

## ОБЛАСТИ ДОПУСТИМЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ В ПОЛНОМ И ЛОКАЛЬНЫХ ПОЛЯХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ

*Ляшенко Т.В. (Одесса)*

По структурированным моделям, описывающим поля свойств модифицированных эпоксидных композитов в координатах состава, определены области нефтестойких составов. С помощью метода Монте-Карло оцениваются объемы областей, рецептурные решения в которых обеспечивают требуемые уровни свойств.

**Введение.** Использование в строительном материаловедении концепции полей свойств материала, разрабатываемой в последнее десятилетие [1-7], позволяет извлечь принципиально новую информацию из эксперимента и получить нетривиальные научно-технические результаты. Одно из базовых понятий этой концепции – обобщающие показатели поля, числовые характеристики, количественно выражающие интересующие технолога особенности полей свойств.

**Натурный эксперимент и поле нефтестойкости.** На одном из этапов комплексного исследования полимерных композитов на основе эпоксидной смолы “Макро”, совместно с фирмой Антикор [8], исследовалась их нефтестойкость. Она оценивалась по нескольким критериям, в том числе по относительному снижению предела прочности при сжатии после экспозиции материала в нефти в течение 9 месяцев,  $K^P = R^P270/R28$ . В эксперименте варьировались четыре фактора, с выделением двух групп. В первую группу вошли дозировки добавок (в массовых частях, м.ч., на 100 м.ч. смолы), модифицирующих матрицу: органической – фурфурола,  $X1 = 5 \pm 5$ , и минеральной ионитной – цеолита,  $X2 = 10 \pm 10$ . Соответствие нижних уровней нулевому содержанию этих модификаторов позволяло оценить свойства композита с матрицей из чистой смолы “Макро” ( $x1 = x2 = -1$  при стандартной нормализации факторов [1]). Факторы второй группы характеризовали наполнение матрицы - варьировалось количество песка,  $X3$ , в диапазоне 0-300, и тонкомолотого диабазового наполнителя,  $X3$ , от 50 до 150. Натурный эксперимент поставлен по 18-ти точечному оптимальному плану, позволяющему построить для свойств композита квадратичные структурированные экспериментально-статистические (ЭС) модели.



$$K^P = 97.7 \begin{cases} + 2.2x_1 - 6.0x_1^2 + 2.6x_1x_2 \\ + 5.3x_2 + 3.8x_2^2 & \text{(a)} \\ - 3.0x_3 - 2.9x_3^2 & \circ \\ - 1.7x_4 - 6.0x_4^2 & \text{(b)} \end{cases} \begin{cases} \circ \\ -1.9x_1x_4 \\ +1.1x_2x_3 \\ -4.6x_2x_4 & \text{(c)} \end{cases} \quad (1)$$

Модель (1), представляя полное поле нефтестойкости  $K^P(x_1, x_2, x_3, x_4)$ , в пространстве всех рассматриваемых факторов, описывает и все возможные локальные поля. В частности, локальное поле  $K^P(x_1, x_2)$  в виде фрагмента

