

Моделювання процесу отримання високопористого комірчастого матеріалу на основі піноскла

А. П. Яценко, Б. Ю. Корнілович, Н. О. Міщук*, П. С. Радченко

*Національний технічний університет України “Київський політехнічний інститут”
Інститут колоїдної хімії та хімії води ім. А. В. Думанського НАН України, Київ

За допомогою факторного експерименту проведено математичне моделювання процесу отримання високопористого матеріалу на основі піноскла. Отримана модель процесу дозволяє знаходити область оптимуму функції пористості матеріалу від трьох вихідних факторів: температури спінування, часу витримки при максимальній температурі та кількості спінувача.

Піноскло з відкритою пористістю, розвиненою питомою поверхнею та високою проникністю для газів і рідин, отримане на основі різноманітних карбонатів, є ефективним носієм масообмінних покриттів. Такий матеріал є стійким до дії багатьох агресивних середовищ, жорсткого іонізуючого випромінювання та перепаду температур [1]. Піноскло, подрібнене до розмірів гранул 1—5 мм з нанесеним сорбційним або реакційноздатним шаром, може бути використане як недорогий та ефективний заповнювач для проникних реакційних бар'єрів при очищенні забруднених важкими металами та радіонуклідами вод [2, 3]. Отримання матеріалу з оптимальною пористістю θ залежить від багатьох вихідних факторів, таких як температура спінення t_{\max} , тривалість витримки при максимальній температурі τ_{\max} , кількість спінувача C_{fa} , атмосферний тиск P_a , в'язкість скла η при температурі спінення. Таким чином, визначення області оптимуму зводиться до проведення великої кількості довготривалих експериментів. Тому доцільно провести математичне моделювання процесу спінення, що дозволить швидко та точно знаходити вихідні параметри (t_{\max} , τ_{\max} , C_{fa}) для отримання матеріалу з необхідними значеннями θ .

Моделювання проводили за трьома факторами: за кількістю введеного спінувача (x_1), за максимальною температурою витримки (x_2) та за часом витримки (x_3). Для моделювання межі та значення факторів варіювання були переведені у кодовану форму:

$$\begin{aligned} x_1 &= -1 \dots 0 \dots +1 \text{ при абсолютних значеннях } 7 \text{ хв } \dots 12 \text{ хв } \dots 17 \text{ хв}; \\ x_2 &= -1 \dots 0 \dots +1 \text{ при абсолютних значеннях } 810 \text{ }^\circ\text{C} \dots 850 \text{ }^\circ\text{C} \dots 890 \text{ }^\circ\text{C}; \\ x_3 &= -1 \dots 0 \dots +1 \text{ при абсолютних значеннях } 1\% \dots 2\% \dots 3\%. \end{aligned}$$

Оскільки за двома чинниками значення результатів експерименту відповідають максимуму, то, очевидно, що математична модель, яка описуватиме процес отримання відкритої пористості, є моделлю другого порядку [4].

Для розрахунку моделі був побудований ротатабельний план із зоряними точками [5]. Значення пористості для “зоряних” точок розраховано на основі експериментальних даних за допомогою екстраполяції (табл. 1).

© А. П. Яценко, Б. Ю. Корнілович, Н. О. Міщук, П. С. Радченко, 2009

Т а б л и ц я 1. План та відповідні результати експерименту

| Опит | x_0 | x_1 | x_2 | x_3 | y_1 | y_2 | y_3 | Y_{cp} |
|------|-------|--------|--------|--------|-------|-------|-------|----------|
| 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 8,1 | 8 | 7,9 | 8 |
| 2 | 1 | 1 | -1 | -1 | 19,1 | 19 | 18,9 | 19 |
| 3 | 1 | -1 | 1 | -1 | 11,1 | 11 | 10,9 | 11 |
| 4 | 1 | 1 | 1 | -1 | 23,1 | 23 | 22,9 | 23 |
| 5 | 1 | -1 | -1 | 1 | 22,1 | 22 | 21,9 | 22 |
| 6 | 1 | 1 | -1 | 1 | 35,1 | 35 | 34,9 | 35 |
| 7 | 1 | -1 | 1 | 1 | 15,1 | 15 | 14,9 | 15 |
| 8 | 1 | 1 | 1 | 1 | 22,1 | 22 | 21,9 | 22 |
| 9 | 1 | -1,215 | 0 | 0 | 29,6 | 29,5 | 29,4 | 29,5 |
| 10 | 1 | 1,215 | 0 | 0 | 77,4 | 77,3 | 77,2 | 77,3 |
| 11 | 1 | 0 | -1,215 | 0 | 34 | 33,9 | 33,8 | 33,9 |
| 12 | 1 | 0 | 1,215 | 0 | 35,5 | 35,4 | 35,3 | 35,4 |
| 13 | 1 | 0 | 0 | -1,215 | 32 | 31,9 | 31,8 | 31,9 |
| 14 | 1 | 0 | 0 | 1,215 | 40,8 | 40,7 | 40,6 | 40,7 |
| 15 | 1 | 0 | 0 | 0 | 71,3 | 71,2 | 71,1 | 71,2 |

