

Т.В. Ляшенко, В.А. Вознесенский

МЕТОДОЛОГИЯ РЕЦЕПТУРНО- ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ

В КОМПЬЮТЕРНОМ СТРОИТЕЛЬНОМ
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

COMPOSITION-PROCESS FIELDS METHODOLOGY
IN COMPUTATIONAL BUILDING MATERIALS SCIENCE

Tatiana V. Lyashenko
Vitaly A. Voznesensky

**Т.В. Ляшенко
В.А. Вознесенский**

**МЕТОДОЛОГИЯ
РЕЦЕПТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ
В КОМПЬЮТЕРНОМ
СТРОИТЕЛЬНОМ
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ**

**Tatiana V. Lyashenko
Vitaly A. Voznesensky**

**COMPOSITION-PROCESS FIELDS METHODOLOGY
IN COMPUTATIONAL BUILDING MATERIALS SCIENCE**

Одесса
«Астропринт»
2017

УДК 691:519.24
Л99

Рецензенты:

профессор *Л. Чарнецкий*, доктор технических наук, ученый секретарь Научно-исследовательского института строительства (Варшава);
профессор *В.И. Кондращенко*, доктор технических наук, профессор кафедры «Строительные материалы и технологии» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет транспорта (МИИТ)»

Рекомендовано к печати ученым советом Одесской государственной академии строительства и архитектуры (*протокол № 1 от 5 октября 2017 года*)

Ляшенко Т.В.

Л99 Методология рецептурно-технологических полей в компьютерном строительном материаловедении = Composition-Process Fields Methodology in Computational Building Materials Science : [монография] / Т.В. Ляшенко, В.А. Вознесенский = Tatiana V. Lyashenko, Vitaly A. Voznesensky. — Одесса: Астропринт, 2017. — 168 с.

ISBN 978–966–927–311–6

Представлена методология исследований и проектирования многокомпонентных композиционных материалов. Изложены базовые положения и основные понятия, методы анализа связей рецептуры, параметров технологии, структуры и свойств композитов, их многокритериальной оптимизации. Рассмотрены примеры применения методологии при разработке строительных композитов разного назначения с разными матрицами. Методология помогает получить новое знание о материалах, обеспечить требуемые свойства, сберечь ресурсы.

Монография адресована исследователям, инженерам, преподавателям, студентам и аспирантам в области разработок и производства высококачественных строительных и других композиционных материалов.

УДК 691:519.24

The methodology of studying and designing multicomponent composite materials is presented. Its framework, main notions, the methods for analysing the relations of formulation, process parameters, structure and properties of the composites and for their multicriterial optimisation are described. Applications of the methodology when developing different purpose building composites with various matrices are considered. The methodology helps to get new knowledge about the materials, to provide required properties, and save resources.

The monograph is addressed to researchers and engineers, to professors and doctoral and master's students in the field of development and production of high performance composite materials.

ISBN 978–966–927–311–6

© Ляшенко Т.В.,
Вознесенский В.А., 2017

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7
Основные обозначения и сокращения	9
Введение. Предпосылки	11
В.1. Типология математических моделей в строительном материаловедении	13
В.2. О компьютерном материаловедении	18
В.3. Принимаемые условия и установки	23
Глава 1. Рецептурно-технологические поля и их обобщающие показатели	26
1.1. Понятие поля свойства	26
1.2. Условия исследования, на данных которого представлены основы методологии рецептурно-технологических полей (тест-задача, карбамидный композит)	27
1.3. Полное и локальные поля	29
1.4. Обобщающие показатели полей	32
1.5. Случайное сканирование полей для расчета обобщающих показателей	37
1.6. Моделирование обобщающих показателей	41
1.7. Однофакторные локальные поля в зонах экстремумов полного поля	44
Глава 2. Структурирование системы факторов. Структурированные экспериментально-статистические модели	47
Глава 3. Рецептурно-технологические поля: модельно-детерминированные, гарантированного уровня свойства, случайные	53
3.1. Модельно-детерминированные поля. Функция дисперсии предсказания	54
3.2. Поля гарантированного и случайного уровней свойства	58
Глава 4. Анализ корреляции свойств	62
4.1. Полное и локальные поля прочности карбамидного связующего	64
4.2. Результаты натурального эксперимента	67
4.3. Вычислительный эксперимент для анализа корреляции свойств	67

4.4. Можно ли оценить истираемость по динамическому модулю упругости?	73
4.5. О результатах анализа корреляции свойств разных композитов	
4.5.1. Товарный бетон	75
4.5.2. Серпентинитовый бетон	76
4.5.3. Виброгасящий полимерный композит	76
4.5.4. Шлако-щелочные вяжущие для жаростойких бетонов	79
4.5.5. Другие результаты	84
Глава 5. Изопараметрический анализ	86
5.1. Полное поле вязкости наполненной карбамидной смолы при скорости сдвига 1 с^{-1} . Локальные поля трех свойств при среднем наполнении	87
5.2. Вычислительный эксперимент для изопараметрического анализа (равновязкие карбамидные композиции)	88
5.3. Изопараметрический анализ и эффект пластификации полимерных связующих за счет состава наполнителя	93
5.4. Анализ шести свойств серпентинитового бетона с марочной прочностью $R = 10 \text{ МПа}$	101
5.5. Анализ свойств модифицированных эпоксидных растворов	103
Глава 6. Локальные поля с критериальными границами для анализа многомерных связей свойств и факторов	106
6.1. Методологические основы вычислительного эксперимента	107
6.2. Увеличение декремента затухания композита для демпфирования ударно-вибрационных колебаний – изменения состава и свойств	109
6.3. Условия и результаты вычислительного эксперимента на локальных полях свойств композитов разной вязкоупругости	113
6.4. Девятифакторные РТ-поля с критериальными границами при исследовании автоклавного ячеистого бетона	118
Глава 7. Многокритериальная оптимизация в многофакторном рецептурно-технологическом поле	121
7.1. Общая постановка задачи	121
7.2. Алгоритм поиска компромисса – итерационное случайное сканирование рецептурно-технологических полей	122
7.3. О решенных задачах компромиссной оптимизации строительных композитов	128
Послесловие	137
Литература	138
Приложение 1. Об истории экспериментально-статистического моделирования	153
Приложение 2. Несколько синтезированных планов эксперимента для факторных систем «смесь, технология»	161

CONTENTS

Preface	7
List of symbols and abbreviations	9
Introduction. Backgrounds	11
1.1. Typology of mathematical models in building materials science	13
1.2. On computational materials science	18
1.3. Accepted conditions and means	23
Chapter 1. Composition-process fields and their generalising indices	26
1.1. Notion of the field of the property	26
1.2. Conditions of the study, on data of which the basics of composition-process fields methodology are presented (carbamide composite)	27
1.3. Whole and local fields	29
1.4. Generalising indices of the fields	32
1.5. Random scanning of the fields to calculate generalizing indices	37
1.6. Modelling of generalizing indices	41
1.7. One-factor local fields in zones of whole field extrema	44
Chapter 2. Structuring factor system.	
Structured experimental-statistical models	47
Chapter 3. Composition-process fields: model-determinate, of guaranteed property level, random	53
3.1. Model-determinate fields. Prediction variance function	54
3.2. The fields of guaranteed and random property level	58
Chapter 4. Analysis of properties correlation	62
4.1. Whole and local fields of strength of carbamide binder	64
4.2. Results of natural experiment	67
4.3. Computational experiment to analyse properties correlation	67
4.4. Can abrasion resistance be estimated by dynamic modulus of elasticity?	73
4.5. On results of analysis of properties correlation of various composites	75
4.5.1. Ready mix concrete	75
4.5.2. Serpentinite concrete	76

4.5.3. Damping vibration polymer composite	76
4.5.4. Slag-alkali binders for heat resistant concretes	79
4.5.5. Other results	84
Chapter 5. Isoparametric analysis	86
5.1. Whole field of viscosity of the filled carbamide resin at shear rate 1 s^{-1} . Local fields of three properties at medium filling	87
5.2. Computational experiment for isoparametric analysis (isoviscous carbamide compositions)	88
5.3. Isoparametric analysis and effect of plasticization of polymer binders due to filler composition	93
5.4. Analysis of six properties of serpentinite concrete that has strength $R = 10 \text{ MPa}$	101
5.5. Isoparametric analysis of the properties of modified epoxy mortars	103
Chapter 6. Local fields with criterion borders to analyse multidimensional relations of properties and factors	106
6.1. Methodological base of computational experiment	107
6.2. The increase of damping decrement of the composite for damping shock-vibration oscillations – variations in composition and properties	109
6.3. Conditions and results of computational experiment on local fields of the properties of composites of different viscoelasticity	113
6.4. Nine-factor CP-fields with criterion borders when studying autoclaved aerated concrete	118
Chapter 7. Multicriterial optimisation in multifactor composition-process field	121
7.1 General statement of the problem	121
7.2. Algorithm of the search for compromise CP-conditions – iterative random scanning of CP-fields	122
7.3. About solved tasks of compromise optimisation of building composites	128
Afterword	137
References	138
Attachment 1. On the history of experimental-statistical modelling	153
Attachment 2. Several synthesised designs of experiment for factor systems "mixture, process"	161

Предисловие – кому и в чем может быть полезна эта книга

Книга может пригодиться, оказать существенную помощь, показать дорогу к эффективным результатам и возможным открытиям тем, кто разрабатывает и исследует композиционные материалы и другие многокомпонентные дисперсные системы. Из многообразия таких систем выделены строительные материалы (объекты исследований авторов). Это могут быть:

- неорганические и органо-минеральные вяжущие, полимерные связующие, многокомпонентные вяжущие системы с добавками молотого шлака и золы уноса, с другими минеральными и химическими добавками;
- пасты и растворы на разных матрицах, в частности, ремонтные и защитные композиции;
- сухие строительные смеси разного назначения;
- другие высокофункциональные материалы, включая бетоны.

Книга может быть полезной в том, чтобы:

- рационально организовать эксперимент, имея в виду наилучшее соотношение экспериментальных затрат и получаемых данных о поведении материала, позволяющих построить модели зависимостей его характеристик от параметров рецептуры и технологии;
- при ограниченных затратах на реальный эксперимент (часто ресурсоемкий), извлечь скрытую в его данных полезную информацию с помощью вычислительных экспериментов – на моделях;
- выявить и количественно охарактеризовать связи рецептурно-технологических условий, характеристик возникающих структур и свойств технологических смесей и готовых продуктов, имитируя в вычислительных экспериментах уровни этих критериев для любых материалов в исследуемых диапазонах составов и параметров обработки;

- определить допустимые рецептурно-технологические решения (гарантированно обеспечивающие требования спецификаций), оптимальные решения (по тому или иному критерию) или компромиссно оптимальные по нескольким критериям качества материала и ресурсосбережения.

Книга задумывалась еще в 1999 г., когда уже сложилась концепция рецептурно-технологических полей свойств материалов и были опробованы ее основные рабочие инструменты.

Летом 2007 года (к этому времени был разработан ряд новых методик) Виталий Анатольевич Вознесенский (1934-2012) выполнил множество расчетов и подготовил массу рисунков для нового замысла подобного издания, который не удалось реализовать при его жизни. Считая своим долгом сделать это, я решила поставить на обложку имя В.А. Вознесенского как соавтора предлагаемого текста.

Концепция рецептурно-технологических полей и ее операционное обеспечение позволили сформировать методологию исследований и проектирования композиционных материалов, которая вошла в практику компьютерного строительного материаловедения, имеет потенциал развития и перспективы применения и которой посвящена эта книга.

Благодарю профессора Леха Чарнецкого, многие годы возглавлявшего кафедру технологии строительных материалов в Варшавском технологическом университете, и профессора Валерия Ивановича Кондращенко – за то, что внимательно прочли рукопись монографии, за советы и замечания.

Татьяна Ляшенко

Основные обозначения и сокращения

- Y – зависимая переменная, выход системы, отклик, критерий, свойство
 x – независимая переменная, вход системы, фактор, нормализованный (безразмерный) фактор
 \mathbf{x} – вектор факторов
 X – натуральный фактор (в натуральных единицах измерения)
 v или w – линейно связанные смесевые факторы, доли компонентов смеси
 k – количество факторов
 q – число компонентов смеси
 p – число взаимонезависимых факторов в системах со смесями
 $Y(\mathbf{x})$ – поле свойства Y в координатах вектора \mathbf{x}
 Ω_x – область полного поля (всех k факторов)
 \mathbf{x}_{gr} – вектор градиентных факторов, формирующих локальное поле
 \mathbf{x}_{ch} – вектор факторов, изменяющих локальное поле
 Ω_{gr} – область локального поля
 Ω_{ch} – область изменяющих факторов
 G – обобщающий показатель поля
 Δ – абсолютный перепад
 δ – относительный перепад, логарифмический декремент затухания колебаний
 Ω – размер области допустимых x
 s_e – ошибка эксперимента
 α – риск ошибки статистической гипотезы
 b – оценка коэффициента полиномиальной модели
 \mathbf{D} – корреляционно-дисперсионная матрица коэффициентов модели
 $d(\mathbf{x})$ – функция дисперсии предсказания
 $r, r_{Y_i Y_j}, r\{Y_i Y_j\}, r\{\mathbf{x}_{gr}\}$ – парный коэффициент корреляции, с указанием пары критериев, факторов локальных полей
 a_1 – наклон линейной корреляционной модели

f – относительная частота

s – стандартное отклонение, номер итерации

Знаки: \in – принадлежность, \subset, \subseteq – включение,

\sim – соответствие, $/$ – «при условии»

$\{ \}$ – содержат указания на критерий, факторы поля, другие условия и признаки

F, SC, CA – степень наполнения (карбамидного связующего), доли в наполнителе карбида кремния и крупных зерен андезита

A, R, η, E, K_w – износостойкость, прочность, вязкость, модуль упругости, коэффициент водостойкости

M – система (подсистема) смесевых факторов, «смесь»

T – система (подсистема) взаимонезависимых факторов, «технология»

Q – качество, комплекс свойств в системах «смеси, технологии – свойства»

ВЭ – вычислительный эксперимент

ефп – единица расстояния в факторном пространстве

ИП – изопараметрический

ИПА – изопараметрический анализ

КМВ – компьютерное материаловедение

КСМВ – компьютерное строительное материаловедение

ММК – метод Монте-Карло

МНК – метод наименьших квадратов

МРВЭ – матрица результатов вычислительного эксперимента

МРТП – методология рецептурно-технологических полей

НЭ – натурный эксперимент

РТ – рецептурно-технологический

РТП – рецептурно-технологическое поле

СИМ – структурно-имитационная модель

УМФ – уравнение математической физики

ЭС-модель – экспериментально-статистическая модель

ЭСМ – экспериментально-статистическое моделирование

RAV – диапазон допустимых значений

RC – диапазон компромисса

RPV – диапазон возможных значений

ВВЕДЕНИЕ – предпосылки

Большинство исследований в современном строительном материаловедении направлено на создание высококачественных композиционных материалов, наилучшим образом отвечающих своему назначению. В этом смысле их стали называть высокофункциональными [1-3]. Таким материалом может быть и высокопрочный бетон для конструкций моста, и быстротвердеющий раствор низкой прочности для кратковременного закрепления породы.

Назначение диктует комплекс требований к критериям качества материала на разных этапах его жизни: к характеристикам структуры, технологическим и эксплуатационным свойствам; к критериям стойкости, уровень которых определяет время службы, особенно при работе под жесткими воздействиями, в агрессивных, низко- и/или высокотемпературных средах; к надежности, гарантированности свойств в системах, отказ которых приводит к недопустимым последствиям; к экологическим критериям «чистоты» технологии, утилизации отходов, ресурсосбережения и др. Концепция устойчивого развития [4] выдвигает, в частности, требования к обеспечению стойкости и долговечности бетонов. Это позволило бы сократить выбросы CO₂ от производства цемента, уменьшить нагрузку на исчезающие источники природных заполнителей, смягчить проблему вывоза бетона разрушенных конструкций, снизить расходы на ремонт [2].

Современные производители вынуждены создавать новые высоко технологичные продукты в рекордные сроки, повышая при этом и их качество, и эффективность процессов, в узком и широком смысле. Последнее означает, что хотя **увеличение долговечности** достигается, как правило, **за счет высокой «начальной» стоимости собственно материала**, это может **снизить затраты «в целом», оказаться эффективным** для включающей материал системы. Такой высококачественный материал оказывается конкурентоспособным.

При этом подразумевается **эффективность всей жизни материала**, «от рождения до смерти» (от идеи, через исследование, конструирование и производство, при эксплуатации и деградации, до утилизации). Это соответствует со-

временной философии качества – гарантировать качество, строя его с самого начала жизни продукта, с замысла, проекта. Принцип обеспеченности качества представляет компромисс, смягчает противоречие между тенденцией улучшения качества жизни людей и необходимостью экономить ресурсы.

Проектирование качества (*Quality by Design, QbD*) означает, что качество должно быть заложено в продукт при его разработке. Для последующего воплощения **должны быть назначены** такие **параметры состава и процесса производства** материала, которые обеспечат требуемые или улучшенные эксплуатационные свойства, в том числе устойчивость и надежность, и как следствие, максимальную эффективность его применения.

Разрабатываемые композиционные материалы – сложные, гетерогенные, многокомпонентные системы. Само понятие «композит» указывает на принципиальную возможность найти рецептурные решения, которые бы удовлетворяли требованиям, выдвигаемым тем или иным назначением. Реализовать такую возможность помогает увеличение числа компонентов, ставшее тенденцией [5], «магистральным направлением» [6] в разработках строительных композитов. Это многокомпонентные вяжущие системы, комплексные модификаторы, включающие десятки химических добавок и активных минеральных компонентов разной дисперсности, модифицированные полимерные связующие, полифракционные наполнители и заполнители, гибридные волокнистые наполнители и другие **многокомпонентные компоненты многокомпонентных систем**, в частности, таких как полимерминеральные сухие смеси.

Характерна «**вложенная**» **многокомпонентность**. Увеличение количества компонентов и их подсистем – своего рода вызов строительному материаловедению, поскольку ему приходится анализировать и выбирать рецептурно-технологические решения из необозримого многообразия вариантов.

При разработке любых многокомпонентных композиций (на минеральных или органических связующих, твердеющих естественно или при тепловой обработке, конструкционных или отделочных и т. д.) приходится решать проблемы **количественного анализа и обеспечения свойств на разных стадиях существования материала** (свойств смеси, характеристик формирующейся структуры, функциональных свойств композита), **в их связи с многокомпонентным составом и параметрами процессов**.

Параметры рецептуры и технологии (включая условия эксплуатации), уровни которых можно назначить, зафиксировать, составляют **вектор рецептурно-технологических (РТ) факторов** $x = (x_1, \dots, x_k)$. Критерии качества Y – технологические и структурные характеристики материала на разных стадиях, экс-

плуатационные свойства и **любые** другие отклики* на изменения управляемых входов x могут быть обобщенно названы **свойствами**.

Схема на рис. В.1 подчеркивает природу случайных величин Y , характеризующих реакцию структуры материала на управляемые воздействия x и в силу этого представляющих **информационную базу для формирования желаемых структур за счет тех или иных значений РТ-факторов**.

Очевидно, что для количественного анализа связей между факторами x и критериями Y и для «закладки качества в проект» (т.е., для назначения состава и режимов, которые обеспечат заданные или улучшенные уровни комплекса свойств) необходимы математические модели этих связей. По таким моделям могут решаться и прямые задачи материаловедения (прогноза, оценки Y), и обратные (проектирования, определения допустимых или лучших x) [7].

В.1. Типология математических моделей в строительном материаловедении.

Математические модели – неотъемлемые составляющие этой мультидисциплинарной отрасли науки, на всех уровнях рассмотрения материала (от атомно-молекулярного до материала в конструкции); сформирована их типизация [8, с. 9-14; 9, с.14-16; 10, 11]. Выделены следующие пять типов различных по своей природе моделей, ориентированных на те или иные цели моделирования, в той или иной степени связанных с использованием компьютерных средств.



Рис. В.1. Схематическое изображение связей при рассмотрении цепи «рецептура, технология → структура → свойства»

* Среди них могут быть и стоимостные критерии, а также параметры процессов (гидратации, образования поровой структуры, перколяции...).

1. Основанные на фундаментальных законах **уравнения математической физики** (УМФ), описывающие процессы тепломассообмена и структурообразования в дисперсных системах, течение жидкостей, напряженно-деформированное состояние материала... Особенности и проблемы их применения в материаловедении, как подчеркивают Б.В. Гусев и А.С. Файвусович [12], заключаются в том, что приходится описывать совокупности многостадийных последовательных и параллельных физических и химических процессов, используя законы и зависимости разных научных дисциплин, учитывая структурные особенности среды и др. Компьютеры нужны, прежде всего, для решения численными методами формулируемых затем краевых задач. Важные для **анализа** механизмов структурообразования и деструкции, обобщенно характеризуя материалы того или иного класса, УМФ не выражают связей свойств с многокомпонентным составом, знание которых необходимо для конструирования (**синтеза**) конкретных материалов конкретного назначения.

2. **Концептуальные модели**, основанные на идеализированных (механических, физико-химических ...) представлениях о материале. Такую модель сначала выражают вербально, как в примере [8, 9] с реологическим телом Максвелла: «пусть тело состоит из пружины и поршня, движущегося внутри вязкой жидкости». Далее модель описывается аналитически дифференциальными (модель Максвелла) или алгебраическими уравнениями (распределение напряжений в образце, представленном системой конечных элементов [13]), геометрическими соотношениями (укладка зерен-шаров в объеме [14, 15]), кинетическими уравнениями (устойчивость свободнодисперсных систем [16]). К этому типу относятся и формулы традиционных расчетов состава бетона (включаемые в компьютерные системы проектирования составов [17]), модели гидратации цементов и структурообразования наполненных полимеров, коррозии цементных и дегградации полимерных композитов и т.д.

В концептуальном основании таких математических моделей заложено и их преимущество – «физическая» интерпретируемость, и недостаток – может быть корректно описана символически далекая от реальности концепция. Следует подчеркнуть, что подразумевается **экспериментальное определение** входящих в математические выражения **коэффициентов** (вязкости жидкости, модуля упругости и т. д.) – «констант», относящихся к фиксированным рецептуре и режимам, но не зависимостей от них. В концептуальных моделях свойства материала не связаны непосредственно с многокомпонентным составом.

3. **Экспериментально-статистические модели***, ЭС-модели [8, 9, 18, 19] – математические описания именно связей между факторами x и критериями Y , как правило, в виде полиномов, построенные по результатам **спланированного эксперимента**. Наиболее общий вид ЭС-модели (линейной по параметрам, нелинейной по факторам) представляет уравнение (В.1), где эффекты $f_i(x)$ – линейно независимые, базисные функции (как правило, степени аргументов).

Использование **нормализованных безразмерных переменных** x_i (чаще всего $-1 \leq x_i \leq +1$) **вместо натуральных именованных** величин X_i (варьируемых в диапазонах $X_{i,\min} \leq X_i \leq X_{i,\max}$) обеспечивает **четкий физический смысл имеющим размерность критерия Y коэффициентам** ЭС-модели, в частности вида (В.2), возможность сравнивать эффекты, а также приемлемые ошибки вычислений. Между тем, применяемые довольно часто **модели с измеряемыми на разных шкалах «натуральными факторами»**, как правило, невозможно интерпретировать, а ошибки могут оказаться неприемлемыми, что **дискредитирует** ЭС-моделирование (ЭСМ).

$$Y(x) = \sum_{l=1}^L b_l f_l(x), \quad Y(x) = b_0 + \sum_i b_i x_i + \sum_i b_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j \quad (\text{В.1-2})$$

ЭС-модели неизбежно приходится использовать как зависимости $Y(x)$ при разработке материалов в конкретных условиях их создания и эксплуатации, когда уровни РТ-факторов можно назначать в определенных диапазонах значений. Поэтому ЭСМ широко применяется в разработках практически любых строительных композитов, имеет достаточно развитое и универсальное методическое обеспечение, ориентированное на инженеров-экспериментаторов**, осуществляется с помощью специальных и стандартных компьютерных средств. Построенные по данным натурных экспериментов ЭС-модели можно использовать для извлечения скрытой в этих данных информации – выполняя вычислительные эксперименты (ВЭ), в которых комплексы моделей имитируют свойства любых композиций в исследуемых диапазонах значений РТ-факторов [6, 11 и др.]; такие ВЭ рассматриваются в главах данной книги.

Конечно, полиномиальная форма не способствует объяснению механизмов поведения материала, выводам и прогнозам общего характера по ЭС-моделям. При этом теряется спрятанное в них «богатство реальности» и то знание, которое потенциально они могут содержать. Снизить потери, более полно извлечь

* О назначении, содержании и истории экспериментально-статистического моделирования см. Приложение 1.

** Ему посвящена большая часть учебника [9] для студентов вузов, обучающихся по специальности «производство строительных изделий и конструкций».

свернутую в ЭС-моделях информацию о материале может помочь **декомпозиция системы факторов** – выделение их подсистем в соответствии с природой, характером, степенью их влияния на свойства – и использование соответствующих **структурированных ЭС-моделей**; в них выделено влияние факторных подсистем и их синергизм. Таким образом смягчается противоречие между «простотой» интегральной полиномиальной модели и структурной сложностью объекта (композиционного материала). Эти вопросы рассматриваются в **главе 2**.

Важно, что среди критериев Y , описываемых в зависимости от x ЭС-моделями, вполне могут быть коэффициенты-константы фундаментальных уравнений и концептуальных моделей [11, 20, 21]. Примеры такой инкорпорации моделей [22-24] – зависимости параметров реологических уравнений и других характеристик реологических кривых от состава технологических смесей.

4. **Модели исследования операций** (характерные для технико-экономических задач: сетевого планирования, распределения ресурсов, выбора маршрута и т.д. [25, 26]). Эти модели остаются пока «весьма экзотическими» для строительного материаловедения (в силу нетривиальности аналогий). Пример: фильтрация жидкости в бетоне, рассматриваемая как движение через сеть случайной конфигурации с запертыми узлами [27].

5. **Имитационные модели**, для выполняемых на компьютерах вычислительных экспериментов. При этом, как правило, применяют метод Монте-Карло (ММК) – метод статистических испытаний [28], суть которого в генерации случайных реализаций изучаемых ситуаций по их моделям*. В **структурно-**

Из декларации комитета RILEM
Technical Committee 244-NUM
**Numerical modeling
of cement-based materials**

Even though models and modeling have a history of centuries in science and engineering, it seems that the presence of powerful computation tools have disclosed new opportunities for both the academic world and the engineering practice to use these tools for unprecedented developments and applications of models and modeling. Numerical models enable us to evaluate complex systems in a quantitative way. They have the potential to support design activities on different levels of observation and to connect these levels in a multiscale approach. Besides connecting phenomena at different scales, also multidisciplinary interactions can be considered in numerical models.

Definitions and classification

- Material models
- Analytical models
- Numerical models
- Descriptive models
- Predictive models
- Accuracy and reliability of models
- Multi-scale and multidisciplinary of models and modeling
- Legal aspects
- Models and modeling in Codes

* В сегодняшнем понимании термин «метод Монте-Карло» относится к любому виду имитации (*simulation*) с участием случайных чисел (Murdoch D.J. Markov Chain Monte Carlo // Chance, V. 13, N4, 2000. P. 48-51).

имитационных моделях (СИМ) случайная структура материала собирается из множества случайно распределенных элементов (частиц, зерен, волокон, трещин, пор – «структурных неоднородностей») с заданными (фиксированными или случайно распределенными) свойствами, размером, формой. Модель флуктуирует, подобно реальной структуре в натурном эксперименте. Исследуются развитие трещин, поверхности разрушения и деформации в бетоне [29-31], процессы гидратации и пористость [32-35], радиационные потоки и электрофизические свойства [36, 37], свойства бетонной смеси [38]. В многофакторных ситуациях для выделения главных факторов, влияющих на критерии поведения материала, для классификации по этим критериям или прогнозирования их уровней могут быть применены **искусственные нейронные сети** [39-47]*. Известны «**структурно-функциональные**» модели изменений в составе, структуре и свойствах композитов гидратационного твердения, на ранних стадиях структурообразования [48-51] и в процессе длительного воздействия среды [52, 53]. Программное обеспечение ВЭ с имитационными моделями, в частности, разрабатываемое в NIST**, до недавнего времени можно было считать эксклюзивным.

Модели структур сами по себе не дают возможности прогнозировать уровни проектируемых эксплуатационных свойств. Для этого, в конце концов, привлекают концептуальные модели (системы конечных элементов [54-56], формулы расчета прочности с эмпирическими коэффициентами [49, 57, 58] и др.), а также [49, 56, 59] регрессионные модели. О возможном наборе моделей в компьютерных исследованиях материалов говорит приведенный в статье [60] список разработанных в NIST доступных программ для моделирования [61]. Используют последовательное моделирование: модели структур геля гидросиликата кальция (уровень нанометра), цементной пасты (уровень микрометра), раствора или бетона (уровень миллиметра); вычисления на нижнем структурном уровне определяют входные свойства для симуляции структуры следующего более высокого уровня [55, 56, 62].

Из статьи E.J. Garboczi
“The computational materials science
of concrete” in American Ceramic
Society Bulletin. 2013. Vol. 92, No. 4.

It would be very difficult to compute material properties based on how it stored the model's microstructure, viz., an approach based on centers and radii of spherical particles in a virtual container. I needed to get this property computation part operational. Without that component, the model could not be truly called a materials science model, and its results could not be directly compared with experiment.

* Как отмечается в [39], получаемые с их помощью результаты идентичны результатам множественной регрессии.

** National Institute of Standards and Technology (USA).

Перспективы применения СИМ, в том числе, для решения проблем многокомпонентности – **в объединении** с моделями других типов. Можно привести следующие примеры последовательного использования моделей разных типов в исследованиях строительных материалов.

При изучении диффузионных свойств цементных паст E. Garbotczi и D. Bentz [63] с помощью модели случайного роста генерировали их микроструктуру, которую затем рассматривали как случайную сеть (модель исследования операций, как в [27]); коэффициенты диффузии D определялись, для разных В/Ц и степени гидратации по аналитической модели – зависимости Нернста-Эйнштейна, связывающей D с электропроводностью. В Мордовском государственном университете в исследованиях напряженно-деформированного состояния (НДС) композиционных структур [64, 65] используется схема: «планирование ВЭ, с варьированием факторов состава – численное моделирование на основе метода конечных элементов – описание ЭС-моделями влияния факторов состава на компоненты НДС». В работах В.И. Кондращенко [59] сочетания СИМ, УМФ и ЭС-моделей применены в исследованиях бетонов на плотных и пористых заполнителях, древесно-полимерных композитов и биопластиков, в том числе, с учетом уровня «материал-конструкция».

Еще более, чем последовательное применение моделей разных типов, для решения задач создания эффективных композитов на основе фундаментальных закономерностей и накопленных знаний перспективно **синтетическое** (мультипликативное) **моделирование**, как предложено в [11, 20, 21]. Важно, что таким образом для **коэффициентов** («констант») **УМФ и концептуальных моделей**, для оценок по имитационным моделям могли бы быть определены их зависимости от факторов рецептуры и технологии – в виде ЭС-моделей.

В.2. О компьютерном материаловедении. Компьютерные технологии открыли возможности для совместного использования, объединения моделей разного масштабного уровня, разного генезиса, записанных на разных математических языках. В конце 1992 г. начал выходить международный журнал *Computational Materials Science* (ISSN 0937-0256; содержание первых номеров, за 1992-93,

Из декларации на титульном листе журнала *Computational Materials Science*

Computational Materials Science aims to enhance the communication between experimental materials research and computational work on both existing and new, advanced materials and their applications.

О журнале *Computational Materials Science* с сайта издателя – ELSEVIER

The goal of *Computational Materials Science* is to report on results that provide new or unique insights into, or significantly expand our understanding of, the properties of materials or phenomena associated with their design, synthesis, processing, characterization, and utilization.

проанализировано в [66]). Предложено [10, 11] считать год его основания началом отсчета для этого научного направления, нацеленного на решение проблем материаловедения как такового.

Любопытно, что именно в 1992 г. впервые в заголовок публикации по стройматериалам на русском языке [67] было вынесено название *компьютерное материаловедение (КМВ)*. Тогда же [67-69] осмысливались специфические задачи нового направления в содружестве занятых в материаловедении дисциплин и место ЭС-моделей в КМВ, среди моделей разных типов. Была разработана приведенная ниже **схема взаимосвязей элементов КМВ**, отражающая, с одной стороны, **концепцию объединения экспериментального и вычислительного подходов в исследованиях и разработках материалов**, с другой – необходимость **соединять описания поведения материала в конкретных рецептурно-технологических условиях с накопленными мультидисциплинарными знаниями**. Синтетическое по своей сути КМВ, могло бы инкорпорировать модели разных уровней структуры, любой генерации, реализовывать ВЭ на моделях, наполнять базы данных и базы знаний о материалах для экспертных систем. Возможности взаимообогащения подходов и методического скачка на его основе важны для ЭС-моделирования. Его принцип, **извлечение максимума информации из данных эксперимента** [70, 71], согласуется с целью журнала, продекларированной в редакционном заявлении [72], суть которой – **усилить связь между экспериментальной и вычислительной составляющими исследования**. И как сформулировано в [10, 11], компьютерное материаловедение призвано развивать экспериментальные исследования во взаимосвязи с компьютерными технологиями.

Е.Ј. Garboczi вспоминает [60]*, что примерно в 1990-ом начал использовать термин «компьютерное материаловедение бетона», которое сейчас, как он считает, стало жизнеспособной дисциплиной, собирающей многоуровневый набор моделей для такого многоуровневого материала как бетон, начинающей преодолевать **разрыв между фундаментальными принципами и практическими приложениями**. Помимо собственно исследований, этапы которых отражают, в частности, работы [74, 75], этому способствовали подготовленная в NIST обновляемая электронная образовательная монография [76] и такие работы как [77]. Однако, создатель компьютерных моделей гидратации тоже прихо-

* В этой статье, а также в [73] он приводит ссылку на работу своего научного руководителя (G. Frohnsdorff), в которой опубликована первая компьютерная модель гидратации цемента: Frohnsdorff G., Fryer W.G., Johnson P.D. The mathematical simulation of chemical, physical, and mechanical changes accompanying the hydration of cement. Supplementary Paper II-44 at the 5th Int. Symp. of the Chemistry of Cement, Tokyo, 1968.

дит к пониманию [60], что для преодоления этого разрыва в науке о материалах вообще необходимо объединять экспериментальный и вычислительный подходы и упоминает, что эта идея стала движущей силой для *Инициативы генома материалов (Materials Genome Initiative)*.

Как отмечено в [78, 79], при разработке конкурентоспособных материалов для строительной отрасли необходимость в методах компьютерного материаловедения возникает, когда решение не может быть получено в прямом физическом эксперименте или вне компьютерной технологии без больших затрат материальных ресурсов и (или) времени. Вопросы компьютерного строительного материаловедения (КСМВ) с 1993 по 2008 г. обсуждались [68, 80, 81] на ежегодных международных семинарах по моделированию и оптимизации композиций (МОК). Им был посвящено *Приложение* [82] к журналу *Строительные материалы* (ISSN 0585-430X, Москва).

Наиболее эффективным и распространенным моделированием в задачах разработки конкретных материалов, принципиально способным иметь дело с многокомпонентными составами [8, 9, 18, 83-88] и подготовленным к включению в КСМВ, оказалось ЭСМ. Предполагается, что «простые» ЭС-модели строятся на основе «лучшей» возможной информации – на априорных физико-химических знаниях и результатах спланированного, рационального эксперимента. Планирование эксперимента (ПЭ) – не только формализованный способ максимизировать количество получаемой информации при ограниченных ресурсах, позволяющий охарактеризовать и индивидуальное, и совместное влияние РТ-факторов x на отклики Y . Это философия и логика исследования [89], стержень стратегии эксперимента [18, 90]. Неформализованным остается «предпланирование» [18, 90, 91] – базирующиеся на системном подходе постановка проблемы и выбор вида математической модели, включая область независимых переменных x (факторную область).

Из книги В.В. Налимова, Т.И. Голиковой
«Логические основания планирования эксперимента», 2-е изд. М.: Металлургия, 1981

«...результаты изучения механизмов явлений следует представлять не одной, а множеством моделей». «Математическая модель – это вопрос, который исследователь задает природе». «Искусство моделирования в значительной степени определяется тем чувством меры, которое помогает уравнивать знания с тем, что хочется узнать». «Планирование эксперимента – это раздел знаний, относящийся не только и не столько к математической статистике, сколько к логике».

Однако, задачи строительного материаловедения в «эру многокомпонентности» потребовали создания **новой методологии исследований и проектирования высококачественных композиционных материалов**. Чтобы справиться с многомерностью задач и «сократить расстояние» между сложностью объектов и используемыми для их описания простыми полиномиальными мо-

делями, чтобы (по выражению в [92]) увеличивать совместимость моделей материаловедения и инженерной практики, потребовались новые представления и методы, предусматривающие включение ЭС-моделирования в КСМВ [70, 79]. **Для превращения количественных оценок, получаемых по ЭС-моделям, в знания, для того, чтобы задачи вычислительных экспериментов ставились, а результаты интерпретировались в терминах материаловедения,** нужно было, чтобы ВЭ (на любых моделях) получил общую физическую основу, некоторое универсальное, общенаучное мета-представление.