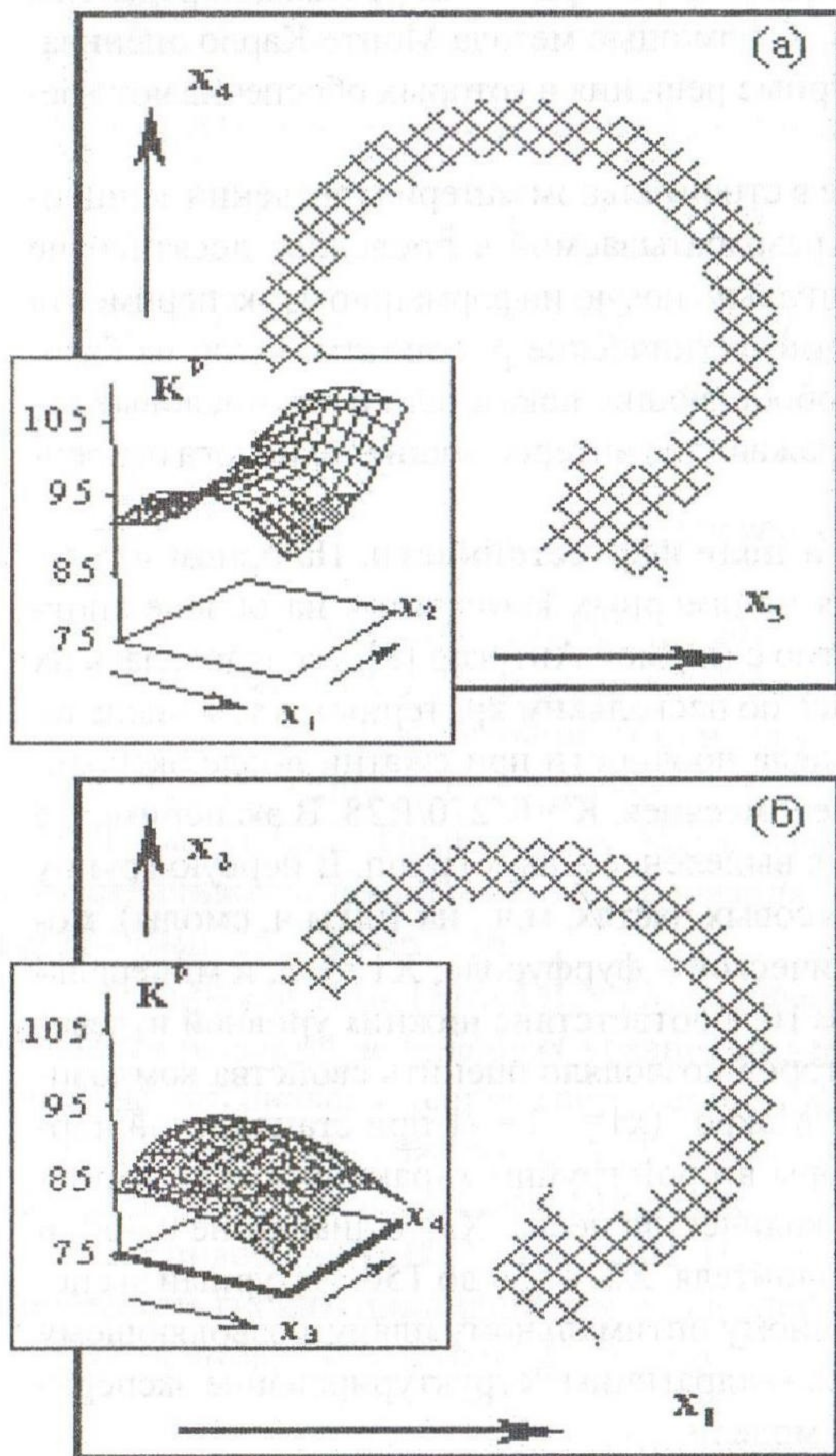


Рис. 1

гиперболического параболоида на рис. 1а. Факторы модификации матрицы  $x_1$  и  $x_2$ , формирующие это поле при фиксированном составе наполнителя, являются для него “градиентными”, поскольку именно они в данной ситуации создают “перепад” уровней  $K^P$ . При изменении содержания кварцевого песка  $x_3$  и тонкомолотого диабаз  $x_4$  изменяется и локальное поле  $K^P(x_1, x_2)$ , передвигаясь по факторной области  $\{x_3, x_4\}$ . Факторы  $x_3, x_4$  на рис. 1а - “изменяющие”. При этом поверхность поля перемещается вдоль оси  $K^P$  и может трансформироваться только за счет перехода к другому фрагменту того же гиперболического параболоида, поскольку модель (1) не содержит эффектов  $x_i^2x_j$  и/или  $x_ix_jx_k$ .

Альтернативная технологическая ситуация отображена на рис. 1б. Здесь градиентными факторами, формирующими локальное поле  $K^P(x_3, x_4)$  при фиксированных



условиях модификации, являются условия наполнения. Поверхность поля, в виде фрагмента эллипсоида, изменяется под влиянием  $x_1$  и  $x_2$ .

