

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВУЛКАНИЗАЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ С ПОМОЩЬЮ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

С. Г. Тихомиров¹, А. А. Маслов¹, О. В. Карманова²,
И. А. Хаустов¹, Е. В. Линцова¹, А. С. Олейник¹

Кафедры: информационных и управляющих систем (1), tikhomirov_57@mail.ru; технологий органических соединений, переработки полимеров и техноферной безопасности (2), ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий», Воронеж, Россия

Ключевые слова: автомобильная шина; вулканизация; математическое моделирование; программный комплекс; резиновая смесь.

Аннотация: Разработаны математический аппарат, устанавливающий взаимосвязь между составом эластомерной композиции и предполагаемыми свойствами вулканизата с учетом параметров процесса его изготовления, а также программный продукт для проведения научно-исследовательских работ по изучению вулканизации резиновых смесей с использованием многокомпонентных структурирующих систем. Реализованы алгоритмы расчета режимов вулканизации толстостенных армированных композитов, позволяющие при проектировании оценивать технологические возможности производства, планировать выбор материалов и оборудования. С использованием разработанного программного продукта дана оценка параметров процесса изотермической вулканизации.

Производство автомобильных шин – многостадийный процесс, который осуществляется на шинном заводе и включает анализ рынка, разработку цифровой модели и прототипа, производство резиновых смесей и полуфабрикатов, сборку, вулканизацию и контроль качества готовой продукции [1]. В настоящее время не существует эффективных методов, которые на основе информации о компонентах резиновых смесей позволяли бы прогнозировать свойства конечных продуктов. Существенное влияние на формирование структуры вулканизата оказывают концентрации исходных компонентов и параметры технологического процесса. В этом случае свойства конечных продуктов определяют по контрольным образцам, полученным из соответствующей партии. Необходимость прогнозирования свойств и поведения таких изделий в условиях их эксплуатации определяет создание новых подходов, основанных на глубоком теоретическом анализе и математическом описании [2, 3]. При моделировании структуры эластомеров перспективными могут быть такие подходы, в которых последовательно рассматриваются свойства каждого компонента композиции. Их практическая реализация при изготовлении изделий и эластомеров позволит снизить трудоемкость технологического процесса и стоимость готовой продукции, обеспечит качественное прогнозирование технологических и физико-механических свойств материалов [4].

Вулканизация – завершающий этап производства шин, на котором изделие из полуфабрикатов, состоящих из армирующих материалов и резиновых смесей, на вулканизационном оборудовании приобретает необходимую форму и новые свойства. В этом процессе тепло передается шине из формы, в которой поддерживается высокая температура за счет циркуляции теплоносителя. После завершения процесса вулканизации готовая шина вынимается из формы и охлаждается при комнатной температуре. В таблице 1 показан пример режима вулканизации пневматической шины. Данный процесс энергоемкий, и его оптимизация позволит не только производить шины высокого качества, но и увеличить объем выпускаемой продукции. Для оптимизации процесса вулканизации необходима соответствующая оценка распределения температурных полей в различных слоях шины во времени. Основной способ определения условий вулканизации заключается в использовании термопар, которые помещают в разные части сырой шины для измерения температуры и построения профилей температурных изменений во времени [5]. Однако данный подход является инертным и дорогостоящим. Поэтому производители шин ищут альтернативные методы, основанные на моделировании процесса с помощью методов конечных элементов, для прогнозирования распределения температуры и скорости вулканизации в объеме продукта.

Процесс вулканизации шины условно можно разделить на восемь этапов, что сложнее, чем процесс изготовления полуфабрикатов. Метод с использованием термопар не предсказывает степень вулканизации в произвольном месте шины, поскольку изменения температуры могут быть получены только в том месте, где расположена термопара. Данный процесс представляет собой сложную процедуру теплового взаимодействия «жидкость – твердое тело», и для получения точных решений необходимо использовать метод конечных элементов [5, 6]. Поэтому необходимо разработать альтернативный метод температурного контроля процесса вулканизации с учетом состава резиновых смесей.

Цель работы – разработка математического аппарата, устанавливающего взаимосвязь между составом эластомерной композиции и прогнозируемыми свойствами готовой резиновой смеси с учетом параметров ее изготовления и обработки.

Таблица 1

Режим вулканизации пневматических шин

Операция	Давление, МПа	Время, мин	Температура пара, °С
Закрытие формы	сегментная форма 150 °С/боковая пластина 140 °С		
Заполнение паром	0,8...1,2	8	178
Первая заливка воды		2	
Заполнение горячей водой:			
цикл	2,4...3,0	77	165
без цикла		70	165
Слив воды	0,5	2	–
	0		
Вакуумирование			
Общее время цикла	–	163	

Структура программного обеспечения

Для исследования процессов вулканизации эластомерных композиций на основе математического моделирования разработано программное обеспечение. Приложение включает программные модули компьютерного моделирования вулканизации эластомерных композиций: симуляции процесса; расчета управляющих параметров; прогнозирования свойств полимерных композиций; накопления базы данных экспериментов и расчетов.

В каждом модуле реализованы алгоритмы обработки данных в соответствии с выбранным режимом: моделирование процессов теплопередачи и кинетики процесса вулканизации; расчет управляющих воздействий технологического процесса; режим сбора статистических данных. На рисунках 1 – 3 изображены схемы взаимодействий и основная логика реализованных модулей программной среды.