Такая метамодель как **поле физической величины** в трехмерном пространстве [93, 94] соответствует еще более общему **математическому понятию поля** величины Y , которое определяется [95] как функция точки x в области Ω_x многомерного пространства, т.е. как совокупность значений Y для всех возможных значений x . Это позволяет рассматривать совокупности возможных уровней свойств материала – значений критериев Y при всех возможных значениях РТ-факторов как **поля свойств материала в координатах состава, параметров процессов производства и эксплуатации** (а также в координатах изделия) [6, 19, 70, 79, 96-99]*.

Понятие рецептурно-технологического поля (РТП) и связанные с ним базовые положения методологии РТ-полей вводятся в **главе 1**. Здесь следует отметить ряд открываемых этим понятием возможностей для строительного материаловедения (сформулированных в 1990-х годах [102-104], обобщенных в [105] и последующих работах).

- Поле $Y(x)$ соединяет многообразие «воздействий» на материал РТ-факторов (вектор x) с результатами этих воздействий (уровнями критериев Y) и служит аналогом материала в исследованиях и проектировании отдельных сторон его поведения. Оно может быть описано графически, численно (уровнями Y для дискретного набора точек x), аналитически. Для описания РТП в принципе могут быть предложены любые модели. В книге в качестве средства описания полей свойств используются ЭС-модели, построенные по данным спланированных экспериментов.

- Для анализа связей РТ-факторов и свойств с помощью ЭС-моделей из полного поля (в области всех рассматриваемых факторов) можно выделить

* Такой подход соответствует и введенному в [90, с. 7] понятию «поле поведения системы», а также рассматриваемым в [90, с. 147-149; 100] полям структурных элементов (в частности, пористости). Распространение понятия поля в геометрических координатах на свойства материала в k РТ-координатах (изменение координат по существу при принципиально не ограниченном увеличении их числа) стало использоваться авторами [8, 96, 101] в связи с вычислительными экспериментами на ЭС-моделях реологических характеристик наполненных полимерных композиций [96].

локальные поля, с областями той же или меньшей размерности и любой конфигурации. Поля разных свойств или локальные поля одного свойства (а не символичные структуры – формулы или их «куски») можно сравнивать, используя в качестве мер сравнения числовые характеристики, имеющие ясный физический смысл. Это минимальный и максимальный уровни поля и их координаты, перепад, градиент, уровни поля в любых интересующих материаловеда особых точках и расстояния между ними, площади (объемы) особых зон и другие *обобщающие показатели* полей G (от *generalising*)*.

• Таким образом понятие РТП (вместе с общенаучными понятиями градиента, поверхности равного потенциала** и т.д.), соединяя наддисциплинарный язык описания мультиматериальных объектов строительного материаловедения с языками отдельных дисциплин, может служить элементом языка междисциплинарного.

• Появляется возможность проанализировать, как локальные поля, в координатах части РТ-факторов, могут изменяться под влиянием других факторов. При этом удобно использовать графические отображения, в частности, однофакторные кривые в зоне экстремумов [19, 108 и др.], «карты полей», с изолиниями и особыми точками (в частности, максимального и минимального уровня поля), позволяющие визуализировать связи факторов и свойств.

Это иллюстрирует рис. В.2 (из работ [8, 109], где локальное поле еще называлось «информационным элементом»); важный инженерный результат этой конкретной визуализации – экономия смолы в полимерном строительном композите, без ухудшения свойств.

Изменяющимся локальным полям более других соответствуют структурированные формы ЭС-моделей (рассматриваемые в **главе 2**). Как отмечено выше, они оказываются целесообразными для количественного анализа связей РТ-факторов и свойств. При необходимости исследовать многокомпонентные сис-

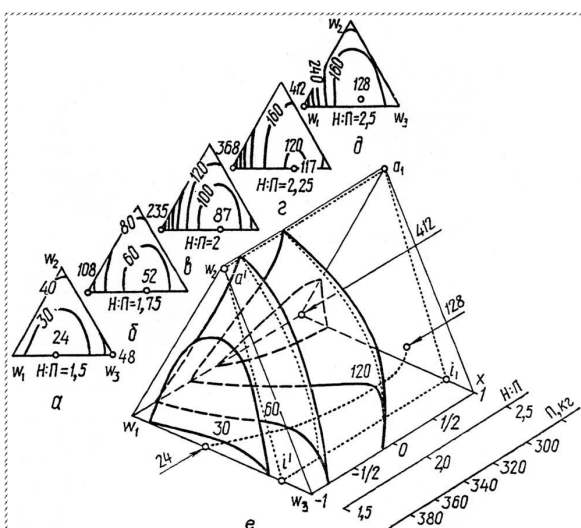


Рис. В.2. Изменяющиеся локальные поля «зерновой состав наполнителя – вязкость» при разных степенях наполнения полиэфирного связующего (а-д) и поле «зерновой состав наполнителя, степень наполнения – вязкость» (е)

* Термин, обозначение, ряд обобщающих показателей авторы использовали уже в книге [8] и в более ранних работах [85, 96, 101].

** Используются, в частности, в картографии [106, 107].

темы, принцип структурирования как прием «борьбы с размерностью» открывает разнообразные возможности для анализа и визуализации результатов.

- Рецептурно-технологические поля могут служить аналогами материалов в вычислительных экспериментах. В них ЭС-модели в тандеме с методом Монте-Карло могут имитировать результаты не реализуемых натуральных экспериментов, оценивая уровни свойств для любых вариантов рецептур и параметров процессов в описываемых моделями диапазонах, с учетом риска моделирования, ошибок эксперимента и дисперсии предсказания моделей (как показано в **главе 3**). При этом заданные ЭС-моделями детерминированные поля превращают в случайные. Многократные случайные реализации полей дают информацию о распределениях оценок их обобщающих показателей и взаимосвязей свойств, позволяя учитывать гарантированные уровни этих числовых характеристик. Цель компьютерных экспериментов (рассматриваемых в **главах 4-6**) – извлечь из моделей, построенных по реальным экспериментальным данным, свернутую в них и напрямую недоступную информацию о связях рецептуры, технологии, структуры и свойств материалов. Отдельно (в **главе 7**) представлен метод итерационного случайного сканирования РТ-полей, позволяющий в многокритериальной ситуации определить не только гарантированно допустимые и оптимальные, но и компромиссно оптимальные составы и параметры процессов.

Схема на рис. В.3 [67-69, 71, 79] содержит блоки, формирующие методологию исследований и конструирования многокомпонентных строительных композитов, направленную на получение нового знания, ресурсосбережение, обеспечение эффективности процессов и качества продуктов. Возможности методологии рецептурно-технологических полей (МРТП) иллюстрирует ряд примеров разработки строительных композиций разного назначения.

В.3. Принимаемые условия и установки. Задачи, которые позволяет решать МРТП, многомерны – и по набору РТ-факторов x , должных обеспечить выполнение требований к свойствам (критериям) Y , и по набору свойств, и по количеству связей между ними. При этом предполагается [8, 18, 102], что не только структура и свойства материала должны быть оптимальными (это, как подтверждается в статье [110] и принято в [111, 112], заложено в понятие «композит»), но и процессы его разработки и изготовления.

Методология РТ-полей рассматривает **оптимальность материала** как:

- достигаемое за счет состава и параметров процессов **соответствие лучшему уровню конкретного критерия или компромиссу нескольких критериев**, выдвигаемым научной идеей или практическим заказом (при выполнении требований к другим критериям);

- это соответствие оценивается с целесообразной точностью, опираясь на известные закономерности, по данным оптимального эксперимента, с помощью моделей, позволяющих наиболее полно извлечь из данных информацию о материале.

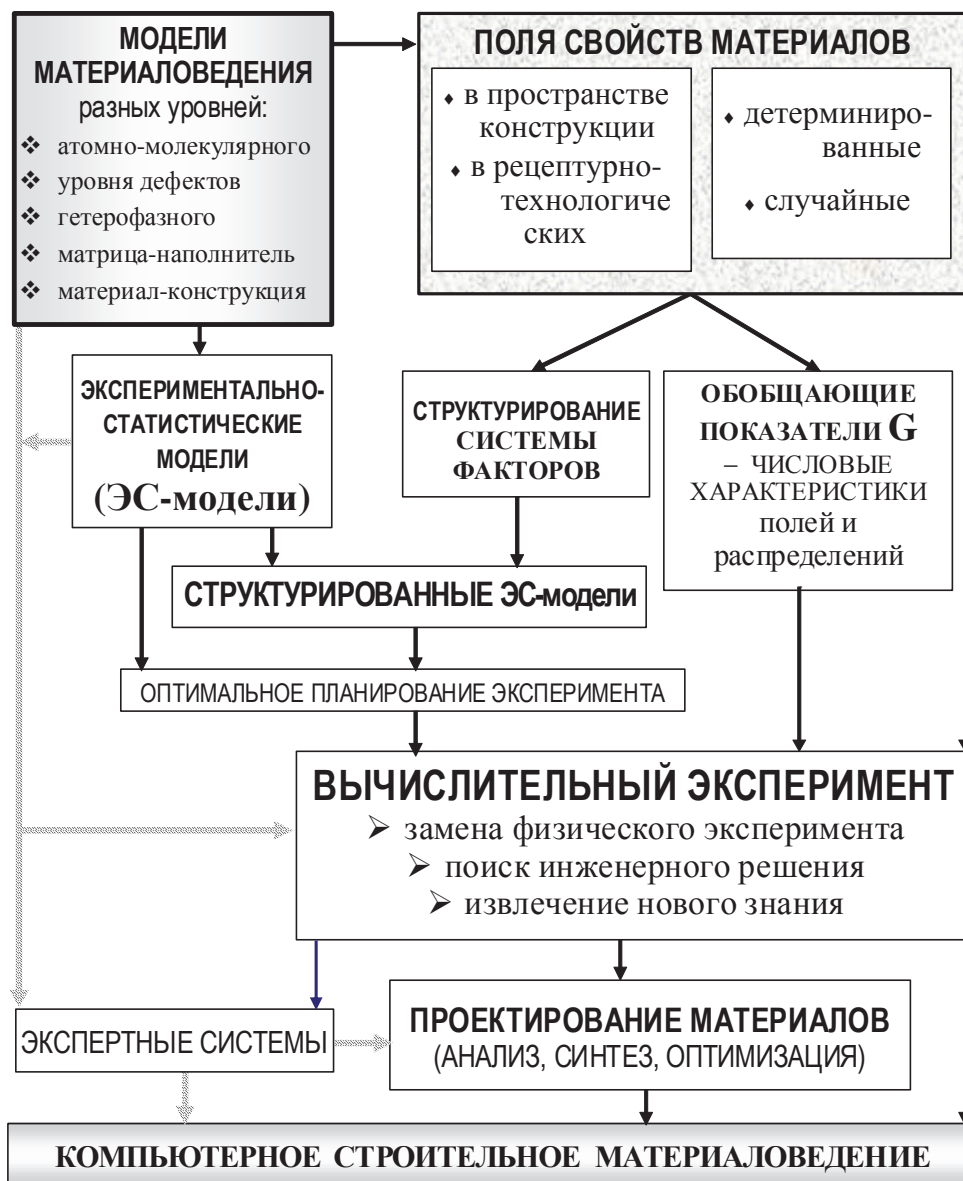


Рис. В.3. Схема включения концепции полей свойств материалов и ЭС-моделей в компьютерное строительное материаловедение

Особенности представляемой в книге методологии исследований и разработки высококачественных строительных композитов определяют [102]:

- идеологическая установка – оптимальность материала;
- **ключевая концепция – рецептурно-технологические поля свойств;**
- информационная база (первичная) – планируемый многофакторный натурный эксперимент;
- основная форма обобщения данных, превращения их в факты – структурированная ЭС-модель;
- способ извлечения новой информации (вторичной) – вычислительный эксперимент.

Методология РТ-полей ввела ЭС-модели в компьютерное материаловедение как незаменимые в настоящее время описания таких полей, предоставляя методические основы для извлечения информации и знаний из свернутых в этих моделях экспериментальных данных.

**Из постера к статье V. Voznesensky, T. Lyashenko, V. Gavriiliuk
at 17. ibausil, Weimar, 2009**

With 40-year experience in using experimental-statistical (ES) modeling when studying and developing a wide diversity of building materials, we would recommend this powerful tool for R&D of multi-component composite materials.

When and how could ES-modeling be helpful now, as irreplaceable constituent of computational materials science methodology?!

It could be profitable to use ES-models to research (at nano-, micro-, mezzo-, macrolevel) and to design:

- multi-component binder systems with additions of slag, fly ash, other mineral additives, alkali ingredients, and polymer admixtures,
- specially purposed repair, protective and furnishing compositions resistant to heat, frost, dynamic load, various media,
- polymer-cement dry mixes of various purpose,
- polymer mortars,
- fiber reinforced composites,
- light weight aggregate, cellular and foam concretes,
- ready-mix concrete,
- any high performance material.

To obtain the models a reasonable number of trials of the designed experiment should be carried out. Built on results of natural experiment ES-models simulate the material properties in various computational experiments, allowing:

- ◆ evaluate and analyse the relations between composition, process parameters, structural characteristics, technological and performance properties,
- ◆ determine technological solutions that would save energy resources, utilise by-products, and guarantee material quality.

Глава 1. РЕЦЕПТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ПОЛЯ И ИХ ОБОБЩАЮЩИЕ ПОКАЗАТЕЛИ

1.1. Понятие поля свойства

Совокупность значений величины Y (свойства материала, характеристики его структуры, другого характеризующего материал критерия) при всех возможных значениях факторов (РТ-параметров, пространственных координат конструкции), составляющих вектор $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)$, образует скалярное поле $Y(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Omega_x$, названное полем свойства [6, 8, с. 8; 19, 68, 70, 90, с. 148; 96-99, 113, 114]; факторная область Ω_x – область поля.

Понятие *скалярное поле* следует из наиболее общего определения поля в математике [95]*. Скалярное поле определяется как поле, ставящее в соответствие каждой точке пространства скалярную величину [95], то есть как скалярная функция точки вместе с областью ее определения [115-117].

Скалярное поле может быть полем физической величины (температуры, скорости, напряжения) в обычных пространственных координатах**. Аналогично, исходя из общего определения скалярного поля, может быть рассмотрено и поле характеристики материала Y ; любыми могут быть как содержательная суть, так и количество координат x_i ($i = 1, \dots, k$, в том числе, $k > 3$) – размерность области Ω_x . Как и поле физической величины [94], оно отображается геометрически с помощью поверхностей (линий) равного потенциала – равного уровня (1.1), и характеризуется градиентом (1.2) – вектором, направленным в сторону быстрого возрастания уровня $Y(\mathbf{x})$.

$$Y(\mathbf{x}) = \text{const} \quad \nabla Y(\mathbf{x}) = (\partial Y / \partial x_1, \partial Y / \partial x_2, \dots, \partial Y / \partial x_k) \quad (1.1-1.2)$$

Как и поле физической величины, поле свойства материала может изменяться во времени; тогда это нестационарное поле, в противном случае – стационарное. В книге поля свойств материалов рассматриваются как стационарные. Если Y – случайная величина, т.е., в каждой точке \mathbf{x} области поля имеет место распределение $f(y)$, то поле $Y(\mathbf{x})$ случайное [118]; оно может быть представлено отдельными значениями случайной величины Y или числовыми характеристиками ее распределения.

* *Поле* – оператор (функция), определенный на пространстве (многообразии) и принимающий значения из множества величин некоторого фиксированного типа. В зависимости от типа величин выделяют скалярное, векторное и тензорное поля и поле направлений.

** Или в координатах времени – тогда одномерное поле называют процессом [118].

Независимо от того, детерминирована или случайна величина Y , учитывается или нет ее статистическое распределение в точке x , поле $Y(x)$ есть распределение свойства в области Ω_x , изменение уровня Y в зависимости от x . Это многомерное распределение может быть представлено (обобщено) отдельными числами, выражающими его существенные особенности (аналогично характеристикам распределения случайной величины). Такие числовые характеристики поля названы [8, 96] обобщающими показателями – G . Для указания свойства и координат области поля, которое G характеризует, используются обозначения $G_Y\{x\}$, $G_{Y,x}$, $G\{Y, x\}$ и т. п.

Если вектор x представляет пространственные координаты изделия (конструкции), то $Y(x)$ – геометрическое (пространственное) поле. Если компоненты вектора x – факторы состава, параметров технологии и условий эксплуатации, то $Y(x)$ – рецептурно-технологическое поле (РТП). Область Ω_x РТП определяется отношениями внутри системы k формирующих поле РТ-факторов (см. гл. 2). Свойство материала может быть рассмотрено в координатах факторов обеих групп совместно.

Если каждой точке области Ω_x ставится в соответствие несколько критериев, $Y = (Y_1, Y_2, \dots)$ – это многокритериальное поле. При этом, рассматривается не векторное поле, а совокупность нескольких скалярных полей (с одной областью).

РТ-поле $Y(x_1, x_2, \dots, x_k)$, свойства материала в k координатах его состава, режимов приготовления и условий эксплуатации, соединяет многообразие «воздействий» этих факторов с результатами воздействий (уровнями любых критериев Y). Поля могут служить аналогами материалов при их исследовании и конструировании.

Распределение Y в теле изделия представляет геометрическое поле свойства $Y(L)$, $L = (l_1, l_2, l_3) \in \Omega_L$; область поля Ω_L определяется конструктивными параметрами изделия [68, 97].

В зависимости от требований потребителя или идеи исследователя, в отношении поля свойства материала в изделии могут быть поставлены следующие цели: в общем случае – получить поле заданной конфигурации, $Y = F(L)$, например, совпадающей (в идеале) с эпюрой эксплуатационных воздействий (как в конструкциях типа «сэндвич» с пористой сердцевиной); в частном, но типовом случае – обеспечить один и тот же уровень Y по всей области Ω_L , т.е., получить $Y = F(L) = const$. Для решения такой задачи (характерной для материалов подводного бетонирования, напорных труб и т.п.) могут быть использованы различные критерии неоднородности пространственного поля [68, 97, 119-121].

1.2. Условия исследования, на данных которого представлены основы методологии рецептурно-технологических полей (тест-задача, карбамидный композит)

Основы МРТП могут быть продемонстрированы в относительно простой ситуации с тремя РТ-переменными. Используются данные, полученные при ис-

следовании наполненного карбамидного связующего [122-126]; решались задачи улучшения свойств карбамидных полимербетонов разного назначения.

Для износо- и водостойких элементов было разработано связующее* (на смоле КФ-Ж, отверждаемой ортофосфорной кислотой в присутствии этиленгликоля) с полиминеральным полифракционным наполнителем – смесью зерен андезита и тонкодисперсного карбида кремния. Это отход абразивного производства, сухие остатки шламов (содержащие 66-72 % SiC и 14-18 % SiO₂, а также Al₂O₃, Fe₂O₃ и др.). Предполагалось возможное активное структурообразующее влияние зерен карбида кремния на карбамидную смолу, за счет повышенной адсорбционной активности поверхности SiC [130] и каталитического действия оксидов металлов на процесс отверждения [127]. Кроме того, рациональное соотношение крупных и мелких зерен позволяет улучшить свойства и технологической смеси, и готового изделия, не снижая степень наполнения (даже если неизменной остается удельная поверхность смеси фракций [8, 109]).

При исследовании в спланированном эксперименте варьировались следующие факторы X_i (нормализованные к $|x_i| \leq 1$):

X_1 – массовое отношение наполнитель-полимер (Н/П, степень наполнения F , *filling*, от 2 до 2.5) рассматривалось и как структурообразующий, и как экономический фактор, который, возможно, следует максимизировать, чтобы снизить расход полимера;

X_2 – доля карбида кремния в тонкой фракции наполнителя, с удельной поверхностью 320 ± 10 м²/кг (SC , от 0 – только андезит, до 60 % по массе);

X_3 – массовая часть крупных зерен андезита (с удельной поверхностью 70 ± 5 м²/кг) в общем количестве наполнителя ($CA = 40 \pm 20$ %).

Для каждого из 15 составов (табл. 1.1), согласно плану B_3 [9, 90], были определены реологические свойства смесей и механические свойства затвердевших композитов (в сухом и водонасыщенном состоянии).

Карбамидные полимербетоны – конструкционные материалы на основе карбамидоформальдегидных смол (многоотоннажный продукт химической промышленности, широко применяемый в производстве древесностружечных плит, фанеры и других строительных изделий, а также при укреплении грунтов, в том числе шахтных выработок). Относительно низкая стоимость этих смол стимулировала создание карбамидных бетонов [127-129]; разрабатывались специальные приемы, отвердители, активизированные наполнители и т.д. для снижения негативного действия содержащейся в смоле воды (до 30%). Эти бетоны применяют в полах зданий промышленного и сельскохозяйственного назначения, в водохозяйственном строительстве, для ремонтных и защитных работ, в частности, на заводах удобрений.

* А.с. 1440889 СССР. Полиминеральная смесь / Вознесенский В.А., Карабаев А.Н. (СССР). – 1988. – Бюл. №12. – 3 с.

Среди них эффективная вязкость η (Па·с) при скорости сдвига $\dot{\gamma} = 1 \text{ с}^{-1}$, призмная прочность R (МПа), динамический модуль упругости E (ГПа, по скорости ультразвука), износостойкость A (истираемость, ч/г – час на грамм, по методике УкрНИИГиМ), коэффициент водостойкости K_w , ударная вязкость и др.

Эти данные позволили построить комплекс нелинейных трехфакторных ЭС-моделей [124, 126], в частности, модель (1.3)* – для износостойкости (адекватная экспериментальным значениям A , при ошибке эксперимента $s_e = 0.41$ ч/г и одностороннем риске 0.1).

Таблица 1.1. Уровни рецептурных факторов в спланированном эксперименте

№ состава	Нормализованные уровни			Натуральные значения		
	x_1	x_2	x_3	F	SC	CA
1	1	1	1	2.5	60	60
2	1	1	-1	2.5	60	20
3	1	-1	1	2.5	0	60
4	-1	1	1	2	60	60
5	1	-1	-1	2.5	0	20
6	-1	1	-1	2	60	20
7	-1	-1	1	2	0	60
8	-1	-1	-1	2	0	20
9	1	0	0	2.5	30	40
10	-1	0	0	2	30	40
11	0	1	0	2.25	60	40
12	0	-1	0	2.25	0	40
13	0	0	1	2.25	30	60
14	0	0	-1	2.25	30	20
15	0	0	0	2.25	30	40

$$\begin{aligned}
 A = & 6.69 + 0.22x_1 - 0.47x_1^2 - 0.52x_1x_2 + 0.85x_1x_3 \\
 & + 1.45x_2 \pm 0 \quad x_2^2 \pm 0 \quad x_2x_3 \\
 & \pm 0 \quad x_3 - 1.12x_3^2
 \end{aligned}
 \tag{1.3}$$

1.3. Полное и локальные поля

В соответствии с идеологией планирования эксперимента [8, 9, 89, 90] в ЭС-модель для Y включаются все компоненты исследуемого вектора x . Такая модель описывает **полное поле** $Y(x)$ – в координатах всех факторов, которые варьировались в спланированном эксперименте; область полного поля Ω_x определяют полные диапазоны всех включенных в ЭС-модель факторов. На рис. 1.1а показано полное поле износостойкости (1.3).

Важно! ЭС-модель описывает бесконечное **множество локальных полей** – «частей» полного поля, выделяемых для оценки и анализа роли факторов в формировании уровней свойств, для выполнения вычислительных экспериментов

* Здесь и далее ± 0 в записи ЭС-модели обозначает незначимый (при заданном риске α) эффект, исключенный из начальной модели заданной формы.

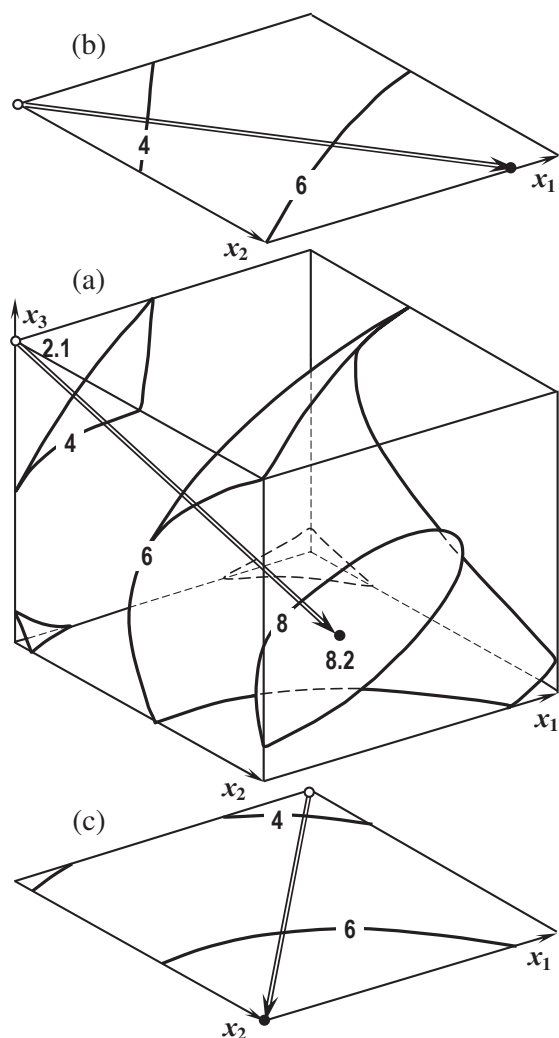


Рис. 1.1. Изоповерхности полного поля (а) и локальные поля износостойкости при максимальном (б) и минимальном (с) содержании крупного андезита

Факторы, под влиянием которых поля $Y(x_{gr})$ трансформируются, названы *изменяющими* (*changing*, $x_{ch} \in \Omega_{ch}$)**. Локальному полю $Y(x_{gr}/x_{ch})$, при фиксированном x_{ch} , соответствует проекция модели $Y(x)$ в точке x_{ch} области Ω_{ch} .

Так при подстановке $x_3 = +1$ и $x_3 = -1$ в модель (1.3) полного поля получены модели локальных полей (1.4-5), показанные изолиниями на рис. 1.1, б-с.

* Знак «/» означает «при условии».

** Область полного поля есть декартово произведение областей градиентных и изменяющих факторов, $\Omega_x = \Omega_{gr} \otimes \Omega_{ch}$.

при исследовании взаимосвязей свойств, для визуализации результатов моделирования и т. д.

Локальные поля выделяются по одному из двух принципов.

Во-первых, это могут быть поля в подобласти полного поля меньшей размерности, чем Ω_x . Они формируются под действием части факторов, названных [103] *градиентными* (*gradient*, $x_{gr} \in \Omega_{gr}$) – создающих градиент Y в этой подобласти, при фиксации на некоторых уровнях остальных РТ-факторов. В полном поле все факторы градиентные.

На рис. 1.1, б-с показаны выделенные из полного трехфакторного поля локальные поля износостойкости карбамидного композита при фиксированном верхнем и нижнем содержании крупных зерен андезита, $A(x_1, x_2 / x_3 = +1)^*$ и $A(x_1, x_2 / x_3 = -1)$. Как видно, изменение CA трансформирует поля $A(x_1, x_2)$, в частности, их максимальные и минимальные уровни соответствуют разным степеням наполнения.

$$A(x_1, x_2 / x_3 = +1) = 5.57 + 1.07x_1 - 0.47x_1^2 - 0.52x_1x_2 + 1.45x_2 \pm 0 \quad x_2^2 \quad (1.4)$$

$$A(x_1, x_2 / x_3 = -1) = 5.57 - 0.63x_1 - 0.47x_1^2 - 0.52x_1x_2 + 1.45x_2 \pm 0 \quad x_2^2 \quad (1.5)$$

Очевидно, что по аналогичным моделям могут быть рассчитаны локальные поля в любых точках шкалы $-1 \leq x_3 \leq +1$. Количественный анализ изменений, происходящих в этих полях под влиянием фактора x_3 , а в общем случае, в любых локальных полях под влиянием x_{ch} , можно провести, используя значения представляющих и обобщающих поле числовых характеристик, рассматриваемых в § 1.4.

Области локальных полей Ω_{gr} – любые 1-, 2-, ..., (k-1)-мерные сечения области полного поля Ω_x при любых возможных фиксированных уровнях (k-1), ..., двух или одного из изменяющих факторов. При этом могут быть рассмотрены любые полезные комбинации выделения из x градиентных и изменяющих факторов. Среди факторов полного поля могут быть и нейтральные факторы (не x_{gr} и не x_{ch}), которые не должны участвовать непосредственно в конкретном анализе полей. Подстановка фиксированного уровня нейтрального фактора изменяет коэффициенты модели полного поля.

Выделение из x векторов x_{gr} и x_{ch} структурирует систему факторов и факторную область, позволяет использовать подходящие структурированные модели полей [103, 131]. Вопросы выделения подсистем факторов, соответствующие факторные области и типы структурированных моделей рассматриваются в главе 2.

Кроме локальных полей, сформированных за счет уменьшения размерности области поля, при анализе многомерных связей свойств и факторов используются локальные поля иной генерации. Локальные поля $Y(x/Cr(x))$ могут быть определены в некоторых «полезных» для решения конкретной инженерной задачи подобластях $\Omega_{Cr} \subset \Omega_x$, той же размерности, вырезаемых из области полного поля (или локального поля 1-го типа) изоповерхностями определенного критерия Cr (в большинстве случаев это фрагменты поверхностей 2-го порядка). В показанном выше полном поле износостойкости (рис 1.1а) изоповерхность $A(x) = 6$, в частности, вырезает 2 подобласти в которых могут быть рассмотрены поля, $A(x) / (A \leq 6)$ и $A(x) / (A \geq 6)$, $R(x) / (A \leq 6)$ и $R(x) / (A \geq 6)$ и др. Локальное *поле с подобными «критериальными границами»* (как правило, нелинейными – криволинейными), будет изменяться с изменением уровня Cr , передвигаясь в другие зоны Ω_x . Такими критериями могут быть одно из свойств, их отношения и другие симплексы. В роли критериев, уровни которых задают границы облас-

ти выделяемого локального поля, можно рассматривать и формирующие поле факторы. Так из полного поля $A(x)$, показанного на рис. 1.1а, можно выделить локальные поля $A(x / (-1 \leq x_2 \leq -0.5))$, $A(x / (-0.5 \leq x_2 \leq 0))$ и т.п. (с разными факторными границами). Формирование и применение локальных полей с критериальными границами обсуждается в главе 6.

1.4. Обобщающие показатели полей

Рецептурно-технологическое поле, многомерное распределение уровня свойства Y в области РТ-факторов, может быть представлено отдельными числами, которые выражают («измеряют») интересующие исследователя-технолога существенные особенности поля, особенности зависимости свойства от состава и параметров процессов. Это числовые характеристики поля, или **обобщающие показатели** G (используются обозначения $G_Y, G\{Y\}, \dots$).

Именно с их помощью можно сравнивать поля разных свойств и локальные поля одного свойства (сравнивая числа, характеризующие распределения), анализировать взаимоотношения полей (от упорядочения «меньше – больше» до построения рассматриваемых ниже специальных моделей). Для сравнения полей разных свойств используются и безразмерные (симплексные) обобщающие показатели.

Числовые показатели G позволяют количественно оценить и проанализировать трансформации локальных полей под влиянием изменяющих их факторов x_{ch} или при изменении критериальных или факторных границ области поля.

Обобщающими показателями могут быть уровни свойства в любых интересующих материаловеда особых точках РТ-области, включая максимум и минимум, координаты таких точек и расстояния между ними*, перепады, градиенты и многие другие, для выбора которых существуют аргументы, обусловленные задачей исследования или проектирования.

«Измеряя» характерные особенности полей, эти числовые показатели осуществляют «свертку» информации (выступают представителями поля в многомерном анализе). Замена бесконечного числа точек и уровней поля ограниченным набором чисел G помогает (как будет показано ниже) визуализировать многомерные связи факторов и свойств.

Некоторые типовые показатели G и их значения, представляющие полное рецептурное поле износостойкости $A(x_1, x_2, x_3)$, приведены в табл. 1.2. Среди них: отмеченные на рис. 1.1а экстремальные уровни и координаты соответст-

* Расстояние между точками факторной области измеряется в единицах нормализованного факторного пространства (ефп).

вующих точек минимума («много» смолы, нет карбида кремния, много крупного андезита) и максимума (максимальное количество SiC при невысокой степени наполнения и среднем содержании крупных зерен); усредненный градиент – длина вектора, соединяющего точки экстремума в направлении увеличения износостойкости; процент составов, отвечающих требованию $A \geq 6$ ч/г – относительный размер допустимой области.

Таблица 1.2. Основные обобщающие показатели рецептурно-технологического поля

G_Y	G_A	Оценка по (1.3)
Порядковые показатели		
Максимальный уровень Y_{\max}	A_{\max}	8.21 ч/г
Координаты максимума $x_{\max.i}$ ($X_{\max.i}$)	$x_{\max.1}$ (F_{\max}) $x_{\max.2}$ (SC_{\max}) $x_{\max.3}$ (CA_{\max})	-0.47 (2.13) +1 (60) -0.22 (35.6)
Минимальный уровень Y_{\min}	A_{\min}	2.05 ч/г
Координаты минимума $x_{\min.i}$ ($X_{\min.i}$)	$x_{\min.1}$ (F_{\min}) $x_{\min.2}$ (SC_{\min}) $x_{\min.3}$ (CA_{\min})	-1 (2) -1 (0) +1 (60)
Середина размаха $Y_M = 0.5(Y_{\max} + Y_{\min})$	A_M	5.13 ч/г
Координаты середины расстояния между экстремумами $x_{m.i} = (x_{\max.i} + x_{\min.i}) / 2$	$x_{m.1}$ (F_m) $x_{m.2}$ (SC_m) $x_{m.3}$ (CA_m)	-0.74 (2.07) 0 (30) 0.39 (47.8)
Уровень Y_m – в точке x_m	A_m	5.86 ч/г
Расстояние между экстремумами, в единицах нормализованного факторного пространства, L_{ext}	$L_{\text{ext}.A}$	2.40
Абсолютный перепад (прирост) $\Delta_Y = Y_{\max} - Y_{\min}$	Δ_A	6.16 ч/г
Усредненный градиент $\nabla_Y = \Delta_Y / L_{\text{ext}.Y}$	∇_A	2.56 ч/г
Относительный перепад $\delta_Y = Y_{\max} / Y_{\min}$	δ_A	4.0
Относительный прирост $d_Y = \Delta_Y / Y_{\min}$	d_A	3.0
Медианный уровень Me_Y	Me_A	6.18 ч/г
Относительный размер области допустимых x , $\Omega\{Y_{\text{spec}}\}\%$	$\Omega\{A \geq 6\}$	56.6
Интегральные показатели		
Среднее по полю \bar{Y} (или Y_{av} – average)	\bar{A}	6.15 ч/г
Стандартное отклонение s_Y	s_A	0.97 ч/г
Коэффициент вариации v_Y	v_A	0.158

Показатели разделены на две группы – по «происхождению».

Порядковый (дифференциальный, точечный) обобщающий показатель образуют числовые характеристики отдельных точек поля как упорядоченного непрерывного множества (это, в частности, максимум и минимум свойства и построенные на них индексы). **Интегральный** (суммирующий) G является обобщенной мерой распределения свойства по всему множеству точек области РТ-поля (в частности, средний уровень РТП).

При неисчерпаемом многообразии числовых характеристик, которые могут быть использованы в качестве обобщающих показателей, полезна их **классификация** по выражаемым ими особенностям РТ-полей [19, 99].

Экстремальные уровни свойства в границах области исследуемого поля – минимальный, Y_{\min} , и максимальный, Y_{\max} , а также их координаты x_{\min} и x_{\max} , являются базовыми обобщающими показателями: с ними связаны и по ним рассчитываются (см. табл. 1.2, а также [19, 99]) другие полезные в инженерных задачах обобщающие показатели.

Экстремумы и их координаты могут рассматриваться не только как меры сравнения полей или как критерии управления и оптимизации.* Они играют важную общеметодическую роль в исследовании. Именно в отношении содержащих их зон области РТ-поля могут быть поставлены «острые» вопросы (в частности, чем отличаются механизмы структурообразования или деструкции композитов в этих граничных по уровню Y зонах) или выдвинуты физико-химические и иные гипотезы, для проверки которых целесообразно использовать специальное инструментальное обеспечение (рентгенофазовый анализ, электронную микроскопию и т. д.). Показатели экстремумов вместе с уровнями и координатами других интересующих материаловеда точек поля составляют группу **характеристик особых точек**.

Следующая группа обобщающих показателей – **характеристики положения** (тенденции, центра). Это может быть средний уровень поля \bar{Y} или медиана Me_Y (определяемые с помощью ММК, как показано ниже в § 1.5). Проще охарактеризовать положение поля, используя такие показатели, как уровень свойства в центре факторной области Y_0 (оцениваемый свободным членом в уравнениях типа (1.3)) или приведенные в табл. 1.2 центральное среднее – середина размаха Y_M и уровень поля Y_m в центральной точке между экстремумами x_m . Технолога могут интересовать расхождения в этих показателях (по Y и по x , как на рис.

* В частности, обеспечение «минимакса» или «максимина» может потребоваться для исключения возможности появления $Y_{\max} > Y_{\text{spec}}$ или $Y_{\min} < Y_{\text{spec}}$, где Y_{spec} – специфицированный (*spec* – от *specified*) граничный уровень свойства.

