223} - y_{1233}) + 8/3(6y_1 - 6y_2 - y_3) - 16(y_{12} + y_{13}) - 16/3(5y_{1112} + 5y_{1113} - 3y_{1222} - 3y_{1333} - y_{2223} - y_{2333});$$

$$\beta_{1223} = 32(3y_{1223} - y_{1123} - y_{1233}) + 8/3(6y_2 - y_2 - y_3) - 16(y_{12} + y_{23}) - 16/3(5y_{1223} + 5y_{2223} - 3y_{1112} - 3y_{2333} - y_{1113} - y_{1333});$$

$$\beta_{1233} = 32(3y_{1233} - y_{1123} - y_{1233}) + 8/3(6y_3 - 6y_1 - y_2) - 16(y_{23} + y_{13}) - 16/3(5y_{1333} + 5y_{2333} - 3y_{1113} - 3y_{2223} - y_{1112} - y_{1222}).$$

Виходячи з вимог, які ставляться до елементів авіаційної техніки, було задано такі значення параметрів оптимізації:

A – адгезія полімерної композиції до металів не менше $1 \cdot 10^6$ кг/мм²;

U – працездатність стрічки в умовах впливу важких кліматичних факторів, не менше 1000 год;

C – зносостійкість – сила тангенціального зрушення, не більше 2,8 Н.

На підставі експериментальних даних було розраховано коефіцієнти

$$\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_{12}, \beta_{13}, \beta_{23}, \beta_{1123}, \beta_{1223}, \beta_{1233},$$

$$\gamma_{12}, \gamma_{13}, \gamma_{23},$$

$$\delta_{12}, \delta_{13}, \delta_{23}$$

для кожного параметра й одержані такі рівняння:

$$\begin{aligned} A = & 143,4x_1 + 108,7x_2 + 54,8x_3 + 85,8x_1x_2 - \\ & - 53,2x_1x_3 + 36,6x_2x_3 - 30,7x_1x_2(x_1 - x_2) - \\ & - 78,9x_1x_3(x_1 - x_3) - 37,1x_2x_3(x_2 - x_3) + \\ & + 83,5x_1x_2(x_1 - x_2)^2 - 20,8x_1x_3(x_1 - x_3)^3 - \\ & - 0,27x_2x_3(x_2 - x_3)^2 + 2071,7x_1^2x_2x_3 - \\ & - 1732,8x_1x_2^2x_3 - 1131x_1x_2x_3^2; \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} U = & 24,3x_1 + 510x_2 + 10,1x_3 + 9064,6x_1x_2 + 28x_1x_3 + \\ & + 178x_2x_3 - 943,2x_1x_2(x_1 - x_2) - 44,3x_1x_3(x_1 - x_3) - \\ & - 691,5x_2x_3(x_2 - x_3) + 32503,7x_1x_2(x_1 - x_2)^2 - \\ & - 75,7x_1x_3(x_1 - x_3)^3 - 142,7x_2x_3(x_2 - x_3)^2 + \\ & + 12727,7x_1^2x_2x_3 + 99124,8x_1x_2^2x_3 - \\ & + 96722,4x_1x_2x_3^2. \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} C = & 6,81x_1 + 9,79x_2 + 0,55x_3 + 15,8x_1x_2 - 3,68x_1x_3 - \\ & - 8,2x_2x_3 - 1,65x_1x_2(x_1 - x_2) + 0,69x_1x_3(x_1 - x_3) - \\ & - 3,57x_2x_3(x_2 - x_3) - 11,04x_1x_2(x_1 - x_2)^2 + \\ & + 3,84x_1x_3(x_1 - x_3)^3 + 24,37x_2x_3(x_2 - x_3)^2 + \\ & + 31,46x_1^2x_2x_3 - 64,47x_1x_2^2x_3 - 26,99x_1x_2x_3^2. \end{aligned} \quad (3)$$

На прикладі контрольних дослідів 13–16, 18, 19, 21–23 розраховані за рівняннями (1)–(3) параметри оптимізації відрізняються від експериментальних даних у межах допустимого.