Режим моделирования теплопередачи в резиновых изделиях предназначен для расчета температурных полей и оценки теплофизических параметров эластомерной композиции. Методы расчета основаны на использовании математической модели, представленной уравнением теплопроводности с заданными начальными и граничными условиями [7]:

$$C(T) \frac{\partial T(l, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial l} \left\{ \lambda(T) \frac{\partial T(l, t)}{\partial l} \right\} + q(l, t), \quad l \in [0, L], \quad t \in [0, t_k]; \quad (1)$$

$$T(l, 0) = T_0(l), \quad l \in [0, L]; \quad (2)$$

$$T(0, t) = T_B(t), \quad T(L, t) = T_H(t), \quad t \in [0, t_k]. \quad (3)$$

где $C(T)$ – коэффициент объемной теплоемкости образца, Дж/(м³·К); $T(l, t)$ – температура, К; L – толщина образца, м; t_k – конечный момент времени, с; $T_B(t)$, $T_H(t)$ – значения температур на верхней и нижней частях резинового образца, К; $\lambda(T)$ – коэффициент теплопроводности образца, Вт/(м·К), $q(l, t)$ – плотность тепловыделения, Вт/м³.

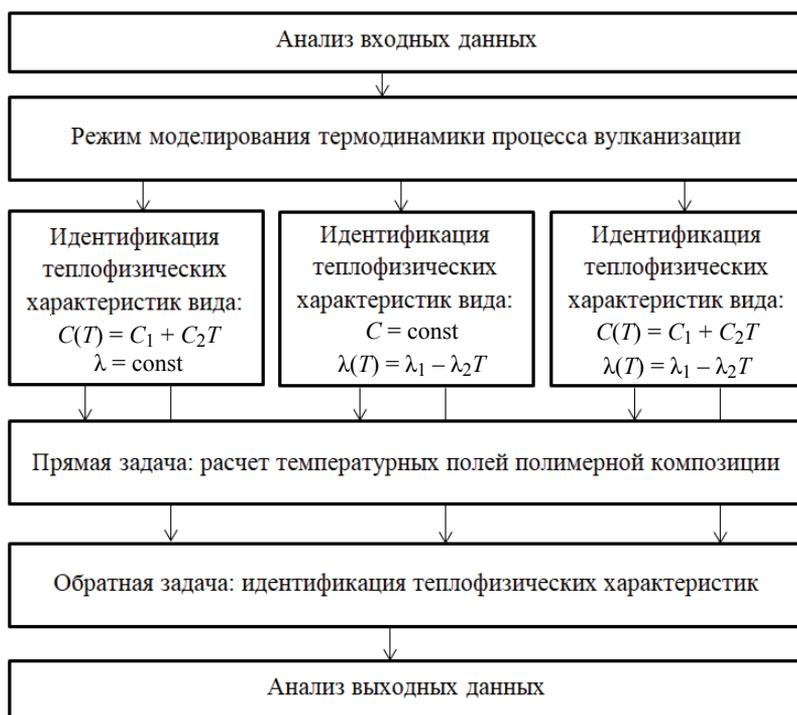
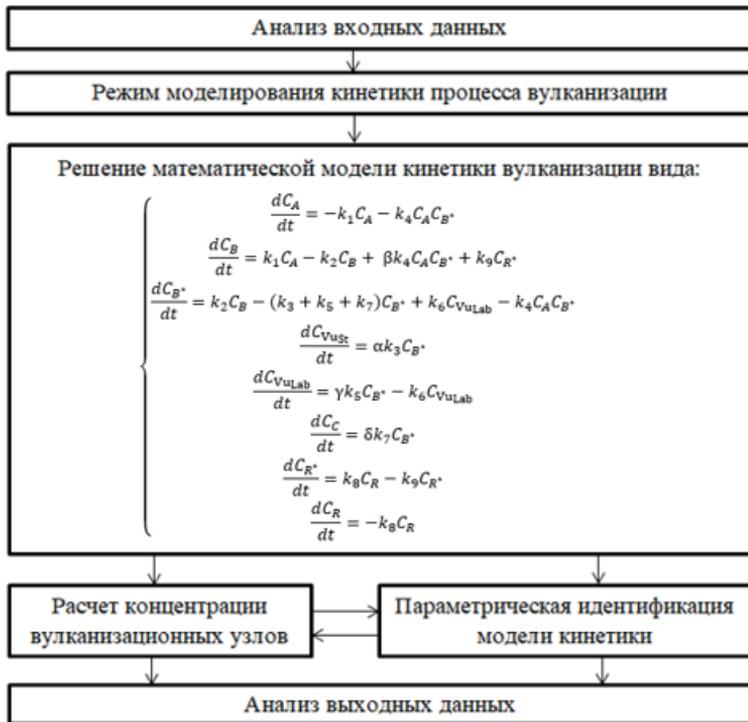


Рис. 1. Схема подсистемы моделирования термодинамики вулканизации



а)



б)

Рис. 2. Схема подсистемы моделирования кинетики вулканизации (а) и расчета оптимальных управляющих параметров (б)

