

**В. А. ВОЗНЕСЕНСКИЙ**, д-р техн. наук,  
**Т. В. ЛЯШЕНКО**, **Я. П. ИВАНОВ**, **И. И. НИКОЛОВ**,  
кандидаты техн. наук

# **ЭВМ И ОПТИМИЗАЦИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Под редакцией д-ра техн. наук  
**В. А. Вознесенского**

КИЕВ «БУДИВЭЛЬНИК» 1989

УДК 668.982 : 65.012 : 517.8

**ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В. А. Вознесенский, Т. В. Ляшенко, Я. П. Иванов, И. И. Николов; Под ред. В. А. Вознесенского.— К.: Будивэльник, 1989.—240 с.: ил.— ISBN 5-7705-0186-3.**

Изложены принципы построения экспериментально-статистических моделей в задачах материаловедения и технологии. Описано использование моделей и ЭВМ при анализе и оптимизации композиционных материалов. Даны примеры новых инженерных решений при создании полимерсодержащих защитных и конструкционных композитов с заданными технологическими и эксплуатационными свойствами.

Для научных работников, инженерно-технических работников предприятий стройиндустрии, отраслевых НИИ и вычислительных центров.

Табл. 22. Ил. 57. Библиогр.: 125 назв.

Рецензенты: *д-р техн. наук, проф. В. Г. Зазимко, А. П. Баглай*

Редакция литературы по строительным конструкциям, материалам и изделиям

Зав. редакцией *А. А. Петрова*

Редактор *Т. Б. Богданова*

Э 3306000000—031 39.89  
M203 (04)—89

ISBN 5-7705-0186-3 © Издательство «Будивэльник», 1989

**«Многолетняя практика доказала, что математическое моделирование — одно из основных методологических достижений научно-технической революции».**

Акад. А. А. Самарский \*

## **ПРЕДИСЛОВИЕ**

Компьютеризация производства — одно из пяти направлений ускорения научно-технического прогресса, включенных в экономическую стратегию партии новой редакцией Программы КПСС \*\*.

Наличие в научной, проектной или производственной системах ЭВМ само по себе не решает проблемы компьютеризации; более того, приобретение системой вычислительной техники без необходимого, целенаправленного и полноценного математического обеспечения, как правило, один из примеров малоэффективных капиталовложений. В лучшем случае в такой неподготовленной к компьютеризации системе ЭВМ используют для решения типовых организационно-технических задач (учет материальных фондов, статистическая и другая информационная отчетность, типовые расчеты по формулам нормативно-инструктивной литературы), но не для решения отраслевых инженерных, в частности, в режимах автоматизированных систем научных исследований (АСНИ), проектирования (САПР) и управления технологическими процессами (АСУ ТП), которые являются базовыми элементами компьютеризации производства. По мнению большинства экспертов, стоимость методического и программного обеспечения АСНИ, САПР и АСУ ТП будет возрастать значительно быстрее, чем входящей в них вычислительной техники.

В цикле «исследуемый объект — информация — модель — алгоритм — программа — ЭВМ — оптимизируемый объект» труд-

\* Самарский А. А. Модели для открытий // Правда. — 1986. — 31 янв.

\*\* Материалы XXVII съезда Коммунистической партии Советского Союза. — М. : Политиздат, 1986. — С. 141—142.

но выделить главное звено, поскольку без любого из звеньев цепь распадается, а ее «обрывки» могут принести больше вреда, чем пользы. Для инженеров разных специальностей неравновелика ответственность за то, чтобы включающий ЭВМ цикл функционировал надежно. За что же кроме «объекта» (композиционного материала, его технологии, предприятия, отрасли) несут ответственность инженеры-материаловеды и технологи? За достоверность информации и работоспособность модели. Ответственность эта огромна, потому что ни специалисты группы 01.01 «Математика»\*, ни группы 05.13 «Управление, автоматика и вычислительная техника» не могут исправить ошибки, допущенные материаловедами и технологами (в частности, специальностей 05.23.05 «Строительные материалы и изделия», 05.17.11 «Технология силикатных и тугоплавких неметаллических материалов») при сборе информации об объекте, а также при участии (вместе с математиками, программистами, системщиками) в составлении математической модели и использовании ее для оптимизации функционирования этого объекта.

Решение задач оптимизации композиционных материалов без привлечения ЭВМ становится анахронизмом, прежде всего потому, что ЭВМ открывает возможность предварительного обсуждения (диалога с коллегами или с самой ЭВМ) многих вариантов рациональных решений, приближающихся (по тем или иным критериям) к оптимальным, что позволяет гибко управлять процессами создания, исследования, внедрения и производства композиционных материалов. Данная книга посвящена именно проблеме, вытекающей из создания таких «человеко-машинных» комплексов, проблеме построения и применения с использованием ЭВМ математических экспериментально-статистических моделей (ЭСМ) в задачах анализа и оптимизации. Работа с ней требует интеллектуального напряжения независимо от уровня знаний в прикладной математике, материаловедении и технологии КМ, поскольку книга по своему замыслу является одним из мостов между ними. В ней анализируется нетривиальная информация с точки зрения тех, кто ставит задачи и анализирует результаты их решения или тех, кто их решает на ЭВМ.

В основу книги положены результаты совместных советско-болгарских исследований, выполненных в Одесском инженерно-строительном институте, Высшем институте архитектуры и

---

\* Номенклатура специальностей научных работников. — Бюл. ВАК при Совете Министров СССР. — 1984. — № 6.



строительства в Софии и Центральной лаборатории физико-химической механики Болгарской Академии Наук в 1976—1987 гг.

Предисловие и гл. 1 написаны В. А. Вознесенским, гл. 2 — Т. В. Ляшенко, гл. 3 — И. И. Николовым, В. А. Вознесенским и Я. П. Ивановым, гл. 4 — Т. В. Ляшенко и Я. П. Ивановым, гл. 5 — В. А. Вознесенским при участии Т. В. Ляшенко (§ 5.7).

Авторы благодарят коллег, особенно кандидатов техн. наук А. Абдыкалыкова, А. Н. Карабаева, Р. Коцилкову и Н. В. Хлыцова за активное участие в проведении экспериментальных и вычислительных работ, а Н. Сарафанюк — за помощь в подготовке рукописи.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ КАК СОДЕРЖАТЕЛЬНАЯ ОСНОВА КОМПЬЮТЕРИЗАЦИИ ИХ ПРОИЗВОДСТВА

### 1.1. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ОПТИМИЗАЦИЯ КАЧЕСТВА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ, ТЕХНОЛОГИИ ИХ ПРОИЗВОДСТВА И ИССЛЕДОВАНИЯ

*Вероятностно-статистическая концепция анализа и оптимизации инженерных решений в области строительного материаловедения и технологии, в которой системный подход и многофакторное моделирование на основе алгоритмизированного планирования эксперимента синтезируются с физико-химической механикой и общей теорией композиционных материалов (КМ), включает четыре базовых положения [72].*

1. Создание КМ без оптимизации его структуры и свойств технически нецелесообразно и экономически не эффективно; оптимизация должна отвечать целям эксплуатации материала в конструкциях.

2. Основа оптимизации рецептурно-технологических решений триединая: системный подход к объектам, алгоритмизированный эксперимент и математическое моделирование. Оптимальными должны быть как процессы изготовления материала, так и его экспериментального исследования и моделирования.

3. Оптимизация структуры, свойств и технологии КМ базируется на физико-химической механике и должна соответствовать критериям экономии ресурсов при заданном уровне качества готовой продукции. Моделирование рецептурно-технологических ситуаций без учета физических закономерностей структурообразования и особенностей материалов мало эффективно, так как дает лишь локальный успех.

4. Оптимальное математическое обеспечение решения задач анализа и оптимизации КМ — автоматизированные на базе ЭВМ системы, ориентированные на работу с ними инженеры-технологи и материаловеды. В таких системах обязательны блоки типовых инженерных решений рецептурно-технологических задач и синтеза оптимальных планов экспериментально-статистического моделирования.

В работе [72] выделены три аспекта, принципиально важных для развития современного материаловедения и создания прогрессивных технологий.

Во-первых, в производстве строительных КМ и конструкций из них происходит процесс усложнения программных технических задач, технико-экономических условий и научно-технических подходов к их решению. Это приводит к *усложнению* трех основных взаимосвязанных объектов:  $O_1$  — композиционных материалов как конечной продукции;  $O_2$  — собственно технологии производства КМ;  $O_3$  — процессов разработки и исследования материалов и технологий как основы научно-технического прогресса в данной отрасли.

Во-вторых, интенсивное развитие и надежное функционирование этих объектов обеспечивается только в том случае, если при их анализе и синтезе используют как *единое целое* методы и факты фундаментальных и прикладных наук (как внутриотраслевых, так и межотраслевых), ведут исследования на *теоретическом и эмпирическом* уровнях познания; поведение объектов рассматривают комплексно с естественно-научной, технической, технологической и социальной точек зрения. Это диалектическое единство гарантируется общеметодическим принципом — системным подходом [48], который тесно связан с прогрессирующим *ростом потерь от принятия неправильных или ненадежных решений* вследствие усложняющихся объектов.

В-третьих, несмотря на разнообразие объектов, целей и ограничений, все реальные материаловедческие и технологические задачи содержат требование о *доказательном выборе в ограниченных пределах наиболее целесообразного варианта* инженерного решения, и, таким образом, должны рассматриваться как задачи *оптимизации*. Цели оптимизации в общем случае могут быть *двух* альтернативных типов. Первый: достигнуть *максимума* критерия оптимизации, израсходовав *любую* часть выделенного ресурса; второй — достигнуть *заданного* уровня критерия качества объекта при *минимальном* расходе ресурсов (в инженерной практике задачи второго типа встречаются значительно чаще, чем первого).

Возникающие при решении задач оптимизации простейшие типовые ситуации проанализированы на рис. 1.1, *a...в*, где показаны три наиболее характерных для технологии КМ функции (траектории достижения цели).

Задача *первого* типа:  
при возможном расходе ресурсов  $X_{\text{норм}} = 4$  три результата ранжируются как

$$a_{3(4)} = b_4 = c_4, \quad (4.1)$$

т. е. все траектории приводят к равному результату, однако при уменьшении нормы ресурса приоритеты изменяются:

$$\left. \begin{aligned} X_{\text{норм}} = 3 \dots a_3 > c_3 > b_3; \\ X_{\text{норм}} = 2 \dots b_2 > c_2 > a_2; \\ X_{\text{норм}} = 1 \dots b_1 > a_1 > c_1. \end{aligned} \right\} \quad (1.2)$$

Задача второго типа:

при заданном уровне качества  $Y_{\text{тр}} = 8$  по минимальному расходу ресурса три технологии райжируются как (1.3), однако при  $Y_{\text{тр}} = 3$  (1.4) приоритеты трансформируются.

$$X^c \{8\} < X^a \{8\} < X^b \{8\}; \quad (1.3)$$

$$X^b \{3\} < X^a \{3\} < X^c \{3\}. \quad (1.4)$$

Анализ (1.1) ... (1.4) отражает диалектическую природу технологической системы: единую траекторию наилучшего управления выбрать нельзя до тех пор, пока не определены цели и границы области действий.

Проанализированные выше функции — частный случай многофакторной рецептурно-технологической ситуации, в которой инженер имеет дело с «полем свойства» (рис. 1.1, г), где каждой

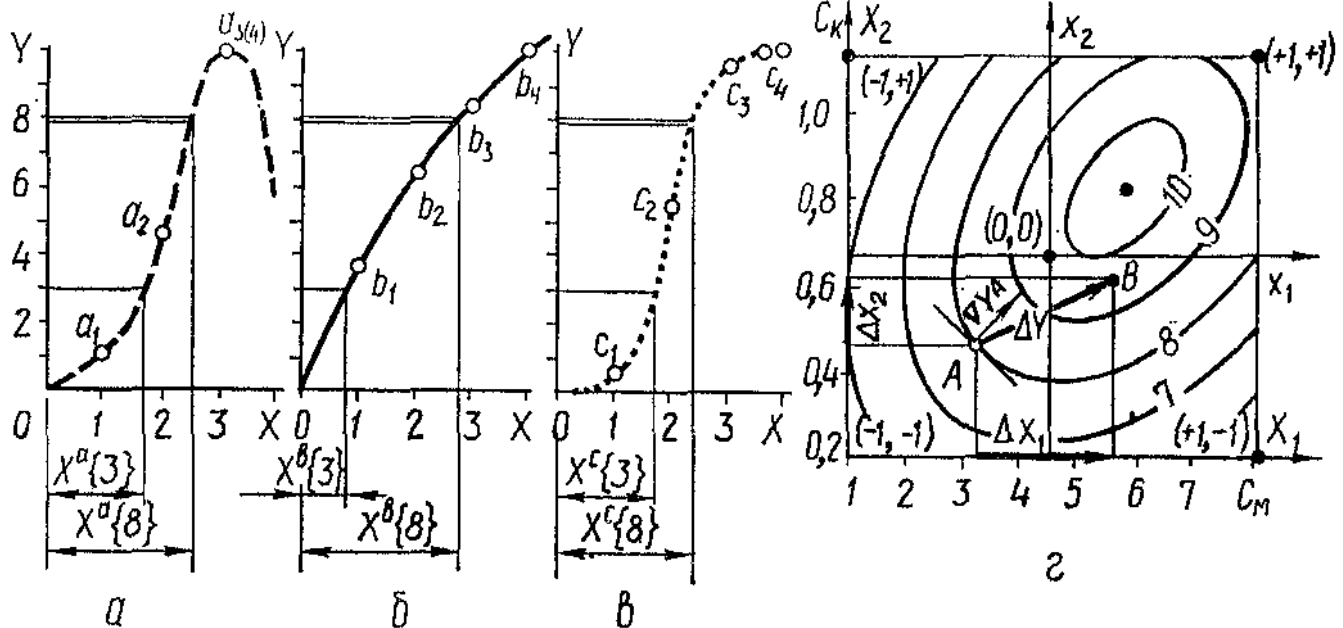


Рис. 1.1. Простейшие типовые задачи оптимизации при трех траекториях достижения цели (а ... в) и изменение выхода  $\Delta Y$  в поле свойств (г) под действием рецептурно-технологических потенциалов  $\Delta x_1$  (изменение концентрации модификатора  $C_m$ , %) и  $\Delta x_2$  (изменение концентрации катализатора  $C_k$ , %)

точке соответствует некоторое значение одного (скалярное поле) или нескольких (векторное поле) свойств КМ. Изменение свойства на  $\Delta Y$ , т. е. переход от точки  $A$  в точку  $B$  (см. рис. 1.1,  $z$ ), возможно только при возникновении *факторных потенциалов*  $\Delta x_1, \dots, \Delta x_k$  (рецептурно-технологических, эксплуатационных [16, 72]). Наиболее быстрым движением к оптимуму — к вершине (см. рис. 1.1,  $z$ ) — будет при таких соотношениях между факторными потенциалами, когда в любой точке оно совпадает с направлением  $n$  градиента поля (1.5), описываемого функцией  $Y = f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k) = f(x)$ ,

$$\nabla Y = \text{grad } Y = dY/dn. \quad (1.5)$$

Привлечение аппарата математической физики к исследованию поля свойств позволяет решать усложненные задачи анализа и оптимизации рецептурно-технологических систем по моделям, построенным на разных исходных предпосылках.

*Пять основных* (относительно реальных материаловедческих и технологических задач) *типов моделей*, различных по своей природе, показаны на схеме 1.1. Модели  $M_1$  (на схеме 1.1 рассмотрено уравнение движения вязкой жидкости Навье — Стокса [62]) имеют в основании анализ *бесконечно малых изменений* в физической системе. При этом число *допущений* очень мало (например, «поток неразрывен» и «жидкость имеет ньютоновскую вязкость»), а при составлении моделей используются *фундаментальные законы* природы (например, знак равенства в уравнении Навье — Стокса отражает закон сохранения энергии). Однако для инженерных расчетов требуется переход от «бесконечно малых» к «измеримым» (конечным) изменениям в системе, который, как правило, столь сложен аналитически (или вообще не возможен в общем виде), что *интегрирование* заменяется приближенными методами, в том числе анализом явлений на моделях с помощью *теории подобия* [62]. Как специальное научное направление теория подобия сформировалась в качестве инженерного инструмента для поиска путей выхода из «математическо-аналитического» тупика (ее мощная альтернатива — численное решение задач математической физики на ЭВМ [24, 60, 91]).

Модели  $M_2$  (на схеме 1.1 рассмотрено реологическое тело Максвелла [62, 84] с периодом релаксации, равным отношению между ньютоновской вязкостью и модулем упругости Гука) имеют в основании, прежде всего *инженерное представление о явлении* — абстрактность отражается *сначала концептуально* (например, «пусть тело состоит из пружины и поршня, движущегося внутри вязкой жидкости»), а *потом* описывается аналитически дифференциальными (см. схему 1.1) или алгебраическими (задача

о распределении напряжений в образце, представленном в виде системы конечных элементов [34]) уравнениями или геометрическими соотношениями (задача об укладке зерен-шаров в объеме [62]), или кинетическими уравнениями (задача об устойчивости свободнодисперсных систем [84]). Преимущества моделей ясны: они легко поддаются «физической» интерпретации технологами, которая уже заложена в концептуальном основании модели. Именно в этом же основании заложен и коренной недостаток моделей типа  $M_2$  — можно корректно описать математическими символами концепцию, далекую от реальности и здравого смысла, базирующегося на межотраслевом знании. Кроме того, модели  $M_2$  не исключают, а подразумевают опытное определение в конкретных рецептурно-технологических условиях различных показателей объекта (как правило, в виде констант).

Модель  $M_3$  на схеме 1.1 отражает зависимость прочности бетона от водосодержания, выраженную формулой Болоева — Скрамтаева. Предназначенные для описания взаимосвязи между входами  $X$  и выходами  $Y$  системы на основе экспериментальных данных модели  $M_3$  отличаются простыми исходными предпосылками («связь может существовать и ее можно описать формулой или алгоритмом»). Это источник и достоинств (универсальность программ, например) и недостатков (относительная сложность содержательной интерпретации [72] и, как следствие, познавательная ограниченность). Модели  $M_3$ , по-видимому, будут занимать основное место в инженерной практике, причем их позиции значительно укрепляются в связи с расширением выпуска микро-ЭВМ и персональных компьютеров.

Модели  $M_4$  только начинают входить в практику решения задач материаловедения и технологии КМ, вероятно, в силу нетривиальности аналогий между собственно «исследованием операций» (сетевое планирование, задача о коммивояжере, неантагонистические игры и др. [48]) и явлениями, происходящими в композиционном материале. На схеме 1.1 показано применение модели  $M_4$ , когда фильтрация жидкости в бетоне рассматривается как движение через сеть случайной конфигурации с запертыми узлами [59].

Попытки объединения моделей  $M_1 \dots M_4$  как попарно, так и в совокупности, известны давно (особенно пары  $M_1 — M_2$  и  $M_2 — M_3$ ), но именно вычислительная техника позволяет реализовать с пользой для материаловедения и технологии такое объединение. Первой его фазой можно считать имитационные модели  $M_5$  [20, 36, 48], одна из составных частей которых — генератор случайных чисел, «заставляющих» модель флуктуировать подобно реальному объекту в производственных условиях.

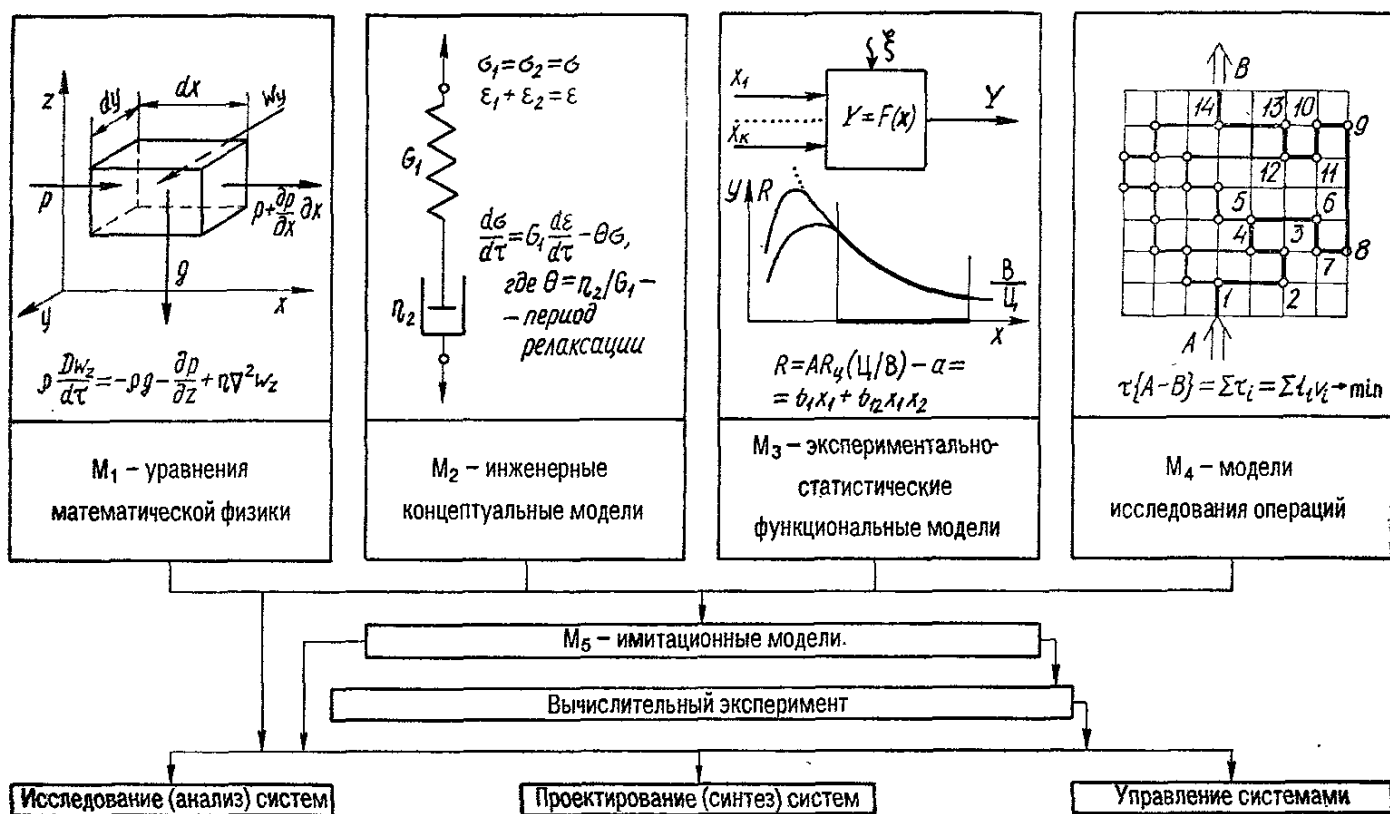


Схема 1.1. Пять типов различных по природе моделей в материаловедении и их связь с целями моделирования

**Т а б л и ц а 1.1. Объекты оптимизации**

Объекты оптимизации	А. Фундаментальные основы оптимизации	Б. Традиционные показатели
		Б-1. Стабилизация
$O_1$ Композиционный материал	Познание закономерностей структурообразования и деструкции (коллоидная химия и физико-химическая механика, механика деформируемого твердого тела) $M_1, M_2, M_3$	Гарантия заданного уровня качества при выпуске материала и его эксплуатации. Обеспечение однородности полей свойств, внутри- и межпартиционного качества $M_3, M_4$
$O_2$ Технология	Познание закономерностей преобразования вещества и энергии (химическая кинетика, процессы и аппараты в технологии композиционных материалов) $M_1, M_2, M_3$	Уменьшение вариации рецептурно-технологических факторов во времени. Обеспечение заданных полей факторов в изделиях и аппаратах. Надежность управления технологией $M_3, M_4$
$O_3$ Материаловедческие и технологические исследования	Общая методология (диалектика, системный анализ, моделирование) и естественно-научные методы исследований $M_3, M_4$	Повышение точности и экспрессности измерений, в том числе в условиях АСУ ТП $M_2, M_3$

Высшая фаза такого объединения — *вычислительный эксперимент* [60], который служит основой новой технологии исследований, экономящей значительные материальные ресурсы и дающей новое знание (вплоть до открытия новых физических явлений) за счет *интенсивного использования математических моделей* и ЭВМ. В области КМ опыт вычислительного эксперимента невелик. Его основные результаты изложены в данной книге, а также в [79 — 1986; 109 — IV].

Математические модели — эффективное средство решения задач во всех *трех основных областях деятельности* материаловедов и технологов — при *исследовании и проектировании систем, управлении их функционированием* (см. схему 1.1). Однако роль каждого типа моделей в разных областях деятельности *не равноценна*. В задачах анализа системы, особенно направленного на познание внутреннего механизма происходящих в ней явлений, особое значение имеют модели  $M_1$  и  $M_2$ , природа которых обеспечивает углубленную интерпретацию результатов моделирования. В то же время в задачах управления системой



## и предпочтительные математические модели

ли объекта	
Б-2. Интенсификация	В. Новые показатели объектов
<p>Улучшение:  средних показателей качества;  вероятностных показателей качества  (минимально возможный уровень, ве-  роятность отказа, доля брака и т.п.)  <math>M_2, M_3, M_4</math></p>	<p>Новая комбинация уровней тра-  диционных показателей качест-  ва. Обеспечение нового показа-  теля качества  <math>M_1, M_2, M_3</math></p>
<p>Сокращение:  трудозатрат;  времени технологического цикла;  материальных и энергетических за-  трат (в том числе за счет использова-  ния отходов промышленности)  <math>M_2, M_3, M_4</math></p>	<p>Технологии:  использующие новые воздействия  на объект (электродинамические,  магнитные и т. п.);  безотходные;  гибкие;  включающие микропроцессоры  и робототехнику  <math>M_1, M_2, M_3</math></p>
<p>Создание новых методов и средств  эксперимента (в том числе использу-  ющих микропроцессоры)  <math>M_1, M_2, M_3</math></p>	<p>Новые принципы исследования и  АСНИ (автоматизированные си-  стемы научных исследований)  <math>M_1, M_2, M_3, M_4</math></p>

(главная из них — достижение конкретной цели функционирования данной системы в определенных условиях) приоритет переходит к моделям  $M_3 \dots M_5$ , в которых эту конкретность удается, как правило, отразить с требуемой полнотой и точностью. При проектировании системы на этапе поискового синтеза предпочтительнее модели  $M_1, M_2$ , отражающие более общую инженерную информацию о системах данного класса, а на стадии подготовки синтезированной системы к реализации повышается значение моделей  $M_3, M_4$  и, особенно,  $M_5$ .

Анализ *трех объектов оптимизации*  $O_1 \dots O_3$  (табл. 1.1) позволил уточнить предпочтительные типы математических моделей  $M_i$  при решении основных научно-технических задач материаловедения и технологии [72]. При этом использованы данные наукометрического анализа [109] и др. Проблема построения моделей  $M_1 \dots M_5$  для оптимизации объектов  $O_1 \dots O_3$  обусловлено имеет мультидисциплинарный характер (см. табл. 1.1, А). Приоритет тех или иных подходов принципиально не абсолютен — их ранги должны определяться исследователем по праг-

матическим принципам, исходя, в частности, из соотношения между *приростом оптимизируемого показателя*  $\Delta Y$  (им может быть и объем новой научно-технической информации) и *расходами на этот прирост ресурсов*, ограниченных конкретными техническими и экономическими условиями. Представляется, что в ситуациях  $O_1Б$  и  $O_2Б$  (см. табл. 1.1) создание сложных универсальных моделей для решения задач оптимизации не оправдано ни с научной, ни с практической точек зрения. Необходимо интенсифицировать разработку методик построения моделей типа  $M_5$  (с преобладанием в них моделей  $M_3$ ) для конкретных материалов и технологий, причем *программное обеспечение* должно быть ориентировано на *диалоговую систему* (см. гл. 2) «мини—ЭВМ—технолог». В ситуациях  $O_iВ$  и, особенно, в  $O_iА$  целесообразно строить *вверх* достаточно сложных моделей, дискриминируемых по результатам научной и производственной практики.

## 1.2. ОБЕСПЕЧЕННОСТЬ РАБОТОСПОСОБНОГО СОСТОЯНИЯ И РИСК ОТКАЗА КАК ВЕРОЯТНОСТНЫЕ ПОКАЗАТЕЛИ КАЧЕСТВА СИСТЕМЫ (КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА, ТЕХНОЛОГИИ, МОДЕЛЕЙ)

Необходимость решения задач, связанных, в частности, с *надежностью* работы системы (материалов, технологий, моделей — см. табл. 1.1), *гарантированным уровнем* показателей ее качества, минимизацией брака [5, 10, 16, 38, 63], — поставила перед практикой моделирования ряд вопросов, требующих новых, нетрадиционных подходов к объектам анализа и оптимизации.

На рис. 1.2, а показаны соотношения между *работоспособным состоянием* объекта и его *отказом*, на границе которых объект находится в *предельном состоянии*. При этом под работоспособным состоянием данного объекта понимают такое состояние объекта, при котором значения  $Y_j$  всех  $M$  параметров, характеризующих способность выполнять заданные функции, соответствуют требованиям нормативно-технической документации (без потери общности  $Y_j \geq Y_{тр}$  при  $j = \overline{1, M}$ ). Количественно неработоспособное состояние объекта по параметру  $Y$  характеризуется, с одной стороны, *вероятностью отказа*  $\alpha$ , а с другой — *граничным значением*  $Y_\alpha$ , ниже которого (рис. 1.2, а), в соответствии с нормативом ( $Y_{норм} = Y_\alpha$ ), это состояние наступает. В терминах прикладной статистики [1]  $Y_\alpha$  — *квантиль уровня*  $\alpha$

случайной величины  $Y$ . Риск отказа  $\alpha$  и уровень предельного состояния  $Y_\alpha$  связаны между собой жесткой детерминированной связью (1.6) через функцию плотности вероятности  $f(Y)$  непрерывной случайной величины  $Y$  — функцию, которая является независимой от технолога объективной реальностью системы

$$\alpha = \int_{-\infty}^{Y_\alpha} f(Y) dY. \quad (1.6)$$

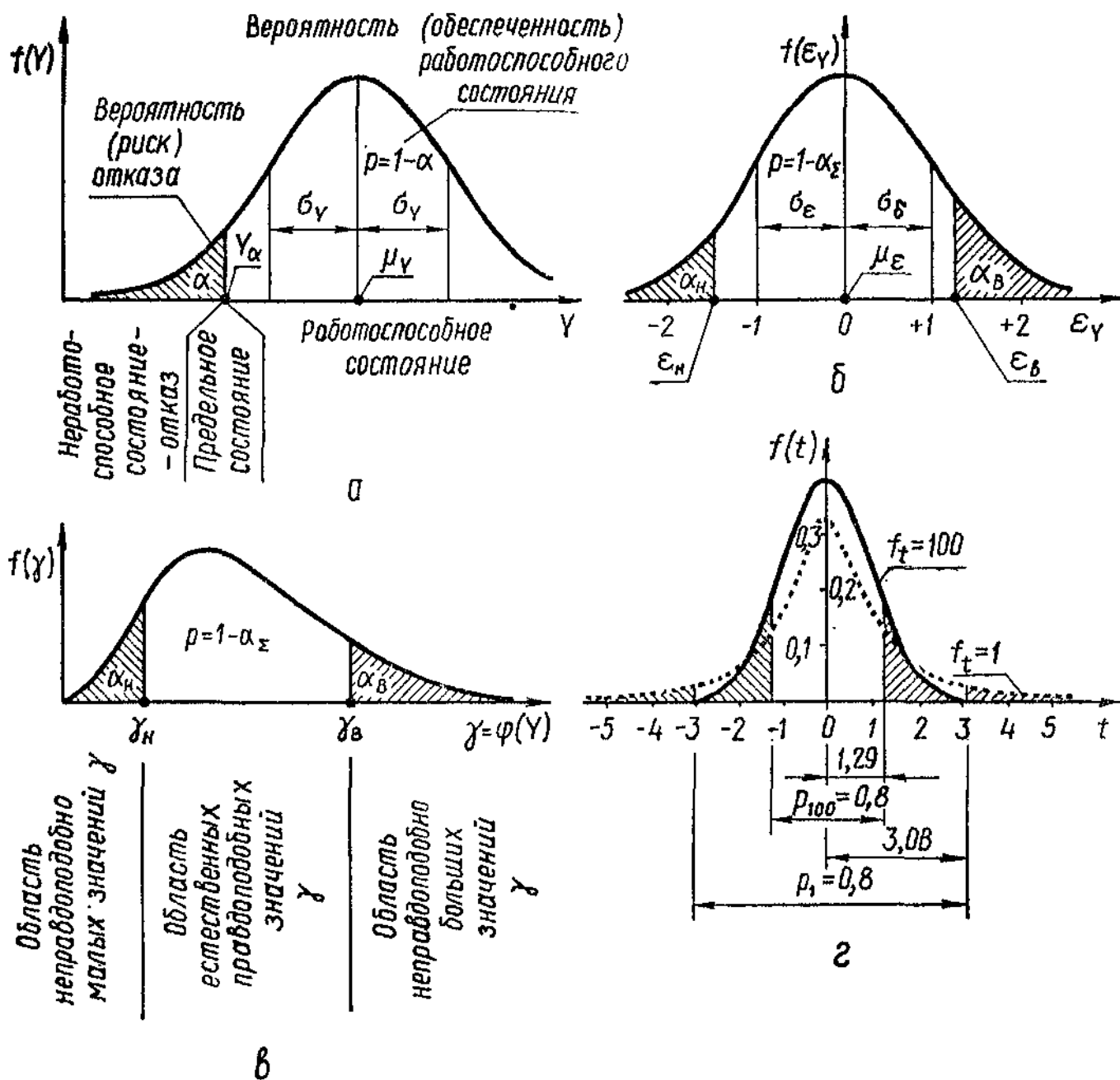


Рис. 1.2. Соотношения между вероятностью работоспособного состояния системы  $p$  и вероятностью отказа  $\alpha$  при одностороннем (а) и двустороннем риске (б), а также зоны риска при проверке статистических гипотез по критерию  $\chi$  (в) и по  $t$ -критерию с разным числом степеней свободы (г)

Величины  $\alpha$  и  $Y_\alpha$  также детерминировано связаны через традиционно используемые технологами числовые характеристики распределений — *среднее*  $\mu_Y$  и *среднеквадратическое отклонение*  $\sigma_Y$ . Так, в частности, для нормального закона распределения  $Y$  связь (1.6) записывается [1, 7] как

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{Y_\alpha} \sigma_Y^{-1} \exp \left\{ -\frac{(Y - \mu_Y)^2}{2\sigma_Y^2} \right\} dY. \quad (1.7)$$

Соотношения (1.6), (1.7) определяют ряд следствий, ставящих серьезные инженерные задачи. Те из них, которые входят в проблематику достоверности выводов по результатам экспериментально-статистического моделирования, рассматриваются в данной главе. Задачи технологических и материаловедческих проблем управления вероятностными показателями  $\alpha$ ,  $Y_\alpha$  рассмотрены в гл. 5.

При моделировании, анализе и оптимизации удобнее пользоваться распределением (см. рис. 1.2, б) *нормированной безразмерной* случайной величиной  $\varepsilon_Y$  (1.8), однозначно связанной со средним значением  $\mu_Y$  и среднеквадратическим отклонением  $\sigma_Y$ ,

$$\varepsilon_Y = (Y - \mu_Y)/\sigma_Y. \quad (1.8)$$

В таких задачах часто выдвигается не требование  $\varepsilon \geq \varepsilon_\alpha$  (аналог см. рис. 1.2, а), а более жесткое требование попадания  $\varepsilon$  в коридор  $\varepsilon_H \leq \varepsilon < \varepsilon_B$  (см. рис. 1.2, б). При этом не обязательно, чтобы риск  $\alpha_H$  выхода за нижнюю границу  $\varepsilon_H$  был равен риску  $\alpha_B$  выхода за верхнюю границу  $\varepsilon_B$ , хотя в большинстве практических задач  $\alpha_H = \alpha_B$ , что позволяет говорить о так называемом двустороннем риске  $\alpha = 2\alpha_{H(B)}$ . В последнем случае *вероятность* попадания случайной величины  $\varepsilon$  в *доверительный интервал* от  $\varepsilon_H$  до  $\varepsilon_B$ , называемая иногда *обеспеченностью* (см. рис. 1.2, б), определяется как

$$P \{ \varepsilon_H \leq \varepsilon < \varepsilon_B \} = p = 1 - \alpha. \quad (1.9)$$

При моделировании, анализе и оптимизации особое значение имеет проверка комплекса статистических гипотез о достоверности получаемых решений [1, 2, 16, 19]. Понятие риска отказа  $\alpha$  тесно связано с аппаратом проверки *статистических* гипотез как предположений о свойствах генеральной совокупности, где этот риск равноценен вероятности сделать ошибку в выводах (сначала в математико-статистических, а как следствие — в

содержательных выводах и инженерных рекомендациях). Проверяют статистически гипотезы  $H$  с помощью специальных правил — *статистических критериев* [1, 20]. Количественно их оценивают с помощью специально подобранной функции от результатов  $Y$  эксперимента  $\gamma = \varphi(Y)$ , для которой хорошо изучена (и протабулирована) функция распределения вероятностей  $f(\gamma)$  (в общем виде см. на рис. 1.2, в). Если критерий  $\gamma_u$ , рассчитанный по результатам  $u$ -й выборки экспериментальных данных, попадает в область *правдоподобных* значений (см. рис. 1.2, в), то гипотеза *допускается*; если в область *неправдоподобно малых* (ограничена сверху значением  $\gamma_H$ ) или *неправдоподобно больших* (ограничена снизу  $\gamma_B$ ) — *отклоняется*. Все критерии по природе *отрицательны* — попадание  $\gamma_u$  в область принятия гипотезы означает лишь то, что она *не противоречит экспериментальным данным*. Эту гипотезу с риском  $\alpha = \alpha_H + \alpha_B$  можно признать правомерной, пока исследования по расширенной информации или с помощью более совершенных (статистически «мощных») критериев не приведут к противоположному результату. Неотрицательный результат проверки  $H$  *не означает*, что эта гипотеза *лучшая* и *единственная* (свойством непротиворечивости могут обладать и другие гипотезы). Ее следует рассматривать лишь как *одно из правдоподобных* (а не абсолютно достоверных) *утверждений*.

Численное значение абсолютного большинства статистических критериев  $\gamma$  *зависит* от объема экспериментальной информации (в частности, от числа образцов  $n$ ), на основе которой проверяется гипотеза  $H$ . При постоянном уровне риска  $\alpha$  чем *меньше* собрано информации (испытано незначительное количество образцов  $n$ ), тем шире оказывается при проверке по  $\gamma$ -критерию доверительный интервал (1.9), т. е. инженерный результат более «расплывчатый». На рис. 1.2, г показаны две кривые распределения  $f(\gamma)$  для критерия  $\gamma = t$  (Стьюдента) [7, 11, 16], который часто используется в инженерной практике, поскольку участвует (1.10) в формировании с помощью эмпирических оценок среднего  $\bar{Y}$  и среднеквадратичного отклонения  $s$  доверительного интервала (1.9) для *истинного среднего*  $\mu$ .

$$P \{ (\mu_H = \bar{Y} - t_{\alpha n} s / \sqrt{n}) \leq \mu \leq (\mu_B = \bar{Y} + t_{\alpha n} s / \sqrt{n}) \} = 1 - \alpha. \quad (1.10)$$

Если число степеней свободы  $f_t = 100$ , то при двустороннем риске  $\alpha = 0,2$  значение  $t = 1,29$ ; но оно возрастает почти в три раза (до  $t = 3,08$ ), если  $f_t = 1$ , что в соотношении (1.10) соответствует параллельным измерениям  $Y$  на двух образцах.

Ошибка в выводах может быть двух родов. Если *отвергнута правильная гипотеза*, то совершается *ошибка первого рода*. Вероятность  $\alpha$  допустить ее названа в прикладной статистике *уровнем значимости*, а соответствующие ей области (см. рис. 1.2, в) — критическими. Если будет *допущена неправильная гипотеза*, то совершается *ошибка второго рода*. Ее вероятность  $\beta$  дополняет значение мощности критерия  $V = 1 - \beta$  [1]. В тех-

Т а б л и ц а 1.2. Возможности ошибок при проверке статистических гипотез (пример: гипотеза о равенстве двух истинных средних  $\mu_1$  и  $\mu_2$ )

Фактически истинны гипотезы	Критерий $\gamma$ рекомендует допустить нуль-гипотезу	Критерий $\gamma$ рекомендует отклонить нуль-гипотезу, а допустить альтернативную гипотезу
Нуль-гипотеза $H_0 : \mu_1 = \mu_2$	Решение <i>правдоподобно</i> : допущена гипотеза $H_0 : \mu_1 = \mu_2$	Решение <i>ложно</i> , так как совершена ошибка <i>первого рода</i> $\alpha$ , поскольку отклонена верная гипотеза $H_0$ ; риск <i>производителя</i> $\alpha$ (producer's risk) — вероятность ошибки, при которой годную партию продукции могут в результате колебаний выборочной оценки признать не соответствующей техническим требованиям

Альтернативная гипотеза $H_1 : \mu_1 \neq \mu_2$	Решение <i>ложно</i> , так как совершена ошибка <i>второго рода</i> $\beta$ , поскольку допущена ложная гипотеза $H_0$ вместо истинной $H_1$ ; риск <i>потребителя</i> $\beta$ (consumer's risk) — вероятность ошибки, при которой <i>негодную</i> партию продукции могут в результате колебания выборочной оценки ошибочно признать годной	Решение <i>правдоподобно</i> , так как допущена гипотеза $H_1 : \mu_1 \neq \mu_2$
---	---	---

нико-экономических задачах, в частности при контроле качества продукции,  $\alpha$  и  $\beta$  называют, соответственно, рисками *потребителя* и *производителя*. Все четыре возможных при проверке гипотез ситуации показаны в табл. 1.2.

Как правило, *назначают риск первого рода*  $\alpha$ , численное значение которого зависит от технико-экономической *тяжести негативных последствий*, возникающих от допущения *неправиль-*

ных гипотез, а потом выбирают среди критериев такой, который обладал бы наибольшей мощностью В. Назначение во всех задачах моделирования «стандартного 5 %-ного» уровня риска  $\alpha = 0,05$  — не более чем исторически сложившаяся традиция. Уровень риска должен *снижаться с ростом цены потерь* от неправильных выводов, т. е. зависеть как от объекта анализа и оптимизации, так и от стадии его исследования. При назначении риска целесообразно [16, 19, 20] руководствоваться следующим:

а) предварительные поисковые работы —  $0,1 \leq \alpha \leq 0,2$ ;

б) окончательные рецептурно-технологические решения в лабораторных и производственных условиях (кроме п. «в, г») —  $0,05 \leq \alpha \leq 0,1$ ;

в) анализ и контроль качества материалов в производственных условиях (кроме п. «г») —  $0,01 \leq \alpha \leq 0,05$ ;

г) анализ и контроль качества конструкционных и защитных материалов, а также токсичных, взрывоопасных и других веществ, опасных для здоровья людей —  $\alpha < 0,01$ .

Некоторые обоснования для выбора риска при расчете строительных конструкций даны в [5] с учетом коэффициента социальной значимости объекта. Риск выпуска недоброкачественной продукции возможен и в результатах научных исследований, в частности моделирования. Этот вопрос подробно проанализирован в [72], а данные анализа *риска при моделировании* представлены на схеме 1.2.

А. Невозможно составить полный список факторов, а значит всегда *останется* некоторая их группа  $X_{K-k}$ , которая *усилит* влияние *случайных* факторов  $\xi$ . Кроме того, на оставшиеся  $k$ -факторы, учитываемые моделью, накладываются ограничения диапазоном их варьирования. Модель описывает лишь влияние потенциалов (см. рис. 1.1, г), вызывающих изменение  $\Delta Y$  более чем на заданный уровень  $C$  или  $D$ .

Б. При исследовании системы составляют *информационную таблицу* [20], задающую матрицу  $X$  и вектор  $Y$ , *дискретные* по сути, а функция  $Y = f(X)$  должна описать поведение системы как *непрерывного целого*.

В. Истинная функция состояния «открывается» экспериментатору *лишь* на исследуемом *участке* и *дискретно* (в опытных точках). Поэтому она аппроксимируется приближенно.

Г. Информацию, как правило, собирают на предметно-физических *моделях, масштабированных* (по параметрам состояния, в том числе по размерам) по отношению к объекту.

Д. Любая измерительная техника ограничена по *классу точности*, а класс отраслевых измерительных приборов и испытательных стендов невысок.

Е. Распределение случайных значений входов и выходов часто *отлично* от нормального, возникающего только тогда, когда генерирующие его случайные факторы равновелики и равномерны [1].

Ж. Показатели *точности модели*, в частности дисперсии оценок коэффициентов  $\sigma^2 \{b_i\}$  и ковариации между ними  $\text{cov} \{b_i b_j\}$ , зависят не только от ошибки эксперимента  $s_y^2$ , но и от *расположе-*

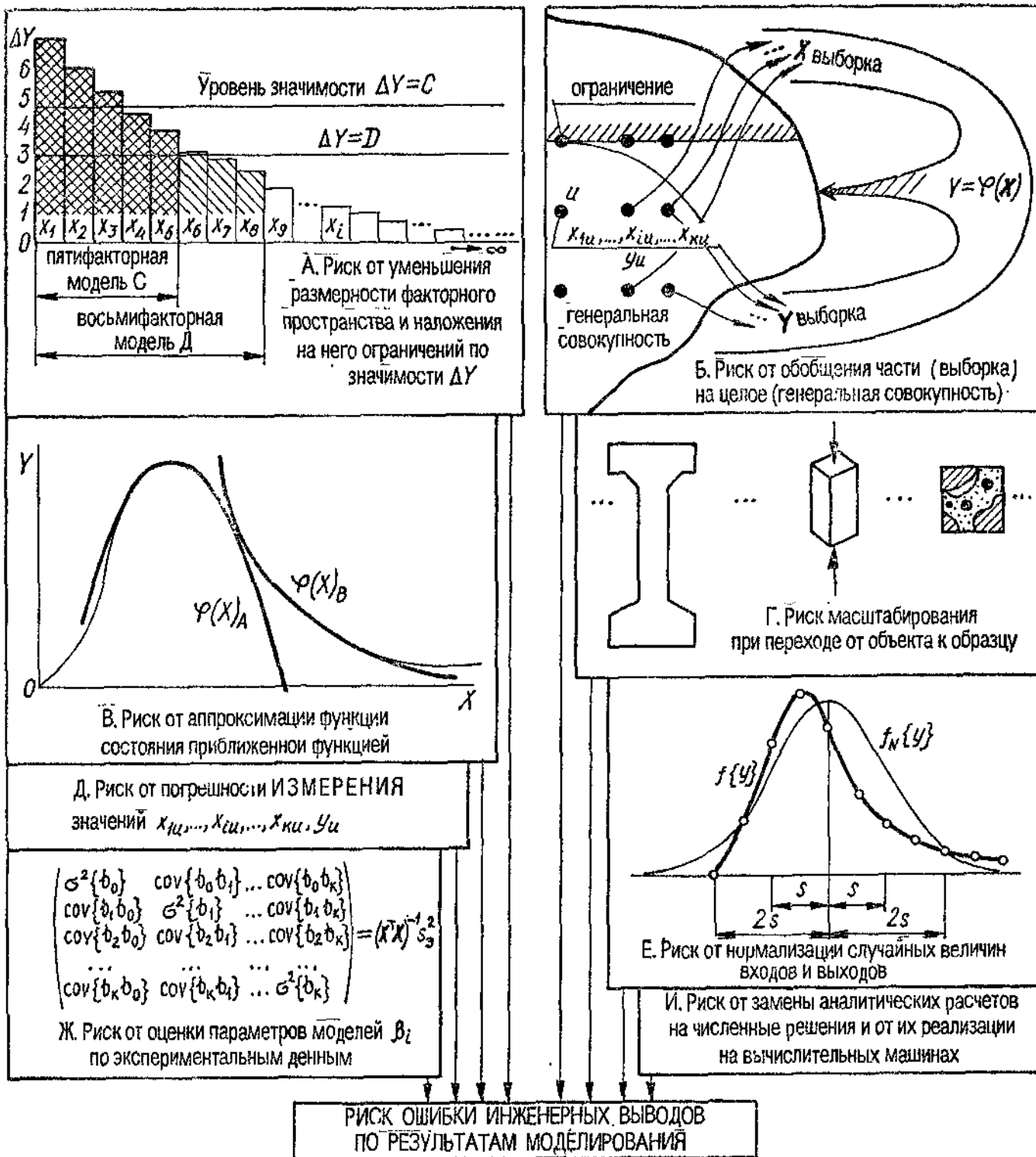


Схема 1.2. Источники риска ошибки при моделировании в материаловедении



ния точек в факторном пространстве (см. схему 1.2, источник риска «Б»).

И. Любые численные решения (а только они возможны на ЭВМ цифрового типа) имеют ограниченное число значащих цифр. В результате ряда операций на ЭВМ точность результата уменьшается [20].

Риск ошибки инженерных выводов по результатам моделирования можно уменьшить за счет рациональной организации исследований [16, 20, 72].

### 1.3. КОМПЛЕКС ТИПОВЫХ ЗАДАЧ, РЕШАЕМЫХ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИМ МОДЕЛЯМ

В исследовательской и производственной практике многие частные задачи после ряда преобразований (как абстрактно-знаковых, так и семантических) приводятся к некоторым типовым постановкам (формулировкам, условиям), что позволяет идти по пути стандартизации методического и программного обеспечения их решения. Для экспериментально-статистических моделей общие принципы типовых решений сформулированы в работах [16, 19, 72]. Целесообразно последовательно проанализировать их применение при решении инженерных задач по одной двухфакторной модели, а также по комплексу из двух моделей в одинаковом факторном пространстве. При этом относительно традиционные постановки и решения, аналогичные изложенным в [7, 16, 17, 72], будут даны конспективно, а относительно новые задачи (с вероятностными критериями, а также перспективные или требующие дополнительной коллективной разработки) будут детализированы.

Технологические условия задачи и результаты моделирования. Исследуется композиция на основе эпоксидной смолы ЭИС-1, предназначенная для монтажа в зимних условиях конструкций сборных железобетонных мостов [30]. Зависимость предела прочности на изгиб  $R$ , МПа, клеевого шва, отверждаемого на морозе ( $-20^\circ\text{C}$ ), от концентраций пластификатора  $x_1$  и отвердителя  $x_2$  (оба фактора нормализованы как  $|x_1| \leq 1$ ) описывается моделью

$$R = 3,17 - 0,48 x_1 - 0,38 x_1^2 - 0,18 x_1 x_2 + 0,19 x_2 - 1,22 x_2^2, \quad (1.11)$$

являющейся сечением пятифакторной модели, полученной по плану  $Na_5$  при дополнительном варьировании количества ускорителя, времени полимеризации и толщины клеевого шва (фик-

сированы на уровнях  $x_3 = +1$ ,  $x_4 = -1$ ,  $x_5 = 0$ ). Оценка при числе степеней свободы  $f_3 = 54$  среднеквадратической ошибки эксперимента  $s_3 = 0,18$  МПа, что дает среднюю по всей области эксперимента относительную ошибку  $\delta_3 = 100 s_3/\bar{R} = 100 \times 0,18/3,17 = 5,7 \%$ .

План  $Na_5$  [16] с числом точек  $N = 27$  симметричен, но не ортогонален. Его ковариационная матрица  $D$  блочно-диагональна (1.12). При этом подматрица  $D_1$  (1.13) содержит не только диагональные элементы  $T_1$  и  $T_{11}$  (необходимые для оценки свободного члена  $b_0$  и квадратичных эффектов  $b_{ii}$ , а также их дисперсий (1.15)), но и внедиагональные элементы  $T_2$  и  $T_5$ , оценивающие ковариацию между этими оценками коэффициентов модели (1.16). Подматрица  $D_2$  (1.13) диагональна. Ее элементы определяют независимые оценки линейных эффектов  $b_i$  и взаимодействий  $b_{ij}$ , а также их дисперсии (1.17):

$$D = \begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix}; \quad D_1 = \begin{pmatrix} T_1 & T_2 & \dots & T_2 \\ T_2 & T_{11} & \dots & T_5 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ T_2 & T_5 & \dots & T_{11} \end{pmatrix}; \quad (1.12) \dots (1.13)$$

$$D_2 = \begin{pmatrix} T_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & T_3 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & T_6 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & T_6 \end{pmatrix}; \quad (1.14)$$

$$T_1 = s^2 \{b_0\}/s_3^2; \quad T_{11} = s^2 \{b_{ii}\}/s_3^2; \quad (1.15)$$

$$T_2 = \text{cov} \{b_0 b_{ii}\}/s_3^2; \quad T_5 = \text{cov} \{b_{ii} b_{ij}\}/s_3^2; \quad (1.16)$$

$$T_3 = s^2 \{b_i\}/s_3^2; \quad T_6 = s^2 \{b_{ij}\}/s_3^2. \quad (1.17)$$

Для плана  $Na_5$  [16] при расчете полной модели второго порядка

$$\left. \begin{aligned} T_1 &= 0,1381; & T_2 &= -0,0303; & T_3 &= 0,0556; \\ T_5 &= -0,0909; & T_6 &= 0,0625; & T_{11} &= 0,4091. \end{aligned} \right\} \quad (1.18)$$

Все оценки коэффициентов в (1.11) статистически значимы при двустороннем риске  $\alpha = 0,2$  (при  $f_3 = 54$  критерий  $t_{0,2} = 1,297$  [16]), так как их гауссовская точность  $h \{b\}$  [20, 72], рассчитываемая как (1.19), выше критического значения (1.20),

$$h\{b\} = |b|/\sqrt{T\{b\}}; \quad h_{кр}\{b\} = t_{\alpha} s_{\nu}. \quad (1.19 \dots 1.20)$$

Так, в частности, для линейного эффекта  $h\{b_2\} = 0,19/\sqrt{0,0556} = 0,81 > 1,297 \cdot 0,18 = 0,23$ .

Показатель условной вязкости композиции при рабочей температуре  $-20^{\circ}\text{C}$  ( $\ln \nu$ ), оцениваемый по времени ее истечения из имитирующего технологический процесс поршневого вискозиметра, описывается в том же факторном пространстве моделью

$$\ln \nu = 3,70 - 0,35x_1 + 0,64x_1^2 - 0,35x_2, \quad (1.21)$$

являющейся сечением трехфакторной модели, полученной по плану  $B_3$  с одной центральной точкой [16] при дополнительном варьировании количества ускорителя (фиксирован как и для  $R$  на уровне  $x_3 = +1$ ). Структура ковариационной матрицы плана  $B_3$  аналогична плану  $Ha_5$  (1.12 ... 1.14). Ее элементы при расчете полной модели второго порядка:  $T_1 = 0,2889$ ,  $T_2 = T_5 = -0,1111$ ,  $T_3 = 0,1000$ ,  $T_6 = 0,1250$  и  $T_{11} = 0,3889$ . При числе степеней свободы  $f_3 = 15$  ошибка  $s_{\nu}\{\ln \nu\} = 0,06$ . С инженерной точки зрения это означает [16], что в факторном пространстве постоянна относительная ошибка экспериментального определения вязкости  $\delta\{\nu\} = 0,06$  (или 6%). При такой точности  $s_{\nu}$  оценки  $b_{12}$  и  $b_{22}$  при проверке по (1.19 ... 1.20) оказались (при  $\alpha = 0,2$ ;  $t = 1,341$  [16]) статистически незначимы и поэтому исключены из модели (1.21). Принятие гипотезы о такой форме модели приводит к изменению матрицы  $D$ .

$$\left. \begin{array}{lll} T_1 = 0,2571; & T_2 = -0,1429; & T_3 = 0,1000; \\ T_5 = -0,1429; & T_6 = 0,1250; & T_{11} = 0,3571. \end{array} \right\} (1.22)$$

Модель предела когезионной прочности (1.11) использована для решения типовых задач как базовая, а модель вязкости (1.21) — для сравнительного анализа и поиска компромиссных решений.

**Задача № 1.** Построение изолиний и поверхностей отклика на диаграмме и анализ их геометрии. Линии равной прочности (изолинии) композита при варьировании количества пластификатора и отвердителя показаны на рис. 1.3, а. Они проведены с шагом  $\Delta R = 0,5$  МПа. Возможна их машинная распечатка. Изолинии  $R$  представляют собой проекции эллипсоида — эллипсы, координаты центра которых определяются [16, 20] как  $x_{1S} = -0,662$  и  $x_{2S} = 0,127$ . Их подстановка в модель (1.11) дает в вершине  $S$  максимальное значение прочности  $R_S = 3,341$  МПа; минимальное значение  $R_{\min} = 1,08$  МПа, как видно

из диаграммы (см. рис. 1.3, а), находится в точке  $x_{1.\min} = +1$ ,  $x_{2.\min} = -1$ . Главные оси  $\tilde{x}_1$  и  $\tilde{x}_2$  канонической формы эллипсов (1.23) наклонены [16] к исходным осям на угол  $\gamma = 6^\circ$ .

$$R - 3,335 = + 0,371\tilde{x}_1^2 - 1,229\tilde{x}_2^2. \quad (1.23)$$

Линии равной условной вязкости для модели (1.21) показаны на рис. 1.3, г. Изолинии-параболы представляют собой проекции параболического цилиндра, имеющего каноническую форму (1.24), причем, в отличие от формы (1.23), значение  $Y = \ln v$ ,

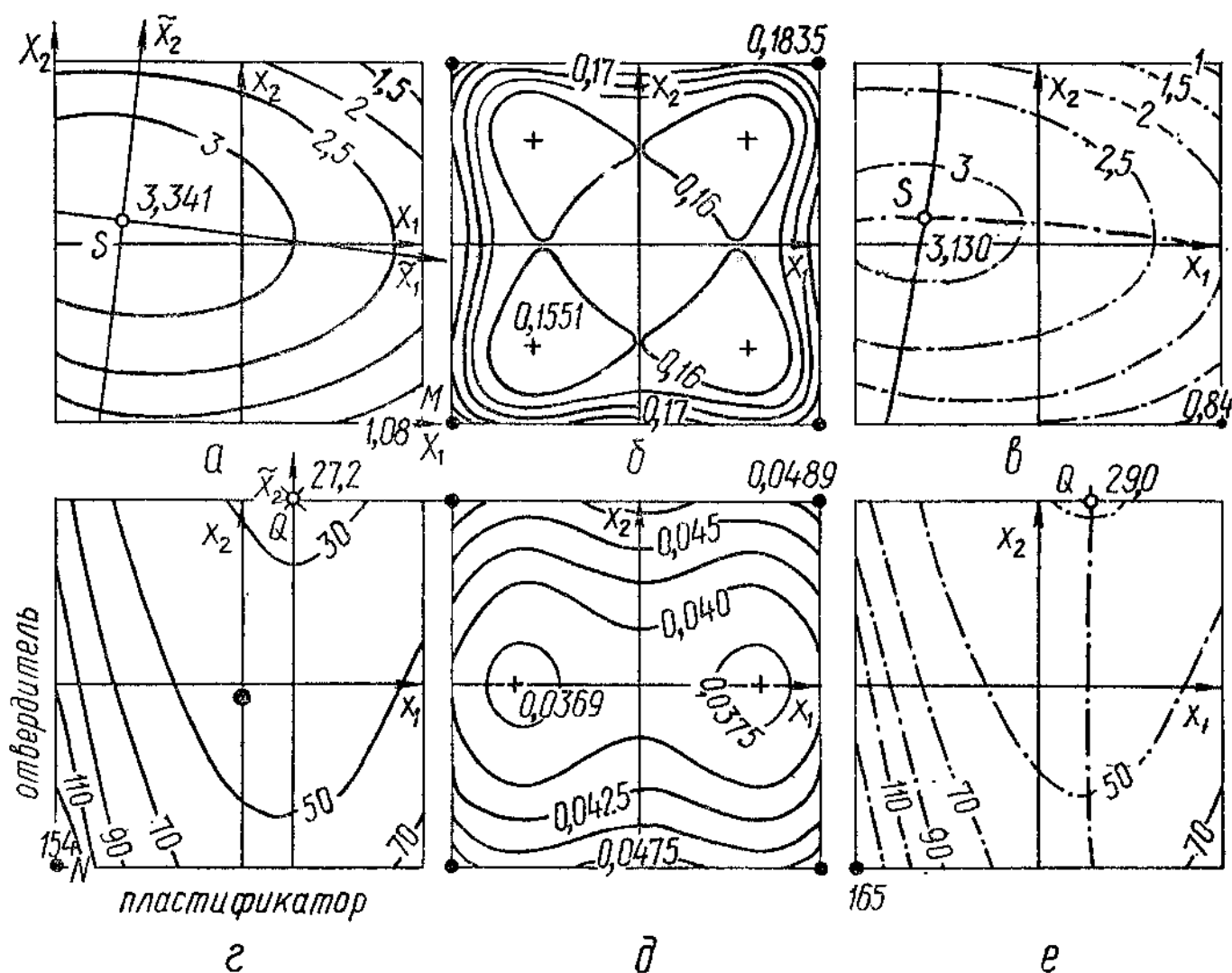


Рис. 1.3. Диаграммы влияния двух рецептурных факторов на предел прочности (а...в) композита и вязкость смеси (г...е) при анализе расчетных (средних) значений  $\hat{Y}$  (а, г), ошибок предсказания  $s\{\hat{Y}\}$  (б, д) и гарантированных уровней качества  $R^{\min}$  (в) и  $v^{\max}$  (е)

задающее изолинию, «скрыто» в новой координате  $\tilde{x}_2$  (1.25).

$$\tilde{x}_1^2 = 0,54x_2, \quad (1.24)$$

$$\tilde{x}_2 = x_2 + 2,86 (\ln v) - 10,434. \quad (1.25)$$

Ось симметрии парабол проходит параллельно оси  $x_2$  (так как  $b_{12} = 0$ ) через координату  $x_1 = 0,273$ , в которой условная вязкость достигает минимума  $v_{\min} = 27,2$  с при  $x_2 = +1$ . Максимальная вязкость  $v_{\max} = 154$  с на границе факторного пространства — при  $x_1 = x_2 = -1$ .

В ряде методических изданий рекомендуется использовать каноническую форму многофакторных поверхностей второго порядка для поиска оптимальных решений, однако этот подход менее информативен чем *диссоциативно-шаговый метод оптимизации ДШМ* [16, 19, 20, 72].

**Задача № 2. Оценка точности расчетов значений прочности  $R$  и вязкости  $v$ .** Для планов с блочно-диагональной ковариационной матрицей  $D$  (1.12) дисперсию предсказания отклика  $s^2 \{\hat{Y}\}^*$  рассчитывают [19, 72] по полиному четвертого порядка

$$s^2 \{\hat{Y}\} = s^2 \{b_0\} + (s^2 \{b_i\} + 2 \operatorname{cov} \{b_0 b_{ii}\}) \sum_{i=1}^k x_i^2 + \\ + (s^2 \{b_{ij}\} + 2 \operatorname{cov} \{b_{ii} b_{jj}\}) \sum_{i < j} x_i^2 x_j^2 + s^2 \{b_{ii}\} \sum_{i=1}^k x_i^4, \quad (1.26)$$

получаемому из общей формулы для оценки дисперсии функции случайных взаимосвязанных величин [16, 19, 20]. С учетом элементов матриц  $D_1$  и  $D_2$  (1.13, 1.14) полином (1.26) переходит в форму (1.27), содержащую ошибку эксперимента  $s_3$  в явном виде,

$$s^2 \{\hat{Y}\} = s_3^2 \left[ T_1 + (T_3 + T_2) \sum_{i=1}^k x_i^2 + (T_6 + T_5) \sum_{i < j} x_i^2 x_j^2 + \right. \\ \left. + T_{11} \sum_{i=1}^k x_i^4 \right]. \quad (1.27)$$

Функция в квадратных скобках при  $s_3^2$  — безразмерная мера точности предсказания модели  $d$  [16, 19, 51, 72].

\* Знак  $\wedge$ , отличающий расчетные значения, ставим только в тех случаях, когда это отличие не ясно из текста.

Для плана  $Ha_5$  функция (1.27) конкретизируется

$$s^2 \{\hat{Y}\} = s_9^2 \left( 138,05 - 5,04 \sum_{i=1}^5 x_i^2 - 119,32 \sum_{i<j} x_i^2 x_j^2 + \right. \\ \left. + 409,09 \sum_{i=1}^5 x_i^4 \right) 10^{-3}. \quad (1.28)$$

Из нее после подстановки  $x_3 = +1$ ,  $x_4 = -1$  и  $x_5 = 0$  получена функция для оценки точности расчетных значений прочности в сечении, описываемом моделью (1.11),

$$s^2 \{\hat{R}\} = s_9^2 [827 - 244 (x_1^2 + x_2^2) - 119x_1^2 x_2^2 + 401 (x_1^4 + x_2^4)] 10^{-3}. \quad (1.29)$$

Численные значения коэффициентов в выражении  $d = s^2 \{\hat{R}\} / s_9^2$  (полином в скобках — (1.29)) зависят *только* от свойств плана для заданного вида модели (через элементы ковариационной матрицы  $T_i$ ) и *положения* рассматриваемого сечения в факторном пространстве (через координаты  $x_i$ ;  $i = \overline{3, 5}$ ). С учетом  $s_9 = 0,18$  дисперсия предсказания определяется как

$$s^2 \{\hat{R}\} = [26,8 - 7,9 (x_1^2 + x_2^2) - 3,9x_1^2 x_2^2 + 13,3 (x_1^4 + x_2^4)] 10^{-3}, \quad (1.30)$$

по которой рассчитаны изолинии (см. рис. 1.3, б) ошибок предсказания  $s \{\hat{R}\}$ , имеющие четыре оси симметрии. *Минимальные значения*  $s \{\hat{R}\} = 0,1551$  лежат на диагональных осях симметрии в точках с координатами  $|x_1| = |x_2| = 0,590$ . Ошибка предсказания в зоне, близкой к границам факторного пространства, интенсивно возрастает по сравнению с центральным полем, где она постоянна  $s \{\hat{R}\} = 0,16 \pm 0,005$  МПа (соответствие модели критерию равномерности [16, 51]). Анализ ошибок предсказания дан в табл. 1.3.

Для *предсказанного значения логарифма условной вязкости*  $\ln v$  (1.21) дисперсия оценивается по функции

$$s^2 \{\hat{\ln v}\} = s_9^2 (0,428 - 0,347x_1^2 + 0,357x_1^4 + 0,225x_2^2) = \\ = (15,4 - 12,5x_1^2 + 12,9x_1^4 + 8,1x_2^2) 10^{-4}, \quad (1.31)$$

полученной из (1.27) при  $s_3 = 0,06$  и учете для плана  $B_3$  значений  $T\{b\}$  (1.22). Изолинии ошибок предсказания  $s\{\widehat{\ln v}\}$  (см. рис. 1.3,  $\delta$ ) радиально-несимметричны (так как все коэффициенты в модели (1.33) разные), но имеют две оси симметрии. По оси  $x_2$  изменение  $s\{\widehat{\ln v}\}$  существенно интенсивнее, чем по оси  $x_1$ . Ошибка предсказания  $v_{\min}$  ( $x_1 = 0,27$  и  $x_2 = +1$ ) составляет  $s\{\widehat{\ln v}\} = 0,0476$  или  $\delta\{v\} = 4,8\%$ .

**Задача № 3.** Диаграммы гарантированных уровней показателей качества  $R_{\min}$  и  $v_{\max}$ . Комплекс моделей (1.11) с (1.30) и (1.21) с (1.31) позволяет оценить по (1.10) *гарантированные*

**Т а б л и ц а 1.3.** Предсказанные значения прочности и их ошибки

R	Координаты		$\hat{R}$ , МПа	$s^2\{\hat{R}\} 10^4$	$s\{\hat{R}\}$	$\delta\{\hat{R}\}$ , %
	$x_1$	$x_2$				
$R_{\max}$	-0,662	0,127	3,34	257,5	0,160	4,8
$R_{\min}$	+1	-1	1,08	336,7	0,183	17,0

уровни качества материала, в частности, минимально возможную (с риском  $\alpha$ ) прочность  $R_{\min}$  (1.32) и максимально возможную условную вязкость смеси  $v_{\max}$  (1.33).

$$R^{\min}\{\alpha\} = \bar{R} - t_{\alpha} s\{R\}, \quad (1.32)$$

$$v^{\max}\{\alpha\} = \exp(\overline{\ln v} + t_{\alpha} s\{\ln v\}). \quad (1.33)$$

Критерий  $t_{\alpha}$  берут для заданного одностороннего риска  $\alpha$  [16] при числе степеней свободы  $f_3$  ошибки эксперимента  $s_3$ , учтенной при расчете  $s\{\hat{Y}\}$ . На рис. 1.3,  $\delta$  и  $\epsilon$  показаны изолинии  $R^{\min}$  и  $v^{\max}$ , рассчитанные численным методом при  $t_{\alpha}\{R\} = 1,296$  и  $t_{\alpha}\{v\} = 1,341$  для риска  $\alpha = 0,1$  (при проверке значимости оценок в моделях эти же уровни  $t$  соответствовали двухстороннему  $\alpha = 0,2$ , так как доверительный интервал в соответствии с нуль-гипотезой [16, 20] должен был «накрыть» истинное значение коэффициента регрессии  $\beta_i = 0$ ).

Изолинии *гарантированных* уровней качества — это *семейство* уже не эллипсов и не парабол (хотя внешнее сходство с рис. 1.3,  $\alpha$  и  $\epsilon$  при малом масштабе сохраняется), так как в (1.32) и

(1.33) первое слагаемое полином второго порядка (1.11) или (1.21), а второе — иррациональная функция *корень квадратный* из полинома четвертого порядка (1.30) или (1.31).

Сравнение равнозначных изолиний на рис. 1.3, а и в показывает, что введение по (1.32) нижнего гарантированного уровня для прочности приводит к уменьшению размеров *эллипсоподобных кривых* (в дальнейшем «гомоэллипсов» — от греч. *homos* — «сходство, подобие») и их приближению к точке максимума  $S$ . В то же время, введение верхнего гарантированного уровня для вязкости  $v_\alpha$  по (1.33) ведет к передвижению гомопарабол на рис. 1.3, в в сторону точки минимума  $Q$ . На обеих диаграммах  $R^{\min}$  и  $v^{\max}$  происходит некоторое смещение точек  $S$  или  $Q$ , а также искривление линий, соответствующих проходящим через них главным осям  $\tilde{x}_1$  и  $\tilde{x}_2$  на рис. 1.3, а и в. По мере уменьшения допустимого риска  $\alpha$  вышеизложенный эффект деформации гомоэллипсов и гомопарабол увеличится (например, при  $\alpha = 0,01$  изолиния  $R^{\min} = 3$  МПа «втянется» в точку  $S$  и на диаграмме исчезнет).

С инженерной точки зрения диаграмма типа  $R_\alpha$  более информативна (см. гл. 5), чем диаграмма для среднего  $\bar{R}$ , так как последнее соответствует риску  $\alpha = 0,5$ , достаточно высокому для большинства материаловедческих и технологических объектов.

**Задача № 4.** Анализ индивидуального влияния факторов на прочность  $R$ . Экспериментально-статистические модели, как правило, — многофакторные полиномы, поэтому *индивидуальное влияние* на критерий качества материала каждого из факторов  $x_i$  можно оценить [16, 19, 72] *только после размещения остальных факторов* на некоторых функционально связанных уровнях  $x_j = f_j(x_i)$ . Частный (но наиболее распространенный) случай — это фиксация всех факторов, кроме анализируемого, на *стабильных* уровнях  $x_j = f_j(x_i) = \text{const}$ . Тривиальное решение — это выбор для стабилизации тех же уровней факторов, на которых ставился эксперимент, т. е.  $-1, 0$  и  $+1$ . Для модели прочности композита (1.11) в этом случае будут получены однофакторные модели (рис. 1.4, а, б). Для целей интерпретации результатов такие решения *слабые*, потому что наиболее важные результирующие точки, в которых находится максимальное и минимальное значения критерия качества композита в абсолютном большинстве случаев не лежат на границах ( $|x_i| = 1$ ) и осях ( $x_i = 0$ ) факторного пространства.

Значительно более информативен иной анализ индивидуального влияния факторов [19]:

а) при *стабилизации* всех факторов, кроме анализируемого



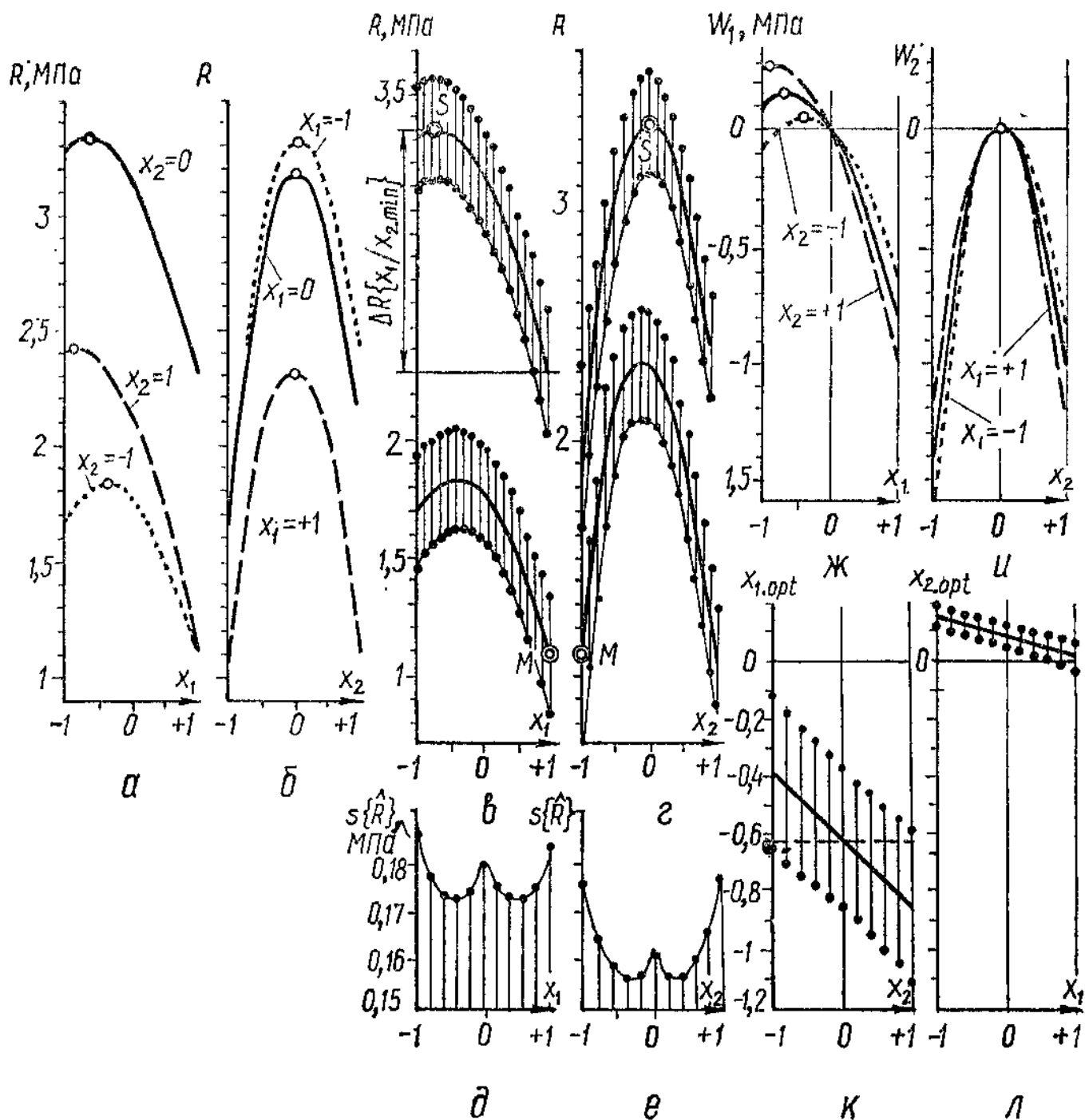


Рис. 1.4. Однофакторные зависимости предела прочности  $R$  (а ... г) от количества пластификатора  $x_1$  (а, в, ж) и отвердителя  $x_2$  (б, г, и) при различных уровнях стабилизации второго фактора (а, б — на экспериментальных уровнях; в, г — в экстремальных точках  $S$  и  $M$ ; ж, и — при квазиоднофакторных моделях), а также изменение ошибки предсказания  $s\{\hat{Y}\}$  (д, е) и оптимальной концентрации компонентов (к — пластификатор, л — отвердитель) в этих условиях (доверительные интервалы на в, г, к, л — заштрихованы).

$x_i$ , на *уровнях*, соответствующих двум *экстремальным* точкам модели  $Y_{\max}$  (координаты  $x_{i.\max}$ ;  $i = \overline{1, k}$ ) и  $Y_{\min}$  (координаты  $x_{i.\min}$ ,  $i = \overline{1, k}$ ), что позволяет вести сравнительный анализ в наиболее *контрастных* условиях;

б) на основе *квазиоднофакторных* моделей, описывающих абсолютный прирост критериев качества под влиянием анализируемого фактора при любом сочетании уровней остальных  $x_j$ .

На рис. 1.4, в, г показаны функции (1.34) и (1.35), проведенные через точки, соответствующие  $R_{\max}$  и  $R_{\min}$  (см. табл. 1.3) и «перепады»  $\Delta R \{x_i/x_{j.\text{ext}}\}$ , возникающие при изменении  $i$ -го фактора по функции, проходящей через экстремальную точку  $x_{j.\text{ext}}$ .

$$\left. \begin{aligned} R \{x_{2.\max}\} &= 3,174 - 0,503x_1 - 0,38x_1^2; \\ \Delta R \{x_1/x_{2.\max}\} &= 1,04; \\ R \{x_{2.\min}\} &= 1,76 - 0,30x_1 - 0,38x_1^2; \\ \Delta R \{x_1/x_{2.\min}\} &= 0,74; \end{aligned} \right\} \quad (1.34)$$

$$\left. \begin{aligned} R \{x_{1.\max}\} &= 3,321 + 0,309x_2 - 1,22x_2^2; \\ \Delta R \{x_2/x_{1.\max}\} &= 1,54; \\ R \{x_{1.\min}\} &= 2,31 + 0,01x_2 - 1,22x_2^2; \\ \Delta R \{x_2/x_{1.\min}\} &= 1,23. \end{aligned} \right\} \quad (1.35)$$

Из анализа следует: абсолютное влияние на  $R$  обоих факторов в зоне максимума выше, так, например,  $\Delta R \{x_1/x_{2.\max}\} = 1,04 > > \Delta R \{x_1/x_{2.\min}\} = 0,74$ ; влияние отвердителя  $x_2$  сильнее, чем пластификатора  $x_1$ ; абсолютный перепад  $\Delta R_{\min}^{\max}$  изменяется с ростом  $x_j$  по линейному закону (1.36), причем для  $x_2$  он уменьшается, а для  $x_1$  — увеличивается:

$$\left. \begin{aligned} \Delta R_{\min}^{\max} \{x_2\} &= R \{x_{2.\max}\} - R \{x_{2.\min}\} = 1,414 - 0,203x_1, \\ \Delta R_{\min}^{\max} \{x_1\} &= R \{x_{1.\max}\} - R \{x_{1.\min}\} = 1,011 + 0,308x_2. \end{aligned} \right\} \quad (1.36)$$

*Квазиоднофакторная модель по  $i$ -му фактору* получается из многофакторной модели при вычленении всех эффектов, зависящих от  $x_i$ ,

$$W_i = Y - b_0 \{x_j, x_k\} = \left( b_i + b_{ij} \sum_j x_j \right) x_i + b_{ii} x_i^2. \quad (1.37)$$

У модели (1.37) нет свободного члена, поэтому она *отражается семейством кривых*, проходящих через начало координат ( $W_i = 0$  и  $x_i = 0$ ). При этом *граничные кривые* семейства соответствуют такому набору  $x_j$ , при котором *слагаемое*  $b_{ij} \sum_j x_j$  достигает *максимума* по абсолютному значению. Из модели прочности композита (1.11) следуют две квазиоднофакторные модели:

$$\left. \begin{aligned} W_1 &= (-0,48 - 0,18x_2) x_1 - 0,38x_1^2; \\ W_2 &= (+0,19 - 0,18x_1) x_2 - 1,22x_2^2, \end{aligned} \right\} \quad (1.38)$$

для которых семейства парабол построены на рис. 1.4, *ж, и*. При двухфакторной модели (1.11) отображенное на рис. 1.4, *ж* семейство кривых представляет собой собранные в узел (координаты  $W_i = 0$  и  $x_i = 0$ ) и ранжированные по  $x_j$  однофакторные кривые, показанные на рис. 1.4, *а*.

Квазиоднофакторные модели удобны для анализа индивидуального влияния фактора на критерий качества системы  $Y$ . Так, из рис. 1.4, *ж* следует: влияние количества пластификатора  $x_1$  на абсолютный прирост предела прочности композита снижается по мере уменьшения концентрации отвердителя  $x_2$ ; прочность композита может возрастать при увеличении дозировки пластификатора до некоторого предела  $x_{1,opt}$ , выше которого механические характеристики могут резко снижаться; числовое значение предельной концентрации пластификатора  $x_{1,opt}$  (только относительно максимизации прочности  $R$ ) повышается по мере снижения дозировки отвердителя  $x_2$ .

*Окончательные научно-технические выводы и рекомендации* необходимо делать с *учетом ошибки предсказания*  $s\{\hat{R}\}$  (1.30). На рис. 1.4, *в, г* показаны *доверительные границы* однофакторных моделей, включающих  $R_{max}$  и  $R_{min}$ . Взяв двусторонний риск  $\alpha = 0,2$  не «накрыть» отрезком между обеими границами истинные значения предела прочности. Среднеквадратические ошибки  $s\{\hat{R}\}$  изменяются в зависимости от координат точки по сложным функциям: на рис. 1.4, *д* показана  $s\{\hat{R}\} = \varphi(x_1)$  для параболы  $R = f(x_1)$ , проходящей через координату  $x_{2,min} = -1$ , а на рис. 1.4, *е* — для параболы  $R = f_2(x_2)$ , содержа-

щей  $R_{\max}$ . Нагляден интенсивный *рост ошибки* предсказания по мере *приближения к границам* факторного пространства, что отмечалось при анализе модели (1.30) и рис. 1.3, б. При построении доверительных границ алгебраическое суммирование таких функций с параболической дает результаты, отличные от кривых второго порядка. С помощью введенного в задаче № 2 термина их можно назвать гомопараболами.

**Задача № 5.** Анализ переменной оптимальной (по прочности материала) концентрации компонентов. Числовое значение предельной концентрации пластификатора  $x_{1.\text{opt}}$  (как отмечено при анализе кривых на рис. 1.4, *ж*) увеличивается по мере снижения дозировки отвердителя  $x_2$ . В общем виде для моделей второго порядка закономерности изменения переменного оптимальной уровня фактора  $x_{i.\text{ext}}$  описывают (при условии  $Y \rightarrow \rightarrow \max$ ,  $b_{ii} < 0$  [16, 19, 72]) плоскостью

$$\hat{x}_{i.\text{ext}} = -0,5 \left( b_i + \sum_j b_{ij}x_j \right) / b_{ii} \quad (1.39)$$

из решения дифференциального уравнения  $\partial W_i / \partial x_i = 0$ , полученного из квазиоднофакторной модели (1.37). Соответствующие (1.38) *оптимальные переменные концентрации* пластификатора  $x_{1.\text{opt}}$  и отвердителя  $x_{2.\text{opt}}$  описывают *прямыми*:

$$x_{1.\text{opt}} = -0,632 - 0,237x_2; \quad (1.40)$$

$$x_{2.\text{opt}} = 0,078 - 0,074x_1, \quad (1.41)$$

показанными на рис. 1.4, *к, л*. Из (1.40), (1.41) следует, что для сохранения оптимальной дозировки любого из двух компонентов при увеличении одной из них другая должна уменьшаться.

При подстановке, в частности, (1.41) в модель (1.11) можно получить *закономерности изменения прочности* под влиянием индивидуального фактора  $x_1$ , но при условии, что *другой фактор*  $x_2$  будет поддерживаться на *переменном оптимальном уровне* (например, с помощью автоматического регулятора с прямой связью между  $x_2$  и  $x_1$ ).

$$R \{x_{2.\text{opt}}\} = 3,177 - 0,494x_1 - 0,373x_1^2. \quad (1.42)$$

Вместо прямой подстановки те же модели можно получить, используя общие формулы [16, 19, 20, 72] *прироста эффектов* (1.43) за счет перевода  $x_i$  на оптимальный переменный уровень  $x_{i.\text{ext}}$  (1.39).

$$\left. \begin{aligned} \Delta b_0 &= -0,25b_i^2/b_{ii}; & \Delta b_j &= -0,5b_ib_{ij}/b_{ii}, \\ \Delta b_{jj} &= -0,25b_{ij}^2/b_{ii}; & \Delta b_{es} &= -0,5b_{ie}b_{is}/b_{ii}. \end{aligned} \right\} \quad (1.43)$$

Так, для  $x_{1.opt}$  расчет приростов  $\Delta b_0 = -0,25 \times (-0,48)^2 / (-0,38) = 0,152$ ;  $\Delta b_2 = -0,5 (-0,48) (-0,18) / (-0,38) = 0,114$ ;  $\Delta b_{22} = -0,25 (-0,18)^2 / (-0,38) = 0,021$  позволяет перевести модель (1.11) в параболу

$$R \{x_{1.opt}\} = 3,322 + 0,304x_2 - 1,199x_2^2. \quad (1.44)$$

Линейная функция (1.39) дает результат [19] с ошибкой  $s \{x_{i.ext}\}$ , зависящей от ошибок оценок коэффициентов  $b_i$ ,  $b_{ii}$  и  $b_{ij}$ , которые, в свою очередь, определяются ковариационной матрицей плана  $D$  и ошибкой эксперимента  $s_3$ . Для планов с блочно-диагональной структурой матрицы (1.12) дисперсия  $s^2 \{x_{i.ext}\}$  ( $i = 1$  без потери общности) описывается поверхностью ( $k - 1$ )-мерного параболоида

$$s^2 \{x_{1.ext}\} = s_3^2 (2b_{11})^{-2} \left\{ [T_3 + T_{11} (b_1/b_{11})^2] + \left[ T_6 \sum_{j=2}^k x_j^2 + T_{11} \sum_{j=2}^k x_j^2 (b_{1j}/b_{11})^2 \right] \right\}, \quad (1.45)$$

которая для моделей (1.40) и (1.41), с учетом  $T \{b\}$ , для плана  $Ha_5$  (1.18) конкретизируется как

$$s^2 \{x_{1.opt}\} = (397,3 + 86,6x_2^2) 10^{-4}; \quad (1.46)$$

$$s^2 \{x_{2.opt}\} = (3,6 + 3,9x_1^2) 10^{-4}. \quad (1.47)$$

Доверительные границы ( $t = 1,296$ ) показаны на рис. 1.4, *к, л*. Обращает внимание сравнительно *широкий доверительный интервал* для оптимальной дозировки пластификатора  $x_{1.opt}$ . Это объясняется тем, что парабола (1.44) более «островершинна», чем (1.42), так как  $|b_{22}| > |b_{11}|$ . Следовательно, равные вариации  $\Delta Y$  будут вызываться меньшими колебаниями фактора  $\Delta x_2 < \Delta x_1$ . Анализ рис. 1.4, *к, л* позволяет принять более простую, чем (1.40) гипотезу  $x_{1.opt} = const$ , поскольку проведенная через  $x_1 = -0,632$  параллельная оси  $x_2$  прямая полностью укладывается в доверительный интервал в пределах  $|x_2| \leq 1$ . Таким образом, с риском  $\alpha = 0,2$  на основе статистических критериев отклоняется гипотеза о влиянии расхода отвердителя на оптимальную дозировку пластификатора, но может быть сохранена гипотеза (1.41) о линейном снижении оптимальной добавки отвердителя с ростом дозировки пластификатора.

С инженерной точки зрения целесообразно оценить потери  $L$  (от английского *lost*) критерия качества при замене линейных регулировочных функций (1.40), (1.41) на константы, равные свободным членам в этих функциях, т. е. средним  $\bar{x}_{i,opt}$  в диапазоне  $|x_j| \leq 1$ , что равносильно назначению в (1.39) всех  $b_{ij} = 0$ .

Последнее приводит к тому, что разность (1.48) в двухфакторной модели типа (1.11) определяется лишь приростом  $\Delta b_{ii}$  (1.43)

$$L_R \{x_i\} = R \{\bar{x}_{i,opt}\} - R \{x_{i,opt}\} = \\ = 0,25 (b_{ij}^2 / b_{ii}) x_j^2 + 0,5 \sum_{e \neq s} (b_{ie} b_{is} / b_{ii}) x_e x_s. \quad (1.48)$$

Расчет по (1.48)  $L_R \{x_1\} = 0,021x_2^2$  и  $L_R \{x_2\} = 0,007x_1^2$  показал, что *потери* при отказе от оптимальных переменных уровней *невелики*, следовательно, могут быть приняты  $x_{i,opt} = -0,5b_i/b_{ii}$  — оптимальные *постоянные* дозировки обоих компонентов.

