

СЛУЧАЙНОЕ СКАНИРОВАНИЕ РЕЦЕПТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПОЛЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ОБОБЩАЮЩИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ

Ляшенко Т.В., д.т.н., профессор,
Одесская государственная академия строительства и архитектуры
frabul16@gmail.com

Аннотация. К базовым понятиям методологии рецептурно-технологических полей, для компьютерного материаловедения, относятся понятия полного и локального поля и их обобщающих показателей. Отмечается недоиспользование неисчерпаемого многообразия этих числовых характеристик при разработках высокофункциональных строительных композитов. На примере поля износостойкости карбамидного связующего в координатах трех рецептурных факторов, описанного экспериментально-статистической моделью, показан ряд типовых числовых характеристик, оценки этих показателей и способ расчета оценок с помощью метода Монте-Карло.

Ключевые слова: рецептурно-технологическое поле, экспериментально-статистическая модель, метод Монте-Карло, компьютерное материаловедение, карбамидное связующее, износостойкость.

ВИПАДКОВЕ СКАНУВАННЯ РЕЦЕПТУРНО-ТЕХНОЛОГІЧНОГО ПОЛЯ ДЛЯ ОЦІНЮВАННЯ УЗАГАЛЬНЮЮЧИХ ПОКАЗНИКІВ

Ляшенко Т.В., д.т.н., професор,
Одеська державна академія будівництва та архітектури
frabul16@gmail.com

Анотація. До базових понять методології рецептурно-технологічних полів, для комп'ютерного матеріалознавства, відносяться поняття повного і локального поля та їх узагальнюючих показників. Відзначається недостатнє використання невичерпного різноманіття цих числових характеристик при розробках високофункціональних будівельних композитів. На прикладі поля зносостійкості карбамідного сполучного в координатах трьох рецептурних факторів, описаного експериментально-статистичною моделлю, показано ряд типових числових характеристик, оцінки цих показників і спосіб розрахунку оцінок за допомогою методу Монте-Карло.

Ключові слова: рецептурно-технологічне поле, експериментально-статистична модель, метод Монте-Карло, комп'ютерне матеріалознавство, карбамідний сполучник, зносостійкість.

RANDOM SCANNING OF COMPOSITION-PROCESS FIELD TO ESTIMATE ITS GENERALISING INDICES

Lyashenko T.V., D.Sc., Professor
Odessa State Academy of Civil Engineering and Architecture
frabul16@gmail.com

Abstract. The notion of composition-process (CP) field is elucidated. The whole and local fields and their generalising indices present the basics of CP-fields methodology, for computational materials science, helpful in research and development of high performance building composites. It

is pointed out that the variety of field numerical characteristics is underexploited. To show the updated list of typical numerical indices and to demonstrate the way they can be calculated the case of three mix variables that condition abrasion resistance of carbamide binder filled with mixture of andesite and silicon carbide grains is used. Experimental-statistical model, describing the field of abrasion resistance in composition coordinates, in tandem with Monte Carlo method allows the estimates of generalising indices to be obtained.

Key words: composition-process field, experimental-statistical model, Monte Carlo method, computational materials science, carbamide binder, abrasion resistance.

Введение. Представление о том, что условия создания высокофункциональных материалов отражают многомерные рецептурно-технологические (РТ) поля свойств, оказалось полезным в исследованиях и разработках строительных композитов. Самое общее понятие скалярного поля $Y(x)$ величины Y – это функция точки x в области Ω_x многомерного пространства, т.е., совокупность значений Y для всех возможных значений x [1-3]. При введении понятия РТ-поля в [4-7] и других работах подчеркивалось, что под «свойством» Y понимаются не только собственно свойства, но и иные (в том числе структурные) характеристики материала и критерии качества (в том числе экологические и ресурсные). А компоненты вектора РТ-факторов $x = (x_1, \dots, x_k)$ – это параметры не только рецептуры и процессов переработки, но и условий эксплуатации и элементов конструкции.

