УДК 678.742.2:678.746.222:658.567.1

Коломеец Т.В., Авраменко В.Л., Пахаренко В.А., Гардер С.Е.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РЕОЛОГИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ КОМПОЗИЦИЙ ПОЛИЭТИЛЕНА И ПОЛИСТИРОЛА СМЕШАННЫХ ОТХОДОВ ПОТРЕБЛЕНИЯ ПЛАСТМАСС

Проблема регенерации пластмассовых отходов является актуальной задачей с точки зрения получения новых эффективных материалов и защиты окружающей природной среды.

Полиэтилен-полистирольные смеси, выделенные из смешанных отходов потребления пластмасс, представляют собой новый класс полимерных материалов, позволяющих сочетать свойства различных полимеров.

С целью определения оптимальных режимов переработки, получения однородных технически совместимых композиционных материалов, формирования оптимальной структуры в режимах сдвигового течения при переработке смесей, проводилось математическое моделирование процессов течения ПЭ и ПС СОПП для получения реологических уравнений, позволяющих учесть влияние параметров переработки на свойства получаемых композиционных материалов.

В качестве искомой функции процесса было выбрано логарифмическое значение вязкости расплавов компонентов и смеси на их основе ($\lg\eta$), в качестве факторов как переменных параметров процесса – логарифмические значения скорости сдвига ($\lg\nu$) и напряжения сдвига ($\lg\tau$) как определяющие процессы течения расплавов полимеров в условиях сдвигового деформирования.

Реологические уравнения течения строились на основе полученных экспериментальных данных с использованием методов регрессионного анализа. Зависимости $\eta_{PE}(\nu,\tau)$ и $\eta_{PC}(\nu,\tau)$ определялись в виде полиномов как первого, так и второго порядков.

Линейная модель имеют следующий вид:

$$\lg\eta = a_0 + a_1 \lg\nu + a_2 \lg\tau \,. \qquad (1)$$

Здесь $\mathrm{a_i}$ – неизвестные коэффициенты, подлежащие определению. Для их определения по методу наименьших квадратов [2] решается задача минимизации функционала:

$$\sum_{i=1}^{n}\left(\lg\eta_i - a_0 - a_1\lg\nu_i - a_2\lg\tau_i\right)^2 \to \min \,. \qquad (2)$$

Если ввести матрицы

$$B = \begin{pmatrix} \lg\eta_1 \\ \lg\eta_2 \\ \vdots \\ \lg\eta_n \end{pmatrix}; \qquad C = \begin{pmatrix} 1 & \lg\nu_1 & \lg\tau_1 \\ 1 & \lg\nu_2 & \lg\tau_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \lg\nu_n & \lg\tau_n \end{pmatrix}; \qquad A = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix},$$

где η_i, ν_i, τ_i $i = \overline{1, n}$ – значения переменных в «n» экспериментальных точках, то минимум функционала обеспечивается следующим выбором коэффициентов a_i [1, 2]:

$$A = \left(C^T \cdot C\right)^{-1} \cdot C^T \cdot B. \tag{3}$$

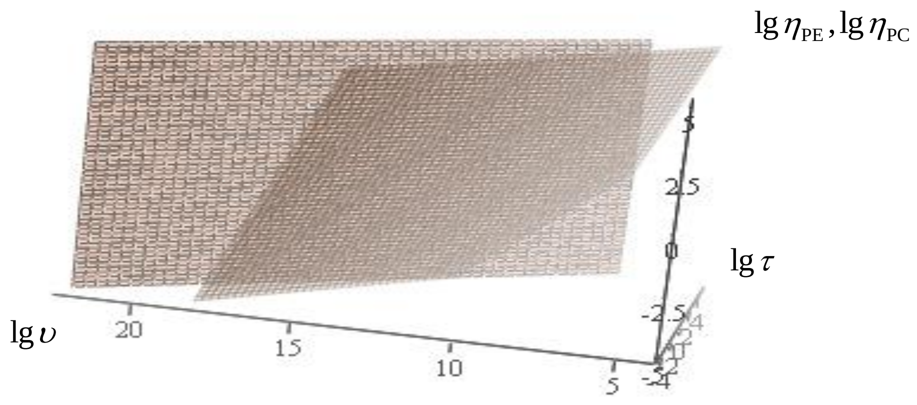
В результате решения были получены следующие зависимости для ПЭ и ПС соответственно:

$$\lg\eta_{PE} = 11{,}209 - 0{,}391 \cdot \lg\nu - 0{,}991 \cdot \lg\tau; \tag{4}$$

$$\lg\eta_{PC} = 14{,}234 - 0{,}00389 \cdot \lg\nu - 1{,}541 \cdot \lg\tau. \tag{5}$$

Проверка статистической гипотезы о значимости коэффициентов показала, что все коэффициенты a_i значимы для обеих моделей на уровне значимости 5 %. Средние относительные погрешности ε в точках эксперимента равны для полиэтилена $\varepsilon_{PE} = 4{,}177$ %, для полистирола – $\varepsilon_{PC} = 2{,}560$ %.