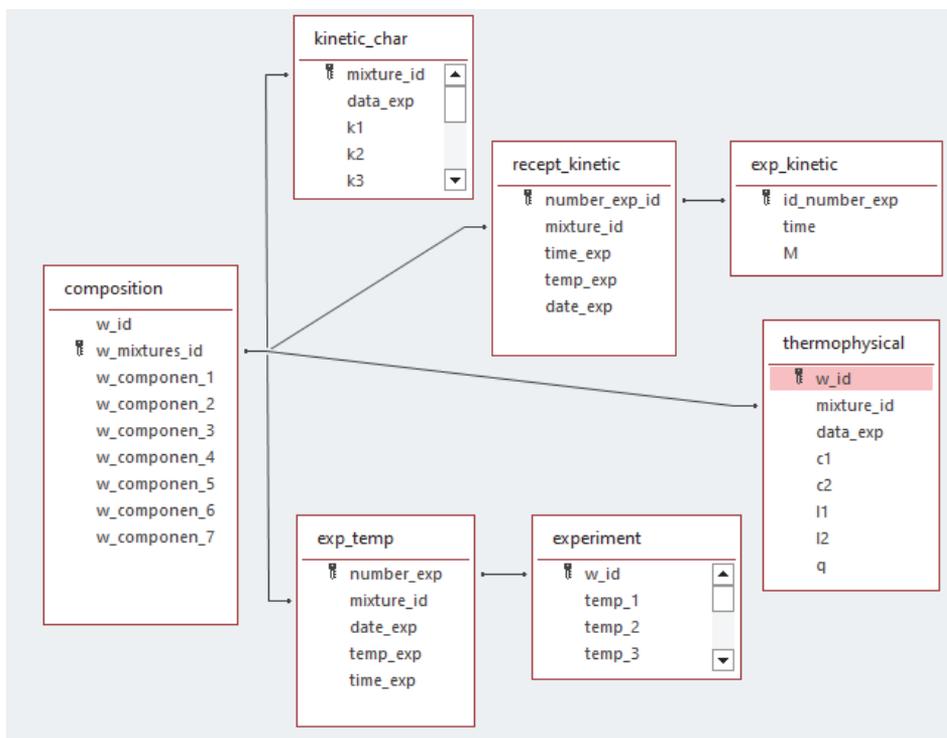


Рис. 3. Инфологическая модель модуля накопления статистических данных

В программе реализованы алгоритмы расчета коэффициентов теплопроводности и теплоемкости эластомерных композиций в зависимости от температуры по экспериментальным данным (рис. 4). Исследователь выбирает, с помощью какого вида аппроксимирующей зависимости проводить оценку теплофизических параметров. В частности, устанавливаются начальная температура вулканизации; расчетное значение коэффициента теплоемкости и априорные значения параметров аппроксимирующей функции теплопроводности в зависимости от температуры; толщина изделия; общая продолжительность процесса. Программа проводит расчеты температурных кривых изделия на разных его уровнях, в результате которых формируется массив температур и выводятся графики. Погрешность расчетных значений относительно экспериментальных данных рассчитывается автоматически и выводится на экран пользователя по завершению построения результатов. Для сохранения и дальнейшего анализа полученных данных предусмотрен импорт во встроенную подсистему статистических накоплений. При работе с программой рекомендовано использовать натурные образцы в форме цилиндра с теплоизолированной боковой поверхностью.

В режиме моделирования имеется возможность расчета степени вулканизации многослойных изделий (как при изотермических, так и неізотермических условиях протекания процесса). В основу модели положена система дифференциальных уравнений (см. рис. 2, а). Кинетические реакции в процессе вулканизации изображены на рис. 5, где А – действительный агент вулканизации; В – предшественник сшивания; В* – активная форма предшественника сшивания; С – внутримолекулярно-связанная сера; Vu_{St} , Vu_{Lab} – стабильные и лабильные узлы вулканизационной сетки; R – каучук; R^* – макрорадикал каучука, образованный в результате термофлуктуационного распада; α , β , γ и δ – стехиометрические коэффициенты; $k_1, k_2, \dots, k_8, k_9$ – константы скоростей реакций.

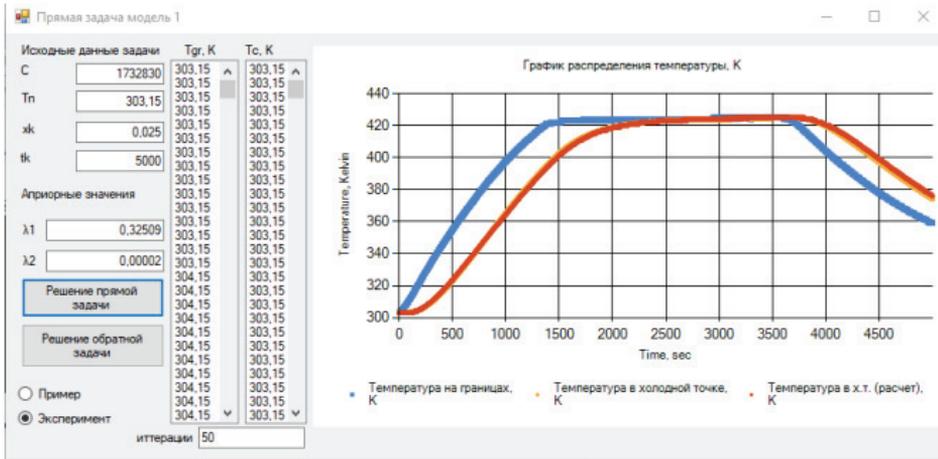


Рис. 4. Режим моделирования. Расчет теплофизических коэффициентов

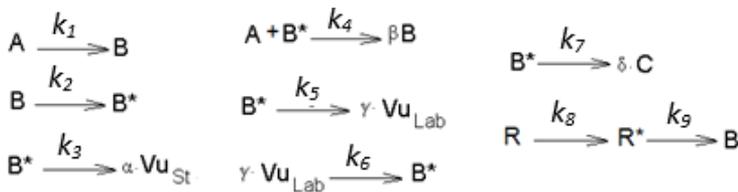


Рис. 5. Кинетические реакции в процессе вулканизации

Начальная концентрация действительного агента вулканизации определяется формулой

$$[ДAB] = \xi[S_8][A_c][Akt]^\theta[R]^\eta, \quad (5)$$

где ξ , θ , η – стехиометрические коэффициенты; $[S_8]$, $[A_c]$, $[Akt]$, $[R]$ – начальные концентрации соответственно серы, ускорителя вулканизации, активатора вулканизации, макрорадикала каучука, моль/кг.