1.1а, где точки максимума и минимума A , а значит, и x_m расположены далеко от центра куба, практически на одной грани).

Изменение свойства в границах области поля оценивается абсолютным (Δ_Y) и относительными (δ_Y , d_Y) приростами (см. табл. 1.2). Недостаток последних: если в какой-то подобласти поля не обеспечивается формирование свойства материала при структурообразовании (композит не твердеет, растрескивается и т.п.), то δ и d оказываются неопределенными. Поэтому был введен [97] и другой относительный показатель «изменяемости» уровня свойства – индекс прироста I_Y (1.6), равный отношению половины размаха к середине размаха, принимающий значения в диапазоне от 0 до 1.

$$I_Y = 0.5(Y_{\max} - Y_{\min}) / (0.5(Y_{\max} + Y_{\min})) = 0.5(Y_{\max} - Y_{\min})/Y_M \quad (1.6)$$

Степень отдаленности (раздвижки) экстремальных значений характеризуют безразмерные верхняя (γ_{\max}) и нижняя (γ_{\min}) относительные границы диапазона значений свойства, по отношению к Y_M или Y_0 . В последнем случае «относительные экстремумы» (1.7-1.8) могут указать на асимметрию «лучшего» и «худшего» уровней поля по отношению к уровню свойства в центре эксперимента.

$$\gamma_{\max} = Y_{\max} / Y_0 \quad \gamma_{\min} = Y_{\min} / Y_0 \quad (1.7-1.8)$$

Мерой интенсивности изменения свойства в факторной области (мерой чувствительности Y к управлению x) мог бы служить максимальный по области поля градиент (1.2). Однако, этот показатель, как правило, не представляет интереса при материаловедческом анализе. Целесообразен «макропоказатель» – усредненный градиент (∇ , табл. 1.2), который соотносит приращение критерия качества (Δ_Y) с тем изменением факторов состава и технологии, за счет которого оно происходит (с расстоянием L_{ext} между экстремальными точками*). Показатели прироста и его интенсивности составляют группу **характеристик потенциалов**, измеряющих степень и направления изменения свойства под действием РТ-факторов.

Характеристики обеспеченности норматива связаны с назначаемыми нормативными уровнями факторов ($x_{i,\text{spec}}$) и свойств (Y_{spec}) [8, 19, 99]. Среди множества значений $x_i\{Y_{\text{spec}}\}$, определяемых уравнением $Y(x) - Y_{\text{spec}} = 0$, могут оказаться полезными ресурсосберегающие решения: минимальные значения факторов, $x_{i,\min}\{Y_{\text{spec}}\}$, при которых обеспечивается норматив качества; макси-

* Определяется в зависимости от вида факторной области как квадратичная норма разности векторов x_{\max} и x_{\min} [8], в частности, для куба нормализованных факторов $L_{\text{ext}} = \sqrt{\sum (x_{i,\max} - x_{i,\min})^2}$.

мальные, $x_{i,\max}\{Y_{\text{spec}}\}$ – когда утилизируются отходы производства (зола, шлам, силикагель и т. д.).

Особое место в этой группе занимает «размер» допустимой, **технологической области** $\Omega\{Y_{\text{spec}}\}$ – доля допустимых решений, относительный объем (%) той части всей области полного или локального поля свойства, где выполняются нормативные требования к его уровню ($Y \geq Y_{\text{spec}}$ или $Y \leq Y_{\text{spec}}$)*, что соответствует геометрической вероятности значений Y в допустимом диапазоне.

Этот полезный для разработчика материалов показатель оценивает возможность найти такие решения и выполнить требования. При этом он характеризует: с одной стороны, устойчивость к случайным помехам в уровнях РТ-факторов, в частности, при колебаниях состава сырья; с другой – возможную гибкость технологии при целенаправленном изменении РТ-факторов, в частности, с целью сэкономить ресурсы. Как оценку возможностей технологического регулирования показатель $\Omega\{Y_{\text{spec}}\}$ можно отнести к **характеристикам управления**, в группу которых включают [19, 99] и показатели устойчивости оптимального уровня качества по каждому фактору [18].

Расчет $\Omega\{Y_{\text{spec}}\}$ осуществляется [11, 132] с помощью ММК (см. § 1.5). Уровень $\Omega\{A \geq 6\}$ в табл. 1.2 означает, что износостойкость не менее 6 ч/г обеспечивают около 57 % рассматриваемых составов наполненного связующего.

Названные и другие обобщающие показатели локальных полей определяются по моделям этих полей (получаемых из полной модели при подстановке фиксированных уровней изменяющих факторов). Так по моделям (1.4-1.5) рассчитаны представленные в табл. 1.3 обобщающие показатели локальных полей износостойкости в координатах степени наполнения и количества карбида кремния, формирующиеся при верхнем ($x_3 = +1$) и нижнем ($x_3 = -1$) содержании крупного андезита (рис. 1.1, b-с).

При дискретном (скачкообразном) переходе от композита с 20 % крупных зерен андезита к композиту с втрое большим их содержанием максимальная износостойкость $A_{\max}\{x_1, x_2\}$ снижается незначительно (на 7 %), поскольку в обоих составах доля зерен карбида кремния находится на верхнем уровне (60 % от массы тонкой фракции). Однако, если на «нижнем» локальном поле (рис. 1.1c) наилучший уровень $A_{\max}\{x_1, x_2 / x_3 = -1\} = 7.7$ ч/г достигается при низком наполнении смолы ($x_2 = -1, F = 2$), то на верхнем поле (рис. 1.1b) показатель $A_{\max}\{x_1, x_2 / x_3 = +1\} = 7.2$ ч/г соответствует высокому наполнению ($x_2 = +1, F = 2.5$).

* Обозначение Ω используется и для допустимой области, и для ее размера.

Таблица 1.3. Обобщающие показатели локальных рецептурных полей износостойкости при низком ($x_3 = -1$, $CA = 20\%$) и высоком ($x_3 = +1$, $CA = 60\%$) содержании крупных зерен

G_A	Оценка по (1.5) для $A\{x_1, x_2 / x_3 = -1\}$	Оценка по (1.4) для $A\{x_1, x_2 / x_3 = +1\}$	$\frac{G_A\{x_1, x_2 / x_3 = +1\}}{G_A\{x_1, x_2 / x_3 = -1\}}$
A_{\max}	7.70 ч/г	7.17 ч/г	0.93
$x_{\max.1} (F_{\max})$ $x_{\max.2} (SC_{\max})$	-1 (2) +1 (60)	0.56 (2.39) +1 (60)	
A_{\min}	3.54 ч/г	2.05 ч/г	0.58
$x_{\min.1} (F_{\min})$ $x_{\min.2} (SC_{\min})$	+1 (2.5) -1 (0)	-1 (2) -1 (0)	
A_M	5.62 ч/г	4.61 ч/г	0.82
$x_{m.1} (F_m)$ $x_{m.2} (SC_m)$	0 (2.25) 0 (30)	-0.22 (2.30) 0 (30)	
A_m	5.57 ч/г	5.31 ч/г	0.95
$L_{\text{ext.}A}$	2.83	2.54	0.90
Δ_A	4.16 ч/г	5.11 ч/г	1.23
∇_A	1.47 ч/г	2.02 ч/г	1.37
δ_A	2.17	3.49	1.61
d_A	1.17	2.49	2.12
Me_A	5.28 ч/г	5.56 ч/г	1.05
$\Omega\{A \geq 6\}$	29.8	34.3	1.15
\bar{A}	5.41 ч/г	5.44 ч/г	1.01
s_A	0.94 ч/г	1.01 ч/г	1.08
ν_A	0.17	0.19	1.07

В этом локальном поле находится (при $x_1 = x_2 = -1$) и самый слабо сопротивляющийся износу композит, с $A_{\min} = 2.05$ ч/г. Поэтому оно характеризуется высокой чувствительностью A к изменению F и CA ($d_A\{x_1, x_2 / x_3 = +1\}$ практически достигает 2.5, а $\delta_A\{x_1, x_2 / x_3 = +1\}$ 3.5 раза).

Оценки этих и практически любых обобщающих показателей могут быть получены по результатам сканирования РТ-полей.

1.5. Случайное сканирование полей для расчета обобщающих показателей

Сканирование РТ-поля по сути представляет собой сбор информации об уровне свойства Y материала (в частности, износостойкости A карбамидного композита)

по всей области поля (в частности, в пределах $-1 \leq x_i \leq +1$). При случайном сканировании с помощью ММК из бесконечного множества определяющих поле РТ-ситуаций случайно выбираются n вариантов – генерируются по n равномерно распределенных в интервале каждого фактора значений x_i , для которых по ЭС-модели вычисляются Y . Таким образом формируется случайная выборка объема n модельно-детерминированных значений Y^* (из совокупности объемом $N = \infty$).

Очевидно, что ошибки в оценках, полученных по такому массиву данных, будут тем меньше, чем больше число генерированных точек n и чем ближе их распределение к равномерному.

В табл. 1.4 показаны результаты случайного сканирования полного поля износостойкости, в трех координатах состава карбамидного композита.

В верхних строках (составы 1-8) столбцов x_1 , x_2 и x_3 левой части таблицы (случайный ряд A) записаны детерминированные координаты 8 вершин куба (± 1 , в общем случае число таких точек $n_v = 2^k$). Ввод вершин куба необходим, поскольку вероятность попадания непрерывной случайной величины в заданную точку практически равна нулю, а именно на границах $x_i = \pm 1$ может находиться экстремум квадратичной, неполной квадратичной, или линейной многофакторной ЭС-модели.

В то же время ввод вершин (при достаточно большом n) практически не может изменить свойств множества сканирующих поле точек, все n наборов координат x_i допустимо считать случайной выборкой.

Значения $-1 < x_i < +1$ в составах 9-10000 – генерированные случайные, равномерно распределенные в этом интервале, уровни факторов; в столбце A результаты расчета по приведенной в таблице модели износостойкости (1.3).

Показанные в правой части табл. 1.4 (ранжированный ряд) фрагменты результатов сортировки составов по убыванию уровня A (от 8.21 до 2.05 ч/г.) представляют матрицу результатов вычислительного эксперимента (МРВЭ, размером 10000×4). По ней, кроме интегральных характеристик (\bar{A} , s_A и др.), могут быть определены максимум, минимум и другие порядковые показатели (см. табл. 1.2). Это в частности, делящая пополам вариационный ряд медиана ($Me_A = 6.18$ ч/г, между строками с номерами «5000» и «5001»), а также относительный объем допустимой области при нормативе $A_{\text{spec}} = 6$ ч/г; последний имеющий такой уровень состав «5666», следовательно, $\Omega\{A_{\text{spec}}\} = 5666/10000 = 0.567$, или 56.7 %.

* Учет ошибок эксперимента и ЭС-моделей (3.13, 4.7), рассматриваемый в § 3.2, 4.3, дает оценки G , приемлемо сходящиеся к оценкам по модельно-детерминированным значениям Y .

Таблица 1.4

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

Коэффициенты модели А		Оценки коэффициентов		Случайный ряд А					Ранжированный ряд А				
				№ состава (строки МРВЭ)				Число составов	10000	№ состава			
				Максимум				Максимум					
				1.00	1.00	1.00	8.21	1.00	1.00	1.00	8.21		
				Среднее				Среднее					
				0.01	0.00	0.00	6.15	0.01	0.00	0.00	6.15		
				Минимум				Минимум					
				-1.00	-1.00	-1.00	2.05	-1.00	-1.00	-1.00	2.05		
				x_1	x_2	x_3	А	x_1	x_2	x_3	А		
b0	6.69	1	1	1	7.09	297	-0.47	1	-0.22	8.21			
b1	0.22	2	1	1	5.39	3919	-0.52	0.99	-0.17	8.19			
b2	1.45	3	1	-1	5.24	492	-0.27	1.00	0.06	8.17			
b3	0	4	1	-1	3.54	1353	-0.85	1.00	-0.27	8.17			
b11	-0.47	5	-1	1	6.00	5436	-0.30	0.98	-0.02	8.16			
b22	0	6	-1	1	7.70	8320	-0.65	0.98	-0.27	8.16			
b33	-1.12	7	-1	-1	2.05	5536	-0.43	0.99	-0.33	8.16			
b12	-0.53	8	-1	-1	3.75	7077	-0.08	0.99	-0.02	8.15			
b13	0.85	9	-0.08	0.62	0.29	9417	-0.44	0.96	-0.14	8.15			
b23	0	10	-0.24	-0.80	0.19	3387	-0.34	0.98	-0.28	8.15			
		11	0.80	0.77	0.92	7956	-0.05	1.00	-0.07	8.14			
		12	-0.97	-0.19	0.73	9709	-0.90	0.99	-0.35	8.14			
				
		5000	-0.28	-0.24	0.94	4.99	1819	0.69	-0.47	0.30	6.18		
		5001	0.07	-0.10	0.13	6.54	2412	0.25	-0.32	0.43	6.18		
				
		5665	-0.43	-0.46	-0.72	5.41	8516	-0.34	-0.21	0.34	6.00		
		5666	-0.73	0.15	0.49	5.98	9163	-0.85	0.64	0.83	6.00		
		5667	0.88	-0.69	0.68	5.83	160	-0.75	0.79	0.99	5.99		
		5668	-0.28	0.20	0.35	6.69	3525	0.51	-0.48	0.57	5.99		
				
		9996	-0.39	-0.73	-0.68	5.03	9740	-0.93	-0.87	0.90	2.79		
		9997	0.96	-0.99	-0.14	5.39	5720	-0.86	-0.98	0.93	2.64		
		9998	-0.28	-0.30	-0.32	6.07	5060	-0.95	-0.98	0.87	2.59		
		9999	-0.87	0.14	-0.47	6.50	334	-0.96	-0.94	0.91	2.56		
		10000	-0.36	0.64	0.04	7.59	7	-1	-1	1	2.05		

Закономерности распределения свойства Y в области РТ-поля (вне зависимости от определяющих его РТ-факторов) отражаются построенными по значениям Y для генерированных векторов факторов эмпирическими кривыми распределения, которые могут быть полезны при решении задач обеспеченности качества. На рис. 1.2 показаны эмпирические функция $F(A)$ и плотность $f(A)$ распределения износостойкости, построенные по 10000 полученным в вычислительном эксперименте значениям A . Доля не отвечающих нормативу значений (слева от метки 6 ч/г на шкале A) составляет $1 - \Omega\{A_{\text{spec}}\} = 0.433$ (от единичных высоты кривой F и площади под кривой распределения f).

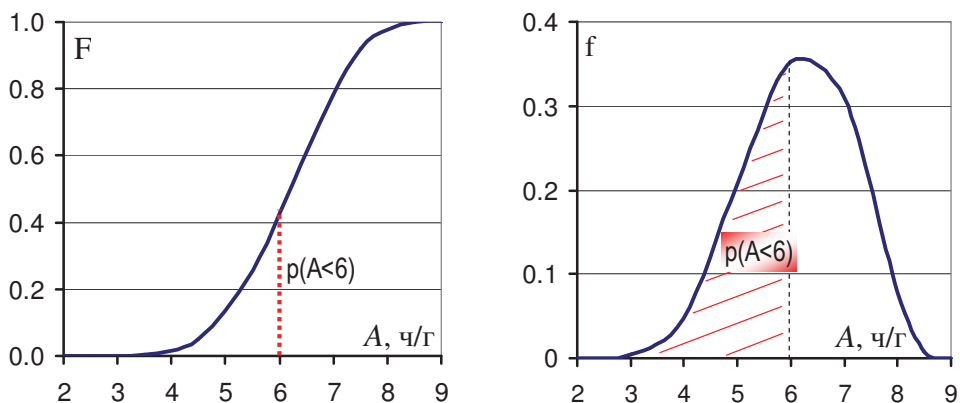


Рис. 1.2. Распределение уровня износостойкости в области факторов состава

Сколько составов следует генерировать для достаточно «представительного» сканирования поля? Если область поля – k -мерный куб с ребром $a = 2$ (безразмерные единицы факторного пространства) и объемом $V = 2^k$, то на каждую из $n = 10000$ точек, равномерно распределенных внутри куба, приходится 0.0001 этого объема, или элементарный кубик объемом $V_n = 2^k/n$. Ребро такого кубика $a_n = (2^k/n)^{1/k} = 2 \cdot (1/n)^{1/k}$, а расстояние между двумя наиболее удаленными точками равно его диагонали $L_n = a_n \cdot k^{0.5}$. Куб на рис. 1.1а имеет объем $2^3 = 8$ и диагональ $L_n = 2 \cdot 3^{0.5} = 3.46$.

Если $n = 10000$, то $V_n = 0.0008$, $a_n = 2 \cdot 0.0001^{1/3} = 0.093$ и диагональное расстояние $L_n = 0.093 \cdot 3^{0.5} = 0.161$.

Если существует возможность на основе инженерного анализа задать расстояние L_n , характеризующее точность вычислительного эксперимента при случайном сканировании поля свойства (степень представления всех возможных значений свойства n выборочными значениями), то проанализированные соотношения позволяют найти требуемое число генерируемых точек (1.9).

$$n = (2 \cdot k^{0.5} / L_n)^k \quad (1.9)$$

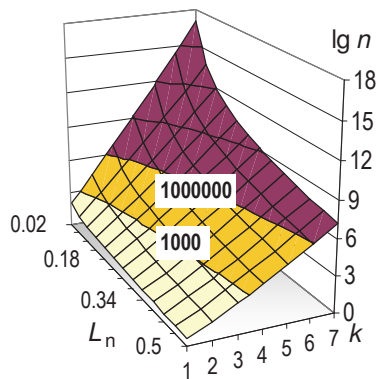


Рис. 1.3. Необходимое число точек n при сканировании поля в зависимости от числа факторов и задаваемого расстояния между точками

Как видно на рис. 1.3, эта двухпараметрическая функция быстро возрастает с ростом числа факторов – размерности области поля, исчерпывая компьютерные возможности. Поэтому в ряде задач (см. в частности, гл. 7) реализуются итерационные процедуры, при которых на каждой итерации решение уточняется за счет перехода к сканированию меньшей части области поля.

1.6. Моделирование обобщающих показателей

По значениям числовых показателей G может быть выполнен количественный анализ изменений, происходящих в локальных полях под влиянием изменяющихся факторов. Изменения значений этих характеристик отражают трансформацию локальных полей при смене уровней x_{ch} .

Расчет оценок G для любого количества любых локальных полей, при любых комбинациях уровней координат вектора x_{ch} не представляет никаких принципиальных методических трудностей. Аналогично тому, как определены G_A , приведенные в табл. 1.3 для показанных на рис. 1.1, b-c, локальных полей износостойкости (1.4-5), при верхнем и нижнем содержании крупного наполнителя ($x_{ch} = x_3 = \pm 1$, поля на «расстоянии» 2 эфп вдоль шкалы x_3), обобщающие показатели полей $A(x_1, x_2)$ при любых фиксированных значениях изменяющего фактора x_3 в интервале $(-1, +1)$ рассчитываются по моделям этих полей, получаемым при подстановке этих значений x_3 в модель полного поля (1.3).

Анализ роли изменяющихся факторов в создании тех или иных условий формирования полей градиентными факторами целесообразно начинать с рассмотрения интегральных параметрических G , среднего и коэффициента вариации. На рис. 1.4 показаны значения этих показателей для полей $A(x_1, x_2)$ в 11 точках на шкале x_3 , через равные интервалы (рассчитаны с помощью ММК при $n = 1000$). Бесспорно существует зона содержания крупных зерен (около $CA = 40\%$, $x_3 = 0$), оптимального по среднему уровню износостойкости $A_{av}\{x_1, x_2\}$, в исследуемом диапазоне количества полимера и карбида кремния; примерно в этих же условиях показатель изменчивости уровня локального поля $v_A\{x_1, x_2\}$ снижается с 19 до 13 %.

По оценкам $G_Y\{x_{gr}\}$ при фиксированных значениях x_{ch} могут быть построены **вторичные ЭС-модели** (по отношению к ЭС-модели полного поля – первичной), описывающие зависимости обобщающих показателей локальных полей от изменяющих эти поля факторов x_{ch} .

Так модели (1.9-10) описывают (практически с нулевой ошибкой неадекватности) зависимости $A_{av}\{x_1, x_2\}(x_3)$ и $v\{x_1, x_2\}(x_3)$, показанные на рис. 1.4.

$$A_{av}(x_3) = 6.549 + 0.017x_3 - 1.121x_3^2 \quad (1.10)$$

$$v(x_3) = 0.128 + 0.006x_3 + 0.043x_3^2 + 0.008x_3^4 \quad (1.11)$$

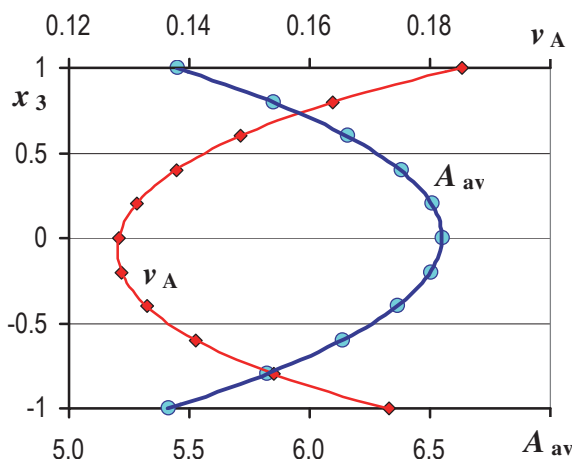


Рис. 1.4. Влияние CA на средний уровень и вариацию уровня поля износоустойчивости в координатах F и SC

В качестве вторичной модели, как правило, приходится использовать полином более высокой степени, чем первичное описание (для сохранения того же уровня точности).

Модели для обобщающих показателей, $G_Y\{\mathbf{x}_{gr}\}(\mathbf{x}_{ch})$, строятся по результатам вычислительных (вторичных) экспериментов – оценкам $G_Y\{\mathbf{x}_{gr}\}$, рассчитанным для полей $Y(\mathbf{x}_{gr})$ в точках \mathbf{x}_{ch} плана вычислительного эксперимента в области Ω_{ch} , соответствующего виду вторичной модели.

При построении модели можно воспользоваться «генерируемой ошибкой эксперимента» s_e [11, 19, 133] или оценкой s_e по результатам случайного сканирования локальных полей – такого как описано в 1.5, но многократного, позволяющего получить эмпирическое распределение любого обобщающего показателя (см. ниже в гл. 3).

В целом путь от получения реальных данных об Y в N_1 точках плана натурального эксперимента (НЭ) до получения, по результатам N_2 испытаний вычислительного эксперимента, моделей, выражающих особенности зависимостей свойств Y от РТ-факторов \mathbf{x} , представляет следующая формальная цепочка.

$$\left. \begin{array}{l} \text{Результаты НЭ: } Y(\mathbf{x}_j), \mathbf{x}_j = (\mathbf{x}_{gr,j}, \mathbf{x}_{ch,j}) \in \Omega_x, j = 1, 2, \dots, N_1 \rightarrow \\ \text{первичная модель } Y(\mathbf{x}) \rightarrow \\ \text{оценки ВЭ: } G_Y\{\mathbf{x}_{gr}\}(\mathbf{x}_{ch,j}), \mathbf{x}_{ch,j} \in \Omega_{ch}, j = 1, 2, \dots, N_2 \rightarrow \\ \text{вторичная модель } G_Y\{\mathbf{x}_{gr}\}(\mathbf{x}_{ch}) \end{array} \right\} (1.12)$$

Цепочка «натурный эксперимент – вторичная модель» отражает чередование композиции и декомпозиции (синтеза и анализа) описания исследуемой системы при движении от частного к общему. Осуществляется эффективное использование «частного» при формулировке вопроса природе (спланированный натуральный эксперимент) – обобщение в попытке получить ответ (ЭС-модель) – анализ, структурирование при постановке нового вопроса (спланированный вычислительный эксперимент), на более высоком уровне знания – новый уровень обобщения эмпирической информации (модели обобщающих показателей).

В результате для каждого из исследуемых критериев Y в распоряжении материаловеда-технолога оказывается, помимо первичной полной ЭС-модели, набор ЭС-моделей меньшей размерности – модели локальных полей и вторичные модели, для обобщающих показателей. Модель $G_Y\{\mathbf{x}_{gr}\}(\mathbf{x}_{ch})$ может потребоваться для количественного анализа трансформаций $Y(\mathbf{x}_{gr})$ под влиянием \mathbf{x}_{ch} , для управления полем за счет этих факторов, для его оптимизации по тому или иному критерию $G_Y\{\mathbf{x}_{gr}\}$.

На рис. 1.5 (слева) показаны описанные моделями (1.13-14) максимальный уровень и потенциальный относительный прирост износостойкости, которые могут быть достигнуты внутри диапазонов F и SC (x_1 и x_2), в зависимости от CA (x_3).

$$A_{\max} = 8.184 - 0.280x_3 - 0.704x_3^2 + 0.014x_3^3 - 0.036x_3^4 \quad (1.13)$$

$$\delta_A = 2.048 + 0.335x_3 + 0.270x_3^2 + 0.338x_3^3 + 0.505x_3^4 \quad (1.14)$$

Графики справа на рис. 1.5 демонстрируют влияние отдельно каждого из трех рецептурных факторов (x_1 , x_2 , x_3 , указанных возле соответствующей кривой) в роли фактора, изменяющего локальное поле ($A(x_2, x_3)$, $A(x_1, x_3)$, $A(x_1, x_2)$) соответственно, на показатель $\Omega\{A \geq A_{\text{spec}} = 6\}$ – процент тех из композиций, определяемых двумя другими факторами, которые обеспечивают $A \geq 6$ час/г.

Зависимости от x_1 и x_3 аппроксимированы полиномами 3-й степени.

В случае $x_{ch} = x_2$ получение прогнозируемых вторичной моделью значений $\Omega\{A \geq 6\}$ в диапазоне от 0 до 100% гарантировалось моделированием величины

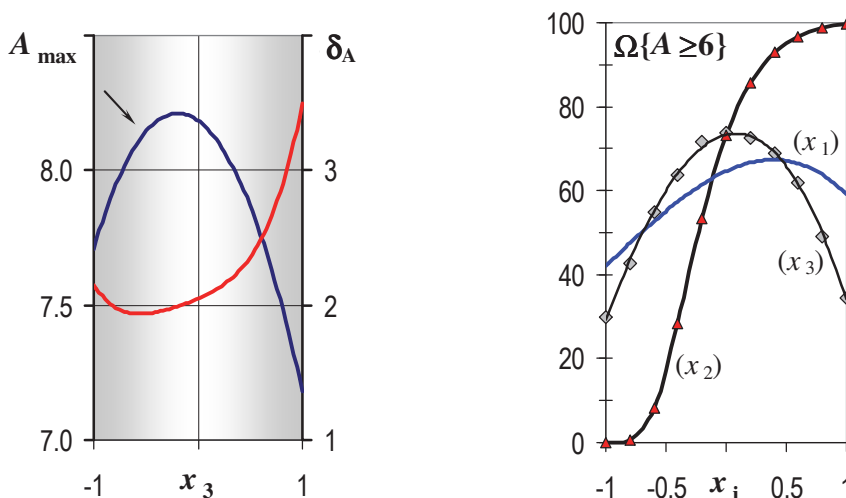


Рис. 1.5. Обобщающие показатели полей износостойкости, формируемых двумя из трех факторов, в зависимости от изменяющего поле третьего фактора

$\alpha\Omega = \ln(\Omega/(100-\Omega))$ [11, 132]. Однако наиболее близкой оценкам этого показателя в вычислительном эксперименте оказалась кривая Гомперца (1.15).

$$\Omega\{A \geq A_{\text{spec}} = 6\} = 100.8 \cdot \exp(\exp(-1.14 - 3.43x_2)) \quad (1.15)$$

Важно, что понятие локального поля и его обобщающих показателей, выделение градиентных и изменяющих факторов позволяют осуществить структурированный подход к анализу связей свойств композиционного материала с многообразием РТ-факторов. Этот подход оказывается эффективным благодаря снижению размерности анализа (вместо Y в пространстве k факторов анализируются Y в пространстве $k_{\text{gr}} < k$ факторов и G_Y в пространстве $k_{\text{ch}} < k$ факторов), а также возможности (обсуждаемые в гл. 2) учесть априорную информацию об особенностях влияния на свойства факторов разных подсистем.

1. 7. Однофакторные локальные поля в зонах экстремумов полного поля

Во многих задачах материаловедения особенно интересен и полезен анализ индивидуального влияния каждого из k рецептурно-технологических факторов на исследуемое свойство Y в двух «контрастных» зонах РТ-поля – зонах максимального и минимального уровня свойства, Y_{max} (при $x_{\text{max.1}}, x_{\text{max.2}}, \dots, x_{\text{max.k}}$) и Y_{min} (при $x_{\text{min.1}}, x_{\text{min.2}}, \dots, x_{\text{min.k}}$). Однофакторные поля в этих зонах позволяют выявить индивидуальное влияние факторов, представляют информацию для поиска оптимальных инженерных решений и для определения РТ-условий, при которых целесообразно проводить специальные ресурсоемкие инструментальные исследования структуры и свойств материала.

Принцип описания и визуализации таких полей – анализируемый фактор остается переменным в модели полного поля, а остальные $(k - 1)$ факторов фиксируются на соответствующих экстремумам уровней*.

Модель (1.3) трехфакторного поля износостойкости позволяет увидеть в зонах минимума и максимума 3 пары однофакторных полей. Поле (1.16), формируемое x_1 (степенью наполнения F), получено при подстановке в (1.3) координат $x_{\text{max.2}} = +1$ и $x_{\text{max.3}} = -0.22$ максимума $A_{\text{max}} = 8.21$ ч/г, а (1.16) при подстановке $x_{\text{min.2}} = -1$ и $x_{\text{min.3}} = +1$, соответствующих $A_{\text{min}} = 2.05$ ч/г (табл. 1.2); как и следовало ожидать, максимум в (1.16) имеет координату $x_{\text{max.1}} = -0.47$, а минимум в (1.16) $x_{\text{min.1}} = -1$.

$$A(x_1 / x_{\text{max.2}}, x_{\text{max.3}}) = 8.08 - 0.49x_1 - 0.47x_1^2 \quad (1.16)$$

* Этот же принцип используется при построении «квазиоднофакторных кривых» [8, 9, 19, 90, 108], позволяющих сравнивать и ранжировать роли факторов.

$$A(x_1 / x_{\min.2}, x_{\min.3}) = 4.12 + 1.60x_1 - 0.47x_1^2 \quad (1.17)$$

Аналогично получены зависимости (1.18-21). Для описания влияния x_2 (содержания зерен карбида кремния SC) на износостойкость в зоне максимума зафиксированы $x_1 = x_{\max.1} = -0.47$ и $x_3 = x_{\max.3} = -0.22$, а в зоне минимума $x_1 = x_{\min.1} = -1$ и $x_{\min.3} = +1$. Для зависимости от x_3 (доли в наполнителе крупных зерен андезита, CA) в зоне максимума в (1.3) подставлены $x_1 = -0.47$ и $x_2 = +1$, а в зоне минимума $x_1 = x_2 = -1$.

$$A(x_2 / x_{\max.1}, x_{\max.3}) = 6.51 + 1.71x_2 \pm 0 \quad x_2^2 \quad (1.18)$$

$$A(x_2 / x_{\min.1}, x_{\min.3}) = 4.03 + 1.98x_2 \pm 0 \quad x_2^2 \quad (1.19)$$

$$A(x_3 / x_{\max.1}, x_{\max.2}) = 8.18 - 0.42x_3 - 1.12x_3^2 \quad (1.20)$$

$$A(x_3 / x_{\min.1}, x_{\min.2}) = 4.02 - 0.85x_3 - 1.12x_3^2 \quad (1.21)$$

Графики каждой пары однофакторных полей на рис. 1.6 (сплошные линии) показывают коридор уровня свойства вдоль диапазона значений соответствующего фактора, отражают характер влияния каждого из трех РТ-факторов.

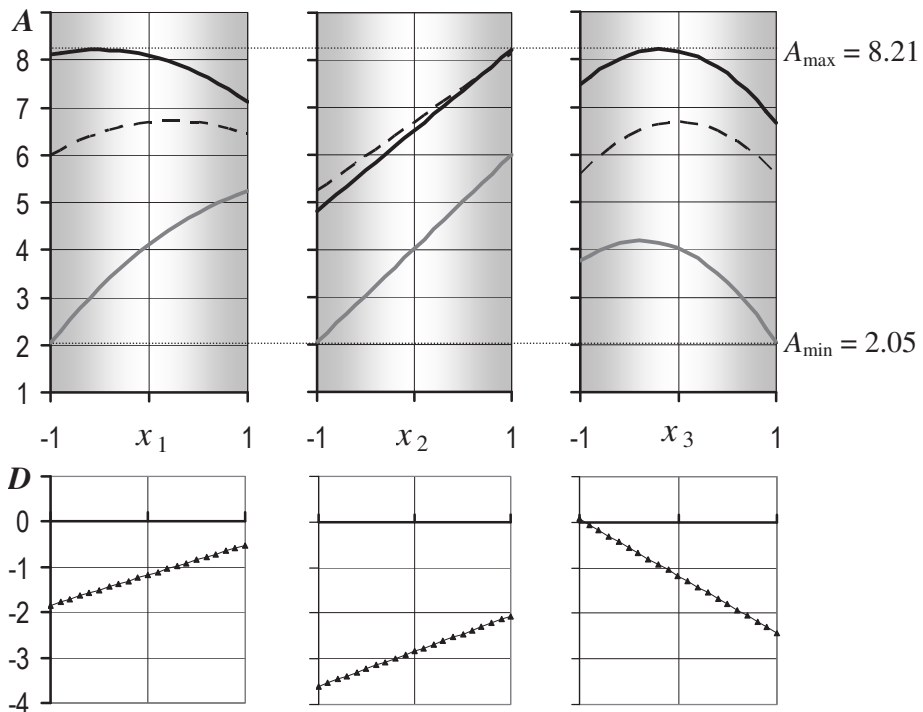


Рис. 1.6. Однофакторные локальные поля износостойкости A (ч/г) в зонах экстремумов и в центре двухфакторной области; однофакторные зависимости показателя D (ч/г) – неравномерности изменения A при переходе из зоны минимума в зону максимума

Информационную ценность каждой пары кривых в зонах экстремумов можно усилить, если проанализировать равномерность перехода от $Y(x_i / \mathbf{x}_{\min.ch})$ к $Y(x_i / \mathbf{x}_{\max.ch})$. Поскольку эти поля в общем случае лежат не в одной плоскости, то в качестве дополнительной границы отсчета целесообразно выбрать соответствующее локальное поле, проходящее через центр $(k-1)$ -факторной области, $Y(x_i / \mathbf{x}_{ch} = (0, 0, \dots))$. Три таких поля износостойкости (1.21-23) также отображены на рис. 1.6 (пунктирные линии).

$$A(x_1 / x_2 = x_3 = 0) = 6.69 + 0.22x_1 - 0.47x_1^2 \quad (1.22)$$

$$A(x_2 / x_1 = x_3 = 0) = 6.69 + 1.45x_2 \pm 0 \quad x_2^2 \quad (1.23)$$

$$A(x_3 / x_1 = x_2 = 0) = 6.69 \pm 0 \quad x_3 - 1.12 \quad x_3^2 \quad (1.24)$$

На том же рис. 1.6 в зависимости от x_i показана мера неравномерности, разной интенсивности изменения уровня однофакторного поля при переходе из зоны минимума в зону максимума (D). Для представления D , поля (1.16-21) обозначены $A_U(x_i)$ и $A_L(x_i)$, соответственно в зонах верхних (*Upper*) и нижних (*Lower*) значений A , поля (1.22-24) – $A_0(x_i)$. Показатель D есть разница центральных средних $A_M(x_i) = (A_L(x_i) + A_U(x_i)) / 2$ и уровней $A_0(x_i)$.

Глава 2. СТРУКТУРИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ ФАКТОРОВ. СТРУКТУРИРОВАННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО- СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Противоречие между «простотой» интегральной полиномиальной ЭС-модели, описывающей полное поле $Y(\mathbf{x})$ в факторной области $\Omega_{\mathbf{x}}$, и структурной сложностью объекта (композиционного материала) смягчается, если модель структурирована – в ней выделено влияние отдельных факторных подсистем и их синергизм [8, 85, 99, 103, 131, 134]. Декомпозицию системы факторов следует начинать с содержательной (технологической) постановки задачи исследования.

При **априорном структурировании** (до эксперимента) РТ-факторы разделяют на подсистемы, прежде всего, в соответствии с характером и степенью их влияния на структуру и свойства материала. Это могут быть: группа факторов, определяющих свойства матрицы (водо-вяжущее отношение, концентрации добавок и т.п.); факторы, задающие количество наполнителя и его дисперсионный и (или) минеральный состав; состав комплексной добавки; технологические режимы (температура на разных стадиях процесса, давление в автоклаве и др.); эксплуатационные факторы, задающие агрессивность среды; совокупности факторов из разных подобных групп, к варьированию которых (по априорным данным) наиболее или наименее чувствительны отклики Y , и т.д.

Апостериорное структурирование, когда ЭС-модели уже построены, может потребоваться при анализе влияния РТ-факторов на свойства; тогда могут быть выделены другие РТ-подсистемы.

