

# Uporaba načrtovanja poskusov in modeliranja z nevronske mreže pri določitvi recepture premaza z optimalnimi reološkimi in mehanskimi lastnostmi

## Optimization of Rheological and Mechanical Properties of Paint Using Methods of Experimental Design and Neural Network Modeling

Leskovšek N.<sup>1</sup>, COLOR Medvode  
L. Tušar, M. Tušar, SRC d.o.o. Ljubljana

*Premaz je kompleksna zmes velikega števila med seboj delujočih komponent. Sestava pa je odvisna predvsem od namena uporabe. Cilj raziskave je bil določiti vplive izbranih dejavnikov (komponent) na mehanske in reološke lastnosti premaza in določiti optimalno recepturo s pomočjo uporabe modela nevronske mreže. Nevronski model omogoča raziskovanje vpliva dejavnikov na posamezno lastnost, izbrano skupino lastnosti ali na vse lastnosti skupaj. Na osnovi ustreznega ovrednotenega modela lahko določimo lastnosti premaza v celotnem izbranem območju posameznih dejavnikov.*

*Ključne besede: načrtovanje poskusov, modeliranje, nevronska mreža, optimalna receptura premaza*

*A paint has to be regarded as a complex mixture of mutually interacting components, usually formulated for a specific application condition. The purpose of this work was an investigation of all influences of selected factors on mechanical and rheological properties (responses) of the high solid coating and to find the optimal formulation through neural network model. This approach allows to investigate each quality parameter (response) separately or all of them together, according to the variations of each component (factor) of the formulation. On the basis of the model properties are known for every formulation i.e. combination of factors within the area determined by the selected range of factors.*

*Key words: experimental design, modeling, neural network, optimal coating recipe*

### 1. Uvod

Premaz, kot zmes več različnih komponent, ki medsebojno vplivajo, predstavlja kompleksen sistem in kot tak primeren za uporabo metod načrtovanja poskusov<sup>1</sup>. Količina komponent v zmesi je odvisna od pogojev pri aplikaciji in kakovostnih zahtev kupca. Zaradi nizke molske mase veziva v premazih z majhno vsebnostjo topil, je stekanje z vertikalnih površin, ki ga lahko ovrednotimo z merjenjem reoloških lastnosti, kritična lastnost premaza. Raziskovali smo vpliv količine posameznih komponent (veziva, pigmenta, reoloških aditivov, polnila in matirnega sredstva) na reološke<sup>2</sup> in mehanske lastnosti premaza.

### 2. Eksperimentalno delo

Za študij smo izbrali sistem poliester/melamin, ki se običajno uporablja kot pečeno sušeci premaz za industrijsko lakiranje. Dejavniki, ki smo jih spreminjali v vnaprej izbranih možnih območjih in po izbranem načrtu, so bili vsebnost pigmenta  $x_1$ , veziva  $x_2$ , polnila  $x_3$ , matirnega sredstva  $x_4$  in reoloških aditivov  $x_5$ . Na ta način smo dobili različne premaze, ki smo jih ovrednotili na osnovi meritev mehanskih in reoloških lastnosti. Merjene mehanske lastnosti so bile trdota, elastičnost, odpornost na udar in kontra udar, oprijem, odpornost na organska topila in sijaj. Merjene reološke lastnosti pa so bile stekanje, viskoznost, mejna napetost  $\tau_0$ , iz tokovnih krivulj, modul akumulacije  $G'$  in modul energijskih izgub  $G''$  iz oscilatornih meritev. Mehanske lastnosti smo merili po ustreznih DIN in ISO standardih, reološke pa s 'control stress' reometrom Carri - Med CSL 500.

<sup>1</sup> Nevenka LESKOVŠEK, dipl. inž. kem.  
COLOR Medvode  
Komandanta Staneta 4, 61215 Medvode

Pri načrtovanju poskusov smo uporabili načrt za zmesi z vnaprej določenimi robnimi pogoji. Celotni načrt obsega 23 točk. Za preliminarne raziskave smo izvedli 15 poskusov.