Решение задачи идентификации кинетических параметров осуществляется путем минимизации целевой функции (6):

$$\Phi(k_1, k_2, \dots, k_8, k_9, \alpha, \beta, \gamma, \xi, \theta, \eta) = \int_0^{t_k} q^2(k_1, k_2, \dots, k_8, k_9, \alpha, \beta, \gamma, \xi, \theta, \eta, t) dt; \quad (6)$$

$$q(k_1, k_2, \dots, k_8, k_9, \alpha, \beta, \gamma, \xi, \theta, \eta, t) = \frac{R(M(t) - M_{\min})}{M_{\max} - M_{\min}} - C_{Vu_{St}}, \quad (7)$$

где M_{\max} , M_{\min} – соответственно максимальное и минимальное значение крутящего момента $M(t)$; R – масштабный коэффициент; $C_{Vu_{St}}$ – концентрация стабильных вулканизационных узлов.

Режим расчета управляющих воздействий реализует численное моделирование процесса вулканизации на основе решения двух взаимосвязанных задач: определения температурного поля в изделии и расчета степени завершенности процесса. Алгоритмы решения заключаются в последовательном расчете температурных полей на каждом участке образца. На основании данных о температуре рассчитывается степень вулканизации $X(l, t)$. Выражение для плотности тепловыделения содержит величину $X(l, t)$, характеризующую степень завершенности

Теплофизические и кинетические параметры									
Сохранить		Закрыть		Отобразить данные с по 3 февраля 2022 г.		Выберите образец Образец_1		Фильтровать	
Массовые доли ингредиентов исследуемых образцов									
w_id	w_mixture_id	w_componen_1	w_componen_2	w_componen_3	w_componen_4	w_componen_5	w_componen_6	w_componen_7	
1	Образец_1	0.505	0.353	0.01	0.0153	0.0253	0.0153	0.0756	
2	Образец_2	0.539	0.309	0.011	0.0163	0.02696	0.0163	0.0625	
3	Образец_3	0.574	0.265	0.011	0.0173	0.02862	0.0173	0.0494	
4	Образец_4	0.60856	0.2222	0.01216	0.0183	0.03028	0.0183	0.0363	
*									
Кинетические параметры									
mixture_id	data_exp	k1	k2	k3	k4	k5	k6	k7	k8
Образец_1	29.03.2020	442	424	2434	24242	4242	4242	4242	2424
*									
Теплофизические характеристики									
w_id	mixture_id	data_exp	c1	c2	l1	l2	q		
1	Образец_1	29.03.2020	1732830	0	0.34953	0.00002	0		
*									

Рис. 6. Окно базы данных накопления расчетных значений параметров модели кинетики и теплофизических характеристик

процесса вулканизации. Степень завершенности процесса можно определить как отношение концентрации вулканизационных узлов к его максимальному значению. В результате модуль позволяет на основе экспериментальных данных подбирать температурно-временные режимы процесса с учетом рецепта полимерной композиции и условий проведения процесса.

В системе реализована база данных экспериментов и результатов расчетов различных режимов, где: composition – массовые доли ингредиентов состава смеси; exp_temp – условия и дата проведения эксперимента на лабораторной установке; experiment – данные с термопар; recipe_kinetic – условия и дата эксперимента на реометре; exp_kinetic – показания реометра; thermophysical – теплофизические параметры; kinetic_char – кинетические характеристики (см. рис. 3).

В качестве примера показано окно базы данных для накопления расчетных параметров модели кинетики и теплофизических характеристик (рис. 6).

Программный комплекс целесообразно использовать в процессах производства автомобильных покрышек на этапах лабораторных исследований, что существенно позволит увеличить производственные объемы выпускаемой продукции за счет подбора оптимальных температурно-временных параметров технологического процесса.

Эксперимент и обработка результатов

С целью демонстрации работы программного обеспечения научных исследований процессов вулканизации приведен алгоритм действий для идентификации констант кинетики, на основе экспериментальных данных. В общем виде последовательность действий исследования следующая:

- 1) подготовка рецепта, изготовление эластомерной композиции и снятие показаний на реометре контрольного образца;
- 2) оценка начальных концентраций;
- 3) обработка реометрической кривой;
- 4) определение концентраций поперечных связей в текущий момент времени;
- 5) идентификация констант с помощью программного обеспечения;
- 6) анализ результатов.

Реограммы описывают вулканизационную кривую. Оцифровка может происходить вручную или с помощью специальных программ (например, Gr2Digit). В таблице 1 представлен принципиальный рецепт (полимерная основа и вулканизирующая группа) резиновой смеси контрольного примера, использующийся в производстве протектора автомобильной шины.

Рецепт эластомерной композиции контрольного примера «Протектор шины»

Назначение/группа	«Протектор шины»	
	Наименование	Вес, кг
Полимерная основа	СКДН	30,579
Активатор вулканизации	Оксид цинка	2,132
Ускоритель вулканизации	ТВБС	1,421
Вулканизирующий агент	Сера	1,35

Экспериментальные исследования контрольных образцов проводили при температуре 443,15 К и продолжительности вулканизации 10 минут. Зависимость изменения крутящего момента резиновой смеси в ходе вулканизации представлена на рис. 7. Из-за особенностей исследования на реометре анализу подвергают несколько контрольных образцов, чтобы оценить равномерность протекания процесса и исключить погрешности испытания.