Структурированная модель полного поля $Y(\mathbf{x} = (\mathbf{x}_{gr}, \mathbf{x}_{ch}))$ представляет, как показано в гл. 1, многообразие локальных полей свойства $Y(\mathbf{x}_{gr})$, в координатах той или иной группы формирующих их градиентных факторов ($\mathbf{x}_{gr} \in \Omega_{gr}$, создающих градиент Y в области Ω_{gr}), и трансформацию этих полей под влиянием группы изменяющих их факторов ($\mathbf{x}_{ch} \in \Omega_{ch}$). Могут быть рассмотрены любые полезные комбинации выделения из \mathbf{x} градиентных и изменяющих факторов.

Выделенным на этапе технологической постановки задачи подсистемам факторов при переходе к математическому описанию могут соответствовать следующие подобласти факторного пространства:

- ♦ p -мерные кубы (отрезки, квадраты, кубы...) взаимонезависимых нормализованных факторов x_i , $-1 \leq x_i \leq +1$, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_p) \in \Omega_{\mathbf{x}}$;
- ♦ $(q-1)$ -мерные симплексы (отрезки, треугольники, тетраэдры...) q линейно связанных смесевых факторов v_i , $0 \leq v_i \leq 1$, $\sum v_i = 1$, $\mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_i, \dots, v_q) \in \Omega_{\mathbf{v}}$;

в системе может быть выделено две смеси (w – второе обозначение);

♦ вырезанные дополнительными ограничениями на x , v , w подобласти кубов и симплексов, а также призмы и другие произведения полных и ограниченных кубов и симплексов [8, 9, 85].

Подсистемы факторов, определяющих набор свойств материала – его качество Q (от *quality*), обозначены:

T (от *technology*) – «технология», T_p – подсистема p **взаимонезависимых** x^* ; из T_p могут быть выделены несколько подсистем «технология» (в частности, T_{p1} и T_{p2} , $p_1 + p_2 = p$);

M (от *mixture*) – «смесь», подсистема **линейно связанных** факторов v (или w); M_q – смесь q компонентов.

Особенности пространства факторов в задачах разработки материалов могут приводить к рассмотрению систем «смеси, технологии – свойства» ($MMTQ$). Вектор факторов для них в общем случае можно записать в виде $z = (v, w, (x_1, x_2)) \in \Omega_z^{**}$. Система факторов «смеси, технологии» (MMT) обобщает все рассматриваемые в строительном материаловедении комбинации линейно связанных и взаимонезависимых переменных, включаемых в ЭС-модели. В табл. 2.1 обозначен ряд типовых систем «смеси, технологии» и варианты отображения для них факторных областей (подразумеваются и «обратные» отображения, в частности, «квадраты на треугольнике» в дополнение к «треугольникам на квадрате»); в отдельных случаях в модель полного поля включают более семи факторов [98, 135-139] и более двух подсистем T [98, 135, 136].

Структурированным системам факторов соответствуют и **структурированные ЭС-модели** [85, 103, 131, 134]; большинство их форм и физический смысл параметров описаны в книге [8].

Для систем TT это обычные полиномы $P(x)$, записанные блоками, соответствующими отдельным подсистемам и их синергизму – как показанная ниже модель (2.1) для вязкости η_1 (Па·с) фиброполимерцементной композиции при скорости сдвига $\dot{\gamma} = 1 \text{ с}^{-1}$, в зависимости от содержания диспергируемого полимера Виннапас ($V - x_1$), молекулярной массы ($MMC - x_2$) и дозировки ($MC - x_3$) метилцеллюлозы, количества полипропиленовой фибры ($F - x_4$) [23, 24, 140].

* Это могут быть и факторы рецептуры (например, дозировки добавок относительно базового компонента), и параметры процессов производства и эксплуатации.

** Структурированная факторная область Ω_z (полного поля) в общем случае записывается как декартово произведение соответствующих подобластей $\Omega_z = \Omega_v \otimes \Omega_w \otimes (\Omega_{x1} \otimes \Omega_{x2})$. В частности, для $z = (v_1, v_2, v_3, x_1, x_2)$ область Ω_z есть множество точек смесового треугольника в каждой точке квадрата взаимонезависимых факторов (и наоборот).

Таблица 2.1. Обозначения факторных систем «смеси, технологии» с вариантами отображения факторных областей

Система факторов	Обозначение	Количество факторов $k = (p = p_1 + p_2) + q_v + q_w$						
		2	3	4	5	6	7	
«Смесь»	M	M_2 Отрезок (—)	M_3 Треугольник (Δ)	M_4 Тетраэдр				
«Технология»	T	T_2 Квадрат (\square)	T_3 Куб					
«Смесь, смесь»	M^q, M^{qw}			M_2M_2 «— на —»	M_3M_2 « Δ на —»	M_3M_3 « Δ на Δ »	M_4M_3 «Тетраэдры на Δ »	
«Смесь, технология»	MT			M_3T_1 « Δ на —» (треугольная призма)	M_4T_1 «Тетраэдры на —»	M_4T_2 «Тетраэдры на \square »	M_4T_3 «Тетраэдры на кубе»	
«Технология, технология»	T^p, T^{p2}	T_1T_1 «— на —»	T_2T_1 « \square на —»	T_2T_2 , «на \square » «Кубы на —»	T_3T_2 «Кубы на \square »			
«Смесь, смесь, технология»	M^q, M^{qw}, T				$M_2M_2T_1$ « \square и прямоугольники на —»	$M_3M_2T_1$ «3-угольные призмы на —»	$M_3M_3T_1$ «3-угольные призмы на Δ » $M_3M_2T_2$ «призмы на \square »	
«Смесь, технология, технология»	MT^p, T^p2			$M_2T_1T_1$ «Прямоугольники и \square на —»	$M_3T_1T_1$ «3-угольн. призмы на —», « Δ на \square »	$M_3T_1T_2$ «3-угольн. призмы на \square », « Δ на кубе»	$M_3T_2T_2$, $M_4T_1T_2$ « Δ и тетраэдры на \square , —, кубе»	

$$\begin{array}{l}
 \ln \eta_1 = 4.06 \\
 \begin{array}{|l}
 \hline
 + 0.70x_1 - 0.41x_1^2 \\
 \hline
 - 0.09x_2 - 0.20x_2^2 \pm 0 \ x_2x_3 \\
 \hline
 + 0.13x_3 \pm 0 \ x_3^2 \\
 \hline
 + 0.17x_4 \pm 0 \ x_4^2 \\
 \hline
 \end{array} \\
 \begin{array}{|l}
 \hline
 + 0.25x_1x_2 \\
 \hline
 - 0.05x_1x_3 \\
 \hline
 + 0.11x_1x_4 \\
 \hline
 \pm 0 \ x_2x_4 \\
 \hline
 - 0.16x_3x_4 \\
 \hline
 \end{array} \\
 \end{array} \quad (2.1)$$

Эллипсы с описаниями эффектов:

- Эффекты Виннапас при средних ММС, МС, F
- Эффекты метилцеллюлозы при средних V и F
- Уровень при средних V, ММС, МС, F
- Эффекты фибры при средних V, ММС, МС
- Синергизм

Для систем со смесями были предложены приведенные полиномы (P_r , *reduced polynomial*): $P_r(v, x)$ для систем MT [141-144], $P_r(v, w)$ и $P_r(v, w, x)$ – для систем MM [144] и MMT [145] соответственно. В книге [8] показано, как эти формы моделей были получены, разъяснен смысл их коэффициентов.

Так в приведенном полиноме второго порядка (2.2) для M_3T_2 , описывающем влияние фракционного состава серпентинитового заполнителя (w_1, w_2, w_3 – доли «мелкой», «средней» и «крупной» фракций), концентрации суперпластификатора и водоцементного отношения (взаимонезависимые x_1 и x_2) на прочность R (МПа) серпентинитового бетона [86, 103, 131], блоки (a-c) содержат следующую информацию.

$$R = \begin{array}{|l}
 \hline
 8.93w_1 + 6.88w_1w_2 + 3.38w_1w_3 \\
 + 8.82w_2 \quad \quad \quad + 5.51w_2w_3 \\
 + 9.84w_3 \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad (a) \\
 \hline
 \end{array} \begin{array}{|l}
 \hline
 + 0.96w_1x_1 - 1.61 w_1x_2 \\
 + 1.93w_2x_1 - 2.76 w_2x_2 \\
 + 1.44w_3x_1 - 2.33 w_3x_2 (c) \\
 \hline
 \end{array}$$

$$\begin{array}{|l}
 \hline
 + 0.58x_1^2 \pm 0 \ x_1x_2 \\
 \pm 0 \ x_2^2 \quad \quad \quad (b) \\
 \hline
 \end{array} \quad (2.2)$$

В блоке (a) полином Sheffe [8, 9, 146, 147] описывает влияние на прочность многофракционного заполнителя при $x_4 = x_5 = 0$ (в центре диапазонов факторов матрицы); коэффициенты при w_i соответствуют уровню свойства для «чистых» псевдокомпонентов, другие оценивают эффект от смешивания фракций, их синергизм. Блок (b) учитывает нелинейность влияния на свойство факторов матрицы при любом фракционном составе серпентинита. Блок (c) отражает синергизм (антагонизм) между количеством каждого из компонентов заполнителя и значениями факторов, определяющих свойства цементной матрицы.

Анализ априорных данных может не позволить выдвинуть гипотезу о связи Y с z , соответствующей приведенному полиному $P_r(z)$, например, об отсутствии эффектов $w_i w_j x_k$, как в (2.2). Тогда в качестве ЭС-моделей можно воспользоваться [8] произведениями обычных и приведенных полиномов для от-

дельных подсистем (при возможности реализовать объемный эксперимент, чтобы оценить большое число коэффициентов и эффектов высокого порядка, многие из которых могут оказаться незначимыми).

В моделях-произведениях каждый из коэффициентов модели для одной из подсистем записывается как функция от факторов другой подсистемы. В частности, $Y(\mathbf{v}, \mathbf{x})$ может быть выражено произведением приведенного полинома Шеффе и обычного полинома в форме (2.3), где i и j – индексы эффектов, базисных функций f , в моделях-сомножителях.

$$Y(\mathbf{v}, \mathbf{x}) = P_1(\mathbf{v}) \times P(\mathbf{x}) = \Sigma\{A_j = [\Sigma b_{ij} \cdot f_i(\mathbf{x})] \cdot f_j(\mathbf{v})\} \tag{2.3}$$

В частности, произведение полиномов второго порядка (Шеффе и обычного) для системы M_3T_1 может быть записано в виде (2.4) или (2.5).

$$\begin{aligned} Y(v_1, v_2, v_3, x) = & (b_{0.1} + b_{1.1}x + b_{11.1}x^2) \cdot v_1 \\ & + (b_{0.2} + b_{1.2}x + b_{11.2}x^2) \cdot v_2 \\ & + (b_{0.3} + b_{1.3}x + b_{11.3}x^2) \cdot v_3 \\ & + \dots \\ & + (b_{0.23} + b_{1.23}x + b_{11.23}x^2) \cdot v_2v_3 \end{aligned} \tag{2.4}$$

$$\begin{aligned} Y(v_1, v_2, v_3, x) = & (A_{1.0}v_1 + A_{2.0}v_2 + A_{3.0}v_3 + A_{12.0}v_1v_2 + A_{13.0}v_1v_3 + A_{23.0}v_2v_3) \\ & + (A_{1.1}v_1 + A_{2.1}v_2 + A_{3.1}v_3 + A_{12.1}v_1v_2 + A_{13.1}v_1v_3 + A_{23.1}v_2v_3) \cdot x \\ & + (A_{1.11}v_1 + A_{2.11}v_2 + A_{3.11}v_3 + A_{12.11}v_1v_2 + A_{13.11}v_1v_3 + A_{23.11}v_2v_3) \cdot x^2 \end{aligned} \tag{2.5}$$

Конечно, для оценки всех 18 коэффициентов модели (2.4-5) необходимо не менее 18 опытов, а не 10-ти, необходимых при оценке для M_3T_1 коэффициентов приведенного полинома второго порядка (2.6). Однако, последний не позволяет, в частности, выделить эффекты v_1v_3x – охарактеризовать связь синергизма внутри смеси с уровнем «технологического» фактора.

$$\begin{aligned} Y(v_1, v_2, v_3, x) = & \boxed{\begin{matrix} A_1v_1 + A_{12}v_1v_2 + A_{13}v_1v_3 \\ + A_2v_2 & + A_{23}v_2v_3 \\ + A_3v_3 \end{matrix}} \quad \boxed{\begin{matrix} + D_1v_1x \\ + D_2v_2x \\ + D_3v_3x \end{matrix}} \\ & \boxed{+ b_{11}x^2} \end{aligned} \tag{2.6}$$

Через модель-произведение можно соединить с ЭС-моделью «квазифундаментальную» модель (реологическую, тепломассообменную и т.п.) [11, 20, 21 и др.]. Так, параметры K и m модели Оствальда-Вилля (2.7) для вязкости в зависимости от скорости сдвига (где K – вязкость η_1 , при единичной скорости, m – темп разрушения; чем больше $|m|$, тем менее устойчива структура) могут быть выражены

[23, 24, 140] функциями состава (2.8), как показано выше в (2.1) для фиброполимерцементных композиций.

$$\eta_{\gamma} = K^{m_{\gamma}}, \quad \ln \eta_{\gamma}(x) = \ln K(x) + m(x) \cdot \ln \gamma' \quad (2.7-8)$$

Моделью-произведением можно выразить совместное влияние конструктивных параметров (вектор L) и РТ-факторов на свойства конструкции и описать вторичными моделями зависимости от x обобщающих показателей $G_Y\{L\}$.

Структурированным факторным областям и структурным особенностям ЭС-моделей соответствуют специальные планы экспериментов, по результатам которых такие модели строятся. Разработанный алгоритм синтеза оптимальных планов [8, 18] позволил построить планы экспериментов с учетом особенностей постановок задач исследования строительных композитов [9]: формы факторной области (полной или усеченной дополнительными ограничениями на факторы, для любой из систем $MMTT$ и их подсистем); вида модели для любой из систем $MMTTQ$, с включением разных эффектов разных факторов на основе априорной информации; необходимости включить в план как «обязательные» интересующие технолога точки РТ-пространства (составы, режимы, условия эксплуатации). Это, в частности, вошедшие в практику исследований планы: для систем M_3T_2 , «треугольники на квадрате» [131, 148-154 и др.]; планы для систем M_3M_3 , «треугольники на треугольнике» [8, 18, 70, 155], и $M_3M_3T_1$, «призмы на треугольнике» [8, 156]; планы для исследований систем M_4T_2 и M_3T_3 (тетраэдры на квадрате [157-159] и треугольники на кубе [160], см. Приложение 2). В плане на «конфете» – квадрате с отсеченной парой противоположных углов [70, 88, 161, 162], соответствующих нетехнологичным смесям, было предусмотрено включение в модель эффектов до 4-ой степени для описания влияния состава на возможную трансформацию распределений свойств. Эффективный план, синтезированный для моделей, включающих неполные кубические и биквадратные пары части факторов, применен в исследованиях композитов на щелочных вяжущих [19, 98]. Разделение факторов и выделение базового блока в плане эксперимента позволяет [19, 83, 87, 88, 98] существенно сократить объем экспериментальных работ для решения типовой технологической задачи – выбора из набора альтернатив наиболее эффективного реагента (добавки, наполнителя, отхода взамен сертифицированного сырьевого компонента и т.д.). Для части факторов может потребоваться нестандартная нелинейная нормализация к $|x| \leq 1$ [19, 98, 163, 164 и др.].

При анализе результатов моделирования – **при апостериорном структурировании** – может оказаться полезным сравнение локальных полей $Y(x_{gr})$ для «контрастных» уровней x_{ch} , с наибольшим перепадом свойств в диапазоне изменяющих факторов [18]. Следует отметить и полезный в многофакторных ситуациях принцип «сепарирования» ЭС-моделей [98], который позволяет (при малых рисках) выделить из полного поля несколько 1-3-факторных, взаимонезависимых. Содержательному анализу результатов моделирования помогают графики и «карты» (изолинии, поверхности) локальных полей при разных уровнях изменяющих факторов (что символически показано на рис. 2.1). Это уже широко используемые диаграммы «квадраты на квадрате», «квадраты на треугольнике» и т.п., часто с отображением на несущей фигуре изменений максимальных и минимальных уровней локальных полей, абсолютных и относительных перепадов и других числовых обобщающих показателей.

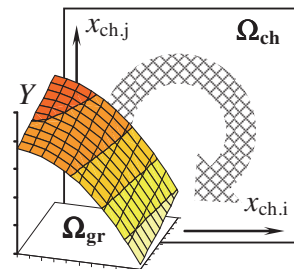


Рис. 2.1. Перемещение локального поля $Y(x_{gr})$ по области изменяющих факторов

Глава 3. РЕЦЕПТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ПОЛЯ: МОДЕЛЬНО-ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЕ, ГАРАНТИРОВАННОГО УРОВНЯ СВОЙСТВА, СЛУЧАЙНЫЕ

Описывающая РТ-поле свойства Y экспериментально-статистическая модель обобщает результаты натурального (или вычислительного) эксперимента, реализованного в N точках плана – для N вариантов состава и параметров процессов (или параметров имитируемых структур).

Многokратные «параллельные» определения уровня свойства при значениях РТ-факторов, соответствующих точкам x_j плана эксперимента ($j = 1, \dots, N$), дают выборки значений Y_j – по n случайных чисел $Y_{j,\min}, \dots, Y_{j,\max}$. В большинстве задач материаловедения (не связанных с проблемами обеспечения качества и надежности в специфических условиях [8, гл. 5]) принимается, что уровень свойства распределен нормально. По этим эмпирическим данным в каждой точке x_j рассчитываются оценки среднего \bar{Y}_j и стандартное отклонение s_{Y_j} (в свою очередь, случайные числа).

Оценки средних служат информационной основой для алгебраического построения ЭС-модели [9] – для расчета методом наименьших квадратов (МНК) вектора b оценок ее коэффициентов (также случайных величин). Оценки среднеквадратических отклонений s_{Y_j} используются для определения [9] стандартной ошибки эксперимента $s_e\{Y_j\}$, относительно которой следует принять (с определенным риском) либо гипотезу о постоянстве во всей факторной области (что существенно упрощает статистический анализ), либо гипотезу об изменении по известной функции от x [165].

При нормальном распределении Y_j границы $\bar{Y}_j \pm s_e$ соответствуют доверительной вероятности $\gamma = 0.6826$ попадания измеряемой величины в этот интервал и двустороннему риску $\alpha = (1 - \gamma) = 0.3174$ выхода за эти границы; интервал $\pm 2 \cdot s_e$ соответствует риску $\alpha = 0.0455$, а «трехсигмовые» границы $\bar{Y}_j \pm 3 \cdot s_e$ – весьма малому риску $\alpha = 0.0027$, который для строительного материаловедения можно признать ничтожным. В общем случае, в произведении $t_{\alpha} \cdot s_e$ закон распределения исследуемой случайной величины Y определяет числовое значение квантиля t_{α} , соответствующее риску α , допустимому в конкретной инженерной задаче.

Риск, связанный с использованием эмпирических данных, не единственный в списке рисков аналогии при моделировании [18, гл.1, §3]. Однако, когда условия эксперимента, форма модели (в данной работе – полином) и метод оценивания ее параметров (МНК) определены, этот риск можно достаточно корректно учесть в вычислительных экспериментах на РТ-полях, при анализе и оптимизации структуры и свойств материалов.

Описание ЭС-моделью, с МНК-оценками ее коэффициентов, предполагает наличие в любой точке x области поля разницы между эмпирическим результатом \bar{Y} (с ошибкой эксперимента s_e) и оценками Y по модели (сумму квадратов N таких отклонений метод и минимизирует). Исходя из этого, кроме единственной (точечной) детерминированной моделью оценки Y , для любого x можно определить [9, 89, 90] интервал $Y \pm \Delta Y$, накрывающий с заданным риском α ис-

тинное значение (математическое ожидание) уровня свойства в этой точке (для этого состава, при этих параметрах процессов или имитируемых структур).

3.1. Модельно-детерминированные поля. Функция дисперсии предсказания

В ЭС-моделях (В.1), в частности в модели поля износостойкости (1.3) и выделяемых из нее моделей локальных полей (см. гл. 1), ошибка эксперимента s_e и риск α участвуют в «скрытом» виде (они учтены при удалении незначимых, статистически равных нулю оценок b).

Рассчитываемые по модели точечные оценки Y однозначно определяют значение свойства для любого $x \in \Omega_x$. Такое РТ-поле $Y(x)$ является **модельно-детерминированным** полем [105]. Хотя его уровни включают ошибки и эксперимента, и самой модели, в вычислительном эксперименте на таком поле откликами будут модельно-детерминированные средние значения свойства Y материала в рецептурно-технологических условиях x .

Результаты вычислительных экспериментов на модельно-детерминированных полях не будут в явном виде отражать риски, заложенные в реальных экспериментальных данных и при моделировании.

Риски можно учесть, используя интервальные оценки (3.1), где: $Y(x)$ – предсказываемое ЭС-моделью среднее значение Y при x (МНК-оценка условного математического ожидания случайной величины Y);

t_α – квантиль распределения Стьюдента [9, 166, 167] при риске α (вероятности выхода значений Y за пределы доверительного интервала);

s_e – среднеквадратическая ошибка натурального эксперимента (при которой ЭС-модель признана адекватной, а оценки коэффициентов значимыми);

$d(x)$ – зависящая от x **функция дисперсии предсказания** [8, 9, 89, 90], определяемая планом эксперимента и видом модели (*конечной*, без незначимых эффектов).

$$Y(x) \pm \Delta Y(x) = Y(x) \pm t_\alpha \cdot s_e \cdot [d(x)]^{0.5} \quad (3.1)$$

Третий сомножитель в отклонении ΔY , мера точности прогноза по ЭС-модели, d -функция, не зависит от результатов эксперимента, но функционально, жестко связана (3.2) с тем, где в k -факторной области поставлен эксперимент и какова структура очищенной от незначимых эффектов конечной модели.

$$d(x) = f^T(x) \cdot D \cdot f(x), \quad (3.2)$$

где $f^T(x) = (f_1(x), \dots, f_L(x))$ – транспонированный вектор базисных функций в ЭС-модели (В.1); для полной квадратичной модели (В.2) $L = 0.5(k+1)(k+2)$;

$$D = \left[\sum_{j=1}^N f(x_j) f^T(x_j) \right]^{-1} - \text{ковариационная (дисперсионная) матрица оценок } b, \text{ параметров модели.}$$

В тест-задаче о влиянии трех факторов состава на износостойкость карбамидного композита полная каноническая квадратичная модель включает 10 эффектов: 1 свободный член с индексом «0», 3 линейных эффекта с индексами «1, 2, 3», 3 квадратичных, с индексами «11, 22, 33» и 3 эффекта взаимодействия с индексами «12, 13, 23». Матрица **D** (3.3) для такой модели содержит 100 элементов.

Десять диагональных элементов матрицы, определяющих дисперсию оценок коэффициентов, в силу структуры симметричного плана B_3 на кубе, с 15 опытами (8 в вершинах, 6 в центрах граней и 1 в центре) имеют значения: $c_{00} = 0.2889$, $c_{11} = c_{22} = c_{33} = 0.1000$, $c_{1111} = c_{2222} = c_{3333} = 0.3889$, $c_{1212} = c_{1313} = c_{2323} = 0.1250$. Из 90 внедиагональных элементов, определяющих парную корреляцию эффектов модели, только 12, оценивающих связи свободного члена и квадратичных эффектов, отличны от нуля: $[(c_{011}=c_{110})=(c_{022}=c_{220})=(c_{033}=c_{330})] = [(c_{1122}=c_{2211})=(c_{1133}=c_{3311})=(c_{2233}=c_{3322})] = -0.1111$.

$$D = \begin{pmatrix} c_{00} & c_{01} & c_{02} & c_{03} & c_{011} & c_{022} & c_{033} & c_{012} & c_{013} & c_{023} \\ c_{10} & c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{111} & c_{122} & c_{133} & c_{112} & c_{113} & c_{123} \\ c_{20} & c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{211} & c_{222} & c_{233} & c_{212} & c_{213} & c_{223} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{230} & c_{231} & c_{232} & c_{233} & c_{2311} & c_{2322} & c_{2333} & c_{2312} & c_{2313} & c_{2323} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Конечная квадратичная модель (1.3) влияния состава на износостойкость композита содержит только 7 эффектов (в отношении трех истинных коэффициентов β с односторонним риском $\alpha = 0.1$ принята нуль-гипотеза $\beta_2 = \beta_{22} = \beta_{23} = 0$), и **D** матрица сокращается до 49 элементов. Она представлена в виде табл. 3.1.

Таблица 3.1. Корреляционно-дисперсионная матрица **D** коэффициентов модели износостойкости (1.3)

		Индексы эффектов модели						
		0	1	2	11	33	12	13
Индексы эффектов модели	0	0.2571	0	0	-0.1429	-0.1429	0	0
	1	0	0.1000	0	0	0	0	0
	2	0	0	0.1000	0	0	0	0
	11	-0.1429	0	0	0.3571	-0.1429	0	0
	33	-0.1429	0	0	-0.1429	0.3571	0	0
	12	0	0	0	0	0	0.1250	0
	13	0	0	0	0	0	0	0.1250

Исключение статистически незначимых эффектов не только уменьшило размер **D**-матрицы, но и повлекло численное изменение элементов, связанных с удаленными. Принятие нуль-гипотезы в отношении β_{22} привело к снижению уровня диагональных элементов c_{00} и $c_{1111} = c_{3333}$, оценивающих дисперсии $s^2\{b_{11}\}$ и $s^2\{b_{33}\}$ в конечной модели, и одновременно к повышению почти на треть абсолютных значений внедиагональных элементов $[(c_{011}=c_{110})=(c_{033}=c_{330})=(c_{1133}=c_{3311})]$, оценивающих корреляцию между эффектами. Не изменились независимые элементы матрицы **D**, соответствующие линейным эффектам и взаимодействиям.

Функция дисперсии предсказания износостойкости по модели (1.3), записанная с использованием D -матрицы в табл. 3.1, после приведения подобных членов имеет вид (3.4).

$$d(x) = 0.2571 - 0.1858x_1^2 + 0.1000x_2^2 - 0.1429x_3^2 + 0.3571(x_1^4 + x_3^4) + 0.1250x_1^2x_2^2 + 0.1608x_1^2x_3^2 \quad (3.4)$$

Рецептурное поле износостойкости (1.3), описанное при ошибке эксперимента $s_e = 0.41$ ч/г, имеет модельно-детерминированный минимум $A_{\min} = 2.05$ ч/г при $x_{\min.1} = x_{\min.2} = -1$ и $x_{\min.3} = +1$ (табл. 1.2); в этой точке $d(x_{\min}) = 0.564$, что при одностороннем риске $\alpha = 0.05$ (квантиль $t_{0.05} = 1.645$) дает, в соответствии с (3.2), значение доверительного полуинтервала $\Delta A_{\min} = 1.645 \cdot 0.41 \cdot 0.564^{0.5} = 0.51$; истинный минимальный уровень износостойкости с вероятностью 90% накрывается интервалом (1.54, 2.56) ч/г.

Расчет для максимального уровня поля ($A_{\max} = 8.21$ ч/г, $x_{\max.1} = -0.47$, $x_{\max.2} = -1$ и $x_{\max.3} = 0.22$) дает $d(x_{\max}) = 0.251$, полуинтервал $\Delta A_{\max} = 1.645 \cdot 0.41 \cdot 0.501 = 0.34$ и истинный максимальный уровень износостойкости в диапазоне от 7.87 до 8.55 ч/г. По сравнению с минимумом, находящимся по всем координатам на границе факторного куба, максимальный уровень предсказывается с абсолютной ошибкой в полтора раза меньшей, а относительной – в шесть раз.

Следует отметить, что в ряде задач, в частности в «поисковых» и многомерных, допустимо отказаться от построения модели четвертой степени типа (3.4), принимая «слабую» гипотезу $d(x) = \text{const}$. Численное значение этой константы определяется как среднее результатов расчетов непосредственно по соотношению (3.2) для n генерированных векторов x (как в § 1.5). Так, для поля износостойкости (1.3) при $n = 10000$ среднее значение $\bar{d} = 0.272$, в диапазоне оценок от 0.20 до 0.59.

Важные особенности функции дисперсии предсказания квадратичных ЭС-моделей проявляются уже при однофакторном анализе. Их демонстрируют d -функции (формулы (3.5-3.10) в табл. 3.2, рис. 3.1) для «особых» однофакторных локальных полей (1.15-1.20, рис. 1.6), проходящих через экстремумы полного поля износостойкости (1.3) карбамидного композита.

► Дисперсия предсказания максимальна на границах исследуемой факторной области ($x_i = \pm 1$); за ее пределами ошибка прогноза резко возрастает.

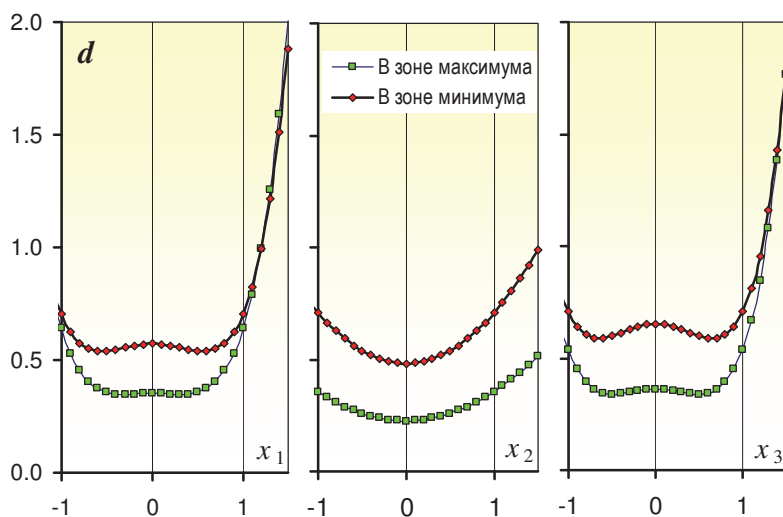
► Минимальная дисперсия предсказания обеспечивается внутри факторной области ($|x_i| < 1$), причем не в тех точках, где был поставлен эксперимент по оптимальному плану, а между ними.

► Чем ближе область однофакторного локального поля к границам эксперимента, тем больше средняя дисперсия предсказания уровня свойства.

Таблица 3.2. Функции дисперсии предсказания для шести однофакторных полей износостойкости в зонах максимума и минимума полного поля

x_{gr}	Условия	$d(x_{gr})$	d_{max}	d_{min}	\bar{d}	Номер формулы
x_1	$x_2 = x_{max.2} = +1, x_3 = x_{max.3} = -0.22$	$0.35 - 0.07x_1^2 + 0.36x_1^4$	0.64	0.35	0.41	3.5
x_1	$x_2 = x_{min.2} = -1, x_3 = x_{min.3} = +1$	$0.57 - 0.22x_1^2 + 0.36x_1^4$	0.71	0.54	0.58	3.6
x_2	$x_1 = x_{max.1} = -0.47, x_3 = x_{max.3} = -0.22$	$0.23 + 0.13x_2^2 + 0.0x_2^4$	0.35	0.23	0.27	3.7
x_2	$x_1 = x_{min.1} = -1, x_3 = x_{min.3} = +1$	$0.48 + 0.23x_2^2 + 0.0x_2^4$	0.71	0.48	0.56	3.8
x_3	$x_1 = x_{max.1} = -0.47, x_2 = x_{max.2} = +1$	$0.36 - 0.18x_3^2 + 0.36x_3^4$	0.54	0.34	0.38	3.9
x_3	$x_1 = x_{min.1} = -1, x_2 = x_{min.2} = -1$	$0.65 - 0.30x_3^2 + 0.36x_3^4$	0.71	0.59	0.63	3.10

► Если конечная ЭС-модель не имеет квадратичного эффекта по некоторому фактору, то соответствующая однофакторная d -функция – парабола (3.7, 3.8) с минимумом в центре факторного диапазона (рис. 3.1).

Рис. 3.1. Функции дисперсии предсказания $d(x_i)$ для $A(x_i)$ при значениях двух других факторов, обеспечивающих максимум и минимум износостойкости

На рис. 3.2. показаны d -функции для двухфакторных полей износостойкости: $d(x_1, x_3 / x_2 = +1)$ – при высоком содержании в наполнителе карбида кремния, $d(x_2, x_3 / x_1 = +1)$ – при высоком наполнении карбамидной смолы. Поверхности отражают характер изменения функций по отдельным факторам и их совместное влияние. Подтверждаются отмеченные выше особенности d -функции. Следует лишь акцентировать внимание на том, что расположенные в углах факторных областей (квадратов) максимумы обеих функций, естественно имеют равные уровни (0.707); именно такие 8 точек (вершины куба, рис. 1.3) входят в план B_3 , по которому был поставлен натурный эксперимент.

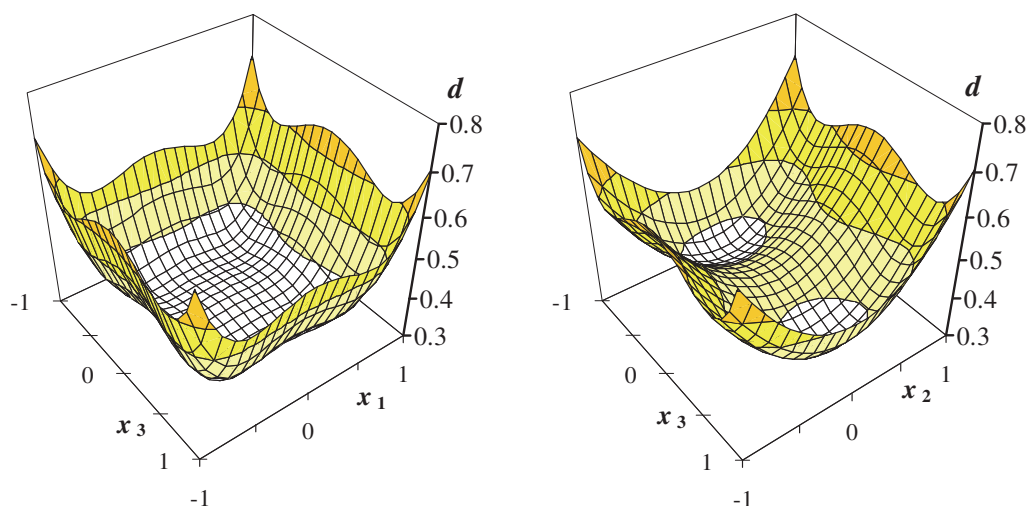


Рис. 3.2. Функции дисперсии предсказания для полей износостойкости: слева – в координатах степени наполнения F и количества крупного андезита CA (x_1 и x_3) при верхнем содержании карбида кремния SC ($x_2 = 1$); справа – в координатах SC и CA (x_2 и x_3) при верхнем значении F ($x_1 = 1$)

3.2. Поля гарантированного и случайного уровней свойства

Интервальная оценка (3.1) уровня свойства Y , рассчитываемого по ЭС-модели в любой точке РТ-области, позволяет ввести в компьютерное строительное материаловедение две полезных разновидности РТ-полей, используя два принципа учета риска [11, 168-170].

Первая разновидность полей свойств расширяет представления, традиционные для материаловедения, прежде всего, в задачах оценки основных, квалификационных механических свойств конструкционных материалов. Если в инженерной задаче известен закон распределения определяемого в эксперименте свойства Y и задан допустимый риск α отказа (разрушения) материала, то нижняя граница работоспособности определяется (по оценкам среднего и ошибки в эксперименте) как $Y_\alpha = \bar{Y} - t_\alpha \cdot s_e$, с учетом квантиля t_α , соответствующего вероятности α значений меньших Y_α . Уровень Y_α можно назвать гарантированным уровнем, поскольку значения выше него обеспечивают (с надежностью $\gamma = 1 - \alpha$) работоспособность материала. Так, в бетоноведении [17] введен класс бетона по прочности, при расчете которого принят односторонний риск $\alpha = 0.05$, допущено нормальное распределение пределов прочности и $t_{0.05} = 1.645$.

Первый принцип учета риска реализуется, если риск можно считать постоянным по области поля (а следовательно, постоянен и квантиль t_α). В этом случае сумма функций (3.1), представленная в виде (3.11), описывает непрерывное поле **гарантированного уровня свойства**, зависящего лишь от k РТ-координат.

$$Y_\alpha(\mathbf{x}) = Y(x_1, \dots, x_k) \pm t_\alpha \cdot s_e \cdot [d(x_1, \dots, x_k)]^{0.5} \quad (3.11)$$

Второе слагаемое, полуширина доверительного интервала – иррациональная функция, с постоянными в области поля сомножителями t_α и s_e , вычитается

[11, 135, 171], если нужно гарантировать отсутствие отказов, возникающих из-за низких уровней свойства (предела прочности, стойкости и т.д.), но прибавляется [11, 135]– когда неприемлемы высокие значения Y (вязкости, водопроницаемости, теплопроводности, усадки ...).