К базовым понятиям методологии РТ-полей (МРТП), для компьютерного материаловедения [8-11], относятся понятия полного поля (в координатах всех k анализируемых факторов), локальных полей (области которых составляют часть области полного поля, меньшей или той же размерности) и обобщающих показателей G (от *generalising*) – числовых характеристик распределения уровня свойства в РТ-области. «Измеряя» характерные особенности зависимости свойства от состава и параметров процессов, эти числовые показатели осуществляют «свертку» информации (выступают представителями поля в многомерном анализе). По показателям G можно сравнивать поля разных свойств и локальные поля одного свойства, анализировать их трансформацию при изменении тех или иных РТ-условий, осуществлять управление РТ-полями.

Эти понятия уже вошли в практику строительного материаловедения. Однако, из неограниченного многообразия показателей G [6], в исследованиях используют лишь малую часть. Это максимальный или минимальный уровень поля свойства (как правило, рассчитываемые либо недостаточно точно, либо по довольно сложному алгоритму [12]), редко – приросты, очень редко – размер области допустимых решений. Неиспользуется, теряется информация, полезная для получения нового знания о композитах, определения лучших составов и режимов.

Цель данной статьи – показать обновленный список типовых числовых характеристик РТ-полей (представленных ранее в труднодоступных публикациях [6-7]) и способ их расчета, легко реализуемый с помощью табличного процессора.

Рецептурное поле износостойкости карбамидного связующего. Перечень и способ расчета основных показателей G демонстрируются на примере поля одного свойства, в относительно простой ситуации с тремя рецептурными переменными. Используются данные, полученные при исследовании наполненного карбамидного связующего [13-15]; решались задачи улучшения свойств карбамидных полимербетонов. В спланированном эксперименте варьировались следующие факторы X_i (нормализованные к $|x_i| \leq 1$):

X_1 – массовое отношение наполнитель-полимер (степень наполнения F , от 2 до 2,5) рассматривалось и как структурообразующий, и как экономический фактор, который следовало максимизировать, чтобы снизить расход полимера;

X_2 – доля карбида кремния в тонкой фракции наполнителя, с удельной поверхностью $320 \pm 10 \text{ м}^2/\text{кг}$ (SC , от 0 – только андезит, до 60% по массе);

X_3 – массовая часть крупных зерен андезита (с удельной поверхностью $70 \pm 5 \text{ м}^2/\text{кг}$) в общем количестве наполнителя ($CA = 40 \pm 20\%$).

Среди свойств, определенных для 15 составов (согласно плану эксперимента), была износостойкость A (истираемость, ч/г). Эти данные позволили описать поле износостойкости карбамидного композита в координатах трех факторов состава нелинейной ЭС-моделью (1), адекватной экспериментальным значениям ($A = 1.7 \dots 7.9$, при ошибке эксперимента $s_e = 0,41$ ч/г). Поле (1) показано на рис. 1.

$$A = 6,69 + 0,22x_1 - 0,47x_1^2 - 0,52x_1x_2 + 0,85x_1x_3 + 1,45x_2 \pm 0 x_2^2 \pm 0 x_2x_3 \pm 0 x_3 - 1,12x_3^2 \quad (1)$$

