

OPTIMALIZACE CHEMICKÉHO SLOŽENÍ SODNODRASELNÉHO KŘIŠŤÁLOVÉHO SKLA

LADISLAV ŠAŠEK, JAROSLAV ŠVÁCHA

*Vysoká škola chemickotechnologická, Katedra technologie silikátů
Suchbátarova 5, 166 28 Praha 6*

Došlo 3. 6. 1987

Metodika využívá experimentálně stanovené regresní rovnice pro chemickou odolnost proti vodě, střední součinitel teplotní roztažnosti a viskozitu v oblasti tavicích teplot na chemickém složení s použitím minoritních přísadků oxidu boritého, hlinitého a zinečnatého. Optimalizace byla provedena simplexovou metodou, která je součástí programové knihovny počítače EC 1033, ve výpočetním centru VŠCHT v Praze. Zpětným proměřením skel navržených simplexovou metodou byla zjištěna velmi dobrá shoda s požadovanými hodnotami vlastností sodnodraselného křišťálového skla a lze ji proto doporučit k širšímu využití v praxi.

ÚVOD

Stále se zvyšující nároky na finální vlastnosti sklářských výrobků, jakož i na základní vlastnosti, které ovlivňují průběh tavicích procesů, je třeba řešit novými moderními přístupy, zvláště využívající výpočetní techniku, která se dnes stává běžně používaným prostředkem moderně řízené výroby skla. Základním požadavkem pro optimalizaci chemického složení skel podle požadovaných hodnot jednotlivých vlastností, a to jak při vysokých tavicích teplotách, tak i při vlastním používání hotových výrobků, je analytické vyjádření závislosti mezi akcentovanými vlastnostmi a chemickým složením skel. Tyto vzájemné vztahy lze uspokojivě řešit regresními rovnicemi různého stupně.

Jestliže je např. sledovaná vlastnost aditivní (závislá pouze na obsahu jednotlivých složek, bez ohledu na množství současně obsažených ostatních složek), je možno použít jednoduché lineární regresní rovnice. Dojde-li však k ovlivnění vlastností i kombinací obsahů ostatních složek, pak je nutno volit regresní vztahy vyšších řádů, aby popis vlastností v závislosti na chemickém složení skel byl dostatečně přesný.

Jsou-li k dispozici vhodné regresní rovnice, pak je možno problém optimalizace vlastností skel řešit i běžnými číslicovými počítači, což je předmětem řešení předložené práce.

TEORETICKÁ ČÁST

Simplexová metoda pro optimalizaci procesů

Simplexová metoda je určena pro nalezení maxima nebo minima lineární účelové funkce za podmínek formulovaných soustavou nerovností pro řešení úlohy. Obecná forma simplexové metody vychází ze zápisu modelu lineárního programování ve vektorovém tvaru:

a) účelová funkce: $z = \mathbf{c}\mathbf{x} \pm$ maximalizace (minimalizace)

b) soustava omezujících podmínek pro řešení úlohy:

$$A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}; \quad A\mathbf{x} \geq \mathbf{b}; \quad \mathbf{x} \geq 0,$$

kde A je strukturální matice řádu (M, N) , která je tvořena koeficienty (v našem případě regresními koeficienty jednotlivých oxidů),

\mathbf{b} — sloupcový vektor pravých stran omezení (v našem případě horní a dolní meze, ve kterých se může pohybovat sledovaná vlastnost optimalizovaného skla);

\mathbf{x} — sloupcový vektor optimalizovaných proměnných (např. oxidy, jejichž obsah je předmětem optimalizace);

\mathbf{c} — řádkový vektor ocenění optimalizovaných proměnných (koeficienty u obsahů oxidů v účelové funkci — jsou rovny 1);

M — počet omezujících podmínek úlohy (počet vztahů, kterými je omezeno složení optimalizovaného skla);

N — počet optimalizovaných proměnných (počet oxidů, jejichž obsah bude optimalizován vzhledem ke sledovaným vlastnostem).