**Задача № 6.** Анализ индивидуального влияния факторов на реологический показатель смеси  $\nu$ . Задача решается по методикам, рассмотренным при анализе модели прочности  $R$  (см. задачу № 4). Однако в силу моделирования вместо измеряемой на вискозиметре физической величины  $\nu$  ее логарифма  $\ln \nu$ , а также из-за отсутствия в модели (1.21) эффекта взаимодействия целесообразно отметить ряд *особенностей* в принятии инженерных решений. Однофакторные модели (рис. 1.5, а) проведены через точки

$$\left. \begin{aligned} N: (\ln \nu)_{\max} = 5,040; \quad \nu_{\max} = 154,5 \text{ с}; \quad x_{1,\max} = x_{2,\max} = -1; \\ Q: (\ln \nu)_{\min} = 3,302; \quad \nu_{\min} = 27,2 \text{ с}; \quad x_{1,\min} = 0,273; \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad x_{2,\min} = +1. \end{aligned} \right\} \quad (1.49)$$

Поскольку в (1.21) принята гипотеза  $\beta_{12} = 0$ , то значение  $x_{1,\min} = 0,273$  постоянно и не зависит от уровня  $x_2$ ; кривые из зоны минимума в зону максимума по всей области переносятся параллельно, при этом для  $f(x_2)$  прирост составляет  $2|b_2| = 0,7$ , а для  $f(x_1)$  — это  $(Y_{\max} - Y_{\min} - 2|b_2|) = 1,038$ .

Для модели (1.21) могут быть построены квазиоднофакторные модели по типу (1.37), однако их содержательная сторона раскрывается только *после* перехода к экспоненциальным функциям:

$$\exp W_1 = \exp(-0,35x_1 - 0,64x_1^2) = \nu/\nu_0 \{x_1\}; \quad (1.50)$$

$$\exp W_2 = \exp(-0,35x_2) = \nu/\nu_0 \{x_2\}. \quad (1.51)$$

Новые модели (1.50), (1.51) показывают *относительное уменьшение* условной вязкости  $\nu$  при увеличении одного из факторов, если уровень другого зафиксирован (в качестве единицы относительной шкалы принимается, как видно, именно то значение вязкости  $\nu_0 \{x_j\} = \exp(b_0 \{x_j\})$ , которое соответствует свободному члену полинома после операции фиксации  $x_j$ ). В частности, из (1.51) следует, что увеличение содержания отвердителя на  $\Delta x_2 = 1$  приводит к уменьшению вязкости со 100 % до 70,5.

При переходе к экспоненциальным функциям однофакторные зависимости (см. рис. 1.5, б) *теряют форму параболы* (вершина становится более пологой, а ветви по мере удаления от нее возрастают интенсивней) и *прямой* (переходит в вогнутую кривую).

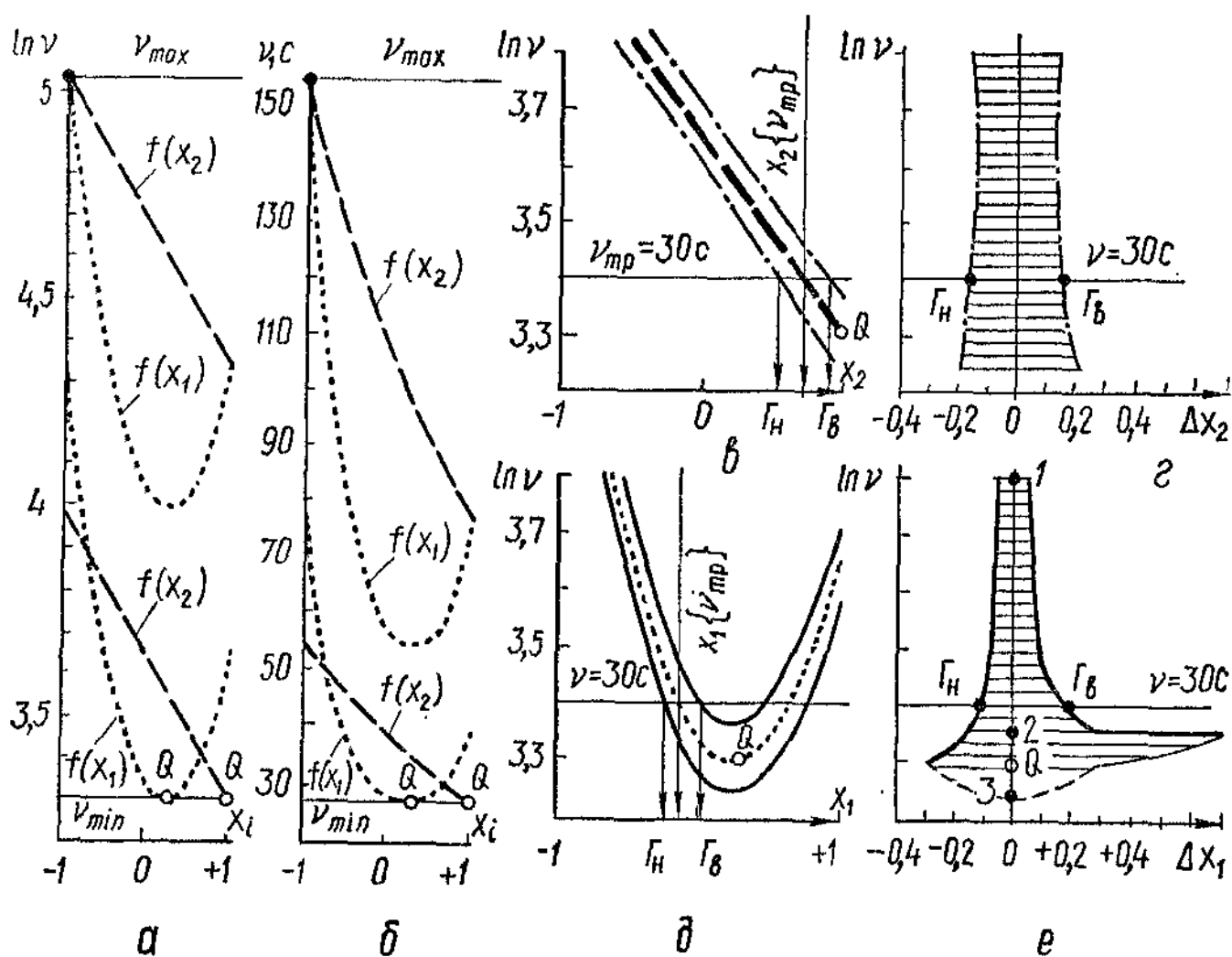


Рис. 1.5. Зависимость показателей условной вязкости  $\ln \nu$  (а) и  $\nu$  (б) от одного из факторов (при условии стабилизации второго на уровне координат экстремальных точек  $N$  или  $Q$ ), а также оценка доверительных границ  $\Gamma_H$  и  $\Gamma_B$  (в, д) и образуемых ими диапазонов  $\Delta x_i$  (г, е) для уровней отвердителя (в, г) и пластификатора (д, е), обеспечивающих требуемое значение  $\nu_{tr} = \text{const}$

Естественно, что прирост при переходе от зоны минимума в зону максимума в данном случае не постоянен. Для  $f(x_2)$  он составляет при  $x_1 = -1$   $\Delta v = 154,5 - 76,7 = 77,8$  с, а при  $x_1 = +1$  — только  $\Delta v = 54,7 - 27,2 = 27,5$  с. Построение квазиоднофакторных моделей после экспоненцирования (1.21) невозможно.

Для однофакторных зависимостей, показанных на рис. 1.5, а, дисперсию предсказания  $s^2 \{\hat{\ln v}\}$  рассчитывают по формуле (1.31). Доверительные границы ( $t = 1,34$ ) для истинных значений  $\mu \{\ln v\}$  при использовании функций  $f(x_i)$ , проходящих через точку  $Q(v_{\min})$ , показаны на рис. 1.5, в (две гиперболы), д (две гомопараболы). Для натуральных значений  $v$  доверительные границы, в общем случае, рассчитывают численным методом при экспоненцировании границ для  $\ln v$ . При исходном равенстве нижнего и верхнего доверительных интервалов для  $\mu \{\ln v\}$  верхний интервал для истинной средней вязкости  $\mu \{v\}$  всегда по абсолютному значению будет больше, чем нижний. Так, в точке  $Q(x_2 = +1, \ln v_{\min} = 3,302, v_{\min} = 27,17$  с) истинное значение  $\mu \{\ln v_{\min}\}$  (рис. 1.5, в) заключено в границах, оцениваемых с учетом (1.31), как

$$(3,302 - 0,064) = 3,238 \leq \mu \{\ln v_{\min}\} \leq (3,302 + 0,064) = 3,366, \quad (1.52)$$

а истинное значение вязкости  $\mu \{v_{\min}\}$  находится в интервале

$$\left. \begin{aligned} \exp 3,238 = 25,48 \leq \mu \{v_{\min}\} \leq \exp 3,366 = 28,96; \\ 27,17 - 1,69 \leq \mu \{v_{\min}\} \leq 27,17 + 1,79. \end{aligned} \right\} \quad (1.53)$$

Полудиапазоны доверительного интервала  $t_{\alpha} s \{\ln v\}$  информативны в инженерных задачах. Так, значение  $\exp(t_{\alpha} s \{\ln v\})$  показывает относительное изменение вязкости в пределах доверительных границ. Из (1.52) получаются результаты  $\exp(+0,064) = 1,066$  или прирост на 6,6 % по сравнению со средним расчетным в данной точке и  $\exp(-0,064) = 0,938$  или снижение на 6,2 %.

**Задача № 7.** Оценка доверительных границ для значения фактора, соответствующего заданному уровню критерия качества смеси. Определение с помощью экспериментально-статистических моделей при любых требуемых уровнях факторов  $x_{i,тр} = \text{const}$  значения критерия качества  $\hat{Y} + t_{\alpha} s \{\hat{Y}\}$  по сути лишь прямая замена расчетом еще одного эксперимента, который нужно было бы реализовать в условиях  $x_{i,тр}$ . При этом диапа-



зон возможной ошибки такого расчета  $s\{\hat{Y}\}$  будет возрастать, если  $x_{i,тр}$  удаляется от границ предшествующего эксперимента:  $|x_i| = 1$ .

В инженерной практике, однако, значительно важнее (сложнее, дороже) решение *обратных* задач, когда с помощью модели по *требуемому* значению критерия качества  $Y_{тр} = const$  нужно найти *обеспечивающий* такой *результат* набор *уровней факторов*  $x_1\{Y_{тр}\}, x_2\{Y_{тр}\}, \dots, x_i\{Y_{тр}\}, \dots, x_k\{Y_{тр}\}$ .

Во-первых, *только* при  $k = 1$  (однофакторная модель) задача имеет *единственное* решение  $x_1\{Y_{тр}\}$ , а в остальных случаях ( $k \geq 2$ ) необходимо добавить или ( $k - 1$ ) *дополнительное* уравнение (за счет введения новых  $Y_{j,тр}$  или учета взаимосвязей между факторами), или выбрать для ( $k - 1$ )-фактора *стабилизированные* уровни (за счет априорной информации, прикидочных опытов или интуиции инженера) или комбинацию (за счет и уравнений, и констант, и опытов) *ликвидировать неопределенность* обратной задачи ( $k - 1$ ) раз.

Во-вторых, даже при  $k = 1$  по ЭСМ для *неслучайно* изменяемого (в экспериментах) фактора  $x_1$  *единственное* решение указать детерминированно *нельзя*, так как *выход*  $Y$  является *случайной* величиной, и модель определяет  $Y_{тр} = \hat{Y}$  с ошибкой  $s\{\hat{Y}\}$ . Следовательно, *результат* будет (с риском  $\alpha$ ) в границах  $\Gamma_H \leq x_1\{Y_{тр}\} \leq \Gamma_B$ , причем

$$\Gamma_H = x_1\{Y_{тр}\} - (\Delta x_1\{Y_{тр}\})_H; \quad \Gamma_B = x_1\{Y_{тр}\} + (\Delta x_1\{Y_{тр}\})_B, \quad (1.54)$$

где доверительные полуинтервалы образуются как

$$(\Delta x_1\{Y_{тр}\})_H = t_\alpha \omega_{s,H}\{x_1\}; \quad (\Delta x_1\{Y_{тр}\})_B = t_\alpha \omega_{s,B}\{x_1\}. \quad (1.55)$$

В общем случае  $\Gamma_H$  и  $\Gamma_B$  могут находиться на *разном* расстоянии от  $x_1\{Y_{тр}\}$  в силу неравенства связанных с ошибкой  $s\{\hat{Y}\}$  отклонений  $\omega_s$  в сторону нижней и верхней границ.

Правил аналитической оценки отклонений  $\omega_s$ , за исключением случая однофакторной линейной регрессии [2, 13, 19, 21, 29, 85], авторами в литературе не найдено, поэтому в Одесском ИСИ разработаны *численные методы решения*, основанные на некоторых допущениях, не нарушающих логики других приближенных методов регрессионного анализа. На рис. 1.5, а для  $\ln v$ , рассчитанного по линейной модели

$$\ln v = 3,652 - 0,35x_2, \quad (1.56)$$

которая проходит через точку минимума  $Q$ , показаны доверительные, рассчитанные с учетом (1.31) ( $\alpha = 0,2$ ), границы

$$\Gamma (\ln v) = \ln v \pm t_{\alpha} s \{ \ln v \} = (3,652 - 0,35x_2) \pm \pm 1,34 \cdot 10^{-2} \sqrt{14,56 + 8,1x_2^2}. \quad (1.57)$$

Для заданного значения вязкости, в частности  $v_{\text{тр}} = 30$  с ( $\ln v_{\text{тр}} = 3,401$ ), можно найти из (1.56) расход пластификатора

$$x_2 \{ v_{\text{тр}} \} = (3,652 - \ln v_{\text{тр}}) / 0,35 = 0,717. \quad (1.58)$$

Для *линейной модели*, полученной по данным одифакторного эксперимента, при оценке доверительных границ  $\Gamma$  фактора  $x$  Брауили [13] и Хальд [85] вводят вспомогательную переменную  $Z$  (1.59), которая имеет математическое ожидание  $\mu \{ Z \} = 0$  и дисперсию  $\sigma^2 \{ Z \}$  по (1.60), и показывают, что отношение (1.61) подчиняется  $t$ -распределению:

$$Z = y'_u - [b_0 + b (\Gamma - \bar{x})]; \quad (1.59)$$

$$\sigma^2 \{ Z \} = \sigma^2 \{ y' \} + \sigma^2 \{ b_0 \} + \sigma^2 \{ b \} (\Gamma - \bar{x})^2; \quad (1.60)$$

$$Z/s \{ Z \} = t_{\alpha}. \quad (1.61)$$

Поскольку в (1.54) требуемый уровень критерия качества задается детерминированно, то случайное значение выхода  $y'_u$  в  $u$ -м опыте заменяется на  $Y_{\text{тр}}$  с  $\sigma^2 \{ Y_{\text{тр}} \} = 0$ . Для нормализованных факторов  $\bar{x} = 0$ . Поэтому для линейной модели (1.56) значения (1.59) ... (1.61) конкретизируются с учетом того, что дисперсия предсказания оценивается по многофакторной модели, и расчетное значение выхода на границе равно  $\hat{Y}_{\Gamma}$ , как

$$Z = Y_{\text{тр}} - (b_0 + b_2 \Gamma) = Y_{\text{тр}} - Y_{\Gamma}; \quad (1.62)$$

$$\sigma^2 \{ Z \} = \sigma^2 \{ b_0 \} + \sigma^2 \{ b_2 \} \Gamma^2 = \sigma^2 \{ Y_{\Gamma} \} = s_9^2 (a_0 + a_{22} \Gamma^2); \quad (1.63)$$

$$t_{\alpha} = Z/s \{ Z \} = [Y_{\text{тр}} - (b_0 + b_2 \Gamma)] / \sqrt{s_9^2 (a_0 + a_{22} \Gamma^2)} = = (-0,251 + 0,35\Gamma) / (10^{-2} \sqrt{14,56 + 8,1\Gamma^2}). \quad (1.64)$$

Из (1.64) в общем случае будет получено выражение для границ  $\Gamma$  (1.65), которое по структуре аналогично формулам для одифакторного эксперимента [13, 19, 85], поскольку  $a_0$

и  $a_{22}$  связаны с элементами ковариационной матрицы плана.

$$\Gamma = \Delta_{\text{тр}}/B \pm t_{\alpha} (s_{\text{э}}/B) \sqrt{a_0 B/b_2 + a_{22} \Delta_{\text{тр}}^2/b_2^2}, \quad (1.65)$$

где

$$\Delta_{\text{тр}} = Y_{\text{тр}} - b_0; \quad B = b_2 - t_{\alpha}^2 s_{\text{э}}^2 (a_{22}/b_2). \quad (1.66)$$

Вероятностный показатель  $t_{\alpha}$  учитывается в (1.65) не только в доверительном интервале, но и в  $B$  (1.66), трижды входящей в слагаемые (1.65).

В частном случае результат (1.67) совпадает с определением  $x_2$  непосредственно из уравнения (1.57) при  $\ln v_{\text{тр}} = 3,401$ .

$$\left. \begin{aligned} \Gamma &= 0,726 \pm 0,167; \\ 0,559 &\leq x_2 \{ \ln v_{\text{тр}} = 3,401 \} \leq 0,893; \\ 0,717 - 0,158 &\leq x_2 \{ \ln v_{\text{тр}} = 3,401 \} \leq 0,717 + 0,176. \end{aligned} \right\} \quad (1.67)$$

Результат (1.67) иллюстрирует факт возможного *неравенства* при  $\alpha = \text{const}$  *доверительных полуинтервалов* ( $|0,158| < < |0,176|$ ). Зависимость  $\Delta x \{ Y_{\text{тр}} \}$  от заданного значения  $\ln v_{\text{тр}}$  показана на рис. 1.5, *г* (для удобства сравнительного анализа с рис. 1.5, *в* аргумент отложен на вертикальной оси).

Для параболической модели (1.68), также проходящей через точку  $Q (v_{\text{min}})$ , можно рассчитать (1.69) два значения  $x_1 \{ v_{\text{тр}} = 30 \text{ с} \}$ . Из них инженерный интерес, как правило, представляет то, которое соответствует *меньшему расходу ресурса* ( $x_1 = -0,12$ ),

$$\ln v = 3,35 - 0,35x_1 + 0,64x_1^2; \quad (1.68)$$

$$\left. \begin{aligned} x_1 \{ \ln v_{\text{тр}} = 3,401 \} &= 0,273 \pm 0,393; \\ x_1^* &= -0,120; \quad x_1 = 0,666. \end{aligned} \right\} \quad (1.69)$$

Высказать достаточно сильную гипотезу о законах *распределения интервалов*  $\Delta x_1 \{ Y_{\text{тр}} \}$  для *параболической модели* (1.68) аналогично гипотезе для *линейной* (1.56) ... (1.61) *затруднительно*, поэтому далее принято определение границ  $\Gamma$  фактора  $x_1$  непосредственно из уравнения (1.70), полученного с учетом (1.31) при  $v = 30 \text{ с}$ , — как корней уравнения *четвертой степени* (1.71).

$$\Gamma (\ln v) = (3,35 - 0,35x_1 + 0,64x_1^2) \pm \pm 1,34 \cdot 10^{-2} \sqrt{23,5 - 12,5x_1^2 + 12,9x_1^4}; \quad (1.70)$$

$$9,06\Gamma - 198,52\Gamma^2 + 2491,27\Gamma^3 - 2264,87\Gamma^4 = 0. \quad (1.71)$$

Для меньшего расхода ресурса  $x_1^* = -0,120$  нужно учесть два корня ( $\Gamma_1 = -0,231$  и  $\Gamma_2 = +0,043$ ). Следовательно, с двусторонним риском  $\alpha = 0,2$  расход отвердителя находится в интервале

$$\left. \begin{aligned} -0,231 \leq x_1 \{ \ln v_{\text{тр}} \} \leq 0,043; \\ -0,120 - 0,111 \leq x_1 \{ \ln v_{\text{тр}} \} \leq -0,120 + 0,163. \end{aligned} \right\} (1.72)$$

Для параболической модели (1.68) неравенство верхнего и нижнего доверительных полуинтервалов ( $|0,111| < |0,163|$ ) проявляется в большей степени, чем у линейной модели (1.67), особенно по мере приближения к экстремуму в точке  $x_1 = 0,273$ . На рис. 1.5, е показаны построенные численным методом зависимости  $\Delta x_1 \{ v_{\text{тр}} \}$  от заданного значения  $v_{\text{тр}}$ . Функции  $\Delta x_1 = f(v_{\text{тр}})$  оказываются кусочными:

а) на отрезке от точки 1 ( $v \rightarrow v_{\text{max}}$ ) до точки 2 (соответствует минимуму верхней граничной кривой) изменение идет по гладким функциям, определяемым в неявном виде уравнением (1.70); по мере приближения к  $v_{\text{min}}$  оба полуинтервала возрастают;

б) в точке 2 происходит разрыв функции, так как возможный диапазон  $(\Delta x_1 \{ Y_{\text{тр}} \})_в$  скачкообразно включает сразу весь «правый доверительный коридор», связанный со вторым корнем уравнения (1.69); при этом функция  $(\Delta x_1 \{ Y_{\text{тр}} \})_н$  сохраняет единственное значение;

в) на отрезке между точками 2 и Q значение  $(\Delta x_1 \{ Y_{\text{тр}} \})_н$  продолжает возрастать по закономерностям интервала «а», а верхний полуинтервал начинает уменьшаться, поскольку сокращается общее расстояние между ветвями нижней граничной гомопараболы с минимумом в точке 3;

г) на отрезке между точками Q и 3 можно найти только суммарный доверительный интервал, который уменьшается по параболическому закону (условно отображен с симметричными полуинтервалами).

Этот основанный на численных методах и реализуемый на ЭВМ алгоритм определения доверительных границ для значения фактора  $x_1$ , соответствующего заданному уровню критерия качества  $Y_{\text{тр}}$ , требует дальнейшего совершенствования стати-

стико-теоретического обоснования, однако его применение позволит *повысить надежность рецептурно-технологических решений* по моделям всех классов.

**Задача № 8. Определение координат максимума и минимума критериев качества и соответствующих доверительных интервалов.** При решении предыдущих задач значения максимума и минимума обоих критериев качества  $R$  и  $v$  уже определены, также как и их координаты, в частности при анализе изолиний на рис. 1.3, *а, г*. Поиск  $Y_{\max}$  и  $Y_{\min}$  по математическим моделям составляет одну из основных задач оптимизации, общие методы решения которых рассмотрены в гл.2. Для частного случая многофакторных ЭСМ в виде *полиномов второй степени* разработаны [16, 19, 20] специальный аналитический метод оптимизации, названный *диссоциативно-шаговым (ДШМ)*, который эффективен и при реализации на ЭВМ и при «ручном» счете, поскольку позволяет не только получить точечные результаты, но и *последовательно анализировать* рецептурно-технологические решения по каждому из  $k$ -факторов.

И экстремум  $Y_{\max(\min)}$ , и его координаты — *случайные величины*, полученные по функциям, коэффициенты которых определены с дисперсиями  $s^2 \{b\}$ . Таким образом, в задачах № 2...6 определено, что с двусторонним риском  $\alpha = 0,2$  экстремальные значения критериев качества *находятся в интервалах* (1.73), графически отраженных на рис. 1.4, *в, г* и рис. 1.5, *в, д*.

$$\left. \begin{aligned} 3,133 &\leq \mu \{R_{\max}\} \leq 3,549 \text{ МПа,} \\ 0,842 &\leq \mu \{R_{\min}\} \leq 1,318 \text{ МПа,} \\ 145 &\leq \mu \{v_{\max}\} \leq 165 \text{ с,} \\ 25,5 &\leq \mu \{v_{\min}\} \leq 29 \text{ с.} \end{aligned} \right\} \quad (1.73)$$

Доверительные границы для координат точек максимума и минимума определяются, в общем случае, как *эллипс*, площадь которого с риском  $\alpha$  *накрывает истинное* значение координат  $\mu \{x_i\}$ . Главные диаметры эллипса, в частности, для  $R_{\max}$  можно найти (1.74), подставляя соответствующие координаты в соотношения (1.46), (1.47),

$$\left. \begin{aligned} d_1 \{R_{\max}\} &= 2t_{\alpha} s \{x_{1.\max}\} = 0,518; \\ d_2 \{R_{\min}\} &= 2t_{\alpha} s \{x_{2.\min}\} = 0,06. \end{aligned} \right\} \quad (1.74)$$

Такой *эллипс рассеяния* показан на рис. 1.6, *а* — *точность* оценки координат экстремума по содержанию пластификатора в 7,5 раз хуже, чем по содержанию отвердителя, что и следовало

ожидать при анализе рис. 1.4, *к ... л*. Эллипс (1.74) не следует путать с эллипсом, определяющим возможное рассеяние по факторной плоскости  $\{x_1, x_2\}$  значений  $R_{\max} = 3,341$  МПа. В последнем случае оно обусловлено существованием не только нижнего гарантированного уровня качества (1.32), но и верхнего  $R^{\max} \{\alpha\} = \bar{R} + t_{\alpha} s \{R\}$ . Если для такой величины построить по аналогии с рис. 1.3, в эллипсоподобные изолинии, то соответствующая  $R^{\max} \{\alpha\} = 3,341$  изолиния и будет решением задачи (см. рис. 1.6, *а*).

Эллипс доверительных значений для координат точек максимума (минимума) может преобразоваться в прямую, когда ошибка в определении одной из координат равна нулю. Эта ситуация возникает, когда решение лежит на границе факторной области. Действительно, по координате  $x_2$  для реологического показателя  $\ln v$  (см. рис. 1.5, *в*) доверительные границы  $\pm t_{\alpha} s \{\ln v\}$ , связанные с ошибкой предсказания, никак не изменяют решения  $x_{2,\min} = +1$ , т. е.  $\sigma^2 \{x_{2,\min}\} = 0$ . Доверительные границы для  $x_{1,\min}$  показаны на рис. 1.6, *а* в виде отрезка на стороне  $x_2 = +1$ . Его размер вычислен по зависимости (1.45) с учетом  $T \{b\}$  для плана  $B_3$  (при  $\beta_{12} = \beta_{22} = 0$ ):

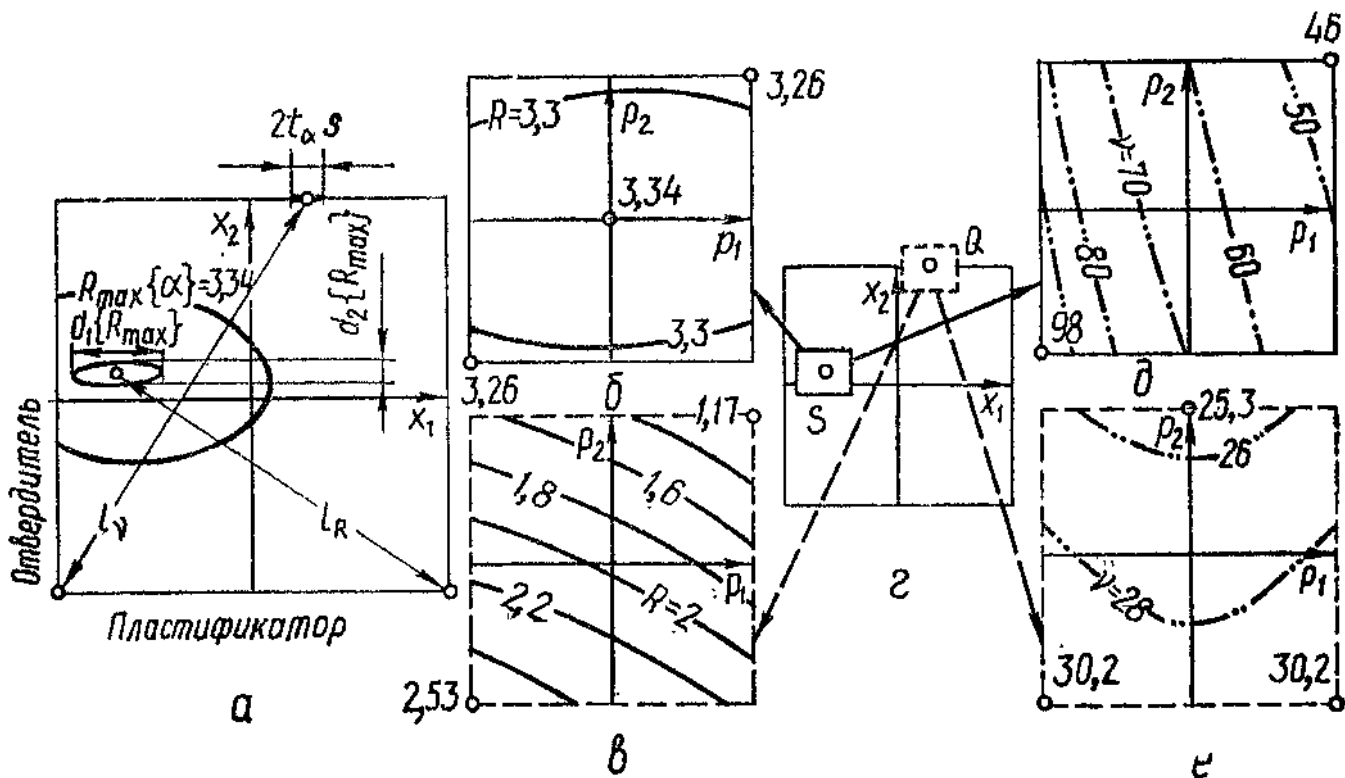


Рис. 1.6. Доверительные интервалы для координат максимума  $R$  и минимума  $v$  (*а*), а также изменение характера изолиний для  $R$  (*б, в*) и  $v$  (*д, е*) при переходе от полного факторного пространства (*г*) к локальным областям  $\{x_1, x_2\}$  возле точек  $S$  (*б, д*) и  $Q$  (*в, е*)

$$2t_{\alpha} s \{x_{1.\min}\} = 2t_{\alpha} s_{\beta} x_{1.\min} \sqrt{T_3 b_1^{-2} + T_{11} b_{11}^{-2}} = 0,056. \quad (1.75)$$

Эллипс вырождается в *точку*, если  $Y_{\max(\min)}$  находится в *вершине* квадрата ( $R_{\min}$  и  $v_{\max}$ ), поскольку дисперсии координат равны нулю. Однако здесь возможна ситуация с конкурирующими решениями, когда на роль особой точки поверхности (с учетом  $s^2 \{\hat{Y}\}$ ) претендуют *несколько вершин*. Так, если в модели  $R$  (1.11) при поиске минимума по ДШМ сначала принять решение о стабилизации уровня  $x_1 = +1$  [16], то далее будет использована модель

$$R \{x_{1.\min} = +1\} = 2,31 + 0,01x_2 - 1,22x_2^2, \quad (1.76)$$

которая (в силу  $b_{22} < 0$ ,  $b_2 > 0$ ) приводит к решению  $x_{2.\min} = -1$  и  $R_{\min} = 1,08$ . Однако в (1.76) оценка линейного члена столь мала, что не может дать гарантированного решения о  $x_{2.\min}$ . Действительно, при альтернативном решении  $x_2 = +1$  на другом конце параболы (см. рис. 1.4, *з*)  $R = 1,1$  МПа. Поскольку доверительные ( $\alpha = 0,2$ ) интервалы с учетом  $s^2 \{\hat{R}\}$  (1.30)

$$\left. \begin{aligned} R \{x_1 = +1, x_2 = -1\} &= 1,08 \pm 1,296 \cdot 0,184; \\ R \{x_1 = +1, x_2 = +1\} &= 1,10 \pm 1,296 \cdot 0,184, \end{aligned} \right\} \quad (1.77)$$

перекрываются, то однозначно определить  $x_{2.\min}$  затруднительно и в инженерных решениях целесообразно рассматривать оба варианта координат как равноценные.

**Задача № 9. Обобщающие показатели двухфакторных моделей.** Значения максимума и минимума критериев качества композита, а также их рецептурно-технологические координаты служат некоторыми *числовыми* показателями  $G$  (от английского *generalization* — обобщение), *обобщающими поля свойств* материала  $Y = f(x)$  (см. рис. 1.1, *з*), в частности, поля  $R = f(x_1, x_2)$  и  $v = \varphi(x_1, x_2)$ , описываемые моделями (1.11) и (1.21).

Кроме этих *обобщающих* показателей *первого уровня* целесообразно рассматривать (табл. 1.4) и *производные* от них показатели более *высоких уровней*. Абсолютный  $G_d = \Delta Y_{\min}^{\max}$  и *относительный*  $G_e = \delta Y_{\min}^{\max}$  *перепады* свойств характеризуют «*чувствительность*» свойства к одновременному *полному* (максимально возможному в пределах изученного факторного пространства  $|x_i| = 1$ ) *изменению* рецептурно-технологических

Таблица 1.4. Формулы для расчета обобщающих показателей применения к оценкам предела

Индекс при $G$ в задаче № 9	Обобщающий показатель $G$	Расчетная формула
а	Максимум	$Y_{\max}$
б	Координаты максимума	$x_{1.\max}/x_{2.\max}$
в	Минимум	$Y_{\min}$
г	Координаты минимума	$x_{1.\min}/x_{2.\min}$
Перепад свойств:		
д	абсолютный	$\Delta Y_{\min}^{\max} = Y_{\max} - Y_{\min}$
е	относительный	$\delta Y_{\min}^{\max} = Y_{\max}/Y_{\min}$
Максимальный усредненный градиент на расстоянии:		
ж	абсолютный	$\bar{\nabla} Y = \Delta Y_{\min}^{\max} / l$
з	относительный	$\bar{\nabla} \delta Y = \delta Y_{\min}^{\max} / l$
и	Расстояние между экстремальными точками (в единицах нормализованного факторного пространства)	$l^2 = \sum_i (x_{i.\max} - x_{i.\min})^2$ $i = \overline{1, 2}$

факторов. Относительный перепад свойств, моделируемых как логарифмические величины, определяется как экспонента абсолютного перепада. Так, для условной вязкости  $\delta v_{\min}^{\max} = \exp 1,738 =$

$= 5,686$  при относительной ошибке  $\delta \{ \delta v_{\min}^{\max} \} = 7,2 \%$  [7, 16, 20] относительные перепады позволяют сравнить между собой *степень изменения разных* по размерности свойств в одинаковом факторном пространстве. Так, по данным табл. 1.4 предел прочности может изменяться в три раза, а условная вязкость чувствительна к изменению факторов почти вдвое сильнее.

Еще более информативен, на наш взгляд, такой обобщающий показатель как усредненный максимальный *градиент* [16] изменения поля свойств — абсолютный  $G_{\text{ж}} = \bar{\nabla} Y$  и относительный  $G_{\text{з}} = \bar{\nabla} \delta Y$ . Градиенты соотносят перепады свойств с кратчайшим «расстоянием»  $l$  между координатами точек наилучшего и наихудшего уровней качества (в пространстве  $|x_i| \leq 1$ ).



и дисперсий их предсказания, а также результаты их прочности  $R$  и условной вязкости  $\nu$

Дисперсия предсказания $s^2 \{\hat{G}\}$		$G \{R\}$	$s_R$	$\delta R, \%$	$G \{\ln \nu\}$	$G \{\nu\}$	$s_\nu$	$\delta \nu, \%$
$s^2 \{Y_{\max}\}$	(1.26)	3,341	0,160	4,8	5,040	154	—	5,4
$s^2 \{x_{i.\max}\}$	(1.45)	$\frac{-0,662}{0,127}$	$\frac{0,200}{0,023}$	—	—/—	0/0	—	—
$s^2 \{Y_{\min}\}$	(1.26)	1,08	0,184	16,9	3,302	27,2	—	4,8
$s^2 \{x_{i.\min}\}$	(1.45)	+1/—	0/0	—	0,273/+1	0,02/0	—	—
$s^2 \{Y_{\max}\} + s^2 \{Y_{\min}\}$		2,26	0,24	10,8	1,738	—	0,072	—
$(\delta Y_{\min}^{\max})^2 (\delta^2 \{Y_{\max}\} + \delta^2 \times \times \{Y_{\min}\})$		3,09	0,54	17,7	—	5,69	—	7,2
$(\bar{\nabla} Y)^2 (\delta^2 \{\Delta Y_{\min}^{\max}\} + \delta^2 \{l\})$		1,12	0,15	13,6	—	—	—	—
$(\bar{\nabla}_\delta Y)^2 (\delta^2 \{\delta Y_{\min}^{\max}\} + \delta^2 \{l\})$		1,54	0,30	19,5	—	2,40	0,175	7,3
$\sum_i [(x_{i.\max} - x_{i.\min})^2 \times \times (s^2 \{x_{i.\max}\} + s^2 \{x_{i.\min}\})] / l^2$		2,01	0,17	8,3	2,37	2,37	0,027	1,1

В табл. 1.4 для реологического показателя относительная ошибка расчета  $\delta \{l_\nu\}$  значительно меньше, чем  $\delta \{l_R\}$  в силу того, что рассеяние значений координат экстремума (см. рис. 1.6, а) для этого критерия качества более ограничено, чем для прочности. Судя по усредненным максимальным градиентам относительного изменения свойств (см. табл. 1.4) вязкость смеси *изменяется интенсивней* (доверительные границы градиентов двух свойств при  $\alpha = 0,2$  не пересекаются), чем прочность композита на каждую единицу факторного пространства  $l(x_i) = 1$ .

Усредненный максимальный градиент  $\bar{\nabla} Y$  обобщает не только скалярное поле свойства материала, описанное полиномиальной моделью, но и *векторное поле*, которое образуют в факторном пространстве истинные градиенты с переменными модулями (1.78) и направлениями к оси  $x_1$  (1.79),

$$|\nabla Y| = \sqrt{(\partial Y / \partial x_1)^2 + (\partial Y / \partial x_2)^2}, \quad (1.78)$$

$$\operatorname{tg} \gamma = (\partial Y / \partial x_2) / (\partial Y / \partial x_1). \quad (1.79)$$

Преимущество обобщающих показателей (1.78), (1.79) в дополнение к  $G_1 \dots G_3$  — учет не только особых точек  $Y_{\max}$  и  $Y_{\min}$ , но и характера поверхности отклика  $f(x_1, x_2)$ .

В целом методика анализа полей свойств с помощью обобщающих показателей  $G_i$  требует дальнейшего совершенствования и дополнительной содержательной интерпретации.

**Задача № 10. Трансформация экспериментально-статистических моделей при изменении области действия факторов.** Оценки коэффициентов полиномиальных моделей  $b_i$  не инвариантны к выбору координат центра  $X_{0,i}$  факторного пространства, в котором ставится эксперимент, и диапазона экспериментального варьирования факторов  $\Delta X_i$ , на что неоднократно обращалось внимание (например [16]). Вопрос о трансформации моделей при переносе координат центра из точки  $X_{0,i}$  в точку  $X_{T,i}$  и изменении интервалов варьирования в  $\omega_i$  раз приобрел существенное значение в связи с разработкой [20; 79—1987] методики анализа устойчивости показателей качества методом Монте-Карло (см. § 5.7). Кроме того, этот вопрос имеет и самостоятельное инженерное значение, в частности, в условиях, когда экспериментальную область специально выбирали значительно шире, чем обычное изменение факторов.

При начальной нормализации факторов  $X_i$  используется соотношение (1.80). В новом соотношении (1.81) те же факторы  $X_i$  нормализуются как  $p_i$  (специальное обозначение для реализации метода Монте-Карло от английского слова *play* — игра):

$$x_i = (X_i - X_{0,i})/\Delta X_i \quad (1.80)$$

$$p_i = (X_i - X_{T,i})/(\omega_i \Delta X_i). \quad (1.81)$$

Поскольку в (1.80) и (1.81) тождественны  $X_i$ , то  $x_i$  и  $p_i$  связаны как (1.82), в котором  $x_{T,i} = (X_{T,i} - X_{0,i})/\Delta X_i$  — исходные нормализованные координаты центра нового пространства  $\Omega_p$ .

$$x_i = (\omega_i p_i \Delta X_i + X_{T,i} - X_{0,i})/\Delta X_i = \omega_i p_i + x_{T,i}. \quad (1.82)$$

Так, если для сравнительного анализа использовать две точки:  $S$  (см. рис. 1.6, *г*), соответствующую максимуму предела прочности  $R$ , и  $Q$ , соответствующую минимуму вязкости  $v$ , характеристики которых приведены в табл. 1.4, и изменить интервалы варьирования пластификатора до  $\omega_1 = 0,25$  (т. е. уменьшить в четыре раза), а отвердителя до  $\omega_2 = 0,2$ , то получим

переходные формулы:

$$\left. \begin{aligned} x_1 \{S\} &= -0,662 + 0,25p_1; \\ x_2 \{S\} &= +0,127 + 0,20p_2; \end{aligned} \right\} \quad (1.83)$$

$$\left. \begin{aligned} x_1 \{Q\} &= +0,273 + 0,25p_1; \\ x_2 \{Q\} &= +1,000 + 0,20p_2. \end{aligned} \right\} \quad (1.84)$$

Подстановка (1.83), (1.84) в (1.11) дает две модели для прочности — (1.85), (1.86), а в (1.21) — две модели для условной вязкости — (1.87), (1.88).

$$R \{S\} = 3,31 - 0,02p_1^2 - 0,05p_2^2 - 0,01p_1p_2; \quad (1.85)$$

$$R \{Q\} = 1,93 - 0,22p_1 - 0,46p_2 - 0,02p_1^2 - 0,05p_2^2 - 0,01p_1p_2; \quad (1.86)$$

$$\ln v \{S\} = 4,17 - 0,30p_1 - 0,07p_2 + 0,04p_1^2; \quad (1.87)$$

$$\ln v \{Q\} = 3,30 - 0,07p_2 + 0,04p_1^2. \quad (1.88)$$

Поскольку центр  $x_{T,i} = 0$  совпадает для модели (1.85) с максимумом  $R_{\max}$ , то, естественно, что линейные эффекты у этой модели равны нулю. То же самое происходит и у модели (1.88), но лишь по одной из координат, так как поверхность  $\ln v$  (см. задачу № 1) параболоид. Изолинии моделей (1.85)...(1.88) показаны на рис. 1.6, б...е. При анализе изоповерхностей *одного и того же свойства в разных факторных подобластях* будут получены *различные по существу технологические выводы о роли пластификатора и отвердителя в формировании свойств композита.*

**Задача № 11.** Выбор по диаграммам значений рецептурно-технологических факторов при заданных уровнях критериев качества. Данная задача — *основная* для тех инженеров-технологов, которые определяют (на стадиях проектирования и управления производством) *условия* получения композитов с *заданными уровнями свойства*. Если число факторов  $k \geq 2$ , то по одной модели, как правило, можно получить *бесчисленное* множество решений, соответствующих требованию  $Y \geq Y_{\text{тр}}$  или  $Y \leq Y_{\text{тр}}$  (в зависимости от инженерного смысла технико-экономических ограничений). Действительно, для предела прочности композита на сжатие  $R$ , описываемого моделью (1.11), выполнение требования  $R \geq R_{\text{тр}} = 2,5 \text{ МПа}$  [30] обеспечивается множеством составов, расположенных на площади, ограниченной соответствующей изолинией — эллипсом на рис. 1.7, а,

описываемым канонической формой (1.23), конкретизируемой в данном случае, как

$$\left. \begin{aligned} 25 - 3,335 &= -0,371\tilde{x}_1^2 - 1,229\tilde{x}_2^2; \\ \tilde{x}_1^2/2,251 + \tilde{x}_2^2/0,679 &= 1. \end{aligned} \right\} \quad (1.89)$$

Вне эллипса находится зона, «запрещенная» технико-экономическим нормативом (на рис. 1.7, а она заштрихована). В качестве обобщающего показателя для множества «разрешенных» составов предлагается использовать оценку  $P_F$  вероятности появления в исследованном факторном пространстве  $|x_i| \leq 1$  любого  $j$ -го состава, удовлетворяющего  $Y_j \geq Y_{j,тр}$ . Эта оценка соответствует процентному отношению (1.90) площади  $F\{R_{тр}\}$  внутри эллипса к общей площади квадрата  $F_0 = [2(x_i = 1)]^2 = 4$ .

$$P_F = (F\{R_{тр}\}/F_0) 100 = 25F\{R_{тр}\}. \quad (1.90)$$

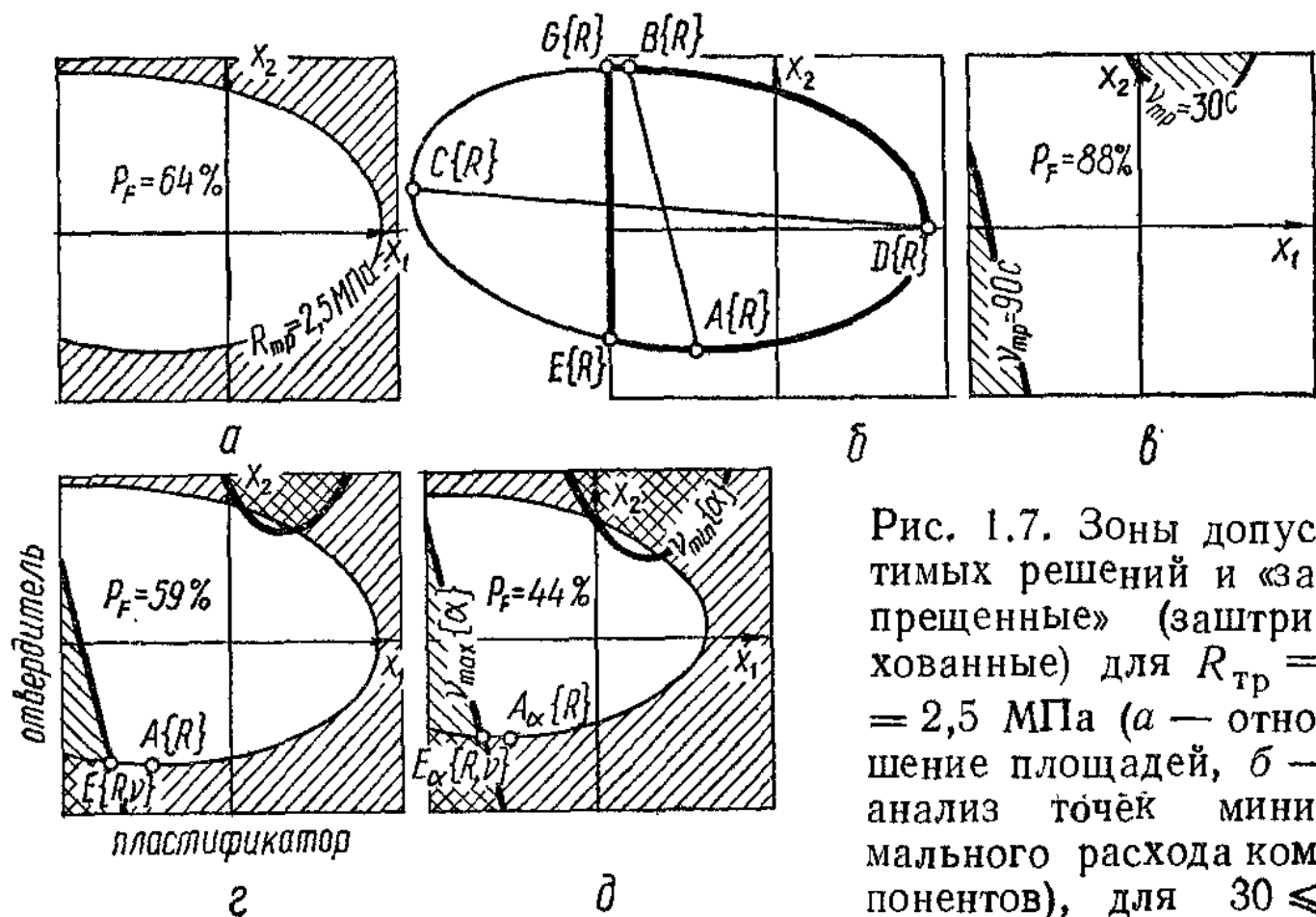


Рис. 1.7. Зоны допустимых решений и «запрещенные» (заштрихованные) для  $R_{тр} = 2,5$  МПа (а — отношение площадей, б — анализ точек минимального расхода компонентов), для  $30 \leq$

$v_{тр} \leq 90$  с (в), при выполнении одновременно обоих требований по средним (г) и гарантированным (д) уровням качества

Площадь  $F \{R_{\text{тр}}\}$  удобно рассчитывать численным методом [71] на ЭВМ, используя (1.89); для эллипса  $R_{\text{тр}} = 2,5$  МПа на рис. 1.7, а  $P_F \{R\} = 64\%$ .

Дальнейшее развитие инженерного решения задачи обычно связано с выбором *наиболее экономичного* (в конкретных условиях материально-технического обеспечения) *состава*. В общем виде этот выбор связан с новым *требованием минимизации расхода ресурса по каждому из факторов*  $x_i \rightarrow x_{i.\text{min}} \{Y_{\text{тр}}\}$ . Такое решение для  $x_i$  всегда *лежит на изолинии*  $Y = Y_{\text{тр}}$  и на линии  $x_{j.\text{opt}}$  (1.39); из условия  $Y \{x_{i.\text{opt}}\} = Y_{\text{тр}}$  с учетом (1.43) можно записать общий вид уравнения (1.91), меньший корень которого и дает координату  $x_{i.\text{min}}$ .

$$\begin{aligned} [(b_0 - Y_{\text{тр}}) - 0,25b_{ij}^2 / b_{jj}] (b_i - 0,5b_j b_{i2} / b_{jj}) x_i + \\ + (b_{ii} - 0,25b_{i2}^2 / b_{jj}) x_i^2 = 0. \end{aligned} \quad (1.91)$$

Для  $R_{\text{тр}} = 2,5$  МПа при  $x_{1.\text{opt}} = -0,632 - 0,273x_2$  (см. (1.40)) полученное из (1.44) уравнение

$$0,822 + 0,304x_2 - 1,199x_2^2 = 0 \quad (1.92)$$

имеет корни  $x_2^* = -0,711$  и  $x_2 = 0,964$ . Соответствующие им точки  $A \{R\}$  и  $B \{R\}$  приведены на рис. 1.7, б; на линии эллипса, согласно (1.40),  $x_{1.\text{opt}} \{\tilde{A}\} = -0,463$  и  $x_{1.\text{opt}} \{B\} = -0,860$ . Здесь же показаны точки  $C \{R\}$  и  $D \{R\}$ , координаты которых найдены по аналогичному уравнению при условии  $x_{2.\text{opt}} = 0,078 - 0,074x_1$  (1.41). Однако точку  $C \{R\}$  не следует принимать в качестве наилучшей по минимальному расходу пластификатора, так как координата  $x_1 = -2,895$  удалена от границ исследуемой факторной области. Целесообразнее (до экспериментальной проверки расширенного влево факторного пространства) принять *осторожное* решение, ограничив  $x_{1.\text{min}} = -1$ . Вторая координата точки  $E \{R\}$  (см. рис. 1.7, б)  $x_2 = -0,657$  легко определяется из квадратного уравнения, получаемого подстановкой  $Y_{\text{тр}} = 2,5$  и  $x_1 = -1$  в модель (1.91). Второй корень этого уравнения  $x_2 = 0,96$  определяет точку  $G \{R\}$ , соответствующую верхней границе количества отвердителя при минимально допустимом расходе пластификатора.

*Компромиссное решение* по минимизации расхода обоих компонентов остается *недостаточно определенным*, так как лежит на *дуге эллипса* между точками  $A \{R\}$  и  $E \{R\}$ . Для однозначного выбора необходимо субъективное решение или построение некоторого дополнительного критерия (например, стоимостного).

Для *реологических* свойств требования *двусторонние*: чтобы смесь при укладке выходила из штуцера, ее условная вязкость ограничена  $v_{тр} \leq 90$  с, а чтобы она не вытекала из швов — ограничена снизу  $v_{тр} \geq 30$  с. Возникающий при этом *коридор разрешенных решений* показан на рис. 1.7, в. Обобщающий показатель  $P_F \{v\} = 88\%$  высок, что свидетельствует о широких возможностях регулировки рецептуры в пределах исследованного факторного пространства.

Однако композит должен удовлетворять *комплексу требований*, в частности, в рамках описанных выше исследований смесь должна быть *технологичной*  $30 \leq v \leq 90$  с, а шов *прочным*  $R_{тр} \geq 2,5$  МПа. В глобальной постановке такое решение следует искать методами нелинейного программирования [20], но для двухфакторных ситуаций достаточно информации, содержащейся на диаграммах рис. 1.7, а, в. Они *совмещаются* в одном поле (см. рис. 1.7, г) и оставшаяся не «запрещенной» область содержит составы, удовлетворяющие требованиям к обоим показателям (число показателей не ограничено).

*Область допустимых решений*  $\Omega_{тр}$  — эллиптический сектор с левой параболической границей, имеющий обобщающий показатель  $P_F \{R, v\} = 59\%$  несколько меньший, чем при выполнении требований только по прочности (см. рис. 1.7, а). *Компромиссное решение* при выборе экономичных составов лежит на *дуге* от  $E \{R, v\}$  до  $A \{R\}$ . Оно несколько сузилось — минимальный расход отвердителя остался неизменным, а минимально допустимый расход пластификатора увеличился с  $x_1 = -1$  до  $x_1 = -0,826$ .

*Надежность* выбора состава композита повышается, если вместо диаграмм  $\hat{Y} = f(x_i)$ , отражающих изменение средних показателей качества, воспользоваться диаграммами *гарантированных уровней* показателей качества. При учете минимально возможной прочности  $R^{\min} \{\alpha\}$  (1.32) эллипс *уменьшается* и площадь допустимых решений характеризуется обобщающим показателем  $P_F \{R_\alpha\} = 58\%$ . При учете вязкости, гарантированной и снизу  $v^{\max} \{\alpha\}$  (1.33) и сверху  $v^{\min} \{\alpha\}$  (для чего доверительный полуинтервал вычитают, а не прибавляют), происходит *двустороннее сужение коридора* допустимых решений. Для него

$P_F \{v_\alpha\} = 81 \%$ . При совмещении этих решений в одном поле (см. рис. 1.7,  $\partial$ ) будет получена область допустимых решений сложной конфигурации с достаточно высоким показателем  $P_F \{R_\alpha, v_\alpha\} = 44 \%$ . Координаты точек минимальных ресурсов  $E_\alpha \{R, v\}$  и  $A_\alpha \{R\}$  смещены в сторону больших расходов и пластификатора, и отвердителя. Однако за счет этого *риск* получения материала, *не удовлетворяющего* техническим требованиям, *снижается с 50 до 10 %*.

**Задача № 12. Изопараметрический анализ показателей качества по двухфакторным диаграммам.** Исследование поведения системы при условии *постоянства некоторого ее выхода* названо [16] *изопараметрическим анализом* — ИПА. Задачи этого типа широко распространены в инженерной практике. В технологии бетонов, например, принято сравнивать свойства затвердевшего композита при условии равенства такого косвенного реологического параметра  $H$  [72] как подвижность бетонной смеси. При этом смеси называют равноподвижными (изореологическими). Экспериментальное определение составов и технологии приготовления последних *трудоемко*, так как требуется значительное число опытов для попадания на заданный уровень подвижности при пошаговом варьировании факторов (принцип «сужающейся вилки»). Если в задаче требуется обеспечить постоянство структурных параметров  $Y_s$  [72] (доли пор некоторого размера в «изопоризованных» композитах; количества синтезируемых новообразований при твердении в «изокристаллических» композитах [69]), то степень трудоемкости делает ее, как правило, неразрешимой. В то же время, использование комплекса ЭСМ не только многократно снижает объем опытных работ, но и позволяет оперативно получать *принципиально новую* технико-экономическую *информацию* и с известным риском  $\alpha$  строить на ее основе научные выводы и давать инженерные рекомендации.

По определению на любой изолинии двухфакторной диаграммы (в общем случае — на любой изоповерхности  $k$ -факторной модели) *уровень* показателя свойств есть величина *постоянная*. Следовательно, движение вдоль изолинии возможно только тогда, когда *каждому изменению фактора  $x_i$  соответствует функционально заданное изменение фактора  $x_j$* . Для обеспечения *изореологичности* смесей при уровне  $v = 50$  с нужно обеспечить управление факторами по модели (1.21) так, чтобы движение осуществлялось *вдоль соответствующей изолинии* поверхности параболического цилиндра, показанного на рис. 1.8,  $a$  — его сегмент ниже уровня  $v = 50$  с ( $\ln v_{\text{тр}} = 3,912$ ) удален для

наглядности решения задачи. Из требования (1.93) следуют два возможных управления: по (1.94)  $x_1$  изменяется произвольно, а  $x_2$  принимает определенные этой функцией значения; по (1.95) приоритет принадлежит  $x_2$ , а  $x_1$  принимает два определенных и взаимосвязанных значения.

$$\ln v_{\text{тр}} = 3,912 = 3,7 - 0,35x_1 + 0,64x_1^2 - 0,35x_2; \quad (1.93)$$

$$x_2 = -0,606 - x_1 + 1,829x_1^2; \quad (1.94)$$

$$x_1 = 0,273 \pm \sqrt{0,406 + 0,547x_2} \quad (\text{при } x_2 \geq -0,742). \quad (1.95)$$

Зависимости (1.94), (1.95) позволяют, таким образом, решать экспериментальные задачи обеспечения изореологичности сме-

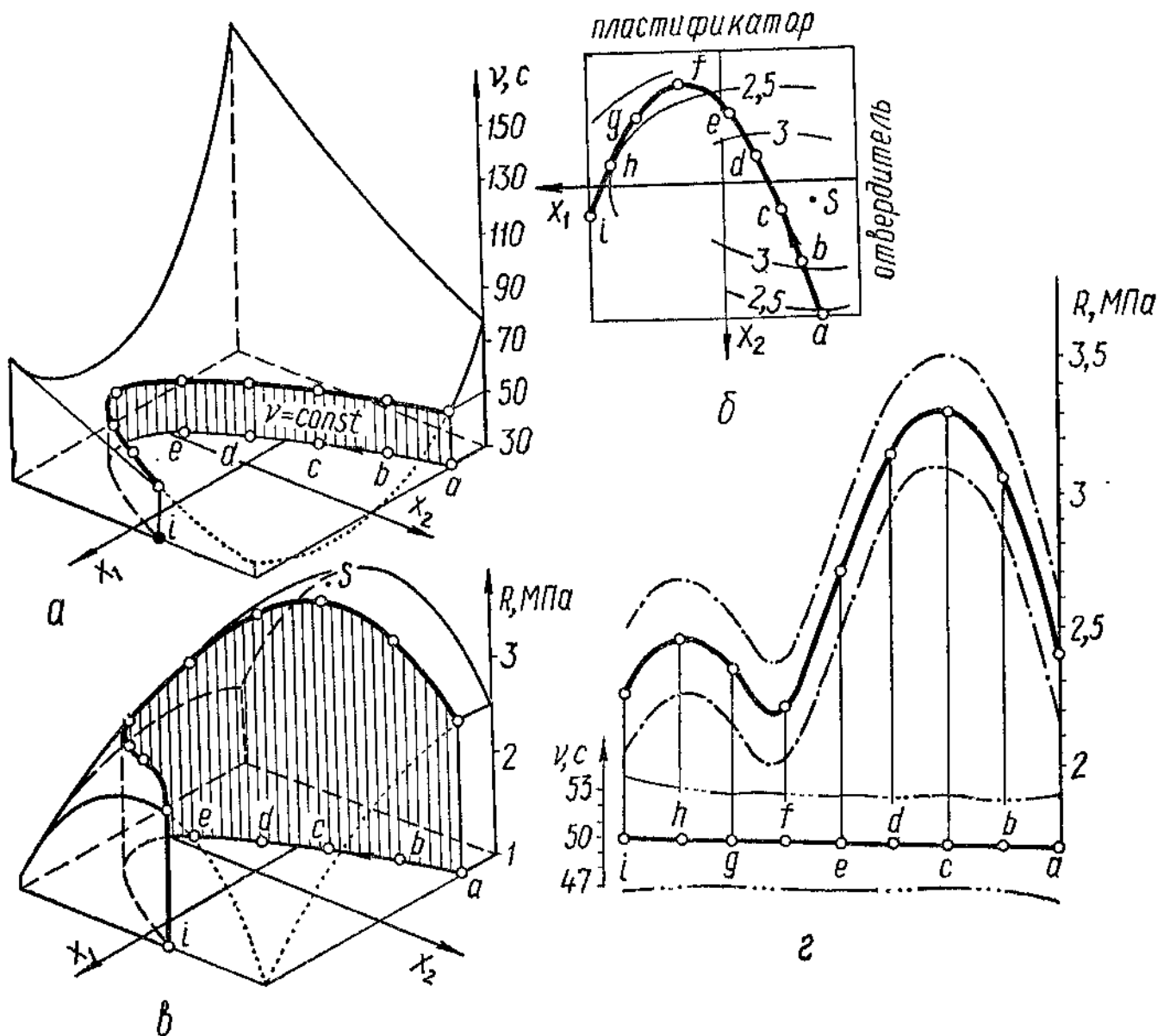


Рис. 1.8. Изопараметрический анализ: выделение изолинии  $v = 50$  с (а), восемь шагов по этой изолинии (б), изменение предела прочности  $R$  в условиях  $v = 50 \text{ с} = \text{const}$  (в — аксонометрия, г — кривая четвертого порядка и ее доверительные границы)



сей, однако этим их роль не исчерпывается. Более высокий этап изопараметрического анализа — исследование изменения других свойств композита (в данном случае — его предела прочности на сжатие  $R$ ) при условии постоянства заданного свойства (в данном случае — условной вязкости). В условиях изореологичности факторы могут изменяться как (1.94) или (1.95), что повлечет за собой изменение по (1.11) свойств затвердевшего композита. Действительно, анализ на совмещенной диаграмме (рис. 1.8, б) изолиний  $v$  и  $R$  показывает, что предел прочности  $R$  подчиняется сложному закону. В начале движения от точки  $a$  (повышенное количество отвердителя при невысоком содержании пластификатора)  $R$  возрастает, но, достигнув некоторого максимума, начинает снижаться с переменной скоростью, что иллюстрируется на рис. 1.8, в поверхностью эллиптического параболлоида (модель 1.11), из которой вырезан сегмент, соответствующий в плоскости  $\{x_1, x_2\}$  удаленному на рис. 1.8, а. В данной задаче закон изменения  $R$  в изопараметрических условиях ( $v = 50$  с) достаточно просто получить подстановкой (1.94) в (1.11), в результате чего будет получена однофакторная модель четвертой степени

$$R \{v = 50\} = 2,61 - 2,04x_1 + 1,63x_1^2 + 4,13x_1^3 - 4,08x_1^4, \quad (1.96)$$

имеющая два локальных максимума и минимум. Еще более сложная модель будет получена при изопараметрическом анализе  $R$  как функции  $x_2$  после подстановки (1.95), поскольку она будет содержать радикалы. Предпочтителен численный метод изопараметрического анализа, основанный на шаговом анализе изменения  $R$  вдоль изолинии  $v = 50$  с. Шаги вдоль линии могут быть равными или неравными (но не меньше некоторой заданной, исходя из точности расчетов, длины). Их значение равно длине дуги изолинии  $l_{p-q}$  между точками  $p$  (координаты  $x_{1,p}$  и  $x_{2,p}$ ) и  $q$  (координаты  $x_{1,q}$  и  $x_{2,q}$ ) и вычисляется в общем виде (используя, например, (1.93)) как

$$l_{p-q} = \int_{x_{1,p}}^{x_{1,q}} \sqrt{1 + (\partial x_2 / \partial x_1)^2} dx. \quad (1.97)$$

Анализ изменения  $R$  по этой методике происходит не вдоль оси  $x_1$  (см. на рис. 1.4...1.6), а вдоль изолинии, что более информативно [72]. Развертка полученной закономерности (при восьми равных шагах) показана на рис. 1.8, г: видны два максимума — один в области точки  $c$ , т. е. вблизи абсолютного максимума прочности, а второй — в области повышенного со-

держания пластификатора и небольших дозировок отвердителя (около точки  $h$ ). Перепад между локальными максимумами значителен — 1,1 МПа. Вправо и влево от них при постоянной вязкости смеси предел прочности  $R$  будет снижаться интенсивно из-за ухудшения микро- и макроструктуры композита, обусловленного как невступившими в реакцию поликонденсации группами отвердителя, так и повышенным содержанием жидкой фазы в надмолекулярных решетчатых структурах [39, 82].

Для повышения достоверности инженерных выводов можно и при изопараметрическом анализе строить с риском  $\alpha$  *доверительные интервалы* как для изменяемого параметра  $R$ , так и для стабилизированного ( $v = \text{const}$ ). Это реализуется с помощью изолиний моделей (см. рис. 1.8, *в*, *г*) аналогично вышеизложенному построению закономерностей изменения средних. Из анализа доверительных границ на рис. 1.8, *г* следует, во-первых, что максимум точки  $c$  не может быть случайным, так как вероятные колебания  $v$  незначительны; во-вторых, что от интерпретации причин второго максимума у точки  $h$  целесообразно воздержаться, потому что в области  $f - i$  возможно происходит лишь локальная стабилизация прочности (истинная линия  $R$  — параллельная оси  $a - i$  прямая).

Изопараметрический анализ входит в состав вычислительного эксперимента (см. гл. 2) и позволяет *выявлять* достаточно *завуалированные особенности и закономерности* поведения системы по многим параметрам, как на стадии структурообразования композитов (см. гл. 4), так и на стадии их эксплуатации [3; 72; 79—1984, 1986].

Вышеописанные задачи не исчерпывают всего многообразия задач, возникающих в многофакторных ситуациях. Отдельные нетривиальные постановки задач и алгоритмы их решения рассмотрены в гл. 3...5.

**ТЕХНОЛОГИЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ  
МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ  
И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ  
ПРИ АНАЛИЗЕ И ОПТИМИЗАЦИИ  
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

---

**2.1. ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ СХЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Путь к оптимальным решениям на всех стадиях создания композиционного материала (от поисковых исследований до производства и эксплуатации) проходит через построение и использование математических моделей конкретных рецептурно-технологических ситуаций. Получение содержательных результатов математического моделирования, т. е. нового знания о материалах и оценках оптимальных инженерных решений, должно быть обеспечено, в свою очередь, соответствующей *технологией создания и использования математических моделей*.

*Формализация* задач (их математические формулировки и методы решения) и их *типизация* (общие постановки, универсальные математические методы) позволяют привлечь *одни и те же приемы и средства моделирования* (модели, алгоритмы, программы) для решения задач различного содержания, выполнения разных этапов анализа и оптимизации разных объектов. Изучение и оптимизация физического объекта — композиционного материала, его структуры и свойств осуществляется на основе математических моделей, полученных по данным физического (натурного) эксперимента. Модели, в свою очередь, могут в вычислительном эксперименте рассматриваться как математические объекты анализа и оптимизации.

«Экспериментирование» с моделями — сущность *вычислительного эксперимента* [60], который предполагает извлечение нового значения, выявление закономерностей, получение конкретных цифр и рекомендаций при «проигрывании» с помощью ЭВМ разных рецептурных, технологических и эксплуатационных ситуаций на системе моделей.

Для задач материаловедения и технологии КМ система моделей, очевидно, должна отражать связь показателей качества материала  $Q$  (технологических —  $H$ , структурных —  $S$ , эксплуатационных —  $R$ ) с рецептурно-технологическими факторами  $u$ ,

в частности, в виде функций

$$Q = F_Q(u); \quad H = F_H(u); \quad S = F_S(u); \quad R = F_R(u). \quad (2.1)$$

Введение в модели (2.1), кроме режимно-технологических и эксплуатационных факторов (температура, время, скорость, агрессивность среды), также и рецептурных (содержания базовых компонентов, концентрации химических добавок, состава наполнителей) приводит к выбору функции  $F_H$ ,  $F_S$ ,  $F_R$  в виде полиномов разных классов (см. § 2.2, гл. 3, гл. 4) и композиций из них. Композиции полиномов, основанные на дифференциации факторов, связанных с различными по физическим признакам группами воздействий на структуру и свойства материалов, в некоторой степени отражают структурную неоднородность КМ как объектов анализа и оптимизации. Таким образом снижается ограниченность полиномиальных моделей как локально-интегральных [51], т. е. имеющих интегральный, сглаживающий смысл и локальное значение.

Комплекс многофакторных регрессионных моделей, коэффициенты которых определяют по значениям откликов в физических экспериментах, используют как объект вычислительного эксперимента для получения оценок показателей  $H$ ,  $S$ ,  $R$  и их отношений в тех условиях, когда затруднительны или нецелесообразны натурные эксперименты. Он необходим также при решении обратных задач (см. задачу № 7, § 1.3) для определения оптимальных управляющих воздействий на структуру и свойства материала  $u_{opt}$  при заданном уровне  $Q_{tr} = const$ .

Эксперимент с моделями на ЭВМ (машинный) позволяет осуществить многовариантный анализ рецептурно-технологических решений. При этом, во-первых, оказывается возможным на базе «машинных», рассчитанных по *первичным* моделям откликов, построить *вторичные* модели для так называемых *обобщающих показателей*  $G$  (см. табл. 1.4), которые позволяют делать выводы на более высоком уровне анализа отношений свойств и характеристик материалов (см. гл. 3...5). Во-вторых, возможна оценка взаимосвязи показателей свойств при разных условиях *стабилизации факторов*  $u_i$  или *показателей*  $Q$  и  $G$  (как при изопараметрическом анализе в задаче № 12, § 1.3 и в гл. 3, 4). В-третьих, открывается возможность оценки не только оптимальных решений по отдельным свойствам или группе свойств, но и их *устойчивости* при имитации колебаний технологических, эксплуатационных и других воздействий на структуру и свойства композитов и расчета соответствующих компенсирующих воздействий (см. § 5.7).

В рассматриваемой технологии исследований объектом опти-

мизации служит и сам эксперимент, отвечая (см. § 1.1) общей оптимизационной направленности при решении инженерных задач в материаловедении и технологии КМ: оптимальными должны быть структура и свойства материала, процессы его изготовления, экспериментального исследования и моделирования.

*Технология [22] построения и использования экспериментально-статистических моделей (ЭСМ) для анализа и оптимизации КМ, в которую включены элементы вычислительного эксперимента, показана на схеме 2.1. В данном разделе рассматриваются общие вопросы ее реализации. Далее конкретизированы и описаны отдельные компоненты схемы, разработанные для задач анализа и оптимизации КМ (см. гл. 3...5).*

Поскольку на всех этапах исследования (от постановки задач до анализа результатов и выбора решения) важно с рациональной полнотой использовать накопленные наукой и практикой проблемные (по отношению к объекту — КМ) и методические (междисциплинарные) знания, на схеме 2.1 выделена отдельным блоком «база знаний» и показаны наиболее очевидные ее связи с другими блоками. Это система специально организованных, обновляемых, связанных между собой данных, относящихся к проблеме и методам ее решения (факторов, гипотез, закономерностей, идей, формул, алгоритмов, методик измерений, результатов, полученных в данной и смежных областях знаний). Эти сведения могут быть представлены в виде банков информации. Подобными банками или их «отделениями» являются некоторые печатные издания (каталоги, сборники, таблицы). Несравнимо большие возможности для накопления и полезного использования представляют машинные базы знаний, создаваемые и эксплуатируемые через ЭВМ. Организация базы знаний по проблеме создания КМ с заданным комплексом свойств — одна из *актуальных* задач получения эффективных решений по этой проблеме, особенно с учетом возможностей, открываемых вычислительным экспериментом. В технологии моделирования КМ блок «база знаний» сегодня реализуется на ЭВМ лишь на уровне микрофрагментов (отдельных наборов данных). Актуальна разработка, прежде всего, принципов классификации и систематизации уже имеющихся и новых (получаемых в процессе исследования) знаний о КМ и их компонентах, физико-химических и физико-механических процессах структурообразования и деструкции, а также о соответствующих математических моделях.

Иницирующим воздействием (входом схемы) является целевая установка, которая дополняется результатами анализа банка идей. Предполагается *цикличность* [16, 72] всего процесса моделирования, отдельных его ветвей и этапов при последовательном *повышении точности* математической модели и *совер-*

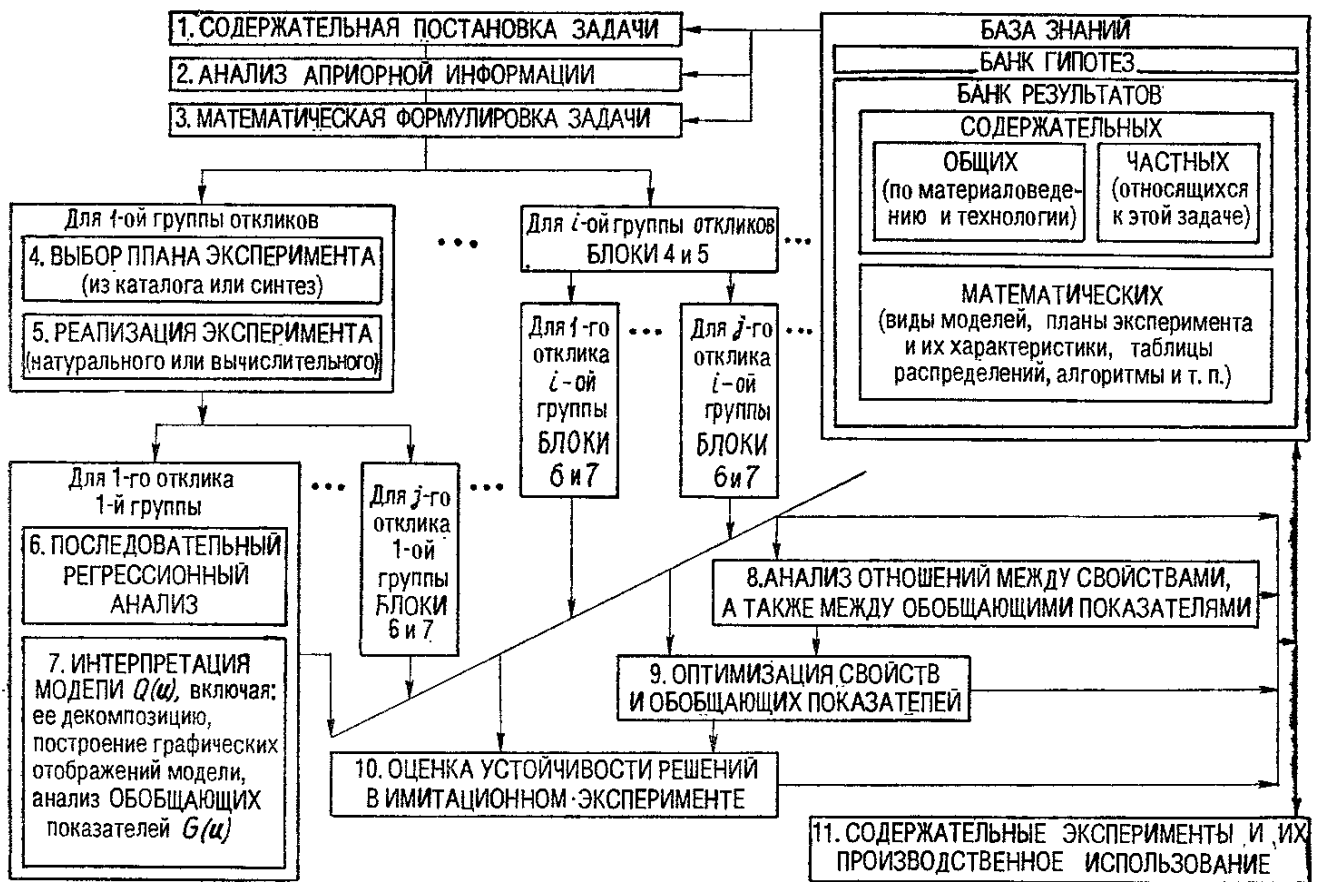


Схема 2.1. Технологическая схема моделирования

шенствовании концептуальной, физической модели. Последняя (выход этапа 2) содержит информацию об основных и второстепенных, отбрасываемых на данном цикле исследований, факторах, характере их связей с показателями  $H, S, R, G$  и критериями оптимальности объекта, рабочих гипотезах.

Начиная с этапа 3, когда физическая модель записывается в математических терминах, вступает в обращение математическая модель. Она содержит системы многофакторных полиномиальных уравнений для показателей структуры и свойств КМ. На входе блока 4 предполагается, что эти регрессионные модели определены с точностью до параметров (коэффициентов уравнений), объединены в группы по общности факторов, связанных в эксперименте с соответствующими откликами  $Y$  (показателями  $Q$  или  $G$ ), и записываются [2, 21, 33, 81, 103] в виде (2.2) \*.

$$Y = F(u) + \varepsilon = f^T(u) \Theta + \varepsilon, \quad (2.2)$$

где  $u = (u_1, \dots, u_k)^T$  — вектор независимых переменных (факторов), которые могут изменяться в области  $\Omega_u$  факторного пространства  $R^k$ ;  $F(u)$  — функция отклика, в частности, линейная комбинация известных базисных функций  $f^T(u) = (f_1(u), \dots, f_m(u))$ , определенных в блоке 3;  $\Theta = (\Theta_1, \dots, \Theta_L)^T$  — параметры, оцениваемые по результатам  $N \geq L$  наблюдений;  $\varepsilon$  — независимые случайные ошибки, распределенные с математическим ожиданием  $E\{\varepsilon\} = 0$  и дисперсией  $D\{\varepsilon\} = \lambda_\sigma^{-1}(u)$  по нормальному закону;  $\lambda_\sigma(u)$  — функция эффективности, связанная с ошибкой эксперимента  $\sigma_\varepsilon$ , в частности, в наиболее распространенном случае, когда  $\sigma_\varepsilon$  в области  $\Omega_u$  постоянна,  $\lambda_\sigma(u) = 1/\sigma_\varepsilon^2 = \text{const}$ .

Уравнение регрессии (2.3) определяет математическое ожидание  $E(Y)$  результатов наблюдений

$$E(Y) = F(u, \Theta) = f^T(u) \Theta. \quad (2.3)$$

Распределение  $N$  наблюдений за  $Y$  на множестве точек факторного пространства  $\{u \in \Omega_u \subset R^k\}$  задает дискретный план эксперимента (2.4), состоящий из спектра разных точек  $u_j$  и

---

\* Здесь и далее символы:  $t$  — знак транспонирования матрицы;  $\in$  — элемент принадлежит множеству,  $\subset$  — множество входит в множество,  $\otimes$  — декартово произведение множеств.

чисел повторений  $r_j \geq 1$  и наблюдений в этих точках,

$$E = \left\{ \begin{array}{c} u_1, \dots, u_j, \dots, u_n \\ r_1, \dots, r_j, \dots, r_n \end{array} \right\}, \quad \sum_{j=1}^n r_j = N. \quad (2.4)$$

Для расчета оценок коэффициентов  $\Theta$  используют *метод наименьших квадратов* (МНК), который обеспечивает минимальную сумму квадратов отклонений расчетных значений отклика от наблюдаемых в эксперименте [13, 29, 85], т. е.  $\min_{\Theta} \sum_{j=1}^N \lambda_{\sigma}(u_j) \times (Y_j - f^T(u_j) \Theta)^2$ . МНК-оценки  $\hat{\Theta}$  определяются из системы (2.5) линейных уравнений как (2.6) и являются наилучшими линейными оценками.

$$M\Theta = Y_f; \quad \hat{\Theta} = M^{-1}Y_f, \quad (2.5), (2.6)$$

где  $M = \sum_{j=1}^n \lambda_{\sigma}(u_j) f(u_j) f^T(u_j)$  — невырожденная, так называемая

информационная матрица Фишера,  $Y_f = \sum_{j=1}^N \lambda_{\sigma}(u_j) \times Y_j f(u_j)$ .

Точность оценок  $\hat{\Theta}$  описывается ковариационной (дисперсионной) матрицей (2.7) и, как видно из (2.5) и (2.4), зависит только от плана  $E$  и точности эксперимента  $\sigma_{\theta}$ .

$$D(\hat{\Theta}) = E \{ (\hat{\Theta} - \Theta) (\hat{\Theta} - \Theta)^T \} = M^{-1}. \quad (2.7)$$

МНК-оценкой функции отклика является *регрессионная функция* (2.8) с дисперсией (2.9)\*.

$$\hat{F} = \hat{Y} = f^T(u) \hat{\Theta}; \quad d(u) = f^T(u) D(\hat{\Theta}) f(u). \quad (2.8), (2.9)$$

Числовые характеристики матрицы  $D$  и ряд функционалов  $\psi(D)$  [20, 33, 77] используют в качестве меры точности оценок  $\hat{\Theta}$ : определитель  $\det D$  (характеризует объем эллипсоида рассеяния оценок), след  $\text{tr } D$  (сумма дисперсий оценок), дисперсия предсказания (2.9) по модели функции отклика и др. Эти числовые меры, характеризуя план эксперимента по качеству оценок (для получения которых эксперимент реализуется), служат

\* Отношение дисперсии предсказания  $d(u)$  к дисперсии воспроизводимости  $\sigma_{\theta}^2$  есть мера точности  $d$  [16, 19, 51, 72], иллюстрированная в задаче № 2, § 1.3.



критериями при выборе плана с учетом ряда других его свойств, желательных для исследователя [51, 77]. *Оптимальный* по критерию  $\psi(\mathbf{D})$  *план* эксперимента  $E^*$  определяется как решение экстремальной задачи

$$E^* = \arg \min_{E \in \Omega_E} \psi(\mathbf{D}(E)), \quad (2.10)$$

где  $\Omega_E$  — множество возможных планов, содержащих  $N$  точек из области экспериментирования  $\Omega_u$ .

В рассматриваемой технологии моделирования для  $i$ -й группы откликов в зависимости от условий задачи выбор плана эксперимента (см. блок 4 на схеме 2.1) осуществляется либо из банка результатов (каталога планов), либо после синтеза оптимального плана на ЭВМ. Вновь рассчитанный план можно, в свою очередь, поместить в машинный каталог.

Для получения на основе (2.2) и (2.4) оценок коэффициентов регрессионного уравнения (2.3), регрессионной функции (2.8) и других функционалов от  $\hat{\theta}$  используют *регрессионный анализ* [2, 16, 29], т. е. расчет МНК-оценок, дополненный их статистическим анализом. Построение первичных и вторичных моделей (соответственно по данным натурного и вычислительного эксперимента) в рассматриваемой технологии выполняется (см. блок 6 на схеме 2.1) в ходе *последовательного регрессионного анализа* (ПРА): при оценке по экспериментальным данным коэффициентов  $\theta$  устанавливается их значимость на фоне ошибок, и эффекты со статистически незначимыми коэффициентами последовательно исключаются (с тем или иным риском) из модели [16, 72]. Очистка ЭСМ от лишних элементов процедурой ПРА — гибкое средство настройки моделей в зависимости от требований к надежности и (или) простоте инженерных решений. Алгоритм ПРА показан в § 2.5; использован во всех задачах гл. 3...5.

Адекватные данным натурного или вычислительного эксперимента регрессионные функции используют (см. блоки 7...10 на схеме 2.1; § 2.6) как количественные соотношения для оценки взаимосвязей между технологическими, эксплуатационными и структурными характеристиками КМ и для оценки оптимальных управляющих рецептурно-технологических воздействий на их структуру и свойства. Получаемые таким образом содержательные результаты (см. блок 11 на схеме 2.1, гл. 3...5), с одной стороны, служат для решения практических задач, с другой, — обогащают базу знаний о материалах.

*Техническая база* для реализации технологии исследований, основанной на математическом моделировании — *вычислительная техника с соответствующим программным обеспечением.*

Ориентация на те или иные вычислительные средства для выполнения отдельных технологических операций и всего технологического цикла обусловлена сложностью решаемых при моделировании задач — их целью, количеством факторов и показателей, размерностью  $L$  регрессионных задач, объемом экспериментальной информации.

Можно говорить об относительном соответствии класса «сложности» задач разным стадиям создания КМ: научного исследования, проектирования, производства\*.

В научно-исследовательских задачах, особенно на этапе поисковых экспериментальных исследований, большая размерность факторного пространства, необходимость синтеза специальных эффективных планов эксперимента, решения других многомерных оптимизационных задач могут потребовать обращения к универсальным ЭВМ, обладающим достаточным объемом оперативной памяти и быстродействием (достаточной «мощностью»).

В условиях производства в тех случаях, когда при ограниченном числе показателей качества оперативные инженерные решения принимаются в пространстве двух-трех факторов по готовым моделям, наиболее эффективна вычислительная техника «малой мощности» (мини- и микро-ЭВМ, персональные компьютеры, микрокалькуляторы)\*\*.

Эта техника удобна и для задач на стадиях исследования и проектирования. «Малые»\*\*\* ЭВМ при необходимости можно использовать как терминальные устройства для связи с ЭВМ большей мощности. В научных исследованиях и проектировании такая связь необходима для работы с базой знаний.

Сложность задач, в частности, их размерность (а следовательно, и ориентация на тот или иной класс ЭВМ) в какой-то мере обусловлены новизной моделируемых ситуаций (см. § 1.1). Для приведенных в табл. 1.1 ситуаций  $O_iB$  (характерных для заводских лабораторий) целесообразно использовать малые машины с типовым программным обеспечением, а для задач  $O_iB$  — более мощные универсальные ЭВМ с привлечением специальных программных средств.

---

\* Речь идет о так называемых инженерных задачах [24], но не о задачах экономики и организации научных исследований, проектирования, производства.

\*\* Об использовании последних в заводских лабораториях см. работу [78].

\*\*\* В связи с развитием микроэлектроники разделение ЭВМ на «большие» и «малые», универсальные и специализированные становится все более условным: разная комплектация микроЭВМ позволяет использовать их и как управляющие машины, и для специализированных

В целом следует считать, что технику «выбирают» задачи и модели, однако, с учетом возможностей выбора и организации эффективного вычислительного процесса.

Таким образом, ориентация на ту или иную вычислительную технику для построения и использования математических моделей должна учитывать множество неформализуемых факторов. Определяющий из них — наличие и возможности разработки программного обеспечения — основного связующего звена между ЭВМ и моделированием. Структура программного обеспечения, выделяющая особенности участия его элементов в технологии моделирования, представлена схемой 2.2.

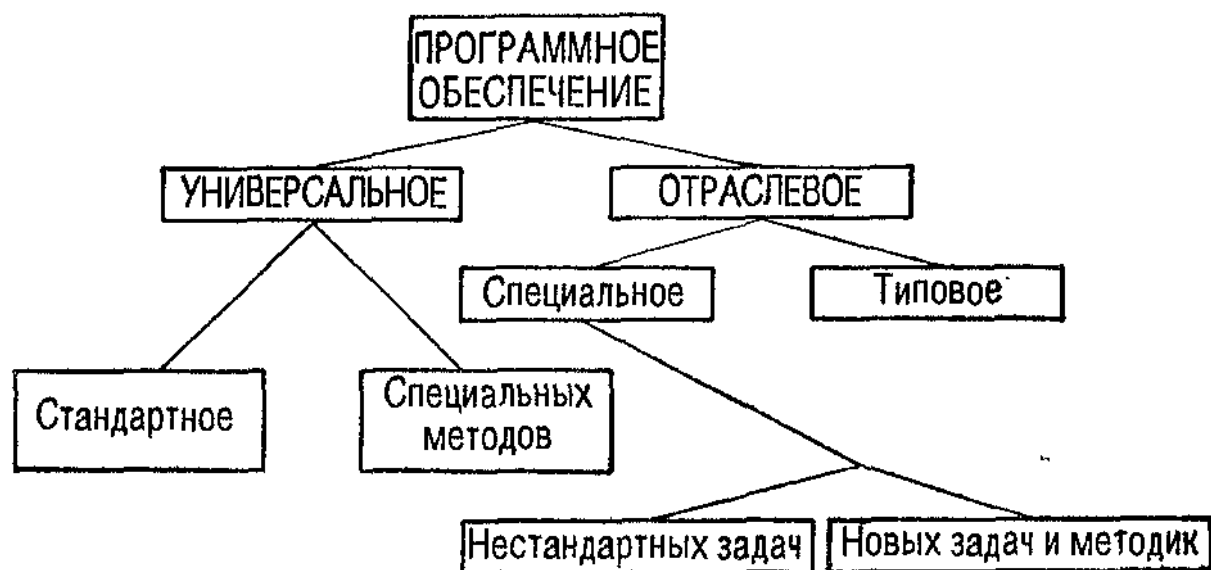


Схема 2.2. Структура проблемного программного обеспечения

Универсальные готовые программные средства (разработанные специалистами по вычислительной математике) обеспечивают методы вычислений, общие для разных областей знаний. Среди них можно выделить: во-первых, стандартные — для выполнения типовых математических процедур (операций с матрицами, обработки экспериментальных данных, датчиков псевдослучайных чисел, общих численных методов); во-вторых, специальные — для решения класса задач (расчет моделей определенного вида, синтез планов эксперимента в специальных факторных областях). Эти компоненты программного обеспечения относительно полно представлены для универсальных ЭВМ. Вычислительные центры через специализированные организации могут приобретать стандартное программное обеспечение.

расчетов, и для решения разных инженерных задач; производят универсальные ЭВМ в микроисполнении. По этой же причине теряют смысл рекомендации конкретных марок ЭВМ.

Универсальные средства пополняются отдельными модулями, комплексами, пакетами программ и диалоговыми системами [28, 32, 49, 68] через фонды алгоритмов и программ за счет специальных разработок, из литературных источников [8, 83, 86, 91, 105].

Отраслевые программные средства необходимы, как правило, лишь для данной отрасли знаний (для задач анализа и оптимизации КМ). Часть, предназначенная для решения типовых задач (см. §§ 1.3, 2.6, а также [17, 72, 108]), может быть выполнена для малых ЭВМ и использована для реализации инженерных решений на всех стадиях создания КМ. Специальные программы нужны для нестандартных ситуаций: во-первых, при необходимости использовать специальные методы и алгоритмы, например, синтезировать план эксперимента при отсутствии подходящего плана в каталоге (см. § 2.4); во-вторых, для решения нестандартных задач, таких как оценка устойчивости показателей методом Монте-Карло по экспериментально-статистическим моделям (см. § 5.7); в-третьих, для решения новых по содержанию задач по методикам, требующим разработки программных элементов.

Названные группы программных средств составляют *проблемно ориентированную систему программ*, предназначенную для задач анализа и оптимизации композиционных материалов. Остается актуальной разработка средства автоматизации такой системы — автоматизированного пакета программ, позволяющего технологу обращаться к системе с помощью близкого к естественному входного языка, или диалоговой системы для исследователей, владеющих приемами моделирования. В любом случае основу системы составляют *библиотеки программных модулей*: стандартных, типовых, специальных. Особенности состава библиотек и содержания отдельных модулей определяются математической постановкой задач, в частности, рассматриваемыми ниже моделями функций отклика.