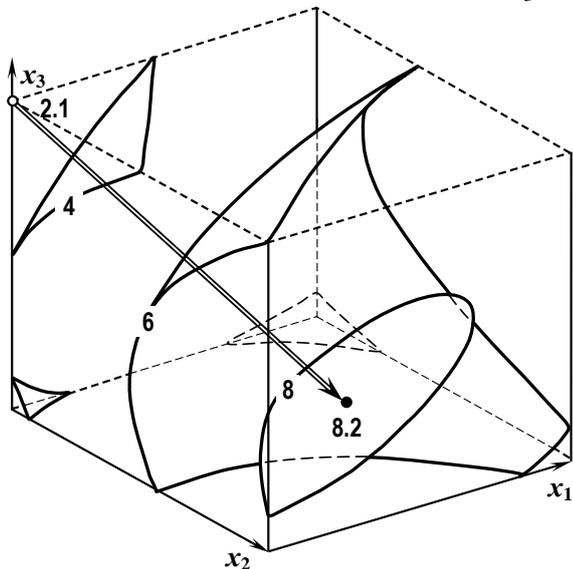


Рис. 1. Износостойкость A (ч/г) в области нормализованных факторов состава

Некоторые типовые показатели G и их значения, представляющие полное поле износостойкости $A(x_1, x_2, x_3)$, приведены в табл. 1. Среди них: отмеченные на рис. 1 экстремальные уровни $A(x)$ и координаты соответствующих точек минимума («много» смолы, нет карбида кремния, много крупного андезита) и максимума (максимальное количество SiC при невысокой степени наполнения и среднем содержании крупных зерен); усредненный градиент – длина вектора, соединяющего точки экстремума в направлении увеличения износостойкости; процент составов, отвечающих требованию $A \geq 6$ ч/г – «размер» допустимой области.

Показатели разделены на две группы – по «происхождению». *Порядковый* показатель (дифференциальный, точечный) образуют числовые характеристики отдельных точек поля как упорядоченного непрерывного множества (это, в частности, максимум и минимум свойства и построенные на них индексы, уровень свойства в любой «особой» точке). *Интегральный* показатель (суммирующий, в частности, средний уровень) является обобщенной мерой распределения свойства по всему множеству точек области РТ-поля. При неисчерпаемом многообразии числовых характеристик, которые могут быть использованы в качестве G , полезны и другие классификации [6, 7]. Оценки этих и практически любых обобщающих показателей могут быть получены по результатам сканирования РТ-полей.

Расчет обобщающих показателей. При случайном сканировании используется метод Монте-Карло [16]. В сегодняшнем понимании термин «метод Монте-Карло» относится к любому виду имитации (*simulation*) с участием случайных чисел [17].

Из бесконечного множества Ω_x определяющих поле РТ-ситуаций случайно выбираются n вариантов – генерируются по n равномерно распределенных в интервале каждого фактора значений x_i , для которых по ЭС-модели вычисляются Y . Таким образом, формируется случайная выборка объема n значений Y (из совокупности объемом $N = \infty$). Очевидно, что ошибки в оценках, полученных по такому массиву данных, будут тем меньше, чем больше число генерированных точек n и чем ближе их распределение к равномерному.

В табл. 2 показаны результаты случайного сканирования полного поля износостойкости, в трех координатах состава карбамидного композита.

В верхних строках (составы 1...8) столбцов x_1 , x_2 и x_3 левой части таблицы (случайный ряд A) записаны детерминированные координаты восьми вершин куба (± 1 , в общем случае число таких точек $n_v = 2^k$). Ввод вершин куба необходим, поскольку вероятность попадания непрерывной случайной величины в ту или иную точку практически равна нулю, а именно на границах $x_i = \pm 1$ может находиться экстремум квадратичной, неполной квадратичной, или линейной многофакторной ЭС-модели. В то же время ввод вершин (при достаточно большом n) практически не может изменить свойств множества сканирующего поле точек, все n