В соответствии со структурированием системы факторов при постановке задачи, блок (а) в модели (1) описывает локальное поле  $K^P(x_1, x_2)$  при среднем уровне изменяющихся факторов  $x_3 = x_4 = 0$ , блок (b) - локальное поле  $K^P(x_3, x_4)$  при среднем уровне  $x_1 = x_2 = 0$ . Связывает оба эти блока блок (с) - поверхности локальных полей  $K^P(x_1, x_2)$  и  $K^P(x_3, x_4)$  трансформироваться только при наличии в (с) ненулевых эффектов.

**Оценка области допустимых решений в полном поле нефтестойкости.** Поле свойства  $Y$  материала, описанное ЭС-моделью, отображается семейством изоповерхностей  $Y(x) = \text{const}$ . Особую роль в технологических задачах играет поверхность, соответствующая уровню  $Y = Y_{\text{треб}}$ , требуемому по условиям конкретной задачи (по стандарту, договору и т.п.). Это граница, которая делит поле на две области - область допустимых решений (в любой ее точке  $Y \geq Y_{\text{треб}}$ ) и запрещенную область ( $Y < Y_{\text{треб}}$ ). Одним из основных обобщающих показателей полей свойств материала, характеризующим устойчивость технологии, является объем допустимой области,  $0 \leq \Omega \leq 100\%$ , относительный к исследуемому факторному пространству (в нормализованных переменных). Чем ближе значение  $\Omega$  к нулю, тем сложнее (дороже) технологу реализовать выбранное в этой области эффективное решение.

Величина  $\Omega$  соответствует геометрической вероятности таких сочетаний уровней рецептурно-технологических факторов  $x_i$  в пространстве  $x_i \leq |1|$ , реализация которых обеспечивает  $Y_j \geq Y_{\text{треб}}$ , и определяется отношением объемов допустимой области и факторного пространства. Для расчета объема допустимой области любой конфигурации используется метод Монте-Карло.

Процедура расчета [9], выполняемая ранее на "больших" ЭВМ, сегодня может быть реализована с использованием стандартных приложений, в частности, Excel (если допустима погрешность  $\pm 0.001$ , что вполне удовлетворяет большинство задач материаловедения). В электронной таблице, используя "Пакет анализа", необходимо генерировать 10000 равномерно распределенных в диапазоне от -1 до +1 случайных чисел для  $k$  переменных (в рассматриваемой задаче  $k = 4$ ), записать модель как формулу со ссылками на  $k$  случайных переменных, получить 10000 значений  $Y$ , провести их сортировку и посчитать число ячеек  $n$ , где  $Y \geq Y_{\text{треб}}$ . Объем допустимой области -  $\Omega = 0.01n$ .

При требовании к коэффициенту нефтестойкости  $K^P \geq 0.95$  область допустимых решений в поле, описанном моделью (1), составляет 41%. Этот уровень, как показывает опыт решения материаловедческих задач, вполне



достаточен для признания допустимых технологических решений вполне устойчивыми.

Основанные на методе Монте-Карло численные методы оценки объема допустимой области позволяют оперативно ответить на ряд важных вопросов об устойчивости технологии и об эффективности выбора составов, режимов и т.п.

На рис. 2а показана зависимость объема области допустимых решений от уровня требования  $K^P$  и  $K^P_{\text{треб}}$ . Все составы полимерного композита в исследованной области отвечают  $K^P$  и  $K^P_{\text{треб}} = 0.8$ . Наиболее интенсивно  $\Omega$  сокращается при переходе от  $K^P_{\text{треб}} = 0.9$  к  $K^P_{\text{треб}} = 0.95$ . Если область  $\Omega$  оказывается меньше 15%, то технологические решения, становятся, как правило, неустойчивыми из-за увеличения в ней доли, связанной с риском моделирования [1, гл.1]. Поэтому выполнить требование  $K^P$  и  $K^P_{\text{треб}} = 0.98$  практически невозможно без обеспечения технологии регуляторами повышенной точности.

Метод Монте-Карло позволяет оценить размер допустимой области и в более сложных ситуациях, когда к материалу предъявляются не одно, а несколько требований. Так, если при выборе состава композита необходимо, кроме требования  $K^P$  и  $K^P_{\text{треб}} = 0.98$ , обеспечить также прочность  $R \geq R_{\text{треб}} = 80$  МПа и поглощение нефти  $P \leq P_{\text{треб}} = 0.5\%$  (по массе), то соответствующие модели [8], позволят получить оценки, отображенные на рис 2б.