Simplexová metoda umožňuje z výchozích řešení (musí existovat řešení — složení skla, které vyhovuje daným podmínkám), dosáhnout po konečném počtu kroků optimálního řešení, kterému odpovídá vyšší (při maximalizační úloze) nebo nižší (při minimalizační úloze) hodnota účelové funkce, než je tomu v předchozím kroku. Postup se opakuje tak dlouho, pokud se nedosáhne optimálního řešení vzhledem k účelové funkci a k omezujícím podmínkám.

Přesný popis výpočtu podle simplexové metody s návodem pro tvorbu programu je uveden v práci [1].

Konkretizace simplexové metody pro podmínky optimalizace složení skla.

Byly optimalizovány 3 systémy skel, které zasahují do běžného složení sodnodravných křišťálů, ve kterých byly použity v množstvích do 1 hmot. % oxid boritý (systém A), oxid hlinitý (systém B) a oxid zinečnatý (systém C).

Pro tyto systémy byly stanoveny regresní rovnice, popisující závislost chemické odolnosti, středního součinitele teplotní roztažnosti a viskozity za vysokých teplot na chemickém složení. Tyto rovnice se staly základem pro výpočet, jehož cílem bylo navržení skla s optimalizovaným obsahem oxidu sodného, vápenatého a příslušného minoritního oxidu (B_2O_3 , Al_2O_3 , ZnO).

Účelová funkce byla volena jako minimalizační typu:

$$X_1 + X_2 + X_3 \leq \min. \quad (1)$$

Z tvaru účelové funkce vyplývá, že je požadován minimální obsah oxidu sodného (X_1), oxidu vápenatého (X_2) a oxidu boritého, respektive hlinitého nebo zinečnatého (X_3).

Výsledkem optimalizačního výpočtu je minimální obsah ve hmot. % základních oxidů (Na_2O a CaO) a jednoho z minoritních oxidů. K těmto oxidům se přiřazuje konstantní obsah 7,7 hmot. % K_2O a 0,5 hmot. % Sb_2O_3 . Obsah SiO_2 se dopočítal jako doplněk do 100 %.

Omezující podmínky určují hodnoty vlastností, tak jak jsou požadovány u optimalizovaného skla. Omezující podmínky vycházejí z regresních rovnic, které bylo nutné upravit do tvaru bez absolutního členu, který byl převeden na stranu hodnoty vlastností. Omezení vlastností je nutno provést kladným číslem a musí být zapsáno

ve formě \leq , $=$, \geq . Při optimalizaci složení skel je výhodné zavést rovněž omezující podmínky, které omezují obsahy všech oxidů ve výsledném optimalizovaném skle (ať již oxidů s optimalizovaným obsahem nebo oxidů přidávaných do skla v konstantním množství). I tato omezení se vyjadřují formou \leq , $=$, \geq .

EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

Regresní rovnice pro systémy A, B, C.

Podrobný popis stanovení regresních rovnic z experimentálně stanovených hodnot pro chemickou odolnost, střední součinitel teplotní roztažnosti a viskozitu sklovin za vysokých teplot pro optimalizované systémy sodnodraselných křišťálových skel jsou uvedeny v práci [2, 3 a 4].

Uvedené regresní rovnice popisují s dostatečnou přesností sledované závislosti na chemickém složení skel všech tří systémů A, B a C.