## **2.2. ПОЛИНОМИАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ ДЛЯ СИСТЕМ «СМЕСИ, ТЕХНОЛОГИЯ — СВОЙСТВА»**

Структура, свойства, соответствующие показатели качества материалов определяются их рецептурой и технологией (под технологией здесь понимаются условия производства и эксплуатации изделий). Для математической формулировки задач управления качеством при создании композиционных материалов необходимо формальное представление рецептуры и технологии в виде системы факторов *и*.

Рецептура материала, состоящего из  $q$  компонентов, задается [72] соотношениями между ними (весовыми или объемными, или мольными) несколькими способами:

а) абсолютные значения содержания компонентов  $P_i, i = \overline{1, q}$  на единицу продукции или загрузку технологического оборудования; при этом уравнение материального баланса

$$P_1 + P_2 + \dots + P_i + \dots + P_q = \sum_{i=1}^q P_i = P_{\Sigma} = \text{const}; \quad (2.11)$$

б) доли  $v_i = P_i/P_{\Sigma}$  — относительные значения содержания компонентов к общему количеству  $P_{\Sigma}$ :

$$P_1/P_{\Sigma} + P_2/P_{\Sigma} + \dots + P_i/P_{\Sigma} + \dots + P_q/P_{\Sigma} = 1; \quad (2.12)$$

$$v_1 + v_2 + \dots + v_i + \dots + v_q = \sum_{i=1}^q v_i = 1; \quad 0 \leq v_i \leq 1; \quad (2.13)$$

в) значения содержания компонентов  $X_i = P_i/P_{\Sigma} = v_i/v_q$  — относительные к количеству основного компонента (обычно цемента, полимера, обозначенного без потери общности индексом  $q$ ), принимаемого за единицу,

$$P_1/P_q : \dots : P_i/P_q : \dots : P_{q-1}/P_q =$$

$$= v_1/v_q : \dots : v_i/v_q : \dots : v_{q-1}/v_q = X_1 : \dots : X_i : \dots : X_{q-1}, \quad (2.14)$$

причем

$$P_q = \sum_{i=1}^q P_i / \left(1 + \sum_{i=1}^{q-1} X_i\right); \quad P_i = X_i \sum_{i=1}^q P_i / \left(1 + \sum_{i=1}^{q-1} X_i\right); \quad (2.15)$$

$$v_q = 1 / \left(1 + \sum_{i=1}^{q-1} X_i\right); \quad v_i = X_i / \left(1 + \sum_{i=1}^{q-1} X_i\right); \quad \sum_{i=1}^q v_i = 1; \quad (2.16)$$

г) относительная комбинированная рецептура с выделением ряда компонентов по п. «в» (например, наполнитель: полимер — Н : П =  $P_1 : P_q = X_1 = 2 : 1$ ) и расчленением некоторых из них по п. «б» (например, в общем количестве наполнителя доля кварца  $v_1 = 0,5$ ; андезита  $v_2 = 0,4$ ; графита  $v_3 = 0,1$ ;  $v_1 + v_2 + v_3 = 1$ ).

Соотношения (2.11...2.13) определяют рецептуру как систему с линейно связанными элементами  $0 \leq v_i \leq 1$ . Число степеней свободы в системе с  $q$  линейно связанными элементами равно  $q - 1$ \*. Ее геометрический аналог —  $(q - 1)$ -мерный симп-

\* Другие примеры систем с линейно связанными элементами: сумма продолжительности технологических операций (если зафиксировано общее время технологического цикла), сумма толщин слоев (если задана общая толщина панели), сумма проекций векторов сил (если тело находится в покое).

лекс (выпуклый многогранник, не имеющий диагональных сечений: отрезок, треугольник, тетраэдр, пентатоп).

Системы, свойства которых зависят только от соотношений  $v_i$  ( $u = v$ ), предложено [41, 45] называть системами «смесь — свойства» и обозначить  $MQ$  (от слов *mixture* — смесь и *quality* — свойство, качество). Название «состав — свойство» иногда используют для многокомпонентных систем, выход которых определяется только долями компонентов, но не зависит от общего количества смеси и других факторов.

Каждому  $j$ -му составу смеси, определяющему свойство  $Y_j$ , соответствует точка симплекса: чистым веществам — вершины, двойным системам — точки ребер, тройным смесям — точки двумерных граней и т. д. Поэтому функция  $Y(v)$  может быть представлена в виде диаграммы «состав — свойство». Для трехкомпонентных систем такое отображение наглядно — это изолинии  $Y(v_1; v_2; v_3)$  в поле треугольника. При  $q = 4$  возможно объемное изображение изоповерхностей свойства в теле тетраэдра. Его поверхность отображается разверткой из четырех треугольных диаграмм, а внутреннее пространство — набором треугольных сечений. В силу наглядности и возможностей графической интерпретации результатов моделирования *треугольная диаграмма — основной информационный элемент* при анализе многокомпонентных систем  $MQ$ .

Диаграммы «состав — свойство» широко используют в физико-химическом анализе при изучении констант смесевых систем. Технические свойства композиционных материалов (в отличие, например, от температур фазовых переходов стекол, керамики, клинкеров, металлических сплавов) определяются не только исходным составом смеси, но и условиями ее переработки в изделие. Диаграммы «состав — свойство» в этом случае могут быть построены для фиксированных уровней технологических и эксплуатационных факторов. Информационная ценность отдельной такой диаграммы ограничена.

Совместное воздействие на свойства и смесевых, взаимозависимых факторов  $v$ , и технологических, взаимонезависимых факторов  $|x| \leq 1$  можно оценить, анализируя изменения в изолиниях диаграмм «состав — свойство» под влиянием  $x_i$ ,  $i = \overline{1, p}$ . Передвигая диаграмму вдоль оси  $x_i$  в факторном пространстве и фиксируя ее в отдельных точках этой оси (в частности, при  $x = -1$ ,  $x = 0$  и  $x = +1$ ), можно оценить изменения изолиний  $Y(v) = \text{const}$  под влиянием одного фактора  $x_i$ . При непрерывном перемещении треугольной диаграммы вдоль оси  $x_i$  формируется треугольная призма, в которой изоповерхности свойства  $Y(v_1, v_2, v_3, x_i) = \text{const}$  образованы соответствующими изолиниями  $Y(v) = \text{const}$ .

Графически изобразить непрерывное изменение изолиний диаграммы «состав — свойство» под влиянием двух технологических факторов  $x$  невозможно. Поэтому предложено [72] использовать дискретный метод, при котором строят и анализируют смесевые диаграммы в фиксированных точках квадрата (в частности, в девяти точках-центроидах). Возможно обратное отображение — в точках симплекса (в частности, в семи центроидах треугольника: трех углах, трех серединах сторон и в центре тяжести) фиксируется скользящий по нему квадрат с изолиниями  $Y(x_1, x_2) = \text{const}$ .

Системы, свойства которых определяются группой смесевых и группой технологических факторов —  $u = (v^T, x^T)^T$  — названы [41, 45] системами «смесь, технология — свойства» и обозначены  $MTQ$  ( $T$  — *technology*). Аналогично, для систем, в которых все факторы взаимонезависимы ( $u = x$ ), используют название «технология — свойства» и обозначение  $TQ$ .

Не только собственно технологические факторы (температура, градиенты скорости, время процесса), но и относительные рецепторные факторы  $X_i$ , когда рецептура задается по способу «в» или «г», могут быть представлены в виде взаимонезависимых нормализованных  $|x| \leq 1$ .

В ряде задач анализа и оптимизации смесевых систем выделяются несколько подсистем с линейно связанными элементами. При этом характерны два типа содержательной постановки задачи.

А. В материаловедении, особенно при изучении влияния разных наполнителей на свойства композитов, целесообразно смесевые факторы разделять на независимые группы, связанные с разными физико-химическими признаками. Так, наполнитель может быть задан содержанием разных веществ (например,  $v_1, v_2, v_3$  — доли в наполнителе кварца, андезита и графита) и, в то же время, гранул разного размера (долями  $\omega_1$  — «мелких» частиц,  $\omega_2$  — «средних»,  $\omega$  — «крупных» частиц или кварца, или андезита, или графита). Подобные так называемые амфисмеси с разных сторон представляют один и тот же объект (в частности, наполнитель КМ). Для такой системы двух групп смесевых факторов

$$\left. \begin{aligned} 0 \leq v_i \leq 1, \quad i = \overline{1, q_1}; \\ 0 \leq \omega_j \leq 1, \quad j = \overline{1, q_2}; \\ \sum_{i=1}^{q_1} v_i = 1, \quad \sum_{j=1}^{q_2} \omega_j = 1; \\ \sum_i v_i \left( \sum_j \omega_j \right) = \sum_j \omega_j \left( \sum_i v_i \right) = 1. \end{aligned} \right\} \quad (2.17)$$

Б. Компоненты изучаемой смеси (например, смеси полимеров) могут быть, в свою очередь, смесями «подкомпонентов». Тогда система смесевых факторов определяется условиями

$$\left. \begin{aligned} 0 \leq c_i \leq 1, \quad i = 1, \dots, q; \quad \sum c_i = 1, \\ 0 \leq v_{ij} \leq 1, \quad j = 1, \dots, q_i; \quad \sum_j v_{ij} = 1 \text{ для любого } i; \\ \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^{q_i} V_{ij} = 1, \end{aligned} \right\} (2.18)$$

где  $c_i$  — содержание (доля, концентрация) в смеси  $i$ -го компонента;  $v_{ij}$  — содержание в  $i$ -м компоненте (в  $i$ -й «подсмеси»)  $j$ -го подкомпонента;  $V_{ij} = c_i v_{ij}$  — доля  $j$ -го подкомпонента в смеси.

Если в примере к случаю А размеры частиц будут разными для разных минералов, то такой наполнитель можно рассматривать как смесевую систему с «подкомпонентами». Задача ЭС-моделирования таких систем рассматривалась в [120] для случая смеси двух составных компонентов при их фиксированном соотношении. При таких ограничениях, после нормировки по  $c_i$

равенств  $\sum_{j=1}^{q_i} c_i v_{ij} = c_i$  и введения обозначения  $w_j = v_{2j}$ , условия

$\sum_{j=1}^{q_1} v_j = 1$  и  $\sum_{j=1}^{q_2} w_j = 1$  также определяют систему с двумя группа-

ми смесевых факторов. Однако такие «подсмеси» в отличие от «амфисмесей» (2.17) представляют разные объекты (разные минеральные компоненты наполнителя), возможно и характеризую их по одному и тому же признаку (по дисперсности частиц). Другой пример для подобного описания — это смесь в наполнителе стеклянных волокон нескольких размеров ( $v_1$  — доля «коротких»,  $v_2$  — «средних»,  $v_3$  — «длинных» волокон) и смесь порошков разной дисперсности ( $w_1$  — доля «мелких» частиц,  $w_2$  — «средних»,  $w_3$  — «крупных»). Этот пример соответствует записи рецептуры по способу «г» при фиксированном количестве волокон, порошков, полимерной и других составляющих в композиции.

Системы, свойства которых определяются действием нескольких групп линейно связанных переменных (амфисмесей, подсмесей), но не зависят от факторов  $x$  (количества смеси, других технологических факторов), могут быть названы [45, 72] системами «смеси — свойства» и обозначены  $M_1 \dots M_S Q$  ( $S$  — число смесей).

Системами «смеси, технология — свойства», обозначенными



$M_I \dots M_S T Q$ , назван наиболее общий случай представления смешевых технологических систем, содержащих несколько групп линейно связанных (смесевых) и группу взаимонезависимых (технологических) факторов. Для композитов это, как правило, химический и дисперсионный составы наполнителей, компоненты матрицы и другие смеси при взаимонезависимом варьировании параметров технологии, в том числе относительного содержания компонентов (например, отношения наполнитель : полимер). На практике целесообразно при формулировке регрессионных задач ограничиться рассмотрением двух смесевых подсистем. Для анализа и оптимизации систем «смесь I, смесь II, технология — свойства» разработаны [41, 44, 45, 72] методические и программные средства, рассматриваемые в данной главе.

Полный вектор факторов в системе с учетом верхних  $g$  и нижних  $h$  границ варьирования факторов записывается как

$$\left. \begin{aligned}
 u &= (v^T, w^T, x^T)^T; \quad v = (v_1, v_2, \dots, v_{q_v})^T; \\
 w &= (w_1, w_2, w_3, \dots, w_{q_w})^T, \quad x = (x_1, x_2, \dots, x_p)^T, \\
 v \in \Omega_v &= \left\{ \sum_{i=1}^{q_v} v_i = 1; 0 \leq g_{vi} \leq v_i < h_{vi} \leq 1 \right\} \subset R^{q_v-1}; \\
 w \in \Omega_w &= \left\{ \sum_{i=1}^{q_w} w_i = 1; 0 \leq g_{wi} \leq w_i \leq h_{wi} \leq 1 \right\} \subset R^{q_w-1}; \\
 x \in \Omega_x &= \{-1 \leq x_i \leq 1, i = \overline{1, p}\} \subset R^p; \\
 u \in \Omega_u &= \Omega_v \otimes \Omega_w \otimes \Omega_x \subset R^{k-2}; \quad k = q_v + q_w + p.
 \end{aligned} \right\} \quad (2.19)$$

Фиксирование переменных в (2.19), а также сверка информации по группам переменных к наборам числовых обобщающих показателей  $G$  (см. табл. 1.4) приводит к системам  $M_I M_{II} Q$ ,  $MTQ$ ,  $MQ$ ,  $TQ$ . Иерархия факторных систем, рассматриваемых при моделировании композитов, по уровню их структурной сложности показана на рис. 2.1, а. При этом из наиболее общего случая факторной области следуют частные области и их декартовы произведения. Для  $q_v \leq 3$ ;  $q_w \leq 3$  и  $p \leq 2$  варианты полных факторных областей показаны на рис. 2.1, б в виде 27 ячеек в трехкоординатной системе. В ячейке 1 факторное пространство «вырождено» в точку — материал зафиксирован по составу ( $v_i = \text{const}$ ;  $w_i = \text{const}$ ) и по технологии ( $x_i = \text{const}$ ). Отрезок прямой 2 и

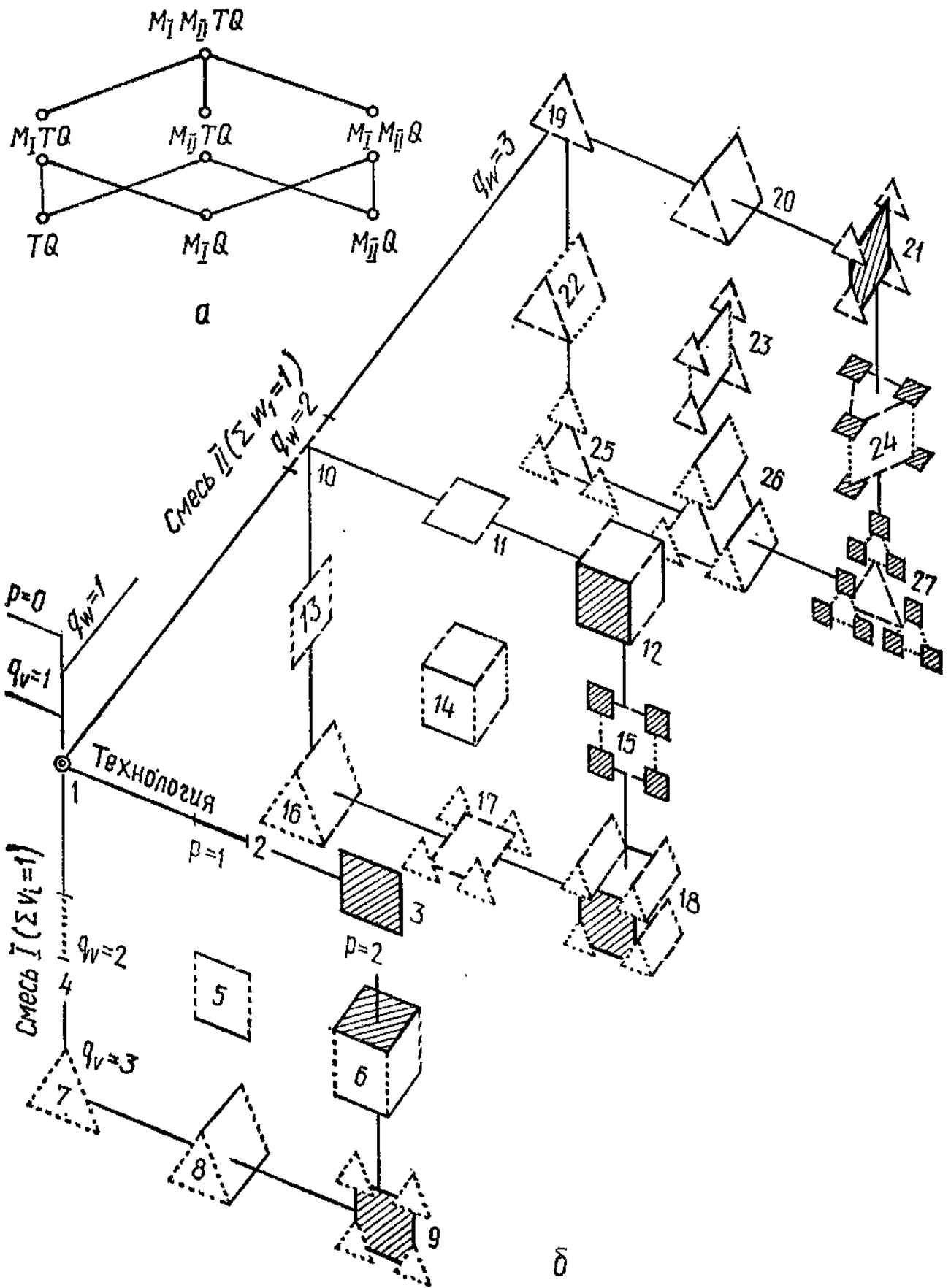


Рис. 2.1. Иерархия подсистем в системе «смесь I, смесь II, технология — свойства» (а) и отображение их факторных областей (б) в трехмерном пространстве «структура вектора факторов»

квадрат 3 — области варьирования одного и двух независимых факторов. В ячейках 4 (10) и 7 (19) расположены базы двух- ( $v_1 + v_2 \leq 1$  или  $w_1 + w_2 \leq 1$ ) и трехкомпонентной диаграмм.

Факторная область для системы  $M_I M_{II} Q$  при  $q_{v(w)} = 3$  показана в ячейке 25. Если часть смесевых факторов зафиксирована, то она «вырождается» в призму (16 — при одном  $w_i = \text{const}$ , 22 — при одном  $v_i = \text{const}$ ) или в квадрат (13 — по одному фиксированному  $v_i$  и  $w_i$ ).

Факторная область для системы  $MTQ$  наиболее полно отражена в ячейках 9 (для  $M_I$ ) и 21 (для  $M_{II}$ ) — это треугольники на квадрате. Уменьшение размерности по смесевым переменным ведет от 9 к 6 (от 21 к 12), а по независимым переменным — от 9 к 8 (от 21 к 20) и т. д.

Области системы  $M_I M_{II} TQ$  представлены в ячейках 27, 26 (уменьшено число независимых переменных), 18, 24 (уменьшено число переменных в одной из смесей), 15, 17, 23, 14 (продолжение последовательного «вырождения»).

Анализируют классы факторных систем ( $TQ$ ,  $MQ$ ,  $MTQ$ ,  $M_I M_{II} Q$ ,  $M_I M_{II} TQ$ ), представляющих те или иные стороны объекта моделирования (композиционных материалов), на основе регрессионных функций (моделей) по результатам решения заданной условиями (2.2), (2.4) регрессионной задачи. Как правило, функция  $F(u, \theta)$  при формулировке регрессионных задач задается в виде полиномов разных классов (нередко с использованием преобразования переменных [72]).

Для задач, в которых варьируются факторы только одной из трех подсистем, используют приемы планирования и анализа эксперимента на кубе (см. ось 1—2—3 на рис. 2.1, б — при исследовании «технология») или симплексе (оси 1—4—7 и 1—10—19 — для диаграмм «состав — свойство»). Вид функций отклика для системы  $TQ$  — обычный полином (2.20), как правило, не выше второй степени.

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2 + \dots + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \dots \quad (2.20)$$

В ряде задач при наличии информации о характере влияния на отклик отдельных факторов к уравнению типа (2.20) могут быть добавлены эффекты третьего порядка  $b_{iii} x_i^3$ ;  $b_{ijl} x_i x_j x_l$ ;  $b_{iii} x_i^3$  или четвертой степени. Полный полином степени  $n$  от  $k$  факторов содержит  $C_{k+n}^n$  коэффициентов.

Применение полиномов вида (2.20) для описания  $q$ -компонентной системы возможно при двух вариантах записи факторов, использующих один из компонентов как базовый:

а) в качестве  $x_i$  рассматривают доли  $v_i$  для  $(q - 1)$  компонентов, а  $v_q$  определяют как  $\left(1 - \sum_{i=1}^{q-1} v_i\right)$ ;

б) вводят факторы-отношения (2.14).

Переход к взаимонезависимым факторам при описании смесей осуществляется в тех случаях, когда система «существует» только при наличии всех компонентов\*, а их содержание изменяется в узких пределах.

Недостаток обоих способов —  $q$ -й компонент не отражается моделью, хотя его содержание (2.15), (2.16) изменяется при варьировании  $x_i$ . В результате эффект влияния  $v_q$  «размазывается» по коэффициентам при других факторах. Кроме того, первый способ применим при узких диапазонах варьирования  $v_i$ , а второй не позволяет исследовать рецептуру при  $v_q \rightarrow 0$  поскольку  $x_i = v_i/v_q \rightarrow \infty$ . Использование же обычных полиномов от  $q$  факторов  $v_i$  невозможно, так как при линейной зависимости переменных полином (2.20) не представляет систему базисных (линейно независимых) функций, что приводит к неопределенному решению регрессионной задачи.

Свойства смесей в системах  $MQ$  в широком диапазоне изменения содержания компонентов чаще всего описывают *приведенными полиномами Шеффе* — функциями относительно всех  $q$  переменных  $v_i$  [6, 56, 77, 103, 106]. Приведенная форма полинома получается [6, 56] из обычного полинома от  $q$  переменных с учетом их линейной связи (2.13) и содержит  $C_{q+n-1}^n$  коэффициентов для  $n$ -й степени. На практике используются регрессионные уравнения в виде полиномов Шеффе до четвертой степени, наиболее часто — второго (2.21), неполного третьего (2.22) и третьего порядка (2.23)\*\*:

$$Y_{(2.21)} = \sum_{i=1}^q A_i v_i + \sum_{i < j} A_{ij} v_i v_j \quad (2.21)$$

---

\* Так,  $v_i \neq 0$  в системе «цемент, песок, вода» цементно-песчаного раствора.

\*\* В формулах использованы нетипичные обозначения оценок коэффициентов для удобства их записи в моделях более сложных смесевых систем  $MTQ$ ,  $M_I M_{II} Q$ ,  $M_I M_{II} TQ$ .

$$Y_{(2.22)} = Y_{(2.21)} + \sum_{i < j < l} A_{i,j,l} v_i v_j v_l; \quad (2.22)$$

$$Y_{(2.23)} = Y_{(2.22)} + \sum_{i < j} A_{i-j} v_i v_j (v_i - v_j). \quad (2.23)$$

Коэффициенты в моделях Шеффе имеют простой *физический смысл*: оценки  $A_i$  при линейных элементах равны показателю свойства смеси, в которой присутствует только  $i$ -й «чистый» компонент. Оценки при остальных элементах характеризуют степень нелинейности (неаддитивности) изменения свойства при смешивании компонентов и отражают синергизм или антагонизм по отношению к данному свойству смеси системы.

Для описания поверхностей отклика в системах  $MQ$  предложен ряд других видов моделей, которые пока не нашли широкого применения. Это однородные полиномы [6], модели неполиномиального типа в специальных случаях [103], когда модели Шеффе не позволяют адекватно описать зависимости свойства от состава.

Если ограничения  $g_i$  и  $h_i$  на смеси факторы задают относительно узкие интервалы их варьирования ( $h_i \dots g_i$ ) и область действия — некоторая малая часть симплекса, то возникают трудности с получением МНК-оценок моделей  $Y(\vartheta)$ , так как из-за плохой обусловленности системы нормальных уравнений (при любом расположении экспериментальных точек в  $\Omega_\vartheta$ ) и ограниченной разрядности ЭВМ теряется точность вычислений. В этих случаях для улучшения обусловленности информационной матрицы необходимы такие преобразования переменных, в результате которых область экспериментирования охватывала бы большую часть факторной области в новой системе координат. В зависимости от конфигурации исходной области  $\Omega_\vartheta$  и содержательной постановки задачи это осуществляется переходом либо к взаимонезависимым переменным, либо к новой системе линейно связанных переменных. В последнем случае выбирают  $q$  составов  $m_1 = (v_1^{(1)}, v_2^{(1)}, \dots, v_q^{(1)})$ ,  $m_2 = (v_1^{(2)}, v_2^{(2)}, \dots, v_q^{(2)})$ , ...,  $m_q = (v_1^{(q)}, v_2^{(q)}, \dots, v_q^{(q)})$ , соответствующих точкам исходного симплекса, которые принимают за самостоятельные *псевдокомпоненты* [6, 56, 103]. Эти, прилегающие к области  $\Omega_\vartheta$  или принадлежащие ей, точки образуют локальный симплекс (в общем случае неправильный, меньшего объема, внутренний по отношению к исходному полному симплексу). Для долей псевдокомпонентов  $m_i$  во всей области локального симплекса выполняется условие

$$\sum_{i=1}^q m_i = 1; \quad 0 \leq m_i \leq 1,$$

которое задает полный правильный симплекс в новой системе координат. Такой новый симплекс  $\Omega_m$  (или объединение нескольких подобных симплексов, как в [90]) накрывает область экспериментирования  $\Omega_v$ . Функция отклика для пересечения  $\Omega_m$  с  $\Omega_v$  записывается в виде полинома Шеффе от переменных  $m_i$ . Модели с псевдокомпонентами использованы в § 5.3.

Если исследуют факторы из двух или трех подсистем, то в общем случае в качестве полиномиальных моделей можно использовать *произведения* (с разным числом сомножителей) обычных и приведенных *полиномов*. Модели-произведения на практике могут содержать большое число незначимых членов высокого порядка и тогда, будучи слишком громоздкими при реальном числе факторов, требуют неоправданно большого числа экспериментальных точек для оценки значимых параметров. Поэтому разработаны приведенные формы полиномов, включающих факторы из разных подсистем.

Для областей действия типа призмы  $\Omega_u = \Omega_v \otimes \Omega_x$  (см. (2.19) и точки 8; 20 и 9; 21 на рис. 2.1, б), образуемых при изучении систем *MTQ*, используют приведенные полиномы [103, 106, 112] от группы линейно зависимых и независимых факторов. К этим формам полинома приводится обычный полином от  $k = q + p$  переменных при подстановке в него равенств, следующих из линейной связи  $q$  факторов:

$$\left. \begin{aligned} 1 &= \sum_{i=1}^q v_i; & v_i^2 &= v_i - \sum_{\substack{1 \leq j \leq q \\ l \neq j}} v_l v_j; \\ v_i^3 &= v_i - \frac{1}{2} \sum_{\substack{1 \leq j \leq q \\ j \neq i}} \left[ 3v_i v_j + v_i v_j (v_i - v_j) - \sum_{\substack{1 \leq l \leq q \\ l \neq i, j}} v_l v_j v_l \right]; \\ v_i^2 v_j &= \frac{1}{2} \left[ v_i v_j + v_i v_j (v_i - v_j) - \sum_{\substack{1 \leq l \leq q \\ l \neq i, j}} v_l v_j v_l \right]; \end{aligned} \right\} \quad (2.24)$$

$$\left. \begin{aligned} x_i &= x_i \sum_{j=1}^q v_j; & x_i^2 &= x_i^2 \sum_{j=1}^q v_j; \\ x_i x_j &= x_i x_j \sum_{l=1}^q v_l; & x_i v_j^2 &= x_i v_j - x_i \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq j}}^q v_l v_l. \end{aligned} \right\} \quad (2.25)$$

Приведенные полиномы *MTQ* второй степени, неполной третьей относительно смесевых переменных и третьей записывают как

$$Y_{(2.26)} = Y_{(2.21)} + \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^q D_{ij} v_i x_j + \sum_{i=1}^p b_{ii} x_i^2 + \sum_{1 \leq i < j \leq p} b_{ij} x_i x_j; \quad (2.26)$$

$$Y_{(2.27)} = Y_{(2.26)} + \sum_{1 \leq i < j < l \leq q} A_{ijl} v_i v_j v_l; \quad (2.27)$$

$$Y_{(2.28)} = Y_{(2.23)} + \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^q D_{ij} v_i x_j + \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^q D_{ijj} v_i x_j^2 + \sum_{1 \leq j < l \leq p} \sum_{i=1}^q D_{i(jl)} v_i x_j x_l + \sum_{i=1}^p \sum_{1 \leq i < j \leq q} D_{(i)j} v_i v_j x_l + \sum_{1 \leq i \neq j \leq p} b_{ij} x_i^2 x_j + \sum_{1 \leq i < j < l \leq p} b_{ijl} x_i x_j x_l + \sum_{i=1}^p b_{iii} x_i^3. \quad (2.28)$$

Приведенный полином  $n$ -й степени относительно  $q$  линейно связанных факторов и  $p$  взаимонезависимых содержит  $C_{q+p+n-1}^n$  коэффициентов. Коэффициенты  $A$  в моделях (2.26) ... (2.28) соответствуют коэффициентам приведенных полиномов Шеффе вида (2.21) ... (2.23), описывающих систему «смесь — свойство» при  $x = 0$ :  $A_i$  определяют в центре области технологических факторов значение свойства системы, когда в смеси присутствуют только  $i$ -й компонент.  $A_{i,j}$ ,  $A_{i-j}$ ,  $A_{i,jk}$  характеризуют нелинейность изменения свойства при смешивании компонентов. Коэффициенты  $D$  и  $b$  характеризуют изменение коэффициентов  $A$  при изменении  $x$ . Так, в (2.26)

$$A_i + \sum_{j=1}^p D_{ij} x_j + \sum_{j=1}^p b_{jj} x_j^2 + \sum_{j < l} b_{jl} x_j x_l = A\{x\}. \quad (2.29)$$

Если функция отклика в системе  $MTQ$  задается произведением приведенного полинома от  $v$  и полинома от  $x$ , то ее удобно представить в форме полинома от факторов одной группы, коэффициенты которого — функции другой группы факторов. Так, в случае  $q = 3$ ,  $p = 1$  модель — произведение полиномов 2-го порядка по каждой из подсистем удобно записать в виде

$$Y = (b_{0.A_1} + b_{1.A_1} x + b_{11.A_1} x^2) v_1 + (b_{0.A_2} + b_{1.A_2} x + b_{11.A_2} x^2) v_2 + \dots + (b_{0.A_{23}} + b_{1.A_{23}} x + b_{11.A_{23}} x^2) v_2 v_3. \quad (2.30)$$

Функции в скобках характеризуют изменения свойств чистых компонентов и проявлений синергизма или антагонизма в смесевой системе в зависимости от технологического фактора. В подобных моделях каждый коэффициент полинома от смесевых переменных превращается из числовой оценки в функцию независимых факторов.

Фиксируя  $x$  в моделях  $MTQ$ , можно получить для любого набора значений технологических факторов с учетом (2.29) набор моделей  $MQ$ , описывающих набор изменяющихся диаграмм «состав — свойство». Зафиксировав смесевые переменные, можно получить обычный полином от  $x$  (2.20), описывающий изменения свойства системы определенного состава под влиянием независимых рецептурно-технологических факторов ( $TQ$ ).

Очевидно, при формулировке регрессионной задачи в запись вида модели, т. е. полиномов (2.26) ... (2.28) или произведения полиномов, могут быть не включены отдельные члены высокого порядка в соответствии с априорными данными о характере связи свойства с рецептурой и технологией.

Для систем  $M_I M_{II} Q$  и факторов областей  $\Omega_u = \Omega_v \otimes \Omega_w$ , названных «симплекс на симплексе» («треугольник на треугольнике», см. 25 на рис. 2.1, б), также разработаны приведенные полиномы [112]. Они получены из обычного полинома от  $k = q_v + q_w$  переменных с использованием подстановок (2.24), (2.31).

$$\left. \begin{aligned} v_i &= v_i \sum_{j=1}^{q_w} w_j, & w_i &= w_i \sum_{j=1}^{q_v} v_j, \\ v_i^2 &= v_i \sum_{j=1}^{q_w} w_j - v_i \sum_{j=1, j \neq i}^{q_v} v_j, \\ w_i^2 &= w_i \sum_{j=1}^{q_v} v_j - w_i \sum_{j=1, j \neq i}^{q_w} w_j, \\ 1 &= \sum_{i=1}^{q_v} \sum_{j=1}^{q_w} v_i w_j. \end{aligned} \right\} \quad (2.31)$$

Приведенные полиномы второй и третьей степеней от двух групп линейно зависимых переменных имеют вид

$$Y = \sum_{i=1}^{q_v} \sum_{j=1}^{q_w} C_{ij} v_i w_j + \sum_{1 \leq i < j \leq q_v} A_{ij} v_i v_j + \sum_{1 \leq i < j \leq q_w} B_{ij} w_i w_j; \quad (2.32)$$



$$\begin{aligned}
Y = & \sum_{i=1}^{q_v} \sum_{j=1}^{q_w} C_{ij} v_i \omega_j + \sum_{1 \leq i < j \leq q_v} \sum_{l=1}^{q_w} C_{(ij)l} v_i v_j \omega_l + \\
& + \sum_{i=1}^{q_v} \sum_{1 \leq j < l \leq q_w} C_{i(jl)} v_i \omega_j \omega_l + \sum_{1 \leq i < j < l \leq q_v} A_{ijl} v_i v_j v_l + \\
& + \sum_{1 \leq i < j \leq q_v} A_{i-j} v_i v_j (v_i - v_j) + \sum_{1 \leq i < j < l \leq q_w} B_{ijl} \omega_i \omega_j \omega_l + \\
& + \sum_{1 \leq i < j < q_w} B_{i-j} \omega_i \omega_j (\omega_i - \omega_j), \quad (2.33)
\end{aligned}$$

а в общем случае степени  $n$  содержат  $C_{q_v+q_w+n-2}^n$  коэффициентов.

Для построения таких моделей требуется значительно меньше опытов в эксперименте, чем для оценки  $(C_{q_v+n-1}^n) \cdot (C_{q_w+n-1}^n)$  коэффициентов произведения двух полиномов Шеффе. В частности, если  $q_v = q_w = 3$ , модель (2.32) записывают

$$\begin{aligned}
Y = & C_{11} v_1 \omega_1 + C_{12} v_1 \omega_2 + C_{13} v_1 \omega_3 + \\
& + C_{21} v_2 \omega_1 + C_{22} v_2 \omega_2 + C_{23} v_2 \omega_3 + \\
& + C_{31} v_3 \omega_1 + C_{32} v_3 \omega_2 + C_{33} v_3 \omega_3 + \\
& + A_{12} v_1 v_2 + A_{13} v_1 v_3 + A_{23} v_2 v_3 + \\
& + B_{12} \omega_1 \omega_2 + B_{13} \omega_1 \omega_3 + B_{23} \omega_2 \omega_3. \quad (2.34)
\end{aligned}$$

Произведение двух полиномов (2.21) содержит  $L = C_{3+2-1}^2 C_{3+2-1}^2 = 6 \cdot 6 = 36$ , а приведенный полином (2.34)  $L = C_{3+3+2-2}^2 = 15$  членов, что при насыщенном планировании эксперимента обеспечивает снижение расхода ресурсов в 2,4 раза.

Коэффициенты  $C_{ij}$  в (2.32) ... (2.34) соответствуют уровню свойства системы, когда в «смеси I» присутствует только  $i$ -й компонент, а в «смеси II» — только  $j$ -й. Так, если  $v_1$  — доля кварца, а  $\omega_2$  — доля «средних» частиц в наполнителе, то  $C_{12}$  определит свойство материала с кварцевым наполнителем средней крупности. Коэффициенты  $C_{ijl}$  в (2.33) учитывают нелинейность смешивания компонентов в одной из смесей для «чистых» компонентов другой смеси. Так, для используемого ранее примера  $C_{(12)2}$  определит эффект смешивания «средних» частиц кварца и андезита,

а в примере с «подсмесями» — эффект смешивания «коротких» и «средних» волокон при «средней» дисперсности порошков. Коэффициенты  $A$  и  $B$  характеризуют нелинейность изменения свойства при смешивании компонентов независимо в смесях I и II.

Для областей действия  $\Omega_u = \Omega_v \otimes \Omega_w \otimes \Omega_x$ , показанных в точках 26 и 27 на рис. 2.1, б, систем  $M_I M_{II} TQ$  с помощью подстановок (2.24; 2.25; 2.31) получены приведенные полиномы неполной третьей степени:

$$Y_{(2.35)} = \sum_{j>i=1}^{q_v} A_{ij} v_i v_j + \sum_{j>i=1}^{q_w} B_{ij} w_i w_j + \sum_{i=1}^{q_v} \sum_{j=1}^{q_w} \left( C_{ij} + \right. \\ \left. + \sum_{l=1}^p R_{ijl} x_l \right) v_i w_j + \sum_{j=1}^p b_{ii} x_i^2 + \sum_{j>i=1}^{q_v} b_{ij} x_i x_j; \quad (2.35)$$

$$Y_{(2.36)} = Y_{(2.35)} + \sum_{l=1}^p \left( \sum_{j>i=1}^{q_v} P_{ijl} v_i v_j + \sum_{j>i=1}^{q_w} Q_{ijl} w_i w_j \right) x_l. \quad (2.36)$$

Функции (2.35) и (2.36) сводятся к приведенным полиномам  $M_I M_{II} Q$  (2.32) при фиксации  $x$  (с внесением образующегося «свободного члена» в коэффициенты  $C_{ij}$  при членах  $v_i w_j$ ), к приведенным полиномам  $MTQ$  (2.26) при фиксации  $v$  или  $w$  и т. д. Коэффициенты  $R$ ,  $P$ ,  $Q$  отражают линейное изменение соответствующих параметров модели  $M_I M_{II} Q$  в зависимости от  $x$ .

Если анализ априорных данных не позволяет принять гипотезу о подобной линейной связи, то, с учетом возможности организации эксперимента для описания систем «смесь I, смесь II, технология — свойства», целесообразно использовать модели в виде произведения приведенного полинома от смешевых переменных, в частности (2.34), и обычного полинома от взаимонезависимых факторов. Такие модели удобно записывать в виде

$$Y = (b_{0.C_{11}} + b_{1.C_{11}} x_1 + b_{11.C_{11}} x_1^2 + \dots + b_{12.C_{11}} x_1 x_2 + \dots) v_1 w_1 + \\ + (b_{0.C_{12}} + b_{1.C_{12}} x_1 + b_{11.C_{12}} x_1^2 + \dots + b_{12.C_{12}} x_1 x_2 + \dots) v_1 w_2 + \\ + \dots + (b_{0.B_{23}} + b_{1.B_{23}} x_1 + b_{11.B_{23}} x_1^2 + \dots + \\ \dots + b_{12.B_{23}} x_1 x_2 + \dots) w_2 w_3. \quad (2.37)$$

Функции в скобках описывают изменение модели  $M_I M_{II} Q$  под влиянием взаимонезависимых факторов рецептуры и технологии. При подстановке в модель  $M_I M_{II} TQ$ , в частности в (2.37), фиксированных значений тех или иных факторов получаются все рассмотренные выше виды моделей, описывающие более простые по структуре и размерности системы, показанные на рис. 2.1.

В сравнении с произведениями трех полиномов при описании систем  $M_I M_{II} TQ$  использование моделей типа (2.37), если это не противоречит априорным данным, обеспечивает значительную экономию опытов. Если  $q_v = q_w = 3$  и  $p = 1$ , модель с тремя сомножителями-полиномами второй степени содержит  $L = 6 \times 6 \cdot 3 = 108$  членов, а для функции (2.38)  $L = 15 \cdot 3 = 45$

$$\begin{aligned}
 Y = & (b_{0.C_{11}} + b_{1.C_{11}}x + b_{11.C_{11}}x^2) v_1 \omega_1 + \\
 & + (b_{0.C_{12}} + b_{1.C_{12}}x + b_{11.C_{12}}x^2) v_1 \omega_2 + \dots \\
 & \dots (b_{0.B_{23}} + b_{1.B_{23}}x + b_{11.B_{23}}x^2) \omega_2 \omega_3. \quad (2.38)
 \end{aligned}$$

Рассмотренные полиномиальные модели систем «смеси, технология—свойства» и их подсистем задают функции  $Q(u)$  и  $G(u)$  при формулировании и решении задач анализа и оптимизации КМ.

### 2.3. АЛГОРИТМ ОПТИМИЗАЦИИ СИСТЕМ, СОДЕРЖАЩИХ ЛИНЕЙНО СВЯЗАННЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ

Формулируемые в содержательных терминах (см. схему 2.1, блок 2) задачи оптимизации структуры и технико-экономических показателей качества КМ, а также оптимизационные задачи их экспериментального исследования в математических терминах (см. схему 2.1, блок 3) записываются как задачи *нелинейного программирования* [20, 70, 86]: найти вектор  $u^*$ , при котором

$$\varphi(u^*) = \min_{u \in \Omega} \varphi(u), \quad (2.39)$$

где  $\varphi$  — критерий оптимальности, в общем случае нелинейная целевая функция  $u$ ;  $\Omega$  — допустимая область решений в виде

$$\Omega = \Omega_u \cap \{u : H_j(u) \geq 0, j = \overline{1, K}\}, \quad (2.40)$$

$\Omega_u$  — область определения  $\varphi$  с учетом прямых ограничений  $g_i \leq u_i \leq h_i$ , ( $i = \overline{1, K}$ );  $H_j(u)$  — функциональные нелинейные ограничения\*.

\* В частном случае, когда линейны целевая функция и все ограничения, имеет место задача линейного программирования [20], не характерная при оптимизации технологии и свойств КМ.

Структура вектора  $u$  и области  $\Omega_u$  определены в разделе 2.2. При синтезе планов эксперимента целевая функция и возможные ограничения детерминированы, а в задачах оптимизации композитов по регрессионным моделям они могут быть статистическими, на что необходимо обращать внимание при оценке точности получаемых инженерных решений, особенно конкурирующих [19]. Критерием оптимальности может быть и один из показателей качества (тогда целевая функция — одна из моделей  $\hat{Y}(u)$ ), и функция от нескольких показателей (тогда  $\varphi(u)$  — функционал от нескольких моделей), и уровень одного из факторов (тогда  $\varphi(u) = u_i$ ). Аналогично могут быть заданы ограничения  $H(u)$ . В любом случае при статистической постановке задачи отыскивают точечную оценку оптимума, заключенную в многомерном доверительном эллипсоиде (единственность решения можно проверить с использованием  $t$ -критерия — см. гл. 1 и [72]).

В общем случае задача (2.39), (2.40) решается с помощью численных методов поиска экстремума — методов условной и безусловной оптимизации [20, 49, 70, 86, 91]. Последние использу-

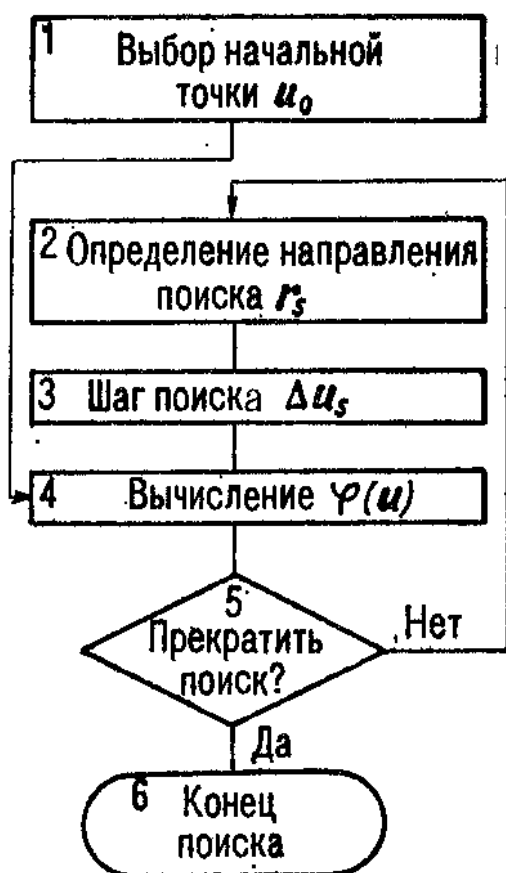


Схема 2.3. Блок-схема обобщенного метода поиска оптимума

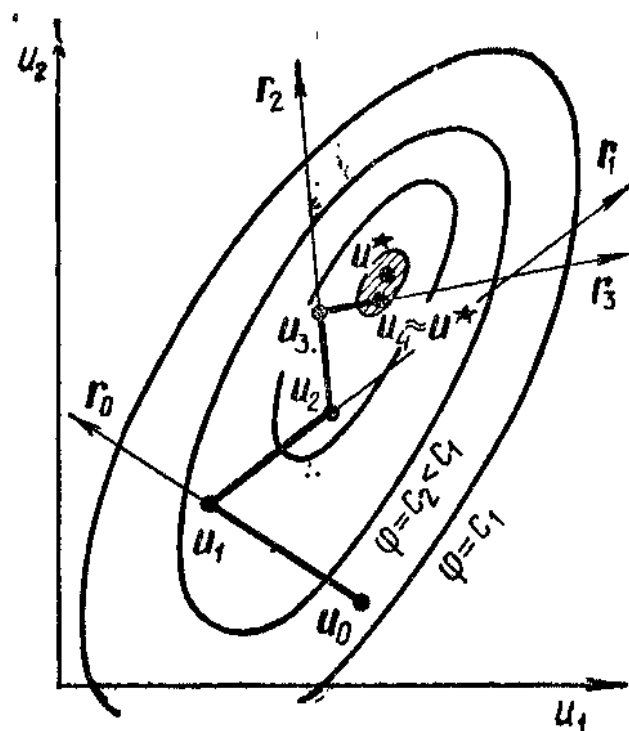


Рис. 2.2. Графическое отображение поиска оптимума

ют, когда в постановке задачи отсутствуют прямые и функциональные ограничения или когда к такой постановке может быть сведена исходная задача (2.39), (2.40). В любом случае при поиске оптимума строят последовательность шагов от некоторой начальной точки  $u_0$  в допустимой области через промежуточные точки  $u_s$  к экстремуму  $u^*$ , как правило, локальному (глобальный оптимум оценивают за счет многократного поиска из разных  $u_0$ ). На схеме 2.3 показан такой обобщенный метод [70], а на рис. 2.2 — пример графического отображения задачи поиска в простейшем двумерном случае без ограничений. Целевая функция  $\varphi(u)$  представлена линиями равного уровня в плоскости факторов  $u_1, u_2$ , заштрихованная область — окрестность цели, в которой

$$\varphi(u) < \varphi(u^*) + \varepsilon, \quad (2.41)$$

где  $\varepsilon$  — заданное малое число.

Задача поисковой оптимизации заключается в отыскании такого пути, двигаясь вдоль которого точка  $u$  пришла бы от  $u_0$  в достаточно малую окрестность цели  $u^*$ , в которой выполняется условие (2.41). Выбор начального приближения к оптимуму (первый этап) в значительной степени определяет скорость и вероятность его достижения. Очередной шаг  $\Delta u_s$  из некоторой точки  $u_s$  на траектории поиска (начиная от  $u_0$ ) осуществляется в направлении  $r_s = (r_{1s}, r_{2s}, \dots, r_{ks})^T$  так, что каждая координата  $u_{is}$  получает приращение  $\alpha_s r_{is}$ . Второй и третий этапы алгоритма поиска — выбор направления  $r_s$  движения к оптимуму и скалярной величины  $\alpha_s$  для вычисления координат очередной точки  $u_{s+1} = u_s + \{\Delta u_s = \alpha_s r_s\}$  — определяют сущность того или иного метода поиска, в процессе которого собирается информация об успехе движения к оптимуму. Значения целевой функции  $\varphi(u_s)$  и функций ограничений  $H_j(u_s)$ , вычисляемые на четвертом этапе, обуславливают следующий шаг поиска, который продолжается или прекращается в зависимости от выполнения назначенных условий остановки, в частности, обеспечивающих неравенство (2.41).

Эффективность тех или иных методов поисковой оптимизации (которая характеризуется прежде всего скоростью и точностью) связана с видом целевой функции и допустимой области, размерностью задачи, разрядностью ЭВМ, на которой реализуются вычисления, и с другими факторами. Некоторые практические рекомендации по выбору метода решения задач нелинейного программирования в зависимости от конкретной постановки (характера функций  $\varphi$  и  $H$ , их числа, размерности пространства поиска, требований точности и «стоимости» решения и других условий)

можно найти в работах [23, 49, 65, 86, 91]. Наиболее *эффективный инструмент* решения сложных оптимизационных задач — *программная система*, которая содержит библиотеку модулей, реализующих *разные методы* оптимизации, и позволяет исследователю *адаптировать алгоритм* поиска к текущим условиям задачи в процессе ее решения: либо *в режиме диалога* (если исследователь — специалист по методам оптимизации), либо с использованием *автоматизированного пакета* программ [49].

Рассматриваемая технология применения ЭВМ при исследовании и проектировании КМ также должна быть обеспечена набором разных алгоритмов оптимизации (в том числе для решения вспомогательных вычислительных задач), основные описаны в [20].

Учет условий и особенностей того или иного класса конкретных задач оптимизации позволяет создавать эффективные специальные процедуры для их решения. Так, для поиска оптимума квадратичной функции на единичном  $k$ -мерном кубе удобен диссоциативно-шаговый метод [19, 20, 72]. Особенность области  $\Omega_u$  (2.19) в задаче (2.39), (2.40) при наличии линейных связей аргументов  $\sum v_i = 1$  и  $\sum w_i = 1$  обусловила необходимость разработки *специального алгоритма оптимизации смесевых систем*.

Алгоритм использует принципы «комплекс-метода Бокса» [86], который особенно эффективен при большом числе  $K$  неравенств  $H_j(u) \geq 0$ , но ограничен случаем поиска условного экстремума на выпуклом непрерывном множестве точек с кубической основой (когда область  $\Omega_u$  представлена гиперкубом  $\Omega_x$ ). Разработанная модификация [26, 66] предусматривает: *линейную связь аргументов* (2.19) и возможную *невыпуклость области* (2.40), вырезаемой ограничениями  $H$  из  $\Omega_u$ .

Поиск  $u^*$  осуществляется следующим образом.

1. Выбирается набор случайных точек  $u_p \in \Omega_u \subset R^l$ ,  $p = \overline{1, t}$ ;  $l \leq k = q_v + q_w + p$  — вершин комплекса ( $t = 2l$ , если  $l \leq 5$ ;  $t = l + 4$ , если  $l > 5$ )\*. Координаты  $x_i$  ( $i = \overline{1, p}$ ) случайной точки рассчитываются как (2.42), а координаты  $v_i$  ( $i = \overline{1, q_v}$ ) и  $w_i$  ( $i = \overline{1, q_w}$ ) — по формулам (2.43) ... (2.44).

$$x_i = g_i + \xi_i d_i; \quad (2.42) \quad u_i = g_i + \xi_i d_i d S^{-1}, \quad \text{при } S \geq d; \quad (2.43)$$

$$u_i = g_i + \xi_i d_i + (d - S) d_i (1 - \xi_i) \left( \sum_{i=1}^q d_i - S \right)^{-1} \quad \text{при } S < d, \quad (2.44)$$

\* Числовые значения параметров алгоритма — эмпирические [86].

где  $\xi$  — случайные числа, распределенные в интервале  $[0; 1]$ .

$$d_i = h_i - g_i; \quad d = 1 - \sum_{i=1}^q g_i; \quad S = \sum_{i=1}^q \xi_i d_i.$$

Принадлежность каждой точки  $u_\rho$  допустимой области проверяется расчетом значений всех функций  $H_j(u_\rho)$ ,  $j = \overline{1, K}$ . Если не выполняется хотя бы одно из условий  $H_j(u_\rho) \geq 0$ , данная случайная точка «отбрасывается», и на принадлежность  $\Omega$  в качестве вершины  $u_\rho$  исходного (начального) комплекса испытывается результат следующей случайной реализации точки  $u_\rho$  \*.

2. Определяется «лучшая» (2.45) и «худшая» (2.46) вершины \*\*.

$$u_\pi = \arg \min_{u_\rho} \varphi(u); \quad u_\nu = \arg \max_{u_\rho} \varphi(u). \quad (2.45), \quad (2.46)$$

3. Рассчитывается точка  $u$  — отражение вершины  $u_\nu$  (2.46) относительно центра тяжести  $c$  остальных  $t-1$  вершин

$$u = 2,3c - 1,3u_\nu. \quad (2.47)$$

Если при этом для некоторого  $i$  нарушается ограничение  $g_i \leq u_i \leq h_i$ , то в случае  $u_i \equiv x$  (нарушение по несвязанной переменной)  $i$ -й координате приписывается значение, отличающееся от граничного на величину  $\varepsilon \rightarrow 0$ ;

в случае  $u_i \equiv 0$  или  $u_i \equiv \omega$  пересчитывают значения  $u_i$  для всех  $i = i_1, \dots, i_q$

$$u_i = 0,5(u_i + c_i); \quad (2.48)$$

в другой модификации алгоритма граничное значение (с поправкой  $\varepsilon$ ) присваивается и переменным из смесевых групп; возника-

ющая при этом невязка  $\left(1 - \sum_{i=i_1}^{i_q} u_i\right)$  распределяется на остальные переменные группы.

\* В программе, выполняющей описываемую процедуру, должны быть предусмотрены остановка счета и соответствующее сообщение при непопадании случайной точки в допустимую область за заданное конечное число случайных реализаций.

\*\* Если процедуру используют для поиска максимума критерия оптимальности, то в качестве целевой функции  $\varphi(u)$  этот критерий берут со знаком минус.

При несоблюдении хотя бы одного ограничения  $H(u) \geq 0$  точка  $u$  смещается к центру  $c$ :

$$u = 0,5(u + c). \quad (2.49)$$

Если  $\varphi(u) \geq \varphi(u_v)$ , то  $u$  смещается к вершине  $u_\pi$ :

$$u = 0,5(u + u_\pi). \quad (2.50)$$

Последовательность операций вычисления  $\varphi(u)$  и проверки соблюдения ограничений  $H(u)$  определяется их сложностью — сначала выполняют наименее громоздкую операцию.

4. Вершина  $u_v$  заменяется точкой  $u$ . Затем выполняются действия, начиная с п. 2.

Таким образом, на каждом шаге поиска (п.п. 2...4) происходит *уменьшение* функции  $\varphi(u)$ . Процедура продолжается до тех пор, пока пять последовательных значений  $\varphi(u)$  не окажутся *одинаковыми* с точностью до  $\varepsilon$ , тогда  $u^* = u_\pi$ .

5. Если поиск экстремума проходит в *невыпуклой области*, может оказаться, что на некотором шаге точка  $u$  не попадает в допустимую область за конечное *число смещений* к центру  $c$ . Тогда  $\varphi(u)$  присваивается очень большое значение («штраф») так, чтобы  $\varphi(u) \gg \varphi(u_v)$ . Последнее обуславливает выполнение операции (2.50). Если после конечного числа смещений к  $u_\pi$  остается  $\varphi(u) > \varphi(u_v)$ , то точка  $u_\pi$  рассматривается как приближенная оценка экстремальной точки. Новый цикл поиска начинается с выполнения пункта «1», т. е. с нового начального комплекса.

Поиск *прекращается* либо после получения «точного» значения (по пункту «4»), либо после выполнения заданного числа циклов поиска, т. е. после получения заданного числа оценок (по пункту «5»). При этом, если оценки точки экстремума совпадают, их можно рассматривать как «точное» решение задачи. Если оценки различны, то в качестве приближенного решения выбирают точку, в которой значение  $\varphi$  минимально.

Изложенная процедура реализуется специальной *подпрограммой* NPSSCR (Фортран IV), основа которой представлена в виде схемы 2.4. Блоки вычислений, выделенных в отдельные модули, показаны соответствующим символом (двойная вертикальная линия). Для получения равномерно распределенных чисел можно использовать подпрограммы URAND [83] или RANDU [67]. Входному параметру  $F_i$  назначают значение «1», если вычисление целевой функции должно предшествовать проверке выполнения функциональных ограничений. В противном случае  $F_i = 2$ . Процедура универсальна — позволяет находить экстремум сложной нелинейной функции многих переменных на выпуклых



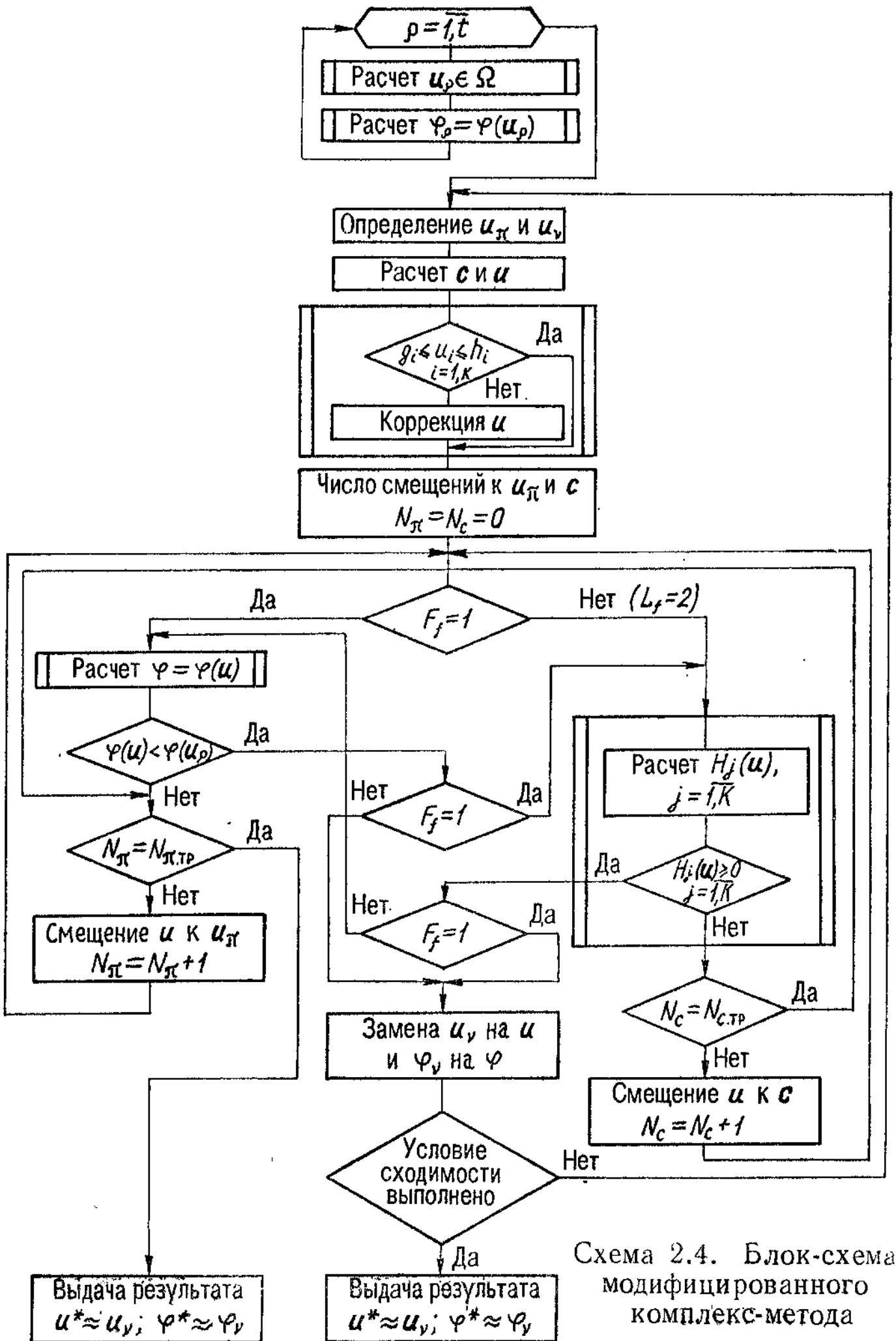


Схема 2.4. Блок-схема модифицированного комплекс-метода

многогранниках (2.19) — кубе, симплексе, их произведениях, а также в разных подобластях многогранников (2.40). Она используется при синтезе оптимальных планов эксперимента (см. этап 4 схемы 2.1, § 2.4), для оценки минимального и максимального уровня свойств композитов (на этапах 7 и 8 — § 2.6), для оценки оптимальных рецептурно-технологических решений (этап 9, § 4.4).

## 2.4. ВЫБОР ПЛАНА ЭКСПЕРИМЕНТА

Необходимый элемент технологии экспериментальных исследований КМ (см. этап 4 на схеме 2.1) — определение плана эксперимента (2.4), натурального или вычислительного. В общем случае задача выбора плана формулируется (см. блок 3 на схеме 2.1) как *оптимизационная* — требуется выбрать *наилучший* из *возможных* планов. «Качество» плана описывается вектором критериев [16, 20, 51, 77] иногда противоречивых и неформализуемых, средн которых: связанные с дисперсионной матрицей (2.7), с дисперсией предсказания (2.9), с затратами на эксперимент — числом опытов  $N$ , с тактикой последовательного проведения опытов.

В этих условиях, как правило, один из критериев выбирают в качестве *критерия оптимальности*, а остальные определяют допустимую область решения  $\Omega_E$  в (2.10). Из нескольких планов, близких к оптимальному по одному из критериев  $\Psi_i$ , выбирают тот, который меньше других проигрывает по другим критериям  $\Psi_j$ . При этом для сравнения планов по критерию  $\Psi_j$  используется величина их *эффективности*  $e_{\Psi_j}$  [28, 51, 77].

$$e_{\Psi_j} = \Psi_j(E^*)/\Psi_j(E), \quad (2.51)$$

где  $E$  — план, оптимальный по критерию  $\Psi_i$ ;  $E^*$  —  $\Psi_j$ -оптимальный план.

В качестве критерия оптимальности при выборе планов наиболее часто применяется  $D$ -критерий  $\Psi(E) = \det D$ .  $D$ -оптимальные планы оказываются [51, 77] «хорошими» по многим другим критериям (низкая дисперсия оценок параметров —  $\text{tr } D$ , пониженная корреляция  $|\rho_{ij}|$  между оценками  $\hat{\theta}_i$  и  $\hat{\theta}_j$ ,  $i, j = \overline{1, L}$ ).

Помимо критериев качества плана, *входами* задачи планирования эксперимента служат условия (2.2) конкретной регрессионной задачи: вид модели функции отклика  $F(u)$ , область действия  $\Omega_u$ , функция эффективности  $\lambda_\sigma(u)$ , число наблюдений  $N \geq L$ , наличие и учет ранее реализованных опытов.

Для ряда *типовых* комбинаций значений входов подходящие планы могут быть выбраны из каталогов [77; 106]. Процесс выбо-

ра можно автоматизировать, если организовать машинный каталог-банк планов, содержащий с той или иной степенью полноты множество известных планов эксперимента. Однако для множества разнообразных *реальных* исследовательских ситуаций, когда по крайней мере одно из условий выбора плана *отличается от стандартного*, оказывается целесообразным или необходимым *синтезировать специальный план*, решая на ЭВМ конкретную задачу (2.10). К таким ситуациям относятся, в частности [20], следующие.

*А. Не стандартна* (отлична от куба, симплекса, шара) *факторная область*. Например,  $\Omega_u$  в (2.19) и область (2.40), где помимо прямых ограничений на факторы указаны функциональные — функции  $H(u)$ , отсекающие от факторного многогранника запрещенные зоны (опасные, бессмысленные или нежелательные для экспериментов). Простейший конкретный пример подобной ситуации: изучается возможность сокращения времени  $\tau$  набора начальной прочности  $R$  полимерной композиции за счет использования в качестве катализатора отверждения смеси двух добавок. Содержание добавки-модификатора структуры  $X_1$  и добавки-ускорителя отверждения  $X_2$  варьируется в диапазонах  $0 \leq X_1 \leq 2$ ,  $0 \leq X_2 \leq 2$  (% массы смолы). При этом по априорным данным известно, что если количество катализатора превышает 3 %, технологическая смесь теряет жизнеспособность, поэтому  $X_1 + X_2 \leq 3$ , или для нормализованных факторов  $x_1 + x_2 \leq 1$ . Последнее условие не позволяет для построения модели зависимости  $\tau(x_1, x_2)$  в виде полинома второго порядка выполнить эксперимент по известному насыщенному плану второго порядка на квадрате. Необходимо определить координаты точек насыщенного плана для оценки шести коэффициентов модели стандартного вида (2.20), но в нестандартной области.

$$\Omega_x = \{ |x_1| \leq 1; |x_2| \leq 1, x_1 + x_2 \leq 1 \}.$$

*Б. Не стандартен вид модели*, отличен от тех, для оценки коэффициентов которых в каталоге есть приемлемые планы. Так, по априорным данным может быть известно, что функция отклика содержит один из коэффициентов высокого порядка, а необходимость экономить опыты не позволяет выполнить эксперимент по известному плану для модели с большим числом эффектов.

Так, при анализе [16, 20] влияния концентрации серной кислоты  $X_1$  в диапазоне  $1 \leq X_1 \leq 10$  % и температуры  $X_2$  в интервале  $20^\circ \leq X_2 \leq 60^\circ$  на вероятность разрушения полимерного материала при растяжении до нормативного напряжения 7 МПа, факторы нормализуются по соотношениям  $x_1 = (\ln X_1 - 0,5) : 0,5$  и  $x_2 = (X_2 - 40) : 20$ . Моделируется вероятностный показатель  $Y\{\alpha\}$  (§ 1.2, гл. 5), для оценки которого в каждой точке

плана испытывают  $n \geq 50$  идентичных образцов. По результатам предварительных опытов известно, что эффекты нулевого, первого и второго порядков влияния концентрации кислоты на деструкцию материала пропорциональны температуре среды. Поэтому модель записывают в виде  $Y = b_0 + b_1x_1 + b_{11}x_1^2 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{112}x_1^2x_2$ . Из-за трудоемкости испытаний 50 образцов в каждой точке плана известные планы третьего порядка на квадрате [77] не устраивают исследователя, поскольку содержат «лишние» точки для оценки шести коэффициентов модели. Необходимо синтезировать насыщенный план.

*В.* Стандартны и модель и область действия (например, полином второго порядка на кубе), однако исследователю необходимо *включить* в план эксперимента особые точки факторной области (эталонные или заведомо наиболее экономичные решения — составы, режимы и т. п.), которые не содержатся ни в одном из планов каталога. В этих условиях необходимо *оптимально построить* план к обязательным точкам.

Так при изучении производительности  $Q$  установки для подачи герметика в стык строительных конструкций с использованием ультразвуковых насадок на сопло [72] анализируют прирост  $\Delta Q$  в зависимости от скорости прохождения герметика в насадке  $X_1 = (1,9 \pm 1,2) \text{ с}^{-1}$  и от толщины обрабатываемого ультразвуком слоя  $X_2 = (4 \pm 2) \text{ мм}$ . Для уже опробованного варианта  $x_1 = 0,4$  и  $x_2 = 0,6$ ; естественно включить точку с такими координатами в эксперимент на квадрате  $\{x_1, x_2\}$ , минимизируя число новых опытов, связанных с переналадкой установки. Тогда вместо испытаний в шести точках насыщенного плана второго порядка можно провести испытания в пяти новых точках, рассчитанных на ЭВМ, которые образуют оптимальный план эксперимента при условии, что в него введена уже реализованная точка.

Большинство алгоритмов расчета оптимальных дискретных планов [28, 103, 117] основаны на предложенном В. В. Федоровым [81] методе последовательного замещения точек исходного невырожденного  $N$ -точечного плана: точка  $u_j$  исключается, а точка  $u$  включается в план в соответствии с вспомогательным критерием улучшения  $\varphi$ . При этом вместо прямой задачи (2.10) поиска  $E^*$  в пространстве  $(k+1)N$  переменных многократно решается в  $k$ -мерном пространстве «двойственная» задача оптимизации по дополнительному к  $\Psi$  критерию  $\varphi$ . При синтезе  $D$ -оптимальных планов таким критерием на каждом  $s$ -м шаге улучшения плана является [81] характеризующее рост определителя информационной матрицы  $M$  приращение  $\Delta(u_j, u)$ :

$$|M(E_{s+1})| : |M(E_s)| = 1 + \Delta_s(u_j, u). \quad (2.52)$$

Метод позволяет найти *приближенное решение* задачи (2.10). Разнообразие алгоритмов [117], использующих функцию  $\Delta$ , обеспечивает тот или иной компромисс между затратами времени ЭВМ и точностью решения.

Реализация процедур построения дискретных оптимальных планов связана с необходимостью на каждой итерации многократно или однократно определять точку максимума  $\Delta$ -функции или ее элемента — функции  $d(u, D)$ . В связи со сложностью создания для разных непрерывных областей действия достаточно общей процедуры поиска максимума, в большинстве алгоритмов синтеза планов [103, 117] реализован подход, при котором оптимальный план формируется из конечного множества точек — «списка кандидатов» (точки спектра непрерывного плана, вершины, центроиды). Однако в многофакторных ситуациях определение множества точек-претендентов представляет дополнительную сложную задачу, а его использование может оказаться неоптимальным с точки зрения реализации вычислительного процесса. Кроме того, желательно иметь следующие возможности: учесть опыты, реализованные на предыдущих этапах исследования, которые не входят в список точек-кандидатов (ситуация В); включать в план как обязательные точки, представляющие особый интерес для экспериментатора (соответствующие эталонным составам, оптимальному уровню одного из факторов и т. п.) (ситуация В); учитывать дополнительные ограничения, вырезающие из основной факторной области зоны, в которых невозможно или нежелательно выполнять эксперимент (ситуация А).

Эти возможности предусматривает специально разработанная достаточно универсальная процедура синтеза дискретных  $D$ -оптимальных планов на выпуклых многогранниках. Это, в частности, все факторные области, показанные на рис. 2.1, б — непрерывные области действия при исследовании систем  $M_1 M_{II} TQ$  и их подсистем. Она позволяет определить планы эксперимента для всех рассмотренных в разделе 2.2 моделей функций отклика в задачах анализа и оптимизации композиционных материалов.

Основанная на итерационном методе Федорова [81], при замещении точек процедура использует «экономичный» алгоритм Уина-Митчела [117, 121] и  $\Delta$ -функцию в виде [81, 117]

$$\Delta_s(u_j, u) = [1 + \lambda(u) d(u, D)] [\lambda(u) d(u, D_1) - \lambda(u_j) d(u_j, D_1)] = \varphi_1 \varphi_2, \quad (2.53)$$

где  $d$  — дисперсионная функция (2.9);  $D$  — дисперсионная матрица плана  $E$ ;  $D_1$  — дисперсионная матрица плана  $E$ , дополненного точкой  $u$ .

План формируется из множества точек, заданного в наиболее общем случае в виде (2.40); при этом реализуются указанные выше возможности учета особенностей конкретной задачи, которая ставится следующим образом.

Пусть  $E_0$  — план начального эксперимента, состоящего из  $N_0$  ( $N_0 \geq 0$ ) опытов (уже реализованных или обязательных), и необходим дополнительный эксперимент по плану  $E_a$  с числом наблюдений  $N_a$ ;  $N_a + N_0 = N \geq L$ .

Требуется в условиях регрессионной задачи (2.2), (2.4), конкретизированной в § 2.2, найти оптимальный план

$$E_a^* = \arg \max_{E_a} \Psi [M(E = E_a + E_0)], \quad (2.54)$$

где  $\Psi = \det M$ .

Для решения задачи (2.54) используют следующий алгоритм\*.

1. Формируется исходный план  $E = E_a + E_0$  (номер шага  $s = 1$ ). В качестве множества точек плана  $\{u_j\}$ ,  $j = \overline{1, N}$ , выбираются:

а)  $N_g$  задаваемых точек (например, центроидов многогранника);  $0 \leq N_g \leq N_a$ ;

б)  $N_a - N_g$  точек, случайно выбираемых из областей действия (2.19) по формулам (2.42) ... (2.44), а при наличии дополнительных функциональных ограничений (2.40) в целом аналогично расчету вершин комплекса (см. § 2.3).

Для плана  $E$  вычисляется матрица  $M$ , дисперсионная матрица  $D = M^{-1}$ , определитель  $\det D$ .

2. Определяется  $u^*$ , при котором

$$\varphi_1^* = \max \varphi_1(u). \quad (2.55)$$

Поиск

$$u^* = \arg \max \lambda(u) f^T(u) D f(u) \quad (2.56)$$

осуществляется с помощью алгоритма, описанного в § 2.3.

---

\* Для тех же входных условий задачи синтеза дискретных планов может быть использован другой алгоритм [26], реализующий базовую процедуру Федорова [81], которая за  $p$  шагов обеспечивает в ряде задач повышенную точность ( $D$  — эффективность  $e_D = |D(E)| / |D(E^*)|$ ), но требует увеличенных затрат машинного времени [117].

3. Рассчитывается \* дисперсионная матрица  $D_1$  (2.57) плана  $\bar{E}_1^s$ , представляющего собой план  $\bar{E}^s$ , дополненный точкой  $u^*$ , и ее определитель (2.58):

$$D_1 = \left[ 1 - \frac{\lambda(u^*) D f(u^*) f^T(u^*)}{1 + \lambda(u^*) d(u^*, D)} \right] D = \\ = D - \frac{\lambda(u^*) (f^T(u^*) D)^T (f^T(u^*) D)}{1 + \lambda(u^*) d(u^*, D)} ; \quad (2.57)$$

$$\det D_1 = \frac{\det D}{1 + \lambda(u^*) d(u^*, D)} . \quad (2.58)$$

4. Среди множества  $\{u_j\}$  точек плана  $\bar{E}^s$  определяется

$$u_j^* = \arg \max \varphi_2(u_j) = \arg \min \lambda(u_j^*) d(u_j^*, D_1). \quad (2.59)$$

5. Составляется план  $\bar{E}^{s+1} = E_0 + \bar{E}_a^{s+1}$ , в котором  $\bar{E}_a^{s+1}$  получен из  $\bar{E}_a^s$  заменой  $u_j^*$  на  $u^*$ .

6. Вычисляется дисперсионная матрица  $D$  плана  $\bar{E}^{s+1}$ , представляющего собой план  $\bar{E}_1^s$  с исключенной точкой  $u_j^*$ ,

$$D = \left[ 1 - \frac{\lambda(u_j^*) D_1 f(u_j^*) f^T(u_j^*)}{1 - \lambda(u_j^*) d(u_j^*, D_1)} \right] D_1; \quad (2.60)$$

$$\det D = \frac{\det D_1}{1 - \lambda(u_j^*) d(u_j^*, D_1)} . \quad (2.61)$$

7. Проверяется выполнение условия по заданной точности  $\delta$

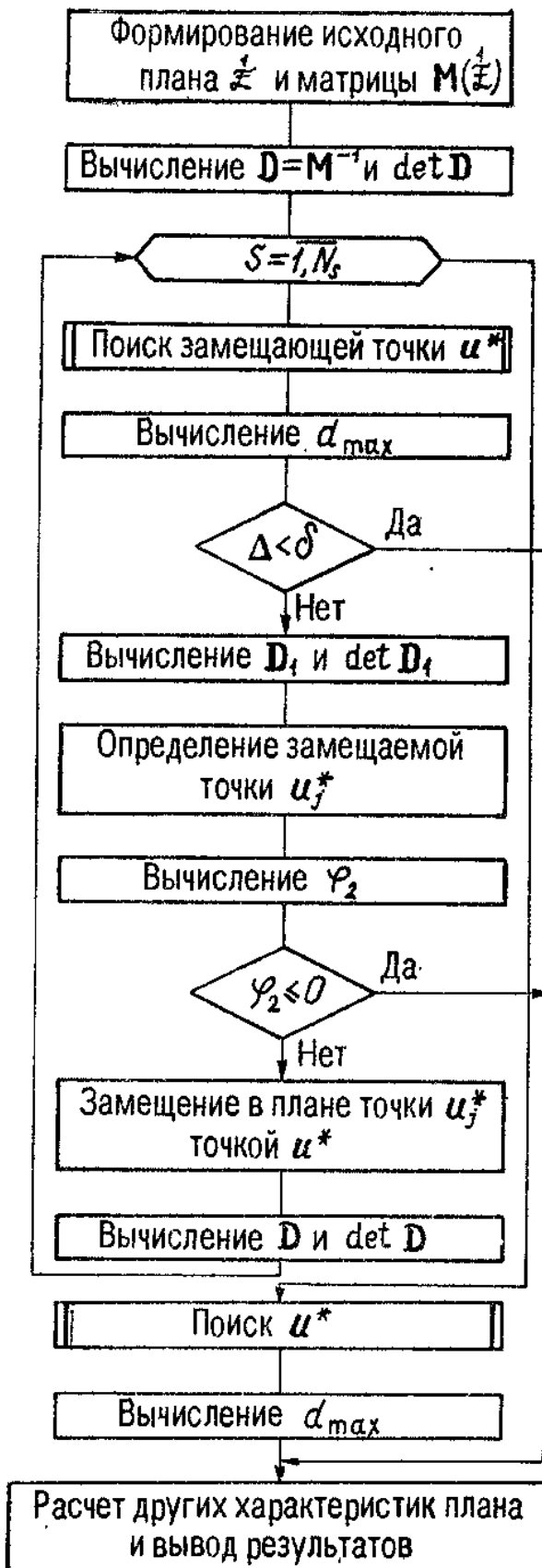
$$\Delta_s(u_j^*, u) = \varphi_1 \varphi_2 < \delta. \quad (2.62)$$

Если при некотором  $s = p$  условие (2.62) выполнено, осуществляется переход к п. 8, если нет — возвращение к п. 2 с заменой  $s$  на  $s + 1$ .

---

\* Рекуррентные формулы (2.57), (2.58), (2.60), (2.61) получены на основе ряда теорем, приведенных в [27,81]. Они заменяют многократные операции обращения матриц, позволяя существенно сократить затраты машинного времени.

Схема 2.5. Алгоритм синтеза  $D$ -оптимального плана



8. Рассчитываются характеристики плана  $E^p$  (дисперсионная матрица и корреляции оценок параметров регрессии, определитель и след матрицы и др.).

План  $E_a^p$  соответствует локальному экстремуму критерия оптимальности  $\Psi = \det D(E^p)$ . Для выявления оптимального плана или группы планов  $E_a^*$  следует организовать многократное выполнение пунктов 1...8 из разных начальных приближений.

Таким образом, изложенный алгоритм позволяет рассчитывать оптимальные планы эксперимента для систем «смесь I, смесь II, технология — свойства» и их подсистем в соответствующих областях действия с учетом реализованных и обязательных опытов, а также при наличии дополнительных ограничений в области экспериментирования. Основа соответствующей программы DESSCR (Фортран IV) представлена блок-схемой 2.5\*. Программа собирается из 15 модулей, в числе которых, помимо основной программы, подпрограмма NPSSCR (см. § 2.3); стандартные подпрограммы, реализующие операции

с матрицами [67]; подпрограммы, вычисляющие  $\lambda(u)$ ,  $d(u)$ , определяющие точки на симплексе, кубе и их произведениях.

\* На схеме  $d_{\max}$  обозначает максимальную в области действия дисперсию функции регрессии.



Программа использовалась для расчета планов эксперимента в ряде исследований композитов разного назначения; в частности, по ней рассчитаны планы, приведенные в гл. 4, а также показанные на рис. 2.3 — к рассмотренным выше примерам ситуаций А, Б, В для расчета планов. На рис. 2.3, помимо точек планов, нанесены изолинии соответствующих оценок  $\hat{Y}$  (см. рис. 2.3, а, в, д). При достаточной точности предсказания  $d(u)/\sigma_y^2$  для этих трех планов, распределения (рис. 2.3, б, г, е) по факторной области несколько отличаются (см. рис. 1.3, б, д) от полученных для стандартных планов [20].

При анализе обобщающих показателей  $G$  (см. схему 2.1, блок 7 и задачу № 9 в § 1.3) выполняется часть технологического цикла моделирования (или весь цикл) с участием «машинных» откликов, рассчитанных по первичным моделям  $\hat{Q}(u)$  (2.1) оценок обобщающих показателей  $G$ . В вычислительном эксперименте

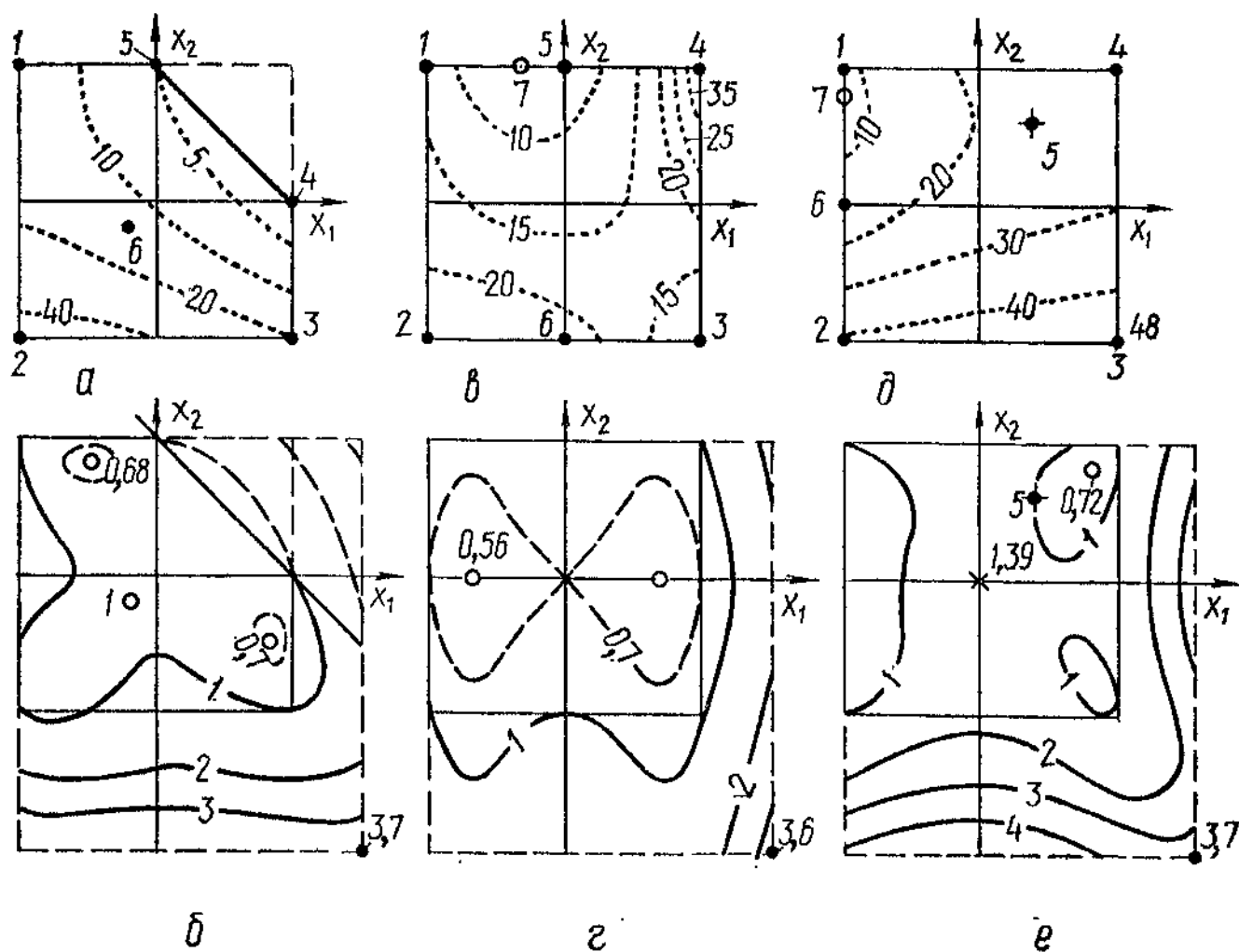


Рис. 2.3. Синтезированные на ЭВМ оптимальные планы (а, в, д) и изолинии ошибок предсказания (б, г, е) для случая усеченного квадрата (а, б), неполной кубической модели (в, г) и фиксированной точки № 5 (д, е)

Т а б л и ц а 2.1. Планы для

	Точки						
	1	2	3	4	5	6	7
$v_1$	1	0	0	$1/2$	$1/2$	0	$1/3$
$v_2$	0	1	0	$1/2$	0	$1/2$	$1/3$
$v_3$	0	0	1	0	$1/2$	$1/2$	$1/3$

второго порядка (2.20)

Модели	неполиного третьего порядка (2.21)	
	третьего	без точек 4...6

при построении вторичных моделей  $G(u)$  меньшей размерности используют известные оптимальные планы на кубе и симплексе. При слабых ограничениях на число испытаний  $N$  эксперимент можно выполнить (оценки  $G$  могут быть рассчитаны) в узлах равномерной сетки с достаточно малым шагом.

Для построения моделей зависимости обобщающих показателей от смесевых переменных  $G(v)$  и  $G(w)$  в виде полинома Шеффе второй степени (2.21) достаточно провести эксперимент (расчет) в центроидах симплекса. Если при этом для расчета коэффициентов используют результаты, полученные в точках симплекс-решетки второго порядка (см. табл. 2.1), то результат в центре симплекса служит для проверки адекватности. Коэффициенты полиномов Шеффе неполиной третьей и третьей степени можно определить по оценкам  $G$  в точках соответствующего симплекс-решетчатого или  $D$ -оптимального плана. Матрицы планов для  $q = 3$  приведены в табл. 2.1. Симплекс-решетчатому плану третьего порядка соответствует  $a = 1/3$ ;  $b = 2/3$ ;  $D$ -оптимальному [6, 77] —  $a = 0,276$ ,  $b = 0,724$ .

Для полиномиальных моделей зависимостей  $G(x)$  второго и третьего порядков могут быть использованы любые известные планы на кубе [77]. В частности, для двухфакторных полиномов второй степени целесообразно выполнить эксперимент во всех центроидах квадрата  $|x| \leq 1$  (вершинах, середине ребер, в центре).

Для оценки зависимостей  $G(v, w)$ ,  $G(x, v)$ ,  $G(x, w)$  целесообразно использовать модели в виде произведения полиномов

## трехкомпонентных смесей

плана						
8	9	10	11	12	13	
$a$	$b$	$a$	$b$	0	0	
$b$	$a$	0	0	$a$	$b$	
0	0	$b$	$a$	$b$	$a$	

порядка (2.22)

(§ 2.2) и произведения соответствующих планов на симплексе и кубе.

Поскольку выбор того или иного плана из ряда возможных основывается на сравнении их характеристик, удобно в наборе программных средств иметь специальную программу для расчета характеристик планов\*.

### 2.5. ПРОЦЕДУРА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО РЕГРЕССИОННОГО АНАЛИЗА

Блок 6 (см. схему 2.1) соответствует этапу построения моделей — расчета МНК-оценок и уточнения вида моделей. Статистическая сущность процедуры уточнения заключается в том, что оценки  $\hat{\theta}_i$ ,  $i = \overline{1, L}$ , определенные по результатам эксперимента, — случайные величины, доверительный интервал\*\* которых

\* В программе SHAREG, созданной для расчета характеристик любых планов при построении любых моделей ( $L \leq 60$ ), рассмотренных в § 2.2, предусмотрена также возможность расчета МНК-оценок  $\hat{\theta}$ ,  $\hat{Y}$ ,  $(\hat{Y} - Y)_j$ ,  $j = \overline{1, N}$  и т. д. для группы откликов, связанных с данным планом.

\*\* Поскольку оценки  $\hat{\theta}_i$  в общем случае коррелированы, корректно говорить об их совместной доверительной области — эллипсоиде рассеяния [16, 51].

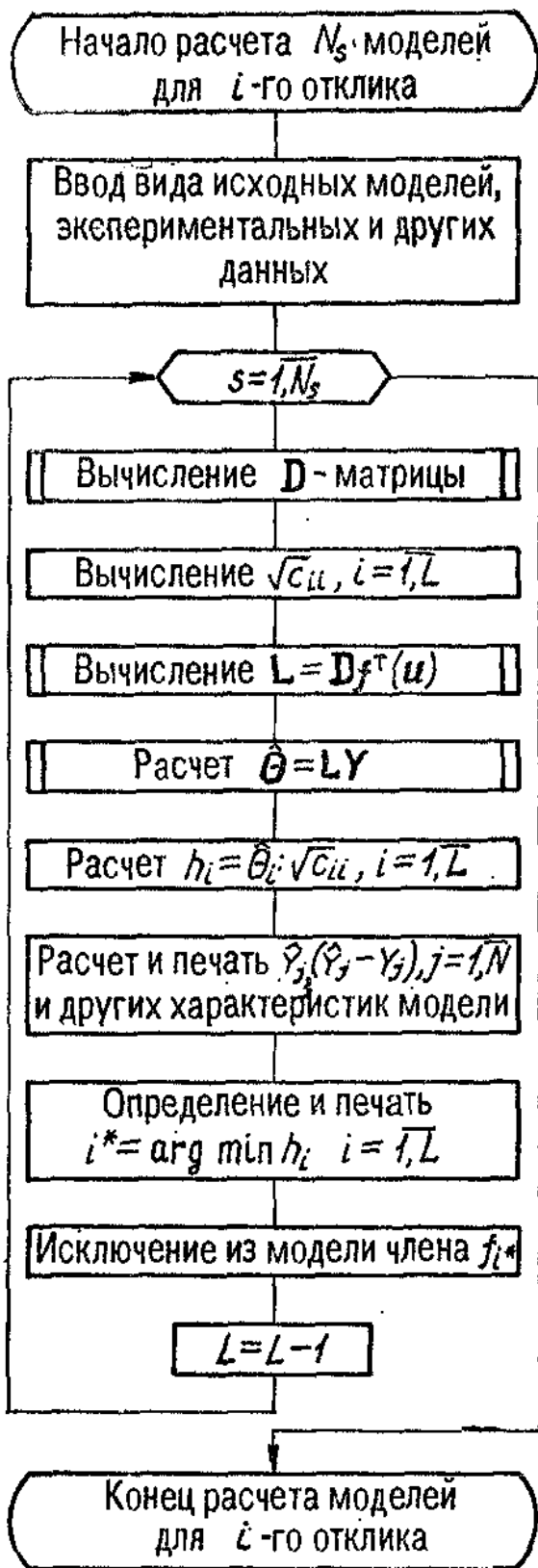


Схема 2.6. Блок-схема последовательного регрессионного анализа (ГРА)

накрывает с некоторым риском  $\alpha$  истинные значения  $\Theta_i$  [16, 72]. Оценка, у которой доверительный интервал накрывает ноль, статистически незначима. Соответствующий ей эффект может быть с риском  $\alpha$  исключен из модели как «шумовой». После исключения эффекта с коэффициентом  $\hat{\Theta}_i$ , в общем случае необходим пересчет остальных оценок  $\hat{\Theta}_j$ , значение которых изменится в зависимости от корреляции между оценками; их коэффициент корреляции  $\rho_{ij}$  определяется видом модели и планом эксперимента ( $\rho_{ij} = c_{ij} / \sqrt{c_{ii}c_{jj}}$ , где  $c_{ij}$  — внедиагональный элемент дисперсионной матрицы  $D$ ;  $c_{ii}$ ,  $c_{jj}$  — диагональные элементы;  $0 \leq |\rho_{ij}| \leq 1$ ).

