

К. Г. Кичатов (к.х.н., доц.), Т. Р. Просочкина (д.х.н., проф. зав. каф.),
Р. Ф. Хамадалиев (асп.), С. Ф. Суважбаева (асп.), А.В. Митюкова (асп.)

ПРИМЕНЕНИЕ ЦИФРОВЫХ ИНСТРУМЕНТОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПОЛИМЕРОВ С ЗАДАНЫМИ СВОЙСТВАМИ

Уфимский государственный нефтяной технический университет,
кафедра нефтехимии и химической технологии
450064, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1; e-mail: agidel@ufanet.ru

K. G. Kichatov, T. R. Prosochkina, R. F. Khamadaliev, S. F. Suvazhbaeva, A. V. Mityukova

SEARCH AND EXPLORE CHEMICAL INFORMATION OF POLYMERS WITH SPECIFIED PROPERTIES USING DIGITAL INSTRUMENTS

Ufa State Petroleum Technological University
1, Kosmonavtov Str., 450064, Ufa, Russia; e-mail: agidel@ufanet.ru

Создан программно-аппаратный комплекс, предназначенный для прогнозирования и проектирования свойств полимеров и полимерных материалов. Составной частью комплекса являются разработанные прототип базы данных полимеров для хранения и поиска информации о свойствах полимерных материалов и композитов на их основе и прототип программы управления базой данных для поиска информации в базе данных. С применением комплекса выполнен выбор кандидата для создания нового композиционного материала по заданным свойствам заказчика и спрогнозирован подходящий по свойствам класс полимеров – полиуретан. Разработана рецептура, и получен образец нового композиционного материала с заданными свойствами на основе полиуретана.

Ключевые слова: база данных; взаимосвязь «структура-свойство»; композиционный материал; полиуретан; программно-аппаратный комплекс; цифровое прогнозирование.

Исследование выполнено в рамках реализации стратегического проекта «Химия новой экономики». Научно-исследовательский проект «Цифровое прогнозирование и проектирование веществ с заданными свойствами».

A hardware-software suite for prediction and design of properties of polymers and polymer materials has been created. The complex includes a developed prototype of a polymer database for storing and searching information about properties of polymer materials and polymer-based composites, and a prototype of a database management program for searching information in the database. The complex was used to select a candidate for creation of a new composite material on the basis of properties specified by the customer, and to predict suitable polymer class polyurethane on the basis of its properties. The new composite material with the required properties has been developed.

Key words: composites; database; digital prediction; hardware-software suite; polyurethanes; «structure-property» relationship.

The research was carried out as part of the implementation of the strategic project «Chemistry of the New Economy». The name of the project is «Digital prediction and design of substances with required properties».

В последнее время в тематике мировых научных исследований немаловажное место отводится применению цифровых технологий в нефтегазохимии, в том числе при разработке новых материалов. В Российской Федерации большинство промышленных предприятий, производящих полимеры, ориентированы на получение базовых марок со стандартными свойствами, что не позволяет должным образом конкурировать с зарубежными производителями, переходящими на индивидуальный подход к каждому перспективному потребителю. Кроме того, ввиду ограниченности собственного ассортимента затруднен переход от промежуточного сырья (полимер) к получению готовой продукции или изделий, в связи с чем задача получения материалов с индивидуальными или уникальными свойствами является стратегически важной.

Обработка большого объема данных требует наличия высокоскоростного доступа к характеристикам полимеров и композитов. Это может быть обеспечено путем создания собственной базы данных, которая обеспечивает структурированное хранение информации, высокоскоростной доступ к значениям, дает возможность расширять базу данных за счет внесения дополнительных свойств или информации.

Облачные решения, существующие в настоящее время, не могут обеспечить достаточную безопасность хранения данных и скорость доступа к информации при обработке данных на стороне клиента.

Программно-аппаратный комплекс включает высокопроизводительную рабочую станцию для проведения компьютерного моделирования структуры и свойств полимерных и композиционных материалов, постоянно пополняемую базу данных свойств полимеров базовых полимеров, композитов, добавок и наполнителей, реактор для синтеза полимерных композиций и добавок, отделочное оборудование для получения готовых полимерных материалов и опытных изделий на их основе.