Полученные данные необходимо обработать, нормировать. Первоначально крутящий момент переводят в условные единицы

$$M_{\text{усл}} = \frac{M_{\text{тек}} - M_{\text{min}}}{M_{\text{max}} - M_{\text{min}}}. \quad (8)$$

Затем условные единицы переводят в концентрации поперечных связей, моль/кг:

$$C_{V_{\text{st}_i}} = M_{\text{усл}_i} R, \quad i = 0, \dots, n, \quad (9)$$

где $R = 5 \cdot 10^{-19}$ – масштабный коэффициент; n – число точек в массиве данных по времени.

Согласно формуле (5) для оценки концентрации действительного агента вулканизации необходимо знать начальные концентрации серы, ускорителя, активатора и макрорадикалов каучука, после перевода их в мольные концентрации данные параметры принимают следующие значения, моль/кг:

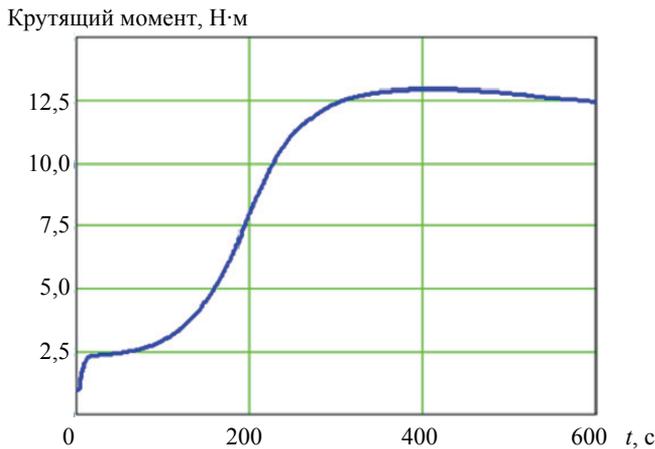


Рис. 7. График экспериментальных кривых вулканизации с реометра после оцифровки

$$[S_8] = 0,033415087;$$

$$[A_c] = 0,26798075;$$

$$[Akt] = 0,166782689;$$

$$[R] = 0,003032264.$$

В расчетной формуле действительного агента вулканизации присутствуют коэффициенты ξ , θ , η , которые необходимо идентифицировать.

Оцифрованные и обработанные экспериментальные данные вводятся в программу, выбираются начальные условия, приближения, диапазон поиска констант. Результаты идентификации для контрольного образца представлены в табл. 2 и на рис. 8, 9.

Таблица 2

**Оценка констант модели для контрольного образца
«Протектор шины» при температуре вулканизации 443,15 К**

Параметр, с ⁻¹ (k_4 , кг·с ⁻¹ /моль)	Значение	Параметр	Значение
k_1	0,009388	α	1
k_2	0,02046	β	2
k_3	$4,216e^{-21}$	γ	1
k_4	0,00834	ξ	1,65
k_5	$1,228e^{-22}$	θ	1,5
k_6	$1,667e^{-22}$	η	0
k_7	0,02129		
k_8	0,01998		
k_9	0,02285		

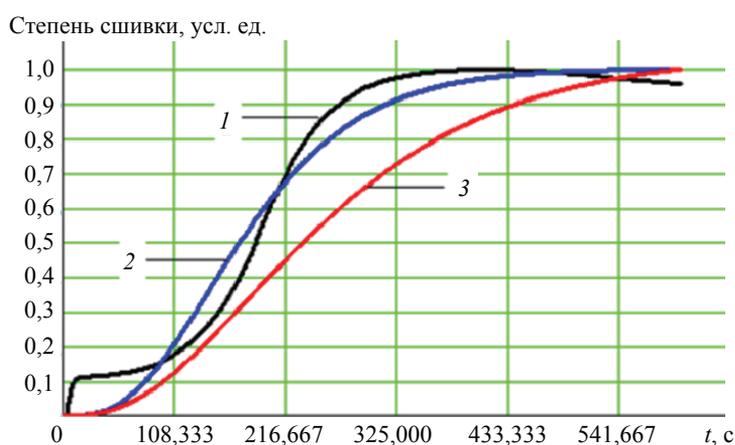


Рис. 8. Графики реометрических кривых в условных единицах:

1 – эксперимент; 2 – график расчетных значений после идентификации параметров модели;
3 – расчет из априорных приближений

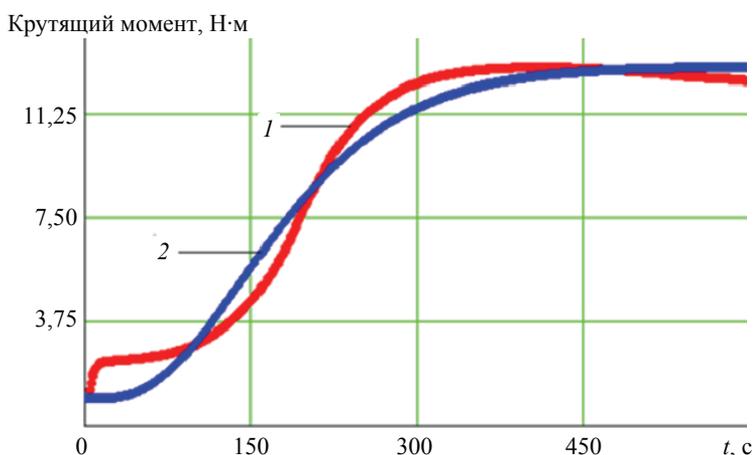


Рис. 9. Графики реометрических кривых:
1 – эксперимент; 2 – расчет

В результате идентификации параметров модели и оценки погрешности можно сделать вывод, что предложенная модель адекватно описывает кинетику изотермической вулканизации. Средняя относительная погрешность для контрольного примера составила 4,86 %.