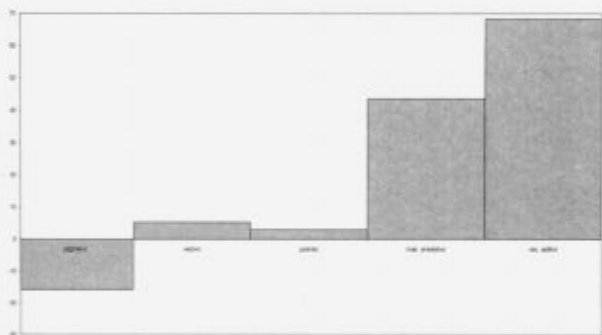
### 3. Modeliranje in rezultati

Za določitev vplivov posameznih dejavnikov (vsebnost izbranih komponent) na posamezno lastnost premaza smo uporabili linearni model tipa

$$y = a \cdot x_1 + b \cdot x_2 + c \cdot x_3 + d \cdot x_4 + e \cdot x_5 \quad (1)$$

Na **sliki 1** je prikazan vpliv posameznih komponent (pigmenta  $x_1$ , veziva  $x_2$ , polnila  $x_3$ , matirnega sredstva  $x_4$  in reoloških aditivov  $x_5$ ), ki se odraža s parametri  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$  in  $e$  (glede na **enačbo 1**) na modul akumulacije energije  $G'$  ( $y$ ). Na  $G'$  ( $y$ ) imajo največji vpliv reološki aditivi  $x_5$ , nekoliko manjši matirno sredstvo  $x_4$  sledijo pa pigment  $x_1$ , vezivo  $x_2$  in polnilo  $x_3$ .

Modeliranje smo izvedli tudi z nevronske mreže<sup>4,5</sup>, kjer smo uporabili algoritem za vzratno popravljanje napak. Arhitektura nevronske mreže je bila dvonivojska s petimi vozli na prvem nivoju (5 dejavnikov), s šestimi vozli na skritem nivoju ter desetimi vozli (število merjenih lastnosti) na izhodnem nivoju (**slika 2**).



**Slika 1:** Velikostni red parametrov v linearni enačbi  $y = a \cdot x_1 + b \cdot x_2 + c \cdot x_3 + d \cdot x_4 + e \cdot x_5$  določa vpliv posamezne komponente (pigmenta  $x_1$ , veziva  $x_2$ , polnila  $x_3$ , matirnega sredstva  $x_4$  in reoloških aditivov  $x_5$ ) na modul akumulacije energije  $G'$  ( $y$ )

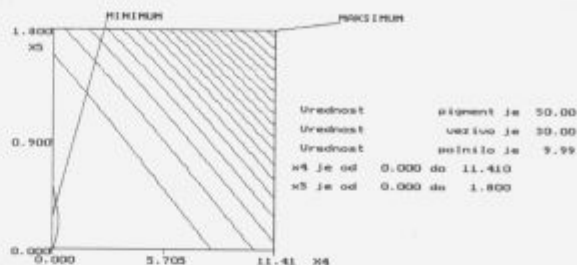
**Figure 1:** The size of the parameters in the linear equation  $y = a \cdot x_1 + b \cdot x_2 + c \cdot x_3 + d \cdot x_4 + e \cdot x_5$  determines the influence of each component (pigment  $x_1$ , binder  $x_2$ , extender  $x_3$ , matting agent  $x_4$ , rheological additives  $x_5$ ) on storage modulus  $G'$  ( $y$ )



**Slika 2:** Arhitektura nevronske mreže je bila dvonivojska. Na prvem nivoju je bilo pet vozlov (5 dejavnikov oziroma vsebnosti komponent), na skritem nivoju je bilo šest vozlov in na zadnjem nivoju je bilo deset vozlov (10 merjenih lastnosti premaza). Uporabljen je bil algoritem z vzratnim popravljanjem napak