Так поле (3.12) минимальной гарантированной (с риском $\alpha/2 = 0.05$) износостойкости композита при низком содержании крупного андезита ($CA = 20\%$, $x_3 = -1$) есть разность показанного ранее на рис. 1.3с модельно-детерминированного поля (1.5) и доверительного полуинтервала, что иллюстрирует рис. 3.3.

$$A_{0.05}(x_1, x_2 / x_3 = -1) = (1.5) - [t_{0.05} = 1.645] \times [s_e = 0.41] \times [d(x_1, x_2 / x_3 = -1)]^{0.5} \quad (3.12)$$

Максимальный уровень поля (3.12) равен 7.21 г/ч, а доля составов, обеспечивающих $A \geq 6$, составляет 19%, т.е., меньше значений этих показателей (табл. 1.2) модельно-детерминированного поля (1.5).

Второй способ учета риска моделирования рассматривает значение $\Delta Y(x)$ в (3.1) как случайную ошибку («шум»). К значениям Y в любой i -той точке x_i области поля добавляется (3.13) ошибка, оцениваемая с использованием генерируемых для каждой точки значений t , распределенных по стандартному нормальному закону (или $t \cdot s_e$ – по нормальному закону). Это приближает условия вычислительных экспериментов (отклики в которых – оценки по моделям) к условиям натурального (выполненного с ошибками s_e).

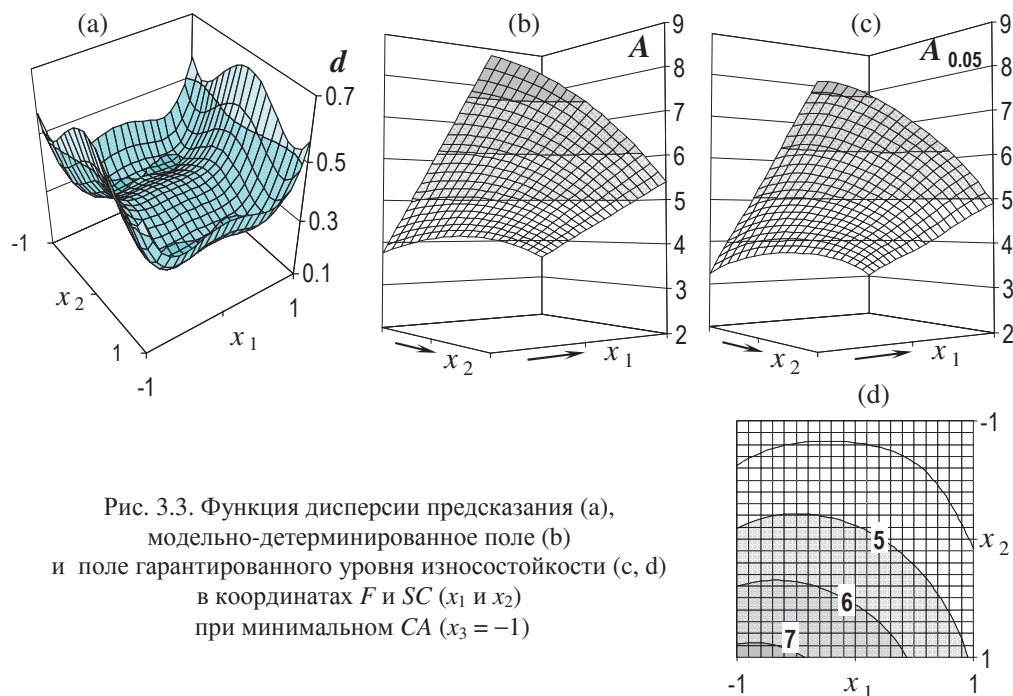


Рис. 3.3. Функция дисперсии предсказания (а), модельно-детерминированное поле (b) и поле гарантированного уровня износостойкости (с, d) в координатах F и SC (x_1 и x_2) при минимальном CA ($x_3 = -1$)

$$Y_u = Y(x_u) \pm t_u \cdot s_e \cdot [d(x_u)]^{0.5} \quad (3.13)$$

Добавление к оценкам Y по модели случайных ошибок для каждого из N равномерно распределенных (случайных или детерминированных, непрерывных или дискретных) x внутри многомерной области трансформирует непрерывное модельно-детерминированное поле в **случайное поле**. Каждая реализация случайного поля (при двойном использовании ММК, если генерируются и t , и x) есть дискретное множество значений Y_u , в N точках РТ-области. Поле средних \bar{Y}_u по результатам многократных реализаций случайного поля будет приближаться к модельно-детерминированному полю при $N \rightarrow \infty$.

На рис. 3.4 показана реализация случайного локального поля износостойкости, в координатах степени наполнения карбамидного связующего и доли карбида кремния в мелкой фракции наполнителя, при минимальном содержании крупных зерен андезита (по значениям A для $N = 441$ составов).

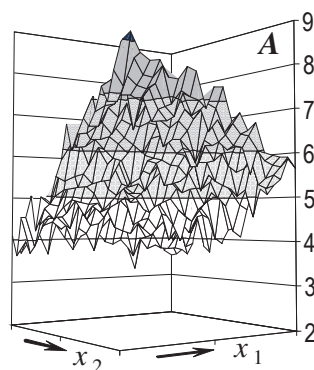


Рис. 3.4. Реализация случайного поля A в координатах F и SC (x_1 и x_2) при $x_3 = -1$

Рисунок 3.5 демонстрирует однофакторные локальные поля износостойкости в исследуемом диапазоне степени наполнения (F от 2 до 2.5, x_1) для двух составов наполнителя,

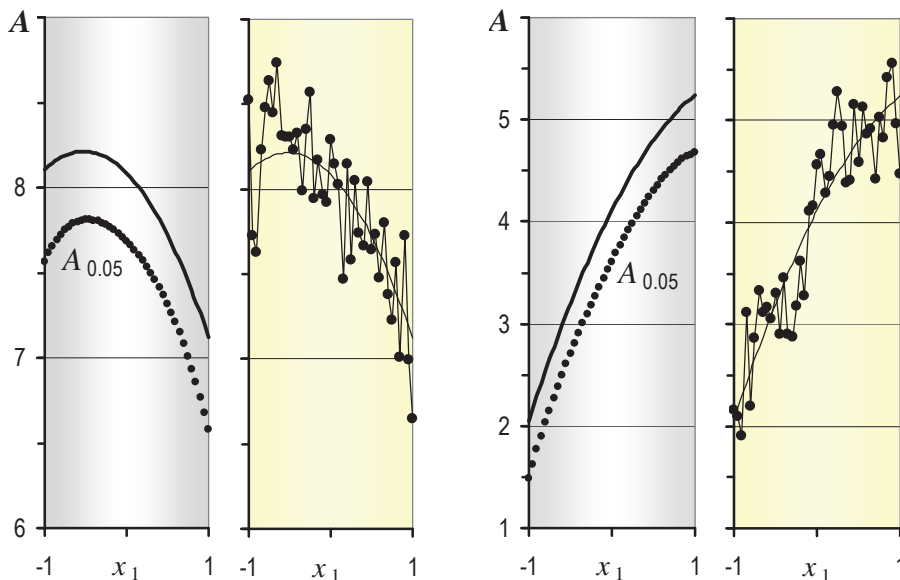


Рис. 3.5. Поля износостойкости в зависимости от F – гарантированного уровня и случайные, вместе с базовыми модельно-детерминированными полями, для двух составов наполнителя, соответствующих максимуму и минимуму A

соответствующих максимальному и минимальному уровням A :

$$x_2 = x_{\max.2} = +1 (SC = 60), x_3 = x_{\max.3} = -0.22 (CA = 35.6);$$

$$x_2 = x_{\min.2} = -1 (SC = 0), x_3 = x_{\min.3} = +1 (CA = 60).$$

Это поля гарантированного уровня (при одностороннем риске 0.05), вместе с соответствующими базовыми, модельно-детерминированными полями (1.15-16), показанными ранее на рис. 1.6, а также по одной реализации случайных полей (точками обозначены случайные значения A для $N = 41$ составов, рассеянные относительно «несущей» кривой модельно-детерминированного поля).

Поля гарантированного уровня могут быть полезны при контроле качества композитов и при выборе соответствующих спецификациям РТ-вариантов (в том числе, с использованием таких, как на рис. 3.3d, «карт» полей нескольких свойств), а также при многокритериальном поиске (глава 7) гарантированно допустимых, оптимальных и компромиссных многофакторных РТ-решений.

Генерируемые в вычислительных экспериментах многократные реализации случайных полей в РТ-координатах позволяют получить распределения и непараметрические интервальные оценки для обобщающих показателей отдельных свойств, и что особенно важно – для числовых характеристик отношений между свойствами, зависимых от многомерных рецептурно-технологических условий (главы 4-6).

Несколько цитат

"Knowledge is what we know, also what we know we do not know. We discover what we do not know essentially by what we know. Thus knowledge expands. With more knowledge we come to know more of what we do not know. Thus knowledge expands endlessly".

C.R. Rao

"Aristotle maintained that women have fewer teeth than men; although he was married twice, it never occurred to him to verify his statement by examining his wives' mouth".

Bertrand Russel

"You get 10 times more information from a carefully designed experiment. To consult a statistician after the experiment is finished is often to merely ask him to conduct a postmortem examination. He can only say what the experiment died of".

R.A. Fisher

"...очень часто наилучшим поведением бывает случайное".

Л.А. Растрин

Глава 4. АНАЛИЗ КОРРЕЛЯЦИИ СВОЙСТВ

Вычислительные эксперименты на случайных полях свойств позволяют получить недоступные непосредственно из натурального эксперимента числовые оценки взаимосвязи свойств материалов, изменяющиеся в зависимости от рецептурно-технологических условий.

Проблема анализа корреляционных связей между свойствами композиционного материала возникает, по крайней мере, в трех инженерных ситуациях.

Во-первых, количественные описания связей критериев Y необходимы для организации экспресс-контроля качества материала, в частности, на основе неразрушающих методов [172-174], для построения достаточно точных и надежных тарировочных кривых. При этом возникает вопрос, насколько связаны между собой два свойства, чтобы можно было быстро (дешево), измеряя одно из них, предсказывать уровень другого (долго или дорого определяемого). Можно ли, по параметрам ядерно-магнитного резонанса воды в гидратируемом цементе после суток твердения, оценить марочную прочность будущего бетона [175, 176], или сделать это по показателям акустической эмиссии [177]?

Во-вторых, они полезны при проектировании композитов (их составов и технологии). Важно знать, насколько взаимосвязаны свойства, для возможного сокращения числа критериев, по которым материал следует спроектировать и оптимизировать, для ответа на вопрос, можно ли изменять уровни свойств независимо. Например, можно ли снизить модуль упругости полимерного композита, не снижая его прочности (как это требовалось при разработке материалов с демпфирующими свойствами, для станин станков [8, 178]).

В-третьих, содержательный анализ количественных описаний связей между характеристиками композита может помочь обнаружить РТ-условия, при которых происходит смена механизмов структурообразования и деструкции, сформулировать те или иные гипотезы материаловедения, оценить, насколько можно по известному параметру поведения материала судить о менее известном параметре (поведения, структуры). Например, можно ли оценивать тиксотропные свойства полимерной композиции (для покрытия без стекания потолочных элементов конструкций) по индексам нелинейной реологической кривой [179-182]? При наличии связи между подобными показателями возникают вопросы и о том, насколько характер и мера этой связи определяется структурообразующими факторами рецептуры.

В качестве меры линейной статистической связи, как правило, используется выборочный коэффициент парной корреляции Пирсона r [9, 165, 167 и др.] – оценка (4.1) коэффициента корреляции ρ случайных величин Y_1 и Y_2 .

$$r\{Y_1 Y_2\} = \frac{\sum_{i=1}^n (y_{1i} - \bar{Y}_1) \cdot (y_{2i} - \bar{Y}_2)}{s_1 s_2 (n-1)} = \frac{\sum_{i=1}^n y_{1i} y_{2i} - n \bar{Y}_1 \bar{Y}_2}{s_1 s_2 (n-1)}, \quad (4.1)$$

где n – объем выборки (число пар наблюдений), \bar{Y}_1 и \bar{Y}_2 – выборочные средние, s_1 и s_2 – стандартные отклонения.

У статистики r сложная функция распределения [167, 183]. Только при достаточно большом n и близким к нулю ρ это распределение аппроксимируется нормальным (а близость r к нулю может означать независимость Y_1 и Y_2 [165, 184]). При $n \geq 20$ близким к нормальному является распределение величины z (4.2), предложенное Р.А. Фишером [185] в качестве нормализующего преобразования для r (см. [167, 186 и др.]).

$$z = 0.5 \cdot \ln [(1-r)/(1+r)] = \operatorname{arctanh} r \quad (4.2)$$

Распределение r или z позволяет определить критические уровни $r_{кр}$, при которых [9, 167] отвергается нуль-гипотеза о статистической незначимости коэффициента корреляции, при заданном риске α и числе степеней свободы $f = n - 2$. Критические значения коэффициента корреляции указывают на наличие линейной связи между Y_1 и Y_2 при $r\{Y_1Y_2\} > r_{кр}$ по абсолютной величине (и при условии правильной, не ложной интерпретации коэффициента корреляции [184], основанной на знании специфики конкретной проблемы). В этом случае могут быть построены и использованы для прогноза линейные корреляционные модели – уравнения регрессии $Y_1(Y_2)$ и $Y_2(Y_1)$ вида (4.3). Угловой коэффициент, или наклон, a_1 , также может быть использован как числовой критерий при описании и сравнении взаимосвязей между свойствами [103, 126, 187, 188].

$$Y_i = a_0 + a_1 Y_j \quad (4.3)$$

Как известно, коэффициент детерминации R^2 , принимающий значения в интервале от 0 до 1, характеризует долю вариации признака (Y_i), связанную с вариацией другого (Y_j) в общей вариации первого. В этом смысле коэффициент детерминации может быть использован как сравнительная числовая характеристика связи между свойствами и в случаях, когда связь оказывается нелинейной, и удается подобрать нелинейный тренд $Y_i(Y_j)$.

Степень корреляции свойств не остается постоянной при изменении рецептуры материала или технологических условий формирования его структуры. Это иллюстрирует рис. 4.1, где показаны результаты вычислительного эксперимента. Линии на верхнем рисунке – зависимости критериев Y_1 и Y_2 от фактора x , отличающиеся темпами ускорения и замедления, а значит и положением экстремума; это могут быть некоторые две характеристики в упомянутых выше ситуациях. Точки представляют имитацию результатов натурального эксперимента – для x с шагом 0.01 генерированы значения функций с нормально распределенной 5-процентной ошибкой. Коэффициент корреляции подсчитан по 27 точкам (при $f = 25$ и одностороннем риске 5 % критический уровень около 0.3). Видны области, в которых линейная связь между критериями Y не обнаруживается, а затем меняет направление (факт изменения корреляции можно предварительно установить, формально используя модельно-детерминированные значения для расчета корреляционной меры – сплошная линия на нижнем рисунке).

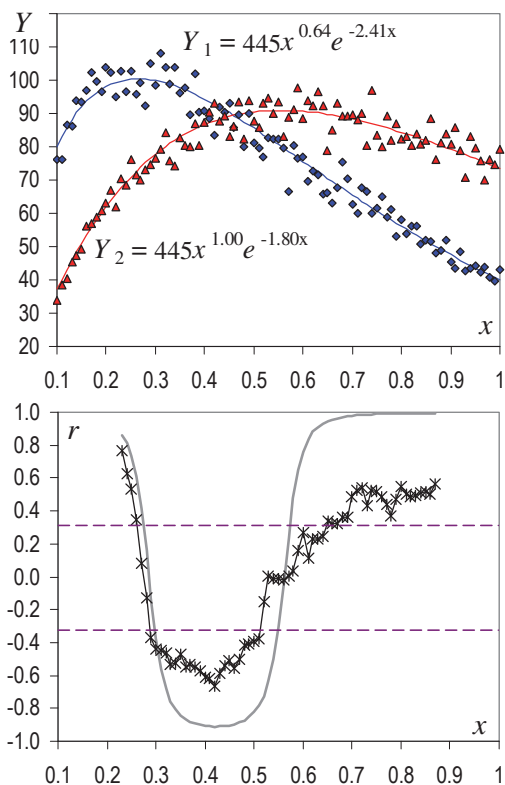


Рис. 4.1. Изменения корреляции свойств под влиянием фактора x

Экспериментальная проверка связанных с мерами корреляции гипотез требует больших материальных и временных затрат. Так, чтобы признать правдоподобной с двусторонним риском 5% линейную зависимость между двумя свойствами при оценке $r = 0.6$, нужно определить каждое из этих свойств на $n \geq 10$ образцах. Если же проверяется гипотеза о влиянии на r даже одного РТ-фактора, его требуется изменять хотя бы на 3 уровнях, и n уже должно быть не

менее 30. В общем же случае мера взаимосвязи между свойствами композиционного материала, в частности, коэффициент корреляции r может быть многомерной функцией РТ-условий, для оценки которой требуется практически недоступное количество данных, специального натурального эксперимента.

В тоже время, реализуемый для получения ЭС-зависимостей планируемый эксперимент ориентирован на минимальное число опытных точек в многофакторной области полного РТ-поля. Диаграмма рассеяния для пары свойств, а также формально значимый коэффициент корреляции, определенный по всем полученным парам их натуральных значений, могут не отражать отсутствие или наличие и тесноту линейной связи между свойствами в отдельных локальных подобластях. Отклики Y в многофакторном эксперименте могут представлять выборки из разных совокупностей, соответствующих принципиально разным структурам и разным отношениям свойств в разных зонах факторной области.

Для того, чтобы выявить такие факты, через надежные числовые оценки корреляции критериев Y в разных факторных зонах, данных натурального эксперимента оказывается недостаточно. Получить количественное описание изменений взаимосвязи свойства в реальном эксперименте практически невозможно.

Необходимую для этого информацию можно «добыть» в вычислительном эксперименте на локальных РТ-полях. Алгоритм и результаты такого эксперимента демонстрируются на примере «тестового» исследования – наполненного карбамидного связующего (§ 1.2). Вместе с обсуждаемой выше износостойкостью рассматриваются другие свойства этих композиций.

4.1. Полное и локальные поля прочности карбамидного связующего

Полученные для 15-ти композиций (табл. 1.1) значения призмной прочности R (МПа) позволили построить ЭС-модель (4.4). Модель описывает (при $s_e = 1.3$ МПа и риске 0.1) показанное на рис. 4.2 полное рецептурное поле $R(x)$ прочности карбамидного композита в координатах степени наполнения ($F \sim x_1$), содержания карбида кремния в тонкой фракции наполнителя ($SC \sim x_2$) и количества в наполнителе крупного андезита ($CA \sim x_3$). Максимальный уровень поля $R_{\max} = 84.1$ (при $x_1 = -0.931$, $x_2 = 0.625$, $x_3 = -1$), минимальный уровень $R_{\min} = 35.6$ (при $x_1 = x_2 = -1$, $x_3 = +1$), перепад $\Delta_R = 48.5$ МПа, или $\delta_R = 2.4$ раза. Доля композиций, обеспечивающих прочность не менее 70 МПа, $\Omega\{R \geq 70\}$ составляет 63%.

$$\begin{aligned}
 R = & 75.3 \pm 0 x_1 - 1.7x_1^2 - 1.1x_1x_2 + 2.4x_1x_3 \\
 & + 9.4x_2 - 4.7x_2^2 + 4.6x_2x_3 \\
 & - 11.0x_3 - 4.8x_3^2
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

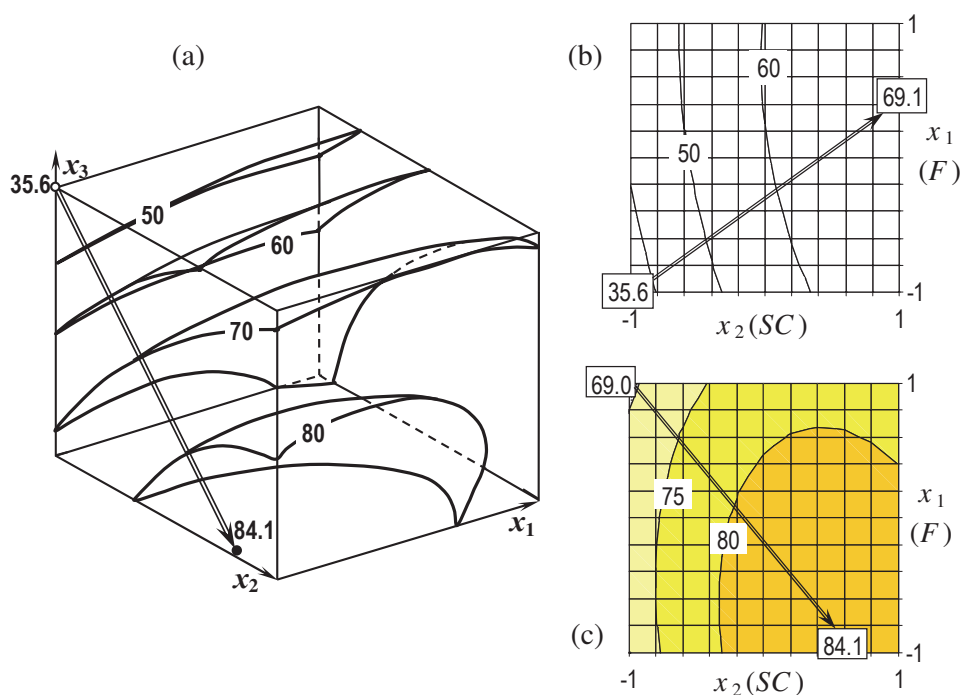


Рис. 4.2. Изоповерхности полного поля (а) и локальные поля призмной прочности при максимальном (б) и минимальном (с) содержании крупного андезита

На этом же рисунке показаны два локальных поля $R(x_1, x_2)$, при $x_3 = \pm 1$ (по аналогии с рис. 1.1 – для износостойкости). Минимальный и максимальный уровни прочности, достигаемые за счет степени наполнения (x_1) и доли карбида кремния в мелкой фракции наполнителя (x_2), а также соответствующие значения этих факторов, существенно отличаются при верхнем и нижнем содержании крупных зерен. При $CA = 60\%$ ($x_3 = +1$, рис. 4.2, б) не остается соотношений F и SC , удовлетворяющих требованию $R \geq 70$ МПа.

Графики на рис. 4.3 отражают возможности достижения максимальных прочностей, изменяя содержание крупного андезита (слева), и обеспечения специфицированного уровня $R = 70$ разными парами факторов состава, в зависимости от значений изменяющего эти возможности фактора (указан в скобках у соответствующей кривой размера допустимой области – площади $\Omega\%$). Оценки этих $G_R\{x_{gr}\}$ получены в вычислительном эксперименте; случайные поля $R(x_{gr})$ генерировались при 5 значениях каждого из изменяющих факторов.

Как видно на рис. 1.1 и 4.2, изоповерхности A (эллиптические цилиндры) и R (семейство эллипсоидов) отличаются по форме; направления усредненных градиентов ∇_A и ∇_R близки (указывают на положительную роль карбида крем-

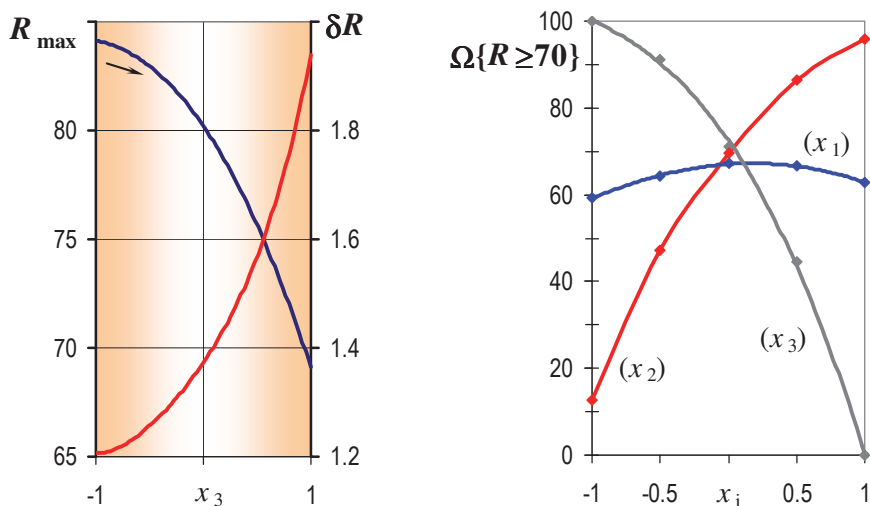


Рис. 4.3. Обобщающие показатели полей прочности, формируемых двумя из трех факторов, в зависимости от изменяющего поле третьего фактора

ния, замещающего мелкий андезит), но не совпадают. То же можно сказать о характере и степени влияния всех рецептурных факторов на прочность (рис. 4.4) и износостойкость (рис. 1.6). При отсутствии SiC ($x_2 = -1$) получается наиболее слабый и быстро истираемый материал; не совпадают значения факторов, обеспечивающих максимумы полей (1.3) и (4.4) – $A(x_1, x_2, x_3)$ и $R(x_1, x_2, x_3)$. Это может указывать на различия в корреляции A с R в разных подобластях составов.

В каких же отношениях находятся эти два свойства? Можно ли говорить об их линейной статистической связи? Возможна ли оценка износостойкости по прочности (определяемой в качестве марочной характеристики)?

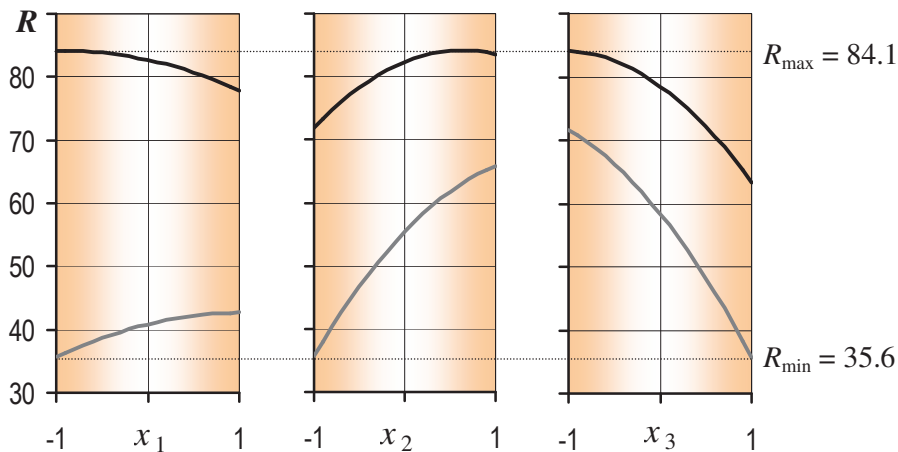


Рис. 4.4. Однофакторные локальные поля прочности R (МПа) в зонах минимума и максимума

4.2. Результаты натурального эксперимента

Определенные для 15-ти композиций (согласно плана натурального эксперимента) 15 пар значений прочности R (МПа) и износостойкости A (ч/г) показаны на рис. 4.5; коэффициенты детерминации износостойкости прочностью для линейного тренда и полиномиального 3-ей степени составляют 0.50 и 0.61 соответственно.

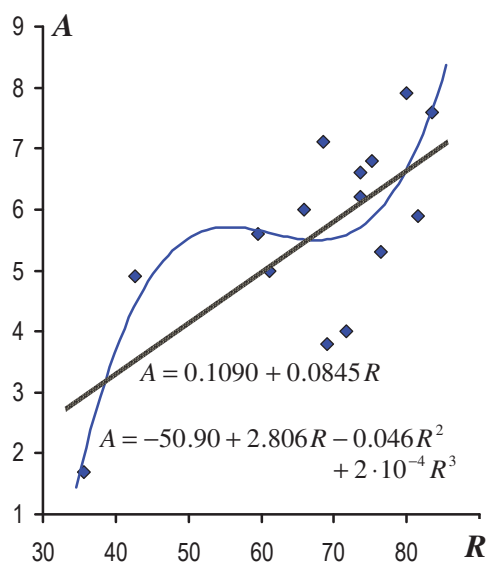


Рис. 4.5. Диаграмма рассеяния результатов натурального эксперимента и линии тренда

Несмотря на то, что коэффициент парной корреляции $r\{AR\} = 0.71$ (оцененный по 15-ти парам значений A и R для композиций из всей исследуемой кубической факторной области) формально предполагает (при риске менее 1%) наличие значимой положительной линейной связи между двумя свойствами, такое заключение может оказаться неверным. Эта парная выборка значений A и R может представлять совершенно по-разному сформированные структуры.

Будет ли изменяться характер корреляционной связи износостойкости с прочностью от одной подобласти составов к другой, позволяют выяснить, в вычислительном эксперименте, ЭС-модели (1.3) и (4.4); они определяют не

только полные поля $R(x_1, x_2, x_3)$ и $A(x_1, x_2, x_3)$, но и бесконечное многообразие локальных, для любой подсистемы факторов, в любой факторной подобласти.

4.3. Вычислительный эксперимент для анализа корреляции свойств

Для исследования возможных изменений корреляции свойств используется следующий алгоритм ВЭ [189].

0. На начальном этапе вычислительный эксперимент планируется. Выбираются (прежде всего, на основе содержательного анализа моделей) один или более факторов ($< k$), которые будут зафиксированы на нескольких уровнях, в соответствии с планом ВЭ. Это «изменяющие» факторы (x_{ch}). От значения к значению они изменяют локальные поля Y , в координатах остальных, формирующих поле «градиентных» факторов (x_{gr}). Подстановка определенных значений x_{ch} в модель полного поля дает модели соответствующих локальных полей.

В частности, уравнения (4.5-4.6), полученные подстановкой $x_1 = +1$ в (4.4) и (1.3) соответственно, описывают поля прочности и износостойкости в координатах состава наполнителя при наибольшем его содержании в связующем (рис. 4.6 а, с).

$$R(x_2, x_3 / x_1 = +1) = 73.6 + 8.3x_2 - 4.7x_2^2 + 4.6x_2x_3 - 8.6x_3 - 4.8x_3^2 \quad (4.5)$$

$$A(x_2, x_3 / x_1 = +1) = 6.44 + 0.92x_2 \pm 0 x_2^2 \pm 0 x_2x_3 + 0.85x_3 - 1.12x_3^2 \quad (4.6)$$

Учитывающая неустраняемые ошибки эксперимента и аппроксимации, описанная в § 3.1 функция дисперсии предсказания (3.2) может быть аналогично получена для модели каждого локального поля из d -функции полного поля, такой как (3.4). На рис. 4.6 б, d показаны d -функции для (4.5-4.6).

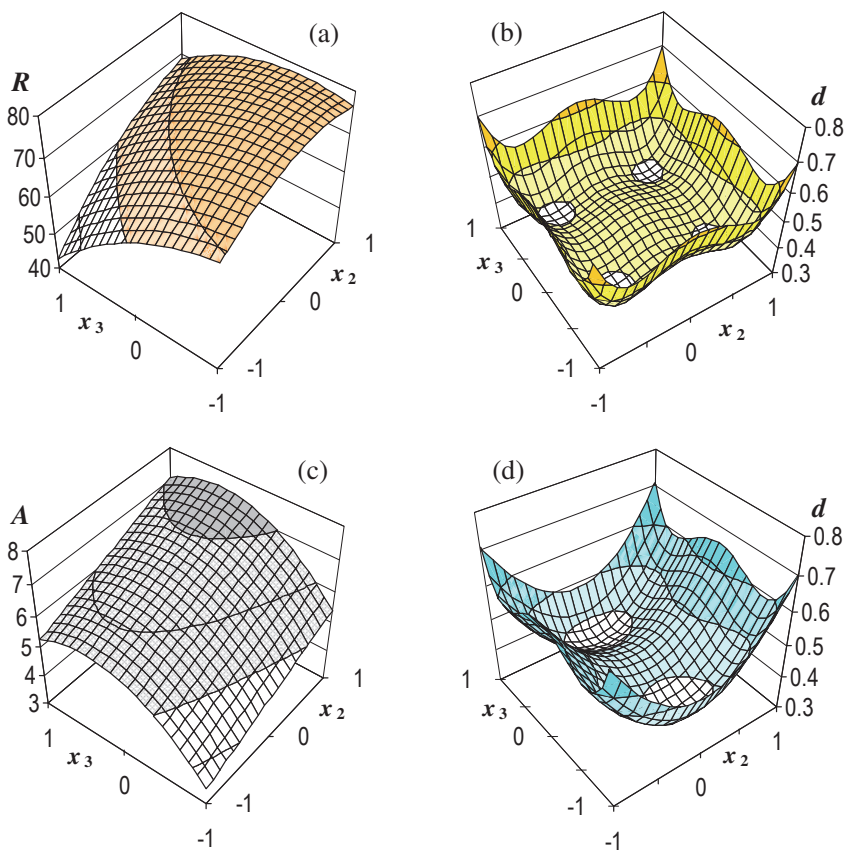


Рис. 4.6. Локальные поля и функции дисперсии предсказания прочности (а, б) и износостойкости (с, d) в координатах состава наполнителя, SC и CA (x_2 и x_3) при верхней степени наполнения, $F = 2.5$ ($x_1 = 1$)

1. При каждом фиксированном значении x_{ch} генерируется по N точек x_{gr} (РТ-параметров), равномерно распределенных в области градиентных факторов (с границами $x_{gr,i} = \pm 1$, для рассматриваемой кубической факторной области).

2. Для каждого из генерированных x_{gr} для обоих свойств рассчитываются модельно-детерминированные значения $Y(x_{gr})$, по соответствующей локальной ЭС-модели. Определяются случайные ошибки $\Delta Y(x_{gr})$ (4.7) и случайные уровни свойств $Y(x_{gr}) + \Delta Y(x_{gr})$; s_e в (4.7) – ошибки определения Y в натурном эксперименте, t – случайные значения величины, распределенной по стандартному нормальному закону. Случайные ошибки и случайные уровни полей для R и A показаны на рис. 4.7 a-b, d-e.

$$\Delta Y(x_{gr}) = t \cdot s_e \cdot [d(x_{gr})]^{0.5} \quad (4.7)$$

Добавление случайных ошибок к значениям Y для равномерно распределенных внутри многомерной области векторов x_{gr} трансформирует модельно-

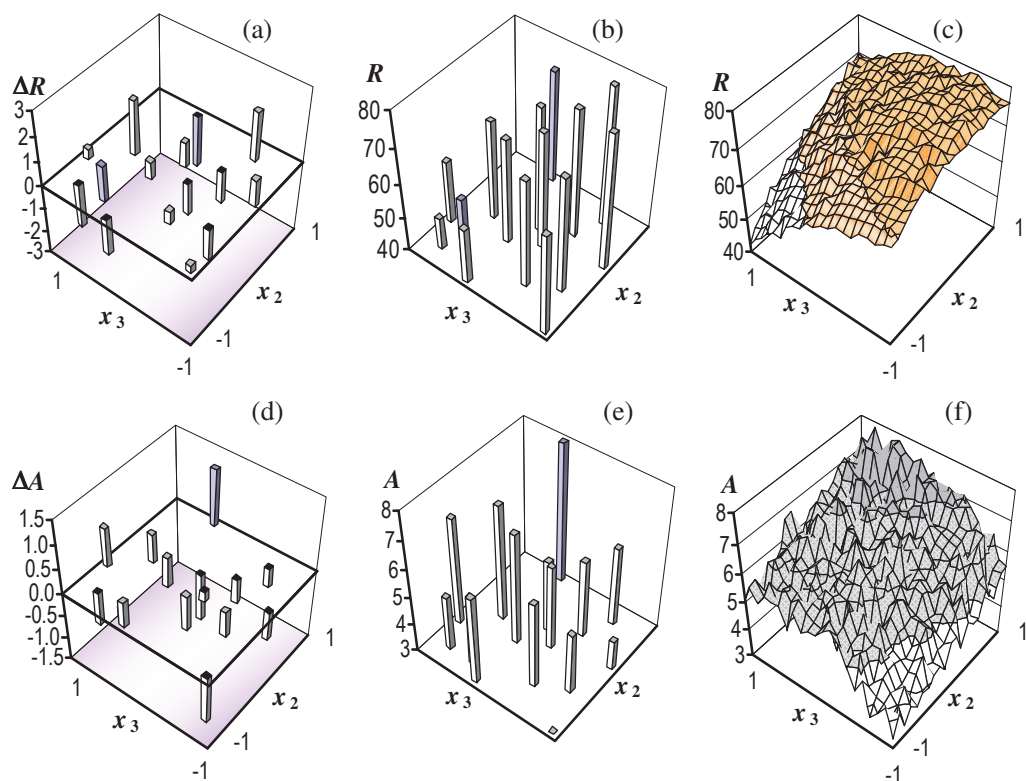


Рис. 4.7. Генерированные случайные ошибки и уровни прочности (a-b) и износостойкости (d-e) наиболее наполненных композиций ($x_1 = +1$, $F = 2.5$) для ряда генерированных составов наполнителя (x_2, x_3); по одной реализации случайного поля прочности (c) и износостойкости (f)

детерминированные локальные поля в «случайные поля» и делает результаты вычислительного эксперимента ближе к результатам потенциального натурального. В этом дважды участвует метод Монте-Карло – для симулирования РТ-условий (точек области поля) и реакции структуры материала на эти условия через уровни полей 2 свойств. На рис. 4.7 с, f показаны по одной реализации случайных полей $R(x_2, x_3 / x_1 = +1)$ и $A(x_2, x_3 / x_1 = +1)$.