Процедура последовательного исключения и пересчета оценок названа последовательным регрессионным анализом (ГРА) [16, 72]. Принятие решения о выборе модели на том или ином шаге зависит от назначаемого риска исключить значимый эффект. Таким образом, ГРА позволяет управлять сложностью модели в зависимости от требований к надежности описания (см. § 5.2).

Поскольку при исключении незначимых эффектов растет число степеней свободы, точность модели может повышаться [72].

Процедура ГРА реализована в программе SEREG (Фортран IV), основа которой показана в виде блок-схемы 2.6. На каждом шаге процедуры после расчета МНК-оценок из модели исключается тот  $i$ -й эффект, коэффициент при котором оценен с наименьшей «гауссовской точностью» (1.19), (1.20). Критерий по-

следовательного исключения может быть рассчитан без назначения конкретного значения  $i \in \{\alpha, \beta\}$ . Это позволяет, не задаваясь заранее конкретным  $\alpha$ , построить последовательность (набор, веер) ЭСМ и, в зависимости от целей моделирования, гибко осуществлять выбор той или иной модели в ходе анализа результатов и формулировать инженерные выводы от наиболее достоверных (при малом риске) до равновозможных (при  $\alpha = 0,5$ ).

С помощью описанной процедуры получены все приведенные в книге экспериментально-статистические модели. Достаточно подробный фрагмент таблицы результатов ПРА приведен в § 5.6.

## 2.6. РЕШЕНИЕ ИНЖЕНЕРНЫХ ЗАДАЧ АНАЛИЗА И ОПТИМИЗАЦИИ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Адекватные данным эксперимента экспериментально-статистические модели, рассчитанные в блоке 6 (см. схему 2.1) для комплекса свойств в системах  $M_1M_{11}TQ$ ,  $M_1M_{11}Q$ , ...,  $M_{11}Q$ , ...,  $TQ$ , позволяя решать все типовые инженерные задачи, рассмотренные в § 1.3 [17, 72, 108], расширяют возможности извлечения из эксперимента информации о нем.

Анализ информации, свернутой в экспериментально-статистической модели для одного свойства. Для облегчения содержательного анализа (см. схему 2.1, блок 7) расчленяют первичную модель  $Q(v, w, x)$  — переходят от непрерывного описания воздействия факторов к описанию более простых по структуре систем в дискретных сечениях факторного пространства вплоть до числовой оценки свойства в точке. Так, из полной модели  $Q(v_1, v_2, v_3, w_1, w_2, w_3, x)$  следуют ее проекции (частные модели) в соответствии с графом на рис. 2.4, а, б. Такие модели и их проекции использованы, в частности, в гл. 4 при анализе зависимостей свойств полиэфирных композиций от минералогического  $v$  и гранулометрического  $w$  составов наполнителя и степени наполнения, нормированной к  $x$ .

При анализе целесообразно выделить и рассмотреть, прежде всего, первичные информационные элементы — воспринимаемые исследователем элементарные факторные подобласти (отрезки, треугольники, квадраты) и соответствующие частные модели  $Q(x)$ ,  $Q(x_1, x_2)$ ,  $Q(v_1, v_2, v_3)$ ,  $Q(w_1, w_2, w_3)$ . Последние описывают поле свойства в пределах данного информационного элемента, которое легко может быть изображено в виде графика, квадратной

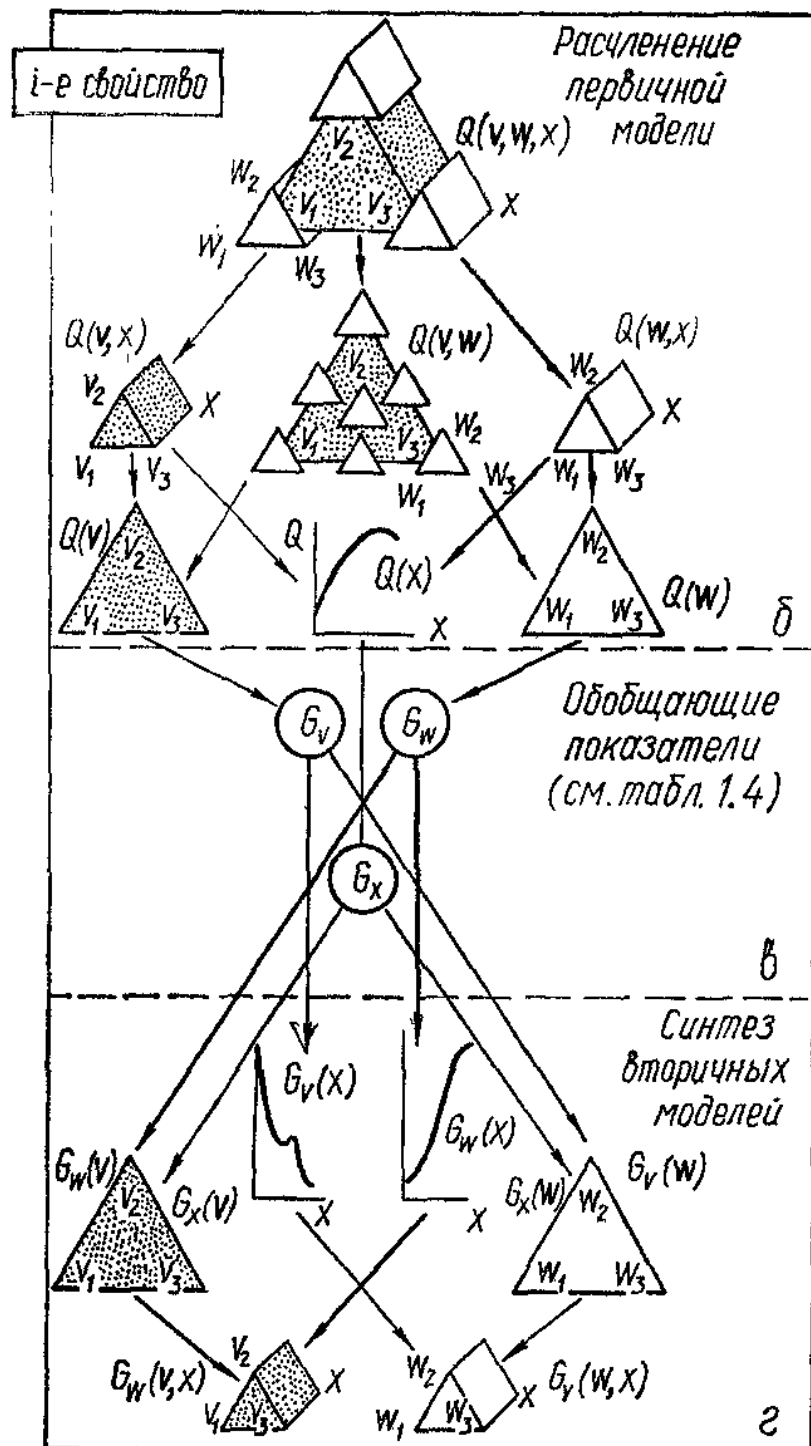
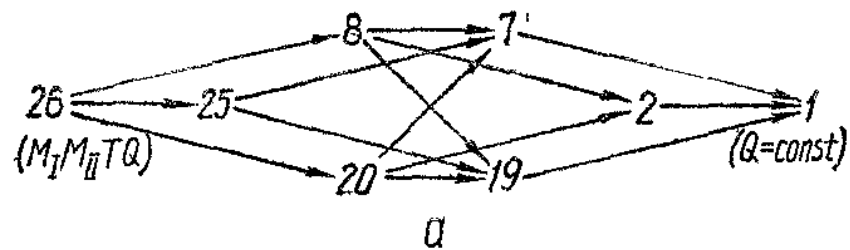


Рис. 2.4. Расчленение модели «смесь I, смесь II, технология — свойство» (а, б) и анализ с использованием обобщающих показателей (б...г)

или треугольной диаграммы. В зависимости от содержательной постановки задачи один из информационных элементов « $u_i - Q(u_i)$ » принимают в качестве базового (см., например, рис. 4.4), а затем анализируют изменения поля свойства базового элемента под влиянием других факторов ( $u_j$ ). При этом используют наборы элементарных диаграмм при разных значениях  $u_j$ , а соответствующие изменения поля свойства можно описать новыми «вторичными» моделями.

При переходе в системе  $M_1 M_{11} TQ$  от полиной модели к ее проекциям (вдоль графа — см. рис. 2.4, а, б) целесообразно использовать в качестве выхода вторичных моделей обобщающие показатели  $G_{u_i}$  — числовые характеристики поля свойства, описываемого «первичной» моделью  $Q(u_i)$  (проекцией полной модели  $Q(u)$  при фиксации части факторов —  $u_j$ ; см. рис. 2.3, б, в, г). Обобщающими показателями поля свойства в зависимости от инженерной постановки задачи (см. задачу № 9, § 1.3, гл. 3, гл. 4) могут быть значения и координаты экстремумов, перепады, градиенты. Обобщающие показатели  $G_{u_i}$  рассчитывают по  $Q(u_i)$  в точках оптимальных планов на кубе, симплексе и призме (см. § 2.4) — в области действия остальных  $j$ -х факторов. По оценкам  $G$  в этих «точках вычислительного эксперимента» и строят вторичные модели для обобщающих показателей. Модели  $G_{u_i}(u_j)$ , представляя собой более высокий уровень свертки экспериментальных данных по сравнению с  $Q(u)$  и, следовательно, более высокий уровень их обобщения, расширяют возможности анализа связей в системах «рецептура, технология, структура свойства КМ» (см. гл. 3 и гл. 4).

Описанные приемы анализа обеспечиваются набором программных модулей, реализуемых и на малых ЭВМ, которые позволяют выполнить следующие операции.

А. Формирование сетки в поле информационного элемента (диаграммы) — куба (отрезка, квадрата), треугольника.

Б. Расчет оценки свойства по усеченным  $Q(u_i)$  и вторичным моделям  $G(u_i)$ . Выполняется в узлах сетки (для построения диаграмм), в других задаваемых точках, в частности, в особых точках поля другого свойства (экстремума, равного уровня свойства).

В. Расчет оценок обобщающих показателей: максимумов и минимумов (в частности, с использованием упрощенного варианта алгоритма, описанного в § 2.3, или диссоциативно-шаговой процедуры для функций от  $|x| \leq 1$ ); площади  $P_F$  (объема  $P_V$ ) допустимой области (см. § 1.3, задача № 11) при разных «нормативных» уровнях  $Q_{\text{норм}}$  или  $G_{\text{норм}}$ ; перепадов, градиентов.

Помимо программ, выполняющих подобный обсчет информа-

ционных элементов, целесообразно из того же набора модулей составить программы для обьсчета более сложных элементов — тетраэдров, кубов (при  $p > 2$ ), а также наборов симплексов ( $q = 3, q = 4$ ) и кубов ( $p = 1, 3$ ) в точках симплекса и куба (в частности, в точках оптимальных планов). Расчеты по этим программам позволяют получить:

*изменяющиеся диаграммы* типа «треугольник на треугольнике», «треугольник на отрезке, квадрате, кубе», «тетраэдр на отрезке, квадрате, кубе», «отрезок на квадрате», «квадрат на квадрате» и т. д.;

*оценки обобщающих показателей*  $G_v, G_w, G_x$  в точках планов на симплексах и кубах разных размерностей для построения вторичных моделей  $G_v(w), G_v(x), G_v(w, x), G_w(v) \dots G_x(v, w) \dots$

Анализ и оптимизация по моделям для нескольких показателей. Комплекс моделей  $Q(u), G(u)$  для разных свойств позволяет осуществить *многовариантный анализ отношений между* структурными, технологическими и эксплуатационными характеристиками КМ (см. схему 2.1, блок 8). Так, помимо оценки обычных корреляционных связей по всему набору натуральных экспериментальных данных, в вычислительном эксперименте можно построить корреляционные зависимости между показателями, например,  $Q_i$  и  $Q_j$  при разных условиях стабилизации факторов на базе рассчитанных по моделям  $Q_i(u)$  и  $Q_j(u)$  оценок показателей. Пример анализа взаимосвязей характеристик материала с использованием корреляционных кривых показан в § 4.3.

Рассчитывают корреляционные зависимости  $\{Q_i(u), Q_j(u)\}$  по следующему алгоритму, реализованному в программе CORSSC.

1. Для данной пары моделей выполняют одинаковое усечение — определяют пару частных моделей при подстановке в исходные модели фиксированных значений части факторов  $u_j$ .

2. По частным моделям  $Q_i(u_a)$  и  $Q_j(u_a)$  рассчитывают набор пар значений  $Q_i$  и  $Q_j$  при изменении анализируемых факторов с некоторым шагом.

3. Рассчитанные оценки представляют в виде таблиц или графически в виде точек в координатах  $\{Q_i, Q_j\}$  (на АЦПУ или на экране дисплея).

Пункты 1...3 выполняются, в зависимости от содержательной сути задачи, для разных пар показателей и разных комбинаций фиксированных и варьируемых факторов.

Другой тип анализа взаимосвязей структурных, технологических и эксплуатационных характеристик материала — *изопараметрический анализ* (ИПА), подробно рассмотренный в задаче № 12 § 1.3. При ИПА изменение  $i$ -го показателя изучается в условиях стабилизации уровня другого  $j$ -го показателя. ИПА выпол-



няют на основе пар частных моделей — двухфакторных от взаимонезависимых (на квадрате) или трехфакторных смесевых (на треугольнике).

Рассчитывают координаты набора таких точек  $u$ , для которых выполняется условие  $Q_j(u) = \text{const}$ .

Координаты точек на этой кривой ИПА определяют следующим образом: одна из координат изменяется с некоторым шагом  $\Delta u$ , другая (или две взаимозависимые смесевые) рассчитывается по методу, аналогичному (1.93) ... (1.95). В точках с координатами  $u \{Q_j(u) = \text{const}\}$  по модели  $Q_i(u)$  рассчитывают оценки показателя  $Q_i$ . Для графического отображения и анализа изменения  $Q_i$  на разных участках линии  $Q_j = \text{const}$  вычисляют длины дуг между двумя соседними рассчитанными точками кривой (аналогично (1.97)). Использование ИПА (с помощью программы IPA) в конкретном исследовании композиционного материала показано в §§ 4.2, 4.3.

*Комплекс ЭС-моделей*, количественно связывающих свойства материала (структурные  $S$ , технологические  $H$ , эксплуатационные  $R$ ) и их обобщающие показатели  $G$  с рецептурно-технологическими факторами  $v, w, x$  позволяет сформулировать и решить (см. схему 2.1, блок 9) инженерные задачи оптимизации технологии и свойств КМ (см. § 1.3). Важнейшие из них: определить рецептурно-технологические варианты, обеспечивающие комплекс заданных свойств при минимальном расходе ресурса\*; при ограниченных ресурсах определить рецептурно-технологические параметры, обеспечивающие максимум (минимум) одного из показателей качества материала (возможно, комплексного, интегрального). Обе задачи формулируются как задачи нелинейного программирования (2.39), (2.40), в которых ЭСМ задают функции  $H$  и (или)  $\Phi$ , т. е. определяют область допустимых решений и (или) целевую функцию. Оптимальное точечное решение  $\hat{u}^*$  может быть получено с помощью рассмотренного в § 2.3 алгоритма\*\*. Возможности оценки устойчивости решений (см. схему 2.1, блок 10) в реальных условиях колебаний уровней рецептурно-технологических параметров рассмотрены в § 5.7.

На практике полезно вместо «жесткого» решения (2.39) распо-

---

\* Это может быть стоимость материала, содержание дефицитного компонента, энергоемкость.

\*\* В подпрограмме NPSSCR предусмотрен вызов подпрограммы функции REGION, в которой проверяется выполнение ограничений  $H_j(u)$  и которая принимает значение 1, если все ограничения выполнены, и 0 — если нарушено хотя бы одно из них. Вычисление  $\Phi$  и  $H_j$ ,  $j = \overline{1, K}$  программируют для каждой конкретной задачи.

лагать набором альтернативных вариантов, близких к оптимальному. Таковую возможность представляет метод «послойного обследования» факторного пространства с определением в каждом слое области допустимых значений. Слои задаются при дискретизации части факторов  $u_f$  (в узлах сетки подобласти  $\Omega \{u_f\}$ ). Они представляют собой информационные элементы  $\Omega \{u_a\}$  (треугольники, квадраты, тетраэдры), для которых помимо (или вместо) обобщающих показателей  $G$  определяются значение критерии оптимальности  $\varphi'$  (в частности, среднее или худшее по  $\Omega \{u_a\}$  значение  $\varphi$ ) и оценка  $P_{V(F)}$  объема (площади) допустимой области (1.90). Оптимальные решения выбирают в том слое  $u_f$ , для которого  $\varphi' (u_f)$  минимально при  $P_{V(F)} \neq 0$  (см. § 4.4).

Рассмотренная в данной главе технологическая схема моделирования, факторные области, виды моделей, специальные алгоритмы их построения и использования как элементы наполнения схемы служат основой компьютеризации процессов создания композиционных материалов разного назначения.

---

## Глава 3

---

# ОПТИМИЗАЦИЯ ПОЛИМЕРСОДЕРЖАЩИХ КОМПОЗИТОВ ДЛЯ РЕКОНСТРУКЦИИ СТРОИТЕЛЬНЫХ СООРУЖЕНИЙ (МОДЕЛИ С НЕЗАВИСИМЫМИ ФАКТОРАМИ)

---

### 3.1. ПОВЫШЕНИЕ РАБОТОСПОСОБНОСТИ СООРУЖЕНИЙ ЗА СЧЕТ РАЦИОНАЛЬНОГО ПРИМЕНЕНИЯ ПОЛИМЕРСОДЕРЖАЩИХ КОМПОЗИТОВ

Проблема обеспечения работоспособности строительных объектов — одна из наиболее актуальных для всех промышленно развитых стран мира как в связи с усложнением самих сооружений и условий их эксплуатации, так в связи с *увеличением потерь от вывода* из нормального режима обслуживаемых ими систем (промышленного производства, транспортных операций, жилищных агломераций) при *отказе* этих сооружений.

Важный элемент этой проблемы — *восстановление* \* работоспо-

способности сооружений с использованием полимерсодержащих композитов, в том числе на основе поликонденсационных смол [31, 40, 61, 64, 104, 110]. Гамма таких композитов, как правило, позволяет решить технические задачи, поставленные перед строителями, однако, остается неоднозначным ответ о выборе рационального состава конкретных композитов с учетом технико-экономических условий производства работ.

Достоверные решения в задачах применения полимерных композитов при восстановлении (усилении, защите, замене) сооружений получаются на основе ЭСМ. Этот вывод следует из анализа двадцатилетнего опыта реализации такого подхода как в многочисленных исследованиях, так и при разработке практических рекомендаций.

Набор мономеров, олигомеров и полимеров, применяемых для повышения работоспособности сооружений широк. Однако эпоксидные смолы в силу ряда достоинств технического характера, относительно невысокой стоимости и распространенности на мировом рынке (около 0,7...1 % производства полимеров) — одни из наиболее конкурентноспособных.

Все изложенные в настоящей главе исследования по созданию новых композитов [94...102] возникли при решении в НРБ *практических задач ремонта, восстановления и усиления железобетонных конструкций, антикоррозионной защиты и гидроизоляции сооружений*. Применение ЭСМ позволило получить более полную информацию и сократить объем экспериментальных работ. При этом найдены экономичные технологические решения, имеющие и самостоятельную научную ценность. В работах коллектива Высшего института архитектуры и строительства в Софии [110, 111] убедительно показано, что область эффективного применения эпоксидных композитов в строительстве охватывает составы для инъектирования и импрегнирования бетонных и железобетонных сооружений с трещинами, для создания гидроизоляционных и защитных покрытий, а также грунтовочных слоев при склеивании нового бетона со старым.

В процессе изготовления, транспортирования и монтажа *сборных железобетонных конструкций* возможно появление тре-

---

\* Рабочая группа международного союза испытателей RILEM, занимающаяся применением синтетических смол в строительстве, предлагает считать восстановлением непосредственно работы на эксплуатируемых сооружениях без изменения их проектных параметров. Для новых сооружений рекомендуется термин «доделка», а для переводимых в новые условия работы сооружений — термин «усиление». В данной главе термины (вне контекста) специально не разграничиваются.

щин. Аналогичные повреждения имеют место и в *монолитных* конструкциях, где причины их возникновения — влажностные деформации, усадка. Такие дефекты требуют ремонта путем нагнетания уплотняющих составов, что позволяет создавать плотные слои и увеличивать коррозионную стойкость арматуры в зоне появившихся трещин. Кроме того, *инъектирование* можно применять для повышения несущей способности конструкции без трещин.

Заполнение эпоксидными композитами бетонных поверхностей, и на определенной глубине (4...5 мм) — пор в бетоне, позволяет улучшить свойства цементного камня. Такую операцию *импрегнирования* проводят, в частности, при создании гомогенного основания для последующего склеивания; при укреплении частично поврежденных поверхностей бетона; для связывания оставшегося после очистки (обработкой пескоструйным аппаратом или щетками) микрослоя пыли и создания непылящих поверхностей; при уплотнении поверхностного слоя для повышения его непроницаемости, стойкости. Кроме того, при восстановлении монолитности бетона эпоксидные композиты создают прочную контактную основу на границе старого бетона с новым.

Импрегнующие эпоксидные композиты применяют и как комбинированные покрытия, в частности, бетонных полов. Так, в НРБ предложены, исследованы и внедрены составы для железобетонных конструкций, работающих в условиях коррозии и износа. Такие составы отличаются низкой вязкостью 10...50 с (по ВЗ-4), что обеспечивает высокую проницаемость, они содержат комплекс растворителей, температура кипения которых подобрана так, чтобы гарантировать не только требуемую проницаемость в бетоне, но и скорость испарения, подходящую для создания прочной структуры затвердевающих композиций. Покрытие выполняют при помощи простых приспособлений. Оно позволяет вводить помещения в эксплуатацию уже через сутки после окончания импрегнирования; дешевле других полимерных покрытий полов.

Эпоксидные мастики применяют в НРБ для шпаклевки бетонной поверхности, заделки швов, защитных покрытий, при изоляционных работах. Наименьшего расхода смолы можно достигнуть при создании водоземulsionных эпоксидных композитов.

Применение водоземulsionных грунтовок и нестекающих мастик для уплотнения влажных бетонных поверхностей ощутимо сокращает сроки строительства. При этом достигается экономия средств за счет устранения предварительной энергоемкой сушки поверхности, а также снижения расхода смолы на 30...35 % (при низкой и средней агрессивности среды) и трудоемкости при нанесении шпаклевок на 20...25 %. Экономический эффект на 1 м<sup>2</sup>:

2,43 лева для стен, 2,46 лева для потолков и 2,39 лева для полов. Кроме того, возникает и дополнительный эффект от сокращения технологических простоев, неизбежных при выполнении многослойных шпаклевок. Предложенные в ВИАС (София) составы наносят традиционным оборудованием, не требуется специальная подготовка кадров.

Из обширного комплекса задач, решенных в совместных советско-болгарских исследованиях, рассмотрено две: о *наполненных дисперсионным поливинилхлоридом композициях на водоземulsionно-эпоксидной основе* и на основе *модифицированной добавками смолы*. Они представляют значительный инженерный интерес для специалистов по реконструкции и защите сооружений и отражают ряд нетривиальных методических подходов к сложным композитам, анализируемых и оптимизируемых на основе математического моделирования.

### **3.2. МНОГОКРИТЕРИАЛЬНЫЙ ПОИСК СОСТАВА ВОДОЭМУЛЬСИОННЫХ ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИЦИЙ С ПОЛИВИНИЛХЛОРИДНЫМ НАПОЛНИТЕЛЕМ**

*Водоземulsionные композиции* на основе эпоксидных смол применяют как смеси с хорошей адгезией к сухим и влажным бетонным поверхностям. Они перспективны для гидроизоляционных и антикоррозионных обмазок, восстановления железобетонных резервуаров, а также импрегнирования и инъекционных восстановительных работ. Такое многоплановое применение обусловлено не только механическими, но и структурно-реологическими технологическими свойствами, обеспечивающими получение *легкообрабатываемых наполненных композиций* [110]. Эти смеси должны проникать во все трещины и поры размером более 0,1 мм на глубине до 1 м под действием рабочего давления до 10 МПа. Поэтому к ним предъявляют жесткие требования по предельной вязкости. Кроме того, такие смеси, являющиеся не-ньютоновскими жидкостями, должны обладать определенной *тиксотропией* [118], чтобы после снятия механических напряжений удерживаться без стекания на вертикальных поверхностях конструкций, а также не вытекать из широких трещин и отверстий инъекционных каналов.

**Технологические условия задачи и результаты моделирования.** Опубликованные сведения о свойствах водных эмульсий эпоксидных смол недостаточны. Поэтому была всесторонне исследована композиция на основе *эпоксидной смолы «Эпокса-АП<sub>1</sub>»* производства химкомбината им. Д. Тошкова (София), соответствующая Болгарскому государственному стандарту БДС 9086—70. Это

диановая смола [88], близкая по своим свойствам (табл. 3.1) к выпускаемым в СССР смолам ЭД-20 и ЭД-16, а также композициям на их основе (УП-5-132 пластифицирована дибутилфталатом аналогично смоле «Эпокса-АП<sub>1</sub>» [104]). Используемая в эксперименте смола может быть приравнена к смолам с фирменными марками MGu-225 (Швейцария), Эпикот 826 (США).

Т а б л и ц а 3.1. Свойства смолы «Эпокса АП<sub>1</sub>» (НРБ) и некоторых эпоксидных смол и композиций советского производств

Показатели	«Эпокса АП <sub>1</sub> »		Смолы по ГОСТ 10587—84		Композиция УП-5-132 (на основе ЭД-20)
	по БДС 9086—70	по данным измерений	ЭД-20 (ЭД-5)	ЭД-10 (ЭД-6)	

Содержание, %:					
эпоксидных групп	15...20	15,9	20...22,5	14...18	15...20
хлора	До 0,5	0,34	До 1,5	До 0,75	—
Плотность, г/см <sup>3</sup>	1,12...1,16	1,13	1,15...1,16	1,17...1,18	—
Вязкость динамическая, Па·с	18...35	По Хепплеру 40 с	12...14 (25 °С)	100 (50 °С)	1,5...3,5 (25 °С)
Прочность, МПа:					
при изгибе, R <sub>н</sub>	Не менее 65	66,6	80...140	80...140	80
при сжатии, R <sub>сж</sub>	—	—	100...200	100...200	60

В качестве отвердителя использован *диэтилентриамин* (ДЭТА) комбината в Бургасе — ОН-0257057-72 (НРБ). Также, как диановые эпоксидные смолы, отвердители типа ДЭТА нерастворимы в воде, но могут быть в ней эмульгированы. Эмульсии стабилизированы растворимым в воде поверхностно-активным веществом «Варанол Н-15» (комбинат «Верила», София). Это синтетическая соль жидких кислот, широко применяемая, например, в резиновой промышленности. Эмульсии приготавливали в *высокоскоростной* (10 000 об/мин) мешалке типа ЕМ-119 (ГДР). Предварительно компоненты эмульсии перемешивали в течение 2 мин на электрической мешалке, после чего смесь двукратно эмульгировали. За 1 час приготавливалось около 60 дм<sup>3</sup> эмульсии, которую можно применять в течение одной недели.

В исследовании варьировалось пять факторов (на 100 массовых частей смолы). Кроме *отвердителя*  $X_1 = (14 \pm 4) \%$ , *воды*  $X_2 = (7,5 \pm 7,5) \%$  и эмульгатора  $X_3 = (4 \pm 3) \%$  в состав композиции входили растворитель  $X_4 = (15 \pm 10) \%$  и *полимерный наполнитель*  $X_5 = (20 \pm 20) \%$ .

С целью регулирования вязкости смеси и времени ее желатинизации, а также плотности затвердевшего композита, в состав включали растворитель-*параксилол* (БДС 9184-81) и в качестве наполнителя использовали *эмульсионный поливинилхлорид* — ПВХ марки Е (БДС 5410-71), выпускаемый химкомбинатом в г. Девня. Это тонкодисперсный (остаток на сите 0,2—0,5 %, на сите 0,063—80 %) порошок насыпной массой 550 кг/м<sup>3</sup> (плотность гранул ПВХ  $\rho = 1395$  кг/м<sup>3</sup>). Такой наполнитель вводят не только с целью экономии смолы (1 кг ПВХ стоит в НРБ в четыре раза меньше, чем 1 кг эпоксидной смолы), но и как расширяющую добавку для самоуплотнения композиций. В течение первых 10...15 мин после приготовления смеси зерна ПВХ набухают на 5...30 %, что приводит к значительному увеличению вязкости (в 1,5...5 раз), особенно при малом содержании воды. Эти явления связаны с формированием ПВХ коагуляционных структур в присутствии первичных и вторичных пластификаторов (в данном случае это дибутилфталат, входящий в состав Эпокса-АП<sub>1</sub>). В результате существенно улучшаются [107, 118] тиксотропные свойства технологической смеси, что особенно важно при ее использовании на вертикальных плоскостях.

Составы композитов, соответствующие плану На<sub>5</sub> [16], показаны в табл. 3.2. Составы 3...6, 11, 12, 15, 16 и 22 — «чистые» матрицы, а 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16 и 20 — безводные композиции. Эти составы исследованы как базовые — для сравнения. По техническим условиям заказчика композиция должна была наноситься на увлажненные бетонные поверхности и обладать улучшенными технологическими свойствами (в том числе тиксотропными), а также быть экономичной. При этом допускалось некоторое снижение ее прочности по сравнению с чистой смолой (но не ниже прочности бетона восстанавливаемой конструкции). Изложенное определило целесообразность и необходимость введения в композиции и воды, и ПВХ.

*Предел прочности на изгиб R*, МПа, после 7 сут твердения композиции выбран как *интегральная* характеристика, поскольку наиболее полно (по сравнению со сжатием, другими сроками) характеризует когезионные свойства композита. Этот показатель целесообразен как критерий оптимизации готового продукта. В соответствии с действующими в НРБ методиками, экспериментальные значения *R* оценены как среднее результатов испытаний трех образцов-балочек размером 2 × 2 × 9 см по однотоочечной

Т а б л и ц а 3.2 План эксперимента и результаты определения предела прочности на изгиб композита  $R$  и условной вязкости смеси  $v$

Номер опыта (состава)	План эксперимента					Состав на 100 частей по массе смолы					Предел прочности на изгиб $R$ , МПа	Вязкость $v$ по истечению, с
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	отвердитель	вода	эмульгатор	растворитель	наполнитель ПВХ		
1	+1	+1	+1	+1	+1	18	15	7	25	40	14,5	13
2	+1	-1	+1	-1	+1	18	-	7	5	40	22,0	27
3	-1	+1	-1	-1	-1	10	15	1	5	-	8,3	17
4	-1	-1	-1	+1	-1	10	-	1	25	-	61,8	6
5	+1	+1	+1	-1	-1	18	15	7	5	-	16,1	14
6	+1	-1	+1	+1	-1	18	-	7	25	-	4,0	6
7	-1	+1	-1	+1	+1	10	15	1	25	40	9,8	14
8	-1	-1	-1	-1	+1	10	-	1	5	40	34,6	82
9	+1	+1	-1	-1	+1	18	15	1	5	40	26,3	56
10	+1	-1	-1	+1	+1	18	-	1	25	40	8,1	22
11	-1	+1	+1	+1	-1	10	15	7	25	-	17,0	10
12	-1	-1	+1	-1	-1	10	-	7	5	-	28,3	20
13	-1	+1	+1	-1	+1	10	15	7	5	40	16,4	85
14	-1	-1	+1	+1	+1	10	-	7	25	40	26,8	20
15	+1	+1	-1	+1	-1	18	15	1	25	-	41,1	9
16	+1	-1	-1	-1	-1	18	-	1	5	-	50,8	6
17	0	0	0	+1	0	14	7,5	4	25	20	24,7	20
18	0	0	0	-1	0	14	7,5	4	5	20	32,8	47
19	0	+1	0	0	0	14	15	4	15	20	30,2	21
20	0	-1	0	0	0	14	-	4	15	20	39,6	17
21	0	0	0	0	+1	14	7,5	4	15	40	30,5	39
22	0	0	0	0	-1	14	7,5	4	15	-	34,7	10
23	+1	0	0	0	0	18	7,5	4	15	20	15,9	16
24	-1	0	0	0	0	10	7,5	4	15	20	19,6	27
25	0	0	+1	0	0	14	7,5	7	15	20	17,8	24
26	0	0	-1	0	0	14	7,5	1	15	20	26,3	26
27	0	0	0	0	0	14	7,5	4	15	20	28,6	24



схеме загрузки при пролете 5,33 см. Относительная среднеквадратичная ошибка эксперимента  $\delta_{\Sigma} \{R\} = 5,5 \%$ .

Условная вязкость жидкой композиции  $\nu$  оценивалась по времени истечения 100 см<sup>3</sup> на вискозиметре Фонда [104] с отверстием 8 мм по среднему трех измерений. Относительная ошибка  $\delta_{\Sigma} \{\nu\} = 6,2 \%$ .

Определены следующие основные требования к композиции:

$$R \geq R_{\text{тр}} = 35 \text{ МПа}; 3 \leq \nu_{\text{тр}} \leq 15 \text{ с.} \quad (3.1)$$

Первичный анализ данных табл. 3.2 позволяет сделать следующие выводы, важные для построения оптимальной тактики дальнейших исследований.

Во-первых, коэффициент корреляции между  $R$  и  $\nu$  очень мал  $r \{R, \nu\} = 0,04$ . Это соответствует риску  $\alpha \leq 0,05 \%$ , что требует вести оптимизацию свойства  $R$  и  $\nu$  индивидуально, а потом искать компромиссное решение, удовлетворяющее (3.1).

Во-вторых, анализ корреляционного поля на рис. 3.1, а показывает, что в зону, ограниченную нормативами  $R \geq 35$  МПа и  $\nu \leq 15$  с, попадают составы 4, 16 и 15, ни один из которых не является водоэмульсионным наполненным композитом (это чисто матричные составы). Однако близок к этой области состав 20 ( $R = 39,6$  МПа и  $\nu = 17$  с), включающий 20 % ПВХ, что свидетельствует о реальной возможности получить требуемый инженерный результат в ходе математического моделирования и оптимизации.

В-третьих, диапазон изменения свойств в данном эксперименте весьма велик:  $R$  увеличивается в 15 раз от состава № 6 к № 4, а  $\nu$  уменьшается в 14 раз от № 13 к № 4 (или № 6, или № 16); такие перепады свойств требуют [16] перехода к моделированию не самих значений  $R$  и  $\nu$ , а их натуральных логарифмов (при этом остаются постоянными именно относительные среднеквадратичные ошибки эксперимента  $\delta_{\Sigma} \{R\}$  и  $\delta_{\Sigma} \{\nu\}$ , указанные выше).

Получены с помощью ГРА (см. § 2.5) две адекватные модели со всеми значимыми ( $\alpha = 0,1$ ) оценками коэффициентов

$$\begin{aligned} \ln R = & 3,343 - 0,088x_1 - 0,469x_1^2 + 0,388x_1x_2 - 0,204x_1x_3 - 0,245x_1x_4 - \\ & - 0,144x_2 + 0,203x_2^2 & + 0,142x_2x_3 + 0,222x_2x_4 - \\ & - 0,185x_3 - 0,266x_3^2 & - 0,074x_3x_4 + 0,262x_3x_5 - \\ & - 0,153x_4 & - 0,141x_4x_5 - \\ & - 0,073x_5 + 0,141x_5^2, \end{aligned}$$

(3.2)

$$\begin{aligned}
 \ln v = & 3,184 - 0,187x_1 - 0,181x_1^2 - 0,115x_1x_3 - 0,162x_1x_4 + \\
 & + 0,091x_2 + 0,25x_2^2 - 0,103x_2x_3 - \\
 & - 136x_3^2 + 0,176x_3x_4 - 0,125x_3x_5 - \\
 & - 0,446x_4 - 0,092x_4x_5 + \\
 & + 0,577x_5 - 0,255x_5^2,
 \end{aligned}
 \tag{3.5}$$

которые и использованы для решения заданных инженерных задач.

Реализация диссоциативно-шагового метода при максимизации прочности композита. Поиск оптимальных составов водоземulsionных композиций для ремонтно-восстановительных работ осуществлен (рис. 3.1, б...в) диссоциативно-шаговым методом ДШМ. При этом для принятия решений целесообразно на последнем этапе использовать двухфакторные диаграммы, отражающие влияние количества воды (0...15 %) и наполнителя ПВХ (0...40 %), т. е. тех факторов, уровень которых опре-

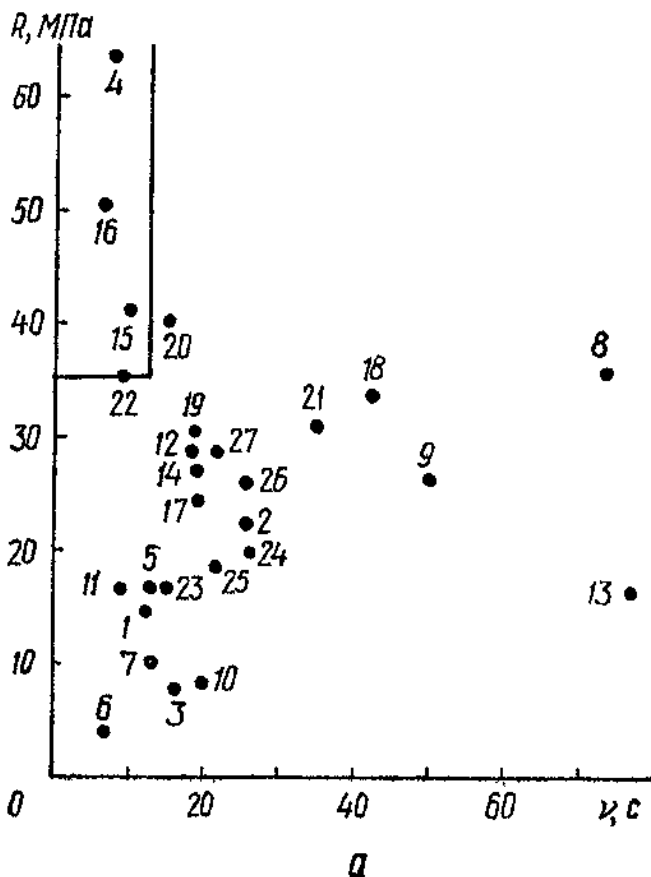


Рис. 3.1. Корреляционное поле  $\{R, v\}$  (а) и блок-схема алгоритма поиска компромиссного решения по показателям прочности композита (б) и по условной вязкости смеси (в)

$$Y_1 = 3343 - 88x_1 - 469x_1^2 + 388x_1x_2 - 204x_1x_3 - 245x_1x_4 - 144x_2 + 203x_2^2 + 142x_2x_3 + 222x_2x_4 - 185x_3 - 266x_3^2 - 74x_3x_4 + 262x_3x_5 - 153x_4 - 141x_4x_5 - 73x_5 + 141x_5^2 \quad (1)$$

$$b_{11} < 0; (|b_{11}| + |b_{12}| + |b_{13}| + |b_{14}|) \leq 2/|b_{11}|; x_{1,opt} \leq 1/1 \quad (2)$$

κ(15)

$$x_{1,opt} = -0,094 + 0,414x_2 - 0,217x_3 - 0,261x_4 \quad (3)$$

$$Y_1 = 3347 - 180x_2 + 283x_2^2 + 58x_2x_3 + 121x_2x_4 - 165x_3 - 244x_3^2 - 21x_3x_4 + 263x_3x_5 - 130x_4 + 32x_4^2 - 141x_4x_5 - 73x_5 - 141x_5^2 \quad (4)$$

$$b_{33} < 0; (|b_{33}| + |b_{23}| + |b_{34}| + |b_{35}|) \leq 2/|b_{33}|; x_{3,opt} \leq 1 \quad (5)$$

$$x_{3,opt} = -0,332 + 0,119x_2 - 0,043x_4 + 0,539x_5 \quad (6)$$

κ(15)

$$Y_1 = 3374 - 119x_2 + 286x_2^2 + 119x_2x_4 + 31x_2x_5 - 123x_4 + 32x_4^2 - 152x_4x_5 - 160x_5 + 212x_5^2 \quad (7)$$

om(22)

κ(24)

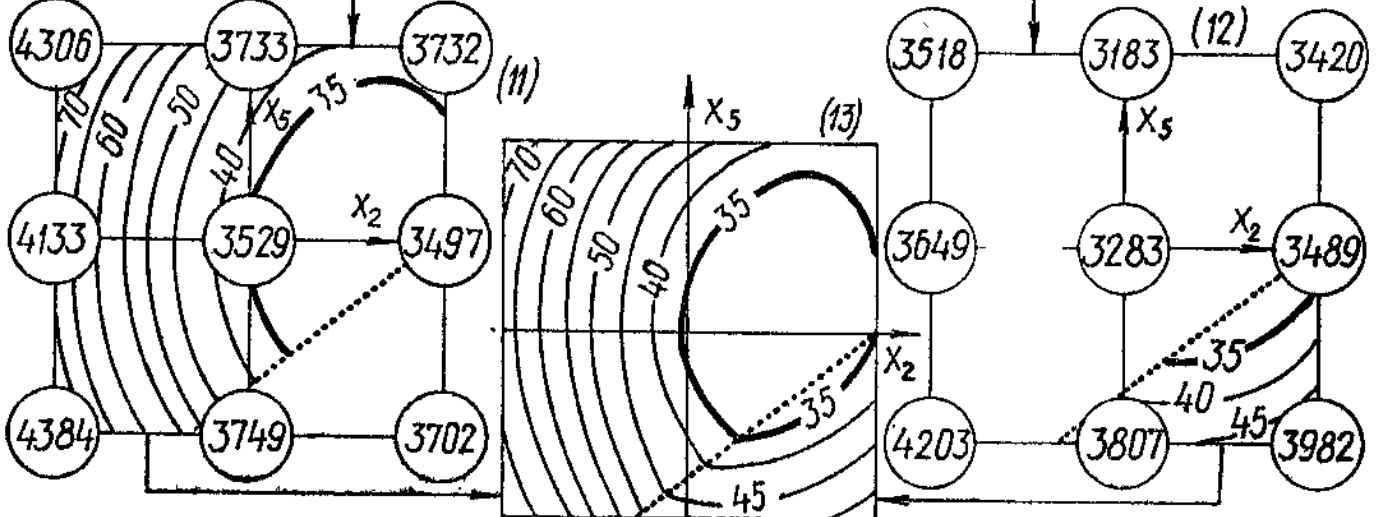
$$x_4 = -1$$

$$b_{44} > 0; |b_{44}| < (|b_{24}| + |b_{45}|); x_{4,opt} = -1U + 1 \quad (8)$$

$$x_4 = +1$$

$$Y_1 = 3529 - 318x_2 + 286x_2^2 + 31x_2x_5 - 8x_5 + 212x_5^2 \quad (9)$$

$$Y_1 = 3283 - 80x_2 + 286x_2^2 - 31x_2x_5 - 312x_5 + 212x_5^2 \quad (10)$$



0

$$Y_2 = 3184 - 187X_1 - 181X_1^2 - 115X_1X_3 - 162X_1X_4 + 91X_2 + 250X_2^2 - 103X_2X_3 - 136X_3^2 + 176X_3X_4 - 125X_3X_5 - 446X_4 - 92X_4X_5 + 577X_5 - 255X_5^2 \quad (14)$$

om (2)  
om (6)

$$\left. \begin{aligned} X_{1, opt} &= -0,094 + 0,414X_2 - 0,217X_3 - 0,261X_4 \\ X_{3, opt} &= -0,332 + 0,119X_2 - 0,043X_4 + 0,539X_5 \end{aligned} \right\} (15)$$

$$Y_2 = 3172 - 60X_2 + 238X_2^2 - 47X_2X_4 - 33X_2X_5 - 468X_4 + 21X_4^2 + 38X_4X_5 + 686X_5 - 357X_5^2 \quad (16)$$

$$b_{22} > 0; (|b_{21}| + |b_{24}| + |b_{25}|) \leq 2|b_{22}| \quad (21)$$

$$X_{2, opt} = -0,126 + 0,099X_4 + 0,069X_5 \quad (22)$$

K (7)

$$Y_2 = 3168 - 463X_4 + 19X_4^2 + 35X_4X_5 + 690X_5 - 358X_5^2 \quad (23)$$

$X_4 = -1$

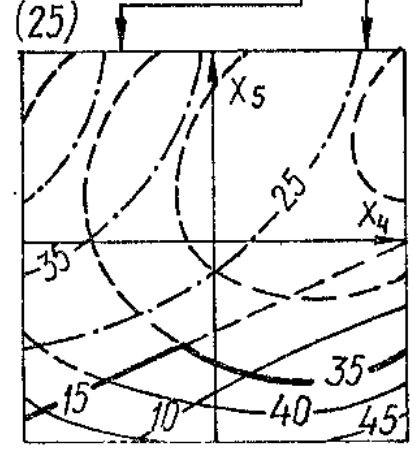
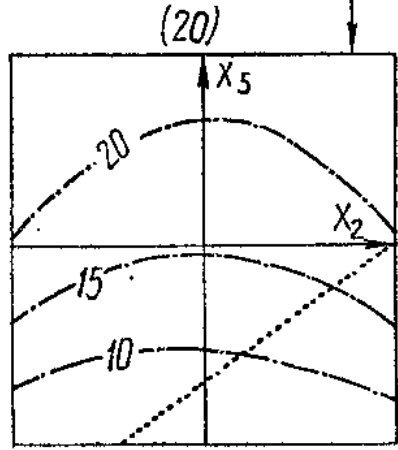
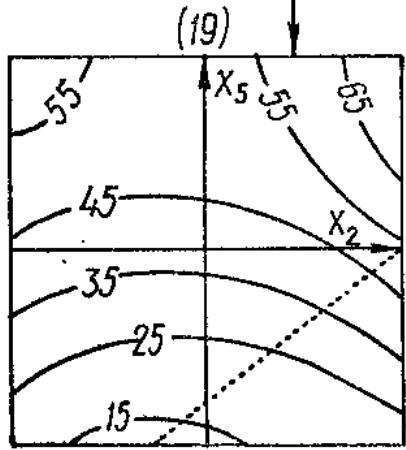
$X_4 = +1$

om (7)

$$Y_1 = 3403 - 165X_4 + 47X_4^2 - 137X_4X_5 - 182X_5 + 215X_5^2 \quad (24)$$

$$Y_2 = 3661 + 107X_2 + 238X_2^2 - 33X_2X_5 + 648X_5 - 357X_5^2 \quad (17)$$

$$Y_2 = 2725 + 13X_2 + 238X_2^2 - 33X_2X_5 + 724X_5 - 357X_5^2 \quad (18)$$



8

деляет общие и специальные технико-экономические показатели материала (тиксотропию, набухание, адгезию). Оптимизация на рис. 3.1 ведется для упрощения записи результатов по моделям (3.2), (3.3) с увеличенными в  $10^3$  раз оценками ( $Y_1 = 10^3 \ln R$ ,  $Y_2 = 10^3 \ln v$ ).

Из модели 1 (см. рис. 3.1) следует, что для обеспечения  $Y_{1.\max}$  необходимо поддерживать количество *отвердителя на переменном оптимальном* уровне 3, который, судя по условию 2, не может выйти за границы эксперимента. Оптимальное (по прочности композита) содержание отвердителя уменьшается с ростом количества введенного в смолу растворителя и эмульгатора, но увеличивается при бóльшей дозировке воды (чем больше воды, тем больше отвердителя: знак плюс перед  $+0,414x_2$ ). Последнее объясняется тем, что активность отвердителя ДЭТА падает в присутствии воды, вследствие уменьшения его контактного взаимодействия со смолой.

Вывод о необходимости введения *эмульгатора  $x_3$  на переменном оптимальном уровне 6* следует из модели 4, полученной из 1 при постановке в нее управляющей функции 3. Как видно из 6, существенное влияние на изменение концентрации эмульгатора оказывает содержание наполнителя ПВХ. Чем больше наполнителя, имеющего тенденцию к набуханию в присутствии дибутилфталата, тем больше требуется эмульгатора для сохранения стабильности водоэпоксидной композиции, а следовательно, и бездефектности и однородности затвердевшего композита. После подстановки 6 в 4 получена трехфакторная модель 7, описывающая изменение предела прочности композита под влиянием варьирования количества воды, растворителя и ПВХ *при условии оптимальных концентраций отвердителя и эмульгатора* (переменных для разных составов композита).

Еще один «свободно оптимизируемый» фактор в модели 7 — количество растворителя  $x_4$ , которое, как следует из условия 8, для максимизации  $Y_1$  может принимать *два конкурирующих* значения на границах исследованной факторной области:  $-1$  или  $+1$ . Поэтому модель 8 «расщепляется» на две: 9 и 10, — по каждой из которых определяют значения  $Y_1$  в девяти точках-центроидах факторного квадрата «вода — ПВХ» (числа в кружках, расположенных в центре квадрата, в четырех углах и на серединах четырех сторон). Сравнительный анализ характеристик прочности в одинаковых точках квадратов 11 и 12 показывает, что повышенное количество растворителя ( $x_4 = +1$  или  $X_4 = 25\%$  массы смолы, правая диаграмма) оптимально в зоне увеличенного количества воды ( $x_2 > 0$ ) при малых концентрациях ПВХ ( $x_5 < 0$ ). В то же время, при большем насыщении композита гранулами ПВХ (или при переходе к безводным компози-

циям) дозировку растворителя для достижения  $R_{\max}$  сводят к минимуму ( $x_4 = -1$  или  $X_4 = 5\%$ , левая диаграмма—см. рис. 3.1).

Оптимальные решения *совмещаются* на одной диаграмме 13, которая описывается *сплайн-функцией* с границей пересечения двух эллипсов по прямой

$$240 - 233x_2 + 304x_3 = 0 \quad (3.4)$$

и определяется приравниванием моделей 9 и 10. Сплайн-функция 13 непрерывна, хотя уровни фактора  $x_4$ , вызывающего «излом» поверхности, дискретны.

На диаграмме 13 область, удовлетворяющая требованию (3.1) по пределу прочности  $R \geq 35$  МПа, достаточно обширна ( $P_F = 24\%$ ) и соответствует, главным образом, водоэмульсионным композитам с пониженным содержанием воды, но при любой (в исследованных пределах) степени наполнения. В то же время, с ростом степени наполнения реологические свойства смеси изменяются: и эффективная вязкость, и предельное напряжение смеси, и способность к тиксотропии будут возрастать. Поэтому окончательно выбирать состав следует с учетом этих технологических параметров композиции, один из которых ( $10^3 \text{ Ip } \nu$ ) описывается моделью 14 на рис. 3.1, в.

Выбор рецептурной области, обеспечивающей заданные уровни вязкости смеси и прочности композита. Поиск рецептурных условий, обеспечивающих  $\nu \leq 15$  с (3.1) целесообразно вести, исходя не из алгоритма индивидуальной минимизации  $Y_2$ , а с учетом решений, полученных при *максимизации* предела прочности, в частности, для концентраций отвердителя  $x_1$  (3) и эмульгатора  $x_3$  (6). Такое решение оправдано хотя бы потому, что относительные значения коэффициентов  $b_{11}/b_0 = 0,057$  и  $b_{33}/b_0 = 0,042$  в модели 14 меньше, чем аналогичные значения в модели 1 — соответственно 0,14 и 0,08. Следовательно, показатель относительной вязкости  $\nu$  менее чувствителен чем  $R$  к переходу от оптимальных решений (полученных из условия  $\nu_{\min}$ ) к компромиссным (полученным из условия  $R_{\max}$ ).

После подстановки в модель 14  $x_{1.\text{opt}} \{Y_1\} = f_1(x_2, x_3, x_4)$  и  $x_{3.\text{opt}} \{Y_1\} = f_3(x_2, x_4, x_5)$ , взятых из предыдущих решений 3 и 6, получается трехфакторная модель 16 реологического показателя  $\nu$  при условии переменной дозировки отвердителя и эмульгатора, оптимальной по пределу прочности.

По аналогии с предыдущим решением модель 16 расщепляется, при  $x_4 = -1$  17 и  $x_2 = +1$  18, на две модели, изолинии которых показаны на 19 и 20. Анализ диаграмм показывает, что условие  $\nu \leq 15$  с выполняется при малом количестве растворителя ( $x_4 =$

$= -1$ ) в столь узкой зоне (оценка  $P_F = 2,6\%$  — см. гл. 1 — задачу № 11), что реализация такой рецептуры не даст (из-за ошибок аппроксимаций, эксперимента, дозировки компонентов — см. § 1.2) результата, полезного для практики. Значительно обширнее область решений при повышенном количестве растворителя ( $x_4 = +1$ ), когда оценка вероятности появления требуемого соотношения (3.1) состава достигает  $P_F = 43\%$ .

Анализ решений в промежуточных условиях  $-1 < x_4 < +1$  ведется по модели 16 при ее дальнейшем преобразовании, исходя из минимизации критерия вязкости  $\ln v \rightarrow \min$ . Для модели 16 выполняется условие 21, что позволяет ввести переменную дозировку воды 22, оптимальную именно с точки зрения снижения относительной вязкости смеси  $v$ . Подстановка 22 в 16 приводит в факторном пространстве «растворитель — ПВХ» к модели 23, изолинии которой показаны на 25. В этом случае требование  $v \leq 15$  с удовлетворяется при пониженном наполнении композита гранулами ПВХ (тем больше, чем выше дозировка растворителя — нижний левый угол диаграммы 25 — см. рис. 3.1).

Уровень оптимальности  $x_2 = f_2(x_4, x_5)$ , определяемый по соотношению 22, не связан в последнем варианте с оптимизацией композита по прочности, поэтому компромиссное решение для  $v$  и  $R$  можно получить, учитывая 22 в модели 7. После соответствующей подстановки получена модель прочности 24, изолинии которой отображаются 25 в одной факторной плоскости «растворитель — ПВХ» с изолиниями модели вязкости. Таким образом, компромиссное решение найдено по 25 как область водоэмульсионных составов, наполненных гранулами ПВХ до 6...10% (до  $-0,5 \geq x_5 \geq -0,7$ ) массы эпоксидной смолы с 10...25% растворителя ( $-0,5 \leq x_4 \leq +1$ ). Подстановкой соответствующих значений  $x_4$  и  $x_5$  в 15 и 22 определены необходимые для обеспечения (3.1) дозировки остальных компонентов. Так, в частности, для композита с 6% ПВХ ( $x_5 = -0,7$ ) и 13% растворителя ( $x_4 = -0,2$ ) дозировка воды, исходя из 22,

$$\begin{aligned} x_{2,\text{opt}} &= -0,126 + 0,099(-0,2) + 0,069(-0,7) = \\ &= -0,194 \text{ или } X_2 = 6\%, \end{aligned}$$

а эмульгатора и отвердителя, исходя из 6 и 3, соответственно

$$\begin{aligned} x_{3,\text{opt}} &= -0,332 + 0,119(-0,194) - 0,043(-0,2) + \\ &+ 0,539(-0,7) = -0,723 \text{ или } X_3 = 1,83\%, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_{1,\text{opt}} &= -0,094 + 0,414(-0,194) - 0,217(0,723) - \\ &- 0,261(-0,2) = -0,069 \text{ или } X_1 = 13,7\%. \end{aligned}$$

Наиболее полную картину области допустимых решений дает трехмерная диаграмма на рис. 3.2, а, внутри которой, кроме поверхностей  $R = 35$  МПа и  $v = 15$  с, нанесена и пересекающая их плоскость «растворитель — ПВХ» 25. Диаграммам «вода — ПВХ» 19 и 20 соответствуют левая передняя и правая задняя стороны куба.

Изменение нормативных значений  $R_{тр}$  и  $v_{тр}$  (3.1) вызывает *конформацию* области допустимых решений, причем, одни зоны факторного пространства «закрываются», а другие «открываются» для выбора состава композита. Так, в частности, повышение требований к пределу прочности до  $R \geq 45$  МПа при смягчении их по условной вязкости до  $v \leq 25$  с приводит (рис. 3.2, б) к исчезновению зоны эмульсий с повышенным содержанием воды ( $X_2 > 10\%$ ) при увеличении допустимой дозировки ПВХ (в том числе при минимальном количестве растворителя 5%).

Описанный выше алгоритм поиска компромиссного решения по двум (или нескольким) слабокоррелированным критериям качества композита удачно реализуется на мини-ЭВМ в диалоговом режиме [20], что позволяет технологу оперативно анализировать возможные варианты составов.

Предложенные [94] на основании исследований водоэмульсионные эпоксидные составы использовали [110] для нанесения гидроизоляционного слоя по увлажненной поверхности багажного тоннеля вокзала в Софии, восстановления антикоррозионной

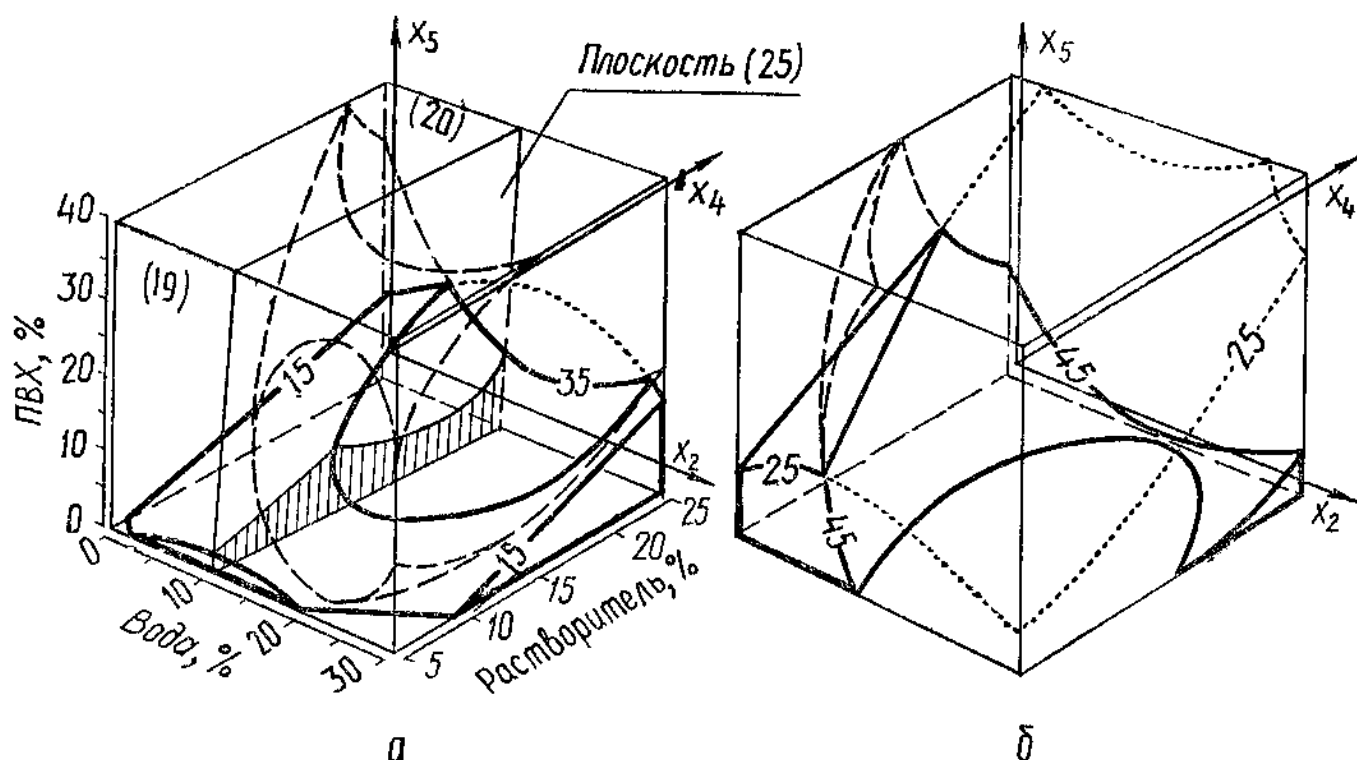


Рис. 3.2. Трансформация областей допустимых решений при изменении требований к композиту (а —  $R \geq 35$  МПа;  $v \leq 15$  с; б —  $R \geq 45$  МПа;  $v \leq 25$  с)



изоляции очистной станции фармацевтического завода в Софии и резервуаров реагентов парокотельной станции «Елаците». Получен значительный технико-экономический эффект, в том числе за счет сокращения времени, необходимого для проведения работ.

Водоэмульсионные эпоксидные наполненные композиты особо перспективны для создания адгезионных слоев при соединении старого со свежим бетоном, нанесения нестекаемых защитных слоев по вертикальным и наклонным поверхностям, инъецирования трещин в бетонных и железобетонных конструкциях.

### **3.3. МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПОИСК ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИЦИЙ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ДОБАВКАМИ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ДЕМПФИРУЮЩИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ**

Безводные эпоксидные композиции имеют, как правило, высокие когезионные и адгезионные показатели, позволяющие использовать их при восстановлении конструкций ответственных сооружений различного назначения. В то же время, для отдельных элементов и конструкций, испытывающих существенные *динамические нагрузки* (фундаменты агрегатов, корпуса станков, контейнерные площадки), важно, чтобы такой композит обладал хорошими *демпфирующими свойствами*, чего можно добиться, в частности, снижением его модуля упругости (при сохранении заданного уровня предела прочности).

**Условия эксперимента и результаты моделирования.** Исследована композиция на основе пластифицированной дибутилфталатом смолы Эпокса-АП<sub>1</sub> (см. табл. 3.1), в которой варьировались пять факторов. Кроме *отвердителя ДЭТА* и *наполнителя ПВХ*, характеристика которых дана в § 3.2, изучалось влияние содержания модифицирующей *кремнийорганической добавки (X<sub>6</sub>)* и *латекса (X<sub>7</sub>)*, а также *минерального наполнителя — цемента (X<sub>8</sub>)*.

Количество кремнийорганической добавки — полиэтилгидридсилоксановой (ПЭГС) жидкости марки 136-41 (старое название ГКЖ-94) изменялось от 0 до 1 % массы смолы (указан процент чистой ПЭГС). Она не растворима в воде, но может быть в ней эмульгирована. Выпускается в СССР (ГОСТ 10834—76\*) и используется обычно как гидрофобизатор. В данном случае цель ее введения в композицию [98] — создание микропористой структуры, обеспечивающей повышенные демпфирующие свойства затвердевшего материала. Предварительные исследования показали, что уменьшение объемной массы  $\gamma$ , кг/м<sup>3</sup>, пределов прочности на изгиб  $R$ , МПа, и на сжатие  $R_c$ , МПа, при введении

модификатора  $0,2 \leq C_M \leq 2 \%$  описывается функциями

$$\left. \begin{aligned} \gamma &= 1058 - 415C_M + 27C_M^2 = 10,58 (100 - 39,2C_M + 2,6C_M^2), \\ R &= 56,2 - 31,6C_M + 3,3C_M^2 = 0,562 (100 - 68,9C_M + 13,4C_M^2), \\ R_c &= 46,0 - 31,7C_M + 6,2C_M^2 = 0,460 (100 - 56,3C_M + 5,8C_M^2). \end{aligned} \right\} \quad (3.5)$$

Анализ нормированных по свободному члену функций (3.5) свидетельствует, что интенсивность снижения для  $R$  при концентрациях  $C_M$  близких к 1 % не выше чем для  $R_c$  (а при  $C_M \geq 1,6 \%$  даже ниже). Такое соотношение  $R_c/R$  позволяет предполагать [25], что за счет введения добавки ПЭГС можно улучшить относительную деформативность и уменьшить собственные внутренние напряжения в структуре композита, а тем самым улучшить его демпфирующие способности.

Второй модифицирующей добавкой служил бутадиен-стирольный латекс марки Булекс-65 ГП с 45 % сухого вещества, стабилизированный Веранол Н-15 (20 % массы латекса — см. § 3.2) плотностью  $\rho = 0,97 \text{ г/см}^3$ . Латекс Булекс-65ГП, выпускаемый комбинатом в г. Бургасе, используют, в частности, при производстве резинотехнических изделий, которые характеризуются сравнительно высокими показателями по удлинению (до 600 %), сопротивлению старению. Введение латекса способствует улучшению вязкопластических свойств технологических смесей [72], а для затвердевшего полимерсодержащего композита — увеличению его предельной деформативности, ударопрочности. В данном случае введением Булекс-65 ГП  $0 \leq C_L \leq 40 \%$  регулировали комплекс структурно-механических характеристик, определяющих демпфирующие свойства эпоксидного композита.

Вторым наполнителем был портландцемент (завод «Златна Панага», плотность  $\rho = 3,20 \text{ г/см}^3$ , удельная поверхность по Блейну  $320 \text{ м}^2/\text{кг}$ ) в количестве  $0 \leq C_C \leq 40 \%$  массы смолы. Цель введения — уменьшение доли дорогостоящих компонентов в общем объеме композиции. Кроме того, предполагалось, что эта добавка вызовет за счет гидратационного твердения уплотнение структуры в тех случаях, когда композиция будет содержать воду (неизбежная «присадка» при использовании латексов). Введение смешанных органоминеральных наполнителей целесообразно не только с точки зрения экономии смолы, но и для уплотнения и улучшения структуры композита (разномодульные наполнители могут уменьшать концентрацию внутренних напряжений в матрице и перераспределять их на большее число цен-



$$\begin{aligned}
R = & 20,68 + 1,22 X_1 - 0,89 X_1^2 - 0,77 X_1 X_5 - 0,41 X_1 X_5 + 0,36 X_1 X_7 - 0,66 X_1 X_8 - \\
& - 2,81 X_5 + 1,46 X_5^2 & + 1,49 X_5 X_6 - 2,76 X_5 X_7 - 1,46 X_5 X_8 - \\
& - 6,98 X_6 + 1,66 X_6^2 & + 3,85 X_6 X_7 + 0,57 X_6 X_8 - \\
& - 12,41 X_7 + 4,81 X_7^2 & + 2,62 X_7 X_8 - \\
& - 2,50 X_8 - 0,89 X_8^2 .
\end{aligned}
\tag{3.8}$$

Дополнительным структурно-механическим показателем было время  $\tau$ , ч, до достижения композицией пластической прочности (по пенетрации конуса П. А. Ребиндера) уровня  $P_m = 0,5$  МПа. Этот показатель описывается моделью (3.9), где  $Y_3 = (\ln \tau) 10^3$ . Для получения жизнеспособной технологичной смеси время, согласно регламента производства строительных работ, должно было быть не менее чем 1 ч, но и не более чем 4,5 ч (т. е.  $0 \leq Y_3 \leq 1504$ ).

$$\begin{aligned}
Y_3 = & 1346 - 575x_1 - 583x_1^2 - 89x_1x_6 + 182x_1x_7 + \\
& + 146x_5 + 367x_5^2 + 81x_5x_6 - 338x_5x_7 - \\
& - 332x_6 - 398x_6^2 + 461x_6x_7 + 53x_6x_8 + \\
& + 1126x_7 + 547x_7^2 - 317x_7x_8 + \\
& + 377x_8 - 423x_8^2.
\end{aligned}
\tag{3.9}$$

**Анализ упругих свойств композита.** Анализ моделей (3.7) показал, что минимальный модуль упругости  $E_{\min} = 1,08$  ГПа находится в точке с координатами

$$\left. \begin{aligned}
x_1 &= -1 \text{ или } X_1 = 8 \% \text{ ДЭТА,} \\
x_5 &= +1 \text{ или } X_5 = 40 \% \text{ ПВХ,} \\
x_6 &= 0,15 \text{ или } X_6 = 0,575 \% \text{ ПЭГС,} \\
x_7 &= +1 \text{ или } X_7 = 30 \% \text{ латекса,} \\
x_8 &= -1 \text{ или } X_8 = 0 \text{ — без цемента,}
\end{aligned} \right\}
\tag{3.10}$$

которые качественно соответствуют вышеизложенным априорным представлениям о роли рецептурных факторов в формировании

нии упругих свойств эпоксидных композитов (необходимо повышенное содержание ПВХ и латекса для снижения  $E$ ).

В то же время, из модели (3.8) следует, что максимальная когезионная прочность  $R_{\max} = 66,7$  МПа соответствует чистой немодифицированной смоле при повышенном расходе отвердителя

$$\begin{aligned} x_1 &= +1 \text{ или } X_1 = 12 \% \text{ ДЭТА,} \\ x_5 &= -1 \text{ или } X_5 = 0 \text{ — без ПВХ,} \\ x_6 &= -1 \text{ или } X_6 = 0 \text{ — без ПЭГС,} \\ x_7 &= -1 \text{ или } X_7 = 0 \text{ — без латекса,} \\ x_8 &= -1 \text{ или } X_8 = 0 \text{ — без цемента.} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Сравнительный анализ (3.10) и (3.11) позволил сделать вывод о том, что для выполнения требований (3.6) — получения материала с повышенными демпфирующими свойствами необходимо выбрать бесцементную рецептуру. Подстановка  $x_8 = -1$  в модель (3.7) переводит ее в четырехфакторную

$$\begin{aligned} E &= 3,23 - 0,10x_1 - 0,65x_1^2 + 0,11x_1x_5 - 0,21x_1x_6 + 0,50x_1x_7 - \\ &- 0,76x_5 \quad \quad \quad + 0,18x_5x_6 + 0,25x_5x_7 - \\ &- 0,66x_6 + 0,90x_6^2 - \\ &- 0,76x_7 + 0,29x_7^2, \end{aligned} \quad (3.12)$$

для анализа которой использован новый метод графического отображения [16, 17, 72] — «квадрат на квадрате». Одна пара факторов (в частности, модификаторы  $x_6$  и  $x_7$ ) образуют *первичный информационный элемент* — «базовый квадрат», на котором изображены изолинии  $E$ , ГПа, при условии стабилизации уровней второй пары факторов (отвердитель  $x_1$  и наполнитель  $x_5$ ) в некоторых точках соответствующего им факторного пространства — «несущего квадрата». Как правило, достаточно рассмотреть девять таких квадратов, расположенных в точках-центроидах несущего квадрата, что облегчает построение квадратичных моделей для числовых показателей (см. табл. 1.4), обобщающих информацию на базовых квадратах  $\{x_6, x_7\}$ .

Диаграмма типа «квадрат на квадрате» показана на рис. 3.3, а. В левом нижнем углу несущего квадрата расположена увеличенная базовая диаграмма, отображающая влияние на  $E$  изменения количества модификаторов ПЭГС и латекса при фиксированном содержании отвердителя (нижний уровень — 8 %

ДЭТА) в композите без наполнителя (нижний уровень — нет ПВХ). В ее поле отражены изолинии  $E$  (семейство эллипсов с центром вне исследованного факторного пространства), соответствующие модели (3.13), полученной из (3.12) при подстановке  $x_1 = x_5 = -1$ ,

$$E = 3,55 - 0,63x_6 + 0,90x_6^2 - 1,57x_7 + 0,29x_7^2. \quad (3.13)$$

Согласно (3.13) модуль упругости уменьшается от 6,88 ГПа для немодифицированной смолы до 2,22 ГПа для композиции с 30 % латекса и 0,68 % ПЭГС. Содержание ПЭГС — константа при любом уровне добавки латекса, так как  $\beta_{67} = 0$  и, следовательно,  $x_{6,opt} = -0,63 : 2 (-0,90) = +0,35$ . Зависимость (3.13) модуля упругости от содержания модификаторов характеризуется следующими *обобщающими показателями*  $G$  (см. табл. 1.4):

максимумом  $E_{max} = 6,88$  ГПа при  $x_6 = -1, x_7 = -1$ ;

минимумом  $E_{min} = 2,22$  ГПа при  $x_6 = 0,35, x_7 = +1$ ;

абсолютным перепадом  $\Delta E_{min}^{max} = 6,88 - 2,22 = 4,66$  ГПа;

относительным перепадом  $\delta E_{min}^{max} = 6,88/2,22 = 3,10$ ;

расстоянием между  $E_{max}$  и  $E_{min}$   $l =$

$$= \sqrt{[(-1)(+1)]^2 + [(-1) - (0,35)]^2} = 2,41;$$

абсолютным усредненным градиентом:  $\bar{\nabla} E = 4,66/2,41 =$   
 $= 1,93$  ГПа/ед;

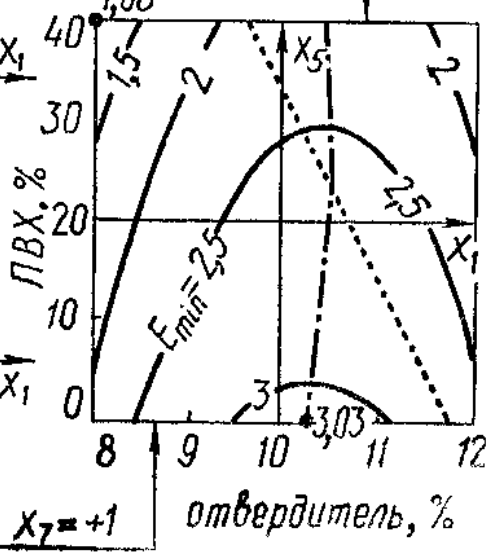
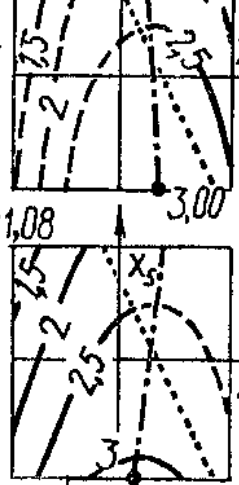
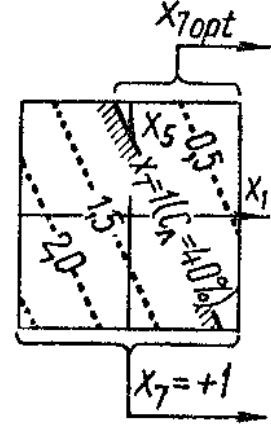
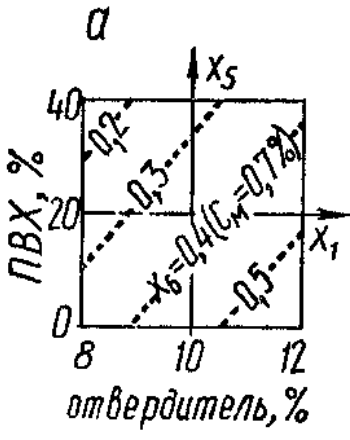
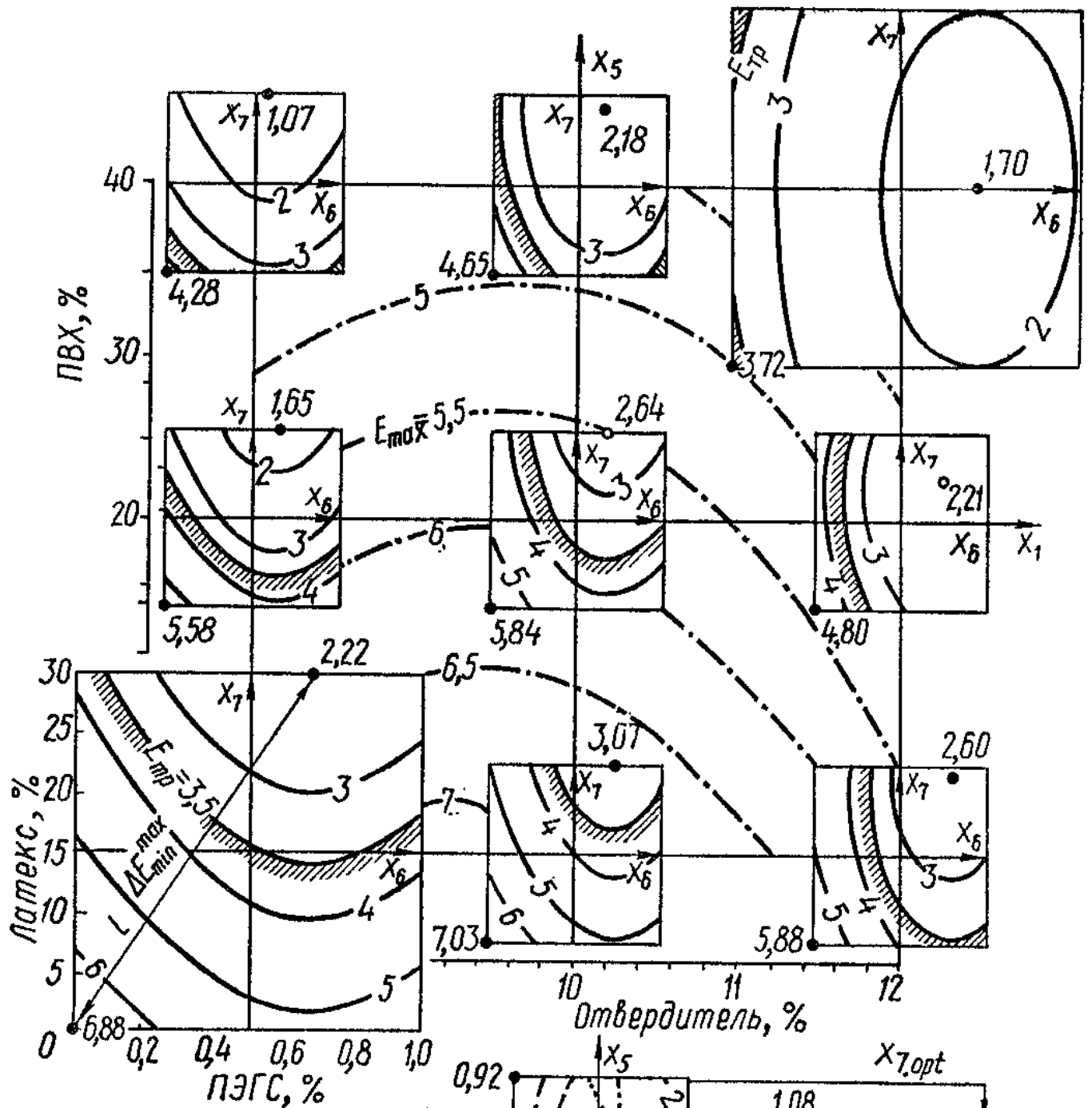
относительным усредненным градиентом  $\bar{\nabla}_\delta E =$

$$= 3,01/2,41 = 1,28.$$

(3.14)

Требованию  $E \leq 3,5$  удовлетворяют композиты в верхней части диаграммы, площадь которой, ограниченная изолинией

Рис. 3.3. Диаграмма «квадрат на квадрате» для анализа влияния рецептуры на модуль упругости композита  $E$  (а); оптимальные количества модификатора (б) и латекса (в), а также суммируемые (г) и результирующая диаграммы (д) для оценки  $E_{min}$



а

б

2

д

$E_{тр}$  и прямыми  $x_6 = x_7 = +1$ , характеризуется обобщающим показателем  $P_F = 35 \%$ .

Анализ девяти базовых диаграмм позволил сделать ряд предварительных технологических выводов, в частности, за счет модификации смолы добавками кремнийорганических соединений и латексов можно снизить модуль в два — четыре раза. Очевидно, что оптимальна повышенная концентрация модифицирующих добавок. Причем, она зависит от количества отвердителя и наполнителя в системе.

Из показателей, обобщающих влияние модифицирующих добавок, (3.14) самый простой — значения  $E_{max}$  и  $E_{min}$ , а также их координаты. Максимальное значение  $E_{max}$  на всех девяти базовых квадратах наблюдается у немодифицированной эпоксидной смолы (нижние левые углы базовых квадратов,  $x_6 = x_7 = -1$ ). Изолинии  $E_{max}$  в поле «отвердитель — ПВХ» нанесены на несущем квадрате. Они соответствуют модели

$$E_{max} = 5,84 - 0,39x_1 - 0,65x_1^2 - 1,19x_5 + 0,11x_1x_5, \quad (3.15)$$

полученной из (3.12) подстановкой  $x_6 = x_7 = -1$ . Из (3.15) и диаграммы на несущем квадрате следует, что абсолютный максимум  $E_{max} = 7,13$  ГПа достигается при отсутствии наполнителя ( $b_{55} = 0$ ;  $b_5 < 0$ ;  $|b_5| > |b_{15}|$ ;  $x_5 = -1$ ) и введении при этом 9,2 % ДЭТА ( $x_{1,opt} = -0,385$ ).

На каждом базовом квадрате концентрация ПЭГС, соответствующая  $E_{min}$ , легко определяется ДШМ из (3.12) как

$$\begin{aligned} x_{6,opt} &= 0,367 + 0,117x_1 - 0,100x_5, \\ 0,150 &\leq x_{6,opt} \leq 0,584. \end{aligned} \quad (3.15a)$$

Диаграмма изменения по (3.15a) оптимальной концентрации модификатора показана на рис. 3.2, б. Для обеспечения  $E_{min}$  всякое увеличение количества отвердителя необходимо сопровождать повышением концентрации ПЭГС, а увеличение доли ПВХ — снижением этой концентрации, причем, влияние этих факторов примерно равное.

Оптимальная для обеспечения  $E_{min}$  концентрация латекса описывается моделью (3.16), построенной по аналогичной (3.15a) методике,

$$\begin{aligned} x_{7,opt} &= 1,310 - 0,862x_1 - 0,431x_5, \\ 0,017 &\leq x_{7,opt} \leq +1 \leq 2,603. \end{aligned} \quad (3.16)$$



По мере уменьшения количества отвердителя и ПВХ содержания латекса, необходимого для обеспечения  $E_{\min}$ , увеличивается. Однако, из (3.16) ясно, что существует в исследованном факторном пространстве область (рис. 3.3, в), где вместо  $x_{7,\text{opt}} = f(x_1, x_5) > 1$  должна быть принята константа  $x_7 = +1$  [19], соответствующая предельной (в области данного эксперимента) концентрации латекса  $X_7 = 40\%$ . Таким образом, оптимальное содержание латекса отражается непрерывной сплайн-функцией, составленной из плоскости, параллельной координатным осям, и наклонной плоскости (3.16). Это приводит к тому, что и изменение  $E_{\min}$  также описывается сплайн-функцией (рис. 3.3, д), составленной на рис. 3.3, г из соответствующих двухфакторных диаграмм: верхняя — для  $x_{6,\text{opt}}$  по (3.15) и  $x_{7,\text{opt}} = f(x_2, x_4)$  по (3.16), а нижняя — для  $x_{6,\text{opt}}$  по (3.15) и  $x_7 = +1$ .