Таблица 1 – Основные обобщающие показатели рецептурно-технологического поля

G_Y	G_A	Оценка по (1)
Порядковые показатели		
Максимальный уровень Y_{\max}	A_{\max}	8,21 ч/г
Координаты максимума $x_{\max.i} (X_{\max.i})$	$x_{\max.1} (F_{\max})$ $x_{\max.2} (SC_{\max})$ $x_{\max.3} (CA_{\max})$	-0,47 (2,13) +1 (60) -0,22 (35,6)
Минимальный уровень Y_{\min}	A_{\min}	2,05 ч/г
Координаты минимума $x_{\min.i} (X_{\min.i})$	$x_{\min.1} (F_{\min})$ $x_{\min.2} (SC_{\min})$ $x_{\min.3} (CA_{\min})$	-1 (2) -1 (0) +1 (60)
Середина размаха $Y_M = 0,5(Y_{\max} + Y_{\min})$	A_M	5,13 ч/г
Координаты середины расстояния между экстремумами $x_{m.i} = (x_{\max.i} + x_{\min.i}) / 2$	$x_{m.1} (F_m)$ $x_{m.2} (SC_m)$ $x_{m.3} (CA_m)$	-0,74 (2,07) 0 (30) 0,39 (47,8)
Уровень Y_m – в точке x_m	A_m	5,86 ч/г
Расстояние между экстремумами, в единицах нормализованного факторного пространства, L_{ext}	$L_{\text{ext}.A}$	2,40
Абсолютный перепад (прирост) $\Delta_Y = Y_{\max} - Y_{\min}$	Δ_A	6,16 ч/г
Усредненный градиент $\nabla_Y = \Delta_Y / L_{\text{ext}.Y}$	∇_A	2,56 ч/г
Относительный прирост $d_Y = \Delta_Y / Y_{\min}$	d_A	3,0
Относительный перепад (прирост) $\delta_Y = Y_{\max} / Y_{\min}$	δ_A	4,0
Медианный уровень Me_Y	Me_A	6,18 ч/г
Относительный размер технологической области, допустимых x , $\Omega\{Y_{\text{spec}}\}\%$	$\Omega\{A \geq 6\}$	56,7
Интегральные показатели		
Среднее по полю \bar{Y} (или $Y_{\text{av}} - averaged$)	\bar{A}	6,15 ч/г
Стандартное отклонение s_Y	s_A	0,97 ч/г
Коэффициент вариации v_Y	v_A	0,16

наборов координат x_i допустимо считать случайной выборкой.

Значения $-1 < x_i < +1$ в составах 9...10000 – генерированные случайные, равномерно распределенные в этом интервале, значения факторов (использован пакет анализа Excel); в столбце A результаты расчета по приведенной в таблице модели износостойкости (1).

Показанные в правой части табл. 2 (ранжированный ряд) фрагменты результатов сортировки составов по убыванию уровня A (от 8,21 до 2,05 ч/г.), представляют матрицу результатов вычислительного эксперимента (МРВЭ), размером 10000×4. По ней, кроме интегральных характеристик (\bar{A} , s_A и др.), могут быть определены максимум, минимум и другие порядковые показатели (табл. 1). Это в частности, делящая пополам вариационный ряд медиана ($Me_A = 6,18$ ч/г, между строками с номерами «5000» и «5001»), а также относительный объем допустимой области при заданном (*specified*) минимальном уровне, нормативе, $A_{\text{spec}} = 6$ ч/г; последний имеющий такой уровень состав в строке «5666», следовательно, $\Omega\{A \geq 6\} = 5666/10000$, или 56,7%.

Таблица 2 – Фрагменты Excel-таблицы с результатами генерации 9992 случайных составов и расчета износостойкости для 10000 составов

		Случайный ряд <i>A</i>				Ранжированный ряд <i>A</i>							
Коэффициенты модели <i>A</i>	Оценки коэффициентов	№ состава (строки МРВЭ)	Число составов			10000	№ состава	Число составов			10000		
			Максимум						Максимум				
			1.00	1.00	1.00	8.21			1.00	1.00	1.00	8.21	
			Среднее						Среднее				
			0.01	0.00	0.00	6.15			0.01	0.00	0.00	6.15	
			Минимум						Минимум				
			-1.00	-1.00	-1.00	2.05			-1.00	-1.00	-1.00	2.05	
			x_1	x_2	x_3	<i>A</i>		x_1	x_2	x_3	<i>A</i>		
b_0	6.69	1	1	1	7.09	297	-0.47	1	-0.22	8.21			
b_1	0.22	2	1	1	5.39	3919	-0.52	0.99	-0.17	8.19			
b_2	1.45	3	1	-1	5.24	492	-0.27	1.00	0.06	8.17			
b_3	0	4	1	-1	3.54	1353	-0.85	1.00	-0.27	8.17			
b_{11}	-0.47	5	-1	1	6.00	5436	-0.30	0.98	-0.02	8.16			
b_{22}	0	6	-1	1	7.70	8320	-0.65	0.98	-0.27	8.16			
b_{33}	-1.12	7	-1	-1	2.05	5536	-0.43	0.99	-0.33	8.16			
b_{12}	-0.53	8	-1	-1	3.75	7077	-0.08	0.99	-0.02	8.15			
b_{13}	0.85	9	-0.08	0.62	0.29	7.48	9417	-0.44	0.96	-0.14	8.15		
b_{23}	0	10	-0.24	-0.80	0.19	5.27	3387	-0.34	0.98	-0.28	8.15		
		11	0.80	0.77	0.92	7.04	7956	-0.05	1.00	-0.07	8.14		
		12	-0.97	-0.19	0.73	4.48	9709	-0.90	0.99	-0.35	8.14		
				
