СТРОИТЕЛЬНОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

Научная статья
УДК 004.032.26
https://doi.org/10.15828/2075-8545-2023-15-6-519-530

CC BY 4.0

Применение поливинилхлорида для нанокомпозитов (анализ и оптимизация показателей качества)

Юлия Фанильевна Коваленко*, Екатерина Анатольевна Шулаева, Николай Сергеевич Шулаев

Институт химических технологий и инжиниринга Уфимского государственного нефтяного технического университета в г. Стерлитамаке, Республика Башкортостан, Россия

* Автор, ответственный за переписку: e-mail: julia_str_ak@mail.ru

АННОТАЦИЯ: Введение. Применение нанокомпозитов в различных отраслях промышленности в последние годы увеличилось благодаря их уникальным свойствам и эксплуатационным характеристикам. Однако оптимизация качественных показателей нанокомпозитов остается сложной задачей из-за сложного взаимодействия между компонентами. В работе представлен обзор методов, используемых для анализа и расчета показателей качества нанокомпозитов с использованием ПВХ в качестве основного материала. **Методы и материалы.** Для математического расчета технологических параметров, не поддающихся прямому измерению, были проведены анализ литературных источников по рассматриваемому процессу и установление соответствующих зависимостей между эмпирическими данными в соответствии с основными закономерностями термодинамики и процессов массообмена. В ходе исследования применен метод нейронных сетей для того, чтобы описать процесс полимеризации винилхлорида, осуществленного суспензионным методом. Для решения данной проблемы была применена каскадная сеть, имеющая прямое распространение сигнала и обратное распространение ошибки. Состав сети: в скрытом слое – десять сигмоидных нейронов, в выходном слое – два линейных нейрона. **Результаты и обсуждения.** В ходе проведения исследований было установлено, что при полимеризации тепловой поток изменяется с течением времени в зависимости от уровня концентрации инициатора. В дальнейшем полученные зависимости могут использоваться при регулировании расхода хладагента в охлаждающую рубашку реактора, для обеспечения изотермического выполнения всего процесса. Было установлено, что, изменяя частоту вращения мешалки, можно изменять размер частиц и, следовательно, молекулярно-массовое распределение поливинилхлорида. Разработанная нейронная сеть была протестирована. Полученные результаты имеют минимальную погрешность и близки к реальным значениям, из чего можно сделать вывод, что сеть обучена правильно и зависимость между данными найдена. **Заключение.** В ходе исследований установлены зависимости, связывающие физико-химические параметры технологического процесса с конструктивными особенностями аппаратуры. Для поддержания качества ПВХ, в частности, соответствующего молекулярно-массового распределения, была разработана нейронная сеть (каскадная сеть, имеющая прямое распространение сигнала и обратное распространение ошибки, состоящая из десяти сигмоидных нейронов в скрытом слое и двух линейных нейронов в выходном слое) в среде MATLAB. Проведены обучение по выборке и проверка на тестовых значениях, которая показала, что сеть с минимальной допускаемой погрешностью предсказывает исход процесса при прочих неизменных параметрах.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: поливинилхлорид, нанокомпозит, нейронная сеть, полимеризация, нанотехнология.

ДЛЯ ЦИТИРОВАНИЯ: Коваленко Ю.Ф., Шулаева Е.А., Шулаев Н.С. Применение поливинилхлорида для нанокомпозитов (анализ и оптимизация показателей качества) // Нанотехнологии в строительстве. 2023. Т. 15, № 6. С. 519–530. https://doi.org/10.15828/2075-8545-2023-15-6-519-530. – EDN: WRQEQL.

ВВЕДЕНИЕ

Поливинилхлорид (ПВХ) нашел широкое применение в строительной отрасли благодаря своим универсальным свойствам и относительно низкой стоимости. ПВХ представляет собой тип полимера, который состоит из повторяющихся звеньев мономеров винилхлорида. В последние годы с использованием нанотехнологий были значительно улучшены характеристики и свойства ПВХ, что сделало его еще более востребованным материалом для строительства.

Использование нанотехнологий включает в себя изменение структуры материала на наноуровне, размер которого составляет примерно от 1 до 100 на-

© Коваленко Ю.Ф., Шулаева Е.А., Шулаев Н.С., 2023

нометров. Модификация ПВХ с использованием нанотехнологий позволяет повысить механическую прочность, долговечность и устойчивость к ультрафиолетовому излучению и химическим веществам. Это делает его востребованным материалом для строительных изделий, которые должны выдерживать негативные влияния параметров окружающей среды (перепад температур, влажность, УФ излучение).

Перспективным и актуальным является применение нанотехнологий композитов ПВХ в строительстве. Нанокомпозиты — это материалы, которые содержат небольшие наночастицы других материалов, таких как глина или углеродные нанотрубки, которые диспергированы по всей матрице ПВХ. Также наночастицы способствуют улучшению механических свойств ПВХ, делая его более прочным, эластичным.

Другим примером является использование нанопокрытий ПВХ, которые могут защитить строительные материалы от коррозии, атмосферных воздействий и других форм деградации. Эти покрытия также улучшают внешний вид поверхностей из ПВХ, способствуют их более эстетичному восприятию.

Марка поливинилхлорида может влиять на свойства нанокомпозитов, такие как их механические, термические и электрические свойства. Различные марки ПВХ могут иметь разную молекулярную массу, степень разветвленности и химический состав, что может влиять на совместимость ПВХ и нанонаполнителей, а также на дисперсию и межфазные взаимодействия внутри нанокомпозитов. Поэтому важно получить соответствующую марку ПВХ и выбрать условия обработки, чтобы оптимизировать характеристики нанокомпозитов.

Стадия полимеризации винилхлорида (ВХ) суспензионным методом является важным промышленным процессом производства поливинилхлорида (ПВХ). На сегодняшний день моделирование этого процесса стало актуальной темой исследований в области управления свойствами полимеров. Модели, разработанные для процесса полимеризации, определяющие свойства полимера, обычно основаны на использовании вычислительных инструментов и методов, таких как моделирование молекулярной динамики, методы Монте-Карло и методы конечных элементов.

Современное состояние проблемы моделирования процесса полимеризации ВХ суспензионным методом характеризуется отсутствием надежных и точных моделей. Ряд исследований был посвящен разработке вычислительных моделей процесса полимеризации. Однако точность этих моделей часто ограничена из-за неполных или неадекватных данных или сделанных допущений. Кроме того, сложность процесса и количество задействованных переменных затрудняют точное прогнозирование проведения реакции полимеризации.

Наиболее широко используемые модели процесса полимеризации основаны на использовании методов Монте-Карло и конечных элементов. Эти модели использовались для создания различных методов моделирования процесса полимеризации. Однако эти модели ограничены в своей способности достаточно точно предсказывать параметры процесса из-за их зависимости от предположений и неполных данных.