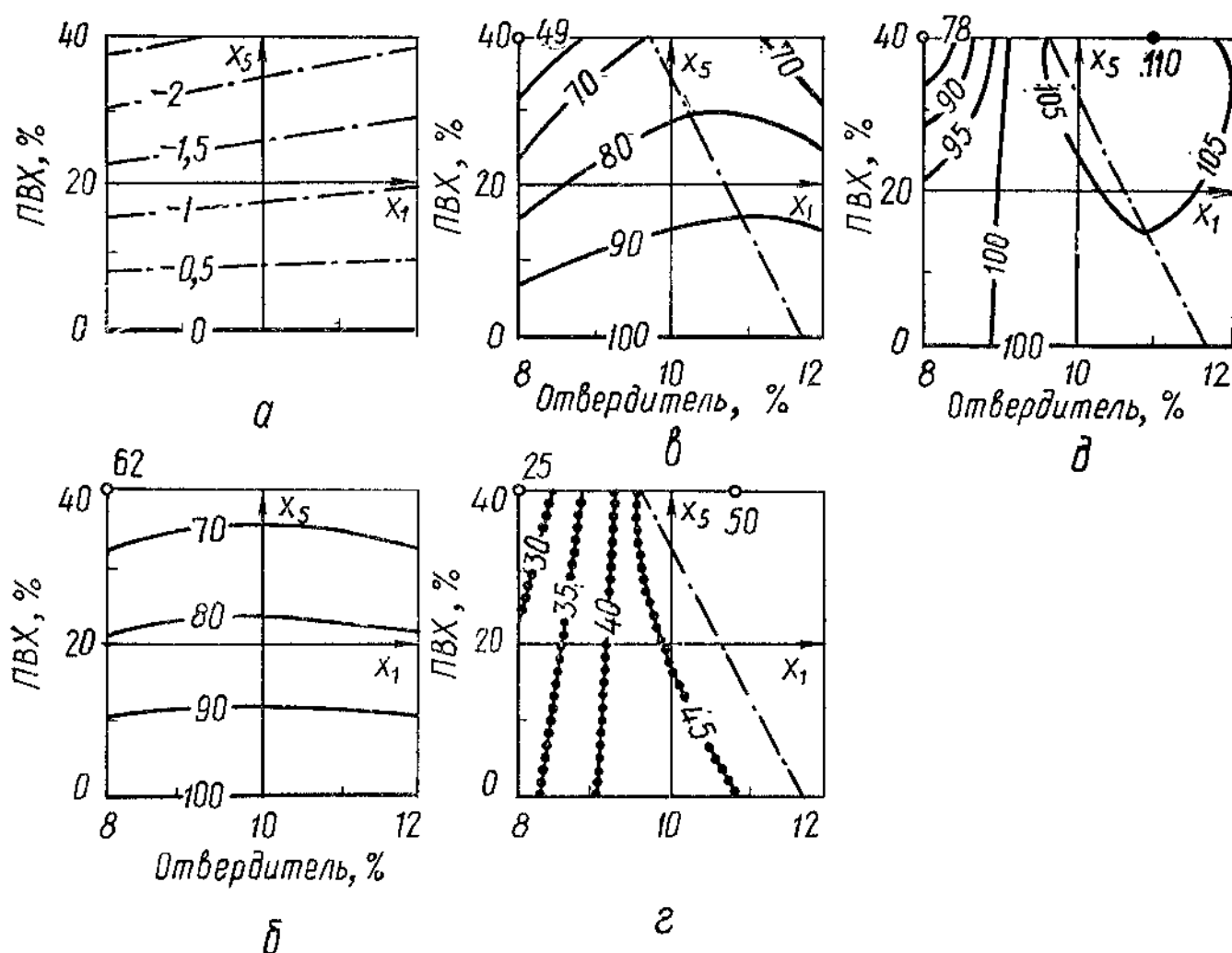


Рис. 3.4. Абсолютный (а) и относительный (б, в) перепады в поле  $\{x_1, x_5\}$  максимального  $E_{\max}$  (а, б) и минимального  $E_{\min}$  (в) в области  $\{x_6, x_7\}$  модулей упругости, а также зависимость показателей чувствительности  $\delta E_{\max}^{\min}$  (г) и  $\kappa \{\delta E_{\max}^{\min}\}$  (д) от изменения количества отвердителя ( $x_1$ ) и ПВХ ( $x_5$ )

Для анализа роли наполнителя ПВХ в формировании упругих свойств композита целесообразно использовать методику [16], основанную на введении «эталонных» функций, а также на специальном преобразовании с их помощью многофакторных полиномиальных моделей. Так, подстановкой в (3.15) значения  $x_5 = -1$  (нет наполнителя) может быть получена модель изменения в зависимости от количества отвердителя модуля упругости ненаполненной эпоксидной смолы

$$E_{\max}^0 = 7,03 - 0,50x_1 - 0,65x_1^2, \quad (3.17)$$

т. е. «эталонная» функция. Используя ее, легко найти абсолютное снижение  $E_{\max}$  при введении ПВХ ( $x_5 > -1$ ) как разность моделей (3.15) и (3.17).

$$\Delta \{E_{\max}\} = E_{\max} - E_{\max}^0 = -1,19 + 0,11x_1 - 1,19x_5 + 0,11x_1x_5. \quad (3.18)$$

Изолинии этого показателя изображены на рис. 3.4, а. Падение  $E_{\max}$  при введении ПВХ тем сильнее, чем ниже концентрация отвердителя в системе. Относительное снижение за счет введения ПВХ модуля упругости  $E_{\max}$  (по сравнению с ненаполненной смолой, у которой  $E_{\max}^0$  принято за 100 %) определяется [72] из (3.17) и (3.18) как дробно-рациональная функция

$$\begin{aligned} \kappa \{E_{\max}\} &= \frac{\Delta \{E_{\max}\}}{E_{\max}^0} = \\ &= \frac{-1,19 + 0,11x_1 - 1,19x_5 + 0,11x_1x_5}{7,03 - 0,50x_1 - 0,65x_1^2}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

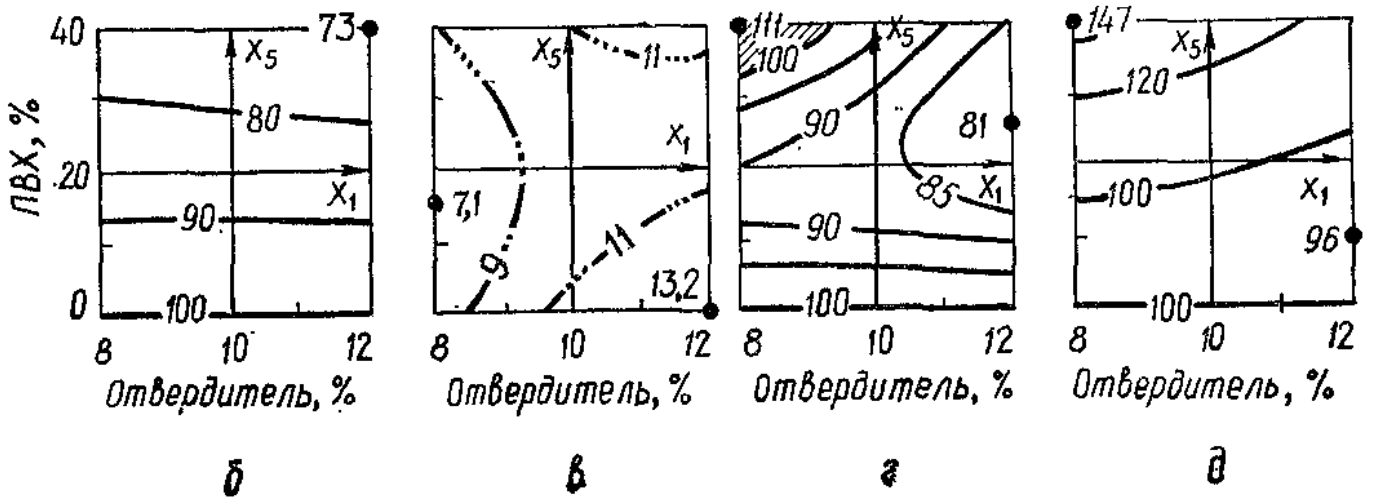
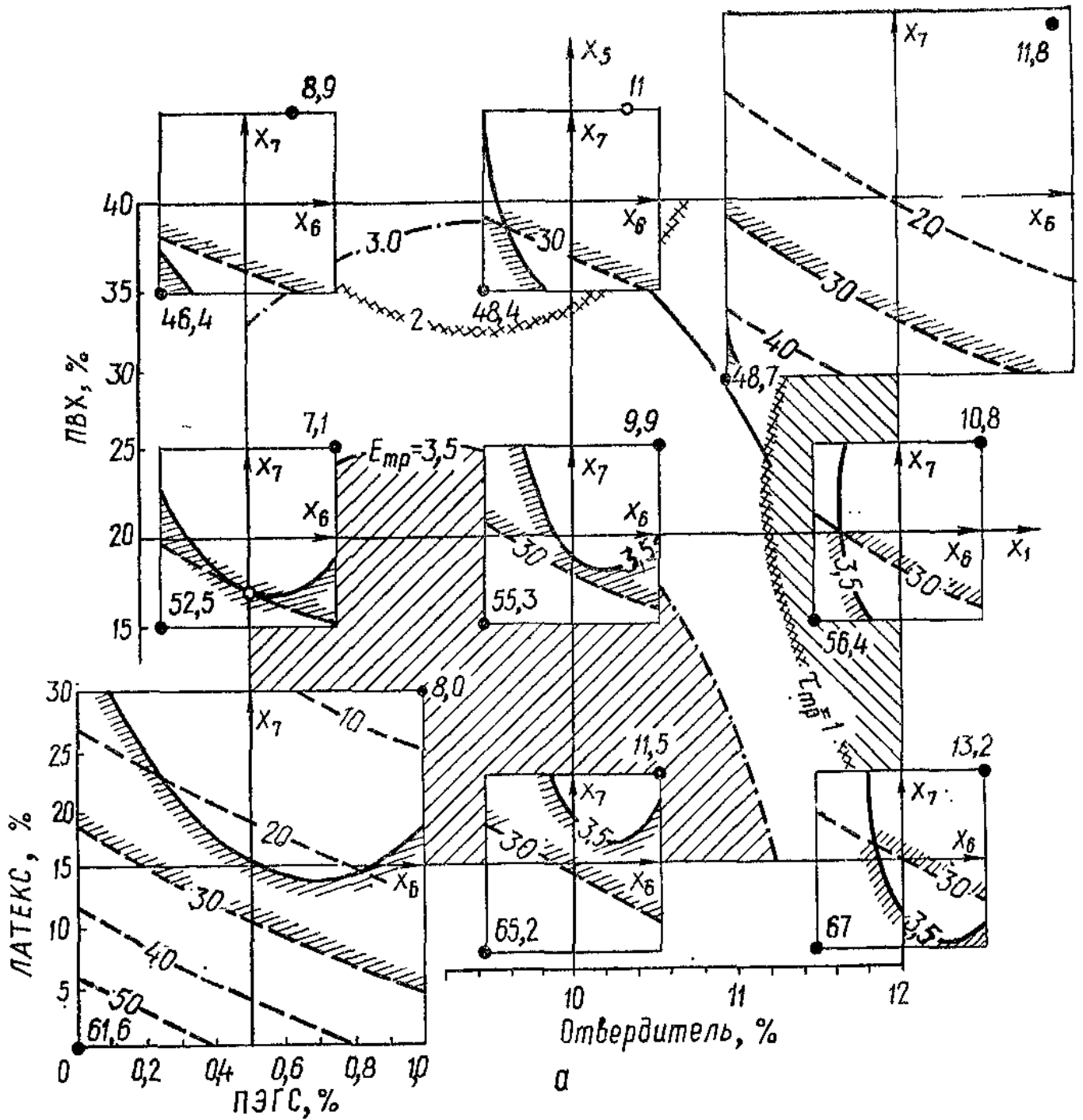
Из соответствующей модели (3.19) диаграммы на рис. 3.4, б следует, что увеличению на 10 % наполнения немодифицированной смолы «мягким» наполнителем ПВХ соответствует снижение модуля упругости композита  $E_{\max}$  на 8,5...9,5 %. Еще сильнее влияет наполнитель ПВХ на минимальный модуль упругости  $E_{\min}$  композита на модифицированной смоле (особенно при нижнем уровне отвердителя). Такое заключение следует из диаграммы  $\kappa \{E_{\min}\}$  на рис. 3.4, в, построенной по аналогичной (3.19) методике. Этот эффект с точки зрения механики полимерных композитов можно объяснить рядом обстоятельств. Во-первых, в зоне  $E_{\min}$  модули упругости модифицированной полимерной матрицы (2,2...3,1 ГПа) и зерна дисперсионного поливинилхлорида

(1,4...3,3 ГПа) близки между собой. Во-вторых, модификация эпоксидной смолы с помощью полиэтилгидридсилоксана и латекса должна изменять характер и относительный объем межфазных слоев [82, т. 1]. В-третьих, усиливается возможность образования под влиянием модификаторов в системе [118] структурных ячеек из агрегатированных зерен эмульсионного ПВХ.

Информативный обобщающий показатель (см. § 1.3, задача № 9) — *относительное уменьшение* модуля упругости  $\delta E_{\max}^{\min} = 100 \times E_{\min} / E_{\max}$  (%) в поле каждого базового квадрата «ПЭГС — латекс»: чем больше это значение, тем *чувствительнее* композит данной степени отверждения и наполнения к модификации матрицы кремнийорганикой и латексом (так как  $x_1$  и  $x_5$  для такого квадрата стабилизированы). Диаграмма  $\delta E_{\max}^{\min}$  на рис. 3.4, г построена с использованием численных методов на основе диаграмм  $E_{\max}$  (см. рис. 3.3, а, «несущий квадрат») и  $E_{\min}$  (см. рис. 3.3, д). Чувствительность композита к модификации матрицы интенсивно увеличивается с ростом количества отвердителя до средней его концентрации (около 10 %), после чего остается постоянной ( $E_{\max}$  примерно вдвое больше чем  $E_{\min}$ ). Влияет на значение  $\delta E_{\max}^{\min}$  и увеличение степени наполнения матрицы гранулами ПВХ, что отражает диаграмма  $\delta E_{\max}^{\min}$  на рис. 3.4, д, изолинии которой рассчитаны по диаграмме рис. 3.4, г. Такой анализ (в сравнении с ненаполненной матрицей) упругих свойств наполненного композита показал резкое увеличение чувствительности матрицы к модификации при большом наполнении гранулами ПВХ и малом количестве отвердителя. Поэтому именно в этой зоне можно ожидать появления наилучших компромиссных решений при получении материалов с повышенными демпфирующими свойствами на основе модифицированных смол.

**Анализ когезионной прочности композита.** *Когезионная прочность* безцементного композита, по аналогии с рис. 3.4, а, также описывается диаграммами «квадрат на квадрате». На рис. 3.5, а все изолинии  $R$ , МПа, показаны только для двух резко различных композитов — без наполнителя ( $x_1 = x_5 = -1$ ) и при максимальном наполнении ( $x_1 = x_5 = +1$ ). Для остальных на базовых квадратах обозначена лишь граница области  $R_{\text{тр}} = 30$  МПа — по условию (3.6).

С ростом степени модификации матрицы когезионная прочность композита *уменьшается* в 4...8 раз, т. е. *интенсивнее* (как и предполагалось), чем снижался в аналогичных условиях модуль упругости. Максимальная когезионная прочность



композитов на немодифицированной смоле — нижний левый угол базовых диаграмм. Снижение прочности  $R_{\max}$  по отношению к эталонному ненаполненному материалу, рассчитанное по аналогии с (3.19), показано на рис. 3.5, б. Значения  $\kappa \{R_{\max}\}$  несущественно отличаются от  $\kappa \{E_{\max}\}$  на рис. 3.4, б. Следовательно, темпы снижения и модуля упругости и когезионной прочности под влиянием введения «мягких» наполнителей можно считать одинаковыми, что свидетельствует о подобном структурообразующем действии [39] наполнителя на эти свойства композита, если он сделан с применением смол, не модифицированных полиорганосилоксанами и латексами.

*Минимальная когезионная прочность* наблюдается для композитов с большим содержанием модифицирующих добавок. Изменение  $R_{\min}$  при увеличении степени наполнения и количества отвердителя показано на рис. 3.5, в. Характер изолинии  $R_{\min}$  обнаруживает интересную закономерность: если наибольшее значение  $R_{\min}$  наблюдается при повышенном содержании отвердителя у ненаполненных смол, то абсолютно наименьшая прочность  $R_{\min} = 7,1$  МПа у композитов с небольшим количеством отвердителя при некотором среднем наполнении (около 15 % массы смолы), выше которого минимальная прочность композита с модифицированной матрицей начинает возрастать. Этот эффект *упрочняющего* воздействия «мягкого» наполнителя на композит с высокой степенью модификации смол особенно четко выявляется при анализе изолиний  $\kappa \{R_{\min}\}$ , изображенных на рис. 3.4, г, где особо выделена зона композитов более прочных, чем эталонные.

Новая информация извлечена при анализе диаграммы на рис. 3.5, д, где отражены изолинии показателя *чувствительности* когезионной прочности к модификации матрицы  $\delta R_{\max}^{\min}$ , нормированного к параметрам эталонного ненаполненного композита. Во-первых, обобщающий показатель  $\kappa \{\delta R_{\max}^{\min}\}$  (в отличие от аналогичного для модуля упругости — см. рис. 3.4, д) возрастает при любой концентрации отвердителя, если количество ПВХ превышает 20 % массы смолы. Во-вторых, наибольшее значение

---

Рис. 3.5. Диаграмма «квадрат на квадрате» (а) для анализа влияния рецептуры на прочность композита и выявления областей допустимых решений, а также оценки обобщающих показателей (б —  $\kappa \{R_{\max}\}$ , в —  $R_{\min}$ , г —  $\kappa \{R_{\min}\}$ , д —  $\kappa \{\delta R_{\max}^{\min}\}$ ) в поле факторов «отвердитель — ПВХ»

$\kappa \{ \delta R_{\max}^{\min} \}$  соответствует именно той зоне, где находилось наименьшее значение  $\kappa \{ \delta E_{\max}^{\min} \}$ , следовательно вырисовывается достаточно четко область поиска компромиссного решения, требуемого по (3.6).

**Выбор состава демпфирующего композита.** На каждом базовом квадрате, изображенном на рис. 3.5, а, нанесена граничная изолиния  $E \geq 3,5$  ГПа по условию (3.6). На трех базовых квадратах ( $x_1 = x_5 = -1$ ;  $x_1 = x_5 = 0$ ;  $x_1 = 0$  и  $x_5 = -1$ ) параметр  $P_F = 0$  (т. е. свободная от ограничений область факторного пространства отсутствует — граница  $E$  выше границы  $R$ ). На одном квадрате ( $x_1 = -1, x_5 = 0$ ) свободная зона вырождена в точку ( $P_F \rightarrow 0$ ). На остальных пяти квадратах зоны возможных решений  $P_F = 10...18\%$  и расположены в области малой концентрации латекса в матрице ( $X_5 < 15\%$ ). На несущем квадрате «отвердитель — ПВХ» эти результаты обобщены: заштрихована зона, в которой нет решений (так как при  $R \geq 30$  МПа наименьшее значение  $E > 3,5$  ГПа) и проведена изолиния наименьшего значения  $E = 3$  в свободной зоне. Из этой диаграммы следует, что для основных показателей качества  $E$  и  $R$  могут быть получены удовлетворительные по (3.6) решения как при повышенном наполнении ПВХ матрицы, так и при повышенном содержании в ней отвердителя. Однако, исходя из механизма поликонденсации эпоксидных смол [88], последнее заключение требовало проверки по дополнительному критерию  $-1 \leq \tau \leq 4,5$  ч — продолжительности структурообразования до достижения пластической прочности  $P_m = 0,5$  МПа, результаты расчетов которого по модели (3.9) приведены в табл. 3.3 вместе с данными о механических свойствах композита.

Из табл. 3.3 следует, что только среди составов с пониженной концентрацией отвердителя ( $x_1 < +1$ ) возможны такие, которые удовлетворяют технологическим требованиям. Поэтому на несущем квадрате выделена вторая запрещенная зона (где  $\tau < 1$  ч) в области повышенного содержания отвердителя.

Таким образом, в результате проведенного поиска компромиссного решения, удовлетворяющего (3.6), выявлена область составов композитов на основе модифицированной кремнийорганической жидкостью и латексом эпоксидной смолы, наполненной эмульсионным ПВХ. Композиты обладают повышенными демпфирующими свойствами, а смеси — необходимой технологичностью. Они были использованы при ремонте специальных сооружений (фундаменты оборудования, подкрановые балки, конструкции мостовых переходов) и дали значительный технико-экономический эффект. Гамма составов инъекционных композитов со свойствами,

описанными моделями (3.9), (3.10), (3.12), внедрены с учетом инструктивных указаний [110] при реконструкции плавательного бассейна «Спартак» в Софии, на объектах Кремиковского металлургического комбината, завода металлопрофиля в Пернике, завода слаботочной аппаратуры в Велико-Тырново, а также на Софийских ДСК № 1 и № 2 и на других объектах НРБ. Наблюдения за сооружениями подтверждают обоснованность принятых инженерных решений.

Важный с научно-технической точки зрения вопрос возникает в связи с выявлением на диаграммах рис. 3.5, г, д зоны *повышен-*

**Т а б л и ц а 3.3. Интервалы изменения свойств в свободных от ограничения зонах факториального пространства «отвердитель — ПВХ»**

Показатели рецептуры и свойств	Координаты базового квадрата				
	-1	0	+1	+1	+1
Отвердитель — $x_1$	-1	0	+1	+1	+1
Наполнитель — $x_8$	+1	+1	+1	0	-1

Модуль упругости $E$ , ГПа	2,7...3,5	2,9...3,5	1,9...3,5	2,6...3,5	2,4...3,5
Когезионная прочность $R$ , МПа,	30...41	30...40	30...48	30...47	30...44
Продолжительность структурообразования $\tau$ , ч	1,4...2,1	0,9...2,2	0,3...0,8	0,1...0,6	0,1...1

*ной прочности наполненного гранулами ПВХ композита. Роль смешанного органоминерального вяжущего в сильно модифицированной матрице целесообразно проанализировать для композитов с пониженным ( $x_1 = -1$ ) содержанием отвердителя. В этом случае, как следует из табл. 3.3, достаточно широк диапазон изучаемых свойств в свободной от ограничений зоне.*

После подстановки в модели (3.7)...(3.9) значений  $x_1 = -1$  и  $x_8 = x_7 = +1$ , что соответствует переходу к сильно модифицированной смоле, получены двухфакторные модели для анализа органоинеральной смеси наполнителей

$$E_{\text{омс}} = 2,85 + 0,14x_8 - 0,55x_8^2 + 0,44x_5x_8; \quad (3.20)$$

$$R_{\text{омс}} = 9,55 + 2,21x_5 + 1,46x_5^2 + 1,35x_8 - 0,89x_8^2 + 1,46x_5x_8, \quad (3.21)$$

$$Y_{\text{омс}} = 2234 - 111x_5 + 367x_5^2 + 113x_8 - 423x_8^2. \quad (3.22)$$

Анализ моделей (3.20)...(3.22) целесообразно вести, сравнивая по методике (3.19)  $E_{\text{омс}}$ ,  $R_{\text{омс}}$  и  $Y_{\text{омс}}$  с соответствующими показателями ненаполненной ( $x_5 = x_8 = -1$ ) сильно модифицированной ( $x_6 = x_7 = +1$ ) эпоксидной смолы Эпокса АП<sub>1</sub>, обладающей при малом количестве отвердителя ( $x_1 = -1$ ) следующими свойствами:  $R_3 = 8,02$ ,  $E_3 = 2,6$  ГПа и  $\tau_3 = 8,8$  ч.

Изолинии моделей  $\kappa \{R\}$ ,  $\kappa \{E\}$  и  $\kappa \{\tau\}$  на рис. 3.6 позволяют сделать ряд технологических выводов. Так, анализ диаграммы  $\kappa \{R\}$  на рис. 3.6, а показывает, что, если введение индивидуальных наполнителей не упрочняет существенно модифицированную матрицу, то их *одновременное* введение сопровождается синергизмом — прочность *возрастает почти вдвое* (189 % прочности эталона — см. рис. 3.6, а), что свидетельствует об изменении характера поверхностных явлений и межфазных взаимодействий [82 — т. 1]. Поскольку при этом модуль упругости возрастает незначительно (рис. 3.6, б), а время до достижения заданной пластической прочности смеси (рис. 3.6, в) остается постоянным —  $(100 \pm 40)$  %, то, по-видимому, упрочнение происходит, главным образом, за счет изменения структуры адсорбционного слоя [39].

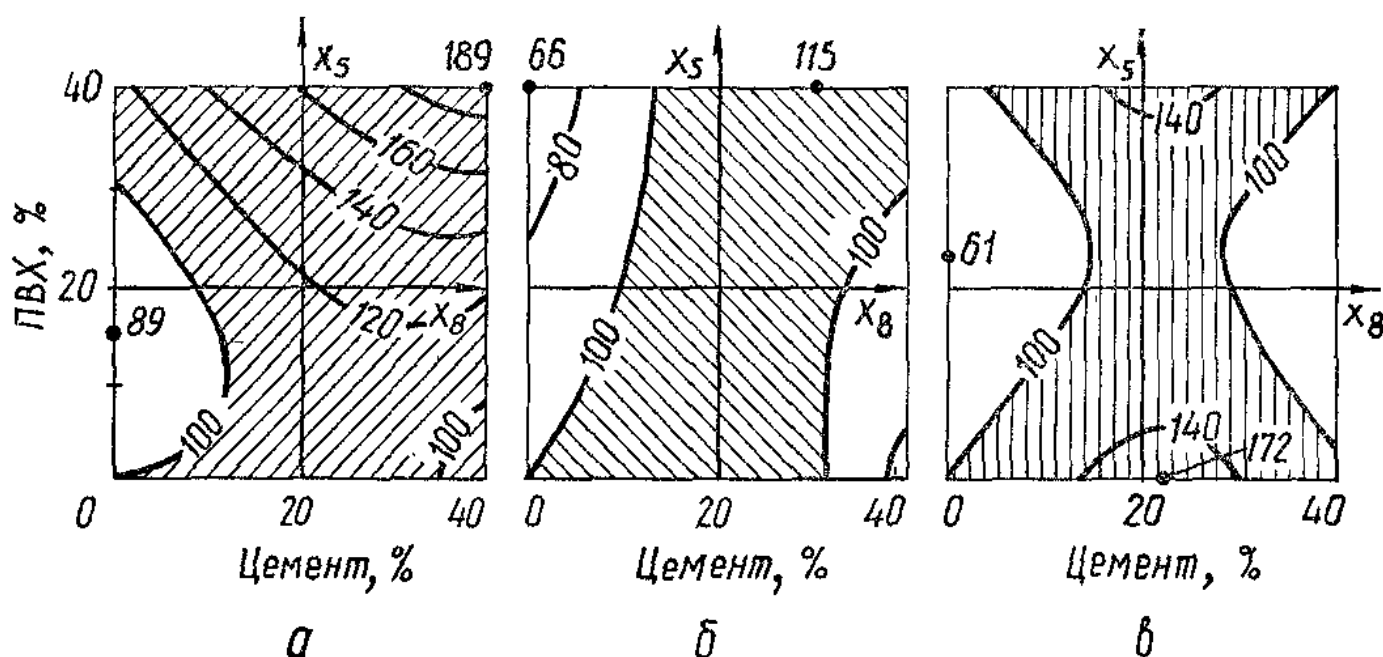


Рис. 3.6. Влияние смешанного полиминерального наполнителя на  $\kappa \{R\}$  (а),  $\kappa \{E\}$  (б) и  $\kappa \{\tau\}$  (в)



Как показывает анализ материалов научно-технических конгрессов в области полимерных композиционных материалов [109, 122], в ближайшем будущем не ожидается создания принципиально новых высокомолекулярных соединений для удовлетворения нужд строительства. Поэтому дальнейшее улучшение свойств композитов на полимерной основе должно идти *по пути модифицирования крупнотоннажных смол и оптимизации органических и минеральных дисперсных, волокнистых и других наполнителей.*

---

## Глава 4

---

# ОПТИМИЗАЦИЯ НАПОЛНИТЕЛЕЙ ПОЛИМЕРНЫХ СВЯЗУЮЩИХ ДЛЯ КОНСТРУКЦИОННЫХ КОМПОЗИТОВ (МОДЕЛИ С ЛИНЕЙНО СВЯЗАННЫМИ ФАКТОРАМИ)

---

### 4.1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ РАЗРАБОТКИ КОНСТРУКЦИОННЫХ КОМПОЗИТОВ ПОНИЖЕННОЙ ПОЛИМЕРОЕМКОСТИ НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Создание конструкционных материалов с заданным комплексом свойств должно обеспечивать снижение материалоемкости строительства и повышение долговечности зданий и сооружений. Обоим направлениям требований отвечают композиционные материалы на основе полимеров. К этому классу материалов относятся и наполненные дисперсными частицами терморезактивные смолы. Их используют для изготовления труб, ванн, фундаментов под технологическое оборудование, в качестве защитно-конструкционных растворов, клеев, покрытий и как связующее\* в полимербетонах. Существенно, что стадия получения этих материалов, как правило, совмещена с формированием готового изделия. При этом, наряду с требованиями к эксплуатационным

---

\* Здесь и далее под связующим понимается наполненная композиция, как это принято в работах [72...75], а не только чистая полимерная матрица (связующее вещество).

свойствам материалов, выдвигаются и требования к свойствам технологической смеси и наиболее общее условие — минимизация материально-энергетических ресурсов.

В полимерных композитах наиболее энергоемки высокомолекулярные соединения. По самым низким оценкам на производство 1 т полимера расходуется 2,5...4,5 т условного топлива (без учета затрат дефицитного органического сырья). Такое же количество энергии идет, в частности, на производство 10...35 т цементного клинкера и на измельчение 1000...2000 т минеральных наполнителей.

Моно- и полифракционные наполнители различной природы предоставляют широкие возможности для уменьшения полимероемкости и управления свойствами композитов. Однако, при этом отдельные требования эксплуатации, технологии, экономии материально-энергетических затрат, как правило, оказываются противоречивыми. Так, направленное на снижение полимероемкости и обеспечение повышенной прочности композита увеличение содержания тонкодисперсного наполнителя требует повышенного расхода энергии на перемешивание и перемещение технологической смеси, на формование изделий. Необходимо подобрать такой наполнитель и в таком количестве, чтобы обеспечить весь комплекс требований к материалу в соответствии с критериями оптимальности в конкретной технико-экономической ситуации. Для решения таких задач оптимизации необходимы количественные соотношения, связывающие содержание наполнителя в полимерной композиции, его «качество», другие рецептурно-технологические факторы (рецептуру матрицы, режимы отверждения) с показателями качества материала.

Многообразие вариантов технологий и сложность процессов структурообразования наполненных полимеров не позволяют дать их количественные описания на уровне существующих теоретических представлений. Необходимые для управления свойствами соотношения целесообразно получать в виде экспериментально-статистических моделей. Их эффективность и полезность для инженерных выводов и развития концептуальных моделей тем выше, чем более полно в их структуре отражены существующие «физические» представления об объекте и учтены цели моделирования.

Полиструктурная теория строительных композитов [25, 72, 75] выделяет в единой структуре материала множество взаимозависимых структур различных уровней (от атомного до «грубых» составных — для цельных строительных элементов) — композиционные материалы представляются как объекты типа «структура в структуре». В соответствии с такими представлениями полимерные связующие, в частности, рассматриваются как микро-

структура для полимербетонов, но как макроструктура для образующих их наполнителей. На любом уровне выделения «структуры в структуре» под оптимальной структурой целесообразно понимать ту [41], которая обеспечивает требуемые показатели физико-технических свойств и эксплуатационной надежности структуры более высокого уровня при минимуме затрат материально-энергетических ресурсов на ее создание.

Очевидно, что для успеха моделирования принцип полиструктурности целесообразно использовать и в самих моделях, количественно связывающих показатели свойств материала с управляющими воздействиями на его структуру — факторами рецептуры и технологии. При реализации этого принципа необходимо, прежде всего, в общей системе выделить отдельные подсистемы, связанные с различными по физическим признакам группами воздействий на структуру и свойства материала. Такой подход обеспечивается структурированными математическими моделями для описания систем с группами линейно связанных и взаимонезависимых факторов — для систем «смеси, технология — свойства» (см. гл. 2), поскольку они отражают возможные области управления многофракционными наполнителями, удобны для анализа их структурообразующей роли и минимизации полимеро- и энергоемкости композитов.

Совместные советско-болгарские исследования [3, 44, 108, 115, 119] проводились с целью снижения полимеро- и энергоемкости полиэфирных связующих с требуемыми реологическими и механическими свойствами за счет *оптимизации гранулометрического и минералогического составов наполнителя*. В основу исследования положена рабочая гипотеза о том, что структурообразующее влияние множества частиц наполнителя (удельной поверхностью  $S > 100 \text{ м}^2/\text{кг}$ ) определяется не только их объемной долей в композите и их суммарной поверхностью, но и свойствами отдельных частиц и их ансамблей. Это влияние через изменение упаковки частиц наполнителя проявляется в реологических и механических свойствах композита, что создает предпосылки для направленного управления этими свойствами, при осуществлении которого целесообразно использовать специальные полиномиальные модели, удобные как для анализа различных аспектов структурообразующей роли наполнителя, так и для минимизации полимеро- и энергоемкости композитов.

При фиксированном составе высокомолекулярных соединений структура и свойства композиций определяются количеством наполнителя (в частности, массовым отношением «наполнитель — полимер»  $H : П$ ) и уровнями показателей его качества, среди которых важнейшие — характеристики поверхностной активности и дисперсности. Поэтому зерна наполнителя целесообразно клас-

сифицировать по *двум взаимонезависимым признакам*: *минералогии* — как интегральной характеристике поверхностной активности и *гранулометрическому составу* (одна из его интегральных характеристик — удельная поверхность  $S$ , м<sup>2</sup>/кг). Каждая из этих двух групп в общем случае есть многокомпонентная смесь, задаваемая долями соответствующих зерен: в смеси I — долями  $0 \leq v_i \leq 1$  разных минералов, а в смеси II — долями  $0 \leq \omega_i \leq 1$  зерен разной дисперсности. Всегда  $\sum_i v_i = 1$  и  $\sum_i \omega_i = 1$ , а это базовые условия для диаграммы «состав — свойство» (см. гл. 2).

В целом системе факторов, определяющих структуру и свойства наполненных полимерных композиций, более всего соответствует система «смесь I, смесь II, технология — свойства». Действительно, влияние многофракционного наполнителя наиболее полно может быть отражено на диаграммах «состав — свойство», трансформирующихся при изменении других независимых рецептурно-технологических факторов (см. гл. 2). Представляется закономерным переход от отдельного анализа диаграмм «химико-минералогический состав — свойство» и «зерновой состав — свойство» к объединенному, поскольку влияние изменений в составе матрицы и наполнителя связано с геометрией поверхностей раздела. Содержание же наполнителя целесообразно задавать в виде отношения Н : П (полимер — необходимая составляющая, неравная нулю), которое удобно варьировать так же, как и другие независимые технологические факторы.

В ходе исследования КМ решались четыре основные взаимосвязанные технико-экономические задачи. Во-первых, следовало получить зависимости реологических свойств (имеющих определяющее значение для экономии смолы и энергии) от количества, минералогии и гранулометрии наполнителя в виде полиномиальных моделей  $M_I M_{II} T Q$ . Во-вторых, на основе комплекса таких моделей — проанализировать совместное влияние рецептурных факторов и скорости деформации полиэфирных связующих на их реологические показатели как характеристики *структурообразования* и соответствия *технологических решений*. В-третьих, необходим аналогичный анализ основных *механических свойств* композитов и, в-четвертых, целесообразно было заключить научно-технический анализ разработкой *рекомендаций по экономии* полиэфирной смолы за счет оптимизации наполнителей при обеспечении комплекса технологических и механических свойств связующих.

Данные для построения полиномиальных моделей получены в лабораторном эксперименте. При его планировании учтены,

с одной стороны, результаты анализа априорных данных (об основных направлениях и условиях применения строительных полимерных композитов, структурообразующей роли наполнителей в формировании их реологических и механических свойств), с другой — методические возможности, рассмотренные в гл. 2.

В эксперименте варьировались три группы факторов.

I. *Минералогический состав наполнителя* — массовые доли в наполнителе порошков разных минералов:  $v_1$  — кварца ( $\text{SiO}_2 = 98,3\%$ ;  $\text{Al}_2\text{O}_3 = 1,2\%$ ;  $\text{Fe}_2\text{O}_3 = 0,2\%$ ; плотность —  $2,64 \text{ г/см}^3$ );  $v_2$  — мрамора ( $\text{CaCO}_3 = 97,0\%$ ;  $\text{SiO}_2 = 2,1\%$ ; плотность —  $2,73 \text{ г/см}^3$ );  $v_3$  — цементного клинкера ( $\text{SiO}_2 = 20,4\%$ ;  $\text{Al}_2\text{O}_3 = 5,1\%$ ;  $\text{CaO} = 64,6\%$ ;  $\text{Fe}_2\text{O}_3 = 3,0\%$ ;  $\text{MgO} = 1,6\%$ ;  $\text{SO}_3 = 1,5\%$ ; плотность —  $3,20 \text{ г/см}^3$ ). При выборе именно этих видов недефицитных минеральных наполнителей из большого ряда возможных [52, 57, 64, 104, 125] исходили из стремления получить в эксперименте значительную вариацию свойств композиций при их относительно низкой стоимости.

*Кварц* рассматривается в работах большинства исследователей как база для сравнения наполнителей (несмотря на то, что он не обеспечивает наилучшие уровни показателей свойств композитов). Это объясняется не только распространенностью минерала, но и доступностью получения его разных фракций (от чистых природных песков до тонкомолотой кварцевой муки). *Карбонат кальция* считается в мировой практике одним из наиболее перспективных наполнителей для полиэфирных связующих, прежде всего, в связи с низкой стоимостью и большими запасами природного сырья [52, 89]; дешевый мраморный наполнитель в ряде регионов обеспечивается отходами камнепиления. *Клинкер* рассматривался как полиминеральный наполнитель (в отличие от «мономинералов» кварца и мрамора) повышенной активности — на границе раздела портландцемент — полиэфирная матрица возможно образование химических связей [80]. Получение зерен различных фракций возможно при отборе их на разных этапах помола и сепарации на цементных заводах.

II. *Зерновой состав наполнителя* — массовые доли в наполнителе порошков разной дисперсности:  $\omega_1$  — мелких частиц (удельной поверхностью по Блейну [37, 113]  $S = (332 \pm \pm 19) \text{ м}^2/\text{кг}^*$ ;  $\omega_2$  — средних частиц ( $S = (97 \pm 7) \text{ м}^2/\text{кг}$ );  $\omega_3$  — крупных зерен ( $S = (46 \pm 4) \text{ м}^2/\text{кг}$ ). Набор фракций обеспечивал при разном распределении зерен по размерам значение удельной поверхности наполнителя в интервале  $40...350 \text{ м}^2/\text{кг}$ , т. е. варьирование в известных пределах [74, 116— № 5] от нижней

\* Положение  $S$  внутри диапазона определяется данным минералом.

«граничной» до «оптимальной» для наполнителей полиэфирных связующих. Таким образом, анализировались в чистом виде и в смесях девять порошков-наполнителей:

кварц мелкий, кварц средний, кварц крупный;  
мрамор мелкий, мрамор средний, мрамор крупный;  
клинкер мелкий, клинкер средний, клинкер крупный.

III. *Независимые* рецептурно-технологические факторы — *степень наполнения*  $H : П$  (отношение по массе) и *скорость деформации* технологической смеси  $\dot{\epsilon}$ . В моделях «смесь I, смесь II, технология — свойство» оказалось целесообразным (см. § 4.2) отразить непосредственно только варьирование степени наполнения в пределах 1,5...2,5;  $(H : П)$  нормируется к  $|x| \leq 1$  по соотношению

$$x = [(H : П) - 0,5 (2,5 + 1,5)] / [0,5 (2,5 - 1,5)] = \\ = (H : П - 2) / 0,5. \quad (4.1)$$

Интервал варьирования соответствует как возрастающему участку концентрационных кривых механических свойств [57, 74, 75], так и пластичному течению неотвержденных композиций [14, 107].

*Полимерная матрица* — ненасыщенная полиэфирная смола Виалкид-550-ПЕ \*. Ненаполненная смола ведет себя как ньютоновская жидкость (при 20 °С динамическая вязкость  $\eta = 16$  Па · с), отверждается за счет сополимеризации со стиролом в присутствии 2 % инициатора (50 %-ный раствор циклогексаперокси и дибутилфталате) и 2 % ускорителя твердения (10 %-ный раствор нафтената кобальта в стироле). Ее пределы прочности: на сжатие призмейный 140 МПа (кубиковый — 171 МПа) и на изгиб 40 МПа, — динамический модуль упругости 1,13 ГПа [114].

В эксперименте определяли удельную поверхность наполнителей  $S$  и структурно-механические свойства технологических смесей и затвердевших композиций. *Эффективную вязкость*  $\eta$ , Па · с, при разных скоростях деформации  $\dot{\epsilon}$ ,  $s^{-1}$ , неотвержденных смесей и предельное напряжение сдвига  $\tau_0$ , Па, исследовали на ротационном вискозиметре Реотест-2 [42].

*Пределы прочности на сжатие*  $R_c$ , МПа, и *изгиб*  $R_{из}$ , МПа, и *динамический модуль упругости*  $E_d$ , ГПа, определены после 14 сут твердения образцов: призм размером 15 × 15 × 45 мм

---

\* Растворенный в стироле (содержание 33...37 %) продукт поликонденсации равных долей фталевого и малеинового ангидрида с этилен и пропиленгликолем; молекулярная масса 2400...2800; плотность 1,12 г/см<sup>3</sup>.

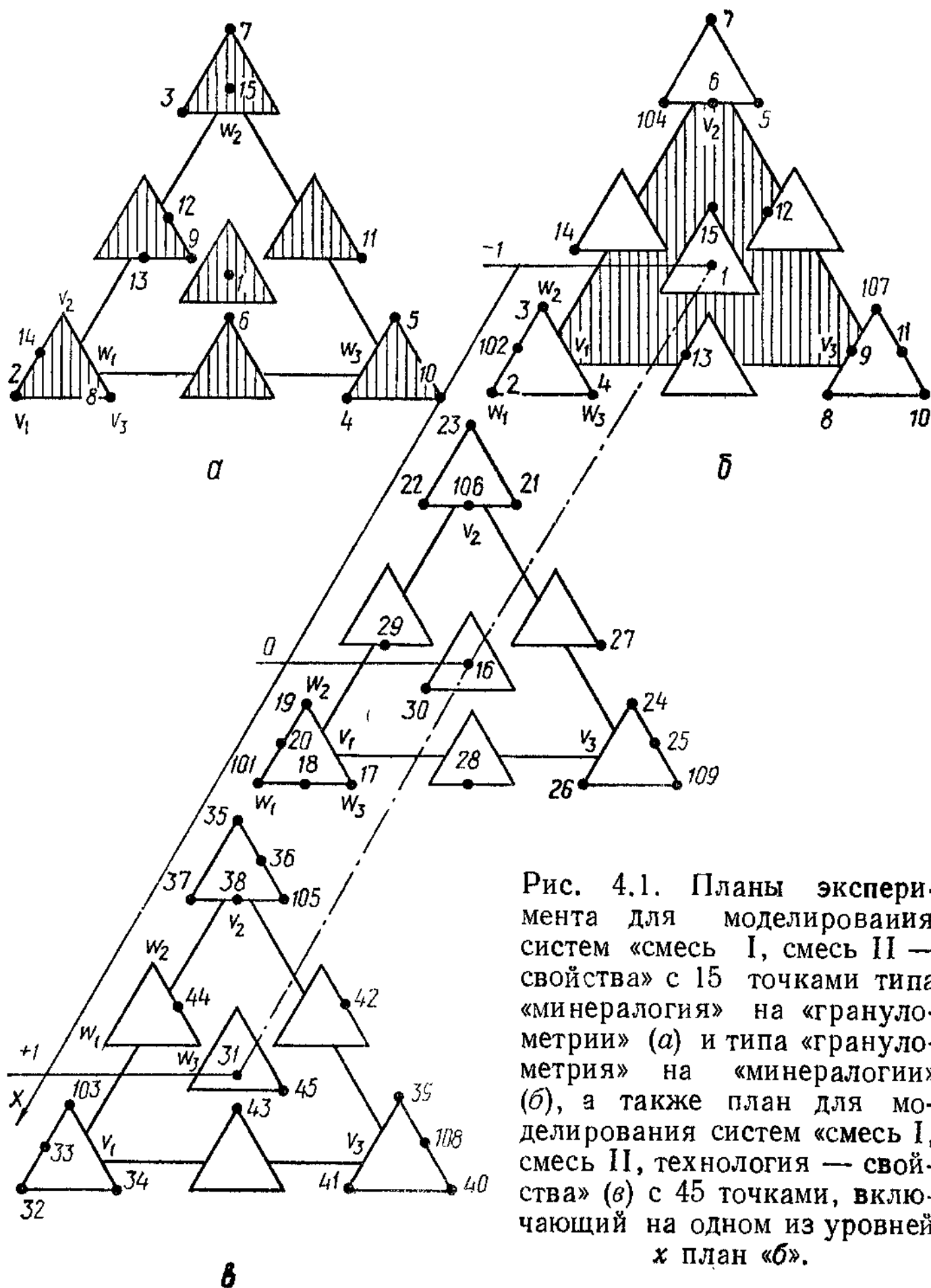


Рис. 4.1. Планы эксперимента для моделирования систем «смесь I, смесь II — свойства» с 15 точками типа «минералогия» на «гранулометрии» (а) и типа «гранулометрия» на «минералогии» (б), а также план для моделирования систем «смесь I, смесь II, технология — свойства» (в) с 45 точками, включающий на одной из уровней  $x$  план «б».

для  $R_c$ , балочек  $15 \times 15 \times 200$  — для  $R_{II}$ , балочек  $5 \times 8 \times 160$  — для  $E_d$  (по резонансному методу [116, № 3]).

Модель зависимости удельной поверхности наполнителя  $S$  от его минералогии и гранулометрии задавалась в виде приведенного полинома «смесь I, смесь II — свойство» (2.34). Для остальных показателей качества композитов использовали модели «смесь I, смесь II. технология — свойство» вида (2.38). Выбор второй степени полиномов обусловлен результатами анализа литературных данных и специальных поисковых экспериментов, а также стремлением получить простые адекватные количественные описания при минимальных экспериментальных затратах. Эксперимент выполнен по насыщенным планам.

План № 1 — для получения оценок 15 параметров модели  $M_I M_{II} Q$ . Содержит 15 опытных точек (табл. 4.1), расположение которых в факторной области (соответствует ячейке № 25 — см. рис. 2.1, б) показано на рис. 4.1, а, б в двух отображениях.

План № 2 — для получения оценок 45 параметров моделей  $M_I M_{II} T Q$ ; содержит 45 опытных точек. Им соответствует 28 разных составов наполнителя, испытываемых при одном или двух, или трех уровнях наполнения (табл. 4.2, рис. 4.1, в). Контрольные точки 101...109 выбраны из соображений симметрии. Они оптимально достраивают план до 54-точечного. При синтезе планов на ЭВМ по программе DESSCR (см. гл. 2) точки 1, 16 и 31 задавались как обязательные\*.

Для удельной поверхности по данным эксперимента с помощью ПРА (см. гл. 2) получена модель (4.2), позволяющая оценить эту структурную характеристику наполнителей во всей области составов.

$$\begin{aligned}
 S = & 350v_1w_1 + 98v_1w_2 + 48v_1w_3 + \\
 & + 336v_2w_1 + 101v_2w_2 + 49v_2w_3 + \\
 & + 313v_3w_1 + 88v_3w_2 + 42v_3w_3 + \\
 & + 52v_1v_2 - 62v_2v_3 + 50w_1w_3. \quad (4.2)
 \end{aligned}$$

Эта модель и ее графические отображения (рис. 4.2), построенные с помощью программы DTRTR, использованы при анализе структурно-механических свойств композиций.

---

\* Для плана № 1: определитель нормированной информационной матрицы  $|M| = 0,112 \cdot 10^{-25}$ ; максимальный коэффициент корреляции оценок параметров  $|\rho|_{\max} = 0,78$ . Для плана № 2:  $|M| = 0,423 \cdot 10^{-90}$ ;  $|\rho|_{\max} = 0,81$ .



Т а б л и ц а 4.1. План эксперимента для построения модели  $M_I M_{II} Q$

№ опыта	План эксперимента						Характеристика наполнителя
	минералогия			гранулометрия			
	$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\sigma_3$	$\omega_1$	$\omega_2$	$\omega_3$	
1	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	Трехминеральная смесь трехфракционная
2	1	0	0	1	0	0	Кварц мелкий
3	1	0	0	0	1	0	То же средний
4	1	0	0	0	0	1	» крупный
5	0	1	0	0	0	1	Мрамор крупный
6	0	1	0	1/2	0	1/2	Смесь мелкого и крупного мрамора
7	0	1	0	0	1	0	Мрамор средний
8	0	0	1	1	0	0	Клинкер мелкий
9	0	0	1	1/2	1/2	0	Смесь мелкого и среднего клинкера
10	0	0	1	0	0	1	Клинкер крупный
11	0	0	1	0	1/2	1/2	Смесь среднего и крупного клинкера
12	0	1/2	1/2	1/2	1/2	0	Мраморно-клинкерная смесь (мелкий + средний)
13	1/2	0	1/2	1/2	1/2	0	Кварцево-клинкерная смесь (мелкий + средний)
14	1/2	1/2	0	1	0	0	Кварцево-мраморная смесь (мелкая)
15	1/3	1/3	1/3	0	1	0	Трехминеральная смесь (средняя)

Т а б л и ц а 4.2. План эксперимента для построения модели  $M_I M_{II} T Q$

№ наполнителя	Уровни факторов						Номер опыта при $x$		
	смесь I			смесь II					
	$v_1$	$v_2$	$v_3$	$\omega_1$	$\omega_2$	$\omega_3$	-1	0	+1
1	1	0	0	1	0	0	2	101 *	32
2	1	0	0	0	1	0	3	19	103 *
3	1	0	0	0	0	1	4	17	34
4	1	0	0	1/2	1/2	0	102 *	20	33
5	0	1	0	1	0	0	104 *	22	37
6	0	1	0	0	1	0	7	23	35
7	0	1	0	0	0	1	5	21	105 *
8	0	1	0	1/2	0	1/2	6	106 *	38
9	0	0	1	1	0	0	8	26	41
10	0	0	1	0	1	0	107 *	24	39
11	0	0	1	0	0	1	10	109 *	40
12	0	0	1	0	1/2	1/2	11	25	108 *
13	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1	16	31
14	1	0	0	1/2	0	1/2	—	18	—
15	0	1	0	0	1/2	1/2	—	—	36
16	0	0	1	1/2	1/2	0	9	—	—
17	1/2	1/2	0	1	0	0	14	—	—
18	1/2	1/2	0	1/2	0	1/2	—	29	—
19	1/2	1/2	0	0	1/2	1/2	—	—	44
20	1/2	0	1/2	0	1	0	—	—	43
21	1/2	0	1/2	1/2	1/2	0	13	—	—
22	1/2	0	1/2	1/2	0	1/2	—	28	—
23	0	1/2	1/2	0	0	1	—	27	—
24	0	1/2	1/2	1/2	1/2	0	12	—	—
25	0	1/2	1/2	0	1/2	1/2	—	—	42
26	1/3	1/3	1/3	1	0	0	—	30	—
27	1/3	1/3	1/3	0	1	0	15	—	—
28	1/3	1/3	1/3	0	0	1	—	—	45

\* При насыщенном планировании эксперимента точки 101...109 можно использовать как контрольные.

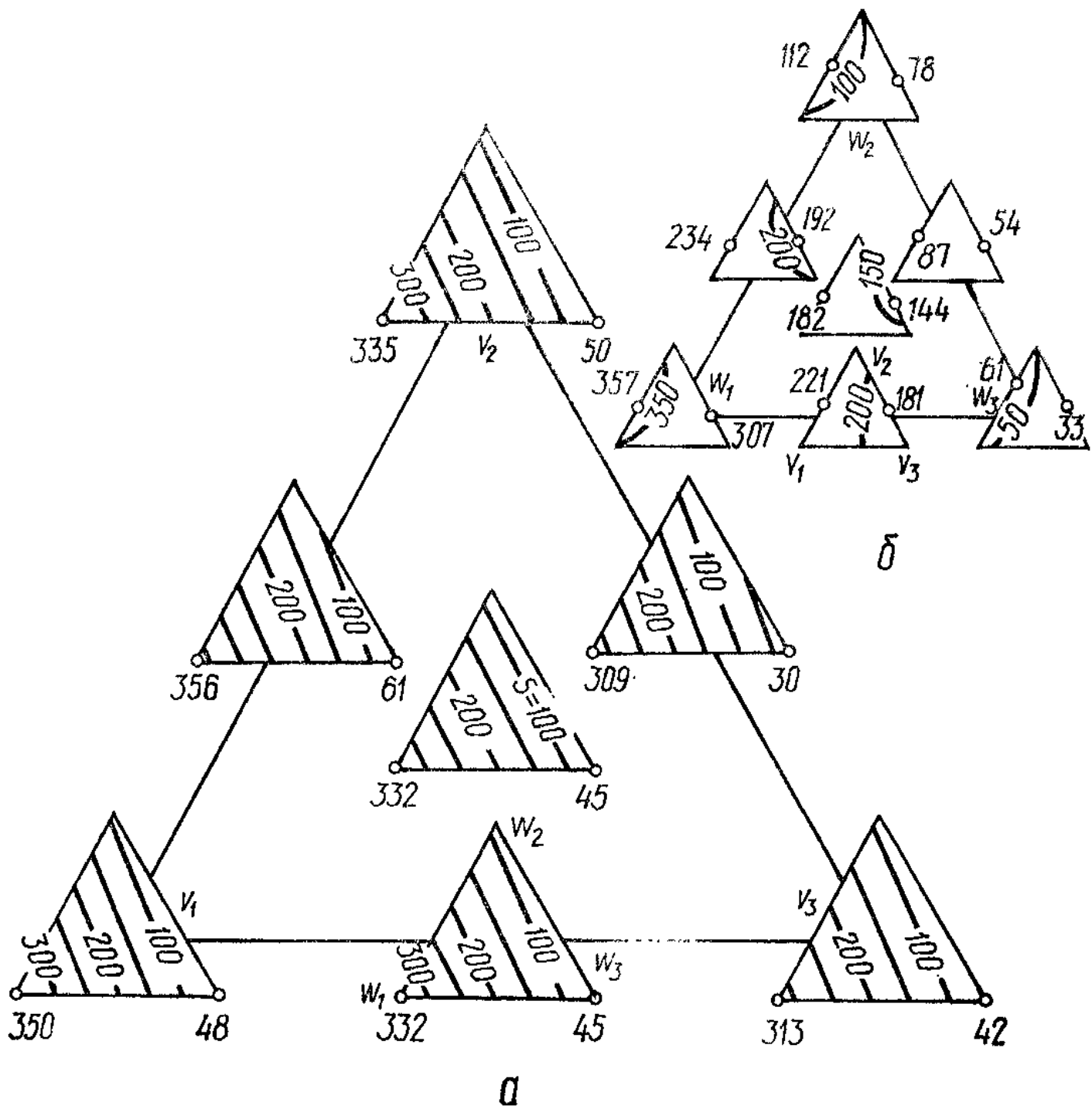


Рис. 4.2. Семь диаграмм «гранулометрия — удельная поверхность наполнителя  $S$ » на треугольнике минералогии (а) и «минералогия —  $S$ » на треугольнике гранулометрии (б)

#### 4.2. АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ НАПОЛНИТЕЛЕЙ НА СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ И РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИЙ

Основой для минимизации энергозатрат и расхода дефицитных компонентов, для решения других инженерных задач по созданию технологических процессов может служить анализ изменения эффективной вязкости в зависимости не только от скорости

деформации, но и от рецептуры неньютоновских жидкостей; он может способствовать и познанию процессов структурообразования в дисперсных системах.

Результаты экспериментального определения эффективной вязкости связующих и построение комплекса моделей для разных скоростей деформаций. В соответствии с планом (см. табл. 4.2 и рис. 4.1) была экспериментально определена эффективная вязкость  $\eta$  54 полиэфирных композиций на 28 разных по дисперсности и минералогии наполнителях при трех уровнях степени наполнения. Каждую смесь испытывали при скоростях деформации, возрастающих от  $1/3$  до  $142 \text{ с}^{-1}$ ; уровни  $\dot{\epsilon}$  образовывали ряд  $\dot{\epsilon} = 3^m$ , где  $m$  изменялось от  $-1$  до  $4,5$  с интервалом  $\Delta m = 0,5$ .

Для некоторых связующих с наполнителями из «чистых минералов» и их смесей результаты определения  $\eta$  представлены на рис. 4.3. Изменения эффективной вязкости в зависимости от скорости деформации  $\dot{\epsilon}$  показаны дискретными наборами точек для смесей с  $H : P \geq 2$  и  $H : P = 1,5$  при  $\dot{\epsilon} < 9$ . В то же время, при  $\dot{\epsilon} \geq 9 \text{ с}^{-1}$  и  $H : P = 1,5$  все результаты (со среднеквадратической ошибкой менее 1 %) описываются гиперболической функцией

$$\left. \begin{aligned} \ln \eta &= 4,608 - 1,098 \log_3 \dot{\epsilon}, \\ \eta &= 100,27 (\dot{\epsilon})^{-0,999} = 100/\dot{\epsilon}, \end{aligned} \right\} \quad (4.3)$$

соответствующей модели Оствальда — Вейля для псевдопластичного течения [84]. С ростом  $\dot{\epsilon}$  структуры при малом  $H : P$  сохраняются несколько дольше, но затем  $\eta$  резко падает и, начиная с  $\dot{\epsilon} = 9$  (когда структура разрушается настолько, что ни дисперсность, ни активность наполнителя не оказывают влияния на вязкость системы), изменяется обратно пропорционально скорости.

В целом влияние скорости  $\dot{\epsilon}$  на вязкость  $\eta$  (тем более в сочетании с изменением минералогии, гранулометрии и содержания наполнителя) носит столь сложный характер, что его удается описать лишь полиномиальными моделями высоких степеней, а это исключает возможность их интерпретации. Поэтому применили прием, аналогичный «временным сечениям» [72]: рассмотрели изменения вязкости композиций под влиянием минералогии, гранулометрии и  $H : P$  при пяти фиксированных значениях  $\dot{\epsilon}$ ,  $\text{с}^{-1}$ :  $1/3$ ; 1; 3; 9; 27. Для каждого из указанных уровней скорости деформации были построены (с использованием программ SEREG и CHARREG модели типа (4.4). Последняя описывает из-

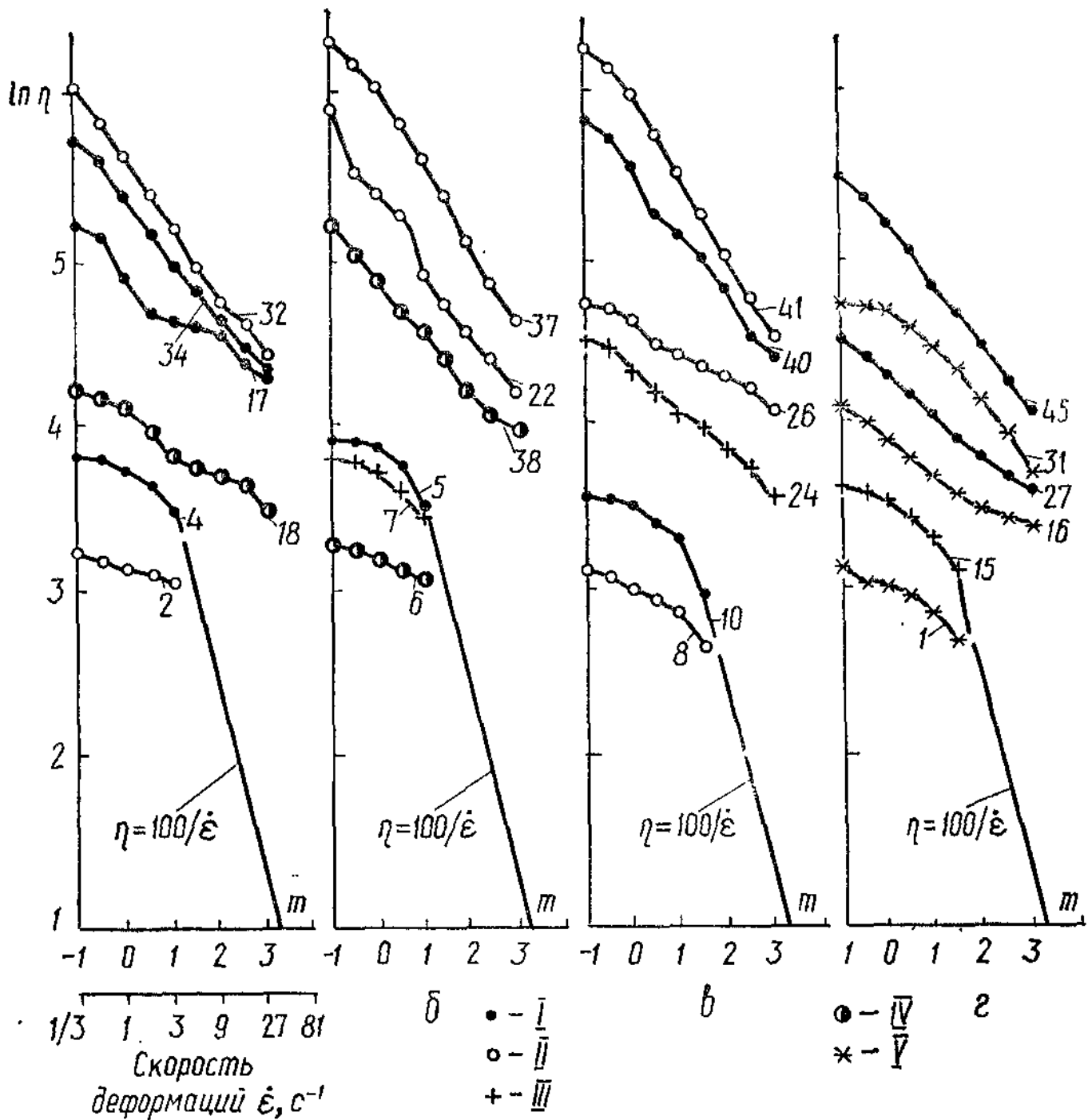


Рис. 4.3. Зависимость показателя эффективной вязкости  $\ln \eta$  от скорости деформаций  $\dot{\epsilon}$ ,  $\text{с}^{-1}$  ( $m = \log_3 \dot{\epsilon}$ ) для некоторых типов полиэфирных связующих (а — кварц, б — мрамор, в — клинкер, z — равновесная трехкомпонентная смесь):

- I —  $w_1 = 0, w_2 = 0, w_3 = 1,$
- II —  $w_1 = 1, w_2 = 0, w_3 = 0,$
- III —  $w_1 = 0, w_2 = 1, w_3 = 0,$
- IV —  $w_1 = 1/2, w_2 = 0, w_3 = 1/2,$
- V —  $w_1 = 1/3, w_2 = 1/3, w_3 = 1/3$

менение вязкости при  $\dot{\epsilon} = 1 \text{ с}^{-1}$ .

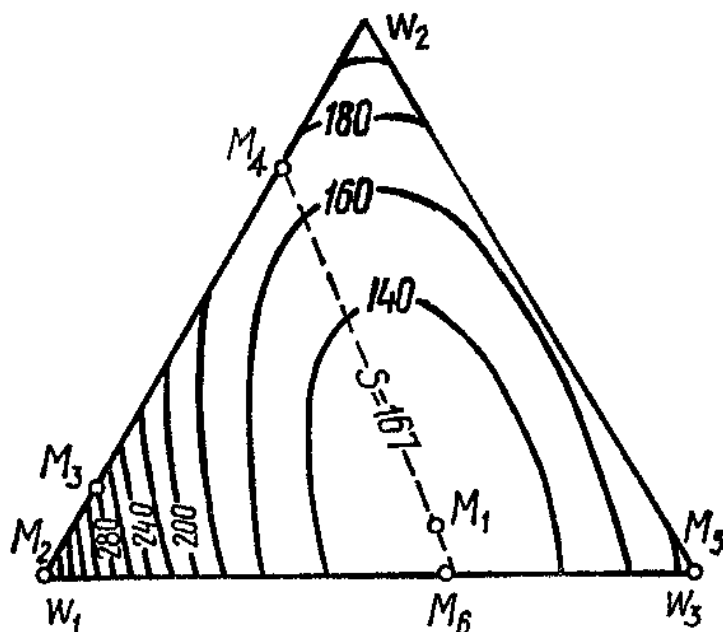
$$\begin{aligned}
 \ln \eta_1 = & (4,51 + 1,24x - 0,13x^2) v_1 w_1 + \\
 & + (4,24 + 0,86x + 0,10x^2) v_1 w_2 + \\
 & + (4,90 + 0,82x - 0,35x^2) v_1 w_3 + \\
 & + (5,46 + 1,23x - 0,66x^2) v_2 w_1 + \\
 & + (5,01 + 0,83x - 0,44x^2) v_2 w_2 + \\
 & + (4,83 + 0,71x - 0,24x^2) v_2 w_3 + \\
 & + (4,52 + 1,49x \pm 0 \quad ) v_3 w_1 + \\
 & + (4,35 + 1,11x \pm 0 \quad ) v_3 w_2 + \\
 & + (4,27 + 1,04x + 0,28x^2) v_3 w_3 + \\
 & + (-0,64 + 0,70x + 0,54x^2) v_1 v_2 + \\
 & + (\pm 0 - 1,14x + 0,56x^2) v_1 v_3 + \\
 & + (-0,94 - 0,33x \pm 0) v_2 v_3 + \\
 & + (-1,43 - 0,63x \pm 0) w_1 w_2 + \\
 & + (-2,58 - 0,42x \pm 0) w_1 w_3 + \\
 & + (-1,04 \pm 0 \pm 0) w_2 w_3.
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Модель (4.4) описывает систему «смесь I (минералогия), смесь II (гранулометрия), технология (степень наполнения) — свойство (вязкость композиции при  $\dot{\epsilon} = 1 \text{ с}^{-1}$ )». Она интерпретируется в соответствии с физическим смыслом параметров таких моделей (см. гл. 2). Так, функция в скобках при первом члене  $v_1 w_1$  показывает параболическое изменение вязкости композиции с наполнителем из мелких зерен кварца при изменении степени наполнения: свободный член соответствует вязкости композиции при  $N : П = 2$  ( $x = 0$ ); коэффициенты при  $x$  и  $x^2$  — оценки скорости и ускорения падения вязкости по мере снижения наполнения. Полиномы от  $x$  при членах  $v_i v_j$  и  $w_i w_j$  показывают какова нелинейность, неаддитивность смешивания минералов и частиц разной крупности по отношению к логарифму вязкости и как она изменяется в зависимости от наполнения. Аналогичные модели для всех рассмотренных уровней  $\dot{\epsilon}$  приведены в табл. 4.3. Для их построения и анализа использовали программные средства, описанные в гл. 2.

**Характерные изменения вязкости под влиянием гранулометрии и наполнителя.** Модели позволяют построить множество диа-

грамм «состав — свойство» двух типов: «минералогия — свойство» и «гранулометрия — свойство». В качестве *первичного информационного элемента* для начального анализа явлений использованы *диаграммы второго типа*, как на рис. 4.4. Изолинии эффективной вязкости  $\eta_1$  композиции с мраморным наполнителем, вводимом в полиэфирную смолу в соотношении  $H : П = 2,5$ ,

Рис. 4.4. Базовая диаграмма «гранулометрия — эффективная вязкость  $\eta_1$ » (мрамор,  $\dot{\epsilon} = 1 \text{ с}^{-1}$ ,  $H : П = 2,5$ ) и ее характерные точки (см. табл. 4.4)



на «гранулометрическом» треугольнике  $(w_1, w_2, w_3)$  — геометрический образ модели (4.5), полученной из (4.4) при подстановке  $v_2 = 1$ ;  $v_1 = v_3 = 0$  и  $x = 1$ .

$$\ln \eta_1 = 6,03w_1 + 5,40w_2 + 5,29w_3 - 2,06w_1w_2 - 3,00w_1w_3 - 1,04w_2w_3. \quad (4.5)$$

Анализ таких диаграмм выявил *характерные изменения вязкости под влиянием дисперсности наполнителя*. Их количественное выражение — *обобщающие показатели* (см. гл. 1) — *числовые характеристики поля вязкости на гранулометрической диаграмме*. Так, для композиций с мраморным наполнителем на рис. 4.4 выделены *особые точки*  $M_1 \dots M_6$ . Для них в табл. 4.4 указаны значения  $\eta_1$ ,  $w_i$ ,  $S$  и расчетная средняя толщина слоя полимера на твердой поверхности, мкм:

$$\delta_{\Pi} = 10^6 [S (H : П) \rho_{\Pi}]^{-1}. \quad (4.6)$$

Значения вязкости в особых точках и другие числовые показатели влияния гранулометрии  $G_w$  обобщаются затем на изменение минералогии, количества наполнителя и скорости деформации. В число показателей изменения вязкости под влиянием дисперсности наполнителя вошли, в частности:

Т а б л и ц а 4.3. Модели  $M_I M_{II} TQ$  эффективной

Эффекты моделн	$\eta_{1/3}$	$\eta_1$
$v_1 \omega_1$	$4,62 + 1,41x$	$4,51 + 1,24x - 0,13x^2$
$v_1 \omega_2$	$4,50 + 0,96x$	$4,24 + 0,86x + 0,10x^2$
$v_1 \omega_3$	$5,23 + 0,96x - 0,46x^2$	$4,90 + 0,82x - 0,35x^2$
$v_2 \omega_1$	$5,91 + 1,34x - 0,91x^2$	$5,46 + 1,23x - 0,66x^2$
$v_2 \omega_2$	$5,52 + 0,95x - 0,79x^2$	$5,01 + 0,83x - 0,44x^2$
$v_2 \omega_3$	$5,13 + 0,93x - 0,27x^2$	$4,83 + 0,71x - 0,24x^2$
$v_3 \omega_1$	$4,68 + 1,58x$	$4,52 + 1,49x$
$v_3 \omega_2$	$4,50 + 1,19x$	$4,35 + 1,11x$
$v_3 \omega_3$	$4,35 + 1,13x + 0,34x^2$	$4,27 + 1,04x + 0,28x^2$
$v_1 v_2$	$-0,71 + 0,49x + 0,42x^2$	$-0,64 + 0,70x + 0,54x^2$
$v_1 v_3$	$-1,31x + 0,47x^2$	$-1,14x + 0,56x^2$
$v_2 v_3$	$-0,92 - 0,63x$	$-0,94 - 0,33x$
$\omega_1 \omega_2$	$-1,83 - 1,09x$	$-1,43 - 0,63x$
$\omega_1 \omega_3$	$-2,89 - 0,65x$	$-2,58 - 0,42x$
$\omega_2 \omega_3$	$-0,88 + 0,40x$	$-1,04$
$\delta_{на}$	0,046	0,045
$\Delta u_{max}$	0,068; 0,056; 0,056; 0,050	0,078; 0,078 0,052; 0,051

\* В нижней части таблицы даны показатели точности моделей: средние задачи № 2) и по четыре наибольших частных отклонения расчетных значе

*перепад* (4.7) вязкости от максимальной (при «мелком» наполнителе) к минимальной (смесь фракций)

$$\kappa_{max} = \eta_{II} \{M_2\} / \eta_{II} \{M_1\} = \exp (\ln \eta_{II} \{M_2\} - \ln \eta_{II} \{M_1\}); \quad (4.7)$$

*показатель* (4.8), характеризующий падение вязкости при переходе от наполнителя, дающего максимальную при  $S = 300 \text{ м}^2/\text{кг}$  вязкость ( $\eta_1^{300}$ ), к наполнителю, обеспечивающему минимальную вязкость при соответствующей удельной поверхности,

$$\kappa^{300} = \eta_{II} \{M_3\} / \eta_{II} \{M_1\} = \exp (\ln \eta_{II} \{M_3\} - \ln \eta_{II} \{M_1\}); \quad (4.8)$$

*усредненный градиент* (4.9), характеризующий скорость падения вязкости от максимальной к  $\eta_{I.min}$  по мере уменьшения удельной поверхности наполнителя на  $100 \text{ м}^2/\text{кг}$ ,

$$\bar{V}_{max} = (\kappa_{max} - 1) / (S \{M_2\} - S \{M_1\}). \quad (4.9)$$



вязкости полиэфирного связующего  $\ln \eta_{\varepsilon} = f(v, w, x)^*$

$\eta_3$	$\eta_6$	$\eta_{27}$
$4,15 + 1,06x + 0,12x^2$	$3,78 + 1,15x - 0,18x^2$	$3,37 + 1,50x - 0,55x^2$
$3,97 + 0,80x$	$3,72 + 1,11x - 0,20x^2$	$3,25 + 1,50x - 0,43x^2$
$4,61 + 0,74x - 0,38x^2$	$4,55 + 1,15x - 0,99x^2$	$4,25 + 1,49x - 1,44x^2$
$4,94 + 1,03x - 0,38x^2$	$4,58 + 1,34x - 0,79x^2$	$4,21 + 1,65x - 1,23x^2$
$4,53 + 0,72x - 0,30x^2$	$4,13 + 1,05x - 0,67x^2$	$3,81 + 1,48x - 1,02x^2$
$4,54 + 0,66x - 0,37x^2$	$4,29 + 1,04x - 0,84x^2$	$3,88 + 1,52x - 1,03x^2$
$4,39 + 1,34x - 0,19x^2$	$4,27 + 1,31x - 0,54x^2$	$4,06 + 1,62x - 1,13x^2$
$4,04 + 1,07x + 0,11x^2$	$3,86 + 1,18x - 0,27x^2$	$3,54 + 1,53x - 0,69x^2$
$3,87 + 0,93x + 0,37x^2$	$3,65 + 1,21x$	$3,52 + 1,56x - 0,64x^2$
$-0,49 + 0,59x$	$-0,36$	$-0,44 - 0,42x$
$-1,09x + 0,52x^2$	$-0,44x$	$-0,32 - 0,36x$
$-0,70$	$-0,78 - 0,45x + 0,46x^2$	$-0,42 - 0,47x$
$-0,43 - 0,33x - 0,64x^2$	$-0,68 - 0,46x$	$-0,42 - 0,43x$
$-2,12 - 0,32x$	$-1,92 - 1,22x + 0,64x^2$	$-1,26 - 1,08x$
$-1,11$	$-1,09 - 0,50x + 0,53x^2$	$-0,40 - 0,37x$
0,044	0,049	0,042
0,069; 0,060 0,059; 0,048	0,076; 0,067 0,059; 0,058	0,069; 0,061 0,043; 0,038

квадратические ошибки предсказания ( $\delta_{\text{на}}$  — относительные ошибки, см. ий от экспериментальных данных —  $\Delta_{\text{и.мах}}$ ).

Показатели  $\kappa_{\text{мах}}$ ,  $\kappa^{300}$ ,  $\bar{V}_{\text{мах}}$ , определяемые на диаграммах «гранулометрия — эффективная вязкость», положены в основу анализа структурообразования и изменения влияния дисперсности наполнителя на эффективную вязкость при переходе к другим минералогии, степени наполнения, скорости деформации.

На диаграмме «зерновой состав —  $\eta_1$ » (см. рис. 4.4) явно выражена зона *пониженной вязкости*  $\eta_1 \leq 140$  Па · с в области тройных смесей и смесей, близких к равновесным бинарным «мелкие + + крупные» (точки  $M_1$  и  $M_6$  близки и по уровню вязкости, и по удельной поверхности). В то же время, при равной удельной поверхности (точки  $M_1$  и  $M_4$ ) вязкость отличается в полтора раза. Минимальная вязкость не соответствует  $S_{\text{min}}$  (точка  $M_5$ ), хотя средняя толщина пленки смолы  $\delta_{\text{п}}$  на крупных зернах втрое больше, чем в зоне  $\eta_{1,\text{min}}$ . Начиная с уровня  $\eta_1 \geq 200$  Па · с, наблюдается резкий рост вязкости к вершине  $w_1$ . В целом при

Т а б л и ц а 4.4. Характерные точки на диаграмме «гранулометрия — эффективная вязкость» для полиэфирного связующего на мраморном наполнителе ( $\varepsilon = 1 \text{ с}^{-1}$ ,  $H : П = 2,5$ )

Точка на рис. 4.4	Доли фракций			$S, \text{ м}^2/\text{кг}$	$\delta_{\text{П}}, \text{ мкм}$	$\eta, \text{ Па}\cdot\text{с}$	Особенность композиции
	мелкой $\omega_1$	средней $\omega_2$	крупной $\omega_3$				
$M_1$	0,35	0,09	0,56	167	2,1	128	Минимальная вязкость $\eta_{1.\text{min}}$
$M_2$	1	0	0	335	1,0	412	Максимальная $\eta_{1.\text{max}}$ и соответствующая удельная поверхность
$M_3$	0,85	0,15	0	300	1,2	291	Базовая $\eta_{1.300}$ (максимальная при $S = 300$ ) для сравнения минералогий как характеристика их структурообразующей способности
$M_4$	0,72	0,28	0	167	2,1	174	Изопараметрическая точка при $S = \text{const} = S \{M_1\} = 167$
$M_5$	0	0	1	48	7,3	198	Минимальная удельная поверхность $S_{\text{min}}$
$M_6$	0,39	0	0,61	171	2	129	Минимальная $\eta_1$ при смешивании мелких и крупных фракций ( $\omega_1 + \omega_3 = 1$ )

переходе от мелких зерен  $M_2$  к оптимальной смеси фракций  $M_1$  вязкость  $\eta_1$  падает более чем в три раза.

Отраженное на диаграмме явление не имеет однозначного физического объяснения в силу сложности параллельно протекающих физических и физико-химических процессов [82] при неньютоновском течении наполненной полимерной композиции. В этих условиях изменения эффективной вязкости под влиянием дисперсности наполнителя можно объяснить [3, 41; 79 — 1984] проявлением следующих механизмов, связанных, с одной стороны, со свойствами материалов, с другой — с динамикой потока жидкости (вероятность и степень действия рассматриваемых механизмов различны в разных областях исследуемой диаграммы).

А. В результате межфазных взаимодействий ближайшие к границе раздела слои полимера — межфазные слои (МФС) — обладают повышенной плотностью упаковки макромолекул по

сравнению с полимером в объеме [39]. Увеличение доли МФС в слое полимера может повысить его вязкость. Таким образом, механизм межфазных взаимодействий наиболее сильно проявляется в тонких пленках.

Б. К течению жидкости в тонких слоях применима гидродинамическая теория смазки, в соответствии с которой вязкое сопротивление возрастает по мере утоньшения слоя смазки [4, 58]. Падение вязкости в области перехода от  $M_2$  и  $M_1$  в значительной степени можно объяснить снижением доли структурированных межфазных слоев и уменьшением вязкого сопротивления смазки по мере увеличения средней толщины слоя полимера ( $S \{M_2\}$  вдвое больше  $S \{M_1\}$  и, соответственно,  $\delta_p \{M_2\}$  вдвое меньше  $\delta_p \{M_1\}$ ).

В. Можно предположить, что в области полифракционных смесей возрастает вероятность проявления следующего механизма. В деформируемой смеси образуются новые структурные агрегаты с повышенной внутренней устойчивостью в некотором диапазоне  $H : P$  и  $\epsilon$  — ассоциаты мелких и крупных частиц. Их плотная упаковка обеспечивает тонкие пленки высокомолекулярного соединения между ними (эндоассоциативный слой) с повышенной долей межфазного слоя. В результате часть смолы выделяется как гидродинамическая смазка в экзоассоциативный слой. Уменьшение относительной доли МФС также способствует снижению вязкости в экзоассоциативном слое, по которому и происходит деформирование системы.

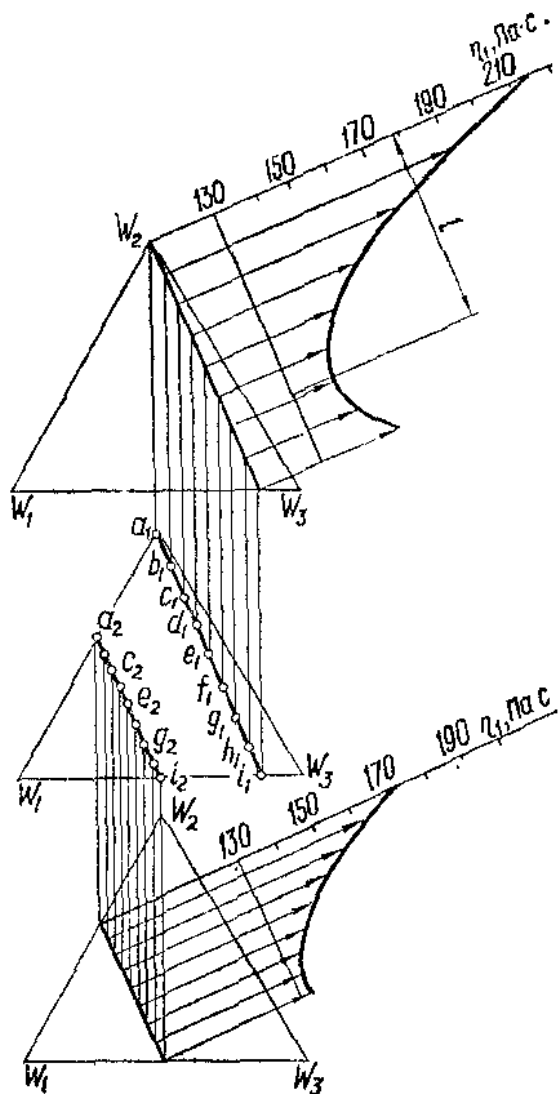
Г. Рост вязкости по мере увеличения доли крупных частиц можно объяснить следующей группой причин. При малом содержании мелких частиц повышается вероятность образования в структуре полостей, в которых «консервируется» жидкость, не участвующая в движении. В связи с этим уменьшается эффективная средняя толщина жидкого слоя. При этом крупные частицы могут при движении механически сцепляться, что, в свою очередь, приводит к увеличению эффективной вязкости за счет увеличения сен-венановской составляющей течения. Кроме того, повышается вероятность деструкции системы в силу меньшей устойчивости ассоциатов, а также за счет седиментационного расслоения (особенно при малых  $S$  и  $\epsilon$ ).

Следует еще раз подчеркнуть, что не существует четких границ между областями действия названных механизмов. Можно говорить об изменении вероятностей их проявления в той или иной области гранулометрических составов наполнителей.

Оценка пластифицирующего эффекта в условиях постоянной удельной поверхности наполнителя (изопараметрический анализ). В исследуемом диапазоне дисперсности твердой фазы из-

меняется и удельная поверхность частиц (от 48 до 335 м<sup>2</sup>/кг для мрамора), и распределение их по размерам. Чтобы в общем изменении вязкости при варьировании гранулометрии выявить эффект влияния распределения размеров частиц, следует исключить из анализа влияние изменения удельной поверхности. Это можно осуществить при изопараметрическом анализе (см. Задачу № 12 § 1.3 и § 2.6), рассматривая  $\eta_1$  в условиях  $S = \text{const}$ .

Суть изопараметрического анализа (ИПА) и его результаты при



рассмотрении вязкости связующего с мраморным наполнителем ( $\varepsilon = 1 \text{ с}^{-1}$ ;  $H : П = 2,5$ ) показаны на рис. 4.5. На гранулометрическом треугольнике нанесены изолинии  $S = 100 (a_1, \dots, i_1)$  и  $S = 200 \text{ м}^2/\text{кг} (a_2, \dots, i_2)$ , рассчитанные по модели (4.2). При движении от зоны средних зерен к зоне «мелкие + крупные» вдоль линии  $S = 100$  по диаграмме «гранулометрия — вязкость» видно, что вязкость падает от 217 до 150 и проходит через минимум 140 Па · с в зоне трехкомпонентной смеси. Аналогичный

Рис. 4.5. Изопараметрический (в условиях  $S = \text{const}$  — средняя диаграмма) анализ эффективной вязкости  $\eta$  при  $S = 100 \text{ м}^2/\text{кг}$  (верхний треугольник) и  $S = 200$  (нижний треугольник)

(4.8) показатель  $\kappa^{100} = 1,57$  — вязкость падает в полтора раза за счет изменения распределения размеров мраморных частиц при равной удельной поверхности и при их равном содержании в связующем. Вдоль линий  $S = 200$  перепад меньше,  $\kappa^{200} = 1,3$ . Однако, непосредственное сравнение  $\kappa^{100}$  и  $\kappa^{200}$ , полученных при  $S = 100$  и  $S = 200 \text{ м}^2/\text{кг}$ , некорректно, поскольку они соответствуют разным диапазонам варьирования гранулометрии. В некоторой степени условия выравниваются при использовании аналогичного (4.9) усредненного градиента

$$\nabla^S = (\eta_{\text{max}}^S - \eta_{\text{min}}^S) / l^S. \quad (4.10)$$

Величина  $\nabla^S$  характеризует чувствительность вязкости (а, следовательно, и структуры композиции) к изменению распределения размеров частиц дисперсной фазы при ее постоянной удельной поверхности. Для условий базовой диаграммы  $\nabla^{100} = 116,2$  и  $\nabla^{200} = 79,2$ , т. е. степень влияния распределения размеров частиц на реологические свойства композиции несколько выше для более крупных (по интегральному показателю  $S$ ) частиц.

Проведенный ИПА позволил выявить эффект снижения вязкости за счет изменения только распределения размеров частиц, все остальные условия стабилизированы: одна и та же удельная поверхностная активность наполнителя (мрамор), равные удельная поверхность, степень наполнения ( $H : \Pi = 2,5$ ), скорость деформации ( $\dot{\epsilon} = 1 \text{ с}^{-1}$ ) и др. Одна из причин того, что подобный эффект ранее не описывался — трудоемкость экспериментального подбора разных по гранулометрии наполнителей, имеющих равную удельную поверхность. Эффект обнаружен и оценен с помощью вычислительного эксперимента на моделях, построенных по более доступным экспериментальным данным. Падение вязкости в зоне полифракционных смесей при прочих равных условиях, по-видимому, подтверждает повышенную вероятность образования в этой зоне ассоциатов частиц, поскольку при  $S = \text{const}$  и  $H : \Pi = \text{const}$  падение вязкости не может быть связано с увеличением средней толщины слоя полимера.

Описанный эффект пластификации композиций при оптимальной гранулометрии подтвержден в серии физических экспериментов [109—1985], в которых определяли вязкость композиций с наполнителями разного зернового состава при постоянстве  $S$  — интегральной характеристики распределения зереи по размерам. Результаты экспериментов указали на качественную инвариантность характерных изменений вязкости композиций на разных полиэфирных и эпоксидных смолах при управлении гранулометрией наполнителей.

Представления о возможных механизмах изменения вязкости под влиянием дисперсности наполнителя фиксированной минералогии (поверхностной активности) и количественный анализ степени этого влияния необходимы для выбора оптимальных технологических условий переработки смесей. Минимальные вязкости связующих в исследованном диапазоне гранулометрических составов соответствуют смесям фракций. Управляя гранулометрией можно добиться, по-видимому, существенного снижения вязкости при прочих равных условиях, не изменяя удельной поверхности и содержания наполнителей.

**Влияние минералогического состава наполнителей на реологические характеристики связующего при постоянной степени**

наполнения. Модель (4.4) дает возможность при постоянном  $H : П$  получить множество диаграмм «гранулометрия — эффективная вязкость», аналогичных рассмотренной для мрамора (см. рис. 4.4), но для разных минеральных составов (в пределах смеси кварц + мрамор + клинкер). Это множество описывается моделью  $M_I M_{II} Q$ , в частности, (4.11), полученной из (4.4) при  $x = +1$  (соответствует верхнему уровню наполнения в исследованном диапазоне  $H : П = 2,5$ ).

$$\begin{aligned} \ln \eta_1 = & 5,62v_1w_1 + 5,20v_1w_2 + 5,37v_1w_3 + \\ & + 6,03v_2w_1 + 5,40v_2w_2 + 5,30v_2w_3 + \\ & + 6,01v_3w_1 + 5,46v_3w_2 + 5,59v_3w_3 + \\ & + 0,60v_1v_2 - 0,58v_1v_3 - 1,27v_2v_3 - \\ & - 2,06w_1w_2 - 3,00w_1w_3 - 1,04w_2w_3. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Для отображения изменяющихся трехкомпонентных диаграмм «гранулометрия — свойство» целесообразно использовать их дискретный набор в семи точках — центронах треугольника минералогии. Такой несущий треугольник и семь соответствующих диаграмм «гранулометрия — вязкость» показаны на рис. 4.6. В вершине  $v_2$  несущего треугольника расположена диаграмма «гранулометрия — вязкость» для мрамора. Характер изменения изолиний описывается рядом обобщающих показателей  $G_w$ , которые рассчитывали для всех семи изображенных на рис. 4.6 диаграмм. Так, получены значения удельной поверхности, соответствующей минимальной вязкости связующих  $\eta_{1.min}$  в точках  $M_1$ , для:

кварца ( $v_1 = 1$ )	— 182,	}	(4.12)
бинарной смеси ( $0,5v_1 + 0,5v_2$ )	— 182,		
мрамора ( $v_2 = 1$ )	— 167,		
бинарной смеси ( $0,5v_2 + 0,5v_3$ )	— 142,		
клинкера ( $v_3 = 1$ )	— 154,		
бинарной смеси ( $0,5v_1 + 0,5v_3$ )	— 168,		
тройной смеси ( $v_1 = v_2 = v_3 = 1/3$ )	— 163.		

Результаты (4.12), в соответствии с изложенной в § 2.6 методикой, обобщаются новой моделью  $S \{M_1\} = S \{\eta_{1.min}\} = f(v_i)$  — полиномом Шеффе:

$$S \{M_1\} = 182v_1 + 167v_2 + 154v_3 + 30v_1v_2 + 0v_1v_3 - 74v_2v_3. \quad (4.13)$$

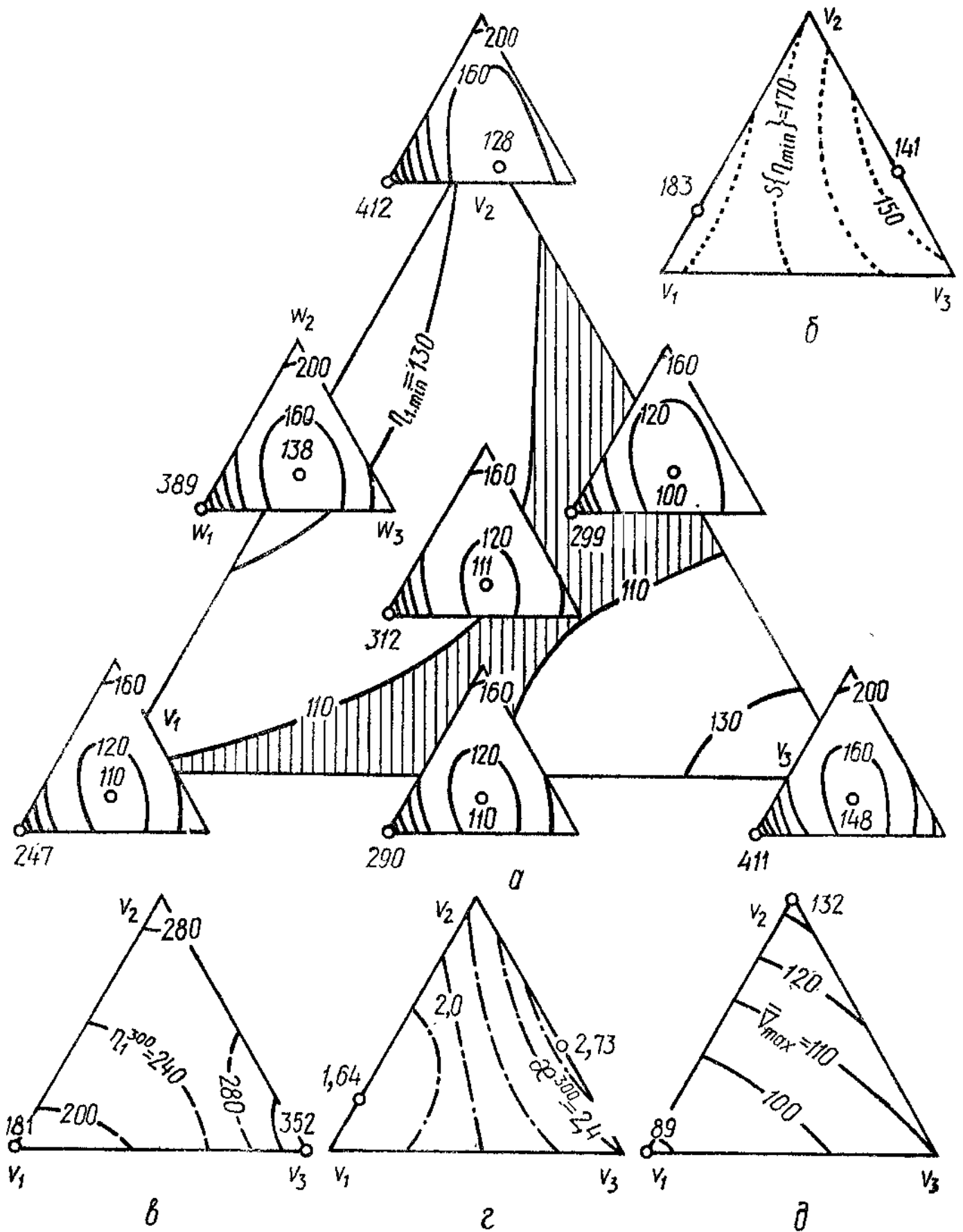


Рис. 4.6. Семь диаграмм «гранулометрия —  $\eta_1$ » и изолинии соответствующих минимальных значений  $\eta_{1,\min}$  на треугольнике минералогии (а); минералогические диаграммы для обобщающих показателей:  $S\{\eta_{1,\min}\}$  (б),  $\eta_1^{300}$  (в),  $\kappa^{300}$  (г) и  $\bar{V}_{\max}$  (д)

Для ее построения использовано шесть точек (4.12), соответствующих плану Шеффе, седьмая (в центре) — контрольная: в ней при расчете по (4.13) получено  $S = 162,9 \text{ м}^2/\text{кг}$ , что точно совпадает с седьмой строкой в (4.12). Изолинии модели (4.13) показаны на диаграмме «минералогия —  $S \{ \eta_{1 \text{ min}} \}$ » на рис. 4.6, б. Аналогичные процедуры применены для обобщения и других показателей во всех рассматриваемых системах «минералогия, гранулометрия — свойство».

Сравнительной характеристикой поверхностной активности наполнителей может служить значение эффективной вязкости  $\eta^{300}$  при их одинаковой удельной поверхности  $300 \text{ м}^2/\text{кг}$  (в точках  $M_3$  на гранулометрических диаграммах), отраженная на рис. 4.6, в. Она характеризует структурообразующую способность наполнителя интегрально (за счет адсорбции, химических связей [9, 39]). При прочих равных условиях ( $H : P = \text{const} = 2,5$ ;  $S = \text{const} = 300$ ;  $\epsilon = \text{const} = 1$ ) наиболее структурировано полиэфирное связующее на клинкерном наполнителе, где  $\eta_1^{300} = 352 \text{ Па} \cdot \text{с}$ . На 20 % ниже структурообразующая способность мрамора ( $\eta_1^{300} = 291$ ), а наименьшую поверхностную активность проявляет кварцевый наполнитель, для которого  $\eta_1^{300} = 181 \text{ Па} \cdot \text{с}$ . Однако изменение этого показателя при смешивании минералов (рис. 4.6, в) неаддитивно, особенно в клинкеросодержащих смесях, что хорошо видно из анализа коэффициентов соответствующей модели

$$\ln \eta_1^{300} = 5,200v_1 + 5,672v_2 + 5,870v_3 + \\ + 0,142v_1v_2 - 0,660v_1v_3 - 0,640v_2v_3. \quad (4.14)$$

Характерное для смесей, содержащих клинкер, уменьшение вязкости можно использовать при решении задач оптимизации наполнителя. Этот технологический вывод подтверждается и рис. 4.6, а, где на несущей минералогической диаграмме нанесены изолинии минимальной вязкости  $\eta_{1 \text{ min}}$ , достигаемой за счет управления гранулометрией смеси.