В качестве архитектуры будущей программы рассматривались несколько вариантов реализации ПО:

- клиентская часть с локальной базой данных;
- клиент-серверная архитектура;
- трехзвенная архитектура, включающая сервер базы данных, сервер бизнес-логики и клиентское приложение ¹.

Выбор третьего варианта архитектуры программного комплекса, включающего базу данных и управляющую программу, обусловлен возможностью обеспечения требований к хранению дан-

ных (совместный доступ, разграничение прав пользователей, ссылочная целостность, репликация), и простотой распространения программы и обеспечения доступа пользователей, поскольку в качестве клиента можно использовать браузер, который установлен на всех персональных компьютерах. На рис. 1 приведены наиболее популярные серверы баз данных.

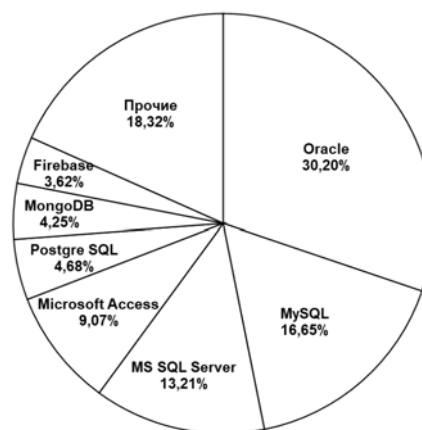


Рис. 1. Рынок серверов баз данных по состоянию на 2021 г. ²

В качестве сервера выбран Microsoft SQL Server, на этапе разработки использовалась версия Express ³. Клиентская часть разработана с применением среды программирования Embarcadero RAD Studio ⁴, сервер бизнес-логики был написан с использованием uniGUI Web Application Framework ⁵, связь «сервер баз данных – сервер бизнес-логики» осуществляется по технологии Fire DAC (компоненты входят в поставку RAD Studio) ⁶, запросы данных проводятся посредством языка SQL.

Программа управления выполнена по трехзвенной архитектуре, что облегчает разработку новых версий программы, добавление новых функций, и алгоритмов обработки свойств полимеров и композитов.

Клиентская программа (рабочий прототип) представлена в виде однодокументного окна, открываемого в окне браузера путем перехода на веб-страницу. Окно разделено на 2 области – область навигации и рабочая область.

Прототип программы управления базой данных позволяет выполнять следующие функции:

- создание, хранение, отображение и вывод в таблицы основной информации о свойствах полимеров и композитов;
- изменение свойств полимеров и композитов;
- осуществлять параметрический поиск информации по параметрам.

Созданная база данных и программа управления позволяет производить сбор, корректиров-

ку и обработку информации по свойствам полимеров и композитов.

Созданные прототип базы данных «SMART Polymer And Composite Database» и прототип программы управления базой данных «SMART Polymer And Composite Data Manager» зарегистрированы в ФИПС^{7,8}.

Разработан и введен в опытную эксплуатацию программно-аппаратный комплекс по прогнозированию и проектированию свойств полимерных и композиционных материалов на их основе.

Для разработки прототипа базы данных полимеров для хранения и поиска информации о свойствах полимерных материалов и композитов на их основе, осуществлен литературный и патентный поиск данных, описывающих свойства полимеров и композитов. Рассмотрены и внесены в базу сведения о десяти базовых полимерах и композиционных материалах на их основе (полиэтилен, полипропилен, поливинилхлорид, полистирол, полиуретан, полиэтилентерефталат, полисульфон, полиэфирсульфон, СКЭП/СКЭПТ, эпоксидные смолы), значения величин механических, физических и физико-химических свойств (всего более 2000 значений).

Для управления базой данных создан прототип программы управления, предназначенный для ввода, корректировки и поиска информации о свойствах полимерных материалов и композитов на их основе, внесенных в базу данных.

Формы программы позволяют осуществить подбор полимерного материала или композита по заданным свойствам как путем выборки из базы

данных, так и путем интеллектуального поиска. Предусмотрена печать отчетных форм по результатам поиска.