1. Systém A-sklo s minoritním přídavkem oxidu boritého

Regresní rovnice pro systém A platí v následujícím rozsahu hmot. % jednotlivých oxidů: 75,73 až 79,73 SiO₂, 7,5 až 9,5 Na₂O, 4,4 až 5,4 CaO, 0 až 1 B₂O₃, 7,7 K₂O, 0,5 Sb₂O₃, 0,16 Al₂O₃ a 0,011 Fe₂O₃.

$$\text{Chemická odolnost CHO} = 0,8559 + 0,3388X_1 - 0,4475X_2 - 0,2625X_3, \quad (2)$$

$$\alpha_{(20 \text{ až } 300 \text{ } ^\circ\text{C})} \cdot 10^{-6} = 3,2032 + 0,4151X_1 + 0,3230X_2 + 0,1904X_3, \quad (3)$$

$$t_{\log \eta} = 2 = 2071,58 - 27,6950X_1 - 33,6950X_2 - 40,8950X_3. \quad (4)$$

Uvedené rovnice (2, 3 a 4) popisují vztah mezi chemickým složením skel a důležitými technologickými a užitnými vlastnostmi skel. Chemická odolnost (CHO) je vyjádřena spotřebou HCl o koncentraci 0,01 mol . cm⁻³, nutnou k neutralizaci výluhu skla. Hodnota středního teplotního součinitele pro teplotní rozsah 20 až 300 °C má rozměr K⁻¹. Teplota viskozity log 2 je uváděna ve °C. Proměnné veličiny X značí X₁ obsah Na₂O, X₂—CaO a X₃—B₂O₃ ve hmot. %.

2. Systém B — sklo s minoritním přídavkem Al₂O₃

Regresní rovnice platí pro následující obsah oxidů ve hmot. %: 75,73 až 79,73 SiO₂, 7,5 až 9,5 Na₂O, 4,4 až 5,4 CaO, 0,16 až 1,16 Al₂O₃, 7,7 K₂O, 0,5 Sb₂O₃ a 0,011 Fe₂O₃. Rovnice mají tvar:

$$\text{CHO} = 0,9876 + 0,4075X_1 - 0,5550X_2 - 0,4800X_3, \quad (5)$$

$$\alpha_{(20 \text{ až } 300 \text{ } ^\circ\text{C})} \cdot 10^6 = 3,3577 + 0,4536X_1 + 0,2181X_2 + 0,1994X_3, \quad (6)$$

$$t_{\log \eta = 2} = 2118,37 - 33,3788X_1 - 34,1175X_2 + 22,4575X_3. \quad (7)$$

Význam levých stran v rovnicích (5, 6, 7) je shodný jako v rovnicích (2, 3, 4). Proměnné veličiny X značí: X₁ (hmot. % Na₂O), X₂ (hmot. % CaO) a X₃ (hmot. % Al₂O₃).

3. Systém C — sklo s přídatkem oxidu zinečnatého

Regresní rovnice platí pro následující obsah oxidů v hmot. %: 75,73 až 79,73 SiO₂, 7,5 až 9,5 Na₂O, 4,4 až 5,4 CaO, 0 až 1 ZnO, 7,7 K₂O, 0,5 Sb₂O₃, 0,16 Al₂O₃ a 0,011 Fe₂O₃. Rovnice mají tvar:

$$\text{CHO} = 0,0796 + 0,4013X_1 - 0,3397X_2 - 0,2125X_3, \quad (8)$$

$$\alpha_{(20 \text{ až } 300 \text{ } ^\circ\text{C})} \cdot 10^6 = 3,5543 + 4,0203X_1 + 0,2739X_2 - 0,0212X_3, \quad (9)$$

$$t_{\log \eta = 2} = 2049,70 - 28,1450X_1 - 28,4500X_2 + 13,0099X_3. \quad (10)$$

Význam levých stran v rovnicích (8, 9 a 10) je shodný jako v rovnicích (2 až 7). Proměnné veličiny X značí: X_1 (hmot. % Na₂O), X_2 (hmot. % CaO) a X_3 (hmot. % ZnO).