Показатель  $\chi^{300}$  (4.8) — снижение вязкости от  $\eta_1^{300}$  к  $\eta_{1 \text{ min}}$  — используется для характеристики устойчивости или стабильности структур, сформированных разными минеральными порошками, поскольку он при  $H : P = \text{const}$  зависит (рис. 4.6, г) только от минералогического состава наполнителя, т. е. от его поверхностной активности. В данном случае стабильность рассматривается по отношению к увеличению толщины полимерной пленки за счет снижения удельной поверхности наполнителя.



В области между  $\eta_1^{300}$  (точка  $M_3$ ) и  $\eta_{1.\min}$  (точка  $M_1$ ) велика роль межфазных взаимодействий и повышена вероятность образования ассоциатов. Поэтому структура стабильна и увеличение толщины полимерных слоев закономерно (в том числе в соответствии с гидродинамической теорией смазки) сопровождается снижением эффективной вязкости. Условной границей области стабильных структур можно считать удельные поверхности  $S \{M_1\}$ , соответствующие минимальной эффективной вязкости  $\eta_{1.\min}$  (см. рис. 4.6, б).

Из рис. 4.6, а следует, что минимальной структурной стабильностью обладают наполнители с большим содержанием кварца ( $v_1 \geq 0,6 \dots 0,7$ ). Причем, для сохранения этой стабильности они требуют и повышенной удельной поверхности  $S \{M_1\}$  (см. рис. 4.6, б). Диаграммы «минералогия — стабильность структуры  $\kappa^{300}$ » и «минералогия — удельная поверхность  $S \{M_1\}$ » приближенно подобны, что свидетельствует о взаимосвязи (близкой к обратно пропорциональной) этих структурных показателей. Стабильность структур на мраморном и клинкерном наполнителях (судя по  $\kappa^{300}$ ) примерно одинакова и значительно выше, чем у кварца. Максимальна устойчивость структур для мраморно-клинкерных смесей, где удельная поверхность  $S \{M_1\} = 141 \text{ м}^2/\text{кг}$  почти в полтора раза ниже, чем кварца.

Отмеченное приближенное подобие диаграмм на рис. 4.6, б и а и результаты их анализа — в пользу построения показателя структурообразующей роли наполнителя на следующем уровне обобщения. Таким показателем является градиент  $\bar{V}_{\max}$  (4.9). Фактически в него за счет последовательно построенных отношений включаются и структурообразующая способность  $\eta_1^{300}$ , и достигаемая управлением гранулометрией минимальная вязкость  $\eta_{1.\min}$ , и структурная стабильность  $\kappa^{300}$ , и граничная удельная поверхность  $S \{M_1\}$ . Из диаграммы на рис. 4.6, д следует, что минимальный градиент свойственен чистому кварцевому наполнителю, а максимальный — чистому мраморному. Таким образом, можно предположить, что именно мраморный наполнитель обладает наибольшей глубиной структурообразующего воздействия на жидкие слои полимера (при  $H : \Pi = \text{const} = 2,5$  и  $\varepsilon = \text{const} = 1 \text{ с}^{-1}$ ).

Полученные заключения можно расширить, сравнивая результаты изопараметрического анализа при  $S = 100$  и  $S = 200 \text{ м}^2/\text{кг}$  для разных минералов и их смесей (рис. 4.7). Качественный характер выводов, приведенных выше для чистого мрамора (изопараметрические кривые изображены на графике в вершине  $v_2$

треугольника — см. рис. 4.7, а), полностью сохраняется, хотя количественные оценки зависят от минерального состава наполнителя. Изопараметрические кривые для разных минералов можно обобщить, отражая на диаграммах минералогии изменения градиента падения вязкости при постоянстве удельной поверхности (4.10):  $\nabla^{100}$  (рис. 4.7, б) и  $\nabla^{200}$  (рис. 4.7, в).

Из анализа диаграмм «минералогия — градиент изопараметрического падения вязкости» (см. рис. 4.7, б...в) следует, что наибольшей чувствительностью к изменению распределения размеров частиц обладают полнэфирные связующие на мраморном на-

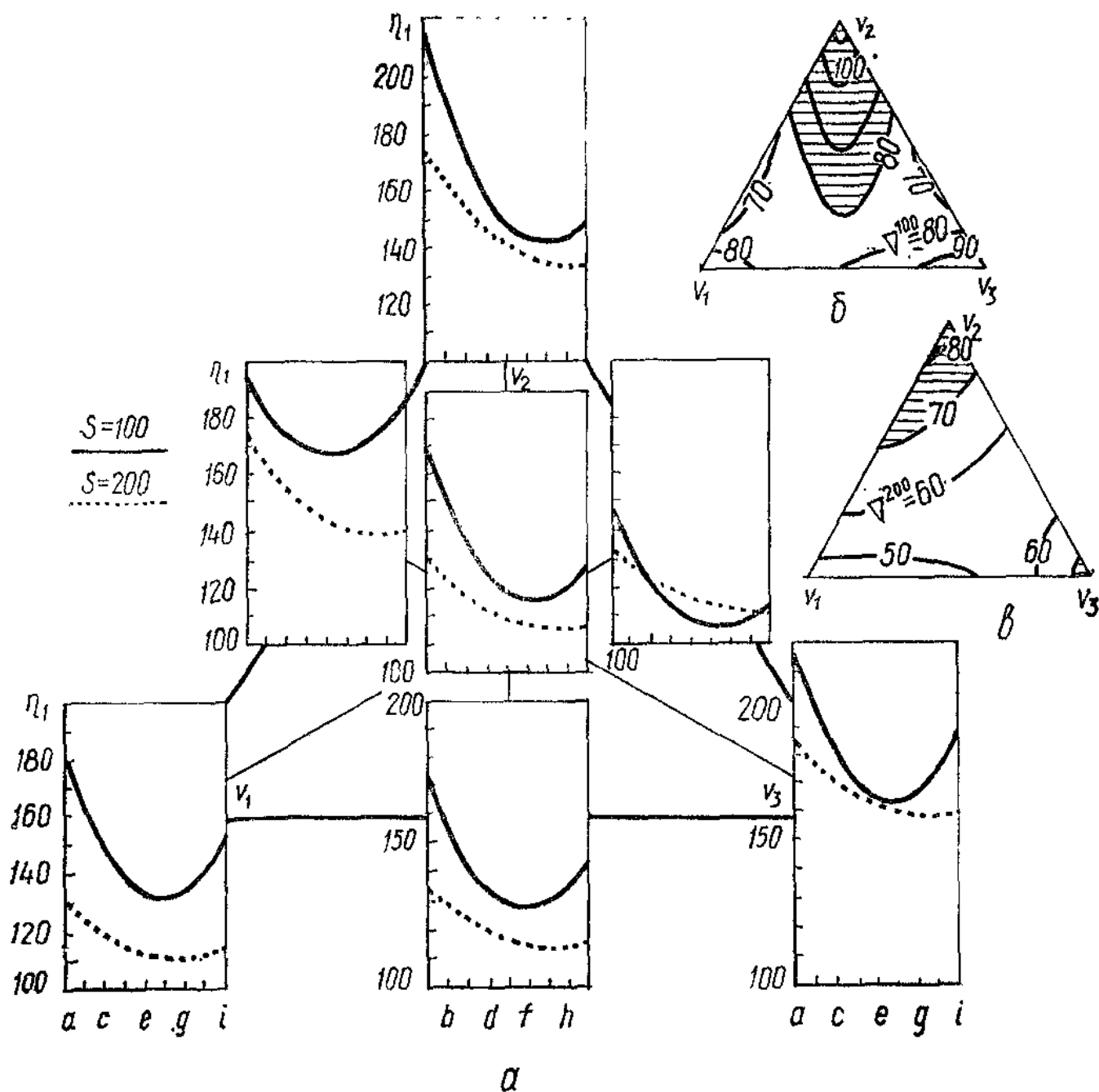


Рис. 4.7. Изменение  $\eta_1$  при  $S = \text{const}$  и  $H : \Pi = 2,5$  для семи минералогических составов наполнителя (а); нормированное максимальное падение вязкости  $\eta_1$  при  $S = 100 \text{ м}^2/\text{кг}$  (б) и  $S = 200 \text{ м}^2/\text{кг}$  (в) в зависимости от минералогии

полнители, меньше чувствительность для клинкера и, особенно, для кварца. Таким образом, дополнительный показатель структурообразующей способности наполнителей  $\nabla^S$  указывает, что минералы, обладающие более высокой поверхностной активностью, увеличивают чувствительность композиций к оптимальной укладке частиц. В этом случае повышается и вероятность образования в структуре ассоциатов частиц. В области систем, склонных к деструкции (а именно через нее проходит линия  $S = 100$ ), роль укладки зерен и образования ассоциатов возрастает, на что указывает неравенство  $\nabla^{100} > \nabla^{200}$  во всем поле диаграмм на рис. 4.7, б...в.

Комплекс технологических замечаний и выводов сделан выше на основе анализа системы диаграмм «гранулометрия — эффективная вязкость», отраженных на минералогическом треугольнике (см. рис. 4.6, а). Те же выводы можно получить, анализируя обратную систему — диаграммы «минералогия — эффективная вязкость», отражаемые на треугольнике зернового состава

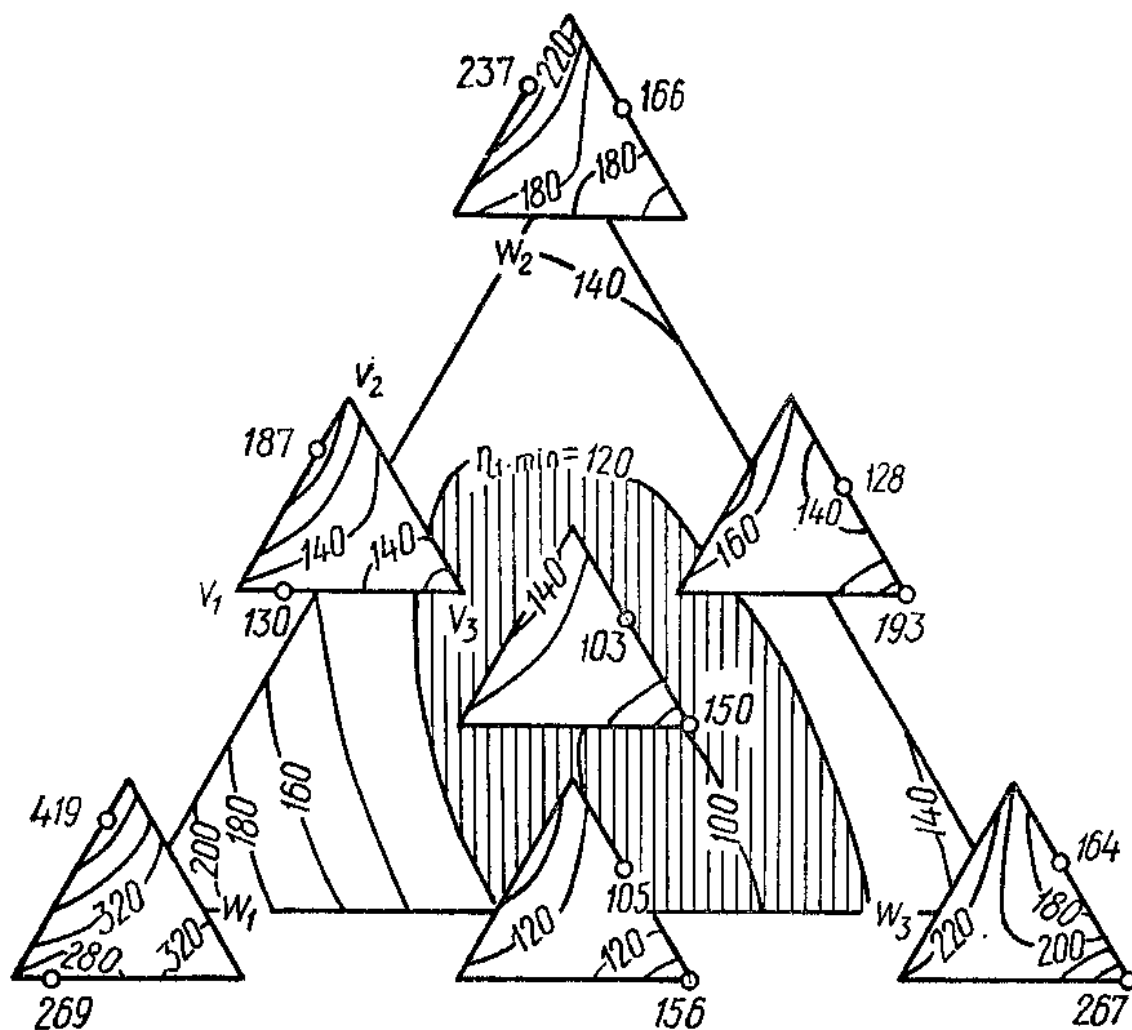


Рис. 4.8. Диаграммы «минералогия —  $\eta_1$ » и изолинии минимальных значений  $\eta_{1.min}$  на треугольнике гранулометрич

(рис. 4.8). Так, характер диаграмм «минералогия —  $\eta_1$ » (особенно для смесей частиц разных фракций) близок к отображению минимальной вязкости на рис. 4.6, а, а изолинии  $\eta_{1,\min}(v)$  на несущем треугольнике зернового состава (см. рис. 4.8) подобны изолиниям на семи треугольниках рис. 4.6, а (наиболее близки к диаграмме для клинкерно-мраморной смеси).

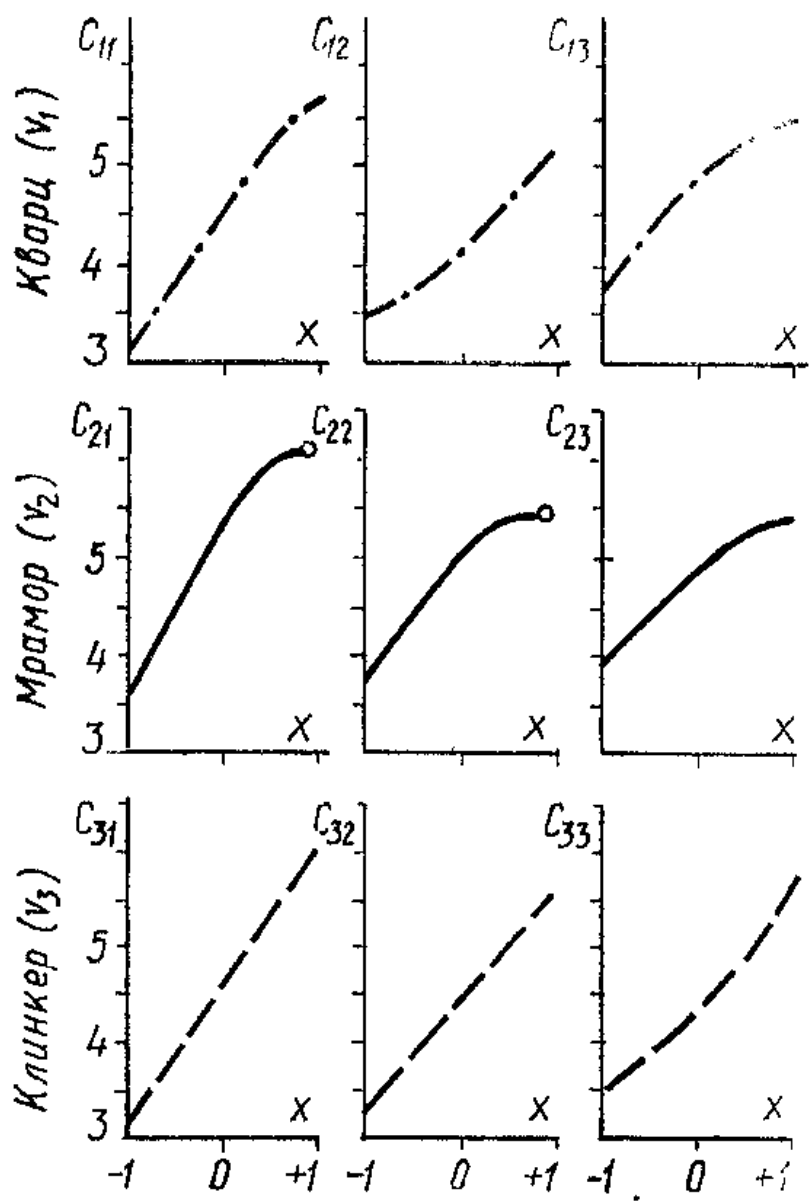
Полученные выше качественные и количественные выводы о влиянии гранулометрии и минералогии наполнителя на реологические характеристики связующего при постоянной степени наполнения ( $H : П = 2,5$ ) использованы в методике выбора оптимальных наполнителей полнэфирных связующих (см. § 4.4). Эти выводы далее развиты и обобщены при анализе влияния на вязкость композиций содержания наполнителя и изменения скорости деформации.

**Изменение эффективной вязкости при уменьшении  $H : П$ .** Влияние степени наполнения полнэфирных связующих на их вязкость отражено в явном виде в самой структуре моделей  $M_1M_{II}TQ$ , приведенных в табл. 4.3. В них входят параболические функции нормализованной переменной  $x = [(H : П) - 2]/0,5$ , которые заменяют константы  $C_{ij}$ ,  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$  в полиномах вида (2.34), описывающих систему  $M_1M_{II}Q$ . По модели (4.4) проведен первичный анализ влияния степени наполнения на эффективную вязкость при  $\dot{\epsilon} = 1 \text{ с}^{-1}$  с использованием графиков (рис. 4.9) изменения коэффициентов модели  $M_1M_{II}Q$  при изменении  $x$ . Верхнему уровню наполнения ( $x = 1$ ) соответствуют значения коэффициентов в (4.11). На рис. 4.9 выделено три зоны в соответствии с физическим смыслом параметров  $C_{ij}$ ,  $A_{ij}$  и  $B_{ij}$ , рассмотренным в § 2.2 для общего случая, а в § 4.2 — для эффективной вязкости связующих. Изменение параметров  $C_{ij}$  отражает изменение вязкости связующих для девяти «чистых» наполнителей в зависимости от степени наполнения. При уменьшении  $H : П$  вязкость закономерно падает (по мере увеличения средней толщины слоев жидкой фазы), хотя характер ее падения отличен для разных наполнителей\*.

---

\* В силу параболичности описания параметров на графиках  $C_{21}(x)$  и  $C_{22}(x)$  есть точки максимума вблизи верхней границы исследуемого диапазона наполнений, которые не следует трактовать как возможность снижения вязкости при увеличении степени наполнения. Это результат ограниченности квадратичной аппроксимации в случае, когда значения функции от  $x$  близки для  $x = 1$  и  $x = 0$ , а для  $x = -1$  резко уменьшены [16, 72].

Мелкие ( $w_1$ ) Средние ( $w_2$ ) Крупные ( $w_3$ )



Влияние смешивания минералов ( $v_i v_j$ )

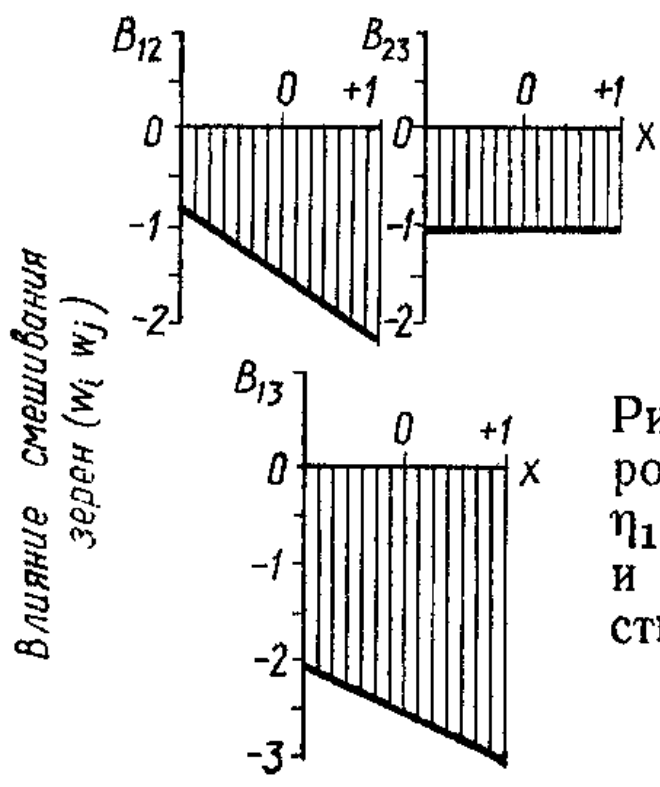
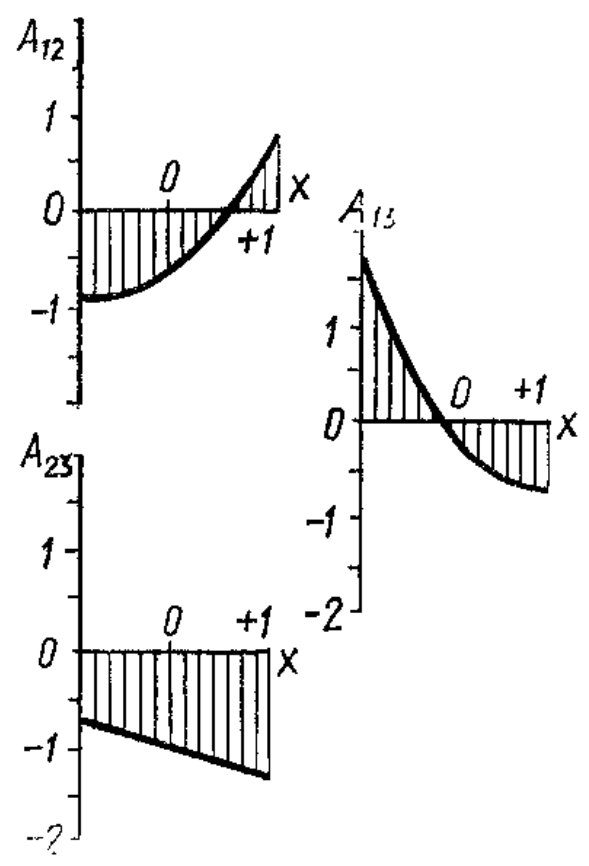


Рис. 4.9. Изменение параметров  $A$ ,  $B$  и  $C$  модели вязкости  $\eta_1$ , связанных с минералогией и гранулометрией, в зависимости от степени наполнения  $x$  (Н : П)

Более информативен анализ в двух других зонах, где в зависимости от степени наполнения показано изменение влияния на вязкость смешивания зерен разной крупности и разных минералов, отраженное изменением коэффициентов  $B_{ij}$  и  $A_{ij}$ . При уменьшении наполнения оценки  $B_{ij}$  сохраняют знак минус. Следовательно, смешивание фракций во всем диапазоне наполнений приводит к снижению вязкости при  $\dot{\epsilon} = 1 \text{ с}^{-1}$ . При уменьшении  $H : П$  (при увеличении  $\delta_{П}$  за счет добавления смолы) для смесей, содержащих мелкие зерна ( $B_{12}$ ,  $B_{13}$ ), естественно, наблюдается некоторое ослабление этого эффекта. Несколько сложнее характер влияния смешивания минералов. Если смешивание мрамора с клинкером ( $A_{23}$ ) приводит к снижению вязкости во всем диапазоне  $H : П$  (хотя и несколько уменьшающемуся в зоне малых наполнений), то для кварцесодержащих смесей эффекты меняют знаки. При большом наполнении кварцево-мраморная смесь ( $A_{12}$ ) дает некоторое повышение вязкости с дальнейшим снижением по мере уменьшения  $H : П$ . Смешивание кварца с клинкером ( $A_{13}$ ) уменьшает вязкость при большом наполнении, а при малом — ее увеличивает. Однозначное объяснение физической сущности влияния смешивания минералов на вязкость дать затруднительно, поскольку оно связано со сложными физико-химическими процессами образования межфазных слоев разной структуры [39, 82], которые определяются свойствами частиц [37, 52, 125] и дисперсионной среды, распределением энергии межфазных взаимодействий [82].

В ходе дальнейшего анализа рассмотрим трансформации базовой диаграммы «гранулометрия — вязкость» (мрамор,  $H : П = 2,5$ ,  $\dot{\epsilon} = 1$  — см. рис. 4.4) с уменьшением наполнения. Эти изменения отражены, в частности, набором гранулометрических диаграмм (рис. 4.10), построенных для ряда фиксированных значений наполнения (пять уровней наполнения от 2,5 до 1,5 с шагом  $H : П = 0,25$ ; диаграмма 4.10,  $d$  тождественна «базовой» на рис. 4.4). При непрерывном перемещении гранулометрической диаграммы вдоль оси наполнения получается объемное отображение (рис. 4.10,  $e$ ) изменения влияния гранулометрии на вязкость. В зависимости от степени наполнения, возникают изоповерхности вязкости внутри призмы. Изолинии на торцевых треугольниках соответствуют диаграммам «гранулометрия — вязкость» при граничных значениях  $H : П = 1,5$  ( $x = -1$ ) и  $H : П = 2,5$  ( $x = +1$ ). Изолинии на гранях призмы отражают зависимость от  $H : П$  вязкости связующих с бинарными наполнителями.

Как видно на рис. 4.10,  $e$ , вязкость связующего на мраморном наполнителе при скорости деформации  $\dot{\epsilon} = 1 \text{ с}^{-1}$  изменяется от

412 Па · с для наиболее наполненной композиции с «мелкими» частицами, до 24 Па · с при малом наполнении смесью «мелких» и «крупных» частиц. Область таких смесей во всем диапазоне наполнений соответствует пониженной вязкости, что указывает на положительный эффект управления гранулометрией. Изоперности вязкости внутри призмы имеют парусообразную форму, выгнутую в сторону больших наполнений. Следовательно, можно *снизить расход полимера* в связующем, выбирая *оптимальный гранулометрический состав наполнителя* — пунктирная линия на рис. 4.10, *e*, которая представляет собой геометрическое место точек типа  $M_1$  на рис. 4.4. Так, для обеспечения заданной вязкости 120 Па · с оптимальная смесь мелких и крупных зерен требует расхода лишь 310 кг смолы на 1 т материала, в то время как при мелком наполнителе необходимо 350 кг смолы.

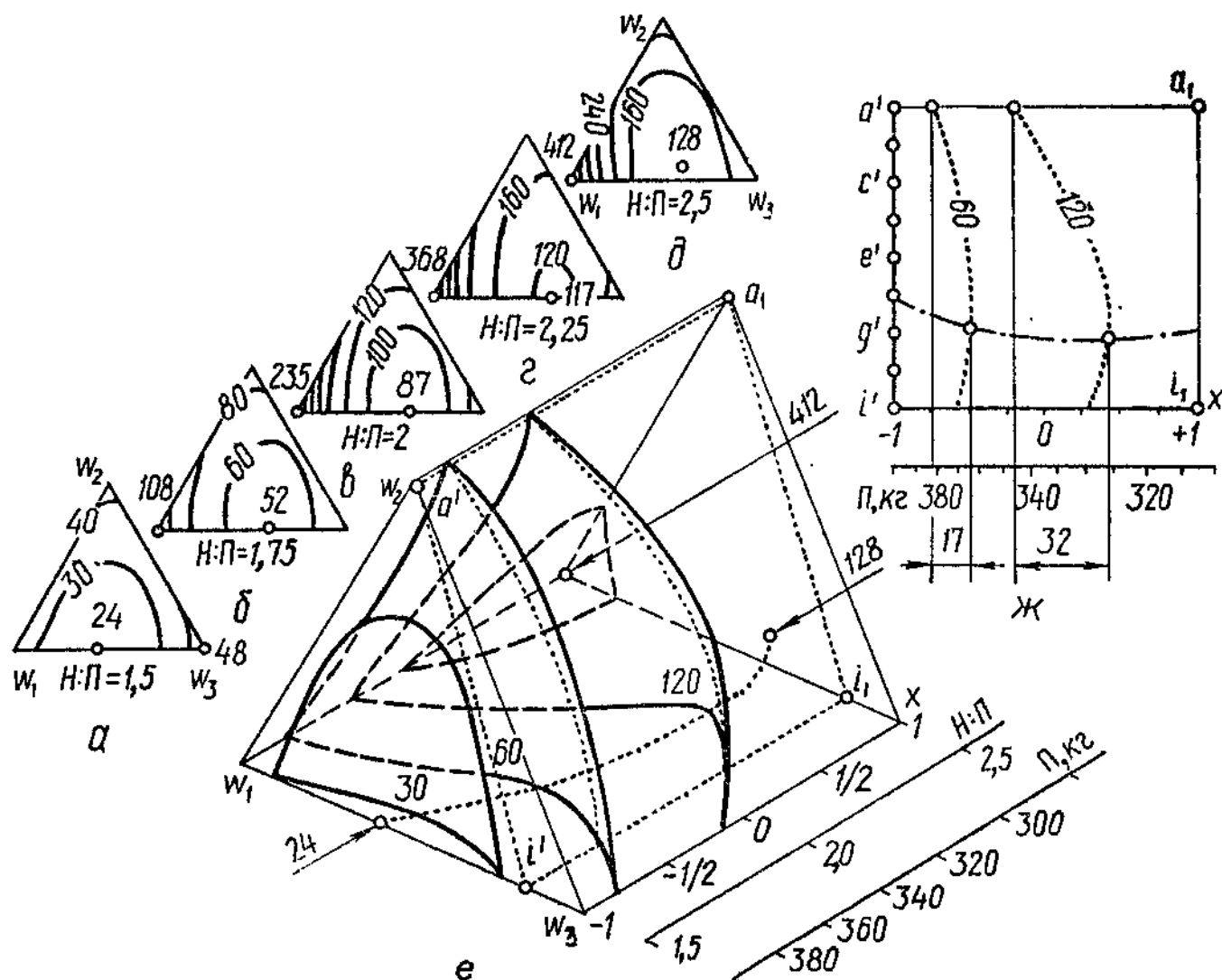


Рис. 4.10. Гранулометрические диаграммы вязкости  $\eta_1$  для пяти уровней  $H:\Pi$  (a...d) и изоповерхности  $\eta_1$  внутри призмы «гранулометрия мраморного наполнителя, степень наполнения  $H:\Pi$ » (e), а также результаты изопараметрического анализа  $\eta_1$  (ж) при  $S = 100 \text{ м}^2/\text{кг}$  по плоскости  $a_1i_1i'_1a'$  внутри призмы

По мере уменьшения наполнения оптимальные составы смещаются в область повышенного содержания в наполнителе мелкой фракции, поскольку по мере увеличения толщины жидких слоев при добавлении полимера стабильность структуры обеспечивается за счет большей удельной поверхности наполнителя.

Дополнительные выводы можно сделать в условиях принципиально нового анализа результатов — *изопараметрического*: изменяя степень наполнения и распределение размеров частиц при постоянной их удельной поверхности.

Эти условия для  $S = 100 \text{ м}^2/\text{кг}$  отображены поверхностью внутри призмы на рис. 4.10, *е*, которая образуется при перемещении линии  $S = \text{const}$  (см. рис. 4.5, линия  $a_1 - i_1$ ) вдоль оси наполнения. При пересечении поверхности (плоскости)  $S = \text{const}$  с изоповерхностями вязкости образуются изолинии вязкости, показанные пунктирными линиями (см. рис. 4.10, *ж*). В этих условиях еще более четко проявляется возможность экономии полимера при заданном уровне вязкости за счет распределения частиц по размерам. Так, для  $\eta = 120 \text{ Па} \cdot \text{с}$  возможна экономия 32 кг полимера на 1 т связующего, т. е. около 10 %. Несколько меньше эффект экономии смолы для менее вязких (менее наполненных) композиций. В этом случае, при более толстых в среднем полимерных слоях, эффект укладки частиц играет меньшую роль в связи с ослаблением роли адсорбционных сил.

Изменение обобщающих реологических показателей при уменьшении степени наполнителя. Физические модификации структуры можно оценить изменениями обобщающих показателей  $G_w$ . Так, снижение структурообразующей способности наполнителей по показателю  $\eta_1^{300}$  с увеличением количества полимера в связующем и утолщением в связи с этим полимерных слоев показано на рис. 4.11, *а*. В зоне относительно тонких пленок падение вязкости для композиций с мрамором незначительно, а затем — резкое, начиная примерно с уровня  $\delta_{\text{п}} = 1,3 \text{ мкм}$ . Структурообразующая способность наполнителя в этом диапазоне уже относительно «толстых» полимерных слоев проявляется в меньшей степени. Очевидно, что по мере увеличения содержания полимера будет сглаживаться ее различие для разных минералов и их смесей. Аналогично падает абсолютный максимум и минимум вязкости по мере увеличения содержания жидкой фазы.

Изоповерхности показателя структурообразующей способности наполнителя в зависимости и от его минералогии, и от содержания в композиции приведены на рис. 4.11, *б*. Такие призматические диаграммы «минералогия, наполнение — структурно-реологическая характеристика» представляют собой следующий уровень обобщения (см. рис. 2.4, *г*) результатов моделирования. Анализ



показал, что с уменьшением наполнения меняется ранжирование минералов по уровню их структурообразующей способности. Минимум в высоконаполненных системах наблюдается на кварце (181 Па · с), а при малом наполнении при «толстых» слоях — на клинкере (20 Па · с). В то же время, максимум, достигаемый на клинкере при  $H:\Pi = 2,5$  (при относительно «тонких» пленках), при малом наполнении соответствует мрамору.

Отображения типа рис. 4.11, б достаточно информативны, но сложны для анализа. Поэтому изменения числовых характеристик  $G_w$  в зависимости от наполнения целесообразно рассматри-

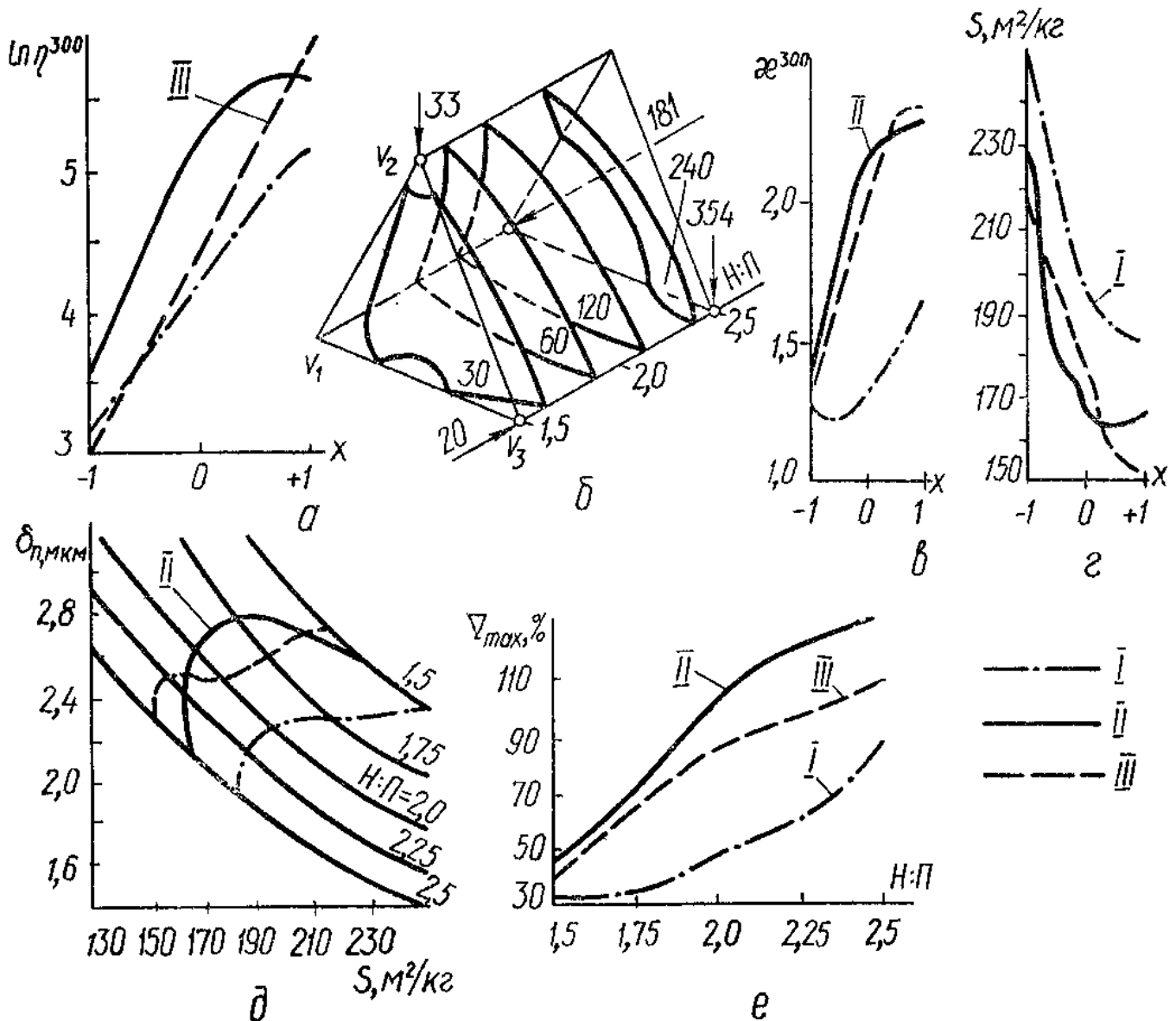


Рис. 4.11. Графики обобщающих показателей  $G_w$  для  $\eta_1$  (а, в, г, е) в зависимости от степени наполнения; изоповерхности (б) показателя структурообразующей способности минерального наполнителя  $\eta_1^{300}$ , а также взаимосвязь (д) оптимальной толщины полимерной пленки  $\delta_{п}$  с удельной поверхностью и содержанием наполнителя:

I — кварц; II — мрамор; III — клинкер

вать, прежде всего, отдельно для наполнителей того или иного минералогического состава, г. е. в виде одномерных графиков. Значение показателя стабильности структуры  $\kappa^{300}$  (рис. 4.11, в) снижается при уменьшении  $H : P$  для всех минералов. При этом перепад вязкостей значителен для клинкера и мрамора, но менее заметен для кварца, у которого он относительно невелик даже при большом наполнении и стабилизируется в области «толстых» слоев. На рис. 4.11, г показано оцененное в вычислительном эксперименте изменение по мере уменьшения  $H : P$  удельных поверхностей  $S \{M_1\}$ , соответствующих минимумам вязкостей или границам областей устойчивых структур (по отношению к увеличению  $\delta_n$  за счет уменьшения дисперсности). Для мраморного наполнителя, в частности, этот структурообразующий показатель существенно возрастает, начиная со средней толщины слоев порядка 2,6 мкм. Таким образом, для сохранения стабильной структуры при малых наполнениях необходима большая удельная поверхность дисперсной фазы. Менее «активный» кварцевый наполнитель во всем диапазоне  $H : P$  должен обеспечиваться большей дисперсностью для создания оптимальных структур.

Для выявления дополнительной технологического и физико-химического характера были проанализированы графики (рис. 4.11, д), связывающие среднюю толщину жидкого слоя  $\delta_n \{M_1\}$  по (4.6), при которой обеспечивается минимальная вязкость композиции как с соответствующей удельной поверхностью, так и с изменением наполнения. Из рис. 4.11, д следует, что средняя толщина полимерного слоя, соответствующая оптимальной структуре, колеблется при изменении степени наполнения в узком диапазоне: от 2,1 при  $H : P = 2,5$  до 2,8 мкм при  $H : P = 1,75$  для мрамора и еще в более узких пределах для клинкера. Нижняя граница  $\delta_n$  (около 1,8 мкм) характерна для минерала с пониженной поверхностной активностью: кварц не может стабильно «удерживать» пленки при их средней толщине, большей чем 1,8...2,3 мкм. Рост содержания полимера в относительно большом диапазоне ( $H : P = 2...1,5$ ) требует для создания оптимальных структур на кварце большей удельной поверхности (обеспечивающей  $\delta_n$  на уровне 2,3 мкм), т. е. увеличения энергоемкости наполнителя. Необходимо также отметить и различия графиков на рис. 4.11, д для мрамора и клинкера, что указывает на разный механизм адсорбции смолы моно- и полиминералами. Чувствительность структур к изменению дисперсности наполнителя (по градиенту —  $\bar{V}_{\max}$ ) падает по мере увеличения толщины полимерного слоя при добавлении полимера (рис. 4.11, е). Уровень этого показателя для кварца значительно ниже, чем для других наполнителей, и постоянен при  $H : P \leq 1,9$ . При малом

наполнении различие наполнителей по этой характеристике сглаживается.

Проведенный на основе вычислительного эксперимента анализ изменения эффективной вязкости (при  $\dot{\epsilon} = 1 \text{ с}^{-1}$ ) и связанных с ней показателей, характеризующих структуру композиций в обширном пространстве их составов, позволил сделать важный технико-экономический вывод: управление гранулометрией и минералогией наполнителей обеспечивает снижение полимероемкости на 30...40 кг/т за счет увеличения степени наполнения в широком диапазоне технологических условий. Экономия 40 кг полимера соответствует по энергозатратам выпуску 0,4...1,2 т цемента или помолу 40...80 т наполнителя (см. § 4.1).

Влияние скорости деформации на реологические характеристики связующих. В самом понятии эффективной вязкости заложено представление о зависимости вязкости структурированной системы от скорости деформации. Влияние скорости деформации на вязкость полиэфирных связующих в большом диапазоне их составов оценивают по комплексу моделей  $\eta_{\dot{\epsilon}} = F(v, w, x)$  при фиксированных значениях  $\dot{\epsilon}$ :  $3^{-1}$ ,  $3^0$ ,  $3^1$ ,  $3^2$  и  $3^3 \text{ с}^{-1}$  (см. табл. 4.3). Совокупность моделей, так же как свернутая в них экспериментальная информация (см. рис. 4.3), подтверждают, что с ростом  $\dot{\epsilon}$  вязкость композиций падает.

Влияние скорости деформации на вязкость композиций разной структуры отражено в изменении диаграмм «гранулометрия —  $\eta_{\dot{\epsilon}}$ » в координатах  $\{(H : П); \dot{\epsilon}\}$  при фиксированной минералогии наполнителя (рис. 4.12, а, клинкер). На несущем прямоугольнике «степень наполнения, скорость деформации» по горизонтали показаны диаграммы для трех уровней  $H : П$  при  $\dot{\epsilon} = \text{const}$ . Скорости расположены через равные интервалы  $\Delta m = 1$  (рост  $\dot{\epsilon}$  тройной). Такая развертка наглядно отражает изменение вязкости связующих в целом под воздействием и гранулометрии, и содержания наполнителя (толщины полимерных слоев, т. е. физико-химических энергетических условий), и скорости деформации. В области изменения этих факторов вязкость связующих на клинкерном наполнителе изменяется в диапазоне 523...3,7 Па · с. Полученная таким образом информация поддается дальнейшему структурированию и обобщению. На несущем прямоугольнике можно показать и проанализировать изменение обобщающих реологических показателей  $G_w$  в зависимости от  $H : П$  и  $\dot{\epsilon}$ . Под влиянием этих факторов во всей исследованной области вязкость  $\eta_{\min}$  (обеспечиваемая регулированием зернового состава клинкерного наполнителя) изменяется от 170 до 3,7 Па · с,

т. е. в 46 раз (см. рис. 4.12, а — пунктирные изолинии на прямоугольнике). Анализ показывает, что для наполненных композиций зерновой состав определяет степень разрушения структуры. За счет увеличения  $\dot{\epsilon}$  от  $1/9$  до  $27 \text{ с}^{-1}$  (в 81 раз) при  $H : \Pi = 2,5$  минимальная вязкость  $\eta_{\min}$  падает в 3,5 раза ( $170/49$  — см. рис. 4.12, а),

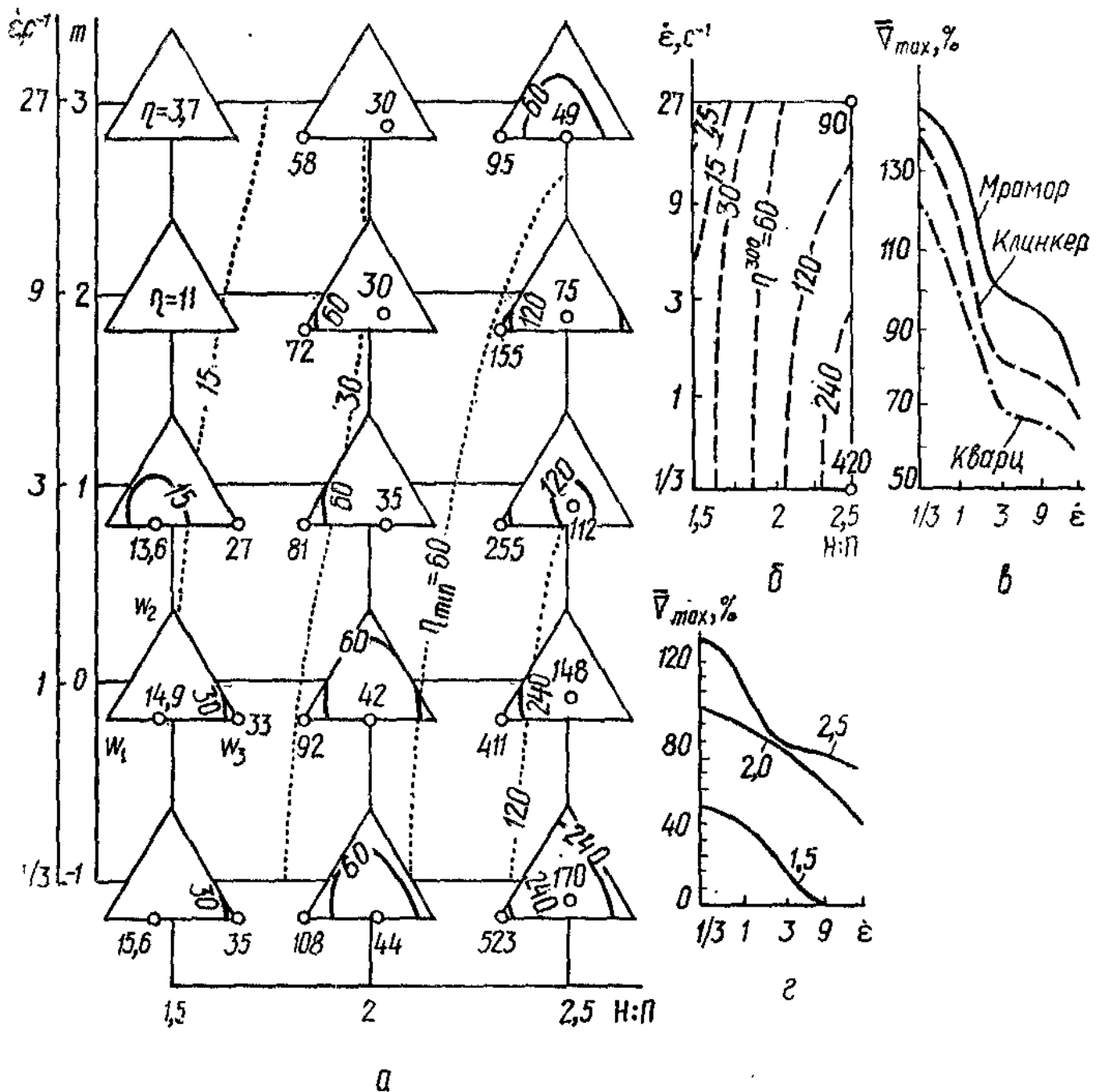


Рис. 4.12. Изменение диаграмм «минералогия мраморного наполнителя —  $\eta$ » в факторном пространстве «степень наполнения, скорость деформации» (а) и изолинии  $\eta_{\min}$  в нем; показатель структурообразующей способности мрамора  $\eta^{300}$  в поле факторов  $H : \Pi$  и  $\dot{\epsilon}$  (б); изменение под влиянием  $\dot{\epsilon}$  показателя чувствительности структуры  $\bar{V}_{\max}$  для разных наполнителей (в) при  $H : \Pi = 2,5$  и при разных  $H : \Pi$  (г) для мраморного наполнителя

а максимальная  $\eta_{\max}$ , на мелких клинкерных зернах — в 5,5 раз (523/95 — см. рис. 4.12, а). Показатель структурообразующей способности клинкера  $\eta^{300}$  в этих условиях уменьшается в 4,7 раза (420/90 — см. рис. 4.12, б). Аналогичные результаты получены и для других минералов [3]. Они указывают на повышенную устойчивость структуры к гидродинамическому разрушению в том случае, когда она сформирована наполнителем оптимального зернового состава. По мере увеличения толщины полимерных слоев при снижении  $H : \Pi$  эта разница в структурной устойчивости уменьшается (как видно из сравнения прямоугольных диаграмм на рис. 4.12, а, б). При  $H : \Pi = 1,5$  и  $\dot{\epsilon} \geq 9 \text{ с}^{-1}$  эффективная вязкость падает обратно пропорционально  $\dot{\epsilon}$  (см. рис. 4.3) вне зависимости от гранулометрии и минералогии. Тенденцию к снижению структурообразующей роли дисперсного наполнителя с ростом скорости деформаций отражает (см. рис. 4.12, в, г) и наиболее обобщающая реологическая характеристика — градиент  $\bar{V}_{\max}$  (4.9). Чувствительность дисперсной системы (по  $\bar{V}_{\max}$ ) к изменению дисперсности наиболее высока для карбонатного наполнителя, резко уменьшается с увеличением содержания полимера и скорости деформации. При больших  $\dot{\epsilon}$  она закономерно равна нулю.

Снизить вязкость композиции при необходимости можно за счет увеличения расхода смолы или затрат технологической энергии в соответствующих агрегатах (смесительных, формовочных). При заданной постоянной эффективной вязкости связующего можно получить экономию полиэфирной смолы, увеличив скорость деформации смеси. На рис. 4.12, а видно, что  $\eta_{\dot{\epsilon}} = \text{const} = 60 \text{ Па} \cdot \text{с}$  может быть получена при малой скорости деформации  $\dot{\epsilon} = 1/3 \text{ с}^{-1}$ , если  $H : \Pi = 2,09$  (расход смолы 324 кг/т), и при большой скорости  $\dot{\epsilon} = 17,4 \text{ с}^{-1}$ , если  $H : \Pi = 2,5$  (расход смолы 286 кг/т). Экономия смолы 38 кг/т достигается при повышении скорости деформации смеси в 52 раза, что потребует дополнительных энергетических затрат. Экономия полимера того же порядка достигается за счет перехода при  $\eta_1 = 60 \text{ Па} \cdot \text{с}$  от мелкого наполнителя к оптимальному (см. рис. 4.10, е).

В вычислительном эксперименте оказалось возможным количественно оценить взаимосвязь степени наполнения композита, скорости деформации смеси и зернового состава наполнителя при обеспечении заданной эффективной вязкости  $\eta$ . На рис. 4.13, а отображены изоповерхности  $\eta$  в вышеуказанных

координатах (рассмотрена смесь зерен  $\omega_1 + \omega_3$ , так как доля  $\omega_2$  для большинства оптимальных зерновых составов близка нулю), а на рис. 4.13, б — изолинии  $\eta = 30 \text{ Па} \cdot \text{с} = \text{const}$  и  $\eta = 120 \text{ Па} \cdot \text{с} = \text{const}$ , построенные на ЭВМ в плоскостях, проходящих при  $H : \Pi = \text{const}$  через точки  $\alpha$  и  $\beta$ . Это особые точки в плоскости  $\varepsilon = 1/3 \text{ с}^{-1}$ . Они соответствуют минимальному расходу смолы (в точке  $\alpha$   $H : \Pi = 1,84$  и расход  $\Pi = 351 \text{ кг/т}$  связующего, а в точке  $\beta$   $H : \Pi = 2,38$  и  $\Pi = 296 \text{ кг/т}$  связующего) за счет оптимизации соотношения между  $\omega_1$  и  $\omega_3$ . Вычислительный эксперимент позволил оценить последствия перехода от оптимальной гранулометрии к более мелким и крупным зернам. Нарушение оптимальности в сторону  $\omega_1 = 1$  вынуждает для сохранения заданной вязкости увеличивать скорость деформации связующих в 40...45 раз, что значительно повышает энергоем-

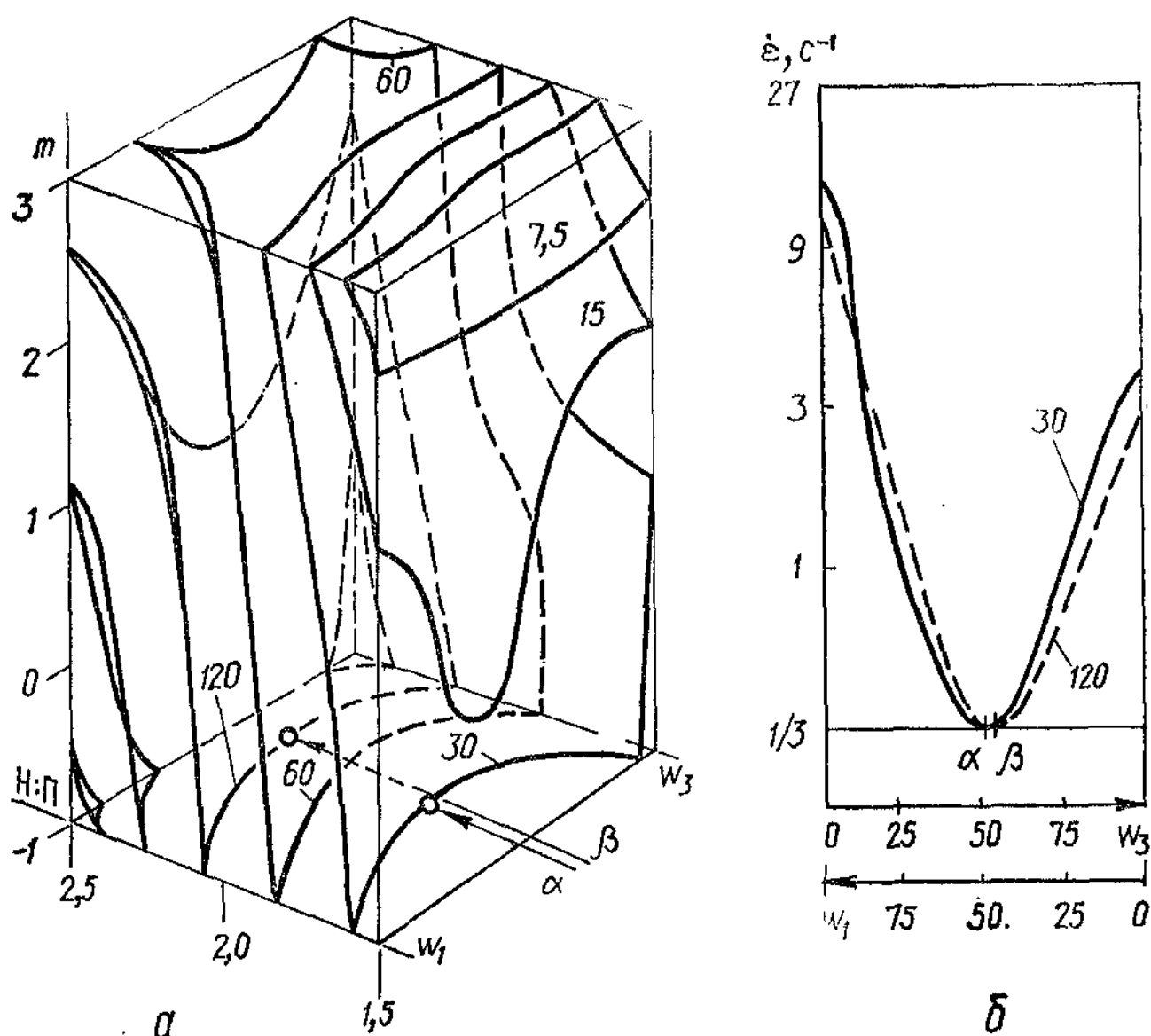


Рис. 4.13. Изоповерхности эффективной вязкости связующих с клинкерным наполнителем в пространстве «гранулометрия,  $H : \Pi$ ,  $\varepsilon$ » (а) и изовязкости оптимально наполненных композиций в соответствующих плоскостях «гранулометрия —  $\varepsilon$ » (б)

кость технологии приготовления и уплотнения смесей. Поскольку требуемая мощность агрегатов при ламинарном течении технологической смеси пропорциональна скорости деформации [12], то становится очевидным, что неоптимальность гранулометрии дисперсного наполнителя резко повышает энергоемкость технологий.

Окончательное решение об оптимальности зернового и минералогического составов может быть принято с учетом требований к эксплуатационным характеристикам материала, главным образом, его механическим свойствам.

#### 4.3. ВЛИЯНИЕ НАПОЛНИТЕЛЕЙ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИЭФИРНЫХ СВЯЗУЮЩИХ

По результатам эксперимента (см. § 4.1) построены модели  $M_1 M_{11} TQ$  для механических свойств затвердевших композиций, в том числе, для пределов прочности на сжатие  $R_c$ , МПа, и изгиб  $R_{из}$ , МПа, и динамического модуля упругости  $E_d$ , ГПа, в зависимости от минералогии, гранулометрии и количества наполнителя (табл. 4.5). В моделях отражена тенденция к увеличению этих показателей качества с ростом степени наполнения  $H : П$  — в зависимостях параметров  $C_{ij}$  от  $x$  линейный эффект положителен. Этот результат соответствует положению [39, 57, 74, 76] об улучшении механических свойств полиэфирных композиций по мере утоньшения межзерновых слоев полимера и его перехода из объемного состояния в пленочное за счет увеличения концентрации наполнителя (до определенного предела, перекрывающего диапазон  $1,5 \leq H : П \leq 2,5$ ). Особый интерес, как и в реологических задачах, представляет оценка влияния смешивания минералов и зерен разной крупности на свойства в зависимости от  $H : П$ . В полученных моделях оно описывается функциями от  $x$  для параметров  $A_{ij}$  и  $B_{ij}$  (при членах  $v_i v_j$  и  $\omega_i \omega_j$  соответственно). Смешивание зерен разной крупности положительно сказывается на прочности на сжатие и модуле упругости — свойствах, для которых велика роль пространственного каркаса. Для прочности на изгиб, при котором определяющую роль играют адгезионные явления, значительны эффекты смешивания минералов.

Комплекс моделей для свойств затвердевшего материала и жидкой смеси позволяет (см. § 4.4) определять эффективные составы композиций, удовлетворяющие условиям их технологии и эксплуатации при минимальных энергетических и материальных затратах.

Т а б л и ц а 4.5. Модели механических свойств композита  
 $Y_j = F(v, w, x)$

Эффекты модели	Показатели качества полиэфирного композита $Y_j$		
	$R_H$	$R_C$	$E_d$ , ГПа
	МПа		
$v_1 w_1$	$42,6 + 5,6x$	$134 + 2x^2$	$10,4 + 0,9x$
$v_1 w_2$	$33,1 + 5,9x$	$129 + 5x$	$9,4 + 0,6x$
$v_1 w_3$	$33,3 + 5,1x - 1,9x^2$	$132 + 7x - 3x^2$	$8,2 + 1,6x$
$v_2 w_1$	$34,0 + 5,8x + 2,4x^2$	$110 + 6x + 4x^2$	$8,8 + 0,5x$
$v_2 w_2$	$28,1 + 2,6x$	$116 + 16x$	$9,7 + 0,5x$
$v_2 w_3$	$25,1 + 3,5x$	$117 + 15x - 3x^2$	8,8
$v_3 w_1$	$42,1 + 5,3x$	$155 + 2x$	9,6
$v_3 w_2$	$32,5 + 4,4x + 2,1x^2$	$141 + 3x$	$9,6 + 0,9x + 0,6x^2$
$v_3 w_3$	$30,7 + 2,2x$	142	$10,5 + 1,8x$
$v_1 v_2$	$-9,8x$	36	1,3
$v_1 v_3$	$-9,6 - 13,8x$	$-29x + 27x^2$	0,0
$v_2 v_3$	$6,2 + 10,0x^2$	$-12 - 18x + 22x^2$	0,0
$w_1 w_2$	-6,8	$54 + 22x - 20x^2$	3,3
$w_1 w_3$	0,0	52	$4,1 + 3,4x$
$w_2 w_3$	$+3,8x$	42	$3,7 - 1,8x$
$s_{на}$	0,89	3,1	0,27
$\Delta u_{max}$	1,93; 1,57 1,08; 1,02	4,6; 3,0 2,7; 2,7	0,45; 0,40 0,39; 0,35

Прочность полиэфирных связующих на изгиб. В исследованном диапазоне составов минимальная прочность на изгиб (около 21 МПа) получена для системы с низким содержанием крупнозернистых порошков мрамора, а максимальная (49 МПа) — при максимальном наполнении связующего оптимальной смесью мелких зерен клинкера и мрамора. Перепад более чем вдвое обусловлен изменением минералогии, гранулометрии и количества наполнителя в композиции.

Влияние дисперсности и минералогии наполнителей на прочность полиэфирных связующих при изгибе для фиксированной степени наполнения  $H : П = 2,5$  показано на рис. 4.14, а. На всех семи диаграммах «гранулометрия —  $R_H$ » характер изолиний близок изолиниям удельной поверхности на диаграммах «гранулометрия —  $S$ » (см. рис. 4.2, а). Это указывает на незначительность для сопротивления изгибу эффекта укладки частиц (значительного для вязкости неотвержденных композиций (см.



§ 4.2) и подтверждает гипотезу об определяющем значении суммарной поверхности раздела для прочности композита при этом виде механического нагружения. Действительно, переходу от точки  $M_5$  к точке  $M_2$  на базовом гранулометрическом треугольнике (мрамор) соответствует увеличению  $R_H$  на 13,6 МПа (на 48 %). Это происходит только за счет увеличения  $S$  от 50 до 336 м<sup>2</sup>/кг, вызывающего утоньшение полимерной пленки на поверхности твердых частиц: ее средняя толщина уменьшается от 7,3 до 1 мкм. Упрочнение композиции при этом, в частности, объясняется упрочнением матричного материала [9, 53] по мере смыкания более плотных структурированных слоев и увеличением адгезионной прочности [55].

Для дальнейшего анализа использованы обобщающие показатели, связанные с особыми точками на диаграммах «грануломет-

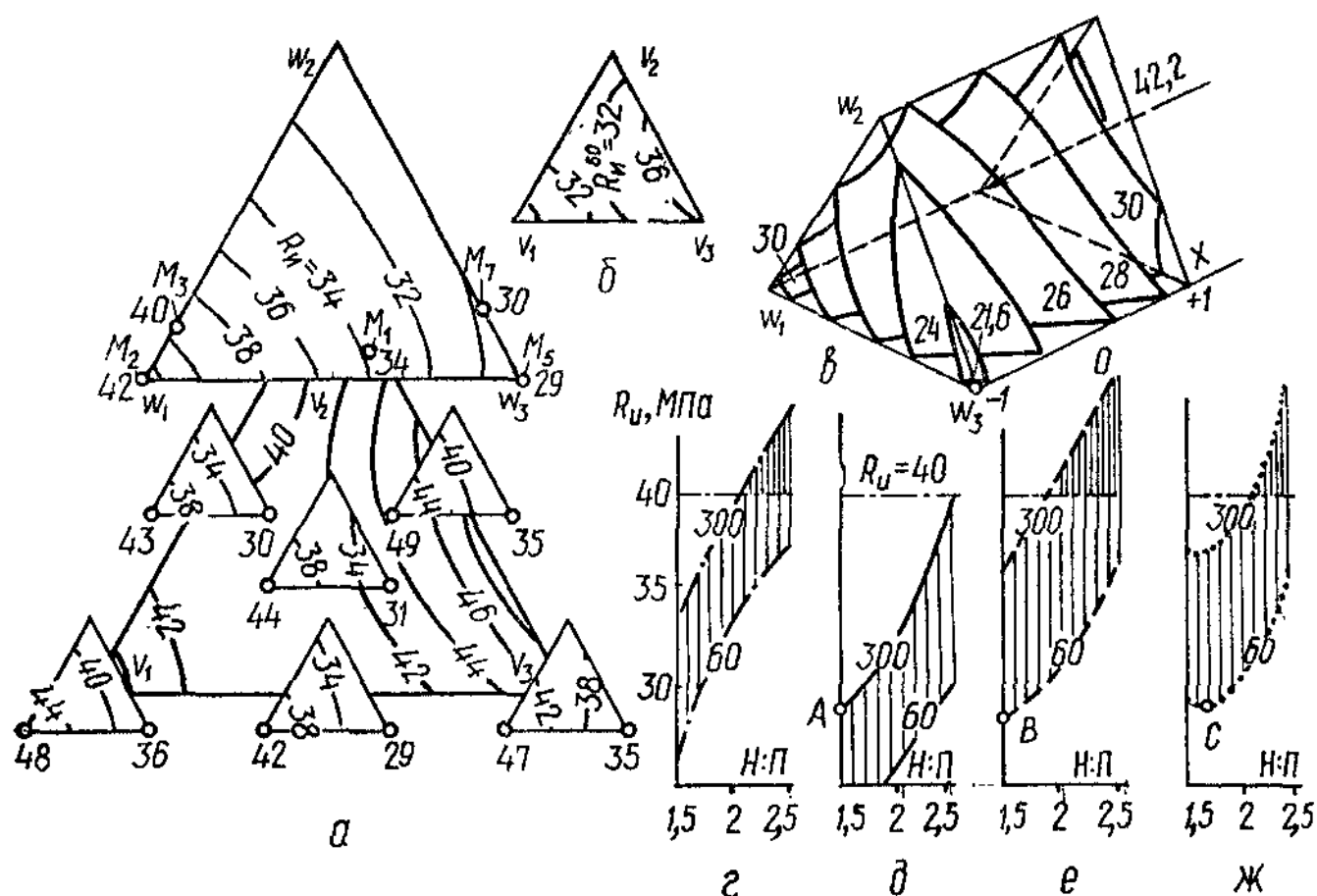


Рис. 4.14. Семь диаграмм «гранулометрия — пределы прочности на изгиб  $R_H$ » и изолинии его показателя  $R_H^{300}$  на треугольнике «минералогия» (а); минералогическая диаграмма для обобщающего показателя  $R_H^{60}$  (б); изоповерхности  $R_H$  для мраморного наполнителя внутри призмы «гранулометрия, Н : П» (в), а также изменение зависимости  $R_H^{300}$  и  $R_H^{60}$  от степени наполнения кварцем (г), мрамором (д), клинкером (е) и равновесной мраморио-клинкерной смесью (ж)

рия —  $R_{и}$ ». Помимо  $M_2$  и  $M_5$  для максимума и минимума  $R_{и}$  на базовой диаграмме отмечены: точка  $M_1$ , отвечающая минимуму вязкости  $\eta_1$  (см. рис. 4.4), точки  $M_3$  и  $M_7$ , соответствующие «эталонным» гранулометрическим составам с удельной поверхностью 300 и 60 м<sup>2</sup>/кг.

На несущем минералогическом треугольнике показаны изолинии  $R_{и}^{300}$  связующих с различными минеральными наполнителями при равной удельной поверхности 300 м<sup>2</sup>/кг (составы в точках типа  $M_3$ ). В этих условиях лучшим оказывается клинкерный наполнитель, несколько хуже кварцевый, еще хуже карбонатный. Обладающий относительно высокой поверхностной активностью в жидкой среде (см. § 4.2) мрамор не обеспечивает высокого уровня  $R_{и}$  затвердевшего композита. Вероятно, здесь проявляется отмеченный в [39, 76, 82] антагонизм между количеством и жесткостью связей в граничном слое, с одной стороны, и условиями возникновения внутренних напряжений и взаимодействия фронта трещин с гетероструктурой — с другой (макроаналог — ненадежность склеек при чрезмерно высокой адгезионной способности элементов соединения). Следует отметить положительный эффект смешивания мрамора с клинкером, который наблюдался и для эффективной вязкости. Отмеченные для  $R_{и}^{300}$  закономерности влияния минералогии сохраняются и для крупнодисперсных наполнителей ( $S = 60$ ), что видно на диаграмме «минералогия —  $R_{и}^{60}$ » (рис. 4.14, б). Изопараметрический анализ при  $S = \text{const}$  показал, что за счет распределения размеров частиц изменение  $R_{и}$  находится в пределах ошибки модели.

С увеличением степени наполнения в диапазоне  $1,5 \leq H : \Pi \leq 2,5$  наблюдается рост прочности на изгиб. Он обусловлен, прежде всего, утоньшением полимерных слоев, переходом полимера из объемного в пленочное состояние, упрочнением матрицы и межфазовых контактов. Изоповерхности на рис. 4.14, в отражают изменение  $R_{и}$  в зависимости как от дисперсности, так и от содержания мраморного наполнителя. По диаграмме можно сравнить интенсивность и степень воздействия этих двух факторов: прочность 30 МПа минимально наполненной композиции ( $x_1 = -1$ ) обеспечивается  $S = 300$ , а при «крупных» зернах ( $S = 85$  м<sup>2</sup>/кг) необходимо максимальное наполнение ( $x_2 = +1$ ). Таким образом, существует противоречие между требованиями к материалу по максимуму прочности на изгиб и по минимуму вязкости смеси (см. рис. 4.4), что еще раз подчеркивает диалектичность технологических задач.

Графики зависимостей  $R_{и}^{300}$  и  $R_{и}^{60}$  от степени наполнения для трех минералов и мраморно-клинкерной смеси (см. рис. 4.14, г...ж)

обобщают описание влияния дисперсности, минералогии и содержания наполнителя на прочность при изгибе. Смесь мрамора с клинкером ( $v_2 = 0,1 \dots 0,5$ ) показывает лучшие результаты во всем диапазоне наполнений. «Крупный» наполнитель из этой смеси минералов ( $R_{и}^{60} = 29,5$  МПа в точке С — см. рис. 4.14, ж), а также клинкерный (см. рис. 4.14, е — точка В) обеспечивают практически такой же уровень прочности, что и мелкий мрамор ( $R_{и}^{300} = 28,9$  МПа в точке А — см. рис. 4.14, д). Поскольку когезионная прочность смолы Виналкид (по  $R_{и}$ ) около 40 МПа, то можно констатировать для всех наполнителей (кроме чистого мрамора удельной поверхностью  $S = 300$  м<sup>2</sup>/кг и насыщенных этим минералом мраморно-кварцевых смесей — см. несущий треугольник на рис. 4.14, а) изменение структурообразования в тонких затвердевших пленках полимера ( $H : П \geq 2$  — зона двойной штриховки на рис. 4.14, г...ж). Дополнительную количественную информацию для оценки явлений при формировании структур на поверхностях раздела в композитах дают абсолютные ( $\Delta R_{и} = R_{и}^{300} - R_{и}^{60}$ ) и относительные ( $\kappa R_{и} = R_{и}^{300}/R_{и}^{60}$ ) приросты прочности. Для композитов на клинкерном наполнителе (см. рис. 4.14, е) характерен наибольший прирост  $\bar{\Delta}R_{и} = 9,4$  МПа (усреднен по диапазону  $H : П$ ). Это на 35 % выше, чем для композита на кварце ( $\bar{\Delta}R_{и} = 7$ ) и свидетельствует о пониженной чувствительности кварца к увеличению поверхности «наполнитель — матрица». В то же время, мраморный наполнитель, для которого  $R_{и}^{300} < R_{и}^{см}$  (см. рис. 4.14, д) и абсолютные значения прочности невелики, имеет  $\bar{\Delta}R_{и} = 7,6$  МПа (а относительный прирост  $\kappa R_{и} = 1,3$  равен клинкерному), что свидетельствует о значительной структурообразующей роли этого минерала как в жидких (см. § 4.2), так и твердых полиэфирных композитах.

В целом анализ количественных оценок влияния гранулометрии, минералогии и степени наполнения композита на его сопротивление изгибу подтвердил превалирующую роль тех рецептурных факторов, которые определяют формирование адгезионных связей на поверхностях раздела «наполнитель — матрица», а также существенное значение условий, при которых происходит направленная перестройка сетчатой структуры тонких межзеренных слоев поликонденсационных смол.

Влияние дисперсности, минералогического состава и содержания наполнителей на прочность композита при сжатии. Модель «смесь I, смесь II, степень наполнения —  $R_c$ » в табл. 4.5 предсказывает изменение прочности на сжатие в диапазоне 99...166 МПа: минимальную прочность  $R_c$  для связующих с крупным мрамор-

ным наполнителем, максимальную — на смеси трех фракций портландцемента.

Анализ изменений  $R_c$  под влиянием состава и количества наполнителя в связующих проводят в ходе вычислительного эксперимента (см. гл. 2) подобно анализу  $\eta$  и  $R_{\eta}$ :

а) первичную модель  $M_1 M_{11} TQ$  для  $R_c$  расчленяют на более простые, удобные для графического отображения и анализа модели, связанные с разными группами факторов при фиксированных значениях остальных факторов;

б) по полученным из  $R_c$  ( $v, w, x$ ) моделям при фиксированных  $v$  и  $x$  строят и анализируют диаграммы «гранулометрия —  $R_c$ », изменяющиеся при переходе от одного минерального состава порошков к другому и при изменении степени наполнения;

в) определяют числовые характеристики  $G_w$  — по ним рассчитывают и анализируют вторичные модели  $G_w(v)$ ,  $G_w(x)$ , которые обобщают зависимости прочности  $R_c$  от гранулометрии для разных минеральных наполнителей при разном их содержании в связующих. Используемые в ходе анализа графические отображения влияния наполнителей на прочность при сжатии показаны на рис. 4.15.

Проявление положительной роли смешивания дисперсных фракций при сжатии композитов было отмечено в § 4.3 при анализе параметров  $B_{ij}$  в модели для  $R_c$ . По изолиниям на гранулометрических диаграммах (рис. 4.15, а) видно, что максимум прочности на сжатие обеспечивается полидисперсными наполнителями. Зерновые составы, отвечающие максимуму  $R_c$ , отмечены как новая особая точка  $M_8$  (обозначена для мрамора) на гранулометрических диаграммах. Сопоставление уровней  $R_{c,max}$  и  $R_{c,min}$  для разных минеральных составов показывает преобладание при этом виде нагружения эффекта укладки частиц по сравнению с проявлением минералогии наполнителя. Изолинии достигаемой за счет управления гранулометрией максимальной прочности на сжатие, в зависимости от минералогии  $R_{c,max}(v)$ , показаны на несущем треугольнике. При  $H : П = 2,5$  максимальная прочность 166 МПа обеспечивается смесью трех фракций портландцемента ( $w_1 = 0,57$ ;  $w_2 = 0,28$ ;  $w_3 = 0,15$ ).

Оптимальной по  $R_c$  гранулометрии мраморного наполнителя (в точке  $M_8$ ) соответствует меньшая удельная поверхность  $S\{R_{c,max}\}$  по сравнению с кварцем и клинкером (рис. 4.15, б). Оптимальная средняя расчетная толщина межзеренных слоев  $2\delta_{\text{п}}$  составляет при этом 5,54 мкм для мрамора и 3,34 мкм для клинкера. Нарушение оптимальности как в сторону более тонких слоев, так и в сторону их утолщения приводит к снижению прочности на сжатие. Степень снижения прочности при переходе

от оптимальной гранулометрии к относительно монофракционным тонкодисперсным и грубодисперсным наполнителям, выраженная показателями  $\kappa^{300} = R_{c.\max}/R_c^{300}$  и  $\kappa^{60} = R_{c.\max}/R_c^{60}$ , для разных минералов и их смесей, как правило, превышает 10%. Максимальный усредненный градиент  $\bar{\nabla}R_c$  (аналогичный по смыслу (4.9)) характеризует чувствительность структуры к изменению дисперсности (и интегральной, и дифференциальной) по отношению к восприятию напряжений, возникающих при сжатии. Диаграмма «минералогия —  $\bar{\nabla}R_c$ » (рис. 4.15, в) показывает, что и по отношению к сжатию наиболее значительна роль поверхностных явлений и контактных взаимодействий в композициях с дисперсным карбонатом кальция.

Изопараметрический анализ  $R_c$  при  $S = \text{const}$  позволил выявить участие распределения размеров частиц и их укладки в сопротивлении КМ сжатию. При изменении гранулометрии мраморного наполнителя от монофракционной к смесевой вдоль изолинии  $S = 100$  (см. рис. 4.2, а) максимальный прирост  $R_c$  более 8 МПа равен приросту прочности при переходе от  $S = 60$

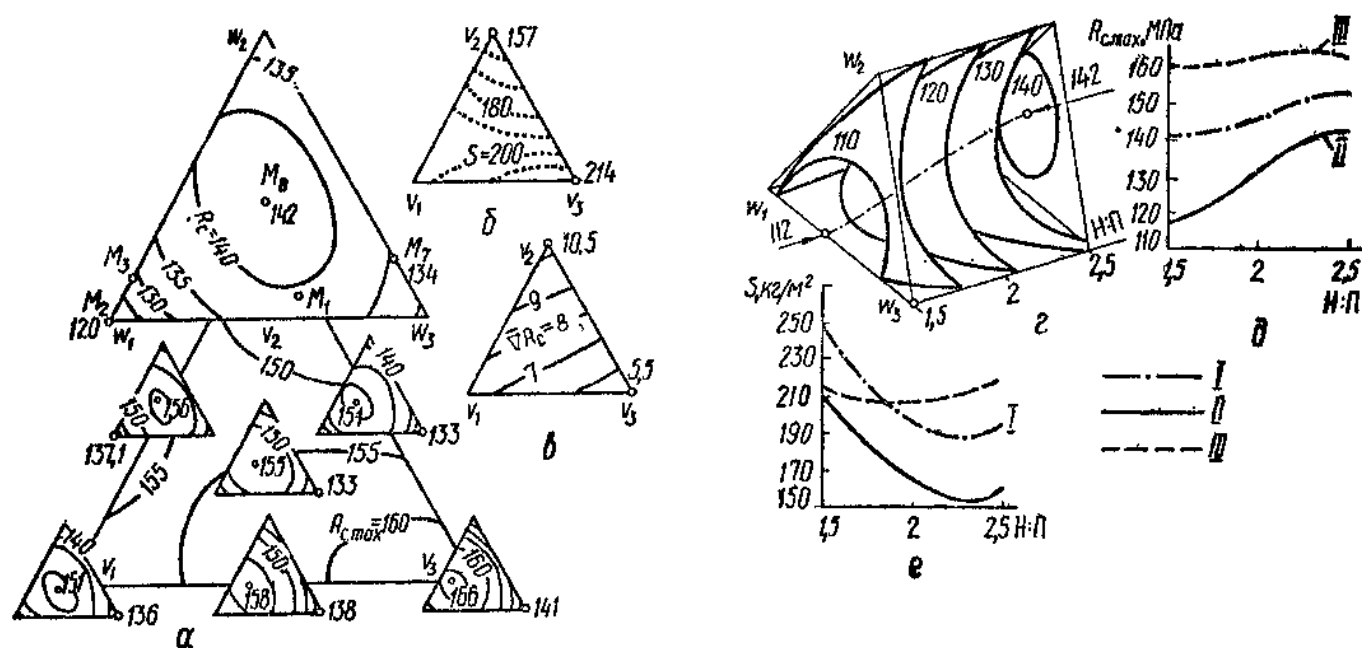


Рис. 4.15. Диаграммы «гранулометрия — пределы прочности на сжатие  $R_c$ » и изолинии  $R_{c.\max}$  на треугольнике «минералогия» (а); минералогические диаграммы для обобщающих показателей  $S \{R_{c.\max}\}$  (б) и  $\bar{\nabla}R_c$  (в); изоповерхности  $R_c$  для мраморного наполнителя внутри призмы «гранулометрия, Н : П» (г); зависимость обобщающих показателей  $R_{c.\max}$  (д) и  $S \{R_{c.\max}\}$  (е) от Н : П для наполнителей разной минералогии:

I — кварц; II — мрамор; III — клинкер

к  $S = 157 \text{ м}^2/\text{кг}$  (от  $M_7$  к  $M_8$ ). Прирост прочности только за счет смешивания фракций при неизменной минералогии, удельной поверхности и содержании наполнителя в композиции указывает на структурообразующую роль укладки частиц в пространственный каркас. Максимуму прочности в зоне тройной гранулометрии соответствует, вероятно, оптимальная неоднородность структуры [25].

Прочность на сжатие полиэфирных связующих растет с увеличением  $H : П$  до 2,5. Этот рост, как и для  $R_{и}$ , связан с увеличением доли структурированных межфазных слоев, упрочнением матрицы и улучшением адгезии по мере уменьшения толщины слоев полимера. Однако, как видно по изоповерхностям на диаграмме (рис. 4.15, *г*), уровень  $R_c$  во всем диапазоне наполнений в значительной степени определяется и дифференциальным распределением полимерных пленок в объеме композита. Внутри призмы « $\omega, H : П$ » существует коридор оптимального (по  $R_c$ ) распределения частиц по размерам, что обеспечивает формирование пространственного каркаса, оптимального для восприятия сжимающих нагрузок. Во всей области составов (см. рис. 4.15, *г*) общий перепад прочности (от худшего состава —  $\omega_3 = 1, H : П = 1,5$  к оптимальному —  $\omega_1 = \omega_3 = 0,28, \omega_2 = 0,44, H : П = 2,5$ ) составляет 44 %. При этом прирост прочности за счет увеличения наполнения мелким мрамором ( $\omega_1 = 1$ ) от 1,5 до 2,5 составляет 11 %, а переход при  $H : П = 2,5$  от состава  $\omega_1 = 1$  к оптимальной гранулометрии обеспечивает 19 % прироста  $R_c$ .

С увеличением  $H : П$  наиболее интенсивный рост  $R_{c \text{ max}}$  для мрамора (рис. 4.15, *д*) свидетельствует о повышении структурообразующей способности таких частиц по мере уменьшения толщины полимерных пленок. Удельная поверхность  $S \{R_{c \text{ max}}\}$ , отвечающая оптимальной гранулометрии мрамора и кварца, растет (рис. 4.15, *е*), начиная с уровня  $H : П = 2$ . По мере утолщения полимерных пленок оптимальная (по  $R_c$ ) структура достигается за счет большей площади поверхности раздела. При этом сохраняется оптимальная в среднем толщина полимерных пленок (результат, близкий к выводам работы [74]). Аналогичная зависимость выявлена для структур, оптимальных по  $\eta_g$  (см. рис. 4.11, *г*). Структурам с портландцементом соответствует относительно высокий уровень  $S \{R_{c \text{ max}}\}$ , нечувствительный к содержанию полимера в исследованном диапазоне  $H : П$ .

Как следует из анализа результатов моделирования, структурообразующая роль поверхностей раздела по-разному проявляется при сжатии и изгибе композитов. Коэффициенты корреляции  $r \{Y_i, Y_j\}$  по всему массиву экспериментальных данных

показали наличие положительной корреляции между  $R_n$  и  $S$  ( $r = 0,47$ ), но слабую взаимосвязь  $R_c$  и  $S$  (истинный коэффициент корреляции  $\rho = 0$ ).

**Динамический модуль упругости полиэфирных композитов.** В качестве сравнительной характеристики упруго-деформативных свойств композиций можно использовать динамический модуль упругости  $E_d$  [114]. Модель для  $E_d$  в зависимости от дисперсности, минералогии и содержания наполнителя (см. табл. 4.5) предсказывает в исследованной области изменение этого свойства более чем в полтора раза в пределах 8,4 (Н : П = 1,5; мелкий мрамор)...13,1 ГПа (Н : П = 2,5; смесь мелкого и крупного клинкера).

При фиксировании Н : П = 2,5 (рис. 4.16, а) максимум  $E_{d,max}$  обеспечивается полидисперсными минеральными наполнителями (новая особая точка  $M_9$  на гранулометрических диаграммах, отмеченная для мрамора), не соответствующими, однако, максимуму  $R_c$  (точка  $M_8$ , перенесенная с рис. 4.15, а); изолинии  $E_{d,max}$  показаны на несущем треугольнике. Если возможный прирост  $E_d$  за счет управления минералогией составляет около 20 %, то за счет гранулометрии наполнителя прирост достигает 32 % по показателю  $\kappa^{300} = E_{d,max}/E_d^{300}$ , который наиболее высок для клинкера. Оптимальной по  $E_d$  гранулометрии клинкерного наполнителя соответствует и меньшая удельная поверхность  $S\{E_{d,max}\}$  по сравнению с кварцем и карбонатом (рис. 4.16, б); оптимальная толщина межзеренных слоев полимера  $2\delta_p$  при этом составляет, мкм;

Для клинкера . . . . .	5
мрамора . . . . .	3,4
кварца . . . . .	3

Связующие на портландцементе показывают и наибольшую чувствительность упругих свойств структуры к изменению дисперсности наполнителя. Характеристика чувствительности  $\bar{\nabla}E_d$  (расчет аналогично (4.9)), в зависимости от минералогии, отражена на рис. 4.16, в. Очевидно, поверхностные явления в формировании упругих свойств полиэфирного композита проявляются наиболее сильно для портландцементного наполнителя (возможная причина этого — образование химических связей [80]). Изменение  $E_d$  под влиянием гранулометрии наполнителя при увеличении Н : П от 1,5 до 2,5 показано на рис. 4.16, г: динамический модуль упругости растет (аналогично результатам [93, 114]) по мере увеличения в объеме композита доли высокомодуль-

ного наполнителя, утоньшения в среднем полимерных прослоек и увеличения доли структурированных межфазных слоев в матрице.

Величина  $E_d$  имеет ограниченное значение для оценки внутренних напряжений в композиции, поскольку при реальных уровнях нагружения взаимосвязь между ними и деформациями нелинейна и меняется в зависимости от длительности действия нагрузки. Результаты определения динамического модуля упругости акустическими методами характеризуют некоторые стороны процесса структурообразования [93, 114], однако, по-видимому, основное их назначение — служить основой экспресс-контроля качества полимерных КМ и в период изготовления, и в период эксплуатации.

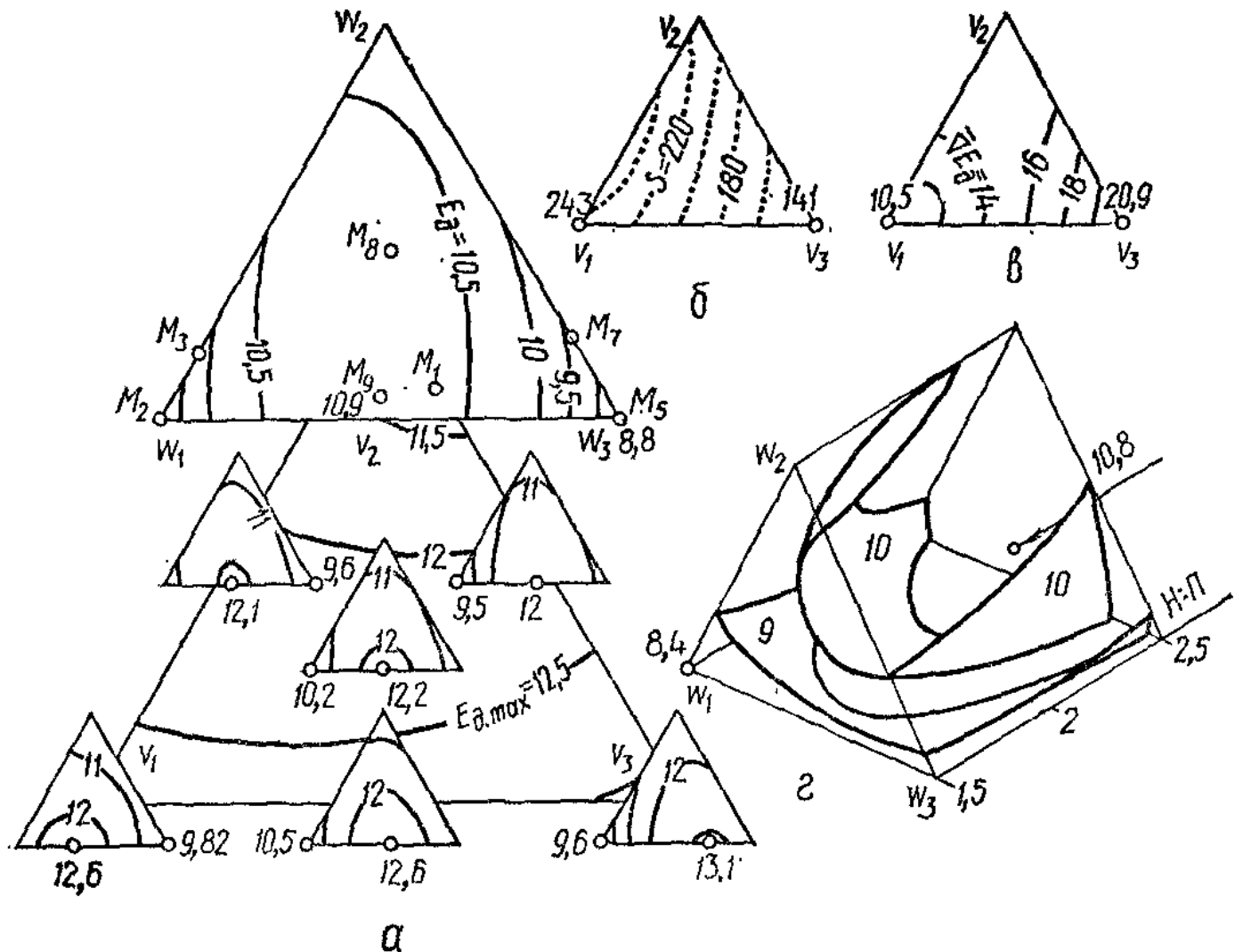


Рис. 4.16. Диаграмма «гранулометрия — динамический модуль упругости  $E_d$ » и изолинии  $E_{d,max}$  на треугольнике «минералогия» (а): минералогические диаграммы для обобщающих показателей  $S \{E_{d,max}\}$  (б) и  $\bar{E}_d$  (в); изоповерхности  $E_d$  для мраморного наполнителя внутри призмы «гранулометрия,  $H:\Pi$ » (г)



Наиболее широко используется физически обусловленная значительным подобием механизмов явлений оценка механических свойств композита, в частности, предела прочности на сжатие, по значению динамического модуля упругости [93, 114, 116—№ 3]. В то же время, взаимосвязь между этими величинами на практике далеко не однозначна — в данном информационном массиве из 54 опытов (см. § 4.1) оценка коэффициента корреляции  $r \{R_c E_d\} = 0,61$ . Этот уровень свидетельствует о достаточной достоверности линейной связи (риск ошибки менее 1 %), но при этом остаточная дисперсия  $s^2 \{\hat{R}_c\}$  столь велика, что делает сомнительным инженерную полезность тарировочной зависимости  $\hat{R} = a_0 + a_1 E_d$ .

Для выявления возможных источников (из числа изученных рецептурно-технологических факторов) неоднозначности связи  $R_c = \psi(E_d)$  применили новую методику [41], реализуемую в ходе *вычислительного эксперимента* на ЭВМ. Она сводится к построению линий корреляционных связей не по всему массиву информации (как эмпирической с  $N = 54$ , так и расчетной — дискретной за счет квантования факторного пространства на любой малый шаг для увеличения объема массива  $N \rightarrow \infty$ ), а при *целенаправленном изменении лишь одного рецептурно-технологического фактора*. Так например, двигаясь вдоль нижней стороны гранулометрического треугольника (при фиксированных минералогии — «мрамор» и  $H : \Pi = 2,5$  — см. увеличенный треугольник на рис. 4.15, а и рис. 4.16, а) от мелких зерен ( $\omega_1 = 1$ ) к крупным ( $\omega_3 = 1$ ) и одновременно фиксируя значения  $R_c$  и  $E_d$ , можно получить в этих координатах тарировочную кривую  $R_c = \varphi(E_d)$  (рис. 4.17, а), которая оказывается двухветвевой. При  $E_d = 10$  ГПа, например, композит на более мелком наполнителе имеет предел прочности на сжатие ( $R_c = 126$  МПа) меньше, чем на смешанном наполнителе, близком к оптимальному ( $R_c = 135$  МПа). Еще более широко открыты ветви кривой для композита на клинкерном наполнителе ( $E_d = 12,5$  ГПа соответствуют точки  $R_c = 147$  МПа и  $R_c = 165$  МПа). Это не единственный вариант анализа. На рис. 4.17, а проведены две кривые, соответствующие передвижению вдоль ребер призмы «гранулометрия, степень наполнения», т. е. изменению содержания матричного вещества при фиксированной гранулометрии ( $\omega_i = \text{const}$ ). Эти результаты указывают на целесообразность учета при построении тарировочных кривых для экспресс-анализа механических свойств некоторых структурных характеристик композита.

Нетривиальные результаты аналогичного вычислительного эксперимента по анализу взаимосвязи между модулем упругости

затвердевшего композита  $E_d$  и эффективной вязкостью  $\eta_1$  соответствующей по составу неньютоновской жидкости представлены на рис. 4.17, б. Исходя из теоретических соображений [39, 55], основанных на формуле Эйнштейна для наполненных полимеров, можно было предположить наличие достаточно сильной положительной корреляции между этими величинами. Однако по 54 экспериментальным данным (см. § 4.1) оценка коэффициента корреляции составила всего  $r\{\eta_1 E_d\} = 0,31$  (риск  $1 < \alpha \leq \leq 10\%$ ). Из рис. 4.17, б следует, что ожидаемая прямая пропорциональность изменения  $E_d$  и  $\eta_1$  наблюдается только тогда, когда при фиксированных минералогии и granulometрии наполнителя увеличивается степень наполнения  $H : П$ . Изменение минералогии приводит к образованию семейства кривых, охватывающего довольно широкий коридор  $\eta_1$  (при  $E_d = 10,5$  ГПа, например,  $\ln \eta_1 = 3,4 \dots 4,8$ , что соответствует изменению эффективной вязкости на 400 %). Замена при прочих равных условиях granulometрии наполнителя вообще приводит к обратной пропорциональности между  $E_d$  и  $\eta_1$ , что свидетельствует о достаточно разных механизмах формирования упруго-вязких свойств композита при управлении или степенью наполнения, или зерновым составом наполнителя.

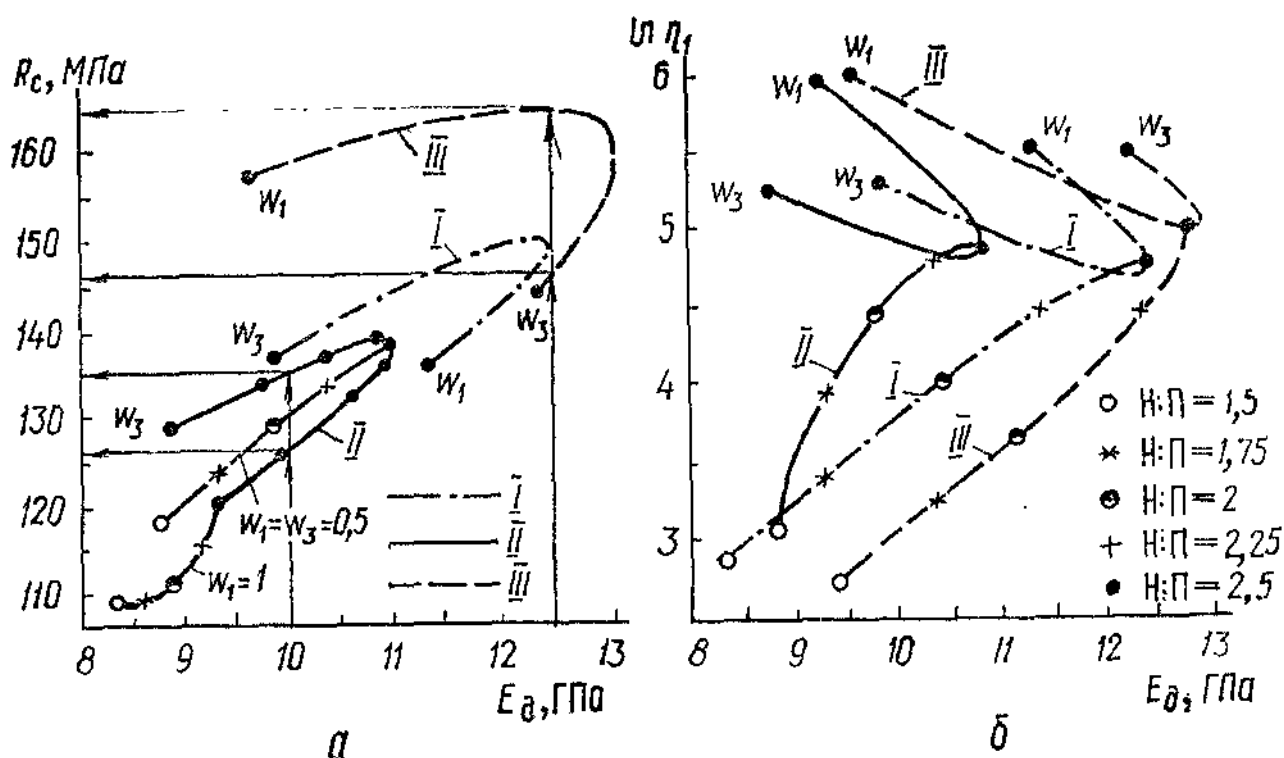


Рис. 4.17. Взаимосвязи  $E_d$  с пределом прочности  $R_c$  (а), а также с показателем вязкости  $\ln \eta_1$  (б):

*I* — кварц; *II* — мрамор; *III* — клинкер

#### 4.4. ОБЕСПЕЧЕНИЕ КОМПЛЕКСА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ И ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ СВОЙСТВ СВЯЗУЮЩИХ

Комплекс моделей технологических и эксплуатационных свойств связующих позволяет решать инженерные и технико-экономические задачи проектирования и производства композиционных материалов. Наиболее общими являются две задачи по выбору рецептуры связующих (для напорных труб, защитно-конструкционных покрытий, полимербетонов разного назначения): *обеспечение заданного комплекса свойств связующего при постоянной полимероемкости* ( $H : П = \text{const}$ ); дополнение первой задачи требованием о *минимизации расхода смолы* ( $H : П \rightarrow \rightarrow \text{max}$ ) \*.

На рис. 4.18 показано решение первой задачи, в частности при  $H : П = 2,25$  и нормативных требованиях к связующему для напорных труб [44]:

$$30 \leq \eta_1 \leq 90 \text{ Па} \cdot \text{с}; \quad (4.15) \qquad 10 \leq \tau_0 \leq 60 \text{ Па}; \quad (4.16)$$

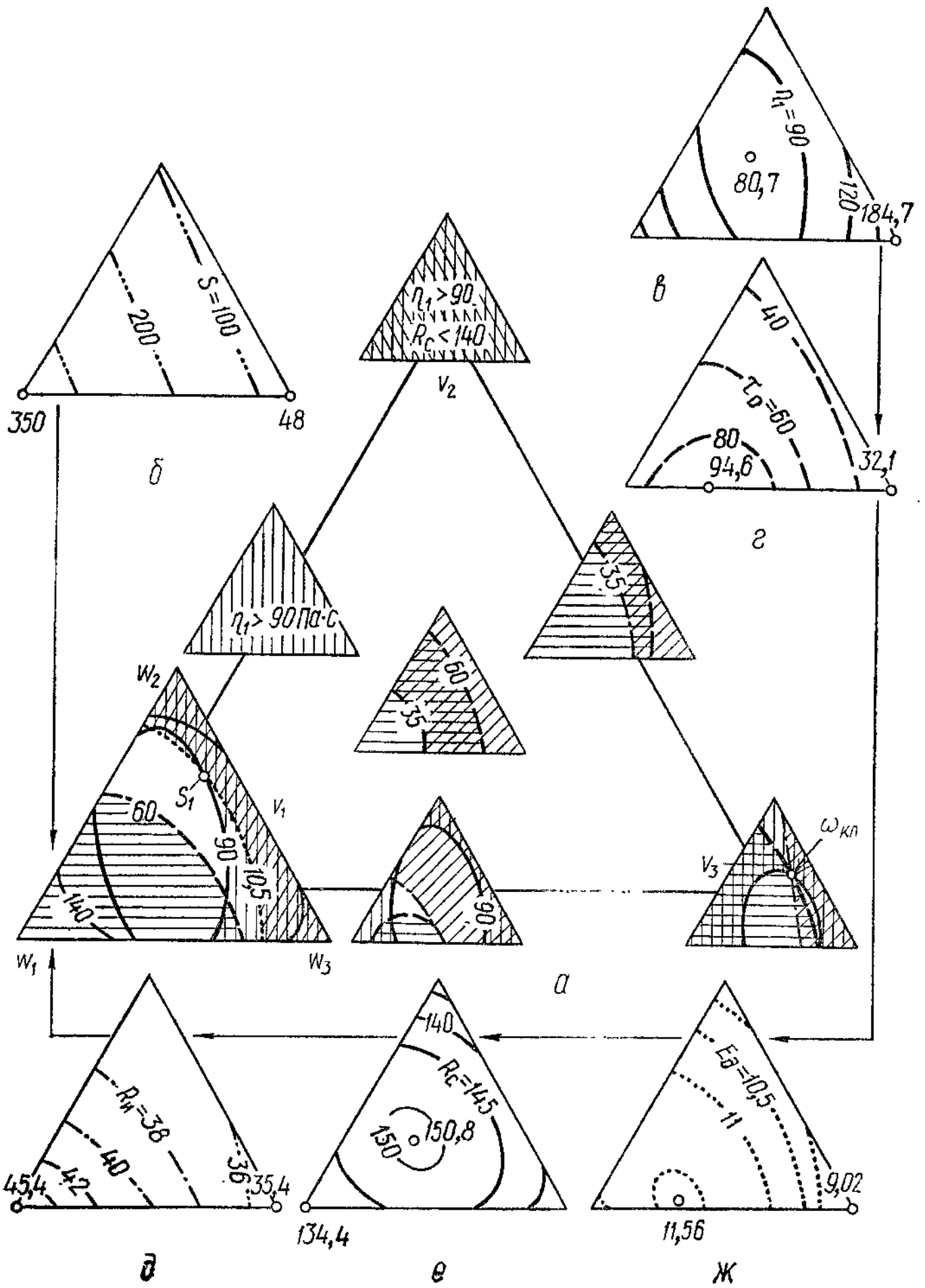
$$R_H \geq 35 \text{ МПа}; \quad R_C \geq 140 \text{ МПа}; \quad E_D \geq 10,5 \text{ ГПа}. \quad (4.17) \dots (4.19)$$

Верхние пределы требований (4.15), (4.16) к реологическим характеристикам обусловлены затратами энергии на перемешивание смеси, а нижние — возможностями ее однородного распределения и сокращением потерь на стекание при формировании изделий. Для кварцевого наполнителя на рис. 4.18, б...ж приведены диаграммы «гранулометрия — регламентируемое свойство связующего». Инженерные решения лежат в области, образуемой *пересечением полей*, в которых *выполняются ограничения* по отдельным свойствам (4.15) ... (4.19). Область решений для кварца (на увеличенном треугольнике  $v_1 = 1$ ) ограничена в зонах: мелких зерен — предельным напряжением сдвига  $\tau_0 \leq 60 \text{ Па}$ , крупных зерен — эффективной вязкостью  $\eta_1 \leq 90 \text{ Па} \cdot \text{с}$  и средних зерен — модулем упругости  $E_D \geq 10,5 \text{ ГПа}$ . Точка  $S_1$  \*\* соответствует минимальной в этой области тонкости помола наполнителя  $105 \text{ м}^2/\text{кг}$ .

При переходе к другим минералогическим составам относительная *оценка площади* допустимой области  $P_F \{ \eta, \tau_0, R_H, R_C, E_D \} = P_F \{ Y_j \}$  (см. § 1.3, задача № 10) изменяется: наибольшая  $P_F \{ Y_j \} = 13 \%$  для кварца, меньше — для смеси кварца с

\* Решения, получаемые во второй задаче, по сути — перемещение решений первой задачи вдоль оси наполнения  $H : П$ .

\*\* Здесь и далее под точкой понимаем некоторую зону, ограниченную эллипсоидом рассеяния, оси которого пропорциональны показателям точности моделирования.



клинкером ( $P_F \{Y_j\} = 6 \%$ ), и лишь точка  $\omega_{кл}$  для клинкера ( $P_F \{Y_j\} \rightarrow 0$ ). Для остальных рассмотренных смесей минералов решения не могут быть получены из-за невозможности обеспечить одно (кварц + мрамор) при несколько (мрамор) требований (4.15) ... (4.19) или из-за их противоречивости (смеси мрамора с клинкером и тройная). Причем, для различных минералов определяющими являются ограничения по разным показателям ( $\eta_1, \tau_0, E_d$  — для кварца;  $\tau_0, R_H$  — для смесей мрамора с клинкером).

При  $H : \Pi \neq \text{const}$  нормативные уровни показателей качества для композиций с заданным минеральным наполнителем отображаются изоповерхностями внутри призмы «зерновой состав, наполнение». На рис. 4.19, а, б показаны «коридорные» ограничения на вязкость смеси (4.15) и ограничивающая поверхность по прочности на сжатие (4.18) для связующего с кварцевым наполнителем ( $P_V \{\eta\} = 64 \%$  и  $P_V \{R_c\} = 85 \%$ ). Совокупность нормативных требований (4.15) и (4.18) будет выполнена в пределах области (рис. 4.19, в), образуемой *пересечением* ограничивающих поверхностей внутри призмы ( $P_V \{\eta, R_c\} = 52 \%$ ). Максимальный уровень наполнения кварцем  $H : \Pi = 2,3$  достигается в точках  $\alpha$  и  $\beta$ .

С увеличением числа нормативных ограничений область возможных рецептурных решений может сократиться или исчезнуть ( $P_V \times \{Y_j\} = 0$ ). В последнем случае следует либо *искать новые* рецептурно-технологические факторы, расширяющие многомерную область действия, либо *пересмотреть комплекс* нормативных требований, ослабив ограничения.

Область зерновых составов, которые обеспечат выполнение всего комплекса требований (4.15) ... (4.19) к полиэфирному связующему на кварце (рис. 4.19, г), образована пересечением изоповерхностей для всех нормируемых свойств ( $P_V \{Y_j\} = 28 \%$ ). Максимальное наполнение ограничено реологическими характеристиками (см. рис. 4.19, г — набор участков поверхностей, выделенных точками 6...13), минимальное — механическими (кусочно-гладкая поверхность, обозначенная на рис. 4.19, г точка-

Рис. 4.18. Определение зерновых составов, обеспечивающих при  $H : \Pi = 2,5$  нормативные требования к связующему по пяти свойствам (а); для кварцевого наполнителя диаграммы «гранулометрия — S» (б) и «гранулометрия — регламентируемое свойство»:

$\eta_1$ , Па · с (в),  $\tau_0$ , Па (г),  $R_H$ , МПа (д),  $R_c$ , МПа (е) и  $E_d$ , ГПа (ж)

ми 1...7, 11, 12). Участки {6, 7, 8, 9} и {10, 11, 13} отсечены от поверхности  $\eta_1 = 90$  (см. рис. 4.19, а). Участок {8, 9, 10, 13} — часть поверхности  $\tau_0 = 60$ . Поверхность  $R_c = 140$  (см. рис. 4.19, б) ограничивает сравнительно небольшую зону {4, 5, 6, 7}. Модуль упругости, уменьшающийся с увеличением содержания полимера (см. § 4.3), определяет основное ограничение {1, 4, 5, 12, 11...} со стороны малых наполнений. Однако на участке {1, 2, 3} ограничением является прочность  $R_H$ .

Оптимальный состав в точке 10 ( $\omega_1 = 0,32$ ;  $\omega_2 = 0,68$ ;  $\omega_3 = 0$ ;  $S = 180 \text{ м}^2/\text{кг}$ ; совпадает с  $\alpha$  на рис. 4.19, в) обеспечивает

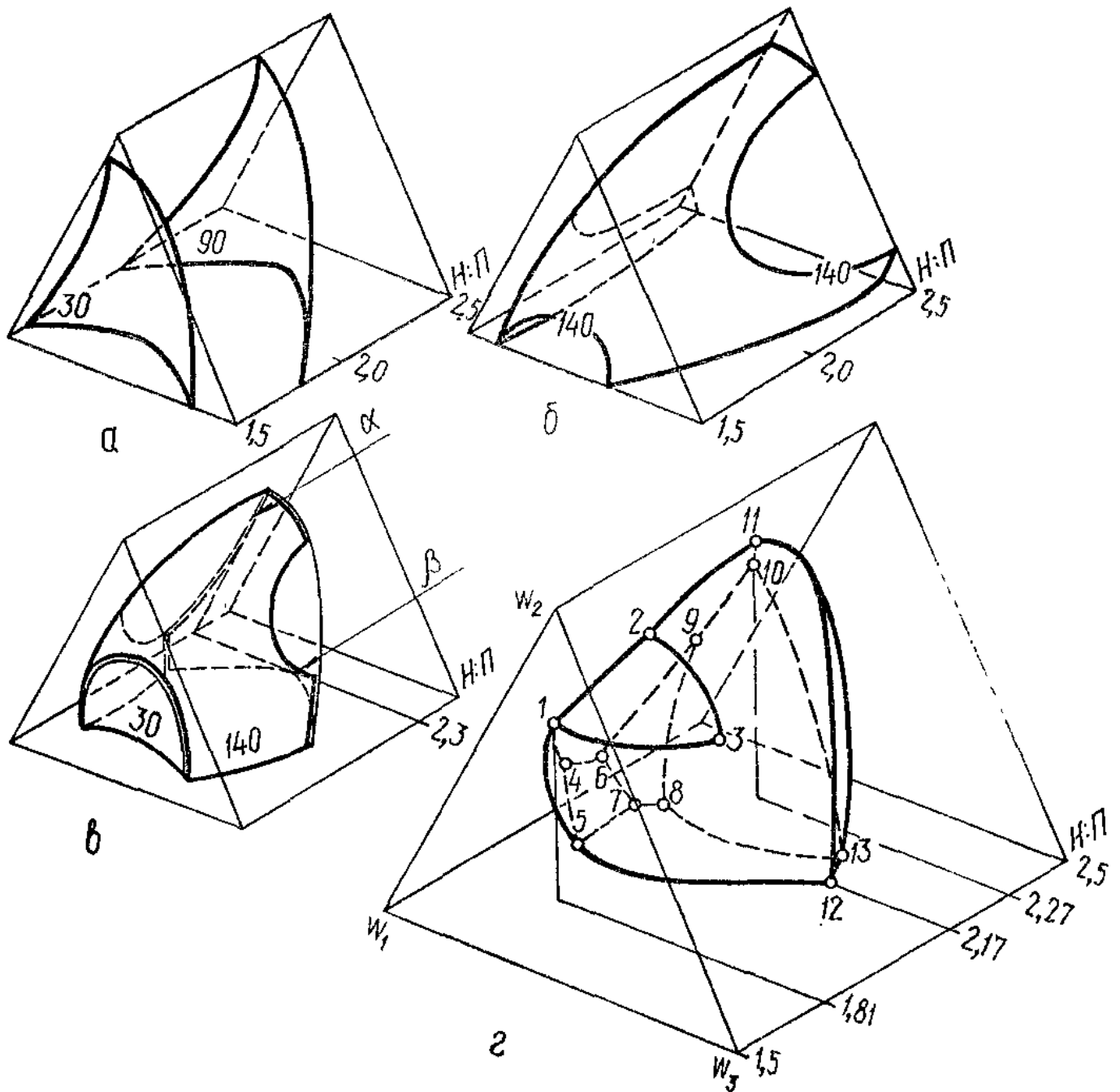


Рис. 4.19. Изоповерхности эффективной вязкости  $\eta_1$  (а) и прочности  $R_c$  (б); области составов, отвечающих требованиям по  $\eta_1$  и по  $R_c$  (в), а также по комплексу ( $\eta_1, \tau_0, R_H, R_c, E_d$ ) требований (г) для связующих на кварцевом наполнителе

$H : П = 2,27$  и расход полимера  $П = 306$  кг на 1 т связующего. При минимально допустимом наполнении ( $H : П = 1,81$ ; точка 1;  $\omega_1 = 0,60$ ;  $\omega_2 = 0,40$ ;  $\omega_3 = 0$ ;  $S = 250$  м<sup>2</sup>/кг) расходуется 356 кг/т. Следовательно, возможности экономии полимера за счет оптимизации состава кварцевого наполнителя (при одновременном улучшении механических свойств композиции) оцениваются 50 кг/т.

Таким образом, модели  $M_I M_{II} TQ$ , построенные для технологических и эксплуатационных свойств связующих, используют для определения множества составов наполнителя, обеспечивающих выполнение нормативных требований к материалу. Из этого множества выбирают составы, в которых минимален расход полимера.

Оптимальный состав, в частности, в точке 10, может быть определен как решение задачи нелинейного программирования (см. § 2.3), в которой критерием оптимальности является расход смолы ( $\varphi(v, w, x) = -x$ ), а система ограничений подобна неравенствам (4.15) ... (4.19). Описанная в гл. 2 процедура оптимизации позволяет найти «глобальный оптимум» — и минералогический, и ганулометрический составы наполнителя, при которых выполняются условия вида (4.15) ... (4.19), а расход смолы минимален.

Однако на практике полезно располагать набором альтернативных решений, близких к оптимальному. Такой набор определяется при «послойном исследовании призмы «зерновой состав, наполнение» от  $(H : П)_{\max}$  с шагом  $\Delta(H : П)$ . В каждом  $u$ -м сечении призмы условия типа (4.15) ... (4.19) определяют решение задачи 1 (см. рис. 4.18, а). При изменении  $H : П$  происходит деформация области решений в пределах соответствующего треугольника. Их непрерывный набор выделяет объемную область допустимых решений (например, на рис. 4.19, а). Решение задачи 2 будет получено в том первом  $u$ -м сечении (слое), в котором  $P_F \{Y_j\} > 0$ . Условиям (4.15) ... (4.19) удовлетворяет единственная точка 10 на рис. 4.19, а при максимально возможном наполнении кварцем  $H : П = 2,27$ . При близком к оптимальному уровню  $H : П = 2,25$  этим условиям уже соответствует область на рис. 4.18, а ( $P_F \{Y_j\} = 13\%$ ).

При реализации на ЭВМ метода послойного обследования факторной области на дисплей или печатающее устройство может быть выведена (в зависимости от целей, технологии и организации работ) информация либо только об области допустимых решений в каждом сечении, либо о сечении в целом. В обоих случаях по моделям для каждого из показателей определяется его значение в узлах сетки (рис. 4.20, а, 45 узлов, шаг по  $\omega_i = 0,125$ ) в

поле соответствующего слоя. Формируется треугольная таблица [44], в каждой ячейке которой (рис. 4.20, б) указываются зерновой (или минеральный) состав наполнителя, а также рассчитанные на ЭВМ соответствующие данному составу показатели качества композита. Рядом с треугольной таблицей целесообразно указывать пределы изменения свойств КМ в данном сечении призмы (рис. 4.20, в), что ускоряет анализ информации и принятие решений. Из распечаток таких таблиц можно комплектовать сборник для безмашинного табличного подбора состава связующих, как это сделано в методических рекомендациях [44]. На их основе по изложенной выше методике определены составы связующих для ремонтно-восстановительных работ, а также изготовления труб, электролизных ванн и других конструкций из полимербетонов. Выбранные составы, удовлетворяя требованиям технологии производства и эксплуатации изделий, обеспечивают экономию олигомеров (Виналкид, ПН-15) на 6...14 % (25...40 кг на 1 т связующего).

Показанные в данной главе пути анализа и оптимизации КМ по моделям «смеси, технология — свойства», а также полученные

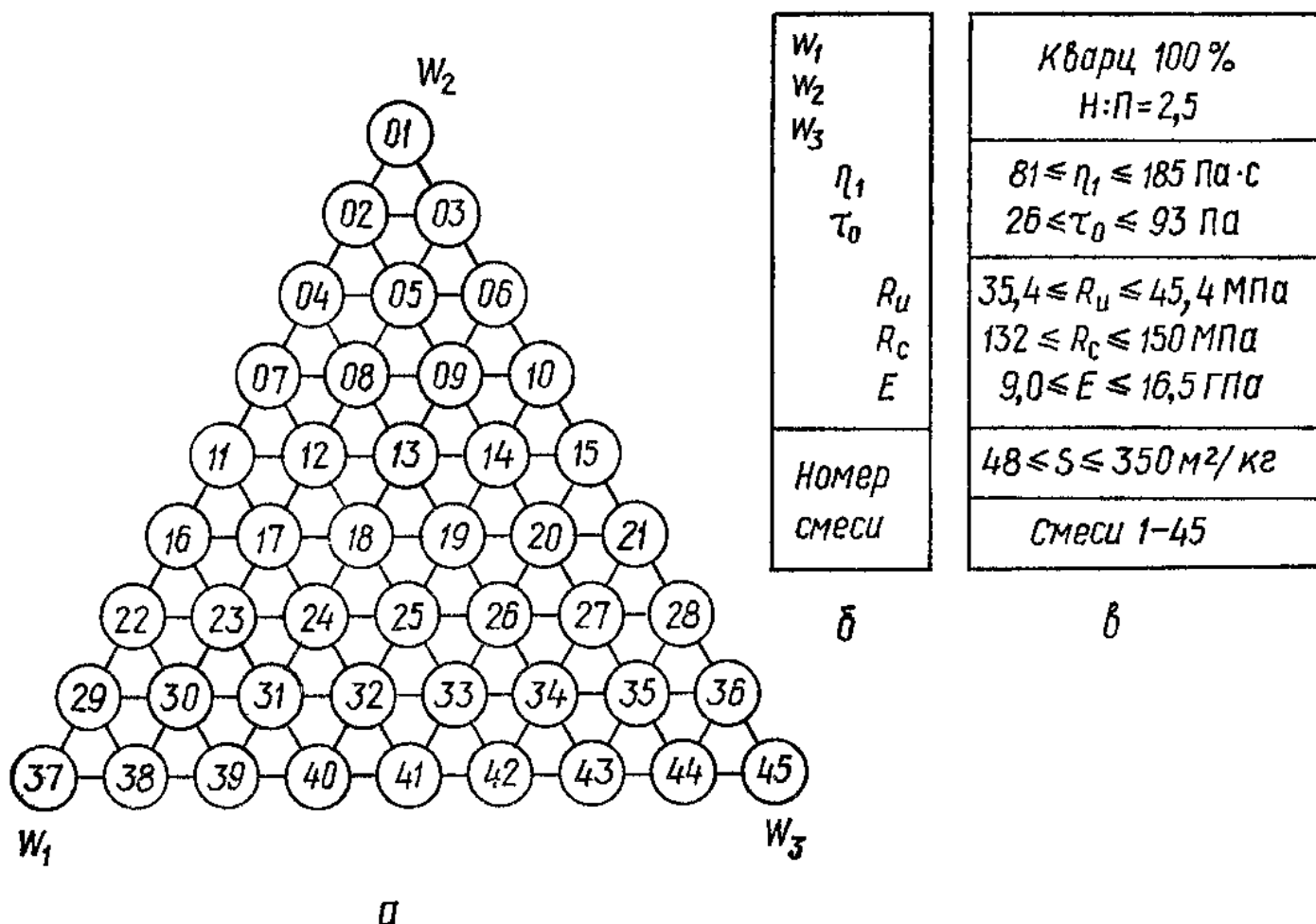


Рис. 4.20. Узлы диаграммы «состав — свойство» (а), расшифровка строк (б) в 45 ячейках и пределы изменения свойств (в) в фиксированном сечении призмы «гранулометрия, Н : П» для заданного наполнителя



на их основе научные, методические и технико-экономические результаты позволяют рекомендовать модели этого класса для самых разных задач материаловедения и технологии. *Эффективность* таких моделей *должна возрасти при переходе к наполненным системам* еще более сложной физико-химической структуры (смеси полимеров и модификаторов; аппретированные наполнители; волокна разной природы, диаметров и длины; смеси волокон и порошковых наполнителей), а также при переходе к *композитам специального назначения* (графитопласты, порошковая металлургия и металлокомпозиты, тугоплавкие силикатные материалы с огнеупорными волокнами), т. е. к материалам, которые должны применяться в расширяющихся объемах при строительстве объектов химической, металлургической и других отраслей промышленности.

---

## Глава 5

---

### НОВЫЕ ВИДЫ МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИХ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ЗАДАЧ, РЕШАЕМЫХ НА ОСНОВЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

---

#### 5.1. ПРОБЛЕМЫ ОЦЕНКИ, МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОПТИМИЗАЦИИ ВЕРОЯТНОСТНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ И ГАРАНТИРОВАННЫХ УРОВНЕЙ КАЧЕСТВА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Проблема обеспечения *гарантированного уровня качества* композиционных материалов, особенно в условиях хозрасчета, требует решения не только технологических, материаловедческих организационно-технических и других сложных инженерных задач, но и углубленной разработки ряда новых методических проблем, связанных (см. § 1.2) с необходимостью *оценки и учета риска* ошибочных инженерных решений, отказов технологии, появления брака.

Жесткая *детерминированная связь* через функцию распределения  $f(Y)$  (1.6) между *риском отказа* системы  $\alpha$  и *нормативным предельным значением* показателя качества ее функционирования  $Y_\alpha$ , рассмотренная в § 1.2, определяет ряд следствий, ставящих

сложные инженерные задачи. Так, в частности, для определенного множества состояний системы, обладающего функцией плотности распределения  $f(Y)$ , можно задать или только предельное состояние  $Y_\alpha$  (что определит  $\alpha$ ), или только риск  $\alpha$  (что определит  $Y_\alpha$ ). Назначение численного уровня любой из этих величин оправдывается технико-экономическими и социальными потерями от отказа конкретного объекта в конкретных условиях [1, 5, 16, 19].

Элементарное решение этого первого проблемного вопроса затруднено, потому что истинная функция  $f(Y)$  неизвестна. В лучшем случае априори известен ее вид, исходя из теоретических соображений о механизме случайных процессов (в некоторых задачах физики, кибернетики, экономики [1]), но числовые значения параметров функций (например, математического ожидания  $\mu$  и дисперсии  $\sigma^2$  при нормальном распределении  $Y$ ) оценивают по экспериментальным данным. Как правило, функцию  $f(Y)$  можно лишь аппроксимировать одной из моделей  $f_a(Y)$  закона распределения вероятностей (МРВ), в которой все числовые характеристики — суть эмпирические случайные оценки  $\theta^*$  по результатам  $n$  экспериментов над образцами, отображающими множество состояний материала.

Некоторое упрощение гипотез и вычислительных процедур (при ухудшении эффективности оценок и точности прогнозов) достигается за счет использования методов непараметрической статистики [1], допускающих оценку  $\alpha$  или  $Y_\alpha$  как  $\theta^*$  без аналитического определения  $f^*(Y)$ , например, по ранжированному ряду из  $n$  опытных данных. При любых вычислительных процедурах с МРВ вероятностные критерии качества материалов будут эффективны, если примененные для их построения оценки  $\theta^*$  не только обладают хорошими статистическими свойствами (несмещенность [1, 13, 16]), но и малой дисперсией  $s^2\{\theta^*\}$ , которая, в частности, в первом приближении обратно пропорциональна  $\sqrt{n}$  (1.10). Это требует «параллельного» испытания не менее 50 образцов при каждом фиксированном по составу и уровням наборе факторов (последнее существенно тормозит развитие инженерных работ по обеспечению гарантированного качества композиционных материалов).

Второй проблемный вопрос связан с необходимостью одновременного изменения и риска  $\alpha$  (уменьшение отказа, брака), и предельного значения  $Y_\alpha$  (повышение норматива снижает материалоемкость конструкции [10, 38, 63]). Этого можно достигнуть, только целенаправленно трансформируя кривую распределения  $f(Y)$ , т. е. задавая объекту (структуре материала, его технологии) новое множество состояний за счет управления влияющими на него факторами  $X$  [16]: рецептурно-технологическими (РТФ)

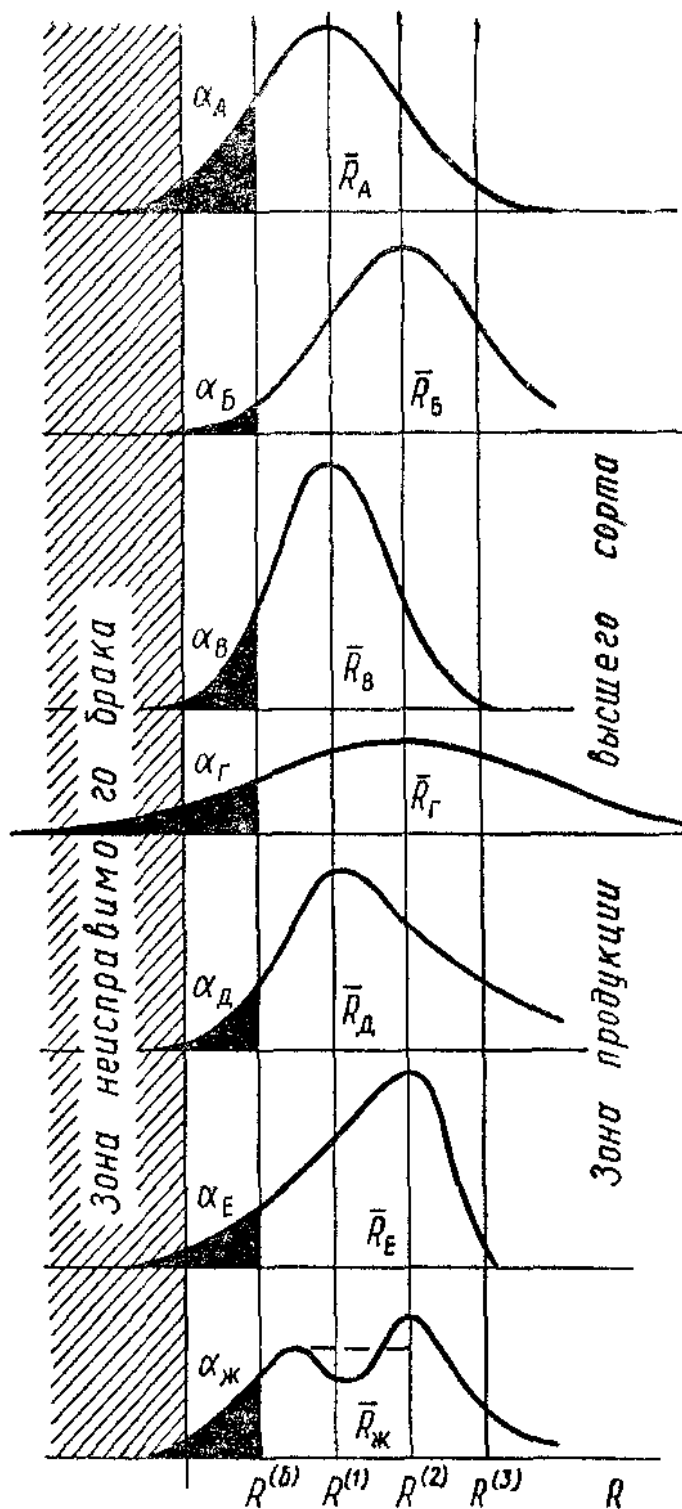
Рис. 5.1. Возможные изменения кривых распределения показателя качества  $R$  для одного материала, полученного по семи различным технологиям

и (или) конструктивно-эксплуатационными (КЭФ).

Функция  $f(Y)$ , являясь отражением внутреннего существа объекта, зависит от уровня воздействующих на него факторов. Для такого параметра распределения как среднее  $\mu$  (или ее оценки  $\bar{Y}$ ) это очевидно, а для характеристик рассеяния и формы распределения, риска отказа, квантилей малых вероятностей — данное положение отнюдь не банальность. Более того, восприятие в инженерных исследованиях нормального закона распределения как универсального по природе (а не как наиболее удобного в теоретических построениях и практических расчетах — см. на схеме 1.2 «риск от нормализации случайных величин») маскирует существо второго проблемного вопроса.

На рис. 5.1 показано семь кривых распределения для изменяющегося по нескольким классам  $R^{(i)}$  показателя качества композиционного материала при формировании его под воздействием различных РТФ и КЭФ, образующих семь условных технологий  $A, \dots, Ж$  [16, 19].

По технологии  $A$  распределение описывается нормальным законом. Среднее совпадает с границей класса  $R^{(1)}$ . Около 16 % продукция попадает в зону брака ( $R < R^{(6)}$ ), причем, неисправный брак составляет 2,3 %.



Технология *Б* улучшена. Без изменения формы кривой средней  $R_B$  за счет рецептурно-технологических потенциалов (см. рис. 1.1, *г*)  $\Delta X$  увеличено до класса  $R^{(2)}$ . Брак уменьшен до 2 %, в том числе неисправимый — до 0,1. Доля продукции высших классов  $R > R^{(3)}$  составила 16 %.

Технология *В* отличается тем, что потенциалы  $\Delta X$  использованы не на увеличение среднего по сравнению с  $\bar{R}_A$ , а на уменьшение рассеяния свойств (т. е. повышение однородности продукции). За счет сокращения среднеквадратического отклонения на 25 % доля брака снижена по сравнению с технологией *А* в 3,5 раза и неисправимый брак стал менее 0,1 %.

Технология *Г* неудачна. Несмотря на затраты ресурсов для повышения среднего до класса  $R^{(2)}$ , показатели качества продукции «расползлись» и, если брак остался на уровне 16 %, то неисправимый брак составил уже 8,1 %. Правда, увеличилась и доля продукции высшего качества до уровня технологии *Б*.

Технология *Д* дает кривую с положительной асимметрией, что вызывает снижение всех видов брака. Исследования в ОИСИ показали, что такая ситуация характерна для ранних стадий развития прогрессирующих технологий, когда случайные возмущения как бы «раскрывают» технологу неиспользуемые возможности природы.

Кривая с отрицательной асимметрией возникает в том случае, когда технология *Е* находится на грани возможностей, т. е. в ней исчерпаны все природные потенциалы сырья, процессов. Случайные возмущения, в основном, ведут к сбоям в технологии и снижению  $R$ . Такая технология, хотя и имеет право на существование, но не прогрессивна.

В кривой распределения  $R$  для технологии *Ж* результируются, как правило, несколько достаточно сильных процессов, воздействие которых на объект неоднородно за время сбора информации (пульсация с несовпадением фаз; развитие структурирующих и деструкционных явлений), что приводит к плосковершинности и полимодальности кривой.

Трансформация реальных кривых  $f(Y)$  может быть и в ограниченном факторном пространстве столь значительной [16, 19, 45], что даже утверждение о симметрии распределения показателей качества материала оказывается неправдоподобным ни статистически, ни по механизму явления (что самое главное!). Трансформация  $f(Y)$  наблюдается не только под действием РФФ при структурообразовании материала, но и под действием КЭФ при деструкции [16, 75]. Не вызывает сомнения, что сложность по существу и неизученность рассматриваемых явлений обуславливают применение только экспериментально-статистических

моделей (ЭСМ) для описания влияния РТФ и КЭФ на оценки параметров  $\theta^* \{f_\alpha(Y)\}$  МРВ.

*Взаимосвязи между моделями МРВ и ЭСМ* требуют специального анализа хотя бы по трем причинам. Во-первых, при их построении исходная база едина (массив экспериментальных данных), а инженерные цели различны; во-вторых, достоверность ЭСМ может быть оценена только на основе гипотез и количественной информации, получаемых при анализе МРВ; в-третьих, вероятностные оценки, генерируемые при инженерном анализе МРВ, целенаправленно могут изменяться только за счет управления факторами РТФ и КЭФ по моделям ЭСМ. Блок-схема взаимосвязей между моделями МРВ и ЭСМ показана на схеме 5.1.

*Циклическая структура «ОКМ-1-МРВ-2-ОКМ»* традиционна при решении задач, связанных с оценкой по модели  $f_\alpha(Y)$  (или по ее числовым характеристикам  $\bar{Y}$ ,  $s^2\{Y\}$ , ...,  $Y_\alpha$ ,  $\alpha$ , ...,  $\theta^*$ ) нормативных границ показателей качества материалов (как правило, механических свойств [7, 10, 63], причем, обычно лишь пределов прочности). Однако нередко она используется при анализе распределения структурных элементов  $S_i$  объекта (размеры частиц и пор, число дефектов) [37, 54, 72] в материаловедении и при анализе распределения колебаний факторов  $X_i$  в задачах экспресс-контроля и управления [16, 19, 38].

*Циклическая структура «ОКМ-1-3-ЭСМ-4-ОКМ»* соответствует построению многофакторной модели (как правило, с использованием алгоритмизированного планирования эксперимента) без доказательства ее применимости для анализа и оптимизации объекта. Некорректность подхода исчезает при включении в цикл параллельно цепей «1-3-ЭСМ» и «1-МРВ-5-6-7-ЭСМ», обеспечивающих последовательный регрессионный анализ (§ 2.5) и проверку других разумных статистических гипотез о параметрах модели  $\theta$ , ее адекватности. Элемент 5 — информация об ошибках эксперимента и степени применимости к выходу модели закона нормального распределения  $f_N\{Y\}$  — обуславливает правдоподобие результатов статистического анализа ЭСМ (см. гл. 1.3).

Объем и достоверность инженерной информации, получаемой по ЭСМ, существенно возрастают, если вместо фиксированного риска ошибки первого рода  $\alpha$  в цепь «6...ЭСМ» включить элемент 8 [16, 19]. Такой принципиально новый подход позволяет (см. § 5.2) по системе из однородных моделей с увеличивающимся количеством эффектов строить комплекс выводов, начиная от самых простых, но достоверных ( $\alpha \leq 0,001$ ), к более сложным, но недостаточно правдоподобным ( $\alpha \geq 0,5$ ).

Важнейшая задача материаловедов и технологов (к сожалению, не всегда ставящаяся) — оценка доверительных границ значений

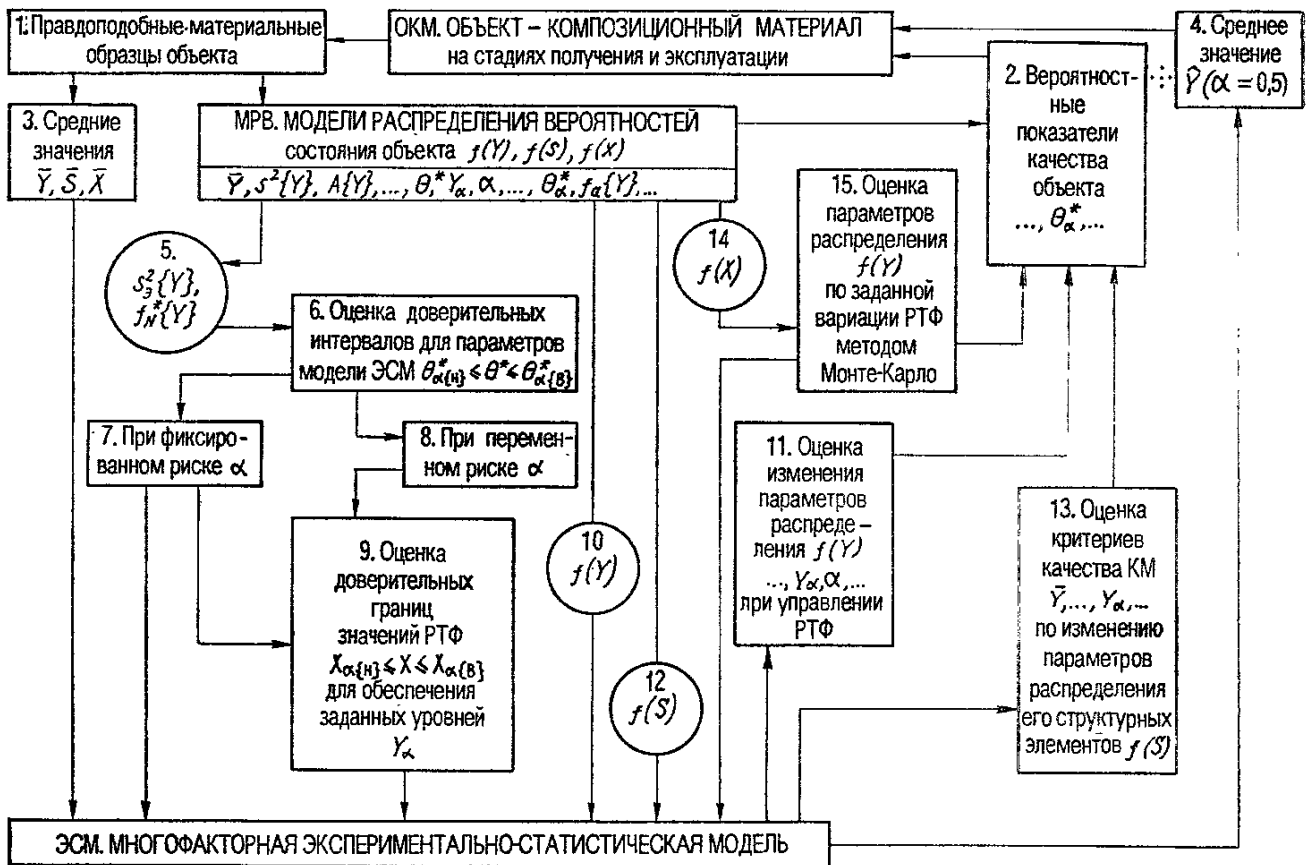


Схема 5.1. Блок-схема взаимосвязей между экспериментально-статистической моделью ЭСМ и моделями распределения вероятностей MRV

факторов  $(X_i \{Y_{тр}\})_н \leq X_i \leq (X_i \{Y_{тр}\})_в$ , изменявшихся в экспериментах детерминировано, для получения по ЭСМ заданного уровня  $Y_{тр} = \text{const}$  как случайной величины с дисперсией  $s^2 \{\hat{Y}\}$ . Это «обратная задача» регрессионного анализа (блок 9), характерная для второго типа оптимизации (см. рис. 1.2) — для задач ресурсосбережения.

На схеме 5.1 показаны три цепи во взаимосвязи между моделями МРЗ и ЭСМ, когда реализуются принципиально новые научные и практические возможности моделирования композиционных материалов.

В цепи МРВ-10-ЭСМ-11-12» решается вторая проблемная задача на основе экспериментальных данных 10 о распределении показателей качества при  $N$  разных режимах изготовления и эксплуатации КМ (см. рис. 5.1). Такие  $N$  опытов проводятся по оптимальным планам эксперимента, а поскольку в каждой точке плана испытывают  $n \geq 50$  образцов (см. § 5.3...5.5), то это позволяет рассчитывать числовые оценки МРВ ( $s^2, \dots, \theta^*$ ) и рассматривать их как выходы системы. Комплекс моделей  $\theta^* \{Y\} = \Phi(X_i)$  позволяет не только управлять вероятностными критериями качества типа  $Y_\alpha$  и  $\alpha$ , но и выявлять рецептурно-технологические или эксплуатационные условия формирования кривых  $f^*(Y)$ , исходя из заданного технико-экономического критерия оптимальности  $K = \psi(\theta)^*$  свойств композиционного материала или параметров его производства.

Во вторую новую цепь «МРВ-12-ЭСМ-13-2» вероятностные характеристики включены дважды: в качестве факторов вводятся параметры распределения структурных элементов объекта 12, а прогнозируют модели параметры распределения критериев качества КМ. Это целесообразно тогда, когда информация о  $\theta^*(S)$  собирается экспрессно и в автоматическом режиме. Так, в § 5.6 проанализирована задача, в которой с помощью комплекса «лазерный поромер — мини-ЭВМ» [72] для нескольких десятков видов ячеистых бетонов были получены сведения о линейной пористости, среднем диапазоне макропор, дисперсии, оценках вероятности  $p_u$  появления пор в заданном  $u$ -м размерном диапазоне, что позволило построить модель для оценки теплопроводности типа  $\lambda = \Phi(\theta^*(S))$ .

В третьей цепи «МРВ-14 + ЭСМ-15-2» многофакторная модель используется как база для проигрыша ситуации со случайной вариацией РТФ и КЭФ (блок «14», формируемый на основе анализа производственной информации) по методу Монте-Карло [71]. Он реализуется на ЭВМ, позволяя в некотором смысле заменить трудоемкий натурный эксперимент (в блоке «1» для МРВ  $n \geq 50$ )

имитационным моделированием и получить информацию, полезную хотя бы для первого приближения задач о гарантированных уровнях качества композиционных материалов. В § 5.5 этот подход проанализирован в задаче [79—1987] об устойчивости эффективной вязкости технологической смеси полиэфирного композита при колебании рецептуры и скорости деформаций смеси. Приведенные на схеме 5.1 элементы и связи не исчерпывают всего многообразия задач. Более того, данную блок-схему следует рассматривать как некоторый генератор идей, методов и реализаций моделирования риска отказов и других вероятностных показателей качества КМ.

## 5.2. ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ЭФФЕКТОВ В МОДЕЛЯХ ПРИ НАРАСТАЮЩЕЙ СТЕПЕНИ РИСКА

Перевод «жесткого» языка математики на относительно «мягкий» язык [51] материаловедения и технологии целесообразен при нарастающей степени риска  $\alpha$  *отвергнуть правильную гипотезу* (см. схему 5.1, цепь «МРЗ-5-6-8-9-ЭСМ»). Этот обоснованный в [16, 72] подход к интерпретации эффектов  $b_i, b_{ij}, b_{iii} \dots$  в экспериментально-статистических моделях заменяет исторически сложившуюся традицию принимать в технико-экономических расчетах постоянный пятипроцентный уровень риска и делает систему построения выводов по ЭСМ более полной и гибкой.

Значимость оценок коэффициентов по методу нарастающей степени риска проверяют *многократно*. Сначала принимают очень *низкий уровень риска*  $0,0001 \leq \alpha \leq 0,01$ , поэтому значимых *эффектов* в ЭСМ остается *мало*, но их интерпретация дает *практически достоверные выводы*. Далее наступает этап получения *инженерно допустимых выводов* при  $0,02 \leq \alpha \leq 0,2$ . Число значимых эффектов возрастает. Их интерпретация дополняет выводы первого этапа. И наконец на заключительном этапе при  $0,2 < \alpha \leq 0,5$  делают *равновозможные выводы*, полезные на стадии *поисковых работ*. Конкретные границы перехода от одной группы выводов к другой выбирает технолог в зависимости от сложности объекта и стадии его исследования. В расчетах используют *последовательный регрессионный анализ* (ПРА). Поскольку ЭСМ сосредотачивает информацию в эффектах  $b_{ij}$  ( $i \leq j$ ), то в таких терминах, связанных с ролью нормализованных переменных  $x_i$ , выводы достаточно просто синтезируются ЭВМ, работающей в диалоговом режиме.

При изучении [7] на физических моделях свойств ячеистых бетонов образцы имитировали разнообразные сочетания элементов  $Y_S$  поровой и межпоровой структур композита. Так, в серии «По-



ры» при постоянной средней пористости  $\Pi = 50\%$  изменялись по плану  $B_4$  четыре фактора:

$X_1 = (1,1 \pm 0,9)$  мм — *средний диаметр пор  $D$* , который обеспечивался гранулами пенополистирола заданного размера, полученными последовательным рассевом на специальных ситах;

$X_2 = (0,16 \pm 0,11)$  мм — *среднеквадратическое отклонение  $s\{D\}$  от среднего диаметра, как характеристика рассеяния размеров пор*, которая обеспечивалась смешиванием в заданном соотношении (в соответствии с моделируемой кривой распределения) различных фракций гранул пенополистирола;

$X_3 = (1,6 \pm 0,5)$  — *эллиптичность пор  $L/V$  (отношение большей оси к меньшей)*, регулируемая разной степенью сжатия свежесформованных образцов в формах для конформации пенополистирольных сфер;

$X_4 = (7,25 \pm 4,25)\%$  — *среднеквадратическое отклонение  $s\{\Pi\}$  от средней пористости  $\Pi$  по объему образца как характеристика однородности структуры*, регулируемое длительностью перемешивания цементного раствора с гранулами.

Нижние уровни всех факторов соответствовали лучшим структурам газобетона, изготовленного по комплексной вибрационной технологии, верхние — средним показателям, характерным для литьевой технологии. По результатам испытаний на изгиб 24 серий (по три образца в каждой, средняя ошибка  $\bar{s}_3\{\bar{R}\} = 43$  кПа) разных по структуре ячеистых бетонов была получена для прочности  $R$ , кПа, полная квадратичная модель

$$\begin{aligned}
 R = & 2117 - 60x_1 - 17x_1^2 + 15x_1x_2 + 5x_1x_3 + 13x_1x_4 - \\
 & - 8x_2 - 32x_2^2 + 6x_2x_3 + 15x_2x_4 - \\
 & - 46x_3 + 17x_3^2 + 22x_3x_4 - \\
 & - 237x_4 + 32x_4^2.
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

В табл. 5.1 все эффекты модели (5.1) *ранжированы* по значению *гауссовской точности  $h\{b\}$  (1.19)*. Поскольку постоянная среднеквадратическая ошибка известна, то можно рассчитать значение  $t_\alpha = h\{b\} : s_3$  и найти пределы соответствующего риска  $\alpha$ ; так как в ходе ПРА оценки  $b_0$  и  $b_{ii}$  (а также их гауссовская точность) могут изменяться, то в табл. 5.1 в скобках у соответствующих  $b$  указаны их дополнительные числовые значения. Там же приведены и графы связей между четырьмя факторами, изменяющийся в зависимости от уровня  $\alpha$ , анализ которого способствует более полной интерпретации ЭСМ (цикл вокруг точки имитирует значимый квадратичный эффект, а темная точка — линейный).

**Т а б л и ц а 5.1. Построение выводов по ЭСМ (5.1) при возрастающей степени риска  $\alpha$  ошибочно отклонить верную гипотезу**

Точность $h \{b\}$	Коэффициент $b$	Риск $\alpha, \%$	Граф связей
4424 (4707) 1008 254 195	$b_0 = 2117$ (2117) $b_1 = -237$ $b_1 = -60$ $b_3 = -46$	$\alpha < 0,1$	1 •    •  4    3

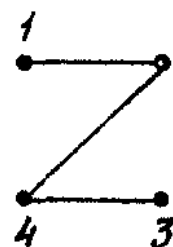
*Практически достоверные выводы о действии факторов в пределах изученных диапазонов  $|x_i| \leq 1$ :*

1. Выход (прочность ячеистого композита) линейно снижается при увеличении  $x_1$  (диаметра пор),  $x_3$  (эллиптичности пор), и  $x_4$  (вариации средней пористости).

2. По силе воздействия на выход эффекты ранжируют как  $|b_4| > |b_1| > |b_3|$ , при чем  $x_4$  (вариация средней пористости) влияет примерно в четыре раза сильнее, чем  $x_1$  или  $x_3$ .

3. Не обнаружено воздействия фактора  $x_2$  (вариация среднего диаметра пор), взаимодействия между факторами и нелинейности их влияния

90	$b_{31} = +22$	$2 < \alpha < 5$
60	$b_{12} = +15$	$10 < \alpha < 20$
60	$b_{24} = +15$	



*Инженерно допустимые выводы:*

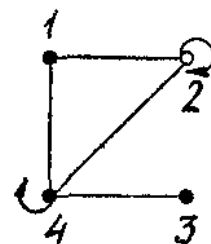
4. Одновременное снижение уровней  $x_3$  (эллиптичность пор) и  $x_4$  (вариация пористости) вызывает неаддитивное (заторможенное,  $b_{34} > 0$ ) снижение выхода (прочности)

5. Если  $x_4 = -1$  (однородный бетон), то эффект фактора  $x_3$  (эллиптичность пор) становится больше, чем  $x_1$  (диаметр пор) ( $|b_1| = 60 < |b_3| + |b_{34}| = 68$ ).

6. Если один из факторов ( $x_3$  или  $x_4$ ) возрастает, а другой уменьшается, то снижение прочности ускоряется.

7—12. По парам факторов  $x_1$  и  $x_2$ ,  $x_2$  и  $x_4$  выводы по аналогии с 4...6.

55	$b_{14} = 13$	$20 < \alpha < 40$
50 (56)	$b_{22} = 32 (31)$	
50 (56)	$b_{24} = 32 (31)$	



37	$b_2 = -8$	$\alpha > 40$
28	$b_{11} = -17$	
27	$b_{33} = -17$	
25	$b_{23} = +6$	
20	$b_{13} = +5$	

Полный

*Равновозможные выводы (в данной задаче не делаются)*

*Выводы*, построенные при нарастающей степени риска  $\alpha$ , приведены в табл. 5.1 (для перевода терминов « $x_i$ » в содержательные термины в диалоговой программе ЭВМ [20] должен быть предусмотрен специальный дешифрующий «семантический» блок). На последних этапах вывод формируется в предположительной форме. Так, по эффекту  $b_{22}$  возможно, что  $x_2$  (вариация среднего диаметра) влияет на выход  $Y$  (прочность) нелинейно и парабола при этом минимальна в зоне эксперимента ( $2 |b_{22}| > |b_{12}| + |b_{24}|$ ).

Изложенный принцип построения по ЭСМ научных инженерных и других содержательных выводов представляется более объективным (и безопасным), чем детерминированные утверждения при заранее фиксированном уровне риска (если уровень значимости не определяется и все эффекты оставлены, то  $0 < \alpha < 100\%$ !).

### **5.3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СОСТАВА ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ВЕРОЯТНОСТНЫЕ ПОКАЗАТЕЛИ ИХ ПРОЧНОСТИ (С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПСЕВДОКОМПОНЕНТОВ)**

В качестве одной из исходных посылок, указывающих на формирование новой актуальной проблематики (см. схему 5.1), достаточно указать на то, что расчет и *оптимизация* строительных конструкций учитывают *минимально допустимые*  $R_{\min}$  значения *механических* характеристик (так называемые нормативные сопротивления материалов [38, 63]), а *оптимизация технологии* производства этих материалов направлена, как правило, на *повышение средних* значений  $\bar{R}$  таких характеристик (или на обеспечение их пониженной ресурсоемкости). Действительно, и при расчете изделий из композитов и прогнозировании их надежности [5, 10, 38, 63] используют не средний показатель механических свойств материала, например, предел прочности  $\bar{R}$ , а минимально возможное (с заданным риском  $\alpha$ ) значение прочности  $R_\alpha$ . В то же время, для оптимизации РТФ  $x_i$ , обуславливающих эти механические свойства, используют ЭСМ именно вида  $\bar{R} = f(x)$ .

При определении оптимальных условий производства и эксплуатации КМ с использованием критериев  $\bar{R}$  или  $R_\alpha$  расхождений в оценке координат  $x_{i,\text{opt}} \{\bar{R}\}$  и  $x_{i,\text{opt}} \{R_\alpha\}$  не будет лишь в особых ситуациях. Так, если случайные значения  $R$  распределены по нормальному закону, а одновременно характеристики рассея-

ния  $s\{R\}$  или  $v = s\{R\}/\bar{R}$  не зависят от  $x_i$ , то оцененные по моделям  $\bar{R} = \varphi(x_i)$  и  $R_\alpha = \psi(x_i)$  значения  $x_{i\text{opt}}$  будут одинаковы. Действительно, основываясь на взаимосвязи (1.32) между  $R_\alpha$  и  $\bar{R}$  (учитывающей риск  $\alpha$  в квантиле  $t_{\alpha,n}$  распределения  $n$  образцов), можно показать, что обе поверхности отклика  $\varphi(x_i)$  и  $\psi(x_i)$  лишь «масштабируются», опускаясь на постоянную  $C_s = ts\{R\}$  (5.2) или пропорционально уменьшаясь в  $C_v = 1 - tv$  раз (5.3).

$$R_\alpha = \psi(x_i) = \bar{R} - t_{\alpha,n}s\{R\} = \varphi(x_i) - C_s, \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} R_\alpha = \psi(x_i) &= \bar{R} - t_{\alpha,n}(\bar{R}v) = \bar{R}(1 - t_{\alpha,n}v) = \\ &= C_v\varphi(x_i). \end{aligned} \quad (5.3)$$

В общем случае функции  $\bar{R} = \varphi(x_i)$  и  $R_\alpha = \psi(x_i)$  различны, так как при управлении РТФ и КЭФ кривые распределения (см. рис. 1.1) могут существенно изменяться. В результате инженерные решения, оптимальные для средних значений свойства  $\bar{R}$ , оказываются смещенными по отношению к  $x_{i\text{opt}}$ , определенным по вероятностным показателям  $R_\alpha$ . Такое смещение наиболее опасно для системы из последовательно соединенных элементов (без резервирования) [4, 10], когда отказ слабого участка КМ ведет к отказу в целом (трубопроводы, сосуды). Поэтому в ряде случаев целесообразно строить модели ЭСМ специально для вероятностных показателей свойств, которые оценивают по данным достаточного количества  $n$  испытаний в каждой точке плана эксперимента.

При моделировании [45] влияния состава эпоксидных композитов (смола ЭИС-1, кварцевый наполнитель двух фракций — мелкий удельной поверхностью  $S_m = 350 \text{ м}^2/\text{кг}$  и крупный —  $S_k = 50 \text{ м}^2/\text{кг}$ ) на вероятностные показатели их прочности на изгиб использованы два критерия оптимальности [72]:  $Y\{\alpha_{\text{тр}}\}$  — минимально допустимые с риском  $\alpha = 0,05$  значения прочности, которые необходимо максимизировать и  $\alpha\{Y_{\text{тр}}\}$  — риск получения КМ с качеством ниже нормативного уровня  $R_{\text{тр}} = 40 \text{ МПа}$ , который необходимо минимизировать.

Степень наполнения  $H : \Pi$  изменялась от 2,5 до 1. Нижний предел  $H : \Pi = 1$  был регламентирован проектными документами, а верхний (2,5) обуславливался тем, что такое насыщение (без ухудшения реологических характеристик композиций при условии применения наполнителей оптимальной дисперсности) было достигнуто при исследовании технологических свойств композитов [109 — IV]. Для целенаправленного изменения рео-

логических и механических свойств композита (см. гл. 4) смешали зерна наполнителя двух фракций. Причем, доля крупного наполнителя  $\omega_k$  изменялась от 0 до 60 % по массе.

Факторы  $H : \Pi$  и доля крупной фракции  $\omega_k$  независимы. Их факторное пространство образует прямоугольник (см. рис. 5.2, а). Однако его полное исследование не целесообразно, так как в зоне, соответствующей  $H : \Pi = 1$  и большому количеству крупного наполнителя, смесь расслаивается. Поэтому целесообразно рассматривать *усечение* этого пространства в виде треугольника, ограниченного линией  $\{m_2, m_3\}$ . Вправо от нее расположены составы, для которых возможно расслоение композиций (см. рис. 5.2, а). Такое факторное пространство традиционными полиномами описывать не рационально, поэтому был осуществлен переход к псевдокомпонентам (см. § 2.2).

Первому псевдокомпоненту  $m_1$  соответствует состав эпоксидной композиции на тонкомолотом мелком наполнителе при  $H : \Pi = 2,5$ . Второму псевдокомпоненту  $m_2$  отвечает состав при  $H : \Pi = 2,5$  и содержанием 40 % мелкого и 60 крупного наполнителя; третьему псевдокомпоненту  $m_3$  соответствует состав при  $H : \Pi = 1$  на тонкомолотом мелком наполнителе. Таким образом, в новом треугольнике (рис. 5.2, б) по линии  $\{m_1, m_2\}$  изменяется доля крупного наполнителя, от  $m_1$  до  $m_3$  — степень наполнения  $H : \Pi = 1 \dots 2,5$ , а по линии  $\{m_2, m_3\}$  — как содержание крупной фракции  $\omega_k$ , так и степень наполнения. Для описания влияния состава на вероятностные показатели механических свойств КМ принята неполная кубическая модель (2.21). Для ее построения достаточно (см. табл. 2.1) семи опытов (см. рис. 5.2, б); точка № 8 ( $m_1 = 2/15, m_3 = 13/15$ ) — контрольная. Реологические испытания на «Реотест-2» показали, что в точках № 2, 7 и 8 (см. рис. 5.2, б) вязкость при  $\varepsilon = 1 \text{ с}^{-1}$  постоянна ( $\eta_1 = 60 \text{ Па} \cdot \text{с}$ ).

Результаты испытаний (двухопорный изгиб, балочка размером  $20 \times 20 \times 80 \text{ мм}$ , пролет 50 мм) на первом этапе упорядочивались в *ранжированный ряд* по типу (5.4) для точки № 1 — см. рис. 5.2 (в скобках указан порядковый номер элемента), который и служил первичным информационным массивом.

$R_1 = 32,3$ (01);	33,4 (02);	33,7 (03);	34,9 (04);	35,4 (05);
36,4 (06);	37,1 (07);	37,4 (08);	38,1 (09);	38,3 (10);
38,7 (11);	38,7 (12);	39,1 (13);	39,3 (14);	39,7 (15);
40,1 (16);	40,3 (17);	40,5 (18);	40,9 (19);	40,9 (20);
41,4 (21);	41,4 (22);	41,6 (23);	41,8 (24);	42,2 (25);
42,4 (26);	42,8 (27);	43,0 (28);	43,0 (29);	43,0 (30);
43,4 (31);	43,4 (32);	43,7 (33);	43,8 (34);	43,8 (35);
44,2 (36);	44,2 (37);	44,2 (38);	44,6 (39);	45,1 (40);
45,1 (41);	45,9 (42);	46,4 (43);	46,4 (44);	46,4 (45);
47,3 (46);	47,4 (47);	45,4 (48);	47,7 (49);	48,3 (50); (5.1)

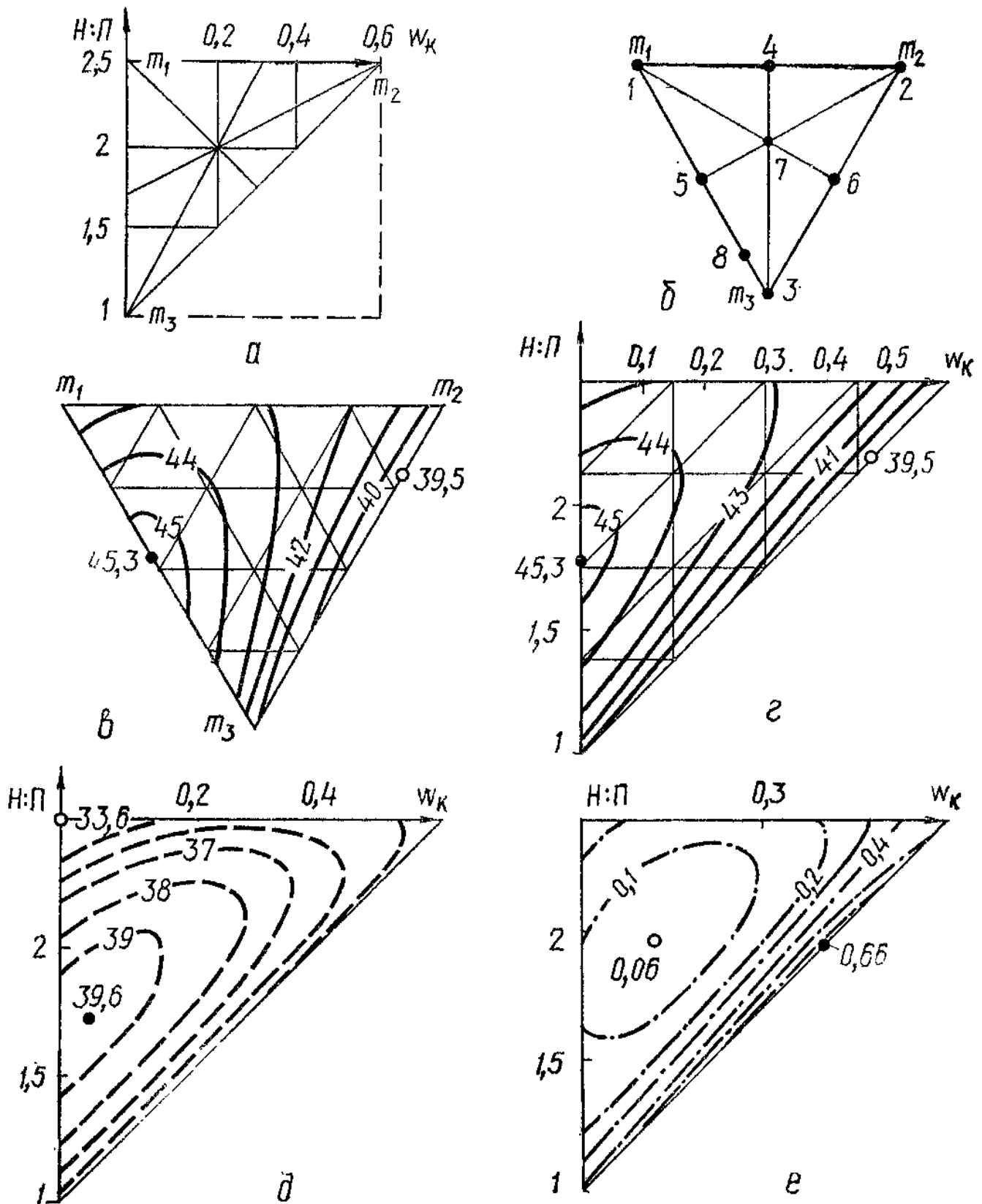


Рис. 5.2. Размещение семи опытных точек в факторном пространстве натуральных переменных (а) и псевдокомпонентов (б); изолинии показателей прочности при изгибе: средней  $\bar{R}$  (в — псевдокомпоненты, г — натуральные переменные) и минимально возможной  $R_{05}$  (д) прочности, а также вероятности разрушения (е) при  $R_{Tp} = 40$  МПа

По ранжированным рядам строили *гистограммы* и рассчитывали *параметрические* оценки  $\bar{R}$ ,  $s$ ,  $v = s/\bar{R}$ , (%),  $A$  и  $E$  (табл. 5.2). Ни в одном из опытов распределение *не соответствует нормальному* закону (для  $|A| \leq 0,53$  и  $-0,81 < E < 1,01$  при  $\alpha = 0,05$  [11]).

Так как гипотеза о нормальности распределения отклонена, то показатель  $Y_\alpha$  целесообразно определить как *непараметрическую* характеристику — *квантиль* [1, 7, 16]. Для части ряда  $\alpha = 0,05$  квантиль  $Q_\alpha$  определяют по алгоритму [20]:

а) порядковый номер  $n_\alpha$  члена ряда (5.4), соответствующий  $Q_\alpha$ , рассчитывают как

$$n_\alpha = \alpha (n + 1) = 0,05 (50 + 1) = 2,55; \quad (5.5)$$

б) предшествующий  $n_\alpha$  член ряда (5.4):  $y^{(2)} = 33,4$  МПа;

в) последующий за  $n_\alpha$  член ряда (5.4):  $y^{(3)} = 33,7$  МПа;

г) интерполяция между ними, с учетом доли 0,55, (5.5):

$$Q_\alpha = R_{05} = 33,4 + 0,55 (33,7 - 33,4) = 33,6 \text{ МПа.}$$

Если, игнорируя явление асимметрии случайных значений  $R$ , принять нормальный закон распределения прочности, то это приведет к существенным смещениям при определении минимальной прочности  $R^{\min}$ . Для нормального распределения  $R^{N \cdot \min}$  рассчитывают по (1.32) при числе степеней свободы  $f = n - 1 = 49$  и  $t_{\alpha, n} = 1,672$  для  $\alpha = 0,05$ . Определенная при  $\alpha = 0,05$  для одинаковой средней прочности в экспериментальных точках № 4 ( $\bar{R}_4 = 43$  МПа) и 8 ( $\bar{R}_8 = 42,9$  МПа) минимальная прочность  $R_4^{N \cdot \min} = 33,1$  МПа и  $R_8^{N \cdot \min} = 30,7$  МПа, в то время как квантили в табл. 5.1 соответственно  $R_{4.05} = 35,7$  МПа и  $R_{8.05} = 37$  МПа, что позволяет ориентироваться на композиты меньшей полимероемкости.

На основе ряда (5.4) рассчитывают и такую важную с инженерной точки зрения оценку как *вероятность  $\alpha_R$  разрушения материала при заданной нормативной нагрузке  $R_{\text{норм}} = 40$  МПа* (т. е. все композиты с прочностью до 39,9 МПа включительно разрушатся, а с  $R \geq 40$  МПа — нет). Реализуется алгоритм:

а) старший член ряда меньше, чем  $R_{\text{норм}}$ :  $R^{(Q)} = R^{(15)} = 39,7$  МПа;

б) последующий за  $R^{(Q)}$  член ряда:  $R^{(Q+1)} = R^{(16)} = 40,1$  МПа;

Т а б л и ц а 5.2. Первичная статистическая обработка эксперимента

Номер точки на рис. 5.2	Состав Н : П		Гистограмма			Статистические характеристики рядов			Вероят- ностные оценки прочности	
	$\omega_K, \%$	$\omega_M, \%$				$\bar{R},$ МПа	$\nu,$ %	$\frac{A}{E}$	$R_{об.}$ МПа	$\alpha_{40},$ %
1	$\frac{2,5}{0}$	$\frac{100}{100}$				42,1	13,6	$\frac{-0,1 *}{-1,2}$	33,6	30,4
2	$\frac{2,5}{60}$	$\frac{40}{40}$				39,6	16,9	$\frac{1,3}{-0,8 *}$	34,6	58
3	$\frac{1}{0}$	$\frac{100}{100}$				41,4	16,3	$\frac{1,3}{-0,8 *}$	35,6	39,6
4	$\frac{2,5}{30}$	$\frac{70}{70}$				43	13,6	$\frac{0,5 *}{-1,1}$	35,7	16,4
5	$\frac{1,75}{0}$	$\frac{100}{100}$				45,2	13,3	$\frac{0,8}{-1,0}$	39,5	9,3
6	$\frac{1,75}{30}$	$\frac{70}{70}$				39,6	18,8	$\frac{1,4}{-0,8 *}$	34,8	65
7	$\frac{2}{20}$	$\frac{80}{80}$				43,5	16,8	$\frac{1,4}{-0,8 *}$	38,9	7,8
8	$\frac{1,2}{0}$	$\frac{100}{100}$				42,9	14,2	$\frac{0,9}{-1,0}$	37	23,6



в) дробный номер члена ряда  $n_{\alpha}^0$ , соответствующий  $R_{\text{норм}}$  (из последнего вычитается единица последней значащей цифры),

$$n_{\alpha}^0 = n^{(Q)} + \{[(R_{\text{норм}} - 0,1) - R^{(Q)}] / (R^{(Q+1)} - R^{(Q)})\} = 15,5; \quad (5.6)$$

г) расчетная оценка вероятности разрушения

$$\hat{\alpha}_R = n_{\alpha}^0 / (n + 1) = 15,5 / 51 = 0,304. \quad (5.7)$$

При моделировании влияния РТФ и КЭФ на вероятность  $0 \leq \alpha_R \leq 1$  обязательно использование преобразования [16]

$$\kappa = \ln [\alpha_R / (1 - \alpha_R)], \quad (5.8)$$

которое обеспечивает попадание расчетного значения  $\alpha_R$  в интервал  $0 \leq \hat{\alpha}_R \leq 1$  при любом значении  $\kappa$

$$\hat{\alpha}_R = e^{\kappa} / (1 + e^{\kappa}). \quad (5.9)$$

Анализ табл. 5.2 показывает следующее. Наилучшие по средней прочности  $\bar{R}$  составы № 5 и 7. Они наиболее рациональны по вероятностным показателям  $R_{05}$  и  $\alpha_{40}$ . Наименее прочный материал по  $\bar{R}$  составов № 2 и 6. Однако по минимальной прочности  $R_{05}$  наиболее опасен состав № 1. В силу отклонения эмпирических распределений от нормального, оценки обеспеченности материала, рассчитанные по коэффициенту вариации, будут очень смещенными. Обобщением экспериментальных данных являются модели третьей степени (неполные) для средней  $\bar{R}$  (5.10) и минимальной  $R_{\alpha}$  (5.11) прочности, а также для показателя вероятности разрушения  $\kappa_R$  (5.12).

$$\begin{aligned} \bar{R} = & 42,1m_1 + 39,6m_2 + 41,4m_3 + 9,2m_1m_2 + \\ & + 14,3m_1m_3 - 3,1m_2m_3, \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} R_{05} = & 33,6m_1 + 34,6m_2 + 35,6m_3 + 6,6m_1m_2 + \\ & + 19,8m_1m_3 + 38,7m_1m_2m_3, \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} \kappa_R = & -0,83m_1 + 0,32m_2 - 0,42m_3 - 5,50m_1m_2 - \\ & - 6,61m_1m_3 + 2,67m_2m_3 - 30,02m_1m_2m_3. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Проверка в контрольной точке № 8 осуществлялась подстановкой координат  $\{m_1 = 0,133; m_2 = 0; m_3 = 0,867\}$  в модели

\* Статистически незначимы (к стр. 204).

(5.10) ... (5.12). Полученное по модели (5.10) значение  $\hat{R}_8 = 43,1$  МПа совпадает с экспериментальным  $\bar{R}_8 = 42,9$  МПа (см. табл. 5.2). Переход от модели для псевдокомпонентов (см. рис. 5.2, в) к прямоугольному треугольнику в натурально изменяемых факторах (см. рис. 5.2, г) осуществляется методом сетки.

При переходе от среднего показателя  $\bar{R}$  (см. рис. 5.2, г) к вероятностному  $R_{05}$  (см. рис. 5.2, д) происходит смещение области минимума в сторону мелкого наполнителя. Область максимальных значений прочности неизменна и лежит в зоне составов на мелком наполнителе. В то же время, наименее вероятно разрушение (при  $R_{\text{норм}} = 40$  МПа) при изгибающей нагрузке композитов с составами на бинарных смесях наполнителя (см. рис. 5.2, е) при  $2,0 \leq (H : \Pi)_{\text{opt}} \leq 2,3$ .

Анализ и оптимизация по вероятностным показателям надежности эпоксидных композитов показали, что переход от проектного состава № 3 с  $H : \Pi = 1$  к составу  $(H : \Pi)_{\text{opt}} = 2$  с содержанием 20...25 % крупного наполнителя не только повышает обеспеченность работы конструкций в сложных условиях эксплуатации, но и обеспечивает получение значительной экономии ресурсов: до 197 кг на 1 т используемой смолы [45].

#### **5.4. ОЦЕНКА ВЕРОЯТНОСТНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ДОЛГОВЕЧНОСТИ КОМПОЗИТА В АГРЕССИВНОЙ СРЕДЕ**

На объектах химической, нефтехимической, пищевой и ряда других отраслей промышленности полимерные композиты наиболее часто используют на тех участках, которые входят в прямой контакт с основными продуктами данного производства, многие из которых агрессивны по отношению к конструкционным материалам. Работа материала в агрессивной среде в ряде случаев приводит к такому изменению его свойств, что требуется капитальный ремонт или полная замена конструкций.

Рекомендации об управлении качеством продукции по вероятностным показателям (см. § 5.1) применимы и к решению задач о работе материалов в разных эксплуатационных условиях (особенно в трубопроводах, емкостях). Для композита на фурановом связующем исследовали [16] по плану  $2^3$  изменение физико-технических свойств (в частности, ударной вязкости  $a$ , кДж/м<sup>2</sup>), при воздействии серной кислоты различных концентраций  $X_1 = C$ , %, и температуры  $X_2 = T = (40 \pm 20)$  °С. Поскольку наиболее опасными представлялись малые концентрации  $C$ , а диапа-

зон исследования должен был быть широким, то уровни варьирования  $X_2$  выбраны несимметричными: 1/10; 1 и 10 %. Однако логарифмическое преобразование  $C$  делает полуинтервалы варьирования равными ( $\lg 0,1 = -1$ ;  $\lg 1 = 0$  и  $\lg 10 = +1$ ) и переход к кодированным переменным осуществляется как

$$x_1 = (\lg C - 0)/1 = \lg C. \quad (5.13)$$

В каждой точке плана испытано по 49...50 образцов. Результаты статистической обработки данных и определения четырех квантилей по описанному в § 5.2 алгоритму приведены в табл. 5.3. Исследование дисперсии оценок параметров распределения подробно рассмотрено в работе [16]. Там же показано, что среднеквадратичное отклонение среднего  $\bar{a}$  по всему эксперименту может быть оценено как  $s\{\bar{a}\} = 0,0605$  кДж/м<sup>2</sup>. Поскольку в опытах № 3, 4, 5, 9 и «Эталон» распределения отличны от нормального, то квантили оценены по ранжированным рядам. Они взяты при одностороннем риске  $\alpha_i$ , равном 0,05; 0,1 и 0,2 (т. е.  $\alpha_i = 0,1 \cdot 2^m$ , где  $m$  равен  $-1$ ;  $0$ ;  $+1$ ), а также при  $\alpha_i = 0,5$  (медиана  $Me$ ).

Т а б л и ц а 5.3. Статистические характеристики результатов эксперимента

№ опыта	Уровни факторов		Оценки параметров распределения				Квантили распределения $a_{\alpha}$ , кДж/м <sup>2</sup>			
	C, %	T, °C	$a_1$	$s\{a\}$	A	E	$a_{0,05}$	$a_{0,1}$	$a_{0,2}$	$a_{0,5}$
			кДж/м <sup>2</sup>							
1	10	60	3,63	0,41	0	0	2,86	3,04	3,30	3,64
2	10	20	3,75	0,38	0	0	2,96	3,17	3,38	3,82
3	0,1	60	3,76	0,34	0	-0,9	3,28	3,33	3,44	3,75
4	0,1	20	4,22	0,49	1,0	0	3,50	3,74	3,84	4,12
5	10	40	2,37	0,51	1,2	0	1,79	1,84	1,92	2,18
6	0,1	40	3,97	0,42	0	0	3,17	3,34	3,57	3,94
7	1,0	60	3,46	0,40	0	0	2,77	2,89	3,11	3,47
8	1,0	20	4,09	0,37	0	2,0	3,50	3,76	3,83	4,04
9	1,0	40	3,92	0,42	0	0	3,27	3,35	3,52	3,92
Эталон, хранящийся на воздухе			4,19	0,51	0,80	0	3,40	3,64	3,82	4,11
							$0,9a_{0,05}$			
							3,06	3,28	3,44	3,70

Рекомендации по определению оценок среднеквадратических ошибок эмпирических квантилей приведены в [16]. Согласно им

$$s \{a_{\alpha}\} = K_K \{\alpha\} s \{\bar{a}\}, \quad (5.14)$$

где  $K_K \{\alpha\}$  — расчетный коэффициент, возрастающий по мере удаления  $\alpha_i$  от  $\alpha = 0,5$  и равный (при гипотезе нормальности):  $K_K \{0,05\} = 2,012$ ;  $K_K \{0,1\} = 1,7$ ;  $K_K \{0,2\} = 1,429$ ;  $K_K \{0,5\} = 1,253$ .

С учетом  $s \{\bar{a}\} = 0,0605$  кДж/м<sup>2</sup> по (5.14) определены  $s \{a_{05}\} = 0,122$ ;  $s \{a_{10}\} = 0,103$ ;  $s \{a_{20}\} = 0,086$  и  $s \{a_{50}\} = 0,076$  кДж/м<sup>2</sup>.

Для анализа степени влияния риска  $\alpha$ , допускаемого при эксплуатации системы, на технические решения построили две неполные кубические модели. Модель (5.15) описывает изменение медианы как характеристики средней ударной вязкости в зависимости от концентраций кислоты  $x_1$  и ее температуры  $x_2$ :

$$a_{50} = 3,50 - 0,68x_1 - 0,23x_1^2 - 0,19x_2 + 0,46x_2^2 + \\ + 0,78x_1x_2^2, \quad (5.15)$$

а модель (5.16) — изменение квантиля  $a_{\alpha}$  не только от этих эксплуатационных факторов, но и от степени риска —  $-1 \leq m \leq +1$  ( $m = [\ln \alpha_i + 2,302]/0,693$ ),

$$a_{\alpha} = 3,03 - 0,75x_1 - 0,25x_1^2 + 0,06x_1x_2 + 0,55x_1x_2^2 - \\ - 0,42x_2 + 0,45x_2^2 + 0,27x_1x_2 + 0,05x_2m^2 + \\ + 0,16m. \quad (5.16)$$

В моделях (5.15) ... (5.16) оставлены только значимые оценки, причем, для (5.16) в качестве ошибки эксперимента использовано среднеквадратическое отклонение при наибольшем  $\alpha_i = 0,2$  (т. е.  $s \{\bar{a}_{20}\} = 0,086$  кДж/м<sup>2</sup>). Комплекс моделей характеризуется тремя особенностями. Во-первых, условия, соответствующие  $a_{\max}$  и  $a_{\min}$ , при переходе от средних показателей  $a_{50}$  к вероятностным  $a_{\alpha}$  в ряде сечений не совпадают (рис. 5.3, а — 1 и 2). Во-вторых, наличие в моделях больших эффектов взаимодействия  $b_{ij}$  приводит к изменению от сечения к сечению квадратичных эффектов  $b_{ii}$ , а значит кривизны парабол (см. рис. 5.3, а — 2 и 3). Во-третьих, в силу несимметричности уровней факторов  $C$  и  $\alpha$  в натуральных переменных переход к последним вызывает трансформацию парабол и прямых (рис. 5.3, б).

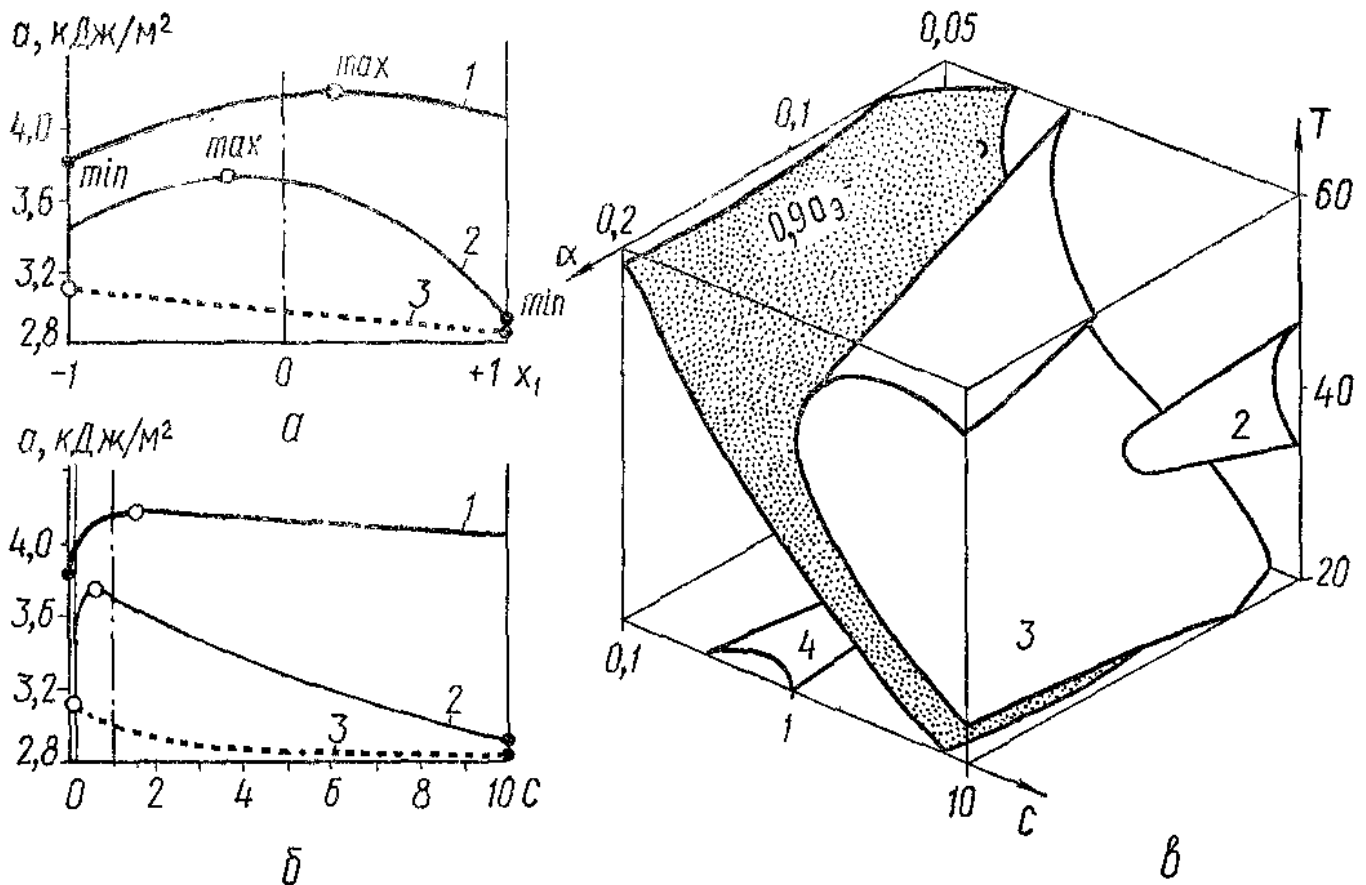


Рис. 5.3. Изменение ударной вязкости (1 — максимально возможной, 2 — средней, 3 — минимально возможной) от концентрации кислоты (а — нормализованные, б — натуральные переменные), а также изоповерхности ударной вязкости при переменном риске  $\alpha$  (в)

Изоповерхности модели (5.16) показаны на рис. 5.3, в. Здесь же нанесена поверхность, соответствующая переменному от  $\alpha$  граничному допустимому снижению качества материала в эксплуатационных условиях не более чем до 0,9 от уровня эталонного (см. табл. 5.3, последняя строка). Анализ изоповерхностей модели, содержащей элемент  $x_2 t^2$ , подтверждает, что зона относительно безопасной работы КМ изменяется не только в зависимости от условий эксплуатации, но и от допустимого риска отказа сооружения  $\alpha_i$ .