3. По N парам полученных таким образом случайных значений (Y_i, Y_j) рассчитывается одна выборочная оценка коэффициента корреляции $r\{Y_i Y_j\}$, или другой меры отношений между двумя свойствами, в частности, наклона a_1 регрессионной прямой $Y_i(Y_j)$ – числового показателя $G\{Y_i Y_j\}$, обобщающего поля двух свойств, их статистической связи.

Диаграммы рассеяния на рис. 4.8 демонстрируют результаты симуляции уровней R и A для генерированных составов наполнителя при нижнем и верхнем его содержании ($N = 500$). Сильная положительная линейная связь A с R при $F = 2$ исчезает при $F = 2.5$. Очевидно, при таком изменении степени наполнения существенно изменяются структуры полимерной матрицы, минерального каркаса и композита в целом.

4. Многократная реализация процедуры (1-3) позволяет получить распределение корреляционной меры. Оба распределения на рис. 4.8 построены по 500 оценкам $r_{23}\{RA\}$. Каждая оценка рассчитана по новой парной выборке для нового случайного набора из $N = 15$ векторов (x_2, x_3) ; т.е., число генерированных составов наполнителя в одной реализации пары случайных локальных полей равно числу испытаний в натурном эксперименте (во всей факторной области).

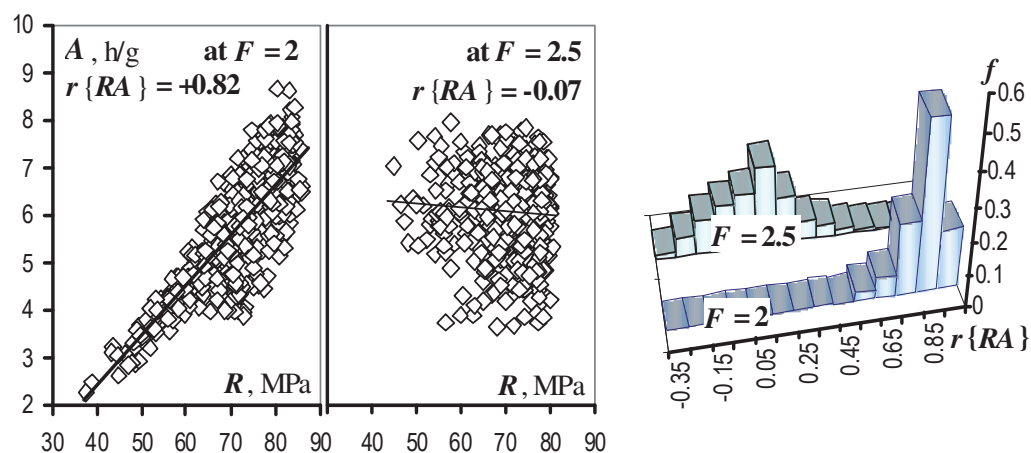


Рис. 4.8. Прочность и износостойкость для генерированных SC и CA и распределения коэффициента корреляции между двумя свойствами при нижней и верхней степени наполнения

Пункты 1-4 алгоритма отражает схема на рис. 4.9.

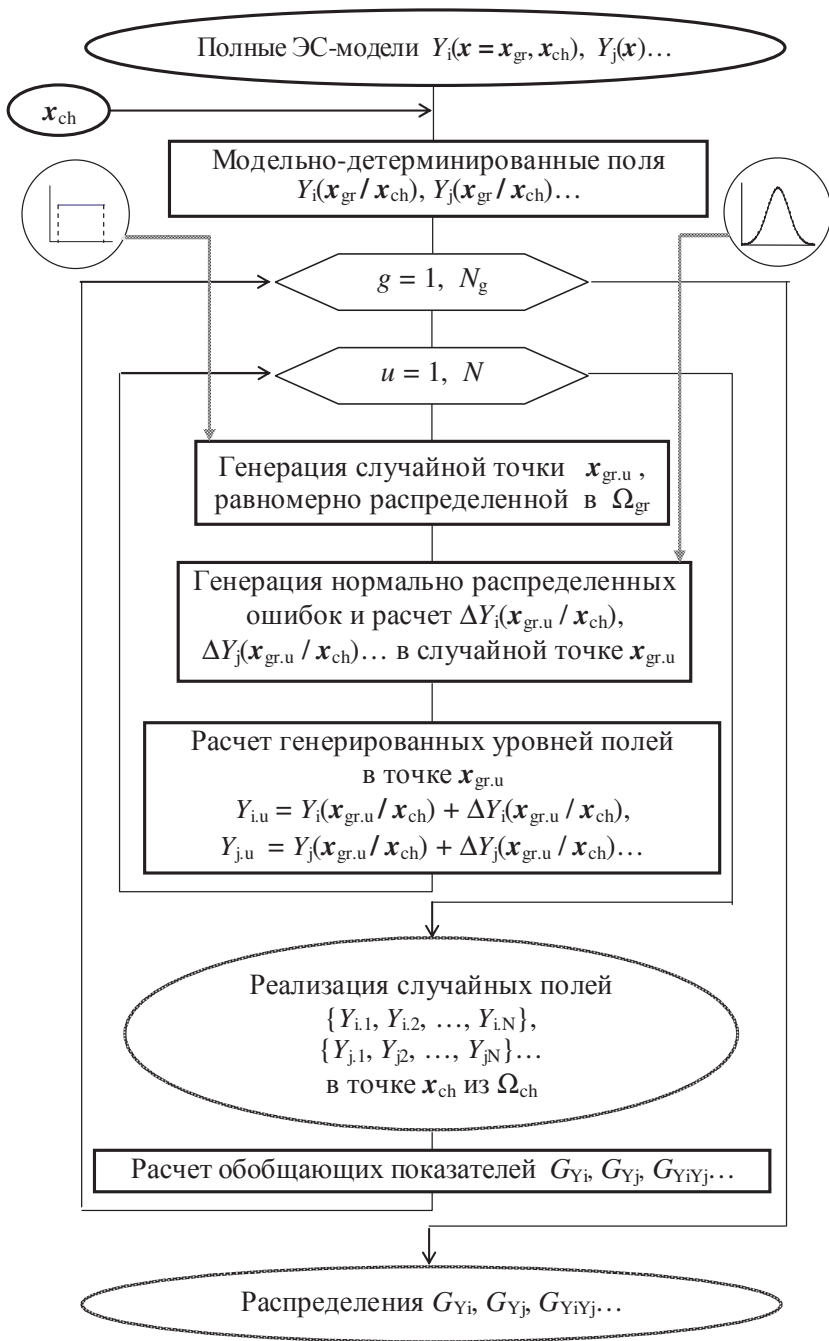


Рис. 4.9. Блок-схема алгоритма ВЭ для оценки обобщающих показателей – локальных РТ-полей свойств и их связи (в одной точке плана ВЭ)

5. Распределения корреляционной меры, полученные для каждого значения x_{ch} , дают возможность построить ЭС-модели (вторичные по отношению к первичной модели – по натурным данным) для любых статистик этой меры.

Такой вторичной моделью является уравнение (4.8) – для медианного значения коэффициента корреляции износостойкости с прочностью (если варьирует состав наполнителя) в зависимости от соотношения «наполнитель/полимер».

На рис. 4.10 вместе с этой зависимостью показаны аналогичные для квантилей q_{05} и q_{95} , оценивающих (с риском 0.05) нижний и верхний уровни $r_{23}\{AR\}(x_1)$.

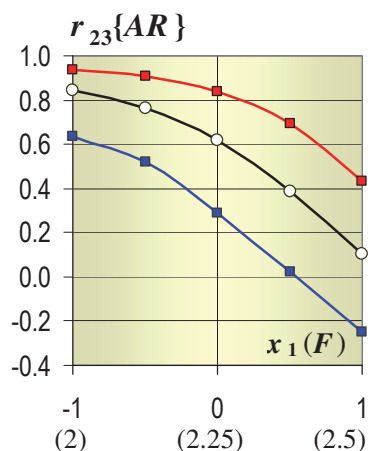


Рис. 4.10. Коэффициент корреляции износостойкости с прочностью карбамидного связующего при вариации состава наполнителя в зависимости от степени наполнения

$$r_{23}\{AR\}(x_1) = 0.614 - 0.372x_1 - 0.142x_1^2 \quad (4.8)$$

Такой же вычислительный эксперимент для анализа корреляции A с R выполнен на локальных полях $A(x_1, x_3)$ и $R(x_1, x_3)$, изменяющихся под влиянием x_2 , а также на $A(x_1, x_2)$ и $R(x_1, x_2)$, при x_3 в качестве изменяющего фактора. Получены

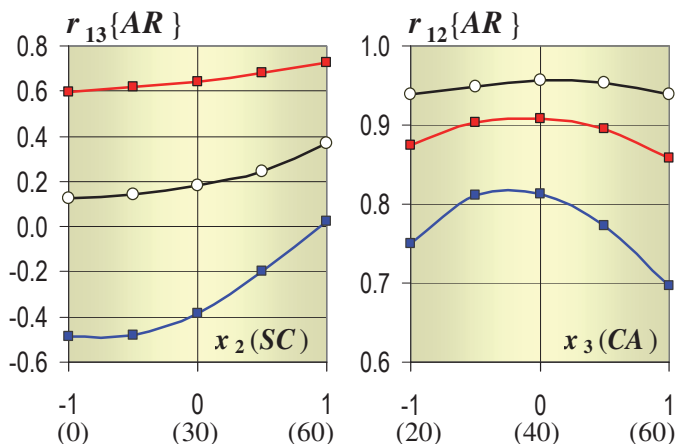


Рис. 4.11. Коэффициенты корреляции износостойкости с прочностью при вариации F и CA в зависимости от содержания карбида кремния (слева) и при вариации F и SC в зависимости от количества крупного андезита (справа)

распределения выборочных коэффициентов корреляции; медианные значения, 5-е и 95-е процентиля показаны на рис. 4.11.

При любом количестве карбида кремния в наполнителе (и при его отсутствии) вариация степени наполнения и содержания крупного андезита дает незначимый r_{13} , то есть, показывает, что между A и R

нет линейной статистической связи. Напротив, при любой доле в наполнителе крупного андезита ($CA \sim x_3$) вариация степени наполнения ($F \sim x_1$) и содержания карбида кремния ($SC \sim x_2$) обнаруживает линейную статистическую связь износостойкости с прочностью при сжатии (r_{12} значим практически при нулевом риске). Показанные на рис. 4.11 доверительные границы близки к их параметрическим оценкам [167].

4.4. Можно ли оценить истираемость по динамическому модулю упругости?

В работе [126] приведены результаты использования более ранней версии изложенного выше алгоритма, для анализа корреляции истираемости A (ч/г) с динамическим модулем упругости E (ГПа). Анализировались возможности получения экспресс-оценок истираемости (важнейшей характеристики стойкости промышленных полов) по уровню E (одного из основных критериев для неразрушающего контроля качества материала по скорости ультразвука).

В натурном эксперименте были определены уровни E для 15 составов связующего (по плану эксперимента – табл. 1.1, также как уровни A , R и др. свойств). Эти данные показали, что при коэффициенте корреляции $r\{A, E\} = 0.55$ может быть принята (с риском около 3 %) гипотеза о статистической линейной связи (4.9). Однако, остаточная ошибка $s\{A(E)\} = 1.40$ ч/г составляет почти 20 % от уровня A в центре факторной области. Поэтому уравнение (4.9) можно использовать лишь для оценки тенденции изменений износостойкости.

$$A(E) = a_0 + a_1 \cdot E = 1.15 + 0.631 \cdot E \quad (4.9)$$

Значения E для 15 композитов позволили описать ЭС-моделью (4.10) рецептурное поле $E(x_1, x_2, x_3)$, представленное на рис. 4.12 вместе с $A(x_1, x_2, x_3)$. Поле E имеет максимум 9.68 (при $x_1 = 0.68$, $x_2 = 1$, $x_3 = -1$) и минимум 4.41 ГПа (при $x_1 = x_3 = 1$, $x_2 = -1$). Изоповерхности A и E – фрагменты эллиптических цилиндров, но их оси ориентированы по-разному, что ставит под сомнение гипотезу о линейности $A(E)$.

$$\begin{aligned} E = & 7.97 + 0.36x_1 - 0.91x_1^2 + 0.89x_1x_2 \pm 0 \ x_1x_3 \\ & + 1.06x_2 - 0.41x_2^2 \pm 0 \ x_2x_3 \\ & - 0.64x_3 \pm 0 \ x_3^2 \end{aligned} \quad (4.10)$$

В то же время, как видно на рис. 4.12, направления градиентов полей $A(\mathbf{x})$ и $E(\mathbf{x})$ весьма близки в плоскости (x_2, x_3) . Очевидно, при вариации этих свойств за счет изменения состава наполнителя вдоль этого направления характери-

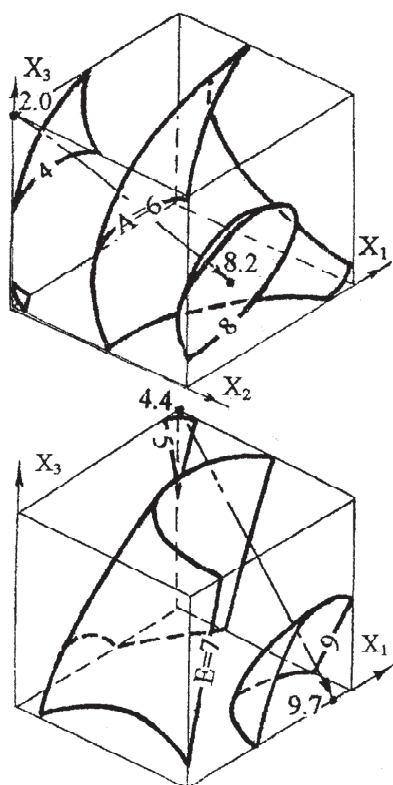


Рис. 4.12. Рецептурные поля износостойкости и динамического модуля упругости

пресс-данным о динамическом модуле упругости композитов, у которых степень наполнения $F = 2.25$.

По оценкам в вычислительном эксперименте обобщающих показателей локальных полей $E(x_2, x_3)$, $A(x_2, x_3)$ и их корреляции (G_E , G_A , G_{EA}) при пяти значениях x_1 влияние степени наполнения на эти показатели могло быть описано вторичными полиномиальными моделями. Так, зависимость наклона линии регрессии от отношения Н/П описана (с ошибкой около 0.04) полиномом третьей степени (4.11).

$$a_1\{A(E)\} = 0.78 - 0.62x_1 - 0.15x_1^2 + 0.27x_1^3 \quad (4.11)$$

Корреляция между A и E может значительно ослабеть, если наполнение окажется за пределами $2.1 \leq F \leq 2.4$ (т.е. $-0.6 \leq x_1 \leq +0.6$); наименьшая – при повышенном содержании смолы.

ки прогноза будут лучше. Можно предположить, что корреляция A с E будет меняться в зависимости от рецептурных условий (как и A с R , § 4.3).

Ряд вычислительных экспериментов на локальных полях A и E позволил получить недоступные по натурным данным интервальные оценки показателей корреляции этих свойств и их зависимостей от состава (даже для показателей, распределения которых трудно описать теоретически).

В частности, при зафиксированном среднем наполнении ($F = 2.25$, $x_1 = 0$) получены следующие непараметрические оценки для коэффициента корреляции и наклона (a_1) прямой регрессии A по E : $r_{05} = 0.32$, $r_{50} = 0.64$, $r_{95} = 0.83$ (значимые во всем диапазоне); $a_{1.05} = 0.40$, $a_{1.50} = 0.75$, $a_{1.95} = 1.15$ (изменяется почти втрое, что может затруднить экспресс-контроль износостойкости).

Уравнение $A = 0.40 + 0.75 \cdot E$, с улучшенными по сравнению с (4.9) характеристиками ($r_{50} = 0.64 > 0.55$), позволяет более точно оценивать износостойкость по экс-

Из анализа влияния других факторов на формирование взаимосвязи A и E следует: 1) корреляция между этими свойствами не обнаруживается, если их вариацию не обуславливает количество SiC (x_2 – не градиентный фактор); контроль износостойкости карбамидного композита с помощью ультразвуковых волн целесообразен, когда в его состав введен карбид кремния; 2) теснота связи между A и E менее чувствительна к содержанию крупных зерен, чем к отношению «наполнитель / полимер».

Связь износостойкости с E была проанализирована и для ситуаций с одним градиентным и двумя изменяемыми факторами. Семейство поверхностей на рис. 4.13 (из [126]) отражает влияние степени наполнения и содержания крупных зерен в наполнителе на коэффициент корреляции между динамическим модулем упругости и истираемостью, управляемыми содержанием карбида кремния: $x_{gr} = x_2$, $x_{ch} = (x_1, x_3)$. Поверхности соответствуют квантилям r_α генерированного распределения $r\{A, E\}$ при α равных 0.05, 0.50 и 0.95.

Приведенные в [126] результаты анализа корреляции A с E показывают, что динамический модуль упругости может рассматриваться как критерий управления износостойкостью карбамидного композита при условии повышенного количества полиминерального наполнителя ($H/P \geq 2.1$) с повышенным содержанием карбида кремния.

4.5. О результатах анализа корреляции свойств разных композитов

4.5.1. Товарный бетон. Вычислительные эксперименты, выполненные с целью совершенствования методов прогнозирования и контроля качества товарного бетона, позволили [187, 190] выявить и оценить изменения корреляции прочности бетона при растяжении (R_t) с прочностью при сжатии (R_c). В частности, было установлено, что если уровни прочности изменяются в связи с изменением содержания цемента и соотношения количества щебня и песка, введение модификаторов (полимерная суспензия и наполнитель) ослабляет, но не разрушает

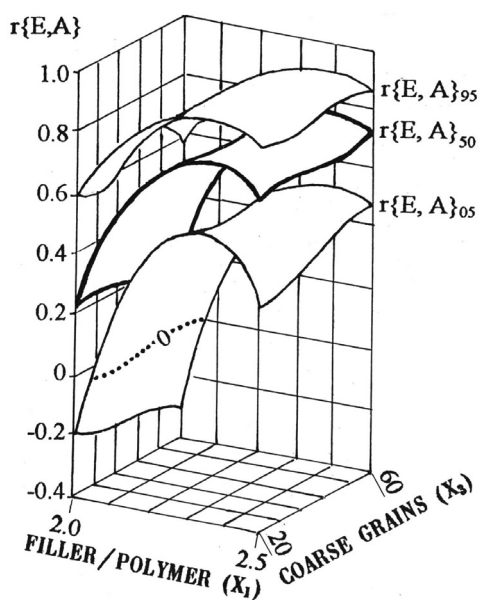


Рис. 4.13. Медианный и граничные уровни $r\{E, A\}$ в зависимости от степени наполнения и доли крупных зерен

положительную корреляцию. Однако, если R_t и R_c реагируют на изменения в дозировках модификаторов, гипотеза о линейной связи оказывается справедливой только в ограниченной области содержаний базовых компонентов. При определенных фиксированных количествах цемента модификация бетона может снизить r до значений, при которых эта гипотеза должна быть отвергнута; положительная линейная статистическая связь R_t с R_c может отсутствовать.

4.5.2. Серпентинитовый бетон. При разработке [86, 103, 131] гидратных бетонов для защиты от нейтронов в высокотемпературных атомных реакторах варьировался зерновой состав серпентинитового заполнителя – доли в смеси «мелкой», «средней» и «крупной» фракций (линейно связанные смесевые факторы), а также концентрация суперпластификатора и водоцементное отношение (взаимонезависимые факторы состава матрицы). В большой комплекс свойств бетонной смеси и бетона, определенных для 15 составов (по плану эксперимента в системе M_3T_2Q), входила и прочность после нагревания до 300° бетона, твердевшего в течение года (R_{yt}), а также скорость ультразвука в бетоне (v , в связи с необходимостью неразрушающего контроля качества в процессе эксплуатации). Выполненные по рассмотренной выше методике вычислительные эксперименты, на описанных ЭС-моделями вида (2.2) рецептурных полях этих критериев, показали результаты, важные для организации контроля качества.

Значение $r\{v, R_{yt}\}$, обусловленное вариацией состава матрицы (градиентных факторов), возрастает при введении в мелкий серпентинит средних и крупных зерен. Такое изменение гранулометрии (изменяющих факторов) приводит к уменьшению наклона a_1 прямой $R_{yt}(v)$ почти в 1.5 раза, при значительном сужении доверительного интервала для этой статистики. Остаточная дисперсия снижается почти в 2.5 раза, давая ошибку прогноза около 9 % от средней прочности.

Корреляция v с R_{yt} , определяемая при вариации смесевых градиентных факторов, вообще не обнаруживается (оценки r статистически равны нулю при риске менее 0.01 %, а ошибки оценок a_1 больше самих оценок), при любых фиксированных значениях изменяющих факторов состава матрицы.

4.5.3. Виброгасящий полимерный композит. При разработке этого материала [8, 97, 104, 169, 178] для демпфирующих слоев в фундаментах под оборудование и промышленных полах, для ремонта железобетонных элементов, подверженных аналогичным нагрузкам, варьировались 5 рецептурных факторов:

- состав комплексного модификатора эпоксидной матрицы – дозировки (% от массы смолы, близкой по свойствам ЭД-20) полиэтиленового воска (10 ± 10),

бутадиен-стирольного латекса (10 ± 10), фурфурола (5 ± 5)*, нормализованные соответственно к x_1, x_2, x_3 ;

- состав минеральной дисперсной фазы – количество тонкодисперсного кварцевого наполнителя ($100 \pm 50 \rightarrow x_4$) и кварцевого песка ($250 \pm 250\% \rightarrow x_5$).

Прочностные, деформативные, демпфирующие и другие свойства были определены для 27 композиций (по плану Na_5 [90]). Это позволило описать 5-факторными нелинейными ЭС-моделями рецептурные поля этих критериев и выполнить вычислительные эксперименты, в т. ч., для анализа их корреляции.

Максимальный уровень полного поля логарифмического декремента затухания колебаний δ (s^{-1}), в координатах всех пяти факторов, $\delta_{\max} = 0.579$, а минимум $\delta_{\min} = 0.100$; имеет место более чем пятикратное изменение этого свойства в исследуемой области составов. Уровень динамического модуля упругости E (ГПа) в области полного поля $E(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$ тоже изменяется более чем в 5 раз.

Столь значительные перепады объясняются, очевидно, сменой механизмов структурообразования. При модификации эпоксидной матрицы полиэтиленовым воском, латексом и фурфуолом структура пространственно-сшитого полимера изменяется на молекулярном, топологическом и надмолекулярном уровнях [191]. Кроме того, существенно изменение объемного содержания минеральной составляющей (толщины межзеренных слоев и доли в них структурированного межфазного слоя); это влияет на переход матрицы от квазижидкого до квазитвердотельного состояния с тонкопленочной структурой [192].

Это же объясняет неоднозначность отношений между упругими и демпфирующими свойствами для композитов с существенно разной степенью модификации и наполнения матрицы. Так, определенный по всем 27 парам экспериментальных значений E и δ , для составов с существенно различными соотношениями компонентов, коэффициент корреляции оказался незначимым ($r\{E, \delta\} = -0.24$), хотя ожидалось, что с уменьшением модуля упругости декремент затухания будет возрастать [8].

Анализ локальных полей $E(x_4, x_5)$ и $\delta(x_4, x_5)$ при разных значениях изменяющих их факторов x_1, x_2 и x_3 показал, что соотношение направлений градиентов этих полей меняется в зависимости от условий модификации матрицы. Очевидная метаморфоза эпоксидной матрицы приводит к изменению не только уровней упругих и неупругих свойств материала, но и их взаимосвязи.

* Предполагалось, что эти модификаторы матрицы повышают рассеяние энергии за счет внутреннего трения.

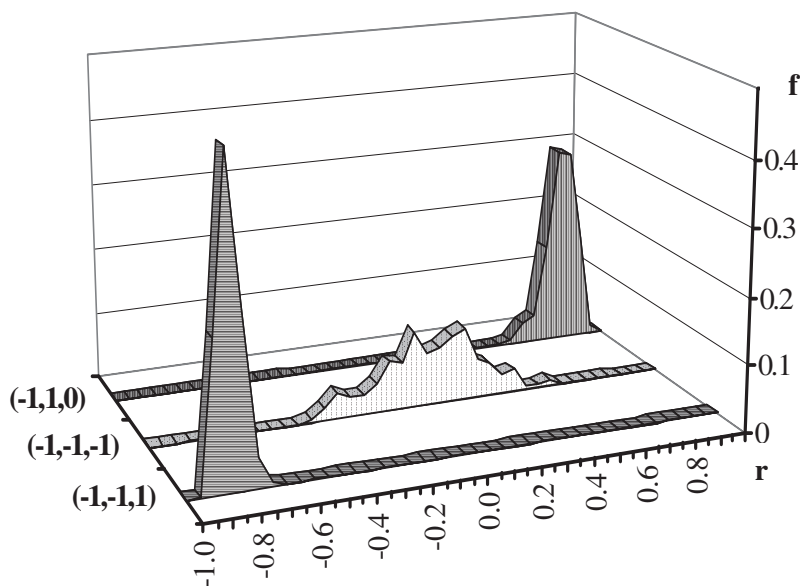


Рис. 4.14. Распределения коэффициента корреляции $r\{E, \delta\}$, определяемого при вариации количества наполнителя и заполнителя и фиксированных дозировках модификаторов матрицы:
 $(-1, 1, 0)$ – нет воска, «много» латекса, среднее количество фурфурола; $\bar{r} = +0.79, s_r = 0.06$;
 $(-1, -1, -1)$ – нет модификаторов; $\bar{r} = 0.04, s_r = 0.20$;
 $(-1, -1, 1)$ – нет воска, нет латекса, «много» фурфурола; $\bar{r} = -0.87, s_r = 0.04$

Распределения $r\{E, \delta\}$ на рис. 4.14 [169] позволяют увидеть, что достаточно сильная отрицательная статистическая связь декремента затухания с модулем E в случае модификации лишь фурфуролом (10 %) сменяется значимой положительной связью при введении большого количества латекса (20 %) и фурфурола на среднем уровне (5%). При отсутствии модификаторов линейная статистическая связь между этими характеристиками

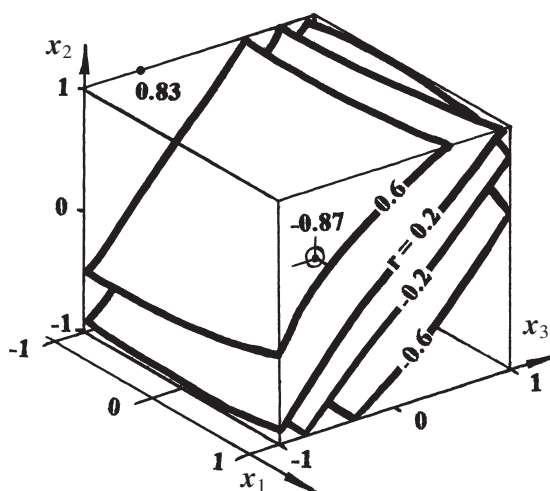


Рис. 4.15. Влияние ПЭ-воска (x_1), латекса (x_2) и фурфурола (x_3) на коэффициент корреляции δ и E , обнаруживаемой при вариации количества мелкого кварца и песка

вязких и упругих свойств материала не обнаруживается (полигон частот значений r накрывает 0).

Распределения $r\{E, \delta\}$ и их числовые характеристики (средние, стандартные отклонения, медианы, квантили и др.) были получены для $3^3 = 27$ композиций, по плану вычислительного эксперимента на кубе ($x_1, x_2, x_3 = \pm 1, 0$). Эти результаты позволили описать вторичными ЭС-моделями влияние условий модификации матрицы эпоксидного композита на показатели взаимосвязи между характеристикой внутреннего трения δ и динамическим модулем упругости E . На рис. 4.15 [169] представлено влияние состава и количества модификатора на коэффициент корреляции $r\{E, \delta\}$.

В зоне сильной отрицательной корреляции ($r \leq -0.6$) находятся составы во всем диапазоне содержания воска с ограниченным количеством латекса и достаточным количеством фурфурола. Выше поверхности $r = 0.6$ комплексные модификаторы с любым количеством воска (в исследованном диапазоне), с повышенным количеством латекса при ограниченном содержании фурфурола.

4.5.4. Шлако-щелочные вяжущие для жаростойких бетонов. В совместных исследованиях Научно-исследовательского института вяжущих веществ и материалов им. В.Д. Глуховского и Одесской государственной академии строительства и архитектуры, связанных с разработкой жаростойких композитов, проводился анализ корреляции показателей жаростойкости и термостабильности.

1. В одной из работ исследованы композиции, включающие термоактивированный каолинит [6, 19, 193, 194]. В натурном эксперименте определены пределы прочности для 41-го состава жаростойкого бетона, сразу после ТВО и после воздействия 800 и 1000°C (R^{800}, R^{1000} , МПа). По специально синтезированному плану эксперимента [19], допускающему построение неполных кубических ЭС-моделей, варьировались четыре фактора: модуль жидкого стекла (1.0-2.4, silicate modulus $M_s \sim x_1$), содержание шамота в смеси со шлаком (20-60%, x_2), температура термообработки каолиновой добавки (100-750°, x_3 , нормализованный с использованием нелинейной шкалы [8, 19]), количество добавки (10-30%, x_4).

После обжига при обеих температурах прочность должна быть не менее 60 МПа. Кроме того, необходимо, чтобы уровень коэффициента термостабильности $K^T = R^{1000} / R^{800}$ был не ниже единицы.

При первичном анализе результатов натурального эксперимента оказалась правдоподобной (с риском менее 0.01) гипотеза о линейной связи между прочностями композитов, прошедших обжиг при 800 и 1000°C; $r\{R^{800}, R^{1000}\} = 0.768$.

Поскольку только 5 композиций отвечали требованию $K^T > 1$ (в остальных повышение температуры вызывало деградацию структуры и падение прочности), полученная корреляционная модель $R^{1000} = 20.0 + 0.64 \cdot R^{800}$ прогнозирует $R^{1000} < R^{800}$ практически во всей допустимой области ($R > 60$ МПа).

Уравнение не гарантирует прирост R^{1000} с увеличением R^{800} (в среднем на 0.64 МПа при увеличении R^{800} на 1 МПа) для всех исследуемых составов вяжущего. Даже визуальное сравнение формы соответствующих пар поверхностей на рис. 4.16 (представляющих описанные ЭС-моделями рецептурные поля) обнаруживает, что существуют области составов, в которых рост R^{800} не сопровождается увеличением R^{1000} (в частности, сечения по x_1 , и по x_2 , при температурах активации каолинита 100 или 750°C). Таким образом, возможны существ-

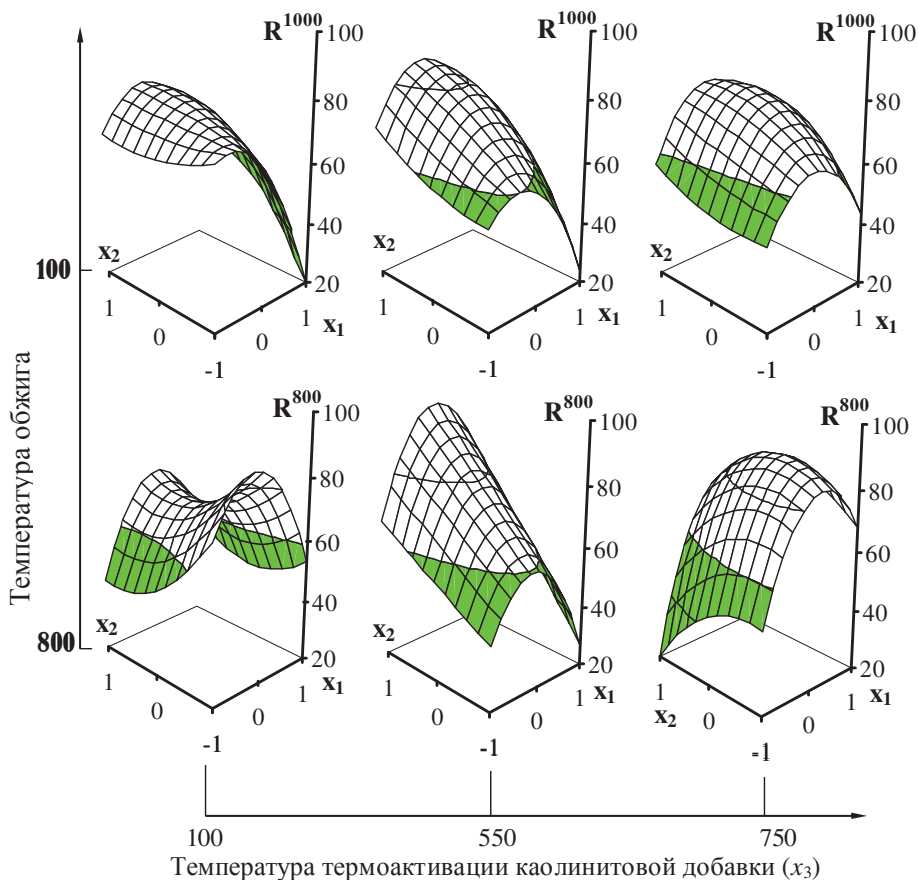


Рис. 4.16. Трансформация полей прочности в координатах M_s (x_1) и количества шамота (x_2) при изменении температуры обработки каолиновой добавки (x_3) и температуры обжига композитов (с содержанием добавки 20 м.ч.); затенены области $R < 60$ МПа

венные различия в характере и степени связи R^{1000} с R^{800} для разных рецептурных областей.

Это удалось выяснить в результате вычислительных экспериментов. В частности, для композитов с добавкой 10 % высушенного каолинита ($x_3 = x_4 = -1$) при генерации пределов прочности в подсистеме «Шлако-шамотное вяжущее» (x_1, x_2) получено распределение $r\{R^{800}, R^{1000}\}$ со следующими квантилями: 5-й процентиль $r_{05} = 0.01$, медиана $r_{50} = 0.24$, $r_{95} = 0.48$ (полигон в левом нижнем углу диаграммы на рис. 4.17). Распределение накрывает ноль, но с вероятностью менее 0.05 (площадь под полигоном «до 0» $\alpha = 0.031$), и линейная положительная связь R^{1000} с R^{800} для вяжущих разного базового состава признается правдоподобной при таких условиях модификации каолинитом.

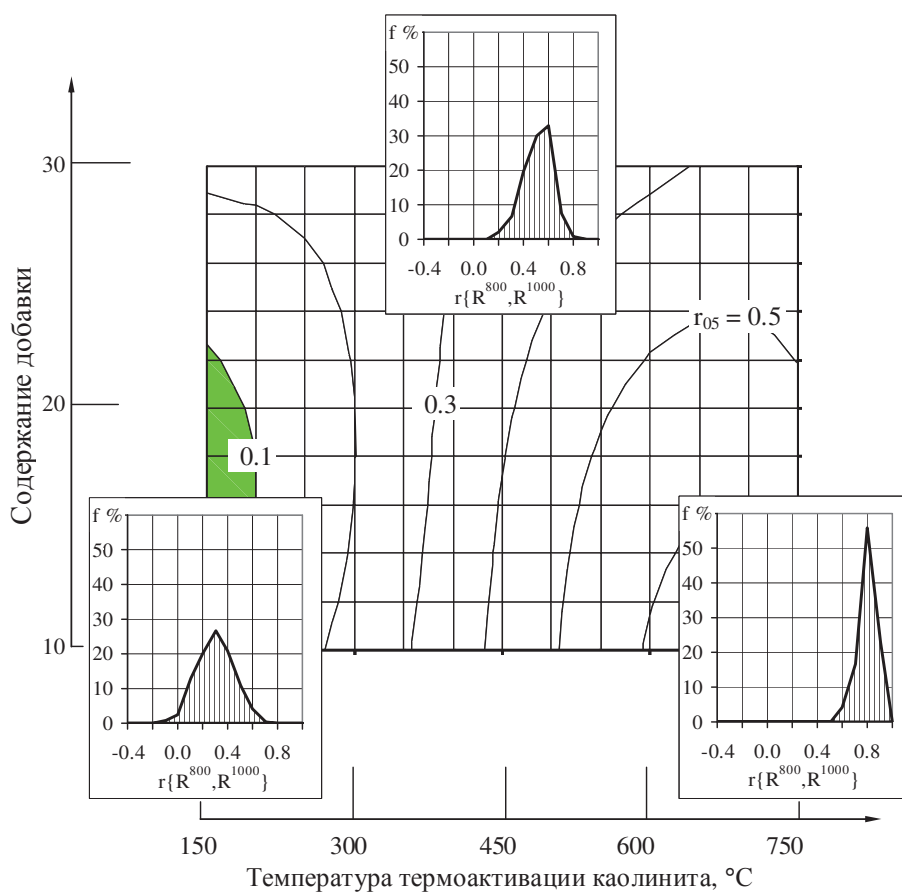


Рис. 4.17. Распределения коэффициента корреляции $r\{R^{800}, R^{1000}\}$ для трех условий модификации вяжущего и изолинии 5-го перцентиля r в координатах условий модификации

Влияние факторов подсистемы «добавка» на оценки корреляции двух прочностей, когда их вариация происходит при изменениях M_s и доли шамота, обобщено вторичными моделями (с использованием z -преобразования Фишера (4.2)), по результатам спланированного ВЭ на квадрате (x_3, x_4) . Зависимость тесноты связи R^{1000} с R^{800} от содержания и температуры обжига каолинита, в частности, представляют изолинии r_{05} на рис. 4.17 (построены при обратном преобразовании, $r = (e^{2z} - 1)/(e^{2z} + 1)$).