Sestavení omezujících podmínek pro optimalizaci

Při sestavování omezujících podmínek pro všechny tři systémy A , B a C se vycházelo z regresních rovnic pro jednotlivé systémy (2 až 10). Základním požadavkem na sklo optimalizovaného složení byla jeho chemická odolnost. Chemická odolnost sodnodraselných křišťálových skel spadá do IV. třídy odolnosti vůči vodě (ČSN 708001). Tato třída je charakterizována spotřebou odměrného roztoku 0,01 mol · dm⁻³ HCl od 0,8 do 2,00 cm³ na 1 g skelné drtě.

Další optimalizační podmínka byla stanovena hodnotou středního součinitele teplotní roztažnosti. U optimalizovaných skel byla tato hodnota stanovena pevně na velikost $\alpha_{(200 \text{ až } 300 \text{ } ^\circ\text{C})} = 9,10 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.

Pro popis viskozity, především z hlediska přídatku minoritních oxidů (B₂O₃, Al₂O₃, ZnO), je nejdůležitější teplota tavení, které se přiřazuje hodnota viskozity

$\log \frac{\eta}{\text{dPa} \cdot \text{s}} = 2$. Pro systém A , s přídatkem oxidu boritého byla tato teplota

volena v intervalu $t \leq 1600 \text{ } ^\circ\text{C}$, pro systémy B a C , s přídatky oxidů hlinitého a zinečnatého, bylo voleno omezení $t \leq 1620 \text{ } ^\circ\text{C}$.

Při optimalizaci bylo rovněž omezeno složení výsledných optimalizovaných skel tak, aby bylo řešení v oblasti, pro které byly stanoveny příslušné regresní rovnice.

1. Omezení pro řešení systému A

chemická odolnost $\geq 1,2 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1} 0,01 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \text{ HCl}$,

chemická odolnost $\leq 1,5 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1} 0,01 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \text{ HCl}$,

$$\alpha_{(20 \text{ až } 300 \text{ } ^\circ\text{C})} \cdot 10^6 = 9,1 \text{ K}^{-1},$$

$$t_{\log \eta = 2} \leq 1600 \text{ } ^\circ\text{C},$$

$$7,5 \leq X_1 \leq 10,0; \quad 4,4 \leq X_2 \leq 5,6,$$

$$0,0 \leq X_3 \leq 0,7.$$

Spojení omezujících podmínek s regresními rovnicemi bylo provedeno takto:

a) chemická odolnost

$$1,2 \leq 0,8559 + 0,3388X_1 - 0,4475X_2 - 0,2625X_3, \quad (11)$$

$$1,5 \geq 0,8559 + 0,3388X_1 - 0,4475X_2 - 0,2625X_3. \quad (12)$$

b) střední součinitel teplotní roztažnosti

$$9,1 = 3,2032 + 0,4151X_1 + 0,3230X_2 + 0,1904X_3. \quad (13)$$

c) teplota viskozity $\log \eta = 2$

$$1600 \geq 2071,58 - 27,70X_1 - 33,60X_2 + 40,90X_3. \quad (14)$$

Po převedení absolutních členů na levou stranu rovnice se obdrží konečný tvar omezujících podmínek, které se již přímo použijí pro zadávání hodnot pro počítač. Pokud by se po převedení absolutních členů na levé straně rovnic nebo nerovností vyskytla záporná hodnota, pak je nutno obě strany násobit číslem (-1) , aby byla splněna podmínka, že strana hodnot vlastností nesmí být pro výpočet záporná.

2. Omezení pro řešení systému B

chemická odolnost $\geq 1,2 \text{ cm}^{-3} \cdot \text{g}^{-1} 0,01 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \text{ HCl}$,

chemická odolnost $\leq 1,5 \text{ cm}^{-3} \cdot \text{g}^{-1} 0,01 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \text{ HCl}$,

$$\alpha_{20 \text{ až } 300 \text{ } ^\circ\text{C}} \cdot 10^6 = 9,1 \text{ K}^{-1},$$

$$t_{\log \eta = 2} \leq 1620 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$7,5 \leq X_1 \leq 10,0; \quad 4,4 \leq X_2 \leq 5,6$$

$$0,0 \leq X_3 \leq 1,0.$$

3. Omezení pro řešení systému C

chemická odolnost $\geq 1,2 \text{ cm}^{-3} \cdot \text{g}^{-1} 0,01 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \text{ HCl}$,

chemická odolnost $\leq 1,5 \text{ cm}^{-3} \cdot \text{g}^{-1} 0,01 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \text{ HCl}$,

$$7,5 \leq X_1 \leq 10,0; \quad 4,4 \leq X_2 \leq 6,0,$$

$$0,0 \leq X_3 \leq 1,0.$$

Výstup z počítače

Výsledkem simplexové metody jsou celkem tři optimalizovaná skla: sklo A s minoritním přídavkem B_2O_3 , sklo B s Al_2O_3 a sklo C se ZnO. Optimalizován byl obsah proměnných oxidů (Na_2O , CaO) a příslušného minoritního oxidu. Obsahy ostatních oxidů byly ponechány na konstantní úrovni (K_2O , Sb_2O_3 a Fe_2O_3), základní sklo-tvorný oxid SiO_2 byl dopočítán do 100 hmot. %.

1. Obsah proměnných oxidů ve skle A:

Na_2O 9,54 hmot. %

CaO 5,60 hmot. %

B_2O 0,67 hmot. %

2. Obsah proměnných oxidů ve skle B:

Na_2O 9,67 hmot. %

CaO 5,60 hmot. %

Al_2O_3 0,67 hmot. %

3. Obsah proměnných oxidů ve skle C:

Na_2O 9,73 hmot. %

CaO 6,00 hmot. %

ZnO 0,46 hmot. %

Těmito výstupy končí funkce simplexové optimalizační metody a následuje ověření správnosti uvedeného řešení z počítače praktickým proměřením natavených skel

podle udaného optimálního složení. Celkové chemické složení optimalizovaných skel *A*, *B* a *C* je uvedeno v tabulce I. V tabulce II je uvedeno porovnání naměřených

Tabulka I

Celkové oxidové složení optimalizovaných skel *A*, *B*, *C* s minoritními přísadky oxidů B_2O_3 , Al_2O_3 a ZnO ve hmot. %

Označení skel	SiO_2	Na_2O	CaO	B_2O_3	Al_2O_3	ZnO	K_2O	Sb_2O_3	Fe_2O_3
<i>A</i>	75,82	9,54	5,6	0,67	0,16	—	7,7	0,5	0,011
<i>B</i>	75,85	9,67	5,6	—	0,67	—	7,7	0,5	0,011
<i>C</i>	75,45	9,73	6,0	—	0,16	0,46	7,7	0,5	0,011

Tabulka II

Porovnání naměřených hodnot sledovaných vlastností optimalizovaných skel *A*, *B* a *C* s požadovanými hodnotami vlastností sodnodraselných křišťálových skel

Požadovaná hodnota sledované vlastnosti	Naměřená hodnota sledovaných vlastností u optimalizovaných skel <i>A</i> , <i>B</i> a <i>C</i>		
	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>
Chemická odolnost $1,2 \leq CHO \leq 1,5$	1,41	1,49	1,44
Str. souč. tep. rozt. $\alpha_{(20 \text{ až } 300 \text{ } ^\circ\text{C})} \cdot 10^6 = 9,1 \text{ K}^{-1}$	9,10	9,10	9,10
Teplota $\log \eta = 2$ $t \leq 1620 \text{ } ^\circ\text{C}$	1591	1619	1613

hodnot sledovaných vlastností optimalizovaných skel *A*, *B*, *C* s hodnotami požadovaných vlastností sodnodraselných křišťálů. Z hodnot sledovaných vlastností lze konstatovat, že naměřené hodnoty všech tří optimalizovaných skel, uvedených v tabulce II vyhovují požadavkům pro sodnodraselné křišťály. Uvedený postup a použití simplexové metody bylo oprávněné.

DISKUSE VÝSLEDKŮ

Popsaný postup optimalizace umožňuje najít řešení úlohy i v případě, že se zdánlivě jedná o protichůdné působení jednotlivých oxidů na sledované vlastnosti skel a pohybuje se v zadaných omezeních. Empirické řešení úlohy by bylo velice

složitě a časově náročně. Simplexová metoda celý postup značně zjednodušuje a najde řešení pro zadané systémy skel. Pokud jednoznačné řešení v daném rozsahu oxidů neexistuje, pak počítač navrhne takové chemické složení skla, které nejvíce odpovídá podmínkám úlohy, především podmínce, která je zadána účelovou funkcí. Ukázalo se, že je výhodné volit omezující podmínky pro sklo jak formou intervalů (např. chemická odolnost byla stanovena v širším rozsahu), tak formou rovnic (např. přesná hodnota středního součinitele teplotní roztažnosti), tak i formou nerovností (např. teplota pro hodnotu viskozity $\log \eta = 2$, kdy se zadá nejvyšší možná teplota). Jako omezující podmínky se rovněž osvědčilo volit intervaly rozsahů jednotlivých optimalizovaných oxidů, aby bylo zajištěno, že optimalizované složení bude ležet v oblasti, pro které byly stanoveny regresní rovnice. Dále se osvědčila podmínka, že hlavní sklotvorný oxid SiO_2 se dopočítával do 100 %.

Velmi důležitá je též volba vlastní účelové funkce. Tato funkce je řídicím článkem celého optimalizačního postupu a pouze správná a přesná formulace účelové funkce může vést k úspěšnému řešení. V uvedeném případě byla volena účelová funkce vzhledem k minimálnímu obsahu oxidu sodného, vápenatého a minoritního oxidu.

Optimalizací chemického složení obalových a plochých skel se zabýval Mühlbauer [6]. Jím navržená metoda nepoužívá simplexovou metodu. Vychází sice z regresních rovnic, popisujících závislost vlastností sklovin na chemickém složení, ale řešení je podmíněno zadáním povolených odchylek sledovaných vlastností výsledného skla a počátečním odhadem obsahu jednotlivých oxidů, který počítač postupně upravuje, až dojde k povoleným odchylkám hodnot sledovaných vlastností. Při řešení se nepoužívá účelové funkce, postup optimalizace je řízen sumami odchylek jednotlivých vlastností vždy nově navrženého skla, až se dojde k výslednému složení skla. V porovnání s postupem využívajícím simplexovou metodu je uvedený postup složitější a úspěšné řešení velmi podstatně závisí na počátečním odhadu chemického složení skla, které je výchozím stavem pro počítač. V práci Hofreitra a Nejepínského [7] je uvedena metoda optimalizace složení sklářského kmene. I když tato metoda řeší poněkud odlišnou problematiku, její myšlenka je v celku shodná se simplexovou metodou a dala by se též využít k optimalizaci chemického složení skla.

ZÁVĚR

Uvedenou simplexovou metodu lze využít pro optimalizaci chemického složení skel vzhledem k požadovaným vlastnostem. Podmínkou je znalost závislosti mezi chemickým složením skel a akcentovanými vlastnostmi, a to jak v oblasti využití skel, tak i při jejich výrobě. Operativní využitelnost uvedené optimalizační metody spočívá v tom, že je již připravená v programové knihovně a pouze malými úpravami příslušných regresních rovnic, popisujících závislost sledovaných vlastností skel a sklovin na chemickém složení a zadáním účelové funkce a omezujících podmínek optimalizace, lze dospět k řešení bez náročného programu.

Literatura

- [1] Kuester J. L., Mize J. H.: *Optimization Techniques with Fortran*. Mc Graw-Hill Book Company, New York 1980.
- [2, 3, 4] Šašek L., Švácha J.: *Sborník Vysoké školy chemicko-technologické*, řada L Chemie a technologie silikátů (v tisku).
- [5] Gros I.: *Operační výzkum a řízení chemických výrob*. SNTL, Praha 1980.
- [6] Mühlbauer M.: Kandidátská disertační práce, VŠCHT Praha 1982.
- [7] Hofreitr M., Nejepínský J.: *Sklář a keramik* 37, 41 (1987).

L. Šašek, J. Švácha:

ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА НАТРИЕВО—КАЛИЕВОГО ХРУСТАЛЯ

Ладислав Шашек, Ярослав Шваха

*кафедра технологии силикатов Химико-технологического института
166 29 Прага 6*

Авторы используют методику, основывающуюся на экспериментальным путем установленном уравнении регрессии для химической водостойкости, среднем коэффициенте теплового расширения и вязкости в области температур плавки от химического состава с применением миноритных добавок оксидов трехвалентного бора, трехвалентного алюминия и двухвалентного цинка. Оптимизацию проводили с помощью симплексного метода, который является составной частью программной библиотеки ХТИ в Праге. На основании обратного измерения стекол и стекломасс, предлагаемыми симплексным методом, устанавливали весьма хорошее совпадение с требуемыми величинами исследуемых свойств натриево-калиевого хрусталя, и поэтому можно приводимый способ оптимизации рекомендовать для более широкого использования на практике. Оперативная используемость приводимого метода оптимизации заключается в том, что он уже имеется в распоряжении в программной библиотеке и только на основании небольших обработок соответствующих уравнений регрессии, описывающих зависимость исследуемых свойств стекол и стекломасс от их химического состава и заданием целевой функции и ограничивающих условий оптимизации, можно получить решение без тревожительной программы.

OPTIMIZING THE CHEMICAL COMPOSITION OF SODA-POTASH CRYSTAL GLASS

Ladislav Šašek, Jaroslav Švácha

Department of Silicate Technology, Institute of Chemical Technology, 166 28 Prague 6

The method utilizes an experimentally established regression equation for chemical resistance to water, the mean coefficient of thermal expansion and viscosity in the region of melting temperatures in dependence on chemical composition varied by minority additions of boric oxide, alumina and zinc oxide. The optimizing was carried out by the simplex method which is available in the program library of the Institute of Chemical Technology. Experimental measurements on glasses and glass melts devised by the simplex method showed very satisfactory agreement with the required values of the given properties of soda-potash crystal glass. The optimizing procedure can therefore be recommended for wider utilization in practice. The main advantage of the optimizing method is that the respective programs are readily available and it is only necessary to carry out minor adjustments of the respective regression equations describing the dependence of the properties of glasses and glass melts on their chemical composition. The solution can be found without having to work out demanding programs by merely setting the objective function and the boundary conditions of optimizing.

RÁDIOAKTIVITA KERAMICKÝCH MATERIÁLŮ používaných pri výrobe púzdiel integrovaných obvodov môže vážne ovplyvňovať funkciu pamätí. Pozitívne nabité jadrá hélia (α -častice), ktoré vznikajú pri rozpade stopových prímiesi rádioaktívnych izotopov uránu a thória, môžu neutralizovať negatívny náboj pamäte a spôsobiť chybu (Ceram. Eng. Sci. Proc. 6, 1321 (1985)). Japonská firma Toshiba Ceramics použila vlastnú rafinačnú technológiu na produkcii vysokočistého kremenného skla, ktoré sa upravuje na jemný prášok a využíva ako plnivo do živcových púzdiel integrovaných obvodov. Obsah uránu a thória sa znížil na úroveň 10^{-7} — 10^{-8} % hmotn. a úroveň α -žiarenia na 0,01—0,001 častíc/cm³h, čo je prinajmenšom o poriadok nižšia hodnota ako u iných vysokočistých produktov (Toshiba Ceramics News, No. 8, 1987).

V. Figusch