Совершенствование методик построения и анализа нового типа моделей, включающих в число факторов допустимый риск отказа  $t = \varphi(\alpha)$ , позволит не только обоснованно решать задачи повышения обеспеченности параметров качества как на стадии изготовления композитов, так и на стадии эксплуатации конструкций из них, но и расширить содержательную основу теории надежности и долговечности материалов за счет интерпретации эффектов при нетривиальных элементах модели — взаимодействиях типа  $x_i t$ ;  $x_i x_j t$  и  $x_i^2 t$  на основе достижений отраслевой науки,

## 5.5. ОЦЕНКА ИЗМЕНЕНИЯ ТЕСНОТЫ СВЯЗИ МЕЖДУ ВОДОПОГЛОЩЕНИЕМ И ПОРИСТОСТЬЮ КОМПОЗИТА ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ РЕЦЕПТУРНЫХ ФАКТОРОВ

Одна из наиболее доступных для строительных полимерсодержащих композитов смола — карбамидная. Однако, несмотря на ряд ее положительных технических качеств [57, 73, 104] и относительно низкую стоимость, она не нашла широкого применения, так как полученные на ее основе КМ недостаточно водостойки. Содержащаяся в ней и выделяющаяся в процессе отверждения вода, а также газовые пузырьки, захваченные тонкодисперсным наполнителем, и контактные трещины «матрица — наполнитель» — основные причины образования дефектов макро- и микроразрывной структуры композита. В зависимости от объема и характера, сформированного в процессе смешивания, формования и твердения технологической смеси порового пространства КМ имеет разное водопоглощение. Проникая внутрь КМ по капиллярной структуре, а также за счет диффузионных процессов [35, 87], вода (водные растворы электролита) способствуют повышению подвижности структурных элементов полимера и снижает прочность межмолекулярных связей, что приводит к уменьшению энергии, необходимой для разрушения материала. Дегградация полимерного композита [75] отражается коэффициентом его водостойкости  $K_w$  — отношением уровней показателей качества до и после экспозиции в воде.

С инженерной точки зрения для целей экспресс-контроля интересна возможность прогноза деградации полимерного КМ по цепи «расчетная пористость  $\Pi$  — водопоглощение  $W$  за время  $\tau$  — коэффициент водостойкости  $K_w(\tau)$ », которая исследуется далее для карбамидных композиций на смоле УКС, отверждаемой ортофосфорной кислотой с соотношением  $2 \leq H : \Pi \leq 2,5$  (фактор  $X_1$ ). В качестве наполнителя использованы крупный ( $S_K = 65 \text{ м}^2/\text{кг}$ ) и мелкий ( $S_M = 300 \text{ кг/м}^2$ ) андезит. Причем, часть последнего  $g_{KK}$  (массовая доля, %) заменялась тонкодисперсным ( $S_{KK} = 350 \text{ кг/м}^2$ ) карбидом кремния — отходом абразивного производства, что способствовало повышению износостойкости готовых изделий. При изменении  $0 \leq g_{KK} \leq 60 \%$  (фактор  $Z_2$ ) одновременно регулировалось содержание крупной фракции по линейной функции (5.17), что обеспечивало, как показали специальные исследования, получение смесей с пониженной эффективной вязкостью (см. гл. 4) и затвердевшего КМ с постоянной прочностью на сжатие  $\bar{R} = 68...73 \text{ МПа}$ .

$$G_K = 24 + 0,567g_{KK}. \quad (5.17)$$

В точках плана  $3^2$  (табл. 5.4) экспериментально оценены свойства девяти составов КМ с расчетной плотностью  $\rho_u^T$ . В каждой  $u$ -й точке исследовали  $n = 44 \dots 50$  призм ( $20 \times 20 \times 80$  мм). Образцы маркировали, что обеспечивало каждому  $v$ -му образцу в  $u$ -й выборке строгое совмещение оценок фактической плотности до водонасыщения  $\rho_{uv}$  и расчетной пористости  $P_{uv}$  (5.18) и водопоглощения по массе  $W_{uv}$ , а также призмной прочности  $R_{п.и}$  после 30 сут пребывания в воде.

$$P_{uv} = (1 - \rho_{uv}/\rho_u^T) 100. \quad (5.18)$$

В табл. 5.4 приведены статистические характеристики свойств, относящихся к первому элементу цепи  $\{P, W\}$ . Для обоих свойств средние при проверке по  $t$ -критерию гипотезы  $H_0: \mu \{Y_{\max}\} = \mu \{Y_{\min}\}$  (см. табл. 1.2) существенно отличаются, несмотря на высокие коэффициенты вариации. Значения свойства  $Y_{uv}$ , как правило, распределены по отличным от нормального законам. При переходе от оценок по среднему  $\bar{Y}$  к квантилям  $Y_\alpha$  может происходить изменение координат экстремальных точек. Так, наименьшее среднее водопоглощение  $\bar{W}_7$  имеет состав Н : П = 2,25 при  $g_{кк} = 60 \%$ , а квантиль при  $\alpha = 0,05$ ;  $W_{05}^{\min}$  соответствует составу № 5 (Н : П = 2,5;  $g_{кк} = 30 \%$ ). Измененные средние значения  $\bar{P}_u$  и  $\bar{W}_u$  под влиянием рецептурных факторов описывается моделями

$$\begin{aligned} \bar{P} = & 6,4 + 2,4x_1 - 1,2x_1^2 - 1,1x_1z_2 + 1,0x_1^2z_2 + \\ & + 0,5z_2 + 0,8z_2^2 - 1,7x_1z_2^2, \end{aligned} \quad (5.19)$$

$$\begin{aligned} \bar{W} = & 3,7 + 0,4x_1 + 0,6x_1^2 - 0,4x_1z_2 + 2,2x_1^2z_2 - \\ & - 1,4z_2 + 0,6z_2^2 - 1,1x_1z_2^2. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Координаты для  $\bar{P}_{\max}$  и  $\bar{W}_{\max}$  тождественны ( $x_1 = -1, z_2 = +1$ ), а вот для  $\bar{P}_{\min} = 2,3$  (при  $x_1 = -1; z_2 = -0,41$ ) и  $\bar{W}_{\min} = 2,8$  (при  $x_1 = 0,21; z_2 = +1$ ) существенно отличаются. Сравнительный анализ изолиний (5.19) и (5.20) позволяет утверждать, что поверхности отклика подобны (рис. 5.4, а, б) только в локальных областях, а это свидетельствует об ограниченности взаимосвязи параметров качества  $P$  и  $W$ .

Количественно измененные степени тесноты связи между случайными показателями  $P$  и  $W$  под влиянием  $x_1$  и  $z_2$  можно оце-

**Т а б л и ц а 5.4. План эксперимента и статистические  
композиата**

№ точки (состава)	План		Состав КМ				Число образцов $n$	Пористость $\Pi$ , %					
	$x_1$	$x_2$	Н : П	Массовые доли на- полнителя, %				$\bar{\Pi}$	характеристики $f(\Pi)$			$\Pi_\alpha$	
				крупный $G_k$	мелкий				$\sigma_{\Pi}$ , %	АП	БП	$\Pi_{0,5}$	$\Pi_{95}$
					$G_m$	отход $G_{kk}$							
1	+1	+1	2,5	58	42	60	49	7,0	17	0	0	4,5	9,1
2	-1	+1	2	58	42	60	50	6,0	28	0	0	3,4	9,6
3	+1	-1	2,5	24	76	0	45	7,8	19	-0,6	1,0	4,8	10,3
4	-1	-1	2	24	76	0	44	2,6	44	0,9	0	1,1	5,2
5	+1	0	2,5	41	59	30	49	7,8	13	0	0	6,3	10,0
6	-1	0	2	41	59	30	44	3,1	32	0,6	0	1,7	5,6
7	0	+1	2,25	58	42	60	45	7,9	12	0	-0,9	6,2	9,4
8	0	-1	2,25	24	76	0	48	6,8	22	0	-1,1	4,3	9,2
9	0	0	2,25	41	59	30	47	5,9	20	0	-1,0	3,9	8,0

нить после расчета по (5.21) коэффициента корреляции между  $\Pi_{uv}$  и  $W_{uv}$  в каждой  $u$ -й точке

$$r_u \{ \Pi W \} = \text{cov} \{ \Pi_u W_u \} / (s_u \{ \Pi \} s_u \{ W \}) =$$

$$= \left[ \sum_{v=1}^n (\Pi_{uv} - \bar{\Pi}_u) (W_{uv} - W_u) \right] / (s_u \{ \Pi \} s_u \{ W \}). \quad (5.21)$$

Оценки коэффициентов корреляции  $r_u \{ \Pi W \}$  в табл. 5.4 колеблются в широких пределах. Чем ближе  $r_u$  к нулю, тем более рассеяны  $v$ -е результаты внутри  $u$ -го опыта. На рис. 5.4, в показаны корреляционные поля для опытов № 5 и 8. Эллипсы рассеяния [7, 13, 20] при  $\alpha = 0,2$  имеют равную единичную площадь (5.22)  $F_5 \{ \Pi W \} = F_8 \{ \Pi W \} = 1,8$ , но их главные оси наклонены к осям координат под разными углами.

$$F \{ \Pi W \} = s \{ \Pi \} s \{ W \} \sqrt{1 - r \{ \Pi W \}}. \quad (5.22)$$

Величины  $r_u \{ \Pi W \}$  (см. табл. 5.4) являются оценками [2, 7, 13, 85] истинных коэффициентов корреляции  $|\rho \{ \Pi W \}| \leq 1$ . Их



# характеристики пористости и водопоглощения карбамидного

Водопоглощение $W$ , %						Оценки взаимосвязи					
$\bar{W}$	характеристики $f(W)$			$W_\alpha$		$r \{PW\}$	вероятности связи				
	vW, %	$A_W$	$E_W$	$W_{05}$	$W_{95}$		$t \{PW\}$	$\alpha$	$q$	$\kappa$	$\hat{q}$ , %
								%			
4,5	31	-0,6	1,2	2,0	6,1	+0,20	1,41	16,5	83,5	1,62	90,4
3,7	39	0,8	0	2,2	6,3	+0,03	0,21	84,0	16,0	-1,66	26,0
6,9	12	0	0	5,4	8,4	-0,11	0,74	46,0	54,0	0,16	68,5
4,3	19	0	0	3,0	5,6	+0,47	3,47	0,2	99,8	6,77	99,9
4,8	38	0	-1,5	1,9	7,4	-0,15	1,03	30,4	69,6	0,83	40,0
4,1	16	0	0	2,9	5,2	+0,36	2,47	1,7	98,3	4,05	94,4
3,0	23	1,9	5,1	2,3	4,1	+0,18	1,20	23,5	76,5	1,18	51,3
5,7	23	0	0	2,4	7,9	+0,49	3,83	0,2	99,8	6,78	99,9
3,5	22	1,1	2,5	2,4	5,5	-0,06	0,43	58,1	41,1	-0,36	88,2

абсолютное значение как степень тесноты связи можно использовать в сравнительном анализе, позволяя формулировать выводы типа «связь ближе к (дальше от) функциональной». Если  $|r| < 0,235$ , то оценка статистически не значима при  $\alpha = 0,05$  [11]. Количественным показателем тесноты взаимосвязи служит риск первого рода  $\alpha$  принять неправильную гипотезу о наличии связи между  $\Pi$  и  $W$  или обеспеченность взаимосвязи  $q = 1 - \alpha$ . По абсолютному значению  $r_u \{PW\}$  сначала определяют критерий Стьюдента (5.23), а потом по таблицам [11] и интерполяционным формулам [20] находят соответствующий ему при  $f = n - 2$  двусторонний риск  $\alpha$  (см. табл. 5.5)

$$t_u \{PW\} = |r_u \{PW\}| \sqrt{n_u - 2} / \sqrt{1 - r_u^2 \{PW\}}. \quad (5.23)$$

Модель для показателя  $\kappa$  (5.8) обеспеченности  $q = 1 - \alpha$

$$\begin{aligned} \kappa = & 2,11 - 1,61x_1 - 0,91x_1^2 + 2,47x_1z_2 + 2,5x_1^2z_2 - \\ & - 3,30z_2 + 1,13z_2^2 - 0,13x_1z_2^2, \quad (5.24) \end{aligned}$$

(см. рис. 5.4, г, изолинии  $\hat{q}$ ) дает, судя по значениям табл. 5.4, практически приемлемые результаты (хотя в точке № 9 расхож-

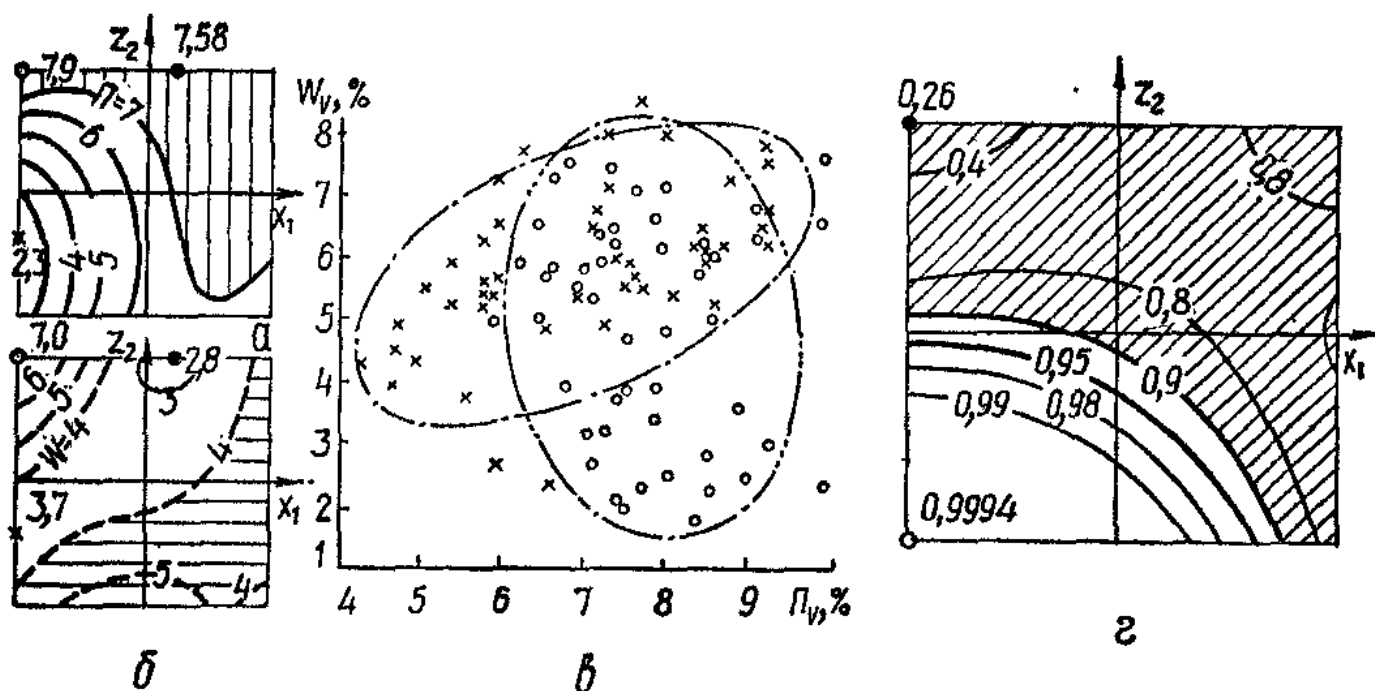


Рис. 5.4. Диаграммы средних значений пористости  $\bar{\Pi}$  композита (а) его водопоглощения  $\bar{W}$  (б), корреляционные поля  $\{ \Pi, W \}$  для двух образцов разной структуры (в), а также диаграмма изменения вероятности взаимосвязи  $\Pi$  и  $W$  (г) под влиянием  $H : \Pi$  ( $x_1$ ) и фракционного состава наполнителя ( $z_2$ )

дение в оценках велико, но общая картина закономерности не меняется, так как  $\hat{q}_9 < 0,9$ ).

Из (5.24) и диаграммы на рис. 5.4, г следуют выводы. Во-первых, система экспресс-контроля, основанная на оценке  $W$  по  $\Pi$ , будет работать относительно стабильно только в локальной области (пониженное наполнение  $H : \Pi < 2,25$  при среднем содержании крупного наполнителя  $25 \leq G_k \leq 40 \%$  и ограниченном введении тонкодисперсного карбида кремния  $0 \leq g_{kk} \leq 45 \%$ ). Во-вторых, достоверная корреляционная связь наблюдается лишь в том случае, когда вся пористость открыта для переноса воды в структуре КМ. Если в материале остаются резервные замкнутые поры, то они наполняются водой из внешней среды за счет диффузии ограниченно, что и разрушает линейную связь  $W = f(\Pi)$ .

В целом проведенный анализ влияния рецептурных факторов на степень тесноты связи между показателями качества КМ открывает пути решения некоторых актуальных задач, как в области теоретического материаловедения (понятие об оптимальной структуре, вопрос о подобии закономерностей «состав — свойство»), так и в области создания методов экспресс-контроля свойств композитов.

## 5.6. МОДЕЛИ НОВОГО ВИДА «СВОЙСТВА — ПАРАМЕТРЫ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ» В ЗАДАЧАХ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ТЕПЛОМАССООБМЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТОВ

Существенное влияние на уровень свойства поризованных композитов характеристик их макропористости общепризнано. Однако проблема количественной его оценки пока далека от разрешения. Есть две важнейшие причины такой ситуации. Во-первых, *отсутствие экспрессных методов* для инструментальной оценки геометрических характеристик элементов макропористости, причем, методов, позволяющих *формировать* достаточно *большие массивы информации* для надежной оценки параметров законов распределения этих элементов. Во-вторых, отсутствие методического и программного обеспечения для построения и анализа моделей, описывающих влияние множества этих элементов на свойства поризованных композитов. Результаты работ по созданию метода *лазерной порометрии* и его применению [72], в том числе реализации их в виде измерительно-вычислительного комплекса (ИВК), позволили интенсифицировать исследования по вышеуказанной проблеме и перевести их на качественно новый уровень [54].

Сущность лазерного метода определения дифференциальной макропористости — анализ интенсивности лазерного излучения,

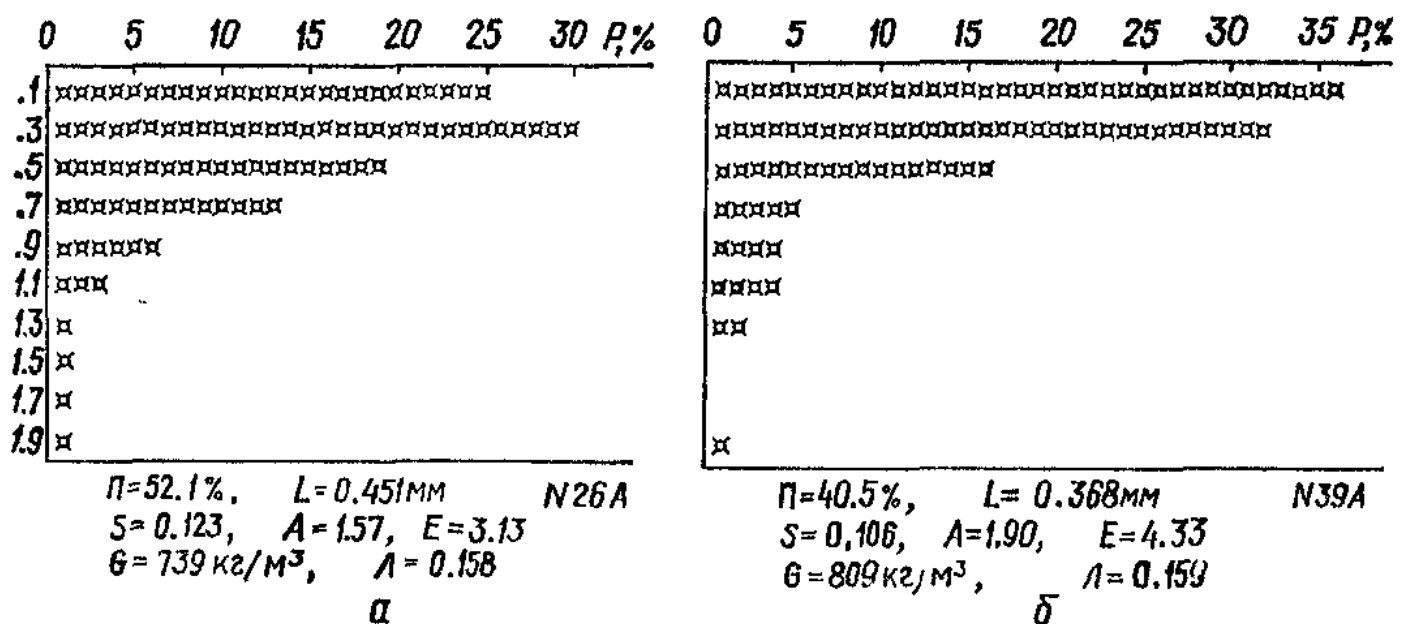


Рис. 5.5. Гистограммы распределения пор по размерам двух образцов разной плотности (а — 739 кг/м³, б — 809), но с одинаковым коэффициентом теплопередачи —  $\lambda = 0,158... 0,159 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$

отраженного от поверхности образца. Максимумы интенсивности идентифицируют с межпоровыми перегородками, а минимум — с порами. При постоянной скорости  $v_{л}$  перемещения луча по отношению к материалу длительность сигналов  $\tau_u$  представляет собой параметр, характеризующий размеры пор  $l_u = v_{л}\tau_u$ . Электронная сортировка импульсов по длительности  $\tau_u$  соответствует распределению хорд по размерам. Микро-ЭВМ управляет процессами измерения структурных параметров, сбора и обработки экспериментальных данных. При помощи ИВК определяют показатель *линейной поверхностной пористости* образца  $\Pi$  (процентное отношение суммы длительности всех «поровых» сигналов к общей длительности движения луча), *распределение*  $p\{l_i\}$  (доля, %) *пор по размерам* и соответствующие гистограммы (рис. 5.5), числовые оценки параметров распределения (средняя длина хорды  $\bar{l}$ , дисперсия  $s^2\{l\}$ , асимметрия  $A_l$  и эксцесс  $E_l$ ), а также производные вероятностные показатели качества структуры композита  $Y\{\alpha\} = f(\theta^*\{l\})$ .

В ходе экспериментов, проведенных совместно с НИПСиликатобетон [46], за счет варьирования по квадратичному плану  $R_9$  [16] девяти рецептурно-технологических факторов было получено 92 разных по структуре ячеистых бетона (табл. 5.5). Для каждого из них на ИВК измерено по 2000 пор и построены гистограммы (см. рис. 5.5) распределения хорд по размерам (10 диапазонов по 200 мкм с верхним пределом 2 мм). В целом полученные ячеистые композиты при уменьшении плотности  $\rho$  с 909 до 403 кг/м<sup>3</sup>, т. е. в 2,26 раза, снижают теплопроводность  $\lambda$  во столько же раз ( $0,219/0,099 = 2,21$ ), что соответствует традиционным представлениям в строительном материаловедении. Связь между  $\lambda$  и  $\rho$  тесная (коэффициент корреляции  $r\{\ln \lambda, \rho\} = 0,854$ ,  $f = n - 2 = 90$ , риск менее 0,1 % [11]) и описывается экспонентой (5.25) с ошибкой  $\delta\{\lambda\} = 9,37\%$ , которую можно признать удовлетворительной (с инженерной точки зрения) ошибкой прогноза.

$$\lambda = 0,0672e^{0,00118\rho}. \quad (5.25)$$

Чтобы воспользоваться зависимостью (5.25) в практической работе (например, в заводской лаборатории) нужно достаточно большое время ожидать высушивания образца контролируемого ячеистого композита до постоянного веса. Использование же для оценки коэффициента теплопроводности результатов лазерной порометрии, приведенных в табл. 5.5, которые определяют экспрессно и не зависимо от влажности образца, открывает новые возможности для совершенствования системы контроля, анализа и оптимизации ячеистого бетона. Коэффициенты корреляции между  $\ln \lambda$  и основными вероятностными структурными показате-

телями  $\theta^* \{l\}$  приведены в табл. 5.6. Ее анализ укрепляет гипотезу о том, что можно построить зависимости типа  $\lambda = a_0 e^{a_1 \theta \{l\}}$  и более сложные, имеющие ошибку прогноза, соизмеримую с таковой для формулы (5.25). Данные табл. 5.5 также свидетельствуют в пользу этой гипотезы. В средней части табл. 5.5 приведены сведения о 12 образцах, имеющих равную теплопроводность  $0,16 \pm 0,003$  Вт/м · К (вариация  $\pm 2$  %), но при этом различающихся, прежде всего, по плотности, так как  $\rho$  изменяется для № 41...52 в  $832/651 = 1,3$  раза. Одна из причин этого, по-видимому, в разнице средних длин хорд (диаметров пор) в  $0,576/0,368 = 1,6$  раза, дисперсии — в 1,3 раза, доли мелких пор — в 2,1 раза. В качестве аргументов новых функций целесообразно использовать безразмерные нормированные входы (5.26), для которых значение  $|1|$  совпадает со среднеквадратическими отклонениями  $s \{\theta^*\}$ . Их введение, кроме вычислительных упрощений [1, 2], существенно облегчает и интерпретацию моделей.

$$(\theta_{i.u}^*)_e = (\theta_{i.u}^* - \bar{\theta}_i^*)/s \{\theta^*\}. \quad (5.26)$$

В ходе анализа взаимосвязей между  $\lambda$  и характеристиками макроструктуры рассмотрен веер многофакторных полиномиальных (до неполной четвертой степени) и других линейных по параметрам [20, 51] моделей. Наилучшие результаты получены для моделей, содержащих следующие показатели:

$P_e$  — безразмерную (5.26) *линейную пористость* как геометрический аналог плотности ячеистого бетона;

$l_e$  и  $s_e$  — безразмерные оценки таких параметров распределения пор по размерам как *среднее* и *дисперсия*;  $z_i = [l_p p_i - (\overline{l_p p_i})]/s \{l_p p_i\}$  — оценки *частот пор* в  $i$ -х группах; преобразование необходимо из-за значительной асимметрии распределения пор по размерам (см. табл. 5.5, рис. 5.5).

Особенность аргумента  $z_i$  в том, что кроме значений, жестко связанных с интервалами 0...0,2 мм ( $z_m$  — показатель «мелких» пор) и 1...2 мм ( $z_k$  — показатель «крупных» пор), используется один *динамический аргумент*  $z_0$  — показатель доли пор в том из четырех (0,2...0,4; 0,4...0,6; 0,6...0,8 и 0,8—1 мм) «средних» диапазонов, в котором находится оценка среднего  $\bar{l}$  данного ячеистого бетона. Такое нетривиальное решение позволило не только избежать сложностей учета  $p_i$  в модели (поскольку  $\sum p_i = 100$  % — факторы линейно связаны — см. гл. 2), но и получить более точные модели, чем (5.25). В табл. 5.7 представлены фрагменты ПРА таких моделей — при 20 элементах точность модели достигает 9,09 % и ее использование обеспечивает экспрес-

Т а б л и ц а 5.5. Результаты измерения коэффициента теплопроводности  $\lambda$  (фрагмент раижированного ряда), плотности  $\rho$ , а также структурных параметров ячеистого композита

Номер элемента	$\lambda$ , Вт/(м <sup>2</sup> ·К)	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$\Pi$ , %	Статистические оценки распределений				Доли пор, %		
				$\bar{l}$ , мм	$s^2 \{l\}$	$A_l$	$E_l$	10-200 мкм	1...2 мкм	в диапазоне $\bar{l}$
								$\rho_M$	$\rho_K$	$\rho_0$
1	0,099	418	48,1	0,62	0,20	0,96	0,21	16,8	19,6	9,3
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
41	0,157	721	49,2	0,47	0,15	1,32	1,54	28,5	11,5	18,9
42	0,157	756	24,6	0,40	0,12	1,72	3,42	33,1	7,0	17,2
43	0,157	832	43,6	0,44	0,11	1,29	2,06	26,7	6,2	23,4
44	0,158	709	55,2	0,48	0,16	1,39	1,61	26,6	10,4	18,6
45	0,158	739	52,1	0,45	0,12	1,57	3,13	24,5	3,3	19,2
46	0,159	751	47,3	0,52	0,21	1,27	0,96	30,0	15,2	19,0
47	0,159	809	40,5	0,37	0,11	1,90	4,32	35,8	4,0	32,4
48	0,160	651	50,0	0,58	0,23	1,74	-0,52	31,9	20,7	8,4
49	0,160	656	36,8	0,57	0,15	1,04	0,99	17,4	12,8	23,7
50	0,162	796	46,0	0,43	0,14	1,75	3,44	31,2	7,3	18,8
51	0,163	762	37,3	0,34	0,08	2,12	7,17	34,1	2,2	33,8
52	0,163	776	46,6	0,39	0,10	1,59	2,91	31,9	6,6	32,9
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
92	0,219	909	22,4	0,34	0,08	2,5	9,86	34,1	1,8	35,0
Граница: нижняя	0,099	403	22,4	0,25	0,03	0,35	-0,82	12,9	0,9	8,4
верхняя	0,219	909	67,8	0,77	0,24	3,05	12,89	54,4	32,1	40,7

сность оценки теплозащитных свойств ячеистого КМ на лазерном ИВК без специальной подготовки образцов и доведения их до стандартной влажности.

Для анализа и интерпретации результатов целесообразно использовать несколько более простую модель (шаг 16)

$$\begin{aligned}
 Y = 10^3 \ln \lambda = & -1877 + (-97 - 38z_0 + 45z_M - \\
 & - 72l_{\epsilon z_M} - 46z_0 z_M) \Pi_{\epsilon} + 24\Pi_{\epsilon}^2 + (113 + 104z_0 + 111z_M - 100z_0 z_M) l_{\epsilon} + \\
 & + 64z_0 + 119z_M + 98z_M^2 + (82 - 84z_K) z_0 z_M, \quad (5.27)
 \end{aligned}$$

совпадающую по точности с моделью (5.25). Гауссовская точность любой оценки коэффициентов в (5.27) выше 190, что соответствует риску ошибки первого рода менее 5 %.

Перспективно использование моделей «свойство как функция параметров распределения структурных элементов» для оптими-

Т а б л и ц а 5.6. Коэффициенты корреляции между  $\lambda$  и основными вероятностными структурными показателями  $\theta \{l\}$

Показатели	$\Pi, \%$	Характеристики							
		параметрические					непараметрические		
		$\bar{l}, \text{мм}$	$s \{l\}$	$v_l, \%$	$A_l$	$E_l$	$\ln p_M$	$\ln p_K$	$\ln p_0$
$\ln \lambda$	-0,71	-0,49	-0,38	-0,41	0,39	0,32	0,46	-0,41	0,28

Вероятностные структурные  $\theta \{l\}$ :

$\Pi$	0,54	0,50	-0,32	-0,47	-0,46	-0,45	0,52	-0,30
$l$		0,87	-0,64	-0,90	-0,83	-0,83	0,90	-0,68
$s \{l\}$			-0,22	-0,78	-0,82	-0,54	0,95	-0,77
$v_l$				0,63	0,45	0,86	-0,33	0,2 *
$A_l$					0,94	0,71	-0,83	0,70
$E_l$						0,63	-0,86	0,70
$\ln p_M$							-0,65	0,39
$\ln p_K$								-0,73

Числовые оценки распределения

$\theta_M^* \{l\}$ :

$\bar{\theta}^*$	0,45	0,48	0,37	0,77	1,4	2,7	3,20	2,08	3,09
$s \{\theta^*\}$	0,11	0,113	0,07	0,09	0,52	2,73	0,34	0,75	0,34
$A_\theta$	0,42	0,1 *	-0,3 *	0,1 *	0,65	1,46	0,1 *	-0,73	-0,41
$E_\theta$	-0,74	-0,5 *	-0,4 *	-0,89	0,6 *	2,25	-0,92	0,4 *	-0,2 *

Относительная ошибка прогноза  $\delta \{\lambda\}, \%$  по  $f \theta^*$

12,8	15,9	16,8	16,9	16,6	16,9	16,4	16,4	17,7
------	------	------	------	------	------	------	------	------

\* Статистически не значимы при  $\alpha = 0,05$ .

зации статистического множества этих структурных элементов с целью направленного изменения свойств композитов. Так, минимизация теплопроводности по (5.27) с помощью ДШМ [16, 72] позволила установить, что дифференциальный закон распределения пор по размерам, соответствующий  $\lambda_{\text{min}}$  существенно трансформируется в зависимости от интегральной пористости композита  $\Pi$  (т. е. и от его плотности  $\rho$  как основной инженерной характеристики ячеистого КМ). Данный вывод следует рассматривать как предварительный, поскольку требуется как расширение информационных массивов (см. табл. 5.5), получаемых на ИВК лазерной порометрией, так и совершенствование методического и программного обеспечения такого моделирования. В то же вре-

Т а б л и ц а 5.7. Последовательный регрессионный анализ модели  $Y = 10^3 \ln \lambda = \varphi (П, \bar{l}, p_0, p_m, p_k)$

Коэффициенты	Шаг ПРА										
	1	...	11	12	13	...	16	...	22	...	30
	Число эффектов $L \{b\}$										
	31	...	21	20	19	...	16	...	10	...	2
$b_0$	-1883	...	-1875	-1878	-1874	..	-1877	..	-1858	...	-1898
$b_1$	-98	...	-98	-94	-94	...	-97	...	-134	...	-126
$b_2$	111	...	65	79	79	...	113	...	86		
$b_3$	33	...	44	46	58	...	64	...	20		
$b_4$	192	...	165	172	174	...	199	...	147		
$b_5$	-26	...									
$b_{11}$	30	...	29	29	24	...	24				
$b_{22}$	282	...	128	128							
$b_{33}$	16										
$b_{44}$	170	...	124	122	63	...	98				
$b_{55}$	-36	...	-71	-65	-39						
$b_{12}$	-15										
$b_{13}$	-45	...	-42	-45	-43	...	-38				
$b_{14}$	36	...	42	39	46	...	45				
$b_{15}$	7										
$b_{23}$	128	...	126	130	75	...	104	...	87		
$b_{24}$	404	...	232	232	66	...	111				
$b_{25}$	-142										
$b_{34}$	101	...	104	105	60	...	82	...	36		
$b_{35}$	22										
$b_{45}$	-86										
$b_{123}$	-50	...	-48	-61	-55						
$b_{124}$	-120	...	-116	-102	-82	...	-72	...	-75		
$b_{125}$	-63	...	-47	-72	-39						
$b_{134}$	-43	...	-44	-55	-68	...	-46	...	-62		
$b_{135}$	-19										
$b_{145}$	35	...	38								
$b_{234}$	72	...	92	92	108	...	100				
$b_{235}$	38										
$b_{245}$	-10										
$b_{345}$	-56	...	-93	-91	-95	...	-84	...	-9		
$\{\lambda\}, \%$	9,81	...	9,13	9,09	9,20	...	9,38	...	10,62	...	12,99

модели вида «свойство как функция параметров распределения структурных элементов» обладают повышенной научной информативностью (по сравнению с моделями вида «свойство как функция рецептурно-технологических факторов») и перспективны для создания методов неразрушающего контроля свойств композитов.



альных технологических процессах в широких пределах (в технологии композитов это прежде всего рецептуры с утилизируемыми отходами промышленности), включаются также факторы, которые могут быть *стабилизированы* достаточно точно на заданных уровнях (химические добавки-регуляторы, температура среды). Если изменение некоторых из них не требует больших затрат ресурсов, то эти факторы можно рассматривать как *компенсационные* для перевода качества продукции (с риском  $\alpha$ ) на уровень не хуже гарантированного.

В гл. 4 показано, что *эффективная вязкость* полиэфирного связующего  $\eta$ , Па · с, при фиксированном минералогическом составе наполнителя существенно зависит от степени наполнения  $H : П$ , граиулометрии наполнителя и скорости деформации смеси  $\dot{\epsilon}$ ,  $c^{-1}$ . Если в такой системе рис. 5.6, а, б вызвать случайные колебания входных факторов, это повлечет случайные колебания выходного значения  $\eta$ , анализ распределения которого может служить основой для оценки вероятностных реологических показателей смеси.

В развитие § 4.2 рассмотрено [79] изменение  $\eta$  смеси на клинкерном наполнителе (см. рис. 4.16) при варьировании степени наполнения  $x_1 = [(H : П) - 2]/0,5$  и доли крупных зерен в смеси с мелкими  $x_2 = (\omega_k - 0,5)/0,5$ , а также скорости деформации смеси  $z_3^i = (m - m_{0.i})/1$ , где  $m = \log_3 \dot{\epsilon}$ , причем,  $m_{0.i}$  — середи-

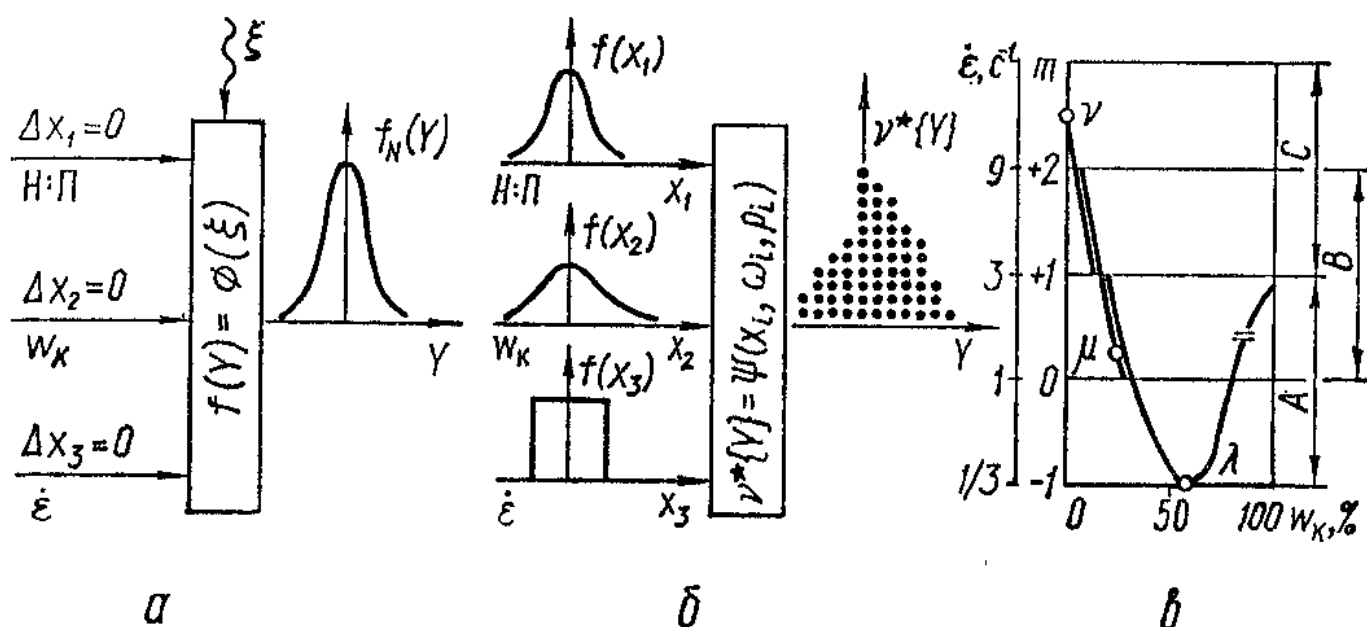


Рис. 5.6. Технологическая система при условии стабилизации факторов (потенциалы  $\Delta x_i = 0$ ) с откликом  $Y$ , изменяющимся под влиянием случайных воздействий  $\xi$  (а); та же система в условиях имитационного моделирования по методу Монте-Карло (б); используемые при этом кусочные функции  $\dot{\epsilon} = f(\omega_k)$  для изореологической смеси (в)

на интервала трехуровневого изменения  $m$  при «кусочном» описании поведения системы. Введенное здесь разделение в диапазоне  $-1 \leq m \leq 3$  ( $1/3 \leq \dot{\epsilon} \leq 27 \text{ с}^{-1}$ ) непрерывного описания (полиномами высоких степеней  $\dot{\epsilon}$ ) на три кусочных (рис. 5.6, в) описания полиномами неполной третьей степени так, чтобы каждый последующий отрезок частично перекрывал предыдущий, снижает ошибку неадекватности моделей в окрестностях исследуемой точки (это особо важно при реализации синтеза экспериментально-статистического моделирования с методом Монте-Карло). Результаты кусочного моделирования показаны в табл. 5.8.

Для сравнительного анализа устойчивости реологических свойств взяты такие рецептурно-технологические условия, при которых средняя вязкость постоянна  $\eta = 120$  ( $Y = 10^3 \cdot \ln \eta = 4788$ ), а полимероёмкость  $\Pi$  при малой скорости деформаций  $\dot{\epsilon} = 1/3 \text{ с}^{-1}$  минимальна (они аналогичны данным рис. 4.13, б). Эти условия определяют по кусочным моделям в табл. 5.8 по следующему алгоритму:

а) рассматривается вязкость при самой малой  $\dot{\epsilon} = 1/3 \text{ с}^{-1}$ , для чего в модель  $Y_A$  подставляют  $z_3^A = -1$ ;

б) по полученной в а двухфакторной модели определяют на изолинии  $Y = 4788$ ; значение  $x_2 = 0,144$  (доля крупных зерен  $\omega_k = 0,572$ , обеспечивающая  $S = 170,2 \text{ м}^2/\text{кг}$ ), при котором  $x_1 = 0,745$  достигает максимума ( $H : \Pi = 2,37$  — минимум полимероёмкости  $\Pi_{\min}$ ) — точка  $\lambda^{(A)}$ ;

в) рассматривают условия постоянства  $\eta = 120 \text{ Па} \cdot \text{с}$  при сохранении  $\Pi_{\min}$  ( $H : \Pi = 2,37$ ), но при переходе к мелкому наполнителю  $\omega_k = 0 \%$  ( $S = 313 \text{ м}^2/\text{кг}$ ), для чего модель  $Y_C$  переводят в однофакторную подстановкой  $x_1 = 0,745$  и  $x_2 = -1$ ;

г) по модели в как корень квадратного уравнения определяют значение  $z_3^C = 0,573$  ( $m = 2,573$ ;  $\dot{\epsilon} = 16,89 \text{ с}^{-1}$ ) — точка  $\nu^{(C)}$ , в которой обеспечивается  $\eta = 120$ ;

д) среднюю точку  $\mu$  выбирают так, чтобы при  $\eta = 120$  и  $H : \Pi = 0,745$  содержание зерен  $\omega_k$  было средним между граничными значениями  $\lambda$  и  $\nu$ , т. е.  $x_2 = -0,428$  ( $\omega_k = 0,286$ ;  $S = 246 \text{ м}^2/\text{кг}$ );

е) оценку  $\dot{\epsilon}$  для точки  $\mu^{(B)}$  находят по модели  $Y_B$ ; расчетное значение  $z_3^B = -0,681$  ( $m = 0,329$ ;  $\dot{\epsilon} = 1,44 \text{ с}^{-1}$ ).

Результаты оценок  $x_1, x_2, z_3^i$  по а...е дают координаты (обозначены далее  $x_{T,i}$ ) для трех точек  $\lambda^{(A)}, \mu^{(B)}$  и  $\nu^{(C)}$  (см. табл. 5.8).

Далее анализ ведут по локальным моделям, полученным по

Т а б л и ц а 5.8. Коэффициенты многофакторных кусочных моделей  $Y = 10^3 \ln \eta$  для разных участков шкалы градиента скорости деформаций  $\dot{\epsilon}$  и моделей изменения эффективной вязкости в окрестностях заданных точек ( $\lambda$ ,  $\mu$  и  $\nu$ )

Значимые оценки коэффициентов моделей *	Кусочные модели $Y_i = f(x_1, x_2, z_3^i)$			Модели * $Y = \psi(x_i, p_i)$ для окрестностей точек на кривой $\eta = 120 \text{ Па} \cdot \text{с}$ при $H : \Pi = 2,37$		
	отрезки на рис. 5.6			(из модели «А»)	(из модели «В»)	(из модели «С»)
	А	В	С			
	$z_3^A = m-0$	$z_3^B = m-1$	$z_3^C = m-2$	$\omega_K = 0,572$ $\dot{\epsilon} = 0,33$	$\omega_K = 0,286$ $\dot{\epsilon} = 1,44$	$\omega_K = 0$ $\dot{\epsilon} = 16,89$

$b_0$	3761	3673	3626	4788	4788	4788
$b_1$	1136	999	1013	+144	+121	+16
$b_2$	-186	-235	-283	0	-41/-82/-16,4	-60/-120/-241
$b_3$	-123	-278	-62	-11	-49	-59
$b_{11}$	+134	0	+344	+2	+3	-9
$b_{22}$	+664	+509	+398	2/8/33 **	2/7/29	1/5/20
$b_{33}$	-72	-45	-108	-3	+1	0
$b_{12}$	-219	-160	-95	0/-1/-1	0/-1/-1	-1/-1/-2
$b_{13}$	-96	-37	+196	-2	-5	-2
$b_{23}$	0	-48	0	0/0/-1	0/0/1	1/2/4
$b_{122}$	+116	+164	+218			
$b_{133}$	0	+87	+146			
$b_{112}$	+198	+232	+268			
$b_{233}$	0	0	0			
$b_{113}$	0	-191	-489			
$b_{223}$	-97	-149	-107			

\* Все оценки  $b_{iji} \leq |1|$ .

\*\* Три числа, разделенные чертой — оценки коэффициентов для «игровых» диапазонов  $\omega_2$  соответственно 5; 10 и 20 %.

рассмотренной в § 1.3 (задача № 10) методике трансформации ЭСМ. Эти модели описывают поведение системы в окрестностях точек  $\lambda^{(A)}$ ,  $\mu^{(B)}$  и  $\nu^{(C)}$  при сокращении интервала варьирования факторов в  $\omega_i$  раз, причем эта степень масштабирования определяется возможными колебаниями  $\Delta P_i$  факторов  $X_1$ ,  $X_2$  и  $Z_3$  в производственных (реальных или проектных) условиях. Так, в данном случае среднеквадратическое отклонение для наполнения принято однозначным  $\Delta P \{H : \Pi\} = 0,05$ , а для доли крупных зерен

$\omega_k$  в наполнителе на трех уровнях 2,5; 5 или 10 %. Границы изменения  $\omega$  оценены как  $\Delta P \{m\} = \pm 0,2$ . Это соответствует колебанию  $\omega$  от 81,9 до 122,1 % по сравнению с координатой  $(x_{T,i})_e$ . Масштаб  $\omega_i = \Delta P_i / \Delta X_i$  сокращения факторного пространства до размеров «игровой» области, в которой имитируется методом Монте-Карло поведение системы, назван «игровым». Он составил

$$\left. \begin{aligned} \omega_1 &= 0,05/0,5 = 0,1; \\ \omega_2 \{-1\} &= 0,025/0,5 = 0,05, \quad \omega_2 \{0\} = 0,05/0,5 = 0,1, \\ \omega_2 \{+1\} &= 0,1/0,5 = 0,2; \\ \omega_3 &= 0,2/1 = 0,2. \end{aligned} \right\} \quad (5.28) \dots (5.30)$$

В локальных моделях (см. табл. 5.8), полученных из исходных подстановкой (1.82), аргументом является  $p_i$  — генерируемое по методу Монте-Карло случайное воздействие, нормированное так, чтобы его среднее стремилось к 0, характеристика рассеяния — к 1: для нормального закона  $\sigma_N \{p_i\} = 1$ , для равномерного распределения границы  $\Gamma \{p_i\} = \pm 1$ . Равномерный закон распределения (см. рис. 5.6, а) принят для показателя скорости деформаций  $m$ . Таким образом, для игровой зоны  $v_c$  получена при  $\omega_2 = 0,1$  модель

$$\begin{aligned} Y &= 4788 + 16p_1 - 120p_2 - 59p_3 - 9p_1^2 + 5p_2^2 - 1p_1p_2 - \\ &\quad - 2p_1p_3 + 2p_2p_3. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Результат реализации метода Монте-Карло ( $n = 200$ ) — гистограмма распределения частот оценок  $Y$  эффективной вязкости (рис. 5.7, а). По ней определяли числовые характеристики распределения — как параметрические ( $\bar{Y}$ ,  $s$ ,  $A$ ,  $E$ ), так и непараметрические (квантиль  $Y_\alpha$ , соответствующий риску  $\alpha = 0,1$  появления эффективной вязкости выше нормативной; ширина коридора вязкостей  $\Delta_\alpha$  с двусторонним риском  $\alpha = 0,2$ ; оценка риска получения вязкости на 20 % выше нормативной и др.).

Имитационный эксперимент осуществлен в девяти точках (табл. 5.9). Первая изменяющая его условия переменная  $h_1$  соответствует детерминированным уровням  $+1$ ; 0 и  $-1$  зернового состава наполнителя, т. е. точкам  $\lambda$ ,  $\mu$  и  $\nu$  на рис. 5.6, в (выход за границу  $\omega_k < 0$  или  $h_1 < -1$  возможен, так как соответствует увеличению дисперсности наполнителя в зону  $S > S \{v\} = 313 \text{ м}^2/\text{кг}$ ). Вторая  $h_2 = (\omega_2 - 0,05)/0,025$  — изменению уровня

случайных колебаний этого зернового состава. Получена серия неполных кубических моделей для оценок генерированных гистограмм типа

$$Y_{0,\alpha} = 147 + 8h_1 - 10h_1^2 - 28h_1h_2 + 5h_1^2h_2 + 23h_2 + 3h_2^2. \quad (5.32)$$

Анализ результатов имитационного моделирования (см. табл. 5.9 и 5.7, б...д) позволяет сделать ряд методических и технологических заключений. Статистические распределения выходных параметра  $Y$  при нормальном и равномерном колебании факторов  $x_i$  могут быть резко ассиметричны и островершинны, что делает недостоверным расчет вероятностных показателей вязкости на основании гипотезы о нормальном распределении. Степень отклонения распределения  $Y$  от нормального зависит от положения точки в факторном пространстве. В зоне оптимального гранулометрического состава (точка  $\lambda$ ) вероятностные оценки слабо зависят от уровня колебаний  $h_i$ . В зоне мелкого одифракционного наполнителя (точка  $\nu$ ) чувствительность максимальна—увеличение колебаний  $\omega_2$  с 2,5 до 10 % вызывает рост  $s\{Y\}$  в 3,3 раза,  $\eta_\alpha$  — на 31 %,  $K_\eta$  — на 59 % и риска  $\alpha\{\eta\}$  получения  $\eta > 144$  Па · с — в 50 раз. Если при малых  $\omega_2$  наиболее устойчивы реологические показатели смесей на мелком наполнителе (точка  $\nu$ ), то при больших колебаниях — на наполнителях оптимального зернового состава (точка  $\lambda$ ).

Методика, синтезирующая экспериментально-статистическое и имитационное моделирование, позволяет искать пути решения сложных технологических задач «о компенсационном управлении системой, испытывающей случайные рецептурно-технологические колебания, при условии сохранения гарантированного уровня ее качества». Так, если предположить, что повышением скорости деформации смесей  $\dot{\epsilon}$  можно компенсировать колебания эффективной вязкости, возникающие из-за вариации ее состава ( $N : П$  и  $\omega_k$ ), то количественная оценка такого повышения  $\dot{\epsilon}$  определяется по следующему алгоритму.

Исходные модели переводятся в «локальные» типа (5.33) за счет учета двух «колеблющихся» факторов. Так для точки  $\nu$  ( $\Delta z = \Delta z_3^c$ ) при  $\omega_1 = \omega_2 = 0,1$

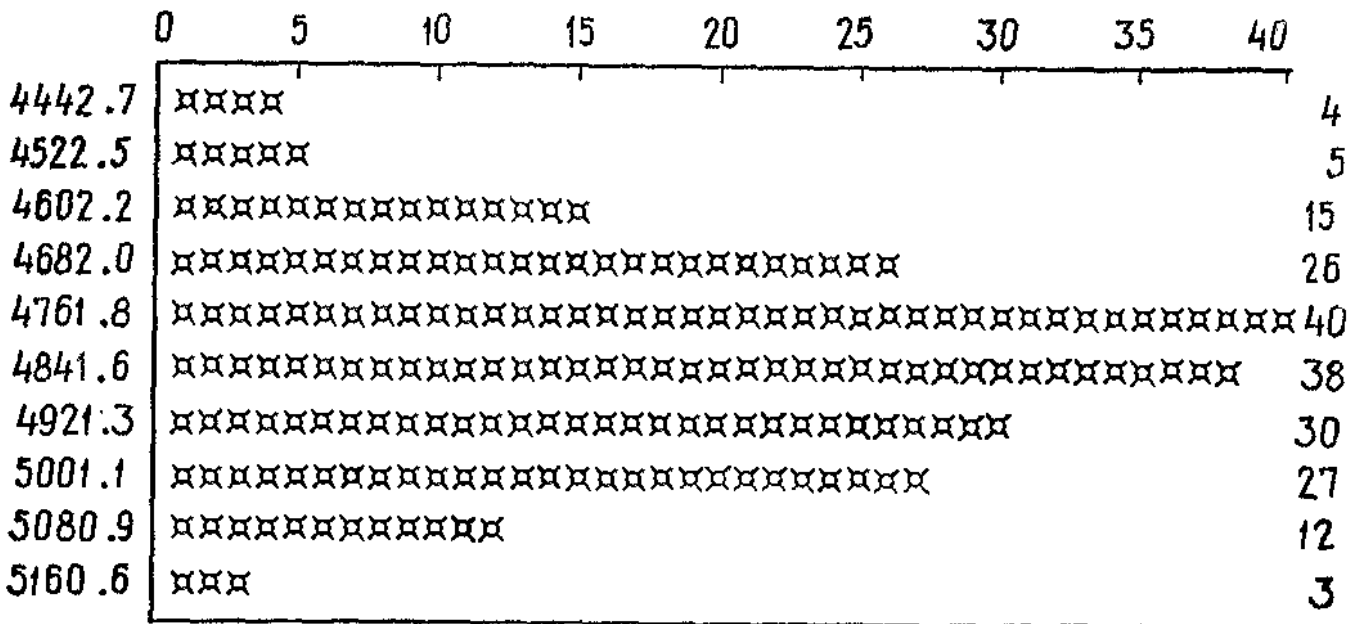
$$Y_0 = 4788 + B_0(p) + B_3(p) \Delta z + B_{33}(p) (\Delta z)^2, \quad (5.33)$$

где  $B_0(p) = 16p_1 - 120p_2 - 9p_1^2 + 5p_2^2 - 1p_1p_2;$

$$B_3(p) = -294 - 8p_2 + 11p_2 - 5p_1^2 - 1p_2^2;$$

$$B_{33}(p) = 0 + 15p_1.$$

$P1 = 0.281 \text{ E-01}, S = 0.9896, A = -0.193, E = -0.188$   
 $P2 = -0.175 \text{ E-01}, S = 0.9888, A = 0.272, E = -0.054$   
 $P3 = 0.105 \text{ E-02}, S = 0.5761, A = 0.009, E = -1.247$



$Y = 0.4820 \text{ E04}, S = 0.1539 \text{ E03}, A = -0.041, E = -0.433$

$\alpha$

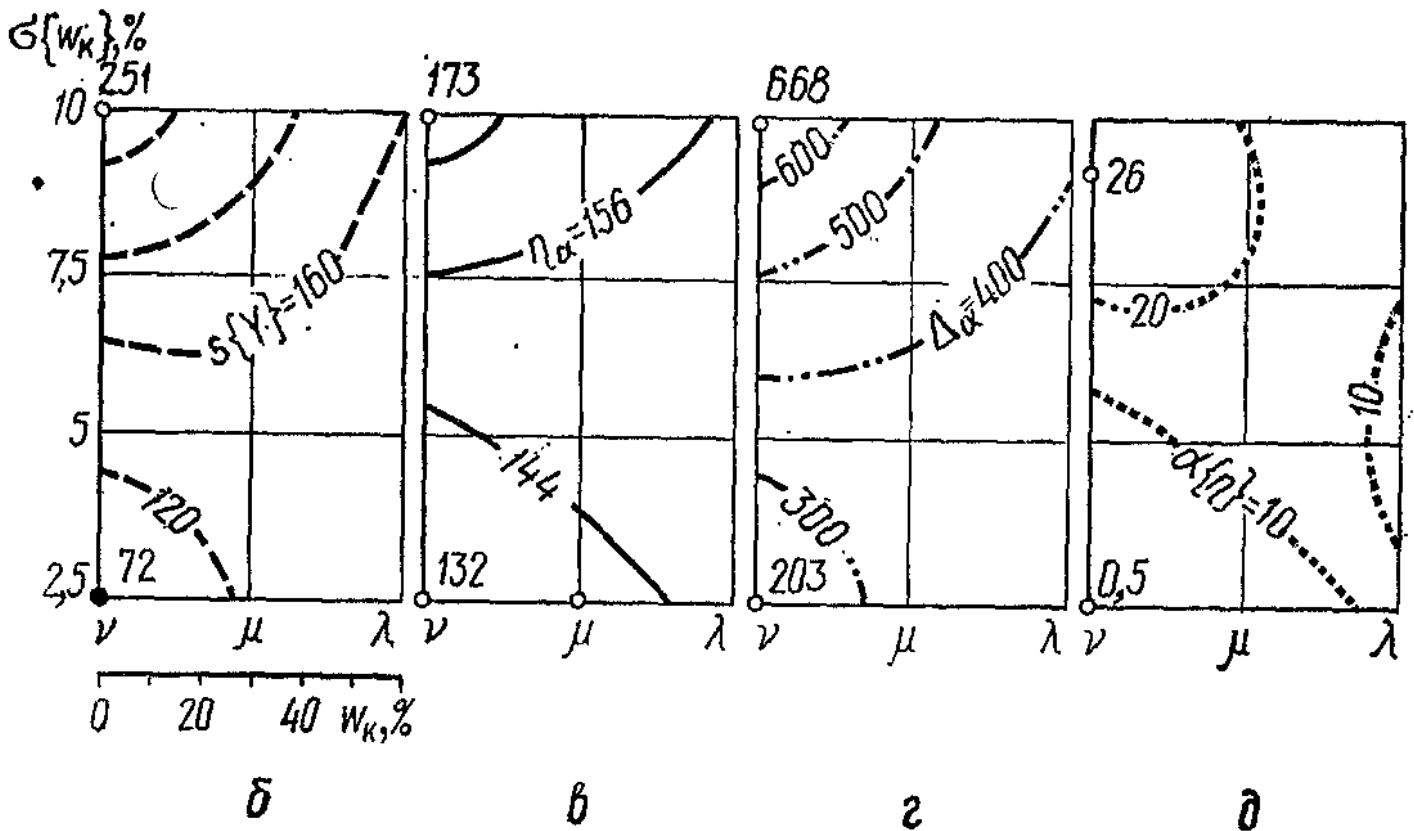


Рис. 5.7. Генерированная на ЭВМ гистограмма (а) распределения показателя вязкости  $10^3 \ln \eta$ ; диаграммы показателей устойчивости (б —  $s\{Y\}$ , в —  $\eta_\alpha$ , г —  $\Delta_\alpha$ , д —  $\alpha\{\eta\}$ ), полученные при имитационном моделировании

Т а б л и ц а 5.9. Оценка для девяти точек плана генерированных методом Монте-Карло по моделям  $Y = \psi(p_1,$

Номер опыта	План имитационного эксперимента					Оценки статистических распределений		
	Переменные					s {Y}	значимые	
	натуральные		кодированные				A* {Y}	E* {Y}
	Доля крупных зерен $\omega_K$ , % (символ точки)	Вариация доли $\omega_K$ , %	$h_1$	$h_2$				
1	0	(v)	2,5	-1	-1	73	0	0
2	0,286	(μ)	2,5	0	-1	128	0	0
3	0,572	(λ)	2,5	+1	-1	149	0	0
4	0	(v)	5,0	-1	0	132	0,5	0,7
5	0,286	(μ)	5,0	0	0	144	0,4	0
6	0,572	(λ)	5,0	+1	0	143	0	0
7	0	(v)	10,0	-1	+2	250	0,4	0
8	0,286	(μ)	10,0	0	+2	203	0,5	0
9	0,572	(λ)	10,0	+1	+2	154	0	0

Приближенное решение рассмотрено в [79—1987], а точное решение следует из (5.33):

$$\Delta z = [-B_3(p) + \sqrt{(B_3(p))^2 - 4Y_{0,t}B_{33}(p)}] / (2B_{33}(p)). \quad (5.34)$$

При этом сначала по методу Монте-Карло из (5.33) находят случайные значения коэффициентов  $B_3(p)$  и  $B_{33}(p)$  в каждой  $i$ -й реализации, потом вычисляют (5.34) случайное значение  $\Delta z$ , и  $n$  результатов анализируют как генерированную статистическую совокупность.

Так, для точки v при  $\omega_1 = \omega_2 = 0,1$  гистограмма распределения  $\Delta z$  имеет характеристики:  $\bar{\Delta z} = -0,04$ ;  $s = 0,40$ ;  $A = 0$ ;  $E = -0,5$ ;  $\Delta z_{0,1} = 0,504$ . Из гистограммы следует, что перевод  $\dot{\epsilon}$  к значению  $m = 3,113$  соответствует гарантии  $q = 0,91$  получения вязкости  $\eta \leq 120$  Па · с.

статистических характеристик распределений  $Y = 10^3 \ln \eta$ ,  $p_2, p_3$ ) и вероятностные показатели реологических свойств смеси

Вероятностные показатели реологических свойств смеси					
квантиль, соответствующий риску $\alpha = 10\%$		ширина коридора $\Delta_\alpha \{Y\}$ при $\alpha = 10\%$	отношение вязкостей на границах коридора при $\alpha = 10\%$ $k_\eta = \frac{\eta_{\alpha}^{\text{верх.}}}{\eta_{\alpha}^{\text{инжн.}}}$	оценка риска получения вязкости на 20% выше норматива 120 Па·с	
$Y_\alpha$	$\eta_\alpha$ Па·с			$\alpha_\eta, \%$	$\kappa$
4885	132	198	1,22	0,5	-5,31
4951	141	333	1,39	8,0	-2,44
4972	144	362	1,44	10,2	-2,18
4950	141	340	1,40	7,2	-2,55
4984	146	351	1,42	10,9	-2,10
4974	145	358	1,43	10,8	-2,11
5155	173	665	1,94	25,0	-1,10
5093	163	521	1,68	22,0	-1,41
5030	153	409	1,50	19,6	-1,41

Таким образом, для получения гарантированной ( $\alpha = 0,1$ ) эффективной вязкости наполненного полиэфирного связующего  $\eta \leq 120$  Па·с в условиях, когда рецептура смеси может колебаться со среднеквадратичными отклонениями  $\sigma \{H : \Pi\} = 0,05$  и  $\sigma \{\omega_k\} = 0,05$ , необходимы *дополнительные энергозатраты* для увеличения скорости деформации в смеси на мелком наполнителе в  $3\Delta z_{0,1} = 3^{0,504} = 1,74$  раза.

Использование в научной, проектной и практической деятельности инженеров-технологов и материаловедов *вероятностных показателей* качества отраслевых объектов (от микроструктурных систем до технологических линий) *будет интенсивно возрастать*, во-первых, по мере усложнения этих объектов, во-вторых, по мере повышения *жесткости требований к надежности* выполнения их функций, в-третьих, по мере уменьшения безопасности общества, в частности, к экологической сфере.



## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Айвазян С. А., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д. Прикладная статистика: Основы моделирования и первичная обработка данных.— М.: Финансы и статистика, 1983.— 471 с.
2. Айвазян С. А., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д. Прикладная статистика: Исследование зависимостей.— М.: Финансы и статистика, 1985.— 487 с.
3. Анализ эффективной вязкости полимерной системы на основе моделей «смесь I, смесь II, технология — свойства» / В. А. Вознесенский, Я. П. Иванов, Т. В. Ляшенко, В. И. Соломатов // Физико-химическая механика дисперсных структур.— К.: Наук. думка, 1986.— С. 122...128.
4. Астарита Дж., Марручи Дж. Основы гидромеханики не-ньютоновских жидкостей.— М.: Мир, 1978.— 309 с.
5. Аугусти Г., Баратта А., Кашиати Ф. Вероятностные методы в строительном проектировании.— М.: Стройиздат, 1988.— 584 с.
6. Ахназарова С. Л., Кафаров В. В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии.— М.: Высш. шк., 1985.— 327 с.
7. Баженов Ю. М., Вознесенский В. А. Перспективы применения математических методов в технологии сборного железобетона.— М.: Стройиздат, 1974.— 192 с.
8. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс.— М.: Радио и связь, 1988.— 128 с.
9. Бартенев Г. М., Зеленев Ю. В. Физика и механика полимеров.— М.: Высш. шк., 1983.— 391 с.
10. Болотин В. В. Прогнозирование ресурса машин и конструкций.— М.: Машиностроение, 1984.— 312 с.
11. Большев Л. Н., Смирнов Н. В. Таблицы математической статистики.— 3-е изд.— М.: Наука, 1983.— 416 с.
12. Брагинский Л. Н., Бегачев В. И., Барабаш В. М. Перемещение в жидких средах.— Л.: Химия, 1984.— 336 с.

13. Браунли К. А. Статистическая теория и методология в науке и технике.— М. : Наука, 1977.— 407 с.
14. Виноградов Г. М., Малкин А. Я. Реология полимеров.— М. : Химия, 1977.— 438 с.
15. Вовк С. Н. Математический эксперимент и научное познание.— К. : Вища шк., 1984.— 195 с.
16. Вознесенский В. А. Статистические методы планирования эксперимента в технико-экономических исследованиях.— 2-е изд.— М. : Финансы и статистика, 1981.— 263 с.
17. Вознесенский В. А. Оптимизация состава многокомпонентных добавок в композиты.— К. : О-во «Знание», 1981.— 20 с.
18. Вознесенский В. А., Карабаев А. Н. Шламы карбида кремния как наполнители полимерных композитов // Экспресс-информ.: Отечественный опыт / ВНИИЭСМ Минстройматериалов СССР.— 1987, № 12, Сер. 11.— С. 3—4.
19. Вознесенский В. А., Ковальчук А. Ф. Принятие решений по статистическим моделям.— М. : Статистика, 1978.— 192 с.
20. Вознесенский В. А., Ляшенко Т. В., Огарков Б. Л. Численные методы решения строительно-технологических задач на ЭВМ.— К. : Вища шк., 1989.
21. Вучков И., Бояджиева Л., Солаков Е. Прикладной регрессионный анализ.— М. : Финансы и статистика, 1987.— 289 с.
22. Выровой В. Н., Ляшенко Т. В. Физико-химическая механика и оптимизация композиционных материалов.— К. : О-во «Знание», 1987.— 24 с.
23. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация.— М. : Мир, 1985.— 509 с.
24. Горинштейн А. М. Практика решения инженерных задач на ЭВМ.— М. : Радио и связь, 1984.— 232 с.
25. Грушко И. М., Ильин А. Г., Чихладзе Э. Д. Повышение прочности и выносливости бетона.— Харьков : Вища шк. Изд-во при Харьк. ун-те, 1986.— 147 с.
26. Даниленко Е. Л., Ляшенко Т. В. Расчет точных оптимальных планов на выпуклых многогранниках.// Зав. лаб.— 1979.— № 3.— С. 249—251.
27. Даниленко Е. Л., Романовский Р. К. Рекуррентные формулы для критериев оптимальности // Зав. лаб.— 1981.— № 3.— С. 57—58.
28. Денисов В. И., Попов А. А. Пакет программ оптимального планирования эксперимента.— М. : Финансы и статистика, 1986.— 159 с.
29. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ : В 2 кн.— 2-е изд.— М. : Финансы и статистика, 1986.— Кн. 1.— 366 с; Кн. 2.— 351 с.
30. Дябов В. Д., Вознесенский В. А., Саканский Ю. Н. Оптимизи-

- зация клеевой композиции для стыков составных по длине железобетонных мостов на основе математической теории эксперимента. // Тр. СоюздорНИИ.— 1978.— Вып. 109.— С. 96—104.
31. *Елишин И. М.* Полимербетоны в гидротехническом строительстве.— М. : Стройиздат, 1980.— 191 с.
  32. *Енюков И. С.* Методы, алгоритмы, программы многомерного статистического анализа : Пакет ППСА.— М. : Финансы и статистика, 1986.— 232 с.
  33. *Ермаков С. М., Жиглявский А. А.* Математическая теория оптимального эксперимента.— М. : Наука, 1987.— 319 с.
  34. *Зазимко В. Г.* Оптимизация свойств строительных материалов.— М. : Транспорт, 1981.— 103 с.
  35. *Заиков Г. Е., Иорданский А. Л., Маркин В. С.* Диффузия электролитов в полимерах.— М. : Химия, 1984.— 237 с.
  36. *Зайцев Ю. В.* Моделирование деформаций и прочности бетона методами механики разрушений.— М. : Стройиздат, 1982.— 196 с.
  37. *Коузов П. А.* Основы анализа дисперсионного состава промышленных пылей и измельченных материалов.— Л. : Химия, 1987.— 264 с.
  38. *Кудзис А. П.* Оценка надежности железобетонных конструкций.— Вильнюс : Мокслас, 1985.— 156 с.
  39. *Липатов Ю. С.* Коллоидная химия полимеров.— К. : Наук. думка, 1984.— 343 с.
  40. *Лисенко В. А.* Защитно-конструкционные полимеррастворы в строительстве.— К. : Будівельник, 1985.— 134 с.
  41. *Ляшенко Т. В.* Оптимизация наполнителей полиэфирных связующих на основе моделей нового класса : Автореф. дис. ... канд. техн. наук: 05.23.05.— Харьков, 1984.— 20 с.
  42. *Малкин А. Я., Чалых А. Е.* Диффузия и вязкость полимеров. Методы измерения.— М. : Химия, 1979.— 303 с.
  43. Математическая теория эксперимента / Под ред. *С. М. Ермакова*.— М. : Наука, 1983.— 392 с.
  44. Методические рекомендации по применению экспериментально-статистических моделей для оптимизации наполнителя в полимерных композиционных материалах / Под ред. *В. А. Вознесенского и В. И. Соломатова*.— К. : УкрНИИГиМ, 1984.— 64 с.
  45. Методические указания по моделированию систем «смеси, технология — свойства» / *В. А. Вознесенский, Т. В. Ляшенко, В. В. Абакумов, А. Абдыкалыков*.— Одесса : ОИСИ, 1985.— 64 с.
  46. Моделирование технологии и свойств газосиликата : Исследование взаимосвязей между параметрами технологии и

- показателями свойств газосиликата по девятифакторному плану Рехтшафнера / *К. К. Эскуссон, А. Э. Кильксон, И. Ю. Эскуссон и др.*; НИПИ силикатобетон Минстройматериалов СССР. // Производство и применение силикатных бетонов.— Таллин, 1985.— С. 5—34.
47. Моделирование влияния полимерминеральных наполнителей на свойства полимерных композитов для ремонтно-восстановительных работ / *В. А. Вознесенский, И. И. Николов, И. В. Барабаш, В. В. Дьяченко* // Местные строительные материалы.— Омск, 1985.— С. 15—20.
  48. *Моисеев Н. Н.* Математические задачи системного анализа.— М. : Наука, 1981.— 487 с.
  49. *Моисеев Н. Н., Иванюков Ю. П., Столярова Е. М.* Методы оптимизации.— М. : Наука, 1978.— 352 с.
  50. *Налимов В. В.* Теория эксперимента.— М. : Наука, 1971.— 207 с.
  51. *Налимов В. В., Голикова Т. И.* Логические основания планирования эксперимента.— 2-е изд.— М. : Metallургия, 1981.— 151 с.
  52. Наполнители для полимерных композиционных материалов / Под ред. *Г. С. Каца и Д. В. Милевски*.— М. : Химия, 1981.— 736 с.
  53. *Нарисава И.* Прочность полимерных материалов.— М. : Химия, 1987.— 398 с.
  54. Неразрушающие методы испытания строительных материалов и конструкций / Рижский политехн. ин-т.— Рига, 1986.— 96 с.
  55. *Нильсен Л.* Механические свойства полимеров и полимерных композиций.— М. : Химия, 1978.— 310 с.
  56. *Новик Ф. С.* Планирование эксперимента на симплексе при изучении металлических систем.— М. : Metallургия, 1985.— 256 с.
  57. *Патуров В. В.* Полимербетоны.— М. : Стройиздат, 1987.— 286 с.
  58. *Повх И. Л.* Техническая гидромеханика.— Л. : Машиностроение, 1976.— 502 с.
  59. *Подвальный А. М., Проценко А. М.* Исследование проницаемости бетона на математических моделях // Защита строит. конструкций пром. зданий от коррозии / НИИЖБ Госстроя СССР.— М. : Стройиздат, 1973.— С. 149—157.
  60. *Попов Ю. П., Самарский А. А.* Вычислительный эксперимент.— М. : Знание, 1983.— 64 с.
  61. *Потапов Ю. Б., Селяев В. П., Любаев Б. М.* Композиционные строительные конструкции.— М. : Стройиздат, 1984.— 100 с.

62. Процессы и аппараты в технологии строительных материалов / *И. М. Борщ, В. А. Вознесенский, В. З. Мухин* и др.— К. : Вища шк., 1981.— 296 с.
63. *Райзер В. Д.* Методы теории надежности в задачах нормирования расчетных параметров строительных конструкций.— М. : Стройиздат, 1986.— 193 с.
64. *Резник В. Б.* Новые материалы и конструкции на основе полимеров в водохозяйственном строительстве.— К. : Будівельник, 1987.— 175 с.
65. *Рейклейтис Т., Рейвиндран А., Рэгсдел К.* Оптимизация в технике: В 2 кн.— М. : Мир, 1986.— Кн. 1.— 349 с.; Кн. 2.— 320 с.
66. Рекомендации по оптимальному проектированию трехслойных панелей ограждений с металлическими профилированными обшивками и средним слоем из пенопластов / *В. С. Коган, Т. В. Ляшенко, А. Л. Потап* и др.; ЛатНИИСтроительства, ЦНИИСК, им. Кучеренко.— Рига, 1979.— 55 с.
67. Сборник научных программ на Фортране / НИИЖБ.— М. : Статистика, 1974.— Вып. 1.— 316 с.; Вып. 2 — 224 с.
68. *Сильвестров Д. С.* Программное обеспечение прикладной статистики.— М. : Финансы и статистика, 1988.— 240 с.
69. Синтез физико-химических и математических методов исследования гидратации трехкальциевого силиката / *В. А. Вознесенский, Н. Д. Баровски, И. И. Радованов, Е. С. Шинкевич* // Тр. Каз. инж.-стр. ин-та.— Казань, 1981.— С. 22—26.
70. Системы автоматизированного проектирования: Учеб. пособие для вузов: В 9 кн./ Под ред. *И. П. Норенкова*.— М. : Высш. шк., 1986.— Кн. 5.— 144 с.
71. *Соболь И. М.* Метод Монте-Карло.— М. : Наука, 1985.— 78 с.
72. Современные методы оптимизации композиционных материалов / *В. А. Вознесенский, В. Н. Выровой, В. Я. Керш, Т. В. Ляшенко* и др.— К. : Будівельник, 1983.— 144 с.
73. *Соломатов В. И.* Технология полимербетонов и армополимербетонных изделий.— М. : Стройиздат, 1984.— 144 с.
74. *Соломатов В. И., Книппенберг А. К.* Исследование структуры и свойств полиэфирного полимербетона // Изв. вузов : Стр-во и архитектура.— 1977.— № 6.— С. 68—73.
75. *Соломатов В. И., Селяев В. П.* Химическое сопротивление композиционных строительных материалов.— М. : Стройиздат, 1987.— 261 с.
76. *Сухарева Л. А.* Полиэфирные покрытия: Структура и свойства.— М. : Химия, 1987.— 192 с.

77. Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей: Справочник / Под ред. В. В. Налимова.— М. : Металлургия, 1982.— 752 с.
78. *Татцль Г.* Оценка свойств строительных материалов с помощью мини-ЭВМ.— М. : Стройиздат, 1986.— 119 с.
79. Технологическая механика бетона // Тр. Рижск. политех. ин-та.— Рига : 1982.— 167 с.; 1984.— 145 с.; 1986.— 187 с.; 1987.— 197 с.
80. *Угинчус Д. А.* Высокопрочные бетонополимерные материалы.— К. : Будівельник, 1983.— 41 с.
81. *Федоров В. В.* Теория оптимального эксперимента.— М. : Наука, 1971.— 312 с.
82. Физико-химия многокомпонентных полимерных систем: В 2 т./ Под ред. Ю. С. Липатова.— К. : Наук. думка, 1986.— Т. 1.— 375 с.; Т. 2.— 383 с.
83. *Форсайт Д., Малькольм М., Моулер К.* Машинные методы математических вычислений.— М. : Мир, 1980.— 280 с.
84. *Фролов Ю. Г.* Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы.— М. : Химия, 1982.— 400 с.
85. *Хальд А.* Математическая статистика с техническими приложениями.— М. : Мир, 1956.— 664 с.
86. *Химмельбау Д.* Прикладное нелинейное программирование.— М. : Мир, 1975.— 534 с.
87. *Чалых А. Е.* Диффузия воды в полимерных системах.— М. : Химия, 1987.— 312 с.
88. *Чернин И. З., Смехов Ф. М., Жердев Ю. В.* Эпоксидные полимеры и композиции.— М. : Химия, 1982.— 232 с.
89. *Чоцишев К. Ч.* Технология полимербетонов с использованием барханных песков.— Ашхабад : Ылым, 1983.— 232 с.
90. *Шнейдер Д. Е., Черняк В. Г., Баркан Р. Д.* Возможности применения симплекс-решетчатых планов в методе Мак-Лина и Андерсона // Вопросы стр-ва.— 1974.— Вып. 3.— С. 91—94.
91. *Шуп Т.* Решение инженерных задач на ЭВМ.— М. : Мир, 1982.— 238 с.
92. *Эфрон Б.* Нетрадиционные методы многомерного статистического анализа.— М. : Финансы и статистика, 1988.— 263 с.
93. *Абаджиева Ц. Г.* Изследоване на основни якостни и деформациони характеристики на полимербетон чрез ултразвуков имульсен метод: Автореф. дис. ... канд. техн. наук.— София, 1976.— 22 с.
94. А. с. 16517 НРБ. Инжекционна композиция за възстановяване монолитността на повредени бетонни и стоманобетонни конструкции / *И. И. Николов, В. И. Лазаров* (1972).

95. А. с. 20170 НРБ. Метод за получаване на тръби от пластмаса / *Й. Т. Симеонов, Я. П. Иванов* (1978).
96. А. с. 31402 НРБ. Състав на нестигащ кит / *И. И. Николов* (1982).
97. А. с. 31403 НРБ. Състав на полимербетон / *И. И. Николов* (1982).
98. А. с. 31404 НРБ. Състав на инжекционна смес / *И. И. Николов* (1982).
99. А. с. 32040 НРБ. Състав на полимерен материал / *Я. П. Иванов, Р. К. Коцилкова* (1982).
100. А. с. 32205 НРБ. Метод на възстановяване на монолитността на напукани бетонни и стоманобетонни конструкции / *И. И. Николов* (1983).
101. А. с. 48333 НРБ. Импрегниращ състав / *И. И. Николов* (1985).
102. А. с. 51669 НРБ. Състав на полимерен материал / *Я. П. Иванов, Й. Т. Симеонов, Ю. И. Христова* и др. (1985).
103. *Вучков И., Йончев Х.* Планиране и анализ на експеримента при изследване на свойствата на смеси и сплави.— София : Техника, 1979.— 356 с.
104. *Гудев Н.* Полимербетони, полимерразтвори и саморазливни подови настилки.— София : Техника, 1981.— 134 с.
105. *Йончев Х.* Оптимизиране на многокомпонентни системи.— София : Техника, 1982.— 192 с.
106. Каталог последователно генерирани планове / *И. Н. Вучков, Х. А. Йончев, Д. Л. Дамгалиев* и др. // ВХТИ.— София, 1978.— 266 с.
107. *Коцилкова Р.* Върху реологичните свойства на напълнени термореактивни композиции: Автореф. дис. ... канд. техн. наук.— София, 1983.— 30 с.
108. Методически указания по приложение на идеите и методите на математическата теория на експеримента и изследвания по технология и материалознание / *В. А. Вознесенский, Т. В. Ляшенко, Б. Л. Огарков* и др.— Одеса — София : ОИСИ, Высш. ин-т архитектуры и стр-ва, 1984.— 72 с.
109. Механика и технология на композиционните материали / Матер. национал. конф.— В 4-х т.— София : Изд-во БАН, 1977—1985.— Т. I—IV.
110. *Николов И. И.* Възстановяване на монолитността на бетона.— София : Техника, 1979.— 118 с.
111. *Николов И.* Поверхностно замонолитване на пукнатини в стоманобетонни елементи и оглед предпазване на армировката от корозия // Стр-во и монтаж на промишлени обекти.— 1986.— № 4.— С. 3—8.

112. Организация и автоматизация на експерименталните изследвания 81 // Сб. докл. III конф.— Русе, 1981, т. 3, 287 с.
113. Симеонов Й., Иванов Я. Определяне специфичната повърхнина на свързващите вещества // Стр-во.— 1965.— № 5—6.— С. 18—22.
114. Симеонов Й., Христова Ю. Полимербетон : Структура, свойства и механично поведение на полиестерния полимербетон.— София : Изд-во БАН, 1980.— 236 с.
115. Статистически методи в експерименталните изследвания и контрола на качеството // Сб. докл. IV конф.— Варна, 1986, т. 3.— 141 с.
116. Физико-химическа механика / Сб. тр. — София : Изд-во БАН, № 2.— 1976.— 66 с.; № 3 — 1977.—69 с.; № 5 — 1979.— 83 с.; № 13 — 1986.— 87 с.
117. Cook R. D., Nachtsheim C. I. A Comparison of Algorithms for Constructing Exact D-optimal Designs // Technometrics.— 1980.— v. 22.— N 3.— p. 315...324.
118. Ivanov Ya., R. Kotsilkova. Rheological Properties of Highly Filled Polymer Composites// Proc. II Int. Congress on Chemical Engineering.— Monreal, 1981.— V. VII.— p. 308.
119. Ivanov Ya., V. Voznesenskii, T. Lyashenko.— On the Modelling of the Rheological Properties of Concentrated Disperse Systems // Proc. IX Int. Congress on Rheology.— Mexico, 1984.— Advances in Rheology.— vol. 4: Applications.— p. 517—522.
120. Lambrakis D. P. Experiments with Mixtures: Generalization of the Simplex-Lattice Design // J. R. S. S., ser. B., 1968,— V. 30.— N 1.— P. 123—136.
121. Mitchell T. J. An Algorithm for the Construction of «D-Optimal» Experimental Designs // Technometrics.— v. 16.— 1974.— N 2.— P. 203—210.
122. Polymers in Concrete // III Int. Congress on Polymers in Concrete, Koriyama.— 1981.— v. 1.— 729 p.
123. Sherman Ph. Industrial Rheology—Acad. Press: London — New York, 1970—422 p.
124. Simeonov Y., Ivanov Y. Influence of the Filling with Dispersed Mineral Fillers on the Rheological Behavior of Liquid Polymer Composition // Proc. of VII Int. Congress of Rheology.— Sweden, 1976.— P. 102—104.
125. Wake W. C. Fillers for Plastics.— London: ILIFFE, 1971.— 156 p.



# О Г Л А В Л Е Н И Е

Предисловие . . . . .	3
<b>Глава 1. Моделирование композиционных материалов как содержательная основа компьютеризации их производства . . . . .</b>	<b>6</b>
1.1. Математические модели и оптимизация качества композиционных материалов, технологии их производства и исследования . . . . .	6
1.2. Обеспеченность работоспособного состояния и риск отказа как вероятностные показатели качества системы (композиционного материала, технологии, моделей)	14
1.3. Комплекс типовых задач, решаемых по экспериментально-статистическим моделям . . . . .	21
<b>Глава 2. Технология использования математических моделей и вычислительной техники при анализе и оптимизации композиционных материалов . . . . .</b>	<b>55</b>
2.1. Технологическая схема моделирования . . . . .	55
2.2. Полиномиальные модели для систем «смеси, технология — свойства» . . . . .	64
2.3. Алгоритм оптимизации систем, содержащих линейно связанные элементы . . . . .	79
2.4. Выбор плана эксперимента . . . . .	86
2.5. Процедура последовательного регрессионного анализа . . . . .	95
2.6. Решение инженерных задач анализа и оптимизации композиционных материалов на основе экспериментально-статистических моделей . . . . .	97
<b>Глава 3. Оптимизация полимерсодержащих композитов для реконструкции строительных сооружений (модели с независимыми факторами) . . . . .</b>	<b>102</b>
3.1. Повышение работоспособности сооружений за счет рационального применения полимерсодержащих композитов . . . . .	102

3.2. Многокритериальный поиск состава водоэмульсионных эпоксидных композиций с поливинилхлоридным наполнителем . . . . .	105
3.3. Моделирование и поиск эпоксидных композиций, модифицированных добавками для повышения демпфирующих свойств композитов . . . . .	117
<b>Глава 4. Оптимизация наполнителей полимерных связующих для конструкционных композитов (модели с линейно связанными факторами) . . . . .</b>	<b>133</b>
4.1. Постановка задачи разработки конструкционных композитов пониженной полимероемкости на основе экспериментально-статистических моделей . . . . .	133
4.2. Анализ влияния наполнителей на структурообразование и реологические свойства композиций . . . . .	143
4.3. Влияние наполнителей на механические свойства полиэфирных связующих . . . . .	171
4.4. Обеспечение комплекса технологических и эксплуатационных свойств связующих . . . . .	183
<b>Глава 5. Новые виды материаловедческих и технологических задач, решаемых на основе математического моделирования . . . . .</b>	<b>189</b>
5.1. Проблемы оценки, моделирования и оптимизации вероятностных показателей и гарантированных уровней качества композиционных материалов . . . . .	189
5.2. Интерпретация эффектов в моделях при нарастающей степени риска . . . . .	196
5.3. Моделирование влияния состава эпоксидных композитов на вероятностные показатели их прочности (с использованием псевдокомпонентов) . . . . .	199
5.4. Оценка вероятностных показателей долговечности композита в агрессивной среде . . . . .	206
5.5. Оценка изменения тесноты связи между водопоглощением и пористостью композита под воздействием рецептурных факторов . . . . .	210
5.6. Модели нового вида «свойства — параметры распределения структурных элементов» в задачах прогнозирования тепломассообменных характеристик композитов . . . . .	215
5.7. Анализ устойчивости вязкости смеси на основе экспериментально-статистического и имитационного моделирования методом Монте-Карло . . . . .	221
<b>Список использованной литературы . . . . .</b>	<b>230</b>

Монография

*Вознесенский Виталий Анатольевич,  
Ляшенко Татьяна Васильевна,  
Иванов Ячко Павлов, Николов Иван Иванов*

# **ЭВМ И ОПТИМИЗАЦИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Художник обложки *А. Ф. Мороз*  
Художественный редактор *Б. Ф. Сушко*  
Технический редактор *А. М. Короб*  
Корректор *Г. Я. Василюшина*

ИБ № 3026

Сдано в набор 23.08.88. Подписано в печать 14.03.89.. БФ 05522. Формат 70×100<sup>1/32</sup>. Бумага типографская № 1. Гарнитура литературная. Печать высокая. Усл. печ. л. 9,75. Усл. кр.-отт. 10,07. Уч.-изд. л. 12,23. Тираж 1400 экз. Заказ № 8—1515. Цена 2 р. 60 к.

Издательство «Будивэльнык». 252053 Киев, ул. Обсерваторная, 25.

Отпечатано с матриц Головного предприятия РПО «Полиграфкнига» на Киевской фабрике печатной рекламы им. XXVI съезда КПСС. 252067, Киев-67, ул. Выборгская, 84.