Аналогично выполнен ВЭ в подсистеме «жидкое стекло, шлако-шамотная смесь», градиентными были факторы подсистемы «термоактивированная добавка» [194]. Значимую линейную связь можно ожидать при «малых» дозировках шамота и невысоких значениях M_s . При повышенном содержании шамота только верхние значения модуля M_s обуславливают значимую корреляцию R^{800} и R^{1000} .

2. Изложенная в 4.3 методика ВЭ применена при исследовании связей между свойствами шлакощелочного вяжущего, разработанного [195] в НИИ им. В.Д. Глуховского, с целью создания нормативной базы для диагностики бетонов и расширения информации о механизмах их структурообразования и деструкции. Для вяжущей системы «СА-СА₂-MgO.Cr₂O₃-натриевое растворимое стекло» определялись, в частности, прочность на сжатие через семь суток естественного твердения R_n и после обжига при 800 и 1000°C (соответственно R_8 и R_{10}), а также симплексы $K_8 = R_8/R_n$ и $K_{10} = R_{10}/R_n$, характеризующие жаростойкость композиций [19]. Изучалось влияние состава системы на эти критерии и на связь между ними [154].

В натурном эксперименте варьировались: 3 линейно зависимых смесевых фактора (подсистема M_3) – доли в минеральной фазе «СА-СА₂-MgO.Cr₂O₃» псевдокомпонентов ($0 \leq v_i \leq 1$, $\sum v_i = 1$, $i = 1 \dots 3$), соответствующих вершинам треугольника, выделяющего область перспективных составов на треугольной диаграмме минералов; 2 взаимонезависимых параметра щелочного компонента (подсистема T_2) – силикатный модуль (M_s , от 1 до 2 ~ нормализованный $|x_4| \leq 1$) и плотность ($1.2 \leq \rho \leq 1.3$ г/см³ ~ x_5). Определенные для 16 композиций (по специально синтезированному плану эксперимента [19]) значения критериев позволили построить ЭС-модели вида (2.2) – приведенные полиномы 2-й степени для системы M_3T_2Q .

Непосредственно данные натурного эксперимента показали значимую статистическую связь коэффициентов стойкости с R_n . Уравнения (4.12-13) имеют коэффициент детерминации соответственно 0.52 и 0.60, то есть более половины вариации K обусловлено уровнем начальной прочности.

$$K_8 = 1.50 - 0.214 \cdot \ln R_n \quad K_{10} = 1.68 - 0.279 \cdot \ln R_n \quad (4.12-13)$$

Однако, как показали результаты вычислительных экспериментов, инженерная полезность функций $K(\ln R_n)$ для экспресс-контроля жаростойкости оказалась существенно зависящей от характеристик щелочного компонента.

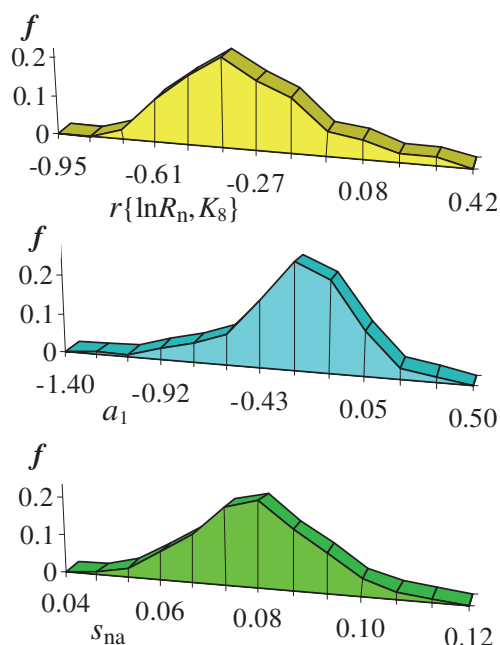


Рис. 4.18. Распределения оценок линейной модели $K_8 = a_0 + a_1 \cdot \ln R_n$ при $M_s = 1.5$, $\rho = 1.25$ ($x_4 = x_5 = 0$)

Таблица 4.1. Статистики распределений характеристик модели $K_8(R_n)$

		$r\{\ln R_n, K_8\}$	a_1	s_{na}
	Av	-0.36	-0.36	0.074
	Max	0.31	0.37	0.114
	Min	-0.84	-1.24	0.043
	A	0.59	0.43	0
	E	0	0.57	0
Квантили	q_{05}	-0.67	-0.90	0.053
	q_{10}	-0.63	-0.72	0.057
	Me	-0.39	-0.35	0.073
	q_{90}	-0.04	-0.03	0.091
	q_{95}	0.06	0.05	0.096

Так, при зафиксированных $M_s=1.5$ и $\rho=1.25$ ($x_4 = x_5 = 0$) после 200 генераций по 16 равномерно распределенных на смесевом треугольнике минеральных составов (v), для которых с помощью ЭС-моделей оценены уровни R_n , K_8 и их статистической связи (включая ошибку неадекватности линейной модели s_{na}), были получены распределения, представленные на рис. 4.18. Некоторые из них оказались существенно отличными от нормального (асимметрия A и эксцесс E статистически отличны от нуля [167]); полезные в этом случае непараметрические оценки (процентили q_α) также определены в результате статистических испытаний (табл. 4.1 [154]). Выяснилось, что связь жаростойкости с начальной прочностью значительно ослабевает, если они варьируют без изменения свойств щелочного компонента (по-видимому, основных структурообразующих факторов при формировании уровней R_n и K).

Существенное влияние щелочных факторов на эту связь подтвердили результаты вычислительного эксперимента при разных уровнях M_s и ρ (по плану на квадрате x_4, x_5). На рис. 4.19а показано, как трансформируются полигоны распределения $r\{\ln R_n, K_8\}$, если при $\rho = 1.3$ г/см³ изменять модуль жидкого стекла. Если $M_s = 2.0$ ($x_4 = +1$), связь сильно

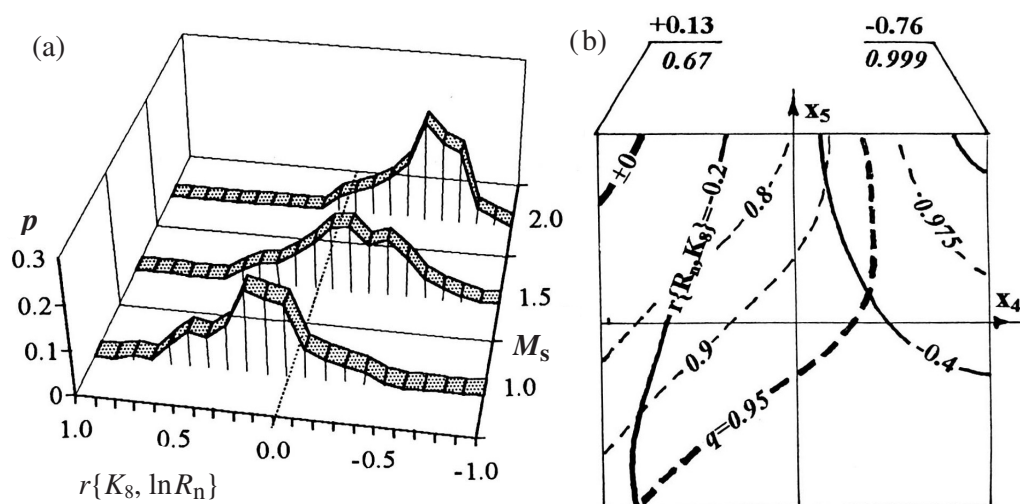


Рис. 4.19. Распределения коэффициента корреляции $r\{K_8, \ln R_n\}$ при разных модулях M_s (a) и диаграмма влияния щелочного компонента на уровень и достоверность корреляционной связи (b)

отрицательна, но при снижении M_s до 1.0 ($x_4 = -1$) распределение не только накрывает ноль (связь достоверно не обнаруживается!), но и показывает тенденцию к росту жаростойкости при увеличении R_n .

По полученным в ВЭ оценкам построены [154] неполные биквадратные вторичные ЭС-модели для коэффициента корреляции и риска α ее отсутствия, а также диаграммы с изолиниями $r\{\ln R_n, K_8\}$ и соответствующего ему уровня достоверности $q = 1 - \alpha$ в координатах M_s и ρ (рис. 4.19, b). Как видно, полезная для прогноза жаростойкости достоверная отрицательная связь между начальной и остаточной прочностью наблюдается при щелочном компоненте с высоким модулем M_s ; если $M_s < 1.7$ ($x_4 < 0.5$), то это заключение остается в силе только при одновременном уменьшении плотности жидкого стекла.

4.5.5. Другие результаты. С помощью симуляции значений РТ-факторов и соответствующих откликов структуры в вычислительных экспериментах для ряда композиционных материалов удалось выявить и измерить трансформацию корреляционных связей свойств при переходе от одних РТ-условий к другим. Это в частности, следующие свойства и материалы:

- ♦ коэффициент интенсивности напряжений, прочность и динамический модуль упругости мелкозернистого бетона, при равновесной влажности, в сухом и водонасыщенном состоянии [78, 196, 197];

- ♦ неравновесный температурный интервал кристаллизации в сварочном шве и критическая скорость вынужденного деформирования, при которой начинается образование трещин (критерий сопротивления образованию горячих трещин); связь этих критериев оказалась зависимой от легирующих добавок в обмазке сварочного электрода [198, 199];
- ♦ характеристика тиксотропии и темп разрушения (параметр реологического уравнения) отделочных фиброполимерцементных смесей [179-182, 188];
- ♦ прочность при изгибе и динамический модуль упругости защитно-конструкционных модифицированных эпоксидных композитов [200], характеристики их водо- и нефтестойкости [201-203];
- ♦ прочности при сжатии и изгибе, в раннем и 28-суточном возрасте, в связи с водопотребностью фиброармированных полимерцементных композиций для самовыравнивающихся полов, а также с динамическим модулем упругости [23, 140, 204, 205];
- ♦ прочности при сжатии и изгибе и плотность облегченных гипсовых композиций, наполненных перлитом и ценосферами [206, 207].

Таким образом, тандем структурированных ЭС-моделей и метода Монте-Карло в вычислительных экспериментах на рецептурно-технологических полях дает возможность стратифицировать исследуемое многообразие РТ-условий получения материала – выявить области составов и режимов, для которых могут быть построены работоспособные корреляционные уравнения, позволяющие оценивать уровень того или иного свойства (критерия) по уровню другого.

Обнаруживаемые при этом трансформации характера корреляционных связей могут указывать на смену доминирующих механизмов структурообразования и деструкции при переходе от одних РТ-условий к другим.

Глава 5. ИЗОПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

В задачах строительного материаловедения часто возникает необходимость исследовать изменения структурно-механических и эксплуатационных характеристик композитов и других критериев Y под влиянием РТ-факторов в условиях, когда факторы должны обеспечить неизменный уровень одного из критериев (некоторого базового свойства B , в частности, технологического). Приходится сравнивать свойства бетонов [208-213] из равноподвижных смесей и других композитов, изготовленных из технологических смесей одинаковой «удобообрабатываемости», теплофизические и другие свойства материалов равной плотности. В зависимости от целей исследования, это могут быть «изореологические» или «изопрочностные», или «изоресурные» и т.п. *изопараметрические* (ИП) условия.

Экспериментальный подбор разных составов и режимов, обеспечивающих один и тот же фиксированный уровень базового свойства, весьма трудоемок, в ряде случаев практически неосуществим; например, при необходимости изучить композиты с равными показателями стойкости или с равной долей пор в определенном диапазоне размеров.

Для таких исследований, для управления свойствами, когда одно из них должно оставаться неизменным, был предложен [90] *изопараметрический анализ* (ИПА), на основе ЭС-моделей. Описанные ими зависимости свойств материала от вектора нормализованных РТ-факторов x (и смесевых v, w) анализируются [8, 19] в условиях (5.1) – фиксированного уровня одного из свойств*.

$$B(x) = const = B_{is} \quad (5.1)$$

Использование в ИПА комплекса ЭС-моделей $Y(x)$, включая $B(x)$, позволило многократно снизить объем опытных работ и получить принципиально новую информацию в исследованиях полимерных связующих [8, 214-216], ячеистых и мелкозернистых бетонов [18, 217]. Однако графоаналитическая реализация этого полезного метода [8, 19] была недостаточно простой и удобной.

Иной подход к изопараметрическому анализу сформирован в рамках концепции полей свойств [6, 79, 168, 218]; с ней ИПА связан методологически – анализ свойств Y проводится на поверхности равного потенциала поля одного из них. Достигаемые за счет изменения x ИП-условия соответствуют движению по поверхности (5.1). В случае двумерной области полей (Ω_x) – это движение

* Ряд исследователей не вполне корректно называют изопараметрическим анализом простое отображение зависимостей Y от x изолиниями и изоповерхностями.

вдоль изолинии; уровни других Y определяются (по ЭС-моделям) вдоль соответствующей траектории в Ω_x .

Осуществляется ИП-анализ на основе результатов вычислительного эксперимента [219]. Использование метода Монте-Карло в тандеме с ЭС-моделями, для симуляции РТ-параметров и уровней РТ-полей избавляет ИПА от сложных процедур [8, 19] движения равными шагами по изолинии поля (к тому же, он может быть реализован в факторной области любой «разумной» размерности), а также приближает результаты компьютерного эксперимента к реальным данным. Для демонстрации возможностей такого эксперимента ниже используются данные о свойствах наполненных карбамидных композиций (п. 1.2), полученные в спланированном натурном эксперименте. К уже представленным выше свойствам в этой главе добавляется эффективная вязкость.

5.1. Полное поле вязкости наполненной карбамидной смолы при скорости сдвига 1 с^{-1} . Локальные поля трех свойств при среднем наполнении

Для 15 композиций (табл. 1.1) на ротационном вискозиметре была определена эффективная вязкость η (Па·с), в частности, при скорости сдвига $\dot{\gamma} = 1 \text{ с}^{-1}$. По этим данным построена ЭС-модель (5.2).

$$\begin{aligned} \ln \eta = & 3.27 + 0.61x_1 + 0.33x_1^2 + 0.09x_1x_2 - 0.16x_1x_3 \\ & + 0.36x_2 + 0.36x_2^2 - 0.14x_2x_3 \\ & - 0.36x_3 + 0.46x_3^2 \end{aligned} \quad (5.2)$$

Модель описывает (при риске 0.1 и относительной ошибке 0.07, или 3.15

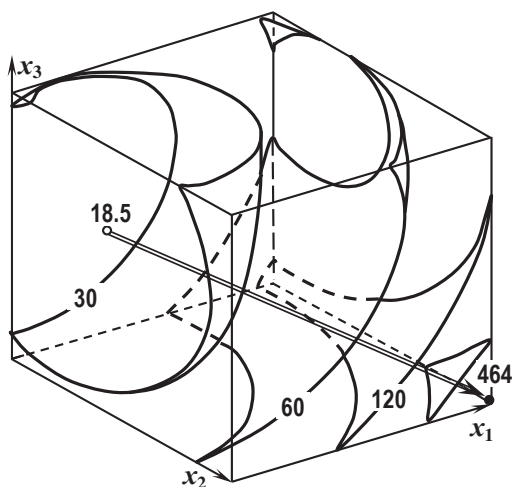


Рис. 5.1. Рецептурное поле вязкости наполненной карбамидной смолы

Па·с) показанное на рис. 5.1 поле $\eta(x)$ в нормализованных координатах степени наполнения ($F \sim x_1$), содержания в наполнителе карбида кремния ($SC \sim x_2$) и крупных зерен андезита ($CA \sim x_3$).

Минимальный уровень поля (при низком наполнении, около 20 % SiC и 44 % крупных зерен), $\eta_{\min} = 18.5$, максимум $\eta_{\max} = 464$ Па·с (наиболее наполненные смеси, с максимальным содержанием карбида кремния и минимумом крупных зерен, $x_1 = x_2 = +1$, $x_3 = -1$), перепад $\Delta_\eta = 445.5$ Па·с, или $\delta_\eta = 25$ раз. Изменение вязкости в большом диапа-

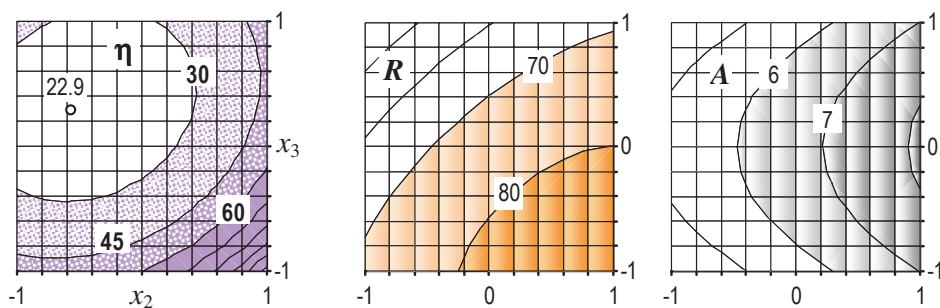


Рис. 5.2. Влияние состава наполнителя ($SC \sim x_2$ и $SA \sim x_3$) на вязкость смеси η (Па·с), на прочность R (МПа) и износостойкость A (ч/г) композита при среднем наполнении ($F = 2.25$, $x_1 = 0$)

зоне и направление вектора роста, естественно, определяются снижением количества полимера и крупных зерен, что уменьшает толщину прослоек жидкой фазы; синергизм при смешивании зерен карбида кремния и андезита способствует пластификации [6].

Для презентации алгоритма ИПА следует рассмотреть «плоскую задачу», а именно перейти к локальным полям свойств в координатах состава наполнителя при среднем его количестве, $Y(x_2, x_3 / x_1=0)$. На рис. 5.2 показаны такие поля η , R и A ; их описывают модели (5.2, 4.4, 1.3) при $x_1=0$. Рассматриваются «изовязкие» композиции, т.е., неизменяемый параметр – вязкость η . Выбранный уровень $\eta_{is} = 45$ Па·с соответствует середине требуемого технологией [126] диапазона $30 \leq \eta \leq 60$ Па·с.

5.2. Вычислительный эксперимент для изопараметрического анализа (равновязкие карбомидные композиции)

Отдельное испытание в компьютерном эксперименте для ИПА проводится (как правило) в двумерной области формирующих локальное поле градиентных факторов ($\mathbf{x} = \mathbf{x}_{gr} = (x_i, x_j)$, $\Omega_x = \Omega_{gr}$), при фиксированных уровнях остальных факторов (компонентов вектора \mathbf{x}_{ch} , изменяющих локальные поля). В частности, могут быть предусмотрены испытания в точках области Ω_{ch} , соответствующих тому или иному плану вычислительного эксперимента. В испытании информация для ИПА «добывается» не на линии $B(\mathbf{x}) = B_{is}$ (в демонстрируемом примере $\eta_{is} = 45$ Па·с), а в *изопараметрическом коридоре* Ω_{is} , выделяемом из Ω_x . Испытание заключается в следующем.

1. Определяется доверительный коридор (5.3), границы которого учитывают (с риском α , при котором построена модель полного поля) «размытость» рассчитываемого по модели детерминированного значения B . Ширина коридора

(изопараметрической области значений B) задается ошибкой s_e экспериментального определения B и квантилем t -распределения и изменяется в зависимости от \mathbf{x} через функцию дисперсии предсказания d (см. гл. 3)*.

$$B_{is,\alpha}(\mathbf{x}) = B_{is} \pm t_{\alpha} \cdot s_e \cdot [d_B(\mathbf{x})]^{0.5} = B_{is} \pm \Delta B_{is}(\mathbf{x}) \quad (5.3)$$

2. В двухфакторной области Ω_x (в демонстрируемом ниже примере – на квадрате $\{x_2, x_3\}$) генерируется n равномерно распределенных точек (в примере 1600 составов наполнителя, 1-ое подключение ММК). Для участия в анализе оставляются те n_{is} точек \mathbf{x}_{is} , значения параметра B в которых, рассчитанные по ЭС-модели $B(\mathbf{x})$, попадают в коридор $B_{is} \pm \Delta B_{is}(\mathbf{x})$. Таким образом, верхняя и нижняя границы $B_{is,\alpha}(\mathbf{x})$ доверительного коридора (5.3) выделяют в области поля Ω_x изопараметрический коридор Ω_{is} , $\mathbf{x}_{is} \in \Omega_{is}$. В демонстрируемом примере в ИП-коридоре осталось 123 из 1600 генерированных точек.

3. Недоступные в реальном эксперименте данные об уровнях полей других критериев Y в ИП-условиях имитируются оценками (5.4), уровня случайного поля Y в любой u -той точке из n_{is} точек, попавших в ИП-коридор Ω_{is} . Для этого к рассчитываемым по ЭС-моделям значениям Y добавляется нормально распределенные ошибки предсказания (второе подключение ММК), аналогично (3.13); используются генерируемые для каждой точки значения t , распределенные по стандартному нормальному закону (или $t \cdot s_e$ – по нормальному закону).

$$Y_u = Y(\mathbf{x}_{is,u}) \pm t_u \cdot s_e \cdot [d(\mathbf{x}_{is,u})]^{0.5} \quad (5.4)$$

Если важна лишь тенденция изменения Y в условиях постоянства B , достаточны модельно-детерминированные значения $Y(\mathbf{x}_{is})$ – оценки средних уровней полей в точках \mathbf{x}_{is} .

Результатом этих действий (п. 1-3) оказываются 3 типа «коридоров», по принадлежности содержащихся в них значений: "1" – с n_{is} уровнями изопараметра B в доверительных границах (5.3); "2" – со значениями факторов в ИП-коридоре Ω_{is} , обусловившими уровни B в "1"; "3" – с n_{is} уровнями других Y , оцененных по (5.4) для $(x_{i,is}, x_{j,is})$ из "2", образующими ИП-коридоры этих свойств; в примере это износостойкость и прочность 123 изовязких композиций (с η в интервале $45 \pm \Delta\eta(\mathbf{x}_{is})$ Па·с).

4. Возможны два способа визуализации результатов статистического испытания. В обоих полученные ИП-коридоры (Ω_{is} и коридоры значений свойств, B и Y) «разворачиваются».

* Иногда допустима замена $d(\mathbf{x})$ средним по Ω_x значением \bar{d} , допустимо и увеличение риска. Исходя из целей задачи, методических или инженерных соображений, доверительный коридор можно расширить, умножив Δ на коэффициент > 1 [220].

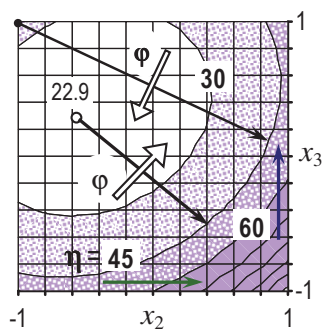


Рис. 5.3. Направления развертки ИП-коридора вдоль линии $\eta = 45$ Па·с и вдоль осей факторов

Развертка первым способом (фокусная) осуществляется вдоль линии $B(x) = B_{is}$, при равномерном угловом перемещении φ вектора обоих факторов, направленного к этой линии из некоторого фокуса. Выбор фокуса произволен, но должен позволять наиболее полно «обозревать» весь коридор. Способ универсален – применим к любым, в том числе циклическим изолиниям; можно разворачивать эллипсовидный коридор, поместив фокус вблизи центра цикла. В примере на рис. 5.3 фокусы – точка минимального уровня локального поля вязкости $\eta(x_2, x_3 / x_1 = 0)$ или вершина $(-1, +1)$ квадрата

$\{x_2, x_3\}$; в этом случае угол обзора, $\pi/2$, оказывается в одном квадранте.

Второй способ проще, но имеет более узкое назначение – развертка производится вдоль оси одного из факторов (стрелки вдоль координатных осей на рис. 5.3), за счет изменения которого предполагается управление свойствами – и B , и другими Y . Если изолиния B_{is} не имеет циклов (ее проекция в Ω_x – не эллипс), то предпочтительно развернуть соответствующий коридор по той факторной

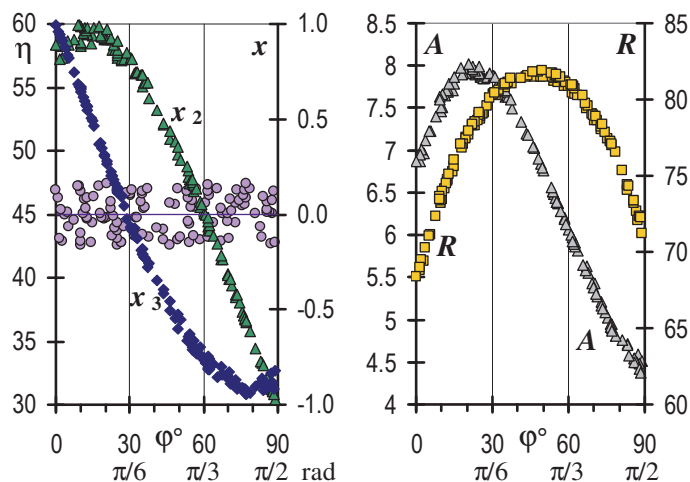


Рис. 5.4. Вязкость, состав наполнителя (x_2, x_3), износостойкость и прочность изовязких карбамидных связующих в изопараметрическом коридоре (фокусная развертка)

оси, на которую у нее большая проекция*.

Вдоль оси развертки отображаются значения факторов ($x_{i,is}, x_{j,is}$) и соответствующие им уровни свойств Y .

На рис. 5.4 представлены такие «коридорные» графики для средне наполненных ($x_1 = 0, F = 2.25$) изовязких ($\eta_{is} = 45$ Па·с) карбамидных связующих, при обзоре из точки $x_2 = -1, x_3 = +1$; ось абс-

* Для циклов может потребоваться более чем одна развертка вдоль такой оси; при необходимости в качестве линии тренда в коридоре свойства (несущей функции) можно использовать сплайн.

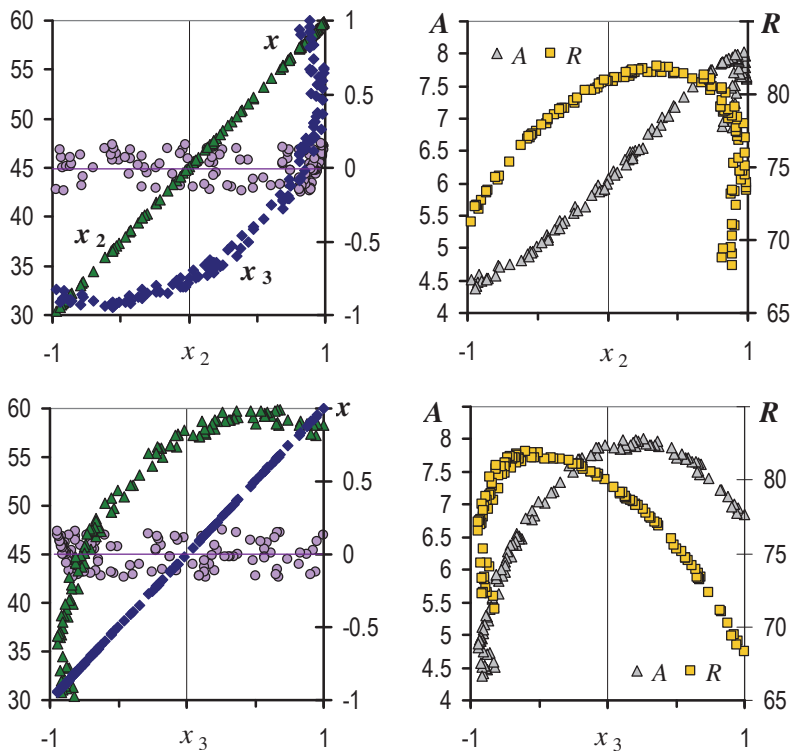


Рис. 5.5. Вязкость, состав наполнителя (x_2, x_3), износостойкость и прочность изовязких связующих в зависимости от содержания карбида кремния (x_2) и крупных зерен андезита (x_3)

цисс – угол обзора по часовой стрелке (как показано на рис. 5.3, в радианах). Отображения на рис. 5.5 развернуты вдоль осей одного и другого фактора.

Значения Y в ИП-коридоре представляют локальное поле с критериальными границами (см. § 1.3), а именно, $Y(x) / B(x) = B_{is} \pm \Delta B_{is}(x)$; область этого поля – Ω_{is} . В примере это: $A(x_2, x_3 / x_1=0, \eta = 45 \pm \Delta\eta_{is}(x_2, x_3 / x_1=0))$

$$\text{и } R(x_2, x_3 / x_1=0, \eta = 45 \pm \Delta\eta_{is}(x_2, x_3 / x_1=0)).$$

«Коридорные» графики на рис. 5.4-5.5 – отображения этих полей, полученных «наложением» коридора Ω_{is} на квадратную область случайных полей $A(x_2, x_3 / x_1=0)$ и $R(x_2, x_3 / x_1=0)$.

5. Особенности РТ-коридоров свойств (как и любых РТ-полей), могут быть выражены обобщающими показателями (см. гл. 1) – максимальным и минимальным уровнями в условиях изопараметрии (в ИП-коридоре Ω_{is}), перепадами и другими числовыми характеристиками. Обобщающие показатели коридоров свойств $G_Y\{\Omega_{is}\}$ позволяют численно оценить изменения Y в ИП-условиях. Оценки G (и их распределения) могут быть рассчитаны по алгоритму, показан-

ному на рис. 4.9. Ряд показателей может быть оценен по «несущей» функции, описывающей изменение Y вдоль оси ИП-развертки*.

Так линию тренда в коридоре износостойкости изовязких карбамидных композиций (рис. 5.4) описывает уравнение (5.5), с коэффициентом детерминации $R^2 = 0.999$.

$$A\{\eta_{is} = 45\} = 6.73 + 6.61\varphi - 10.30\varphi^2 + 3.12\varphi^3 + 0.10\varphi^4 \quad (5.5)$$

Оценки максимального и минимального уровней по (5.5) $A_{\max}\{\eta_{is} = 45\} = 8.0$ и $A_{\min}\{\eta_{is} = 45\} = 4.4$ ч/г, перепад вдоль изолинии требуемой вязкости в 1.8 раза. Максимум износостойкости изовязких композиций обеспечивается в зоне $\varphi = 0.33-0.43$ (x_2 в диапазоне 0.86-0.93, около 57% SiC в наполнителе, x_3 в интервале 0.16-0.35, около 46% крупного андезита). Минимум находится в направлении $\varphi = \pi/2$ (из вершины «-1, +1» на рис. 5.3), т.е. при отсутствии карбида кремния и 20% крупных зерен.

При анализе результатов изопараметрического испытания следует учитывать, что значения Y рассеяны – в коридоре, ширина которого связана с шириной коридора B . Если перепад Y «невелик», следует проверить (по t -критерию) гипотезу о равенстве минимального и максимального значений [9], оцененных по «несущей» функции, с учетом ее ошибки.

Обобщающим показателем рассеяния Y внутри Ω_{is} может служить [6, 221] «коэффициент изопараметрического рассеяния» (5.6), логически связанный с ошибкой модели тренда, определяемый через коэффициент детерминации R^2 .

$$\Psi\{Y\} = 1 - R^2\{Y, x_{is}\}, \quad \Theta\{Y\} = R^2\{Y, x_{is}\} / \Psi\{Y\} \quad (5.6), (5.7)$$

Во сколько раз изменение анализируемого свойства Y за счет x вдоль дуги φ больше рассеяния его значений вокруг несущей линии, можно судить по индексу концентрации (5.7). Для износостойкости A разброс значений вокруг (5.5) в тысячу раз меньше, чем прирост за счет изменения состава наполнителя в изовязких смесях, $\Psi\{A\} = 0.999 / 0.001$.

Специальный вычислительный эксперимент для оценки влияния условий проведения ИП-анализа на его результаты [6] показал, что они более чувствительны к увеличению ошибки эксперимента s_e в (5.4), для Y , чем к увеличению ширины коридора Δ в (5.3), для изопараметра. Уменьшение s_e и Δ ведет к снижению Ψ (а следовательно, к повышению достоверности материаловедческих заключений). Однако, целесообразнее добиваться снижения одного из этих факторов, поскольку существуют их отрицательный синергизм.

6. Оценки обобщающих показателей $G_Y\{\Omega_{is}\}$ могут быть получены в ИП-испытаниях при разных фиксированных уровнях факторов x_{ch} (изменяющих РТ-коридоры свойств), по тому или иному плану таких испытаний в области Ω_{ch} . Вторичные ЭС-модели, построенные по этим оценкам, представляют следующий уровень обобщения по отношению к исходным данным – результатам натурального спланированного эксперимента, как это показано в цепочке (1.12).

* Это вторичная модель, по отношению к данным натурального эксперимента и построенной по ним первичной ЭС-модели, оценки по которой являются откликами в вычислительном эксперименте; по этим вторичным результатам и определяется «несущая» функция. Если первичная модель – полином 2-й степени, то вторичная – до 4-й степени [8].

$$A_{\max} \{ \eta(x_2, x_3) = 45 \pm 2.5 \} = 0.1578 \cdot (51.734 - \exp(3.3504x_1)) \quad (5.8)$$

Моделью (5.8)* описано влияние степени наполнения ($F \sim x_1$) рассматриваемых карбамидных композиций на максимальный уровень износостойкости, достигаемый за счет вариации состава наполнителя ($SC \sim x_2$, $CA \sim x_3$), в условиях требования неизменной вязкости смеси, $\eta = 45 \pm 2.5$ Па·с (рис. 5.6).

Модель получена по результатам статистических ИП-испытаний при $x_1 = -1, -0.5, 0, +0.5$. При $x_1 = +1$ ($F = 2.5$, наиболее наполненные композиции) не оказалось составов наполнителя (x_2, x_3), обеспечивающих указанную вязкость (в этом сечении куба на рис. 5.1 уже отсутствует допустимая область по требуемой η – коридор Ω_{is}).

Подобная информация недоступна непосредственно в реальном эксперименте. ИП-анализ как инструмент компьютерного материаловедения позволяет с помощью виртуальных экспериментов извлечь из натуральных данных новое знание, необходимое для выработки технологических решений.

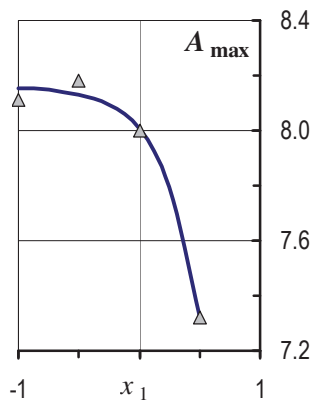


Рис. 5.6. Максимальная износостойкость за счет состава наполнителя изовязких композиций в зависимости от степени наполнения

5.3. Изопараметрический анализ и эффект пластификации полимерных связующих за счет состава наполнителя

Известно, что при «широком» распределении размеров частиц наполнителя (смеси мелких и крупных) полимерная композиция имеет наиболее низкую вязкость [222]. Благодаря первой версии ИПА был выявлен, количественно доказан и объяснен эффект снижения вязкости наполненной полиэфирной смолы (Виналкид 550-ПЕ) только за счет распределения размеров частиц [8, 109, 216, 223] многофракционного наполнителя. Остальные условия были стабилизированы: равная удельная поверхность и та же степень наполнения, а значит и средняя толщина межзеренных слоев, одна и та же удельная поверхностная активность (мрамор), одинаковая скорость сдвига ($\dot{\gamma} = 1 \text{ с}^{-1}$).

Для доказательства инвариантности эффекта к смене смолы была выполнена серия экспериментов [224], на ротационном вискозиметре (при инструментальном обеспечении аналогичном экспериментам с 550-ПЕ). Исследова-

* Подобрана с помощью CurveExpert.

лись закономерности реологического поведения композиций на эпоксидных (ЭД-20, ЭД-16, ЭИС и Э-41) и полиэфирных смолах (ПН-1, ПН-15), а также модельной системы (МС), где в качестве связующего использовалось индустриальное масло (с вязкостью 1.52 Па·с).

Состав трехфракционного наполнителя (w_1 – массовая доля мелких кварцевых зерен с удельной поверхностью $S_1 = 350$, w_2 – доля средних зерен с $S_2 = 150$ и w_3 – крупных, с $S_3 = 50$ м²/кг; $\Sigma w_i = 1$) при постоянном отношении «наполнитель-полимер» Н:П = 2.5 (по массе) варьировался по оптимальному плану на симплексе [9, 225], с десятью точками. На кривых вязкости десяти композиций определены значения η при $\dot{\gamma} = 1$ с⁻¹, по которым построены ЭС-модели в виде приведенных полиномов третьей степени [8, 9]. Так модель (5.9), с шестью значимыми (при риске 0.05) коэффициентами, описывает показанное на рис. 5.7а поле вязкости композиций на смоле ЭД-20 (широко применявшейся в высококачественных материалах для ремонтных работ).

$$\begin{aligned} \ln \eta \{ \text{ЭД-20} \} = & 5.98w_1 \pm 0w_1w_2 - 5.29w_1w_3 + 1.37w_1w_2(w_1-w_2) \pm 0w_1w_3(w_1-w_3) \\ & + 5.68w_2 \quad \quad - 4.28w_2w_3 \quad \quad \quad \pm 0w_2w_3(w_2-w_3) \\ & + 5.19w_3 \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \pm 0w_1w_2w_3 \quad \quad \quad (5.9) \end{aligned}$$

Обобщающие показатели поля $\eta(w_1, w_2, w_3)$ по этой модели: максимальная вязкость $\eta_{\max} = e^{5.98} = 395$ Па·с, при мелком наполнителе ($w_1=1, w_2=w_3=0, S = 350$); $\eta_{\min} = e^{4.06} = 58$ Па·с, при мелком наполнителе в смеси с крупным в соотношении около 1:2 ($w_1=0.33, w_2=0, w_3=0.67, S = 148$ м²/кг); относительное изменение вязкости $\delta\eta = \exp(\ln\eta_{\max} - \ln\eta_{\min}) = 6.81$; расстояние между экстремумами $L_{\text{ext}} = 0.67$ единиц факторного пространства (вдоль нижней стороны треугольника, совпадает со значением w_3); усредненный градиент по относительному приросту $\nabla_{\delta}\eta = \delta\eta / L_{\text{ext}} = 10.2$.