Модель, що включає 3 фактори, має вигляд

$$y = f(x_0, x_1, x_2, x_3). \quad (1)$$

В якості загального рівняння було вибрано повне рівняння функції другого порядку без врахування взаємного впливу факторів між собою, що пояснюється попереднім аналізом експериментальних даних [1]:

$$y = x_0 + a_1 \cdot x_1 + a_2 \cdot x_2 + a_3 \cdot x_3 + a_{11} \cdot x_1^2 + a_{22} \cdot x_2^2 + a_{33} \cdot x_3^2. \quad (2)$$

Для цього на основі приведеної матриці планування (табл. 1) були проведені розрахунки відповідних коефіцієнтів:

$$y = 70,27 + 9,23x_1 - 1,02x_2 + 3,98x_3 - 7,81x_1^2 - 20,51x_2^2 + 0,023x_3^2. \quad (3)$$

Для кожного коефіцієнта проведено розрахунок дисперсії і критеріїв Стюдента, які наведені у табл. 2 та 3.

Відповідно до аналізу критеріїв для кожного коефіцієнта, незначущим виявився коефіцієнт b_{33} з відповідним критерієм Стюдента $tb_{33} = 0,69$, який менше табличного значення $t_{табл} = 2,76$.

Окрім цього, слід зазначити, що незначущість цього коефіцієнта збігається з теоретичною природою пороутворювача в піносклі, оскільки, відповідно до отриманих експериментальних даних [1], вплив кількості спінювача на пористість матеріалу має лінійний характер, тобто не призводить до утворення максимуму значень.

Т а б л и ц я 2. Дисперсії коефіцієнтів

| s_0^2 | sb_0^2 | sb_1^2 | sb_2^2 | sb_3^2 | sb_{11}^2 | sb_{22}^2 | sb_{33}^2 |
|---------|----------|----------|----------|----------|-------------|-------------|-------------|
| 0,15 | 0,0033 | 0,0137 | 0,0137 | 0,0003 | 0,0344 | 0,0344 | 0,0344 |

Т а б л и ц я 3. Критерії Стюдента

| t_{1p} | t_{2p} | t_{3p} | t_{11p} | t_{22p} | t_{33p} |
|----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|
| 673,8467 | 74,51667 | 13107,6 | 227,29158 | 596,3478 | 0,690922 |

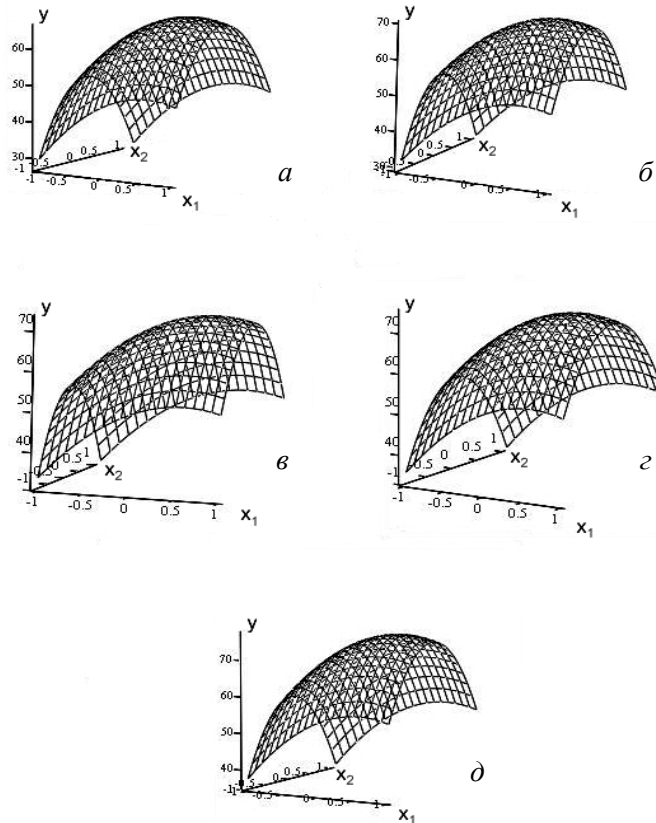


Рис. 1. Поверхні відгуку функції при значеннях фактора $x_3 = -1$ ($C_{fa} = 1,0\%$) (а); $-0,5$ ($C_{fa} = 1,5\%$) (б); 0 ($C_{fa} = 2,0\%$) (в); $0,5$ ($C_{fa} = 2,5\%$) (з); 1 ($C_{fa} = 3,0\%$) (д).

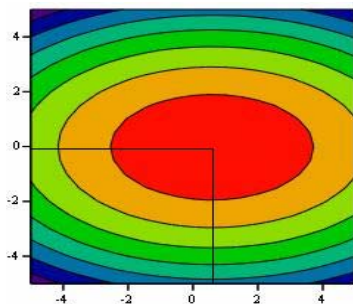


Рис. 2. План рівнів для функції при значенні $x_3 = -1$.

В кінцевому вигляді функція має наступний вигляд:

$$y = 70,27 + 9,23x_1 - 1,02x_2 + 3,98x_3 - 7,81x_1^2 - 20,51x_2^2. \quad (4)$$

Розрахунки моделі, інтерполяцію та побудову поверхонь відгуку здійснювали у програмному середовищі MathCad.

Поверхні відгуку функції наведені на рис. 1. Аналіз поверхонь відгуку привів до висновку про лінійний вплив кількості спіновача на пористість — графіки мають подібний вигляд і відрізняються лише розташуванням по осі y . Для поверхні відгуку, наведеної на рис. 1, д, був побудований план рівнів, з якого чітко видно знаходження максимуму для отриманої функції математичної моделі (рис. 2). Для даної функції відгуку була проведена перевірка адекватності за критерієм Фішера. Для кількості експериментів, рівної 15, і кількості факторів, рівної 3, при мірі значущості 0,05 критерій Фішера склав 4,76.

Для даної функції розрахований критерій Фішера, який склав відповідно 3,65, тобто модель, що описується даною функцією, адекватна.

Для проведення аналізу отриманої функції у пошуках оптимуму запишемо рівняння у вигляді часткових похідних:

$$\begin{cases} \frac{\partial y}{\partial x_1} = 9,23 - 15,62x_1 = 0; \\ \frac{\partial y}{\partial x_2} = -1,02 - 41,02x_2 = 0; \\ \frac{\partial y}{\partial x_3} = 3,98 > 0. \end{cases} \quad (5)$$

Рішенням для даної системи рівнянь є наступні значення параметрів:

$$\begin{aligned} x_1 &= 0,59; \\ x_2 &= -0,025. \end{aligned}$$

По відношенню до третього параметра, слід зазначити, що при постійному збільшенні концентрації спінювача більше 2%, в залежності від часу витримки, отримано задовільні результати по відкритій поруватості, але при цьому сильно знижується міцність матеріалу — пори середніх (1—2 мм) та великих розмірів (2—4 мм) і низька густина піноскла негативно впливають на міцність матеріалу [1].

Отже, обраний для розрахунку набір параметрів відповідає значенням:

$x_1 = 0,59$ або 14,5 хв витримки при максимальній температурі (при абсолютному значенні фактора);

$x_2 = -0,025$ або температура витримки 849,8 °С (при абсолютному значенні фактора);

$x_3 = 0$ або 2,0% (мас.) спінювача (при абсолютному значенні фактора).

В результаті розрахунку системи рівнянь (5) було отримано значення пористості 73%, що відповідає $y(0,59; -0,025; 0)$.

Таким чином, виконання факторного експерименту з моделювання процесу спінювання піноскла дозволило побудувати математичну модель, яка відображає вплив факторів ($C_{\text{фа}}$, $t_{\text{мак}}$, $\tau_{\text{мак}}$) на пористість θ . Розраховані оптимальні параметри процесу узгоджуються з результатами, що отримані експериментальним шляхом [1].

1. Яценко А. П., Корнилович Б. Ю., Радченко П. С. Пеностекло с ангобным покрытием для массообменных процессов // Вісник Національного технічного університету "ХПІ". — 2009. — № 22. — С. 155—160.
2. McMahon P. B., Dennehy K. F., Sandstrom M. W. Hydraulic and geochemical performance of a permeable reactive barrier containing zero-valent iron, Denver Federal Centre // Ground Water. — 1999. — 37, No. 3. — P. 396—404.
3. Nafiz D., Morrison S., Fuller C., Davis J. Handbook of groundwater remediation using permeable reactive barriers // Applications to Radionuclides, Trace Metals, and Nutrients. — San Diego, Calif.: Academic Press, 2002. — 539 p.
4. Бондарь А. Г., Статюха Г. А. Планирование эксперимента в химической технологии. — К.: Вища школа, 1976. — 200 с.
5. Бондарь А. Г., Статюха Г. А., Потяженко И. А. Планирование эксперимента при оптимизации процессов химической технологии. — К.: Вища школа, 1980. — 264 с.