Анализируя современные подходы к моделированию процессов вулканизации, а также производство изделий из эластомерных композиций, можно сделать вывод, что основными факторами, влияющими на формирование пространственной вулканизационной структуры, являются условия проведения вулканизации (теплоносители и энергоносители), физические параметры (давление, температура; продолжительность процесса) и состав композиции. С точки зрения тепловых условий вулканизация происходит при переменных температурах и характеристиках теплопередачи [8, 9]. Наиболее часто используемые каучуки (бутадиенстирольные, бутадиеновые, изопреновые) вулканизируются серой, атомы которой участвуют в образовании межмолекулярных поперечных связей. Основные температурные режимы вулканизации резиновых изделий осуществляются при 413,15...443,15 К. При вулканизации наблюдается неоднородный температурный профиль в объеме толстостенных изделий. С повышением температуры продолжительность вулканизации уменьшается, но для многослойных крупногабаритных изделий увеличивается вероятность перевулканизации на поверхности готовых изделий и неравномерного распределения сшивки по толщине. Таким образом, ухудшается качество продукции [10].

Внешнее давление, действующее на продукт, существенно влияет на повышение прочности резины. С увеличением давления пористость резины уменьшается, а прочность связи между слоями увеличивается. Для обеспечения высокой производительности промышленного оборудования вулканизацию необходимо проводить в максимально короткие промежутки времени. Поскольку за счет поглощенного тепла процесс вулканизации продолжается после окончания нагрева. Данное обстоятельство необходимо учитывать при определении параметров процесса. Для повышения однородности температурного поля процесс нагрева можно проводить со ступенчатым или предварительным нагревом исходной резиновой смеси. Поэтому желательно не добиваться полной вулканизации эластомера [10]. Временные и температурные условия вулканизации зависят от природы каучука и исходного состава эластомерной композиции. Основными параметрами процесса являются время индукционного периода, оптимум вулканизации – время, за которое достигаются требуемые физико-механические свойства вулканиза-

тов, плато вулканизации – интервал времени, в течение которого сохраняются требуемые физико-механические показатели вулканизата. При выборе температурно-временных параметров процесса в основном используется эмпирический подход, не позволяющий получить достоверно воспроизводимые результаты и расчетные режимы изготовления изделий с оптимальными свойствами на достаточно высоком научно-техническом уровне [11]. В промышленных условиях режим вулканизации выбирается на основании расчетных и экспериментальных методов, обеспечивающих выбор программы реализации процесса. При этом для выполнения выбранных режимов необходимо оборудовать процесс средствами автоматизации и контроля, обеспечивающими проведение выбранной процедуры.

Результат аналитического обзора различных подходов к описанию структурирования эластомеров показал, что на сегодняшний день не существует единого подхода к описанию процесса неизотермической вулканизации и общей методики оценки вулканизационных характеристик и свойств вулканизатов, которая позволила бы осуществлять подбор оптимального температурно-временного режима вулканизации [12, 13]. В настоящее время изучение и расчет процессов вулканизации основывается в основном на результатах натурального эксперимента, эмпирических и графоаналитических методах расчетов, а их обобщенный анализ отсутствует. Опыт исследований в данной области науки показывает необходимость использования расчетных методов для определения оптимального режима вулканизации, а также лежащих в их основе математических моделей и алгоритмов.

Заключение

На основе анализа теоретических подходов к описанию вулканизации усовершенствована общая кинетическая схема процесса вулканизации. Предложены дополнительные реакции, описывающие образование и деструкцию лабильных полисульфидных связей, внутримолекулярную циклизацию и другие реакции, приводящие к модификации макромолекул каучука, образованию макрорадикала и его реакцию с подвесками действительного агента вулканизации. Математическая модель структурирования дополнена начальными условиями, которые определены как функции исходных концентраций компонентов вулканизирующей группы.

Разработан программный продукт, предназначенный для проведения научно-исследовательских работ при изучении процессов вулканизации резиновых смесей с использованием многокомпонентных структурирующих систем. Комплекс программ имеет модульную структуру, что позволяет осуществлять его расширение без потери функциональности. Направлением его модернизации является включение в состав математического описания неизотермического режима вулканизации с дальнейшей интеграцией в контур. С использованием разработанного программного продукта осуществлена оценка параметров процесса изотермической вулканизации на контрольном примере рецептуры «Протектор шины». Максимальное отклонение от экспериментальных данных не превышает 5 %, что свидетельствует о точности модели.

Список литературы

1. Шины. Некоторые проблемы эксплуатации и производства / Р. С. Ильясов, В. Дорожкин, Г. Я. Власов, А. А. Мухутдинов. – Казань : Изд-во Казанского гос. технологического ун-та, 2000. – 576 с.
2. Khang, T. Vulcanization Kinetics Study of Natural Rubber Compounds Having Different Formulation Variables / T. Khang, Z. Ariff // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 2012. – Vol. 109. – P. 1545 – 1553.
3. Wang, Dh. Mathematical modelling and numerical simulation of the non-isothermal in-mold vulcanization of natural rubber / Dh. Wang, Q. Dong, Y. X. Jia // Chinese Journal of Polymer Science. – 2015. – Vol. 33. – P. 395 – 403. doi: 10.1007/s10118-015-1594-2