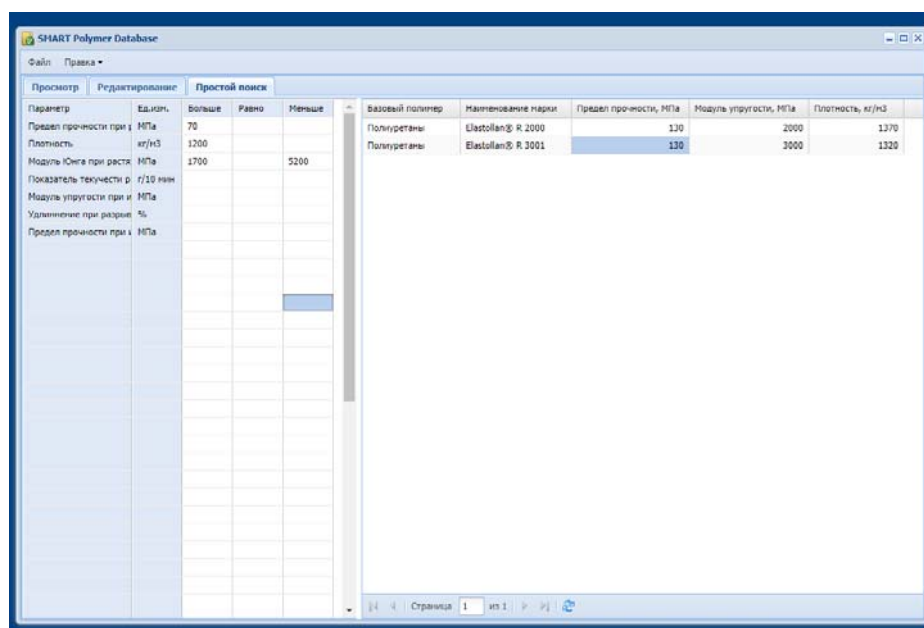
Программа выполнена по клиент-серверной технологии и обеспечивает совместный доступ и редактирование информации в режиме реального времени. Программа может применяться при поиске конструкционного материала с заданными свойствами, а также использоваться для выбора кандидатов для проектирования нового материала.

С применением разработанных прототипов базы данных и программы управления ею осуществлен выбор кандидата для создания нового композиционного материала по заданным заказчиком потребительским и эксплуатационным свойствам:

- предел прочности при растяжении – не менее 70 МПа;
- плотность – не менее 1200 кг/м³;
- модуль Юнга – не менее 1700 МПа.

Отбор полимеров-кандидатов проведен по созданной базе данных с применением инструмента «Простой поиск» программы управления базой данных. Поиск выполнен с помощью SQL-запроса, который формирует программа. В результате проведенного отбора выявлено, что требуемым набором потребительских свойств обладают полиуретаны (рис. 2).

Далее проведены работы по разработке рецептуры материала и получен образец полимера с заданными свойствами. Выполненные экспериментальные исследования подтвердили факт соответствия свойств полученного образца полиуретана заданным характеристикам материала.



The screenshot shows the 'SMART Polymer Database' application window. It features a search interface with a table of results. The table has columns for 'Базовый полимер' (Base polymer), 'Наименование марки' (Mark name), 'Предел прочности, МПа' (Tensile strength, MPa), 'Модуль упругости, МПа' (Modulus of elasticity, MPa), and 'Плотность, кг/м3' (Density, kg/m3). The results show two entries for 'Полиуретаны' (Polyurethanes) with the brand 'Elastollan® R 2000' and 'Elastollan® R 3001'. The first entry has a tensile strength of 130 MPa and a density of 1270 kg/m3. The second entry has a tensile strength of 130 MPa and a density of 1320 kg/m3. The interface also includes a search filter table on the left with columns for 'Параметр' (Parameter), 'Единица' (Unit), 'Больше' (More), 'Равно' (Equal), and 'Меньше' (Less).