		5000	-0.28	-0.24	0.94	4.99	1819	0.69	-0.47	0.30	6.18		
		5001	0.07	-0.10	0.13	6.54	2412	0.25	-0.32	0.43	6.18		
				
		5665	-0.43	-0.46	-0.72	5.41	8516	-0.34	-0.21	0.34	6.00		
		5666	-0.73	0.15	0.49	5.98	9163	-0.85	0.64	0.83	6.00		
		5667	0.88	-0.69	0.68	5.83	160	-0.75	0.79	0.99	5.99		
		5668	-0.28	0.20	0.35	6.69	3525	0.51	-0.48	0.57	5.99		
				
		9996	-0.39	-0.73	-0.68	5.03	9740	-0.93	-0.87	0.90	2.79		
		9997	0.96	-0.99	-0.14	5.39	5720	-0.86	-0.98	0.93	2.64		
		9998	-0.28	-0.30	-0.32	6.07	5060	-0.95	-0.98	0.87	2.59		
		9999	-0.87	0.14	-0.47	6.50	334	-0.96	-0.94	0.91	2.56		
		10000	-0.36	0.64	0.04	7.59	7	-1	-1	1	2.05		

Распределение уровня свойства Y в области РТ-поля (вне зависимости от определяющих его РТ-факторов) отражают построенные по значениям Y для генерированных векторов эмпирические кривые распределения, полезные при решении задач обеспеченности качества. На рис. 2, а, б показаны эмпирические функция $F(A)$ и плотность $f(A)$ распределения износостойкости, по 10000 полученным в вычислительном эксперименте значениям A . Доля не отвечающих нормативу значений (слева от метки 6 ч/г на шкале A) составляет $\alpha = 1 - \Omega\{A_{\text{спец}}\} = 0,433$ (от единичных высоты кривой F и площади под кривой