Уравнения (4) и (5) определяют плоскости в пространстве η, ν, τ. Очевидно, что оптимальный набор параметров переработки (смешивания) будет располагаться на линии пересечения этих плоскостей (рис. 1), где $\lg\eta_{PE} = \lg\eta_{PC}$.



lgηpe, lgηpc

Рисунок 1 – Линии пересечения поверхностей ПЭ и ПС линейных моделей

Приравняв правые части равенств (4) и (5), получим

$$0.38711\cdot \lg\nu - 0.55\cdot \lg\tau + 2{,}944 = 0 . \qquad (6)$$

Равенство (6) позволяет выбирать оптимальные параметры $\nu,\ \tau$ процесса перемешивания. Решая совместно уравнения (4) и (5) можно получить параметрические уравнения линии пересечения указанных плоскостей, которые определяют множество значений точек $\eta,\ \nu,\ \tau$ при которых возможна совместная переработка ПЭ и ПС:

$$\begin{cases} \lg\nu = 5.285 - 0{,}55\cdot \mathrm{t} \\ \lg\tau = 9{,}225 - 0{,}387\cdot \mathrm{t} \\ \lg\eta = 0{,}599\cdot \mathrm{t} \end{cases} . \qquad (7)$$

Рассмотрение уточненных моделей обусловлено желанием учесть эффекты взаимовлияние экспериментальных факторов ν, τ. В данной работе они выбраны как полиномы второго порядка для логарифмических переменных процесса:

$$\lg\eta = a_0 + a_1 \lg\nu + a_2 \lg\tau + a_3 \lg\nu\cdot\lg\tau + a_4 \lg^2\nu + a_5 \lg^2\tau . \qquad (8)$$

Здесь a_i – также неизвестные коэффициенты, подлежащие определению. Для их определения решается задача минимизации функционалов

$$\sum_{i=1}^{n}\left(\lg\eta_i - a_0 - a_1\lg\nu_i - a_2\lg\tau_i - a_3\lg\nu_i\lg\tau_i - a_4\lg^2\nu_i - a_5\lg^2\tau_i\right)^2 \to \min . \qquad (9)$$

Если ввести матрицы

$$B = \begin{pmatrix} \lg\eta_1 \\ \lg\eta_2 \\ \vdots \\ \lg\eta_n \end{pmatrix}; \qquad C = \begin{pmatrix} 1 & \lg\nu_1 & \lg\tau_1 & \lg\nu_1\cdot\lg\tau_1 & \lg^2\nu_1 & \lg^2\tau_1 \\ 1 & \lg\nu_2 & \lg\tau_2 & \lg\nu_2\cdot\lg\tau_2 & \lg^2\nu_2 & \lg^2\tau_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ 1 & \lg\nu_n & \lg\tau_n & \lg\nu_n\cdot\lg\tau_n & \lg^2\nu_n & \lg^2\tau_n \end{pmatrix}; \qquad A = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_5 \end{pmatrix},$$

где $\eta_i,\ \nu_i,\ \tau_i\ \ i = \overline{1,n}$ – значения переменных в n экспериментальных точках, то минимум функционала обеспечивается выбором коэффициентов a_i в соответствии с соотношением (3).

Реологические уравнения имеют вид:

$$\begin{aligned} \lg\eta_{\text{Ï Ý}} = &-38{,}989 + 6{,}66\cdot\lg\nu + 14{,}613\cdot\lg\tau + -1{,}275\cdot\lg\nu\cdot\lg\tau + \\ &+0{,}2451\cdot\lg^2\nu + -1{,}192\cdot\lg^2\tau; \end{aligned} \qquad (10)$$

$$\lg\eta_{\text{Ï Ñ}} = -12{,}136 + 1{,}379\cdot\lg\nu + 6{,}597\cdot\lg\tau - 0{,}271\cdot\lg\nu\cdot\lg\tau - \\ -0{,}032\cdot\lg^2\nu - 0{,}614\cdot\lg^2\tau. \tag{11}$$

Относительные погрешности в экспериментальных точках соответственно для полиэтилена $\varepsilon_{\text{PE}} = 4{,}048$ %, для полистирола – $\varepsilon_{\text{PC}} = 0{,}313$ %, все коэффициенты моделей значимы. График линии пересечения поверхностей, определяемых реологическими уравнениями, приведен на рис. 2.

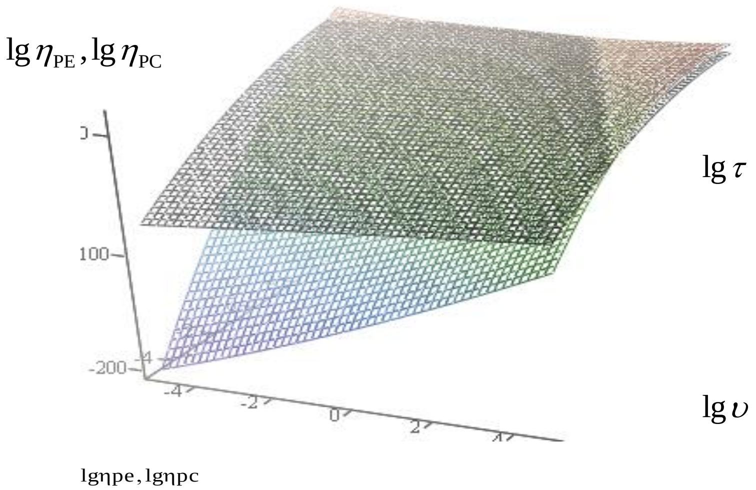


Рисунок 2 – Линии пересечения поверхностей ПЭ и ПС уточненных линейных моделей

Для наилучшего перемешивания должно выполняться условие $\lg\eta_{\text{PE}} = \lg\eta_{\text{PC}}$. Приравнивание правых частей равенств (10) и (11) позволяет получить связь параметров ν и τ. Вследствие того, что линия пересечения проецируется на плоскость (ν,τ) параболой, то каждому значению τ соответствует пара значений параметра ν:

$$\tau_1 = 6{,}934 - 0{,}868\cdot\nu - \frac{\sqrt{543030 - 971614\cdot\nu + 412110\cdot\nu^2}}{578}; \\ \tau_2 = 6{,}934 - 0{,}868\cdot\nu + \frac{\sqrt{543030 - 971614\cdot\nu + 412110\cdot\nu^2}}{578}. \tag{12}$$

Реологические уравнения, описывающие поверхность, позволяют, зная один из параметров процесса, находить другой, и по координатам точек при подстановке в любое из уравнений вычислять функцию процесса.

Как видно из построенных моделей реологических уравнений течения расплавов ПЭ и ПС и получаемых линий пересечения моделей, т. е. наличие общей линии пересечения поверхностей, являются свидетельством наличия совместной области переработки ПЭ и ПС СОПП, и подтверждают ранее сделанный вывод о том, что существует реальная возможность совместной переработки ПЭ и ПС СОПП с получением технически совместимых однородных композиционных материалов.

На практике, имея исходные данные по экструзионному оборудованию, т.е. технические характеристики червяка: диаметр, шаг нарезки, высоту витка, число витков, ширина гребня витка, число заходов червяка, число оборотов червяка, сопротивление головки, радиальный зазор, по методике расчета представленной в работе [4] находим значения напряжения сдвига и скорости сдвига в рабочей зоне экструдера (плавления и гомогенизация), при подстановке которых в уравнение линий пересечения поверхностей, находим искомое значение функции – значение вязкости. По экспериментальным данным кривых зависимости значения вязкости от температуры, давления для различного состава смесей ПЭ и ПС СОПП, находим необходимую область параметров переработки.

Литература

1. Монтгомери Д. К. Планирование эксперимента и анализ данных. – Л. – Судостроение. – 1980. – С. 382.

2. Венецкий И. Г. Основы теории вероятностей и математической статистики. – М. – Статистика. – 1968. – С. 358.

3. Дьяконов В. П., Абраменко И. В. Mathcad 7 в математике, физике и в Internet. – М. – Нолидж. – 1999. – С. 352.

4. Теплофизические и реологические характеристики полимеров. Справочник. Под общей редакцией Ю.С. Липатова. – К. – «Наук. думка» – 1977. – С. 230-244.

УДК 678.742.2:678.746.222:658.567.1

Коломеєць Т.В., Авраменко В.Л., Пахаренко В.А., Гардер С.Є.

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ РЕОЛОГІЧНИХ РІВНЯНЬ КОМПОЗИЦІЙ ПОЛІЕТИЛЕНУ І ПОЛІСТИРОЛУ ЗМІШАНИХ ВІДХОДІВ СПОЖИВАННЯ ПЛАСТМАС

Було проведено дослідження реологічних рівнянь, побудовані математичні моделі реологічних рівнянь поліетилену і полістиролу, та композицій на основі змішаних відходів споживання пластмас, які дозволяють знайти лінії перетину поверхонь для визначення функції процесу, яка базується на даних змінного параметру процесу. Розглянуто лінійні моделі, і уточнені моделі з урахуванням впливу дослідних факторів. Це являється базою для вибору оптимальних технологічних режимів переробки для екструзійного обладнання різного типу.