4. Повышение эффективности процесса вулканизации шин / В. К. Гордеев, В. Пороцкий, В. Савельев, Т. Алдоина // Вопросы практической технологии производства шин. – 2000. – № 1 (50). – С. 85 – 98.
5. Маркелов, В. Г. Моделирование процесса вулканизации толстостенных резинотехнических изделий / В. Г. Маркелов, М. Е. Соловьев // Изв. высш. учеб. заведений. Серия: Химия и хим. технология. – 2007. – Т. 50, № 4. – С. 95 – 98.
6. Фищенко, А. Н. Использование метода конечных элементов при математическом моделировании процесса вулканизации шин / А. Н. Фищенко // Изв. высш. учеб. заведений. Северо-Кавказский регион. Техн. науки. – 2007. – № 6 (142). – С. 45 – 48.
7. Расчет температурных полей пневматических шин в процессе вулканизации / Ю. В. Пятаков, С. Г. Тихомиров, О. В. Карманова, А. А. Маслов // Проблемы шин, РТИ и эластомерных композитов : сб. науч. тр. XXVII междунар. симпозиума, 10 – 14 октября 2016 г., Москва. – М., 2016. – С. 405 – 413.
8. Павлов, В. В. Разработка методики оптимизации тепловых режимов вулканизации резиновых покрытий / В. В. Павлов, Ю. Р. Осипов, С. Ю. Осипов // Вестн. Череповецкого гос. ун-та. – 2008. – № 3 (18). – С. 104 – 111.
9. Современное состояние мирового производства неформовых и формованных резинотехнических изделий. Аналитическая обзорная информация. – М. : НИИЭМИ, 2005. – 233 с.
10. Теплофизические свойства компонентов горючих систем : справ. / Ю. Э. Шелудяк, Л. Я. Кашпоров, Л. А. Малинин, В. Н. Цалков. – М. : НПО Информ ТЭИ, 1992. – 184 с.
11. Вулканизация эластомеров / Под ред. Г. Аллигера, И. Сьетуна ; пер. с англ. А. А. Донцова. – М. : Химия, 1967. – 428 с.
12. Milani, G. Optimization of Extrusion Production Lines for EPDM Rubber Vulcanized with Sulphur: A Two-Phase Model Based on Finite Elements and Kinetic Second Order Differential Equation / G. Milani, F. Milani // Computers & Chemical Engineering. – 2012. – Vol. 43. – P. 173 – 190. doi: 10.1016/j.compchemeng.2012.04.006
13. Методика расчета оптимального времени вулканизации резиновых смесей / А. А. Маслов, О. В. Карманова, С. Г. Тихомиров, И. А. Хаустов // Проблемы шин, РТИ и эластомерных композитов : сб. науч. тр. XXVIII междунар. симпозиума, 15 – 19 октября 2018 г., Москва. – М., 2018. – С. 258 – 264.
14. Методика расчета кинетики процесса неизотермической вулканизации крупногабаритных изделий / С. Г. Тихомиров, Ю. А. Пятаков, О. В. Карманова [и др.] // Химическое и нефтегазовое машиностроение. – 2017. – № 10. – С. 9 – 12.

Software for Investigation of Polymer Composition Vulcanization Processes Using Mathematical Modeling

S. G. Tikhomirov¹, A. A. Maslov¹, O. V. Karmanova²,
I. A. Khaustov¹, E. V. Lintsova¹, A. S. Oleinik¹

*Department of Information and Control Systems (1), tikhomirov_57@mail.ru;
Department of Technology of Organic Compounds, Polymer Processing
and Technosphere Safety (2), Voronezh State University of Engineering Technologies,
Voronezh, Russia*

Keywords: automobile tire; curing; math modeling; software package; rubber compound.

Abstract: A mathematical apparatus has been developed to establish the relationship between the composition of the elastomeric composition and the expected properties of the vulcanizate, given the parameters of the process of its manufacture, as well as a software product to conduct research work on the study of the vulcanization of rubber compounds using multicomponent structuring systems. Algorithms for calculating the vulcanization modes of thick-walled reinforced composites have been implemented, making it possible to evaluate process capabilities of production during design, plan the choice of materials and equipment. Using the developed software product, the parameters of the isothermal vulcanization process were evaluated using a test example of the “Tire Protector” formulation.

References

1. Il'yasov R.S., Dorozhkin V., Vlasov G.Ya., Mukhutdinov A.A. *Shiny. Nekotoryye problemy ekspluatatsii i proizvodstva* [Tires. Some problems of operation and production], Kazan: Izdatel'stvo Kazanskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo universiteta, 2000, 576 p. (In Russ.)
2. Khang T., Ariff Z. Vulcanization Kinetics Study of Natural Rubber Compounds Having Different Formulation Variables, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2012, vol. 109, pp. 1545-1553.
3. Wang Dh., Dong Q., Jia Y.X. Mathematical Modelling and Numerical Simulation of the Non-Isothermal In-Mold Vulcanization of Natural Rubber, *Chinese Journal of Polymer Science*, 2015, vol. 33, pp. 395-403, doi: 10.1007/s10118-015-1594-2
4. Gordeyev V.K., Porotskiy V., Savel'yev V., Aldonina T. [Increasing the efficiency of the tire vulcanization process], *Voprosy prakticheskoy tekhnologii proizvodstva shin* [Questions of practical tire production technology], 2000, no. 1 (50), pp. 85-98. (In Russ.)
5. Markelov V.G., Solov'yev M.Ye. [Modeling of the process of vulcanization of thick-walled rubber products], *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Seriya: Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya* [News of higher educational institutions. Series: Chemistry and chemical technology], 2007, vol. 50, no. 4, pp. 95-98. (In Russ., abstract in Eng.)
6. Fishchenkov A.N. [The use of the finite element method in mathematical modeling of the tire vulcanization process], *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Severo-Kavkazskiy region. Tekhnicheskkiye nauki* [News of higher educational institutions. North Caucasian region. Technical science], 2007, no. 6 (142), pp. 45-48. (In Russ., abstract in Eng.)
7. Pyatakov Yu.V., Tikhomirov S.G., Karmanova O.V., Maslov A.A. *Problemy shin, RTI i elastomernykh kompozitov* [Problems of tires, rubber goods and elastomer composites], Collection of Scientific Papers of the XXVII International Symposium, 10-14 October, 2016, Moscow, 2016, pp. 405-413. (In Russ.)
8. Pavlov V.V., Osipov Yu.R., Osipov S.Yu. [Development of methods for optimizing the thermal regimes of vulcanization of rubber coatings], *Vestnik Cherepovetskogo gosudarstvennogo universiteta* [Bulletin of the Cherepovets State University], 2008, no. 3 (18), pp. 104-111. (In Russ.)
9. *Sovremennoye sostoyaniye mirovogo proizvodstva neformovnykh i formovannykh rezinotekhnicheskikh izdeliy. Analiticheskaya obzornaya informatsiya* [The current state of the world production of non-molded and molded rubber products. Analytical review information], Moscow: NIIEMI, 2005, 233 p. (In Russ.)