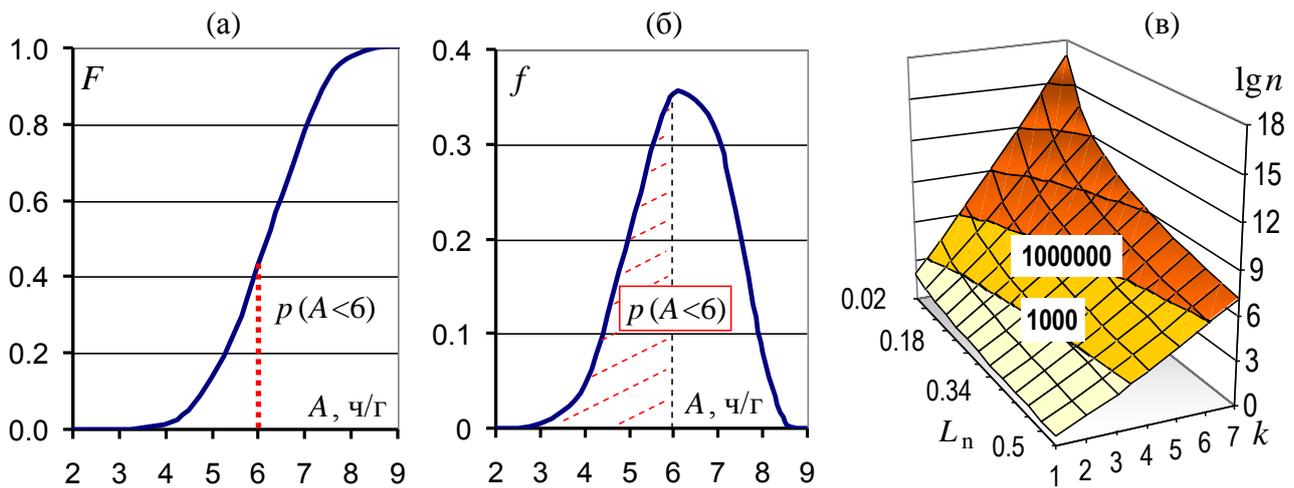


Рис. 2. Распределение уровня износостойкости (а, б); число точек n при сканировании поля в зависимости от числа факторов и расстояния между точками (в)

распределения f).

Аналогично можно рассчитать G для любых локальных полей, в частности, для $A(x_1, x_2 / x_3 = +1)$ и $A(x_1, x_2 / x_3 = -1)$, отраженных изолиниями на верхней и нижней гранях куба на рис. 1, при верхнем и нижнем содержании в наполнителе крупных зерен. Многократное случайное сканирование позволяет получить выборочные распределения оценок G и определить их статистики, в частности стандартные отклонения, необходимые при построении вторичных ЭС-моделей – для обобщающих показателей [10, 11].

Сколько составов (режимов) следует генерировать? Если область поля – k -мерный куб с ребром $a = 2$ (безразмерных единиц факторного пространства) и объемом $V = 2^k$, то на каждую из $n = 10000$ точек, равномерно распределенных внутри куба, приходится $0,0001$ этого объема, или элементарный кубик объемом $V_n = 2^k/n$. Ребро такого кубика $a_n = (2^k/n)^{1/k} = 2 \cdot (1/n)^{1/k}$, а расстояние между наиболее удаленными точками равно диагонали $L_n = a_n \cdot k^{0,5}$.

Куб на рис. 1 имеет объем $2^3 = 8$ и диагональ $L = 2 \cdot 3^{0,5} = 3,46$. Если $n = 10000$, то $V_n = 0,0008$, $a_n = 2 \cdot 0,0001^{1/3} = 0,093$ и диагональное расстояние $L_n = 0,093 \cdot 3^{0,5} = 0,161$.

Если существует возможность на основе инженерного анализа задать расстояние L_n , характеризующее точность случайного сканирования поля (степень представления всех возможных значений свойства n выборочными значениями), то приведенные соотношения позволяют найти требуемое число генерируемых точек (2).

$$n = (2 \cdot k^{0,5} / L_n)^k \quad (2)$$

Как видно на рис. 2, в, эта двухпараметрическая функция быстро возрастает с ростом числа факторов – размерности области поля, исчерпывая компьютерные возможности. Поэтому для ряда задач (в частности, при многокритериальном поиске компромиссного оптимума [18-19]) реализуются итерационные процедуры, в которых на каждой итерации решение уточняется за счет перехода к сканированию меньшей части области поля.

Заключение. Поле свойства материала (структурной, технологической, эксплуатационной и др. характеристики) в координатах состава и параметров производства и эксплуатации, описанное многофакторной ЭС-моделью, может быть представлено выражающими его особенности числовыми показателями. Рассчитать и использовать оценки этих показателей при исследовании и проектировании строительных композитов позволяют ЭС-модели в тандеме с методом Монте-Карло.

Литература

1. Каазик Ю.А. Математический словарь / Ю.А. Каазик. – Таллин: Валгус, 1985. – 296 с.
2. Apostol T.M. Calculus / T.M. Apostol, v. 2, 2nd Edition, Wiley & Sons, 1975. – 704 p.