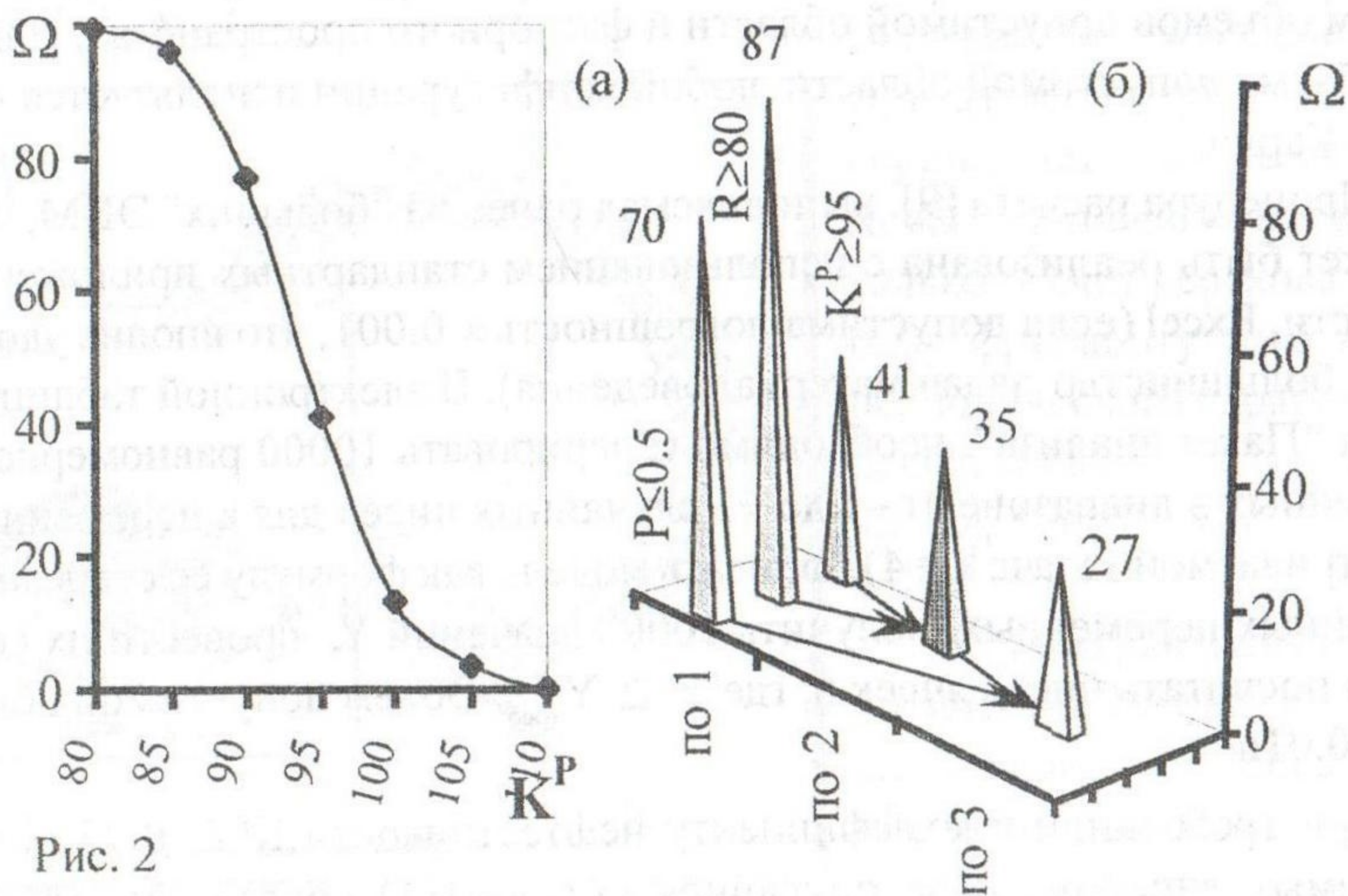


Рис. 2



**Изменение объема допустимой области в локальных полях.** Объем области допустимых решений в локальном поле, в частности, сформированном градиентными факторами  $x_1$  и  $x_2$  (рис. 1а),  $\Omega_{12}$ , определяется по описанному выше алгоритму. Модель для этого получают из полной модели, в частности (1), после подстановки в нее тех фиксированных значений изменяющих факторов  $x_3$  и  $x_4$ , при которых формируется локальное поле.

Оценка роли изменяющих факторов  $x_3$  и  $x_4$  в формировании области допустимых решений в локальных полях  $K^P(x_1, x_2)$  проводится по вторичной модели  $\Omega(x_3, x_4)$ . Для ее построения проводится вычислительный эксперимент в факторном пространстве  $\{x_3, x_4\}$ , по оптимальному плану, допускающему построение неполных кубических или биквадратных полиномов. Моделируется величина  $\varepsilon \Omega = \ln(\Omega / (100 - \Omega))$ , что гарантирует получение расчетных значений  $\Omega$  в диапазоне от 0 до 100%. В данном случае, по откликам – оценкам  $\Omega$ , рассчитанным в 9 точках плана ПФЭ  $3^2$ , построена модель (2)

$$\varepsilon \Omega_{12} = 0.18 \quad \circ \quad -1.66x_3^2 + 0.17x_3x_4 + 0.18x_3^2x_4 + 1.48x_3^2x_4^2 - 1.76x_4 - 3.02x_4^2 - 0.17x_3x_4^2 \quad (2)$$

Поле обобщающего показателя  $\Omega_{12}$  с отчетливым оптимумом при средних уровнях песка ( $150 \pm 75$  м.ч.) и наполнителя ( $85 \pm 20$  м.ч.) показано на рис. 3а. При большом насыщении тонкомолотым наполнителем (более 115-120 м.ч) ни один из составов дисперсной фазы не дает устойчивых технологических решений по модификаторам матрицы.

Для факторов  $x_3$  и  $x_4$ , но выступающих в роли градиентных (рис. 1б), изменение объема области допустимых соотношений песка и наполнителя при изменении дозировок модификаторов матрицы, поле показателя  $\Omega(x_1, x_2)$ ,

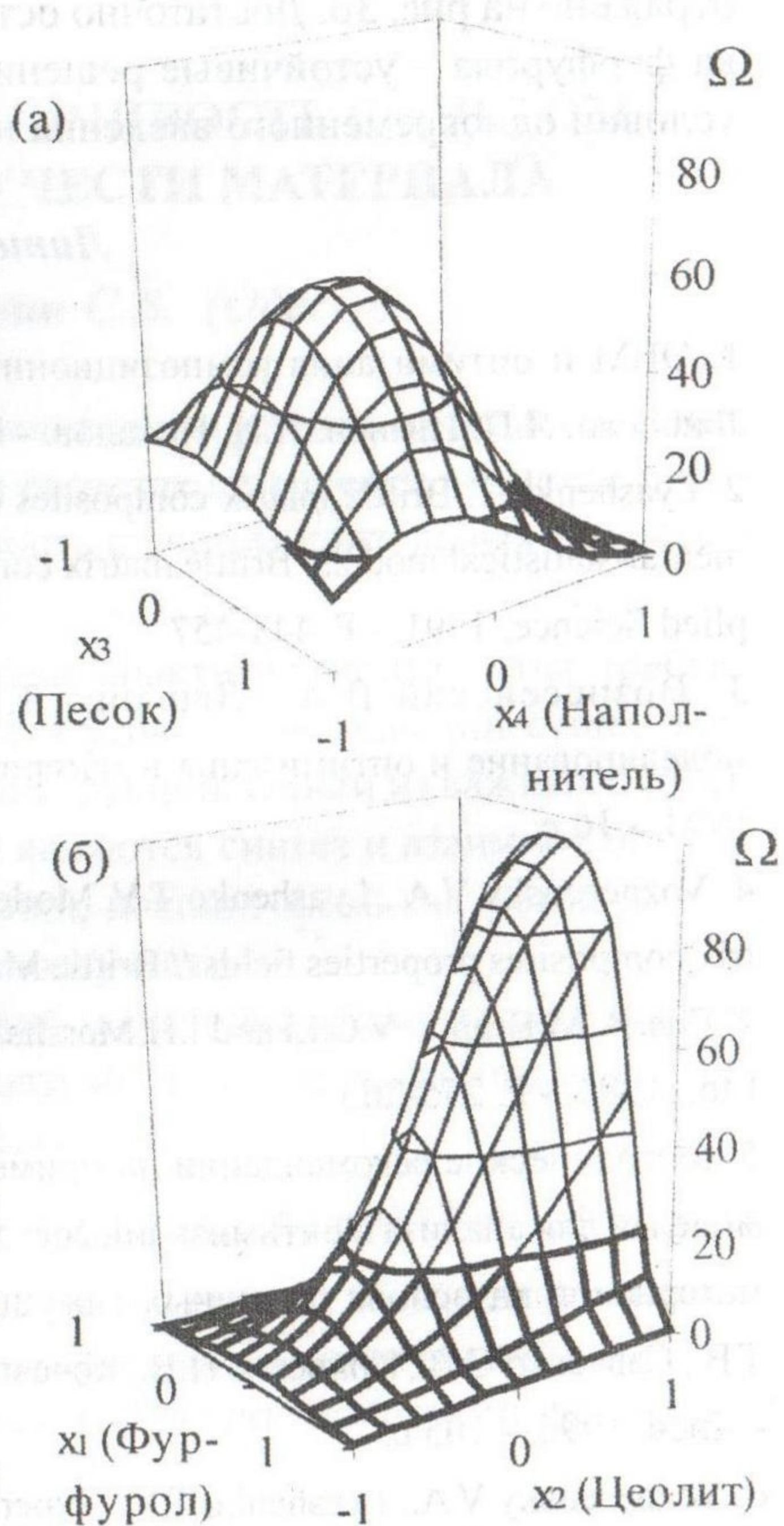


Рис. 3



отражено на рис. 3б. Достаточно осторожного управления требует дозировка фурфурола – устойчивые решения возникают в диапазоне  $5 \pm 3$  м.ч при условии одновременного введения не менее 8-10 м.ч. ионитной добавки.

### *Литература*

1. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я.П. Иванов, И.И. Николов. - К.: Будивэльнык, 1989. - 240 с.
2. Lyashenko T. Brittle matrix composites optimization on the base of structured experimental-statistical models/ Brittle matrix composites 3. - London, New-York: Elsevier Applied Science, 1991. - P. 448-457.
3. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация в материаловедении. - К.: О-во "Знание" Украины, 1993. - 16 с.
4. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. Modelling, analysis and optimization of brittle matrix composites properties fields // Brittle Matrix Composites 4 : Proc. IV Int. Symp. BMC 4. Eds. A.M.Brandt, V.C.Li and I.H.Marshall. - Cambridge and Warsaw : Woodhead Publ. Ltd., 1994. - P. 255-263
5. Методические рекомендации по применению экспериментально-статистических моделей для анализа и оптимизации состава, технологии и свойств композиционных материалов на основе щелочных вяжущих систем / Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Савченко С.В., Кривенко П.В., Кочевых М.А., Пушкарева Е.К. - ОГАСА, НИИВМ - Киев, 1996. - 105 с.
6. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V., Experimental-statistical modelling in computational materials science. – Одесса, Изд. ОГУ "Астропринт", 1998. – 32 с
7. Ляшенко Т.В. Структурированные экспериментально-статистические модели в компьютерном материаловедении // Модели и системы : Сб. науч. тр. Харьк. воен. ун-та. - Харьков, 1999, вып. 1 – С. 53-57.
8. Multi-criterion analysis of the influence of composition on the quality of modified epoxy resin polymer concrete / Lyashenko T., Voznesensky V., Novak V., Kondratyuk V., Karaev V. // Polymers in Concrete: Proc. 3rd South. Afric. Conf. - Iohannesburg, 1997. - P. 157-166.
9. Разработка методического и программного обеспечения анализа и оптимизации технологии и свойств многокомпонентных материалов по блокам регрессионных моделей: Отчет о НИР / Одес. инж.-стр. ин-т., № ГР 01860038945. – Одесса, 1987. - ч.1. – 97 с.