Параметр	Единица	Больше	Равно	Меньше
Предел прочности при растяжении	МПа	70		
Плотность	кг/м3	1200		
Модуль Юнга при растяжении	МПа	1700		5200
Показатель текучести при растяжении	г/10 мин			
Модуль упругости при растяжении	МПа			
Удлинение при разрыве	%			
Предел прочности при разрыве	МПа			

Базовый полимер	Наименование марки	Предел прочности, МПа	Модуль упругости, МПа	Плотность, кг/м3
Полиуретаны	Elastollan® R 2000	130	2000	1270
Полиуретаны	Elastollan® R 3001	130	3000	1320

Рис. 2. Результаты поиска полимеров-кандидатов с помощью программы управления базой данных «SMART Polymer And Composite Data Manager»

В то же время отмечена недостаточная эффективность стандартных инструментальных методов исследования для детального анализа и выявления механизма влияния структуры, формы и концентрации добавок на свойства полученного материала. В этой связи, для проведения дальнейших исследований возникает необходимость в применении цифровых методов с целью прогнозирования свойств полимеров и композитов.

Для разработки научных и технологических основ создания композиционных материалов с заданными свойствами необходимо выполнение многомасштабного моделирования с использованием методов квантовой химии для количественного расчета межмолекулярных взаимодействий «полимер-наполнитель», программного обеспечения COMSOL для моделирования механических и физико-химических свойств композитов, и искусственного интеллекта для более точного подбора полимеров-кандидатов.

Литература

1. Шкрыль А. А. Разработка клиент-серверных приложений в Delphi. – СПб.: БХВ-Петербург, 2006. – 480 с.
2. Самые популярные базы данных 2006–2021 гг. Блог компании OTUS. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://habr.com/ru/company/otus/blog/560278/>, свободный.
3. MicrosoftSQLServer. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://microsoft.com/ru-ru/sql-server/>, свободный.
4. EmbarcaderoRADStudio. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://embarcadero.com/ru/products/rad-studio/start-for-free>, свободный.
5. uniGUI – Web Application Framework for Delphi. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.unigui.com>, свободный.
6. Сорокин А. В. Delphi. Разработка баз данных. – СПб.: Питер, 2005. – 477 с.
7. Свидетельство о государственной регистрации базы данных №2022622324. База данных полимеров, композиционных материалов и их свойств «Smart polymer and composite database» / К.Г. Кичатов, Т.Р. Просочкина и др. – Заявка №2022622223. Дата поступления 14.09.2022. Зарегистрировано в Реестре баз данных 22.09.2022.
8. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2022668153. Программа управления базой данных полимеров и композитов «Smart polymer and composite data manager» / К. Г. Кичатов, Т. Р. Просочкина и др. – Заявка №2022666828. Дата поступления 14.09.2022. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 04.10.2022.

References

1. Shkryl' A.A. *Razrabotka klient-servernykh prilozheniy v Delphi* [Development of client-server applications in Delphi]. St. Petersburg, BHV-Petersburg Publ., 2006, 480 p.
2. *Samye populyarnye bazy dannyh 2006–2021 gg. Blog kompanii OTUS* [Most Popular Databases 2006-2021 OTUS Blog]. <https://habr.com/ru/company/otus/blog/560278/>, svobodnyj.
3. MicrosoftSQLServer. <http://microsoft.com/ru-ru/sql-server/>, svobodnyj.
4. EmbarcaderoRADStudio. [<http://embarcadero.com/ru/products/rad-studio/start-for-free>, svobodnyj.
5. uniGUI – Web Application Framework for Delphi. <http://www.unigui.com>, svobodnyj.
6. Sorokin A.V. Delphi. *Razrabotka baz dannykh* [Database development]. St. Petersburg, Piter Publ., 2005, 477 p.
7. Kichatov K. G., Prosochkina T. R. *Baza dannykh polimerov, kompozitsionnykh materialov i ikh svoystv «Smart polymer and composite database»* [Database of polymers, composite materials and their properties «Smart polymer and composite database»]. Certificate of state registration of the database RF no.2022622324, 2022.
8. Kichatov K. G., Prosochkina T. R. *Programma upravleniya bazoy dannykh polimerov i kompozitov «Smart polymer and composite data manager»* [The program for managing the database of polymers and composites «Smart polymer and composite data manager»]. Certificate of state registration of the computer program no.2022668153 RF, 2022.