3. Математическая энциклопедия. В 5 т. – М.: Советская энциклопедия, 1977-85. – Т. 4, 1984. Encyclopaedia of Mathematics (set). In 10 vol. – Kluwer, 1987-1994 (перевод с русского). www.encyclopediaofmath.org
4. Voznesensky V.A. Modelling, analysis and optimization of brittle matrix composites properties fields / V.A. Voznesensky, T.V. Lyashenko // *Brittle Matrix Composites 4*. – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd., Warsaw: IFTR, 1994. – P. 255-263.
5. Voznesensky V.A. Experimental-statistical modeling in computational materials science / V.A. Voznesensky, T.V. Lyashenko // *Proc. 3rd Int. Applied Statistics in Industry Conf.*, v. 1. – Wichita, KS (USA): ACG Press., 1995. – P. 287-298. www.frabul16.wix.com/dvove
6. Ляшенко Т.В. Обобщающие показатели полей свойств для разработки эффективных композитов / Т.В. Ляшенко // *Строительные материалы, конструкции и инженерные системы*. – Одесса, ОГАСА, 1996. – С. 172-186.
7. Методические рекомендации по применению экспериментально-статистических моделей для анализа и оптимизации состава, технологии и свойств композиционных материалов на основе щелочных вяжущих систем / Науч. ред. В.А. Вознесенский, П.В. Кривенко. – ОГАСА, НИИВМ им. В.Д. Глуховского. – К., 1996. – 105 с. www.frabul16.wix.com/dvove
8. Ляшенко Т.В. Поля свойств строительных материалов (концепция, анализ, оптимизация) / Т.В. Ляшенко // *Прогнозирование в материаловедении: Мат-лы межд. сем. МОК'41* – Одесса, Астропринт, 2002. – С. 9-14.
9. Lyashenko T.V. Composition-process fields methodology for design of composites structure and properties / T.V. Lyashenko // *Brittle Matrix Composites 11*. – Warsaw: Institute of Fundamental Technological Research PAS, 2015. – P. 289-298.
10. Вознесенский В.А. ЭС-модели в компьютерном строительном материаловедении / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко. – Одесса: Астропринт, 2006. – 116 с.
11. Вознесенский В.А. Рецептурно-технологические поля свойств материала в компьютерном строительном материаловедении / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко // *Строительные материалы*, 2006, №3 – Приложение: Наука № 7 – С. 8-11.
12. Вознесенский В.А. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я.П. Иванов, И.И. Николов. – К.: Будивэльнык, 1989. – 240 с.
13. Карабаев А.Н. Повышение вероятностных показателей качества карбамидного полимербетона для гидромелиоративного строительства: автореф. дис. канд. техн. наук: 05.23.05 / Карабаев Анваржон Нейматжанович. Одесский инженерно-строительный институт. – Одесса, 1988. – 22 с.
14. Lyashenko T. Modeling the influence of composition on probabilistic indices of building polymer composites quality / T. Lyashenko, V. Voznesensky // *Proc. 9th Int. Congress on Polymers in Concrete*. – Bologna, 1998. – P. 201-208.
15. Lyashenko T. The use of experimental-statistical modelling in multi-criterion optimization of polymer compositions for floors / T. Lyashenko, V. Voznesensky // In: *Proc. Int. Col. "Industrial Floors'99"*, Technische Akademie Esslingen, Ostfildern, 1999. – P. 497-508.
16. Соболев И.М. Метод Монте-Карло / И.М. Соболев. – М.: Наука, 1978. – 64 с.
17. Murdoch D.J. Markov Chain Monte Carlo / D.J. Murdoch // *Chance*, V. 13, N4, 2000. – P. 48-51.
18. Вознесенский В.А. Компромиссная многофакторная оптимизация гарантированного качества шлакощелочных вяжущих (максимизация прочности и морозостойкости, минимизация расхода ресурса) / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, А.Д. Довгань. – *Современное промышленное и гражданское строительство*. – 2007, т. 3, №1. – С. 5-15.
19. Lyashenko T. Epoxy compositions for protecting road structure units in contact with water-oil mixtures / T. Lyashenko, A. Gara, I. Podagelis, I. Gailiene // *Environmental Engineering*. Vilnius, 2008. – V. 3. – P. 1186-1192.