В дополнение к существующим моделям предложен ряд новых подходов к моделированию процесса полимеризации. Например, некоторые исследователи предложили использовать искусственные нейронные сети для моделирования процесса. Другие подходы включали использование алгоритмов машинного обучения и методов интеллектуального анализа данных.

В целом, современное состояние проблемы моделирования процесса полимеризации ВХ суспензионным методом характеризуется отсутствием достаточно надежных и точных моделей. Это приводит к необходимости проведения дальнейших исследований по разработке более надежных и точных моделей процесса полимеризации.

На рис. 1 показан упрощенный технологический процесс получения суспензионного ПВХ промышленным способом без использования дополнительных этапов. Полимеризация винилхлорида происходит в реакторе для полимеризации при помощи периодического способа. Реактор имеет мешалку и рубашку для подогрева и охлаждения.

Для прокачивания используется обессоленная вода из сборника. Чтобы предотвратить попадание в торцевое уплотнение суспензии поливинилхлорида, подача обессоленной воды осуществляется дозировано при помощи специального насоса. Затем управляющая система начинает загрузку реактора и в дальнейшем ведет процесс согласно рецептурному формату. После того, как винилхлорид был дозирован в определенном в рецепте количестве, реактор начинает разогреваться до той температуры, которая указана в регламенте. Когда достигается установленная температура, происходит запуск датчика времени охлаждения. Параллельно на трубопроводе, подающем захоложенную воду на всасывающий насос, происходит полное открытие клапана. В рубашку реактора подается охлаждающая вода, которая вытесняет собой горячую воду, вследствие чего реактор выводится управляющей системой на заданную температуру. Далее запускается процесс полимеризации. Когда установленное время истекло, управляющей системой осуществляется регулировка и поддержание заданной температуры в реакторе. Регулирующий клапан, который уста-

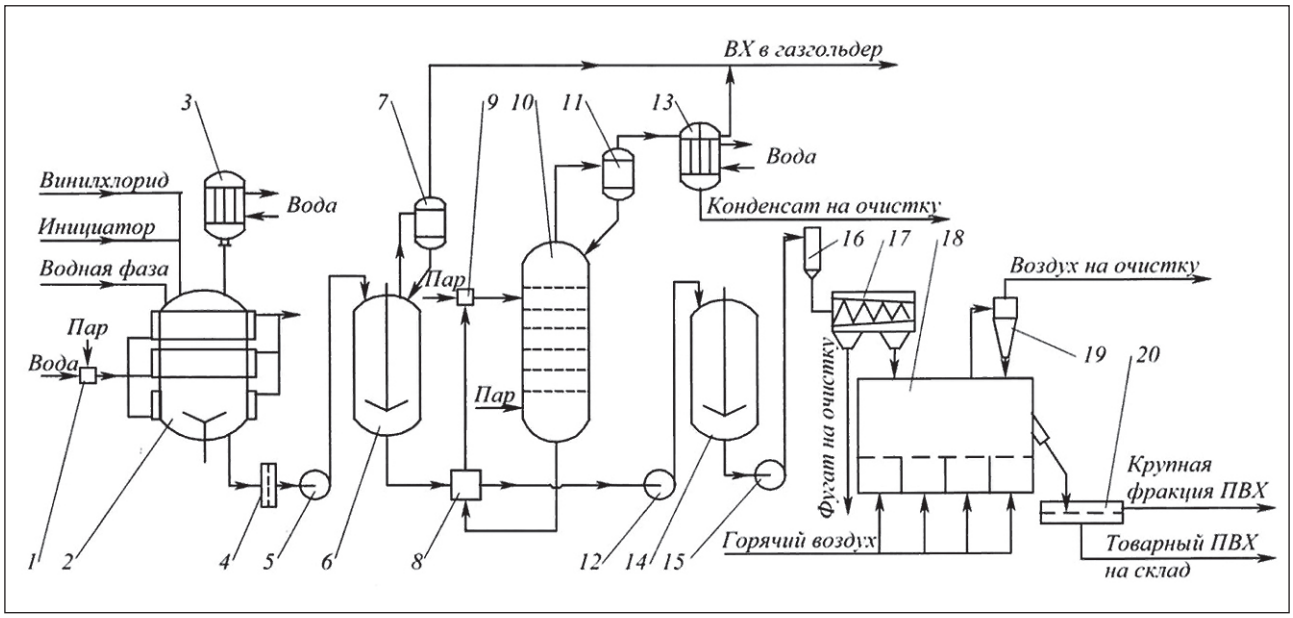

Рис. 1. **Технологическая схема производства поливинилхлорида:** 1, 9 – нагреватели смесительные паровые; 2 – реактор-полимеризатор; 3 – обратный конденсатор-холодильник; 4 – коркоотделитель; 5, 12, 15 – насосы; 6 – дегазатор емкостный; 7, 11 – сепараторы; 8 – теплообменник; 10 – колонна дегазации; 13 – конденсатор; 14 – сборник суспензии ПВХ; 16 – расширитель; 17 – центрифуга; 18 – сушилка кипящего слоя; 19 – циклон; 20 – классификатор

новлен на трубопроводе, подающем в контур прямой захоложенной воды, поддерживает температурный режим все время полимеризации. Если отклонение температуры от установленной составляет ±0,5°С, на рабочем месте оператора раздается сигнал. При превышении установленной температурной границы система управления активирует соответствующий сигнал тревоги или автоматически корректирует параметры работы реактора для поддержания заданного давления на необходимом уровне. При достижении указанного количества происходит завершение полимеризации. Дальше начинается дополимеризация, которая сопровождается временным отсчетом. В случае если не происходит постепенного снижения давления в реакторе, он также переходит на процесс дополимеризации. Последний может осуществляться как в случае разогрева реактора, так и без разогрева при наличии полимеризационной температуры, которая достигается в результате выделения тепла при полимеризации. После того как полимеризация завершается, суспензия с помощью насосов через фильтры подается из реакторов в дегазаторы.

Для удаления газа из суспензии ПВХ используется двухступенчатый процесс дегазации. Сначала происходит освобождение избыточного давления ВХ в емкостных дегазаторах, а затем происходит дегазация в аппаратах колонного типа. Одновременно с выгрузкой суспензии из реакторов начинается сдувка винилхлорида из дегазатора в газгольдер, где происходит отделение газа от частиц ПВХ с помощью абшайдера. Вода из абшайдера периодически возвращается в дегазатор, и контроль за сливом осуществляется с помощью смотрового фонаря. Для промывки и предотвращения забивки трубопровода слива суспензии из абшайдера в него подведен трубопровод маточника. Сдувка ВХ считается завершенной, когда давление в дегазаторе достигает значения не более 0,02 МПа (0,2 кгс/см²).

Из дегазатора поливинилхлоридная суспензия проходит через фильтр и насосом постоянно подается на колонну дегазации. Ее количество поддерживается неизменным регулирующими клапанами в зависимости от того, сколько реакторов работает.

Пар, который подается из верхней части колонны дегазации в нижнюю, проходит через отверстия в тарелках, обогащаясь винилхлоридом. Через теплообменник проходит смесь газообразного винилхлорида, представляющая собой горячую суспензию, выходящую из кубовой части колонны. И смесь, и водяной пар, которые поступают из головной части колонны, подаются в абшайдер, где происходит отделение частиц поливинилхлорида, которые были унесены газом.

Когда происходит выделение и сушка поливинилхлорида, из кубовой части колонны, насосом постоянно перемещается отдегазированная суспензия. Одновременно в спиральном теплообменнике осуществляется ее охлаждение до установленной

температуры. Затем суспензия подается на колонну или в другой теплообменник, который охлаждается оборотной водой.

Суспензия поливинилхлорида, не превышающая температуру 85°С, после дегазации подается через трубопровод в теплообменник, чтобы отделить корку от суспензии. С помощью центробежного насоса через сетчатый фильтр, установленный на линии нагнетания, и через расширитель суспензия ПВХ подается на центрифугу. Насос работает непрерывно. После центрифуги поливинилхлорид с определенным содержанием влаги поступает в дезинтегратор. Маточник, выходящий из центрифуги, проверяется на содержание ПВХ и направляется самотеком через трубопровод в один из его сборников. Если это необходимо, то при помощи центробежного насоса маточник направляется или на стадию полимеризации, или на промывку оборудования и трубопроводов.

В сушилках «кипящего слоя» влажный ПВХ проходит сушку.

После процесса центрифугирования влажные изделия из ПВХ, имеющие определенное содержание влаги, направляются в дезинтегратор, чтобы раздробить образовавшиеся комки. Далее изделия направляются в зону питания сушилки. Она располагается в первой секции оборудования для сушки, между горизонтальными трубами, которые являются встроенными теплообменниками. Снизу, через распределительную решетку, подается горячий воздух, вследствие чего изделия из ПВХ образуют кипящий слой. Подача тепла для сушки осуществляется не только при помощи горячего воздуха, но и через поверхность встроенных теплообменников, нагреваемых горячей водой. Воздух через воздухораспределительную решетку поступает в нижнюю часть сушилки при температуре 90°С. Для поддержания постоянного и достаточно турбулентного кипящего слоя изделий в сушилке подача воздуха контролируется в рамках заранее заданных значений. Расход воздуха поддерживается стабильным. Продукт в сушилке высушивается до достижения необходимой влажности. Затем сухой ПВХ выгружается из сушилки с помощью вибрационных сит. При необходимости готовый продукт ПВХ на выходе из сушилки проходит анализ на содержание влаги и винилхлорида.

Воздух, сопровождающий порошок ПВХ, подается в бункер-циклон через тангенциальный ввод. В циклоне частицы пыли ПВХ отделяются от воздуха и затем поступают на вибрационное сито через дисковой затвор и шлюзовой питатель. Отсеянная товарная фракция направляется к пневмонасосу для последующей передачи в силос.

Когда бункер отсева ПВХ заполняется, крупные частицы с технологических ниток перекладываются в силосы через шлюзовой питатель, используя пневмонасос и воздушный пневмотранспорт.

В процессе полимеризации винилхлорида в реакторе используется изотермический режим. Это означает, что температура остается постоянной во время реакции и контролируется в заданных пределах (от 50 до 72°С), в зависимости от требуемой степени полимеризации. Этот подход особенно важен, если изменяется концентрация инициатора полимеризации, поскольку может оказать влияние на тепловые характеристики реакции.

Чтобы обеспечить необходимые условия, при которых должен осуществляться отвод тепла, изменяющегося во времени, используются теплообменные устройства, такие как рубашка и обратный конденсатор. Реакция полимеризации выделяет тепло, которое должно быть эффективно отведено, чтобы поддерживать стабильную температуру. Рубашка окружает реактор и охлаждается захолодившейся водой, которая принимает на себя часть тепла. Для охлаждения и конденсации испаряющегося винилхлорида в реакторе используется специальный обратный конденсатор, который эффективно удаляет излишнее тепло во время максимального тепловыделения.

Наличие таких теплообменных устройств позволяет эффективно регулировать температуру в реакторе и обеспечивать необходимые условия для процесса полимеризации при изменении концентрации инициатора или других параметров процесса.

Одной из основных характеристик качества получаемого ПВХ является молекулярно-массовое распределение частиц поливинилхлорида, которое в свою очередь зависит от температуры. По мере повышения температуры средняя молекулярная масса частиц уменьшается, что приводит к более широкому распределению молекулярной массы. Это можно объяснить тем, что более высокие температуры вызывают больший разрыв цепи молекул полимера, что приводит к большему количеству более мелких частиц. Кроме того, более высокие температуры могут вызвать разрыв цепи, что также может привести к более широкому распределению молекулярной массы. Таким образом, более высокие температуры имеют тенденцию к уменьшению средней молекулярной массы частиц поливинилхлорида и приводят к более широкому распределению молекулярной массы.

Нейронные сети можно использовать для изучения процесса полимеризации винилхлорида суспензионным методом. Нейронные сети — это мощные вычислительные инструменты, которые можно использовать для анализа сложных нелинейных взаимосвязей между различными входными и выходными данными. Используя нейронную сеть, мож-

но определить конкретные параметры, влияющие на процесс полимеризации, такие как температура, концентрация кислоты, концентрация мономера и скорость перемешивания. Нейронную сеть также можно использовать для разработки модели, которая точно предсказывает свойства полученного полимера, такие как распределение молекулярной массы. Такая модель может быть использована для оптимизации процесса полимеризации и получения желаемых свойств конечного продукта.

Существуют различные программы для создания нейронных сетей, некоторые популярные включают TensorFlow, Keras, PyTorch, Caffe и Theano, Matlab.

Matlab — мощный инструмент в обучении студентов технических вузов. Этот язык программирования, разработанный MATLAB, предоставляет высокоуровневую среду программирования для выполнения технических вычислений, визуализации и анализа данных. Благодаря его широкому применению в инженерии, физике и математике MATLAB становится популярным выбором среди студентов, изучающих эти области (рис. 2).

Существуют следующие типы нейронных сетей:

1. Конкурирующая сеть: тип неконтролируемой сети, в которой нейроны конкурируют друг с другом за активацию на основе входных сигналов. Используется для кластеризации и распознавания образов.

2. Каскадная сеть с прямым и обратным распространением сигналов является контролируемой нейронной сетью, которая используется для обучения моделей. Она состоит из нескольких скрытых слоев и применяется в задачах распознавания изображений и речи.

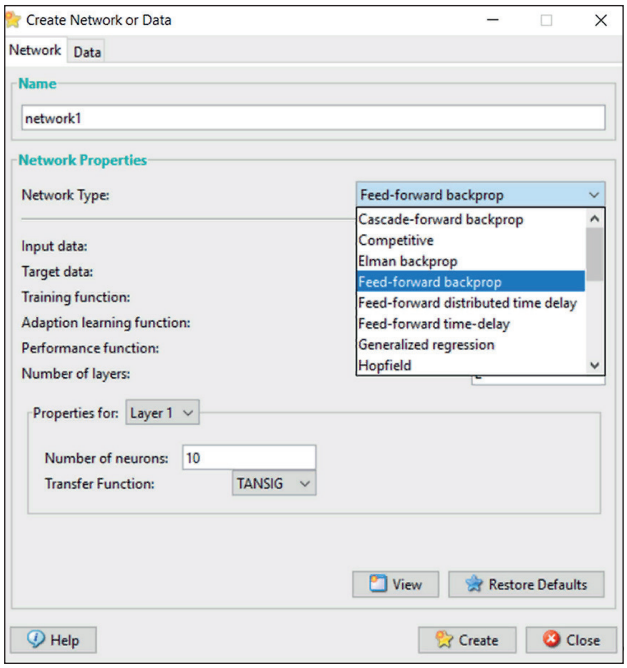

Рис. 2. **Определение вида нейросети в Matlab**

Прямое распространение сигнала происходит от входного слоя к выходному, где каждый нейрон в слое передает свой выход следующему слою. Обратное распространение ошибки используется для коррекции весов и оптимизации модели. Ошибки сравниваются с ожидаемыми результатами, и сигнал обратной связи распространяется обратно через сеть для обновления весов нейронов.

Такая архитектура нейронной сети позволяет обучать модель на основе большого количества размеченных данных и значительно повышает ее способность распознавания и классификации.

3. Сеть Элмана с обратным распространением: тип рекуррентной нейронной сети, которая может хранить и обрабатывать последовательные данные. Она используется для распознавания речи и прогнозирования временных рядов.

4. Сеть с прямым распространением сигнала и обратным распространением ошибки: контролируемая сеть с прямой связью, которая использует обратное распространение ошибки для обучения модели. Она используется для задач классификации и регрессии.

5. Сеть с задержкой и обратным распространением: тип рекуррентной нейронной сети, которая может обрабатывать входные сигналы с временными задержками. Она используется для распознавания речи и распознавания образов.

6. Обобщенная регрессионная сеть. Тип нейронной сети, используемый для регрессионного анализа. Она использует один скрытый слой и может обрабатывать несколько входных и выходных переменных.

7. Сеть Хопфилда: тип сети ассоциативной памяти, которая может хранить и вызывать шаблоны. Она используется для распознавания изображений и образов.

8. Линейный слой (создание): тип нейронной сети, используемый для задач линейной регрессии. Она использует один скрытый слой и может обрабатывать несколько входных и выходных переменных.

МЕТОДЫ И МАТЕРИАЛЫ

Для математического расчета технологических параметров, не поддающихся прямому измерению, были проведены анализ литературных источников по рассматриваемому процессу и установление соответствующих зависимостей между эмпирическими данными в соответствии с основными закономерностями термодинамики и процессов массообмена [1–6].

В ходе исследования применен метод нейронных сетей для описания процесса полимеризации ви-

нилхлорида суспензионным способом. Для решения данной проблемы была использована каскадная сеть, имеющая прямое распространение сигнала и обратное распространение ошибки. В скрытом слое сети – десять сигмоидных нейронов, а в выходном слое – два линейных нейрона.

Это тип алгоритма обучения с учителем, используемый для обучения искусственных нейронных сетей. Алгоритм каскадного обратного распространения используется для повышения производительности стандартного алгоритма обратного распространения с прямой связью за счет использования многоэтапной архитектуры. Многоэтапная архитектура такова, что выходные данные одного этапа нейронной сети используются в качестве входных данных для следующего этапа.

Алгоритм каскадного обратного распространения включает разделение сети на ряд подсетей, при этом каждая подсеть обучается отдельно. Затем выходные данные каждой подсети подаются в качестве входных данных для следующей подсети. Этот процесс завершается получением окончательного результата нейронной сети.

Во время обучения алгоритм сначала выполняет прямой проход по сети, чтобы сгенерировать прогнозируемый результат. Затем вычисляется разница между прогнозируемым выходом и ожидаемым выходом и вычисляются градиенты ошибки по отношению к каждому весу в сети. Затем эти градиенты используются для обновления весов в каждой подсети.

Каскадная сеть, имеющая прямое распространение сигнала и обратное распространение ошибки, состав которой в скрытом слое имеет десять сигмоидных нейронов и два линейных нейрона в выходном слое, может быть описана следующим образом:

Входной слой принимает входные данные, которые представляют собой признаки или характеристики задачи.

Скрытый слой состоит из десяти сигмоидных нейронов. Каждый нейрон принимает входные сигналы и применяет функцию активации сигмоида для генерации выходного значения.

Выходной слой состоит из двух линейных нейронов. Каждый нейрон принимает выходы из скрытого слоя и вычисляет линейную комбинацию с весами и смещением, не применяя функцию активации.

Прямое распространение сигнала:

Входные данные передаются через сеть от входного слоя к скрытому слою и затем к выходному слою.

Каждый нейрон в скрытом слое применяет функцию активации сигмоида к входным сигналам и генерирует выходное значение.

Выходные значения из скрытого слоя передаются в нейроны выходного слоя без применения функции активации.

Обратное распространение ошибки:

- Ошибка вычисляется путем сравнения выходных значений сети с ожидаемыми значениями на основе выбранной функции ошибки.
- Ошибка распространяется обратно через сеть, начиная с выходного слоя, с использованием алгоритма обратного распространения ошибки.
- Веса и смещения сети обновляются в соответствии с градиентным спуском и правилом обновления весов для минимизации ошибки.

Обучение и оптимизация:

- Сеть обучается на обучающем наборе данных, повторяя процесс прямого и обратного распространения ошибки.
- Гиперпараметры, такие как скорость обучения и количество эпох, могут быть настроены для достижения оптимальных результатов.
- После обучения сеть может быть проверена на валидационном наборе данных и дальше на тестовом наборе данных для оценки ее производительности.
- Было показано, что алгоритм каскадного прямого обратного распространения эффективен для повышения точности нейронных сетей, особенно в случаях, когда входные данные зашумлены или когда входные данные сильно различаются. Кроме того, использование отдельных подсетей позволяет повысить вычислительную эффективность алгоритма, поскольку каждую подсеть можно обучать независимо от других.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Процесс получения поливинилхлорида, рассматриваемый здесь, осуществляется при постоянной температуре, что требует контроля отвода тепла, который может меняться со временем в зависимости от того, каким будет состав процесса, включая концентрацию инициатора полимеризации.

В результате проведенных исследований были выявлены связи между изменением теплового потока, который возникает во время реакции полимеризации, и изменением концентрации инициатора со временем (рис.3).

$$Q\left(\frac{Вт}{м^2}\right) = \sum_{i=0}^{6} A_i \cdot t^i, \quad (1)$$

где t – время, ч.; A_i – коэффициенты уравнения, определяемые соотношениями $A_0 = -0{,}5962 + 6{,}4758Z$; $A_1 = 1{,}7535 - 11{,}4222Z$; $A_2 = -0{,}5806 + 8{,}7025Z$; $A_3 = 8{,}64*10^{-2} - 3{,}4579Z$; $A_4 = -4{,}6*10^{-3} + 0{,}748Z$; $A_5 = -8{,}23*10^{-2}Z$; $A_6 = 3{,}6*10^{-3}Z$.

$Z = C - C_0/C_1 - C_0$, $C_1 = 0{,}1\%$ масс от ВХ, $C_0 = 0{,}065\%$ масс от ВХ.

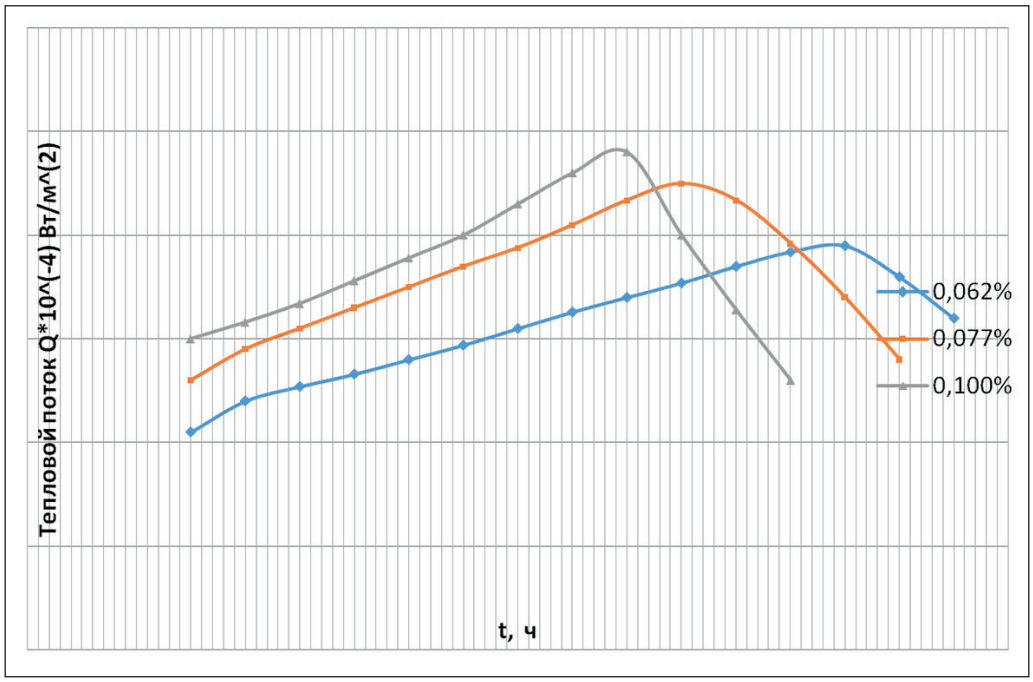

Рис. 3. **Зависимость теплового потока от времени полимеризации при концентрациях инициатора (триганокса): 0,065% масс.от ВХ, 0,077% масс. от ВХ и 0,10% масс. от ВХ**

Данные зависимости применяются для регулирования расхода хладагента в охлаждающей системе реактора с целью обеспечения постоянной температуры во время проведения процесса.

$$G_V(\mathrm{t})\left[\frac{\text{м}^3}{\text{час}}\right] = G_{V0}\mathrm{K}\left(\sum_{i=0}^{6} A_i t^i\right), \quad (2)$$

где K = 0,9 • 10^{-4} м²/Вт

В процессе полимеризации температура полимер-мономерных частиц винилхлорида, обозначенная как T(r), отличается от температуры реакционной среды, обозначенной как Tc. Из решения стационарного уравнения теплопроводности для сферических полимер-мономерных частиц радиусом R и коэффициентом теплопроводности λ следует, что температура определяется по следующему соотношению:

$$\mathrm{T(r)} = \mathrm{T_c} + \frac{\mathrm{QR}}{2\lambda}\left(1 - \frac{\mathrm{r}^2}{\mathrm{R}^2}\right), 0 \le \mathrm{r} \le \mathrm{R}. \quad (3)$$

Видно, что температура достигает максимального значения в центре частицы при r → 0. Отклонение температуры внутри капли от температуры реакционной смеси может достигать 10°C, что влияет на распределение молекулярной массы полимера.

Опираясь на зависимость размеров полимер-мономерных частиц от интенсивности перемешивания и свойств стабилизатора эмульсии [1] и анализа эмпирических данных, была разработана формула, устанавливающая связь химико-технологических параметров с конструктивными особенностями реактора-полимеризатора (рис. 5).

$$d = 0.064\left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{0,6} \cdot \frac{1+2\Phi}{n^{1.2} d_{\text{м}}^{0.8}}, \quad (4)$$

где We = $\rho n^2 d_м^3/\varsigma$ – число Вебера, Φ – объемная доля дисперсной фазы в эмульсии, ρ – плотность, n, $d_м$ – частота вращения и диаметр мешалки соответственно, ς – коэффициент поверхностного натяжения.

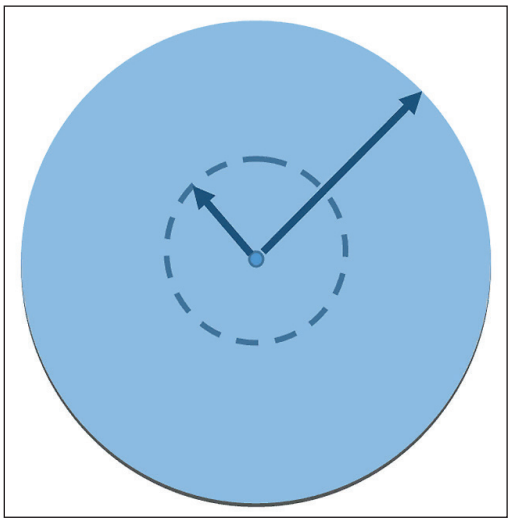

Рис. 4. **Сферическая полимер-мономерная частица радиуса *R***

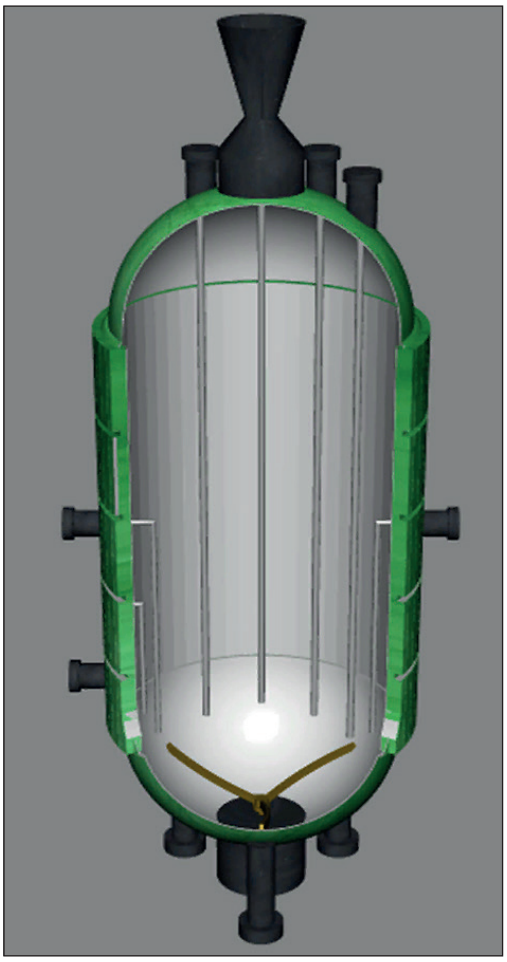

Рис. 5. **Реактор-полимеризатор**

Обобщая полученные зависимости, можно сделать вывод, что, изменяя частоту вращения мешалки, можно изменять размер частиц и, следовательно, молекулярно-массовое распределение поливинилхлорида.

Для улучшения качества выпускаемого продукта в процессе полимеризации винилхлорида были разработаны модели на концептуальном, топологическом и структурном уровнях.

Модель на концептуальном уровне строится с разделением выбранных параметров на входные и выходные параметры. Она содержит исходную информацию для дальнейшего расчета, которая представлена в табл. 1.

Это поможет оптимизировать процесс полимеризации и получить полимер с однородной молекулярной массой, что, в свою очередь, повысит качество выпускаемого продукта.

Таблица 1

Входные и выходные параметры реактора-полимеризатора

Наименование технологических параметров	Переменная
Расход раствора В72	F1
Давление раствора В72	P1
Температура раствора В72	T5
Расход раствора метоцела	F2
Давление раствора метоцела	P2
Температура раствора метоцела	T4
Расход инициатора – триганокс WD-100	F4
Давление инициатора	P4
Температура инициатора – триганокс WD-100	T7
Расход обессоленной воды	F5
Давление обессоленной воды	P7
Температура обессоленной воды	T2
Температура винилхлорида	T3
Давление винилхлорида	P8
Расход винилхлорида	F3
Расход раствора агидола	F6
Расход соды	F7
Температура бикорбоната натрия	T6
Давление суспензии поливинилхлорида	P6
Температура суспензии ПВХ	T1

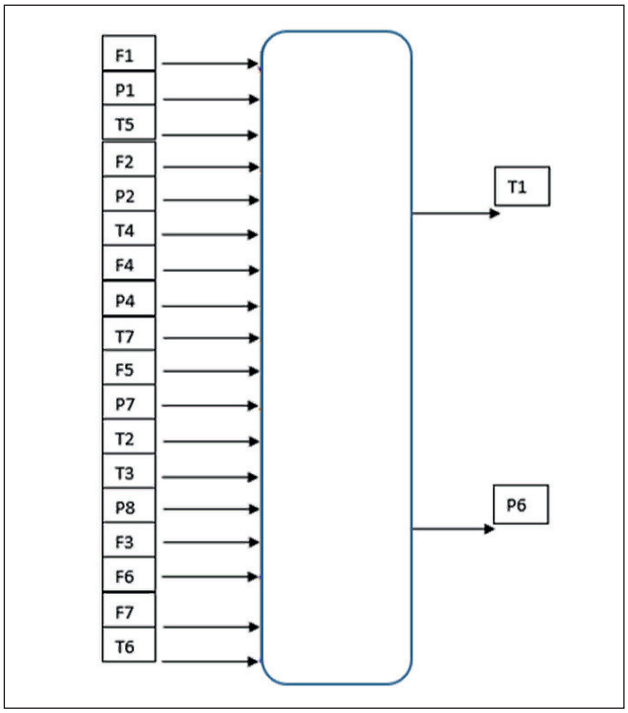

Рис. 6. **Концептуальная модель для разработки нейросети**

Для решения данного задания была выбрана нейронная сеть Cascade-forward backprop, состоящая из десяти сигмоидных нейронов в скрытом слое (рис. 7).

Для проектирования искусственной нейронной сети был использован инструмент nntool в программе Matlab, который позволяет создавать и настраивать нейронные сети в графической среде Neural Network Toolbox. В графическом интерфейсе выбран тип нейронной сети Cascade-forward backprop (рис. 8), количество нейронов во входном, скрытом и выходном слоях. Выбрана функция активации для каждого слоя. Обучена сеть.

ОБСУЖДЕНИЕ

Для оценки результатов и проверки выходных значений нейронных сетей можно использовать проверочные данные. Вкладка «Simulate» в окне настройки нейросети позволяет подавать входные значения и анализировать соответствующие выходные значения.

Табл. 2, содержащая проверочные данные, использована инструментом для оценки работы нейронной сети. С помощью подачи входных значений из табл. 2 в симуляционное окно осуществляется сравнение полученных выходных значений с ожида-

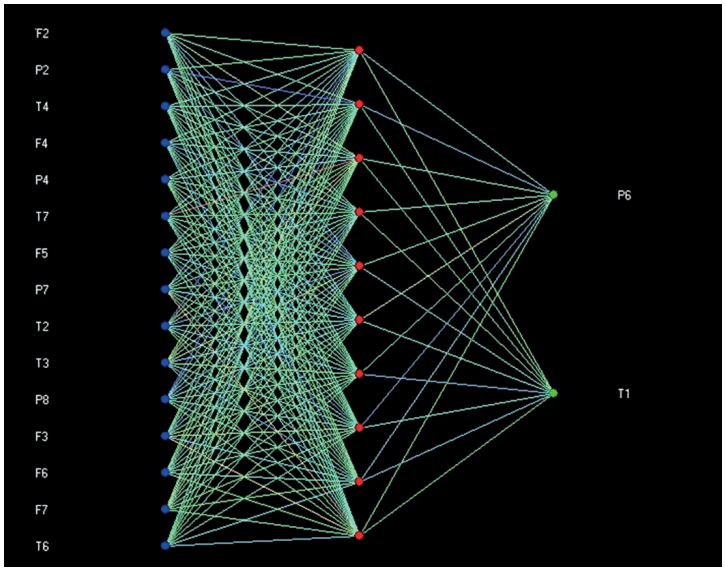

Рис. 7. **Концептуальная модель нейронной сети для регулирования технологических параметров с десятью сигмоидными нейронами скрытого слоя**

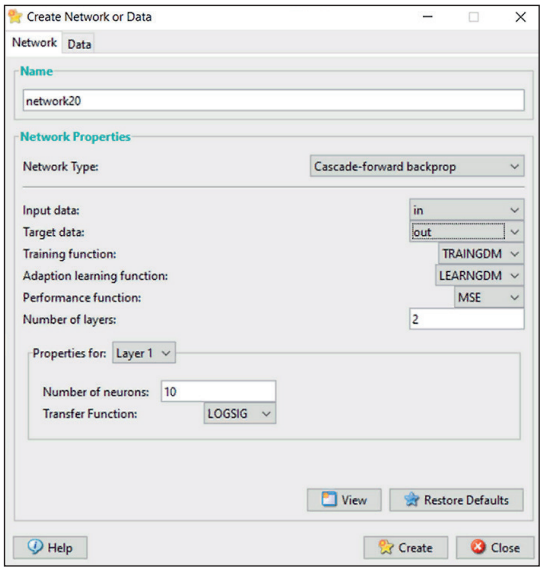

Рис. 8. **Создание искусственной нейронной сети**

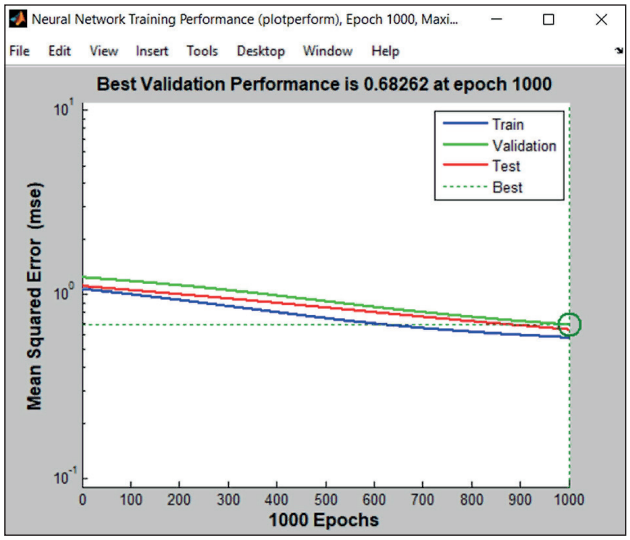

Рис. 9. **Средняя квадратичная ошибка**

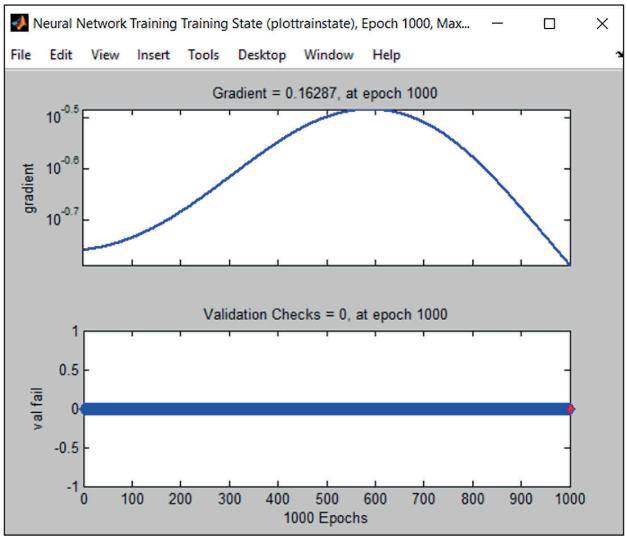

Рис. 10. **Графики обучения сети**

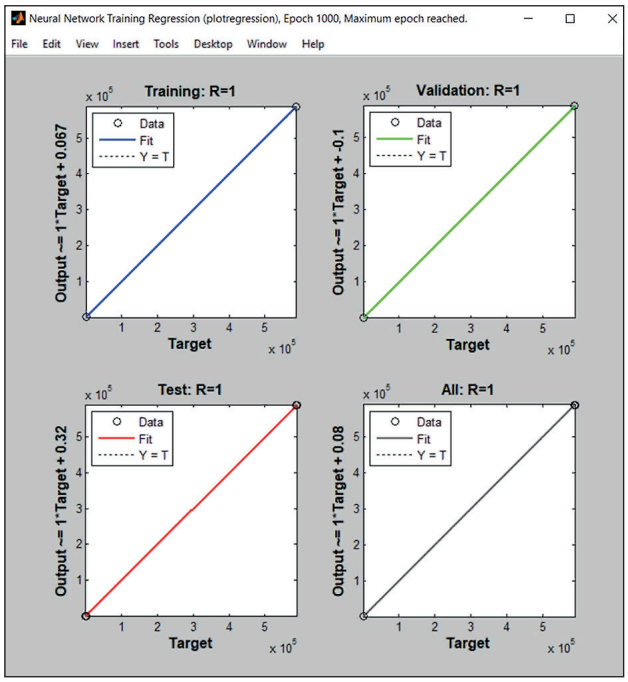

Рис. 11. График линейной регрессии

емыми результатами, что дает возможность оценить точность и надежность нейронной сети в распознавании и классификации данных.

Полученные результаты имеют минимальную погрешность и близки к реальным значениям, что говорит о том, что сеть обучена правильно и зависимость между данными найдена.

Таким образом, разработанную нейросеть можно использовать для прогнозирования молекулярно-массового распределения частиц ПВХ.

Для корректировки марки получаемой продукции можно использовать формулы [2–4].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе исследований были получены следующие результаты.

Была установлена зависимость теплового потока от концентрации инициатора и разработана математическая формула, которая позволяет регулировать расход хладагента в охлаждающей системе реактора для поддержания постоянной температуры и обеспечения изотермического процесса. Эта формула является инструментом для оптимального управления тепловым режимом реактора и обеспечения его стабильной работы.

Было обнаружено, что увеличение температуры приводит к расширению спектра молекулярно-массового распределения в сторону меньших молекулярных масс.

Получена формула, определяющая связь химико-технологических параметров с конструктивными

Таблица 2
Проверка нейронной сети

Входные значения		
	1 группа	**2 группа**
F2, кг/ч	230,11	232,05
P2, Па	872796,85	872797,11
T4, C	24,68	24,72
F4, кг/ч	74,73	75,91
P4, Па	254973,62	254974,09
T7, C	–22,30	–22,34
F5, кг/ч	29005,33	29000,10
P7, Па	200000,61	200000,95
T2, C	95,63	95,18
T3, C	38,15	33,86
P8, Па	591000,05	524078,65
F3, кг/ч	26018,05	26004,93
F6, Па	49032,10	49032,24
F7, кг/ч	5,50	5,47
T6, C	49,00	50,41
Выходные значения		
	Проверочные значения	
P6, Па	588399,02	588397,64
T1, C	66,98	65,81
	Полученные значения	
P6, Па	588400	588400
T1, C	66,74	65,23

особенностями реактора-полимеризатора. Установлено, что, изменяя частоту вращения мешалки, можно изменять размер частиц и, следовательно, молекулярно-массовое распределение поливинилхлорида.

Разработка нейронной сети для описания и прогнозирования процесса полимеризации винилхлорида по суспензионному методу является обоснованной. Для обеспечения качества ПВХ, включая соответствующее молекулярно-массовое распределение, была создана нейронная сеть с использованием каскадной архитектуры прямого и обратного распространения сигнала, десятью сигмоидными нейронами в скрытом слое и двумя линейными нейронами в выходном слое. Разработка проводилась в среде MATLAB.

Проведены обучение по выборке и проверка на тестовых значениях, которая показала, что сеть с минимальной допускаемой погрешностью предсказывает исход процесса при прочих неизменных параметрах. Это, в свою очередь, позволит управлять и оптимизировать технологический процесс и получать продукцию заданного качества.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Ульянов В.М., Гуткович А.Д., Шебырев В.В. Технологическое оборудование производства суспензионного поливинилхлорида: Монография. Н. Новгород. 2004. 253 с.

2. Получение и свойства поливинилхлорида / Под ред. Е.Н. Зильбермана. М.: Химия, 1968. 432 с.

3. Mathematical methods of modeling of polymerizer reactor for the process of polymerization of vinyl chloride. Kovalenko, Y.F., Shulaeva, E.A.AIP Conference Proceeding, 2022, 2467, 060023

4. Mathematical methods for modeling of the process of diaphragm electrolysis Shulaeva, E.A., Kovalenko, Y.F., Serebryakov, E.A. AIP Conference Proceedings, 2022, 2467, 060012

5. Modeling of the process of electrolysis production of caustic, chlorine and hydrogen. Shulaeva, E.A., Shulaev, N.S., Kovalenko, J.F.. Journal of Physics: Conference Series, 2017, 803(1), 012148

6. Simulation and modeling software in chemical technology: Polymerization of vinyl chloride. Shulaeva, E.A., Kovalenko, Y.F., Shulaev, N.S. Advanced Materials Research, 2014, 1040, pp. 581-584

7. Ксандров Н.В. Ресурсосбережение в химической технологии: учебное пособие для вузов / Н. В. Ксандров, О. Р. Ожогина, А. А. Перетрутов. Н.Новгород. 2014. 101с.

8. Коваленко Ю.Ф., Шулаева Е.А., Шулаев Н.С. Моделирование молекулярно-массового распределения при получении поливинилхлорида суспензионным способом // Вестник молодого ученого УГНТУ. 2016. № 1. С. 128-131.

9. Шулаева Е.А., Шулаев Н.С., Коваленко Ю.Ф. Компьютерное моделирование технологических процессов // Бутлеровские сообщения. 2018. Т. 54. № 4. С. 40-55.

10. Муравьева Е.А., Казанцев Р.В., Подлесский Д.В. Разработка нейронной сети для управления процессом щелочной отмывки изопентан- изопрен-толуольной фракции с использованием виртуального анализатора // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Химическая технология и биотехнология. 2022. № 2. С. 120–137.

11. Расчеты аппаратов кипящего слоя / Под ред. И.П. Мухленова, Б.С. Сажина, В.Ф. Фролова. Издательство: «Химия», Ленинградское отделение, 1986. 352 с.

12. Шулаева Е.А., Коваленко Ю.Ф., Серебряков Е.А. Моделирование процесса диафрагменного электролиза // Естественные и технические науки. 2021. № 8 (159). С. 190–192.

13. Шулаева Е.А., Даминев Р.Р., Исламутдинова А.А. Особенности создания имитационно-моделирующих комплексов распространенных нефтехимических процессов на примере процесса синтеза винилацетата // Электротехнические и информационные комплексы и системы. 2013. Т. 9, № 4. 127–134.

14. Шулаева Е.А., Коваленко Ю.Ф. Математическое моделирование и анализ параметров технологического процесса диафрагменного электролиза // Естественные и технические науки. 2022. № 7 (170). С. 214–215.

15. Шулаева Е.А., Шулаев Н.С., Коваленко Ю.Ф. Моделирование параметров электролизера в производстве едкого натра, хлора и водорода // Нефтегазовое дело. 2016. Т. 14. № 4. С. 103–107.

16. Shulaeva E.A., Kovalenko Yu.F., Shulaev N.S. Simulation and Modeling Software in Chemical Technology: Polymerization of Vinyl Chloride. Advanced Materials Research Vol. 1040 (2014), pp. 581–584.

17. Штовба С.Д. Обеспечение точности и прозрачности нечеткой модели Мамдани при обучении по экспериментальным данным // Проблемы управления и информатики. 2007. № 4. С. 102–114.

18. Яхъяева Г.Э. Нечеткие множества и нейронные сети: учеб. пособие. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2008. 316 с.

19. Галушкин А.И. Нейронные сети: основы теории. М.: ГЛТ, 2010. 496 с.

20. Галушкин А.И., Цыпкин Я.З. Нейронные сети: история развития теории: учеб. пособие для вузов. М.: Альянс, 2015. 840 с.

21. Рутковская Д., Пилиньский М., Рутковский Л. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы. М.: РиС, 2013. 384 с.

22. Ширяев В.И. Финансовые рынки: Нейронные сети, хаос и нелинейная динамика. М.: КД Либроком, 2016. 232 с.

23. Редько В.Г. Эволюция, нейронные сети, интеллект: Модели и концепции эволюционной кибернетики. М.: Ленанд, 2017. 224 с.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Коваленко Юлия Фанильевна – ассистент кафедры «Автоматизированные технологические и информационные системы», Институт химических технологий и инжиниринга Уфимского государственного нефтяного технического университета в г. Стерлитамаке, Республика Башкортостан, Россия, julia_str_ak@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0661-2804

Шулаева Екатерина Анатольевна – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры «Автоматизированные технологические и информационные системы», Институт химических технологий и инжиниринга Уфимского государственного нефтяного технического университета в г. Стерлитамаке, Республика Башкортостан, Россия, eshulaeva@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8108-7387

Шулаев Николай Сергеевич – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Информатика, математика и физика», Институт химических технологий и инжиниринга Уфимского государственного нефтяного технического университета в г. Стерлитамаке, Республика Башкортостан, Россия, nshulayev@rambler.ru, https://orcid.org/0000-0002-3595-6948

ВКЛАД АВТОРОВ

Коваленко Ю.Ф. – обработка и анализ экспериментальных данных с применением методов машинного обучения; графическое и табличное представление результатов исследования; написание исходного текста статьи.

Шулаева Е.А. – литературный обзор; проведение экспериментальной работы; сбор и систематизация экспериментальных данных; составление итоговых выводов.

Шулаев Н.С. – научное руководство; разработка концепции и развитие методологии исследования; анализ результатов исследования; написание исходного текста статьи; составление итоговых выводов.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Статья поступила в редакцию 04.10.2023; одобрена после рецензирования 27.10.2023; принята к публикации 03.11.2023.