10. Sheludyak Yu.E., Kashporov L.Ya., Malinin L.A., Tsalkov V.N. *Teplofizicheskiye svoystva komponentov goryuchikh sistem: spravochnik* [Thermophysical properties of combustible system components: a handbook], Moscow: NPO Inform TEI, 1992, 184 p. (In Russ.)
11. Alliger G., S'yetun I. [Eds.] *Vulkanizatsiya elastomero* [Elastomer Vulcanization], Moscow: Khimiya, 1967, 428 p. (In Russ.)
12. Milani G., Milani F. Optimization of Extrusion Production Lines for EPDM Rubber Vulcanized with Sulphur: A Two-Phase Model Based on Finite Elements and Kinetic Second Order Differential Equation, *Computers & Chemical Engineering*, 2012, vol. 43, pp. 173-190, doi: 10.1016/j.compchemeng.2012.04.006
13. Maslov A.A., Karmanova O.V., Tikhomirov S.G., Khaustov I.A. *Problemy shin, RTI i elastomernykh kompozitov* [Problems of tires, rubber products and elastomer composites], Collection of Scientific Papers of the XXVIII International Symposium, 15-19 October, 2018, Moscow, 2018, pp. 258-264. (In Russ., abstract in Eng.)
14. Tikhomirov S.G., Pyatakov Yu.A., Karmanova O.V., Maslov A.A., Khaustov I.A., Podval'nyy S.L. [Method for calculating the kinetics of the process of non-isothermal vulcanization of large-sized products], *Khimicheskoye i neftegazovoye mashinostroyeniye* [Chemical and oil and gas engineering], 2017, no. 10, pp. 9-12 (In Russ.)
-

Software zur Untersuchung der Vulkanisierungsprozesse von Polymerzusammensetzungen mittels mathematischer Modellierung

Zusammenfassung: Es sind ein mathematisches Gerät, das die Beziehung zwischen der Elastomierzusammensetzung und den erwarteten Eigenschaften des Vulkanisats unter Berücksichtigung der Parameter des Herstellungsprozesses feststellt, sowie ein Softwareprodukt für die Durchführung von Forschungsarbeiten bei der Untersuchung der Vulkanisation von Kautschukmischungen unter Verwendung von Mehrkomponenten-Strukturierungssystemen entwickelt. Es sind Algorithmen zur Berechnung der Vulkanisationsmodi von dickwandigen verstärkten Verbundwerkstoffen implementiert, die es ermöglichen, die technologischen Fähigkeiten der Produktion während des Entwurfs zu bewerten und die Auswahl von Materialien und Ausrüstung zu planen. Unter Verwendung des entwickelten Softwareprodukts sind die Parameter des isothermen Vulkanisationsprozesses anhand eines Testbeispiels «Reifenschutz» bewertet.

Le logiciel pour les études des processus de la vulcanisation des compositions polymères à l'aide de la simulation mathématique

Résumé: Sont élaborés un appareil mathématique établissant la relation entre le contenu de la composition élastomère et les propriétés supposées du vulcanisat, en tenant compte des paramètres du processus de fabrication, ainsi qu'un produit logiciel pour les travaux de recherche sur l'étude de la vulcanisation des mélanges

de caoutchouc à l'aide de systèmes de structure multicomposants. Sont réalisés les algorithmes de calcul des modes de vulcanisation des composites renforcés à parois épaisses ce qui permet d'évaluer les capacités technologiques de production, de planifier le choix des matériaux et des équipements lors de la conception. Sont évalués les paramètres du procédé de vulcanisation isotherme à l'aide d'un produit logiciel élaboré à l'exemple de test de la formule "Protecteur des pneus".

Авторы: *Тихомиров Сергей Германович* – доктор технических наук, профессор кафедры информационных и управляющих систем; *Маслов Александр Александрович* – кандидат технических наук, доцент кафедры информационных и управляющих систем; *Карманова Ольга Викторовна* – доктор технических наук, профессор кафедры технологии органических соединений, переработки полимеров и техносферной безопасности; *Хаустов Игорь Анатольевич* – доктор технических наук, профессор кафедры информационных и управляющих систем; *Линцова Елена Викторовна* – аспирант кафедры информационных и управляющих систем; *Олейник Александр Сергеевич* – студент, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий», Воронеж, Россия.