**Figure 2:** Architecture of the neural network was two-layer with five nodes on first level (5 factors), six nodes on hidden layer and ten nodes on output layer (10 properties). The back-propagation algorithm was used

Datoteka z vzorci: OSCSP.NET  
Lastnost  $G'$  dol: maksimum ( $y$ ): 99.121 minimum ( $y$ ): -0.080  
Utlakal vrednost kontur (0.01- 99.20): 5



**Slika 3:** Dvodimenzionalen prerez izdelan na osnovi nevronskega modela za odvisnost modula akumulacije energije  $G'$  od določenih vrednosti za vsebnost pigmenta  $x_1$ , veziva  $x_2$  in polnila  $x_3$ . Vsebnosti matirnega sredstva  $x_4$  in reoloških aditivov  $x_5$  pa se spreminjata po vnaprej določenem območju

**Figure 3:** Contours on the basis of the neural network model for dependency of storage modulus  $G'$  from determined values of pigment  $x_1$ , binder  $x_2$  and extender  $x_3$ . The contents of matting agent  $x_4$  and rheological additives  $x_5$  are changing in the selected areas

Rezultat modeliranja je nevronske model, ki je lahko skupen za vse lastnosti ali pa za skupino izbranih lastnosti oziroma eno samo lastnost. Iz modela lahko za vsako točko znotraj izbranega območja dejavnikov napovemo vse lastnosti premaza. Natančnost napovedanih lastnosti je pogojena z natančnostjo meritev lastnosti posameznega premaza.

Na **sliki 3** je prikazan dvodimenzionalni prerez (izračunan na osnovi modela) za modul akumulacije energije  $G'$  ( $y$ ) pri določeni vrednosti pigmenta  $x_1$ , veziva  $x_2$  in polnila  $x_3$ , spreminjata pa se vsebnosti matirnega sredstva  $x_4$  in reoloških aditivov  $x_5$  v izbranih območjih. Območje maksimalnega  $G'$  je pri največji vsebnosti reoloških aditivov in matirnega sredstva in se z zniževanjem omenjenih komponent zmanjšuje.

### 4. Zaključek

Na osnovi izdelanih meritev smo dobili nevronske model iz katerega lahko za vsako točko znotraj izbranega območja dejavnikov napovemo lastnosti premaza. To nam omogoča kvantitativno vrednotenje vpliva posameznega dejavnika na določeno lastnost.

Prednosti modeliranja z nevronske mrežo so naslednje:

- za vse lastnosti lahko uporabimo en sam model
- ni potrebno poznavanje konstitutivnih enačb ali globljega eksaktnega poznavanja strukture posameznih komponent, njihove kemijske sestave, ... za simulacijo sistema
- če naknadno naredimo še dodatne eksperimente, lahko uporabimo isto nevronske mrežo za modeliranje izbranega sistema.

Ugotovili smo, da je nevronske mreže uporabna za modeliranje lastnosti v odvisnosti od sestave tako newtonskih kot newtonskih suspenzij.

### 5. Zahvala

Avtorji se zahvalujemo Ministrstvu za Znanost in Tehnologijo Republike Slovenije, ki je delo sofinanciralo.

### 6. Literatura

- <sup>1</sup> H. M. Wadsworth (Ed.): Handbook of Statistical Methods for Engineers and Scientist, McGraw-Hill Publishing Company, 1990
- <sup>2</sup> M. Osternhold, M. Breucker: *Rheology*, 1, 1991, 230-234
- <sup>3</sup> G. S. Broten, H. C. Wood: A Neural Network Approach to Analysing Multi-Component Mixtures, *Meas. Sci. Technol.* 4, 1993, 1096-1105
- <sup>4</sup> D. E. Rumelhart, J. L. McClelland, the PDP Research Group: Parallel Distributed Processing, The Press, Cambridge, 1987
- <sup>5</sup> W. C. Carpenter, J.-F. M. Barthelemy: A Comparison of Polynomial Approximations and Artificial Neural Nets as Response Surfaces, *Structural Optimization* 5, 1993, 166-174