Значения показателей G полей вязкости наполненных смол и модельной среды (рис. 5.7, из диссертации [6]) приведены в табл. 5.1 (включая 550-ПЕ с кварцевым наполнителем). Все композиции имеют η_{\max} одного порядка (это достигнуто за счет пластификации некоторых смол), что позволяет считать условия сравнительного анализа равноценными. Судя по критерию $\nabla_{\delta}\eta$, смолы можно разделить на «малочувствительные» к изменению гранулометрического состава наполнителя ($\nabla_{\delta}\eta = 8-12$, эпоксидные ЭД-20, ЭД-16 и ЭИС-1, к которым примыкает исследованная ранее 550-ПЕ) и «высокочувствительные» (полиэфирные ПН-1 и ПН-15 и эпоксидный лак ЭД-41; к ним примыкает модельная смесь, в которой масло не образует сильно структурированных слоев на поверхности кварца). Эффект пластификации смеси за счет оптимального зернового

состава наполнителя подтверждается во всех полях вязкости (рис. 5.7). Наиболее четко этот эффект проявляется при изопараметрическом анализе.

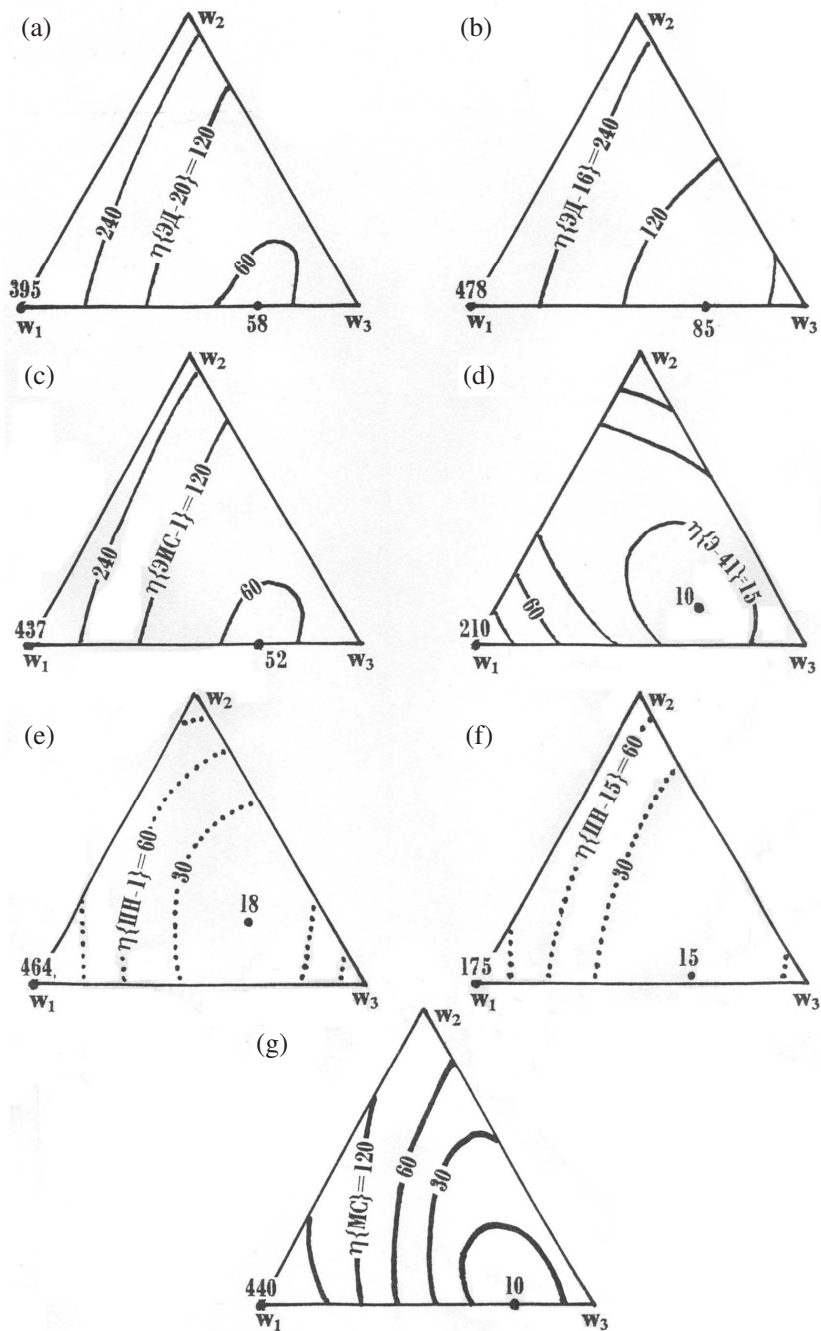


Рис. 5.7. Поля «зерновой состав наполнителя, вязкость» эпоксидных (a-d) и полиэфирных (e-f) композиций, а также модельной системы (g)

Таблица 5.1 Обобщающие показатели рецептурных полей вязкости композиций на семи смолах и индустриальном масле в одной и той же области гранулометрических составов кварцевого наполнителя

Марка смолы	Индекс поля на рис. 5.7	Максимум вязкости		Минимум вязкости			Относительно снижение вязкости δ_η	Расстояние между экстремумами L_{ext}	Градиент по относительному приросту $\nabla_{\delta\eta} = \delta_\eta / L_{ext}$	
		η_{max} , Па·с	w_i	η_{min} , Па·с	w_1	w_2				w_3
ЭД-20	а	395	$w_1 = 1, w_2 = w_3 = 0$	58	0.33	0	0.67	6.8	0.67	10.2
ЭД-16	б	478		85	0.27	0	0.73	5.6	0.73	7.7
ЭС-1	в	437		52	0.31	0	0.69	8.4	0.69	12.2
Э-41	г	210		10	0.21	0.16	0.63	21.0	0.68	30.9
ПН-1	д	464		18	0.22	0.24	0.54	25.8	0.67	38.5
ПН-15	е	175		15	0.32	0.03	0.65	11.7	0.64	18.2
МС	ж	440		10	0.23	0	0.77	44.0	0.77	57.1
550-ПЭ		247		110	0.42	0.11	0.47	2.2	0.56	4.0

Условие ИП-анализа следующее: «как изменится вязкость композиций, если при сохранении постоянной удельной поверхности $S = 150 \text{ м}^2/\text{кг}$, соответствующей зернам среднего размера ($w_2 = 1$), постепенно заменять их на смесь зерен мелкого и крупного ($w_1:w_3 = 1:2$, исходя из соотношения S_1 и S_3)». Эта замена соответствует движению вдоль прямой, проходящей через вершину w_2 смесового треугольника и пересекающей нижнюю сторону под углом около 100° .

В вычислительном эксперименте в области поля S (w_1, w_2, w_3) генерированы 5000 случайных точек (зерновых составов, из которых 10 % «рассыпаны» по границе области). Линию постоянного уровня имитировали значения S для 1282 составов, попавших в доверительный коридор $S \cdot (1 \pm t_\alpha \cdot \delta_s) = 150 \pm 10 \text{ м}^2/\text{кг}$ (при ошибке $\delta_s = 5\%$ и $\alpha = 0.1$).

На рис. 5.8 показаны результаты статистических испытаний – уровни η для представителей смол и для модельной среды в ИП-коридоре. Не вызывает сомнения, что эффект пластификации значим: у ЭД-20 вязкость снизилась примерно в 3-4 раза, а у ПН-1 и в модельной системе в 7-8 раз.

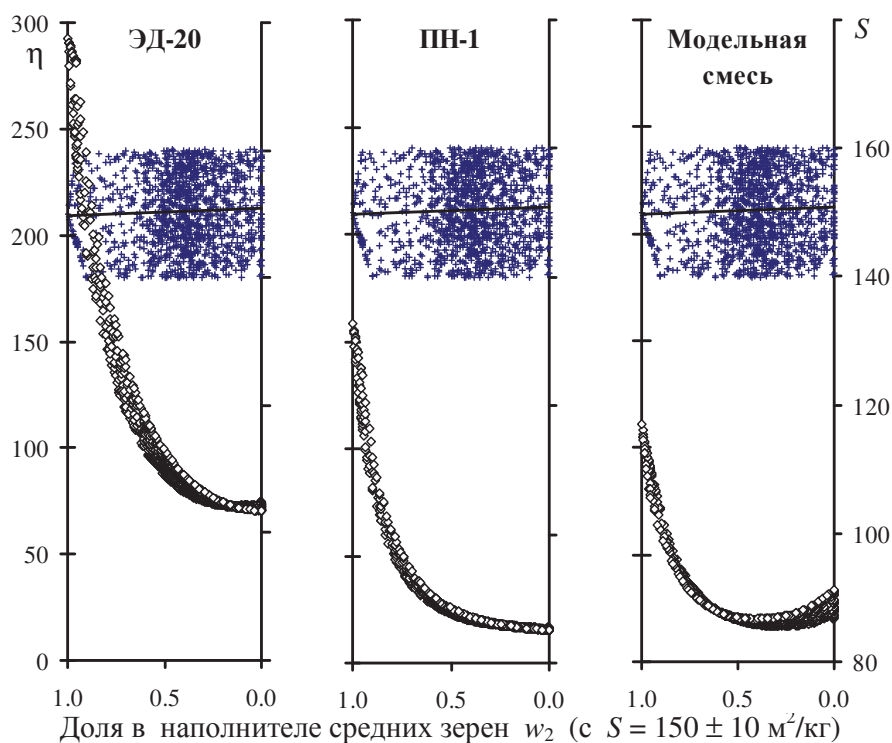


Рис. 5.8. Уменьшение вязкости композиций за счет изменения зернового состава наполнителя при сохранении удельной поверхности

Усредненные результаты статистического испытания для каждого из семи видов композиций показаны на рис. 5.9, а (из работы [6]). Естественно, эти кривые аналогичны зависимостям $\ln \eta(w_2)$ в сечении $w_1:w_3 = 1:2$ по моделям типа (5.9). Уже отмеченная разная чувствительность смесей к изменению распределения размера зерен наполнителя сохраняется и при одинаковой удельной поверхности. Мерой чувствительности служит отношение $\eta(w_2)$ при $S = 150 \text{ м}^2/\text{кг}$ к максимальной вязкости при данном условии (композиции со средними зернами, $w_2=1$). Это отношение, $\varphi\{S=150\}$, является обобщающим показателем полей двух свойств (η в условиях неизменного уровня S). С уменьшением доли средней фракции $\varphi_\eta(w_2)$ уменьшается (рис. 5.9б) от 1 до 0.317 у композиций на ЭД-16 (снижение в 3 раза) и до 0.137 на ПН-1 (снижение в 7 раз). Изменения этого показателя, оцененного по откликам в вычислительном эксперименте, описаны (с весьма малым риском $\alpha < 0.001$) вторичной моделью (5.10).

$$\varphi_\eta = \exp \{ (1-w_2) \cdot [1.979(1-w_2) - 3.582] \} \quad (5.10)$$

График функции (5.10), которая обобщает результаты ИПА, показан на рис. 5.9, б (жирная линия). Модель имеет достаточно высокий коэффициент де-

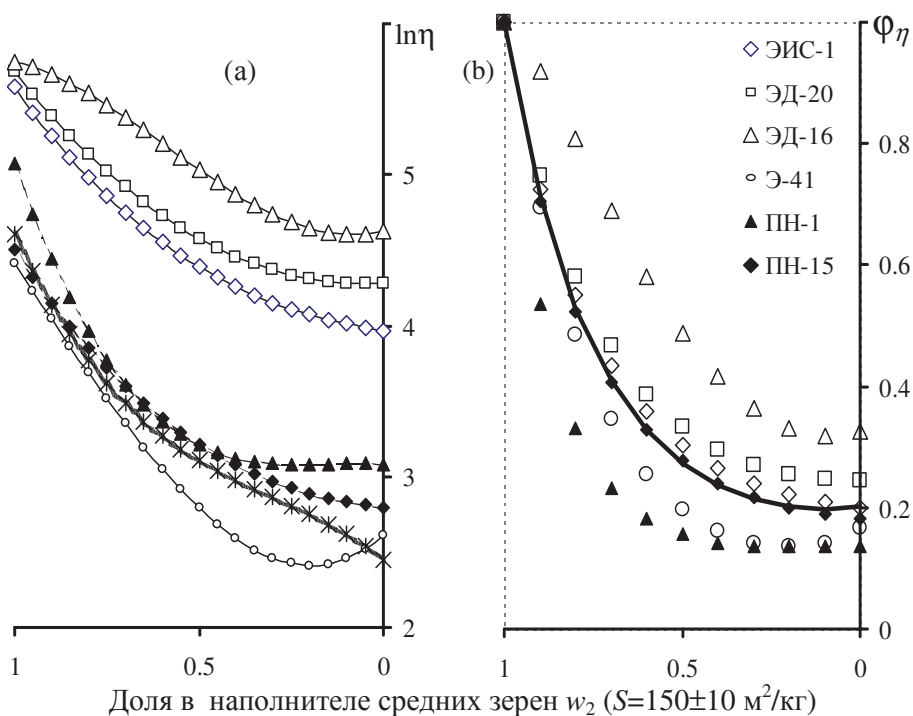


Рис. 5.9. Изменение вязкости композиций с разными средами (а) и степень ее снижения по шести смолам (б) в зависимости от зернового состава кварцевого наполнителя при неизменных удельной поверхности и наполнении

терминации 0.763 – примерно 3/4 наблюдаемого на рис. 5.9, б рассеяния значений Φ_η обуславливается изменением распределения размера зерен, и только 1/4 переходами от смолы к смоле. Такой уровень статистических оценок приемлем для реологических исследований [8]. Он позволяет подтвердить инвариантность факта пластификации технологических смесей на разных полимерных связующих за счет оптимизации зернового состава наполнителей.

Полимодальное распределение толщины полимерного слоя – причина пониженной вязкости композиций. Объяснение некоторых сторон факта пластификации смесей за счет изменения в наполнителе соотношения между массами зерен разного размера при сохранении их интегральной поверхности предложено и развито в ряде работ [8, 109, 216, 223, 226]. Поскольку при неизменном соотношении объемов дисперсионной среды и дисперсной фазы, ни общая поверхность минерального наполнителя, ни его поверхностная активность не меняются, то среднюю расчетную толщину полимерного слоя $\bar{\delta}$ и среднюю долю в ней межфазного слоя следует признать постоянными. Это заключение допускает, однако, изменение распределения толщины слоя.

Основание для объяснения явления пластификации дает полимодальное распределение толщины полимерных пленок (рис. 5.10), связанное с образованием в деформируемой неньютоновской жидкости специфических структурных агрегатов – ассоциатов мелких и крупных частиц наполнителя. Внутри ассоциатов упаковка частиц обеспечивает тонкие межзеренные слои жидкости. Средняя толщина этих эндоассоциативных слоев $\bar{\delta}_{\text{энд}} < \bar{\delta}$, в них

повышена доля межфазного слоя, а поэтому больше сопротивление сдвигающим напряжениям. Из ассоциатов часть жидкости «отжимается» и входит как дополнительная гидродинамическая смазка в экзоассоциативный слой. Его средняя толщина $\bar{\delta}_{\text{экз}} > \bar{\delta}$, правая мода на рис. 5.10 соответствует формированию вокруг ассоциатов утолщенных пленок, которые в силу пониженной доли в них структурированного межфазного слоя деформируются при постоянной скорости сдвига $\dot{\gamma}$ относительно легко, что обеспечивает пониженную эффективную вязкость всей системы.

Техническое использование эффекта пластификации за счет оптимизации распределения размеров зерен наполнителя позволяет снизить полимероемкость композиционных материалов на 10-15 %, без ухудшения технологических и эксплуатационных характеристик [8, 156].

Эффект пластификации полимерных композиций, наполненных смесью зерен разной минералогии. Среди результатов реологических исследований композиций на смоле Виналкид 550-ПЕ [8, 109], со смесями зерен кварца (Q), мрамора (M) и клинкера (C) одинаковой удельной поверхности, для некоторых бинарных смесей также отмечен эффект пластификации, при определенных значениях соотношения между дисперсионной средой и дисперсной фазой, удельной поверхности, скорости сдвига.

При дополнительном анализе полей эффективной вязкости в координатах минералогического состава наполнителя (представленных, в частности, диаграммой «Минералогические треугольники на гранулометрическом треугольнике» [8]) учитывалась структурообразующая способность «монофракционных» ми-

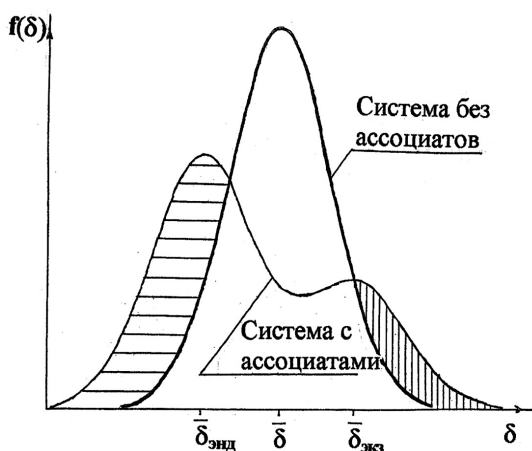


Рис. 5.10. Распределения толщины межзеренных слоев полимера

неральных наполнителей в полиэфирном связующем. Их сравнительная поверхностная активность [8] оценивалась по эффективной вязкости η^{300} (при фиксированных в вычислительном эксперименте условиях: $S = 300$, $H:\Pi = 2.5$; $\gamma = 1$) – показателю, характеризующему межфазные взаимодействия интегрально (за счет адсорбции, химических связей [227, 228]). Структурообразующая способность трех минералов образует ряд $\eta^{300}_C = 350 > \eta^{300}_M = 290 > \eta^{300}_Q = 180$ Па·с (элементы которого значимо различны).

Результаты анализа показали следующее.

Во-первых, существуют пары минеральных фракций, при смешивании зерен которых проявляется синергизм – эффективная вязкость ниже, чем у композиций с мононаполнителями. Это характерно для бинарных систем с клинкером, обладающим наибольшей η^{300} . Пластификация имеет место при добавлении к клинкерным зернам и мраморных, и кварцевых (рис. 5.11), вне зависимости от гранулометрического состава ($S = const = 150 \text{ м}^2/\text{кг}$).

Во-вторых, пластификация не свойственна всем смесям зерен разной минералогии. У композиций с наполнителем из мрамора и кварца существуют такие соотношения между этими минералами, при которых вязкость на 5-7% выше (в пределах ошибки моделирования [8]), даже чем у композиций с зернами мрамора, обладающего большей поверхностной активностью, чем кварц (в 1.5 раза большей η^{300}).

По-видимому, уплотненная упаковка зерен в ассоциатах, с отжатием части жидкой фазы из эндо- в экзо-ассоциативные слои может быть результатом более общей причины либо проявления, либо отсутствия эффектов пластификации при течении композиций, наполненных зернами разной мине-

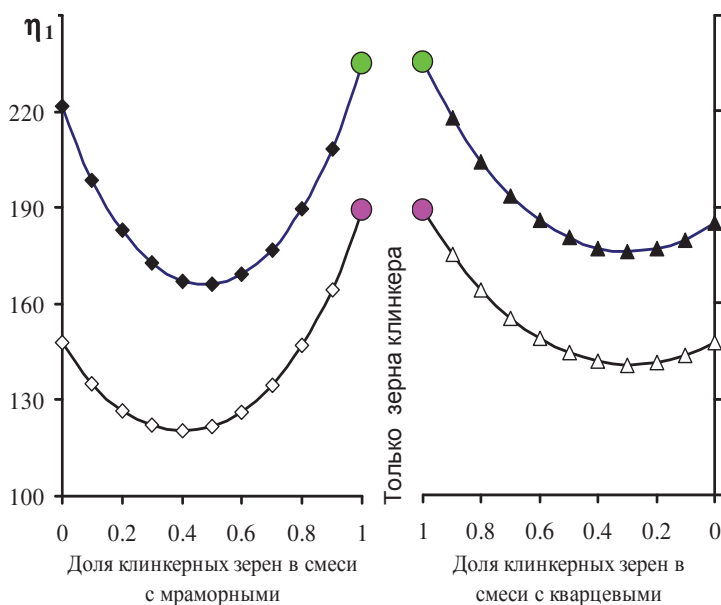


Рис. 5.11. Вязкость композиций с бинарными смесями минеральных наполнителей ($S = 150$, темные маркеры – «средние» зерна, $w_1 = w_3 = 0$, $w_2 = 1$; светлые маркеры – смесь без «средних» зерен, $w_1 = 1/3$, $w_2 = 0$, $w_3 = 2/3$)

ралогии, при одинаковой удельной поверхности. Вероятно, основную роль играет «мозаичная» структура таких композиций (на уровне «наполнитель-матрица»). Если равномерная замена в такой структуре части зерен минерала А зернами минерала В приводит (в силу изменения микрогетерогенности полимера в граничных слоях [228]) к неаддитивному усилению взаимодействий между элементами дисперсной фазы А и В, то образуются ассоциаты, а экзоассоциативные слои утолщаются. Если же при такой замене свойства структуры изменяются пропорционально интегральной поверхностной активности новых зерен В, то синергизм не наблюдается.

5.4. Анализ шести свойств серпентинитового бетона с марочной прочностью $R = 10$ МПа

По ЭС-моделям (приведенным полиномам M_3T_2Q второго порядка, см. гл. 2), полученным при разработке бетонов для защиты от нейтронов в атомных реакторах (кратко представленной в п. 4.5.2), были проанализированы [6] изменения ряда критериев качества бетона в условиях обеспечения за счет рецептурных факторов марочной прочности R на уровне 10 МПа.

В вычислительном эксперименте [6] при разных фиксированных зерновых составах серпентинитового заполнителя (w_1, w_2, w_3 – доли «мелкой», «средней» и «крупной» фракций) поддержание ИП-условия обеспечивали разные дозировки суперпластификатора (Мельмента, x_4) и соответствующее водоцементное отношение (x_5). Учитывались доверительные границы (5.3) для оценок R по ЭС-модели (2.2); d -функции (3.2) учитывались и при оценке уровней анализируемых критериев Y согласно (5.4).

Анализировались следующие из свойств и производных характеристик: текучесть смеси S (*spread*, см), коэффициенты линейного температурного расширения α_{300} и α_C (K^{-1}) – при первичном нагревании до 300° и охлаждении, прочность на сжатие бетона, твердевшего в течение года, до и после нагревания до 300° – R_y и R_{yt} (МПа), коэффициент теплостойкости $K_t = R_{yt}/R_y$, потеря массы после года твердения $\delta\rho_y = 100 \cdot (1 - \rho_y/\rho)\%$.

На рис. 5.12 отображены результаты ИП-испытания для 6 критериев качества серпентинитового бетона с заполнителем "333" ($w_1 = w_2 = w_3 = 1/3$); в коридор $R = 10 \pm 0.35$ попали 319 из 2500 составов матрицы, генерированных на квадрате $\{x_4, x_5\}$. Увеличение количества добавки, по оси абсцисс* связано с одновременным увеличением В/Ц для сохранения $R = 10 \pm 0.35$ МПа.

* Верхняя граница x_4 вдоль изолинии $R = 10$ на квадрате составов матрицы при таком заполнителе несколько ниже +1 (3%).

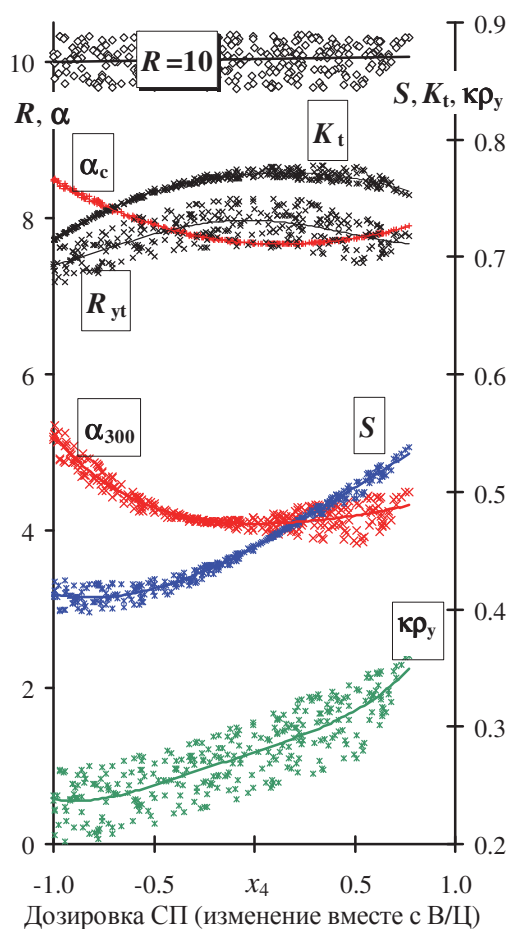


Рис. 5.12. Изменение критериев качества бетона с трехфракционным серпентинитом ($w_1 = w_2 = w_3 = 1/3$) в зависимости от состава матрицы, обеспечивающего $R = 10 \pm 0.35$ МПа

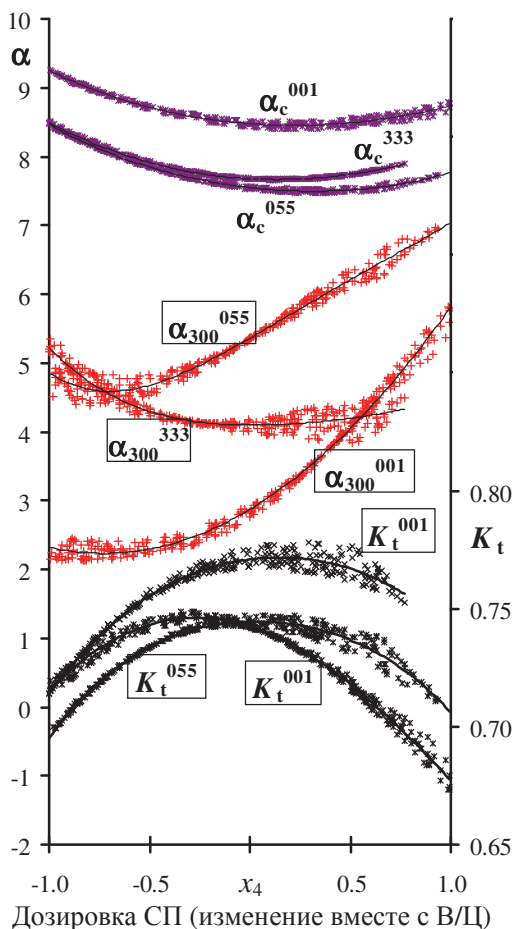


Рис. 5.13. Коэффициенты линейного температурного расширения и теплостойкости бетонов с заполнителем из смесей серпентинита "001", "055", "333" при $R = 10 \pm 0.35$ МПа

Во всем диапазоне изменения x_4 подвижность бетонной смеси, естественно, интенсивно возрастает при увеличении количества СП и удовлетворяет требованию по расплыву конуса $S \geq 40$ см (на рис. 5.12 на правой шкале S в м), даже с учетом случайных помех. Важно, что при этом несколько увеличивается и плотность бетона, твердевшего в течение года, если судить по величине $k\rho_y = 100 \cdot (\rho_y / \rho_{y,\min} - 1)$ (преобразование относительно наименьшего из 319 случайных значений введено для совместного представления 7 графиков).

Следует признать (с учетом границ коридора R_{yt}), что с увеличением содержания добавки предел прочности после нагревания практически не изменяется (коэффициент изопараметрического рассеяния (5.6) довольно высок, $\Psi\{R_{yt}\} = 0.52$)

и не удовлетворяет нормативному требованию $R_{yt} \geq 8$ МПа. Но коэффициент теплостойкости имеет достоверную тенденцию к возрастанию (мера рассеяния $\Psi\{K_t\}$ лишь 0.03) и выше требуемого норматива $K_t \geq 0.7$. Оба α у бетонов на смеси заполнителей "333" ($w_1 = w_2 = w_3 = 0.333$) при увеличении x_4 (и x_5) не возрастают, а α_{300} находится весьма далеко от максимального уровня [6].

Переход в ИП-условиях от смеси «333» к перспективным смесям с большим содержанием крупных зерен, «055» ($w_1 = 0, w_2 = w_3 = 0.5$) и «001» ($w_1 = w_2 = 0, w_3 = 1$), показан на рис. 5.13 для трех показателей – K_t , α_{300} и α_c . Бетоны с заполнителем «001» и особенно «055» достигают достаточно высокого уровня α_{300} (более 5 K^{-1} , который был определен как технически приемлемый). При этом по сравнению с бетонами «333» α_c не уменьшается. Существенно хуже обстоят дела с коэффициентом K_t , который имеет отрицательную корреляцию с α_c и который у бетонов «001» при высоком содержании СП и высоком В/Ц опускается ниже требуемого уровня.

Эта информация, полученная в изопараметрическом вычислительном эксперименте, оказалась полезной при многокритериальном выборе состава серпентинитового бетона для защиты от нейтронов на атомных станциях.

5.5. Анализ свойств модифицированных эпоксидных растворов

Исследование свойств равновязких [220, 221, 229] и равнопрочных [221] композиций было выполнено при разработке полимеррастворов на пластифицированной эпоксидной смоле «Макро», предназначенных для работы в адсорбционно-активных средах. Требовалось за счет модификации растворов улучшить их эксплуатационные свойства без изменения реологических характеристик смесей.

В натурном эксперименте варьировались 2 группы факторов состава (дозировки компонентов на 100 м.ч. смолы): «Модификаторы полимерной матрицы» и «Минеральный каркас» [230]. В 1-ую группу входили дозировки органического модификатора ($5 \pm 5 \rightarrow x_1 = 0 \pm 1$) и тонкодисперсного минерального модификатора ($8 \pm 8 \rightarrow x_2$), во 2-ую – количество кварцевого песка ($175 \pm 125 \rightarrow x_3$) и диабазовой муки (70 ± 20 м.ч. $\rightarrow x_4$); все x_i нормализованы аналогично x_1 .

Построенные по значениям свойств, определенным для 18 композиций (согласно плану эксперимента), ЭС-модели позволили описать рецептурные поля $Y(x_1, x_2, x_3, x_4)$, в частности, эффективной вязкости η (Па·с) при скорости сдвига $\dot{\gamma} = 1 \text{ c}^{-1}$, прочности на растяжение при изгибе R_b (МПа), водо- и нефтепоглощения – W и P . Обобщающие показатели поля $\eta(x)$: $\eta_{\max} = 1485$ (при всех $x_i = +1$), $\eta_{\min} = 49$ Па·с (при при всех $x_i = -1$), относительный перепад в 30 раз.

В вычислительном эксперименте ИП-испытания проведены в области локальных полей $Y(x_1, x_2)$, в частности, при средних уровнях факторов каркаса (175 м. ч. песка, 70 диабаз $\rightarrow x_3 = x_4 = 0$); при этих условиях введение модификаторов увеличивает вязкость вдвое. Выбран изоуровень $\eta_{is} = 280$ Па·с, что близко к вязкости в центре квадрата $\{x_1, x_2 / x_3=x_4=0\}$ (рис. 5.14) и составляет примерно середину нормируемого диапазона (150, 500). Из 504 имитированных модифицирующих составов (500 генерированных равномерно распределенных на квадрате $\{x_1, x_2\}$ и 4-х в его вершинах) 124 попали в доверительный коридор $265.5 \leq \eta \leq 294.5$ Па·с (около 25% составов).

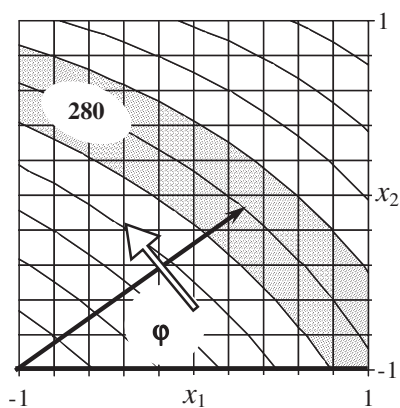


Рис. 5.14. Доверительный коридор вязкости η_{is} в области факторов модификации при средних уровнях факторов каркаса и направлении развертки ИП-коридора

Как видно на рис. 5.15, изменение свойств вдоль линии $\eta = 280$ (угол развертки ϕ в гонах) связано с обеспечивающими этот уровень уменьшением содержания органического и увеличением количества минерального модификаторов (соответственно от 10 до 0 м. ч., x_1 от +1 до -1, и от 0 до примерно 11 м. ч., до $x_2 = +0.65$).

Прочность R_b , начиная с $\phi > 20-25$

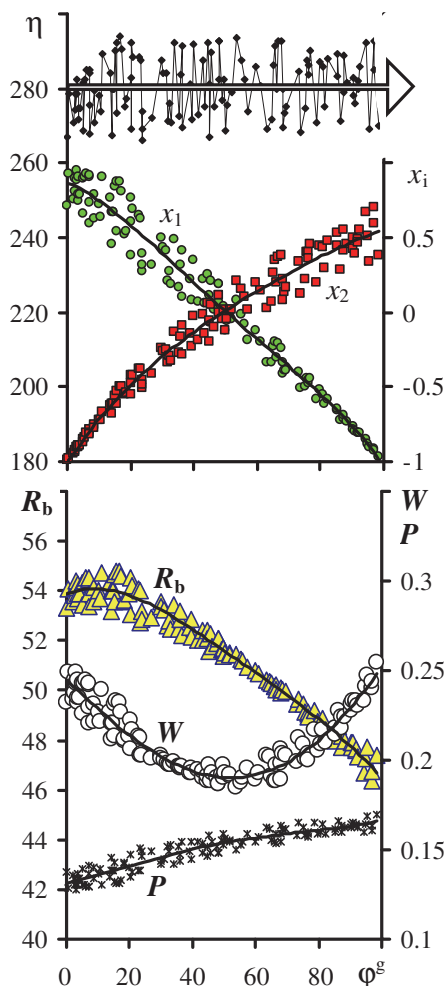


Рис. 5.15. Дозировки модификаторов (x_1, x_2) , обеспечивающие $\eta=280 \pm 14.5$, и соответствующие уровни прочности при изгибе, водо- и нефтепоглощения при «среднем» количестве песка и диабаз (фокальная развертка из $x_3 = x_4 = -1$)

($x_1 = +0.5$, $x_2 \approx -0.5$), интенсивно снижается. Причем, судя по индексу концентрации (5.7), разброс значений вокруг несущей линии (полинома 4-й степени от φ [220]), во много раз меньше, чем рост R_b за счет модификации матрицы. В этих условиях нефтепоглощение P равномерно растет примерно на 0.03%, а водопоглощение W имеет минимум при $\varphi \approx 50$, падая в этой зоне на 1/3. Таким образом, инженерный компромисс находится в области $\varphi < 50^{\text{е}}$.

Аналогичные статистические испытания при других параметрах минерального каркаса позволили проанализировать влияние изменений в каркасе на свойства композита из смесей той же равной вязкости [220, 229]. Была показана целесообразность введения органического и минерального модификаторов эпоксидной матрицы для повышения прочности при изгибе, уменьшения поглощения воды и нефти, определена область компромиссных соотношений между модификаторами.

Компьютерный изопараметрический анализ, используя тандем структурированных ЭС-моделей и метода Монте-Карло в вычислительных экспериментах на рецептурно-технологических полях, позволяет выявлять достаточно завуалированные особенности и закономерности поведения дисперсных систем по многим критериям, характеризующим и структурообразование композитов, и возможности их эксплуатации.

Глава 6. ЛОКАЛЬНЫЕ ПОЛЯ С КРИТЕРИАЛЬНЫМИ ГРАНИЦАМИ ДЛЯ АНАЛИЗА МНОГОМЕРНЫХ СВЯЗЕЙ СВОЙСТВ И ФАКТОРОВ

В условиях многокомпонентности составов, мультипараметричности процессов структурообразования и деструкции, многокритериальности при проектировании композитов гарантированного качества в ряде задач приходится анализировать изменения свойств в широком диапазоне, обусловленном потенциалом модификаторов матрицы, изменением количества и состава наполнителя, разными параметрами дисперсного армирования и т. д. При большом числе факторов и анализируемых критериев эффективность ВЭ для анализа корреляции свойств композитов (глава 4), который мог бы помочь обнаружить действия разных механизмов структурообразования и деструкции, резко снижается.

Для таких условий был предложен [6] методический инструмент компьютерного материаловедения, позволяющий визуализировать и анализировать отношения в большом массиве свойств, которые изменяются в широких диапазонах, при изