

УДК 655.225:773.92

Л. М. ДАНИЛЮК, В. В. ШИБАНОВ,
Р. І. МЕРВІНСЬКИЙ, В. Д. СТЕПАНОВ, В. Т. СЕРАНТ

**ОПТИМІЗАЦІЯ СКЛАДУ ВОДРОЗЧИННОГО
ФОТОПОЛІМЕРИЗУЮЧОГО МАТЕРІАЛУ
ДЛЯ ВИГОТОВЛЕННЯ ЕЛАСТИЧНИХ
ДРУКАРСЬКИХ ФОРМ**

Покажемо можливість використання методу симплекс-решіткового планування [2] при синтезуванні твердих фотополімеризуючих систем. Для прикладу брали трикомпонентну композицію складу полімер—мономер 1—мономер 2.

Математичний вираз залежності «склад—властивості» шукали у вигляді

$$\bar{Y} = \sum_{i=1}^n \beta_i X_i + \sum_{\substack{i=1 \\ i < j}}^n \beta_{ij} X_i X_j, \quad (1)$$

де Y — вектор вихідних змінних стану (функції відгуку) суміші; β_i, β_j — коефіцієнти рівняння регресії; X_i, X_j — компонентні фактори досліджуваної суміші за симплекс-решітковим планом експерименту. Коефіцієнти β_i і β_j є лінійними комбінаціями y_i і y_{ij} , які спостерігались у точках решітки на симплексі.

Співвідношення компонентів суміші підпорядковуються умові $X_1 + X_2 + X_3 = 1$. Функція відгуку — це змінні: Y_1 — максимальний вихід гель-фракції (ГФ); Y_2 — пружно-еластична

Матриця планування експерименту і результатів дослідів

№ досліду	Псевдокомпоненти			Фактори суміші			Змінні стану	
	1	2	3	Мономер I, мас. %	Полімер	Мономер II, мас. %	Гель-фракція, %	Пружно-еластична деформація, %
1	1	0	0	60	30	10	79	4,2
2	0	1	0	30	60	10	48	4,3
3	0	0	1	30	40	30	64	5,2
4	0,5	0,5	0	45	45	10	59	6,8
5	0,5	0	0,5	45	35	20	76	4,6
6	0	0,5	0,5	30	50	20	53	7,0
7	0,333	0,333	0,333	40	43	17	61	5,7

деформація фотополімерного шару. Аналізували частину діаграми «склад—властивості» у межах концентрації компонентів (X_1, X_2, X_3), визначеній на основі попередніх двофакторних експериментів з такими значеннями координат вершини трикутника, мас. %: Z_1 (60; 30; 10); Z_2 (30; 60; 10); Z_3 (30; 40; 30). Після цього переходили в нову систему координат. Вершини $Z_1; Z_2; Z_3$ брали у вигляді самостійних псевдокоординат, причому зберігалась умова $Z_1 + Z_2 + Z_3 = 1$. Матриця планування експерименту [1—6] з допоміжною точкою в центрі плану, наведена у таблиці. Обробку матриці планування проводили за методикою праці [3]. Одержано наступні рівняння регресії:

$$\bar{Y}_1 = 79 Z_1 + 48 Z_2 + 64 Z_3 - 18 Z_1 Z_2 + 18 Z_1 Z_3 - 12 Z_2 Z_3, \quad (2)$$

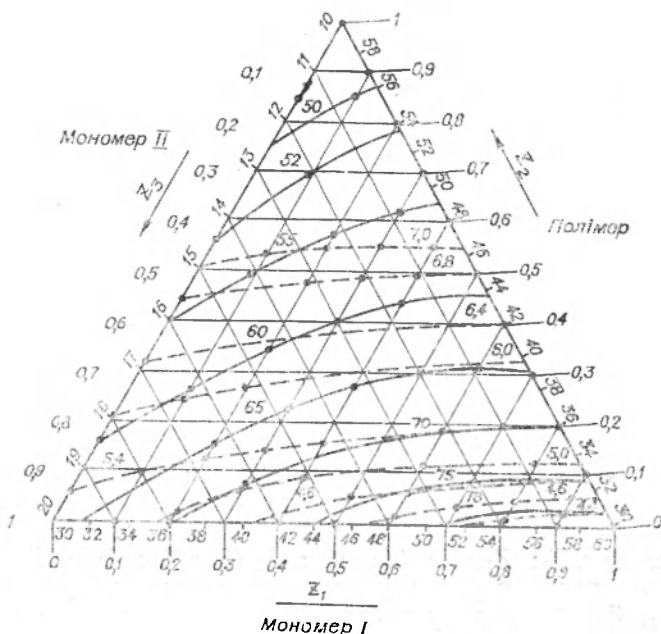
$$\bar{Y}_2 = 4,2 Z_1 + 8,3 Z_2 + 5,2 Z_3 + 2,2 Z_1 Z_2 - 0,4 Z_1 Z_3 + Z_2 Z_3. \quad (3)$$

Середньоквадратична похибка експерименту при п'яти паралельних спробах для дослідження змінних стану $S_{01} = 0,33$, $S_{02} = 0,52$. Відхилення розрахункових значень функції відгуку від експериментальних у середній точці плану (спроба 7) $\Delta Y_1 = 0,2$; $\Delta Y_2 = 0,6$. Перевірка рівнянь по t -критерію Ст'юдента показала, що вони адекватно описують частину діаграми «склад—властивості» ($t_{p_1} = 0,05$; $t_{p_2} = 0,0001$; $t_T = 2,45$) при рівні значимості 0,05; $t_{p_1} \cdot t_{p_2} < t_T$. Перехід до вихідних компонентів досліджуваної системи проводили графічно [1], зображуючи поверхню відгуку трикомпонентної системи проєкціями ліній рівних значень на симплексі, замінивши у рівняннях (2—3) $Z_3 = 1 - Z_1 - Z_2$,

$$\bar{Y}_1 = 64 + 33 Z_1 - 28 Z_2 - 24 Z_1 Z_2 - 18 Z_1^2 + 12 Z_2^2, \quad (4)$$

$$\bar{Y}_2 = 5,2 - 1,4 Z_1 + 4,1 Z_2 + 1,6 Z_1 Z_2 + 0,4 Z_1^2 - Z_2^2. \quad (5)$$

Ці поверхні відгуку, відображені рівняннями (4), (5), представляють собою поверхню типу «зростаючого гребеня», тобто не мають математичних екстремумів і мінімаксів у факторному



Діаграма «склад—властивість» трикомпонентної системи в послідовній області факторного простору: — лінія для Y_2 ; - - - лінія для Y_1 .

просторі Z_1, Z_2, Z_3 . Для побудови діаграми «склад—властивість» використовували програму на мові FORTRANIV:

```
PROGRAM COMMENT *СОСТАВ — СВОЙСТВО *
READ (5) B0, B1, B2, B12, B11, B22, ШХ1
DO 20 Y=48.'80'.2.
WRITE (7,5) Y
5 FORMATE (1F12.4)
X1=.0
6 B=B2+B12*X1
C=B0+B.'*X1+B11*X1*X1-Y
ДЕТ=B*B-4.*B22*C
IF (ДЕТ < .0) 10,10,7
7 X1=(-B+SQRT (ДЕТ))/2. *B22
```

$$X22 = (-B - \text{SQRT}(\text{DET})) / (2. * B22)$$

$$X32 = 1. - X1 - X22$$

$$X1H = (X1 + 1.) / .0333$$

$$X21H = (X21 + 1.) / .0333$$

$$X22H = (X22 + 1.) / .0333$$

$$X31H = (X31 + .5*) / .05$$

$$X32H = (X31 + .5) / .05$$

WRITE (7,8) X1H, X21H, X22H, X31H, X32H

FORMATE (5F12.3)

:10 X1=X1+ШХ1

IF (X1-.1.)6,6,15

:15 CONTINUE

20 CONTINUE

STOP END

Діаграма «склад—властивості» для досліджуваної системи показана на рисунку. Зі збільшенням змінного стану $Y_1 Y_2$ зменшується. Основним параметром, який впливає на якість фото-полімерних форм, вибираємо змінну Y_1 (вихід гель-фракції). Отже, щоб одержати фотоствердну композицію з виходом гель-фракції 70...78% й вище та пружно-еластичною деформацією 5,4...4,4% і менше, необхідна суміш з полімером в кількості 30...34 мас.%, мономером I 54...60 мас.% і мономером II 6...16 мас. %.

1. Ахназарова С. Л., Кафаров В. В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии М., 1985. 2. Бондарь А. Г. Статюха Г. А. Планирование эксперимента в химической технологии. К., 1976. 3. Новые идеи в планировании эксперимента / Под ред. Налимова В. В. М., 1969.

Стаття надійшла до редколегії 12.02.88