Таким чином, отримана математична модель досить добре описує залежність склад – властивість.

Теоретичні розрахунки обраних параметрів оптимізації проводили з кроком 0,1; 0,125; 0,05.

Як видно з рис. 3, сила тангенціального зрушення знижується зі збільшенням відносного змісту 2,4-толуїлендіізоціанату.

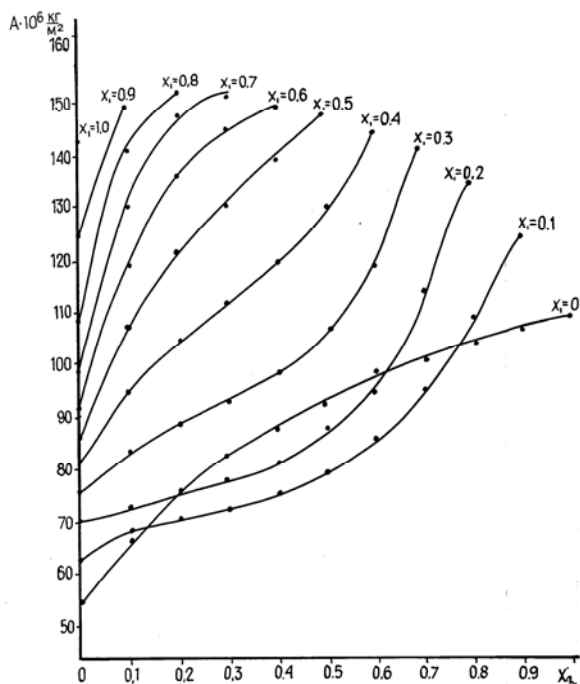


Рис.3. Залежність адгезії полімерної композиції від її складу

Проте збільшення його вмісту є доцільним лише до визначеної межі (не вище 0,3), тому що за таких умов погіршується адгезія полімерної композиції до металу, що призведе до її розтріскування і відшаровування.

Аналогічні графічні залежності було отримано для працездатності і зносостійкості полімерних композицій. Збільшення кількості полівінілового спирту у складі композиції впливає на зростання адгезійної міцності поліуретанової композиції.

Максимальне значення адгезійної міцності спостерігається при відносному вмісті полімера в суміші 0,8.

Працездатність поліуретанової композиції в умовах впливу важких кліматичних факторів залежить від співвідношення уретанового форполімеру і полівінілового спирту. При співвідношенні $x_1/x_2 = 1,25$ працездатність поліуретанової композиції максимальна і дорівнює 3000 подвійних проходів на трибометрі в умовах впливу важких кліматичних факторів.

Отже, оптимальний склад поліуретанової композиції, який задовольняє експлуатаційні характеристики, містить:

- полівінілового спирту 0,3–0,5;
- уретанового форполімеру 0,2–0,5;
- 2,4-толуїлендіізоціанату 0,2–0,3.

Висновки

Експериментальні дані показали, що використовуючи метод математичного моделювання (оптимізації) за умови чітко заданих експлуатаційних характеристик, можна розрахувати оптимальний склад полімерної композиції.

Література

1. *Задгинидзе И.К.* Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. – М.: Наука, 1979. – 396 с.
2. *Середа Э.А., Тишин Г.А., Жаргородский А.М.* Математическое моделирование составов полимеров// Пластмассы. – 1977. – № 1. – С. 55–77.
3. *Рыжов А.Н.* Конформационный анализ алканов в задачах «структура-свойство»: Дис., ... канд. хим. наук. – М.: РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, 2005. – 206 с.
4. *Поздьяев В.В., Залыцкий Г.Д.* Повышение эффективности процессов компаундирования в производстве товарных нефтепродуктов// Нефтепереработка и нефтехимия. – 2005. – № 10. – С. 46–51.

Стаття надійшла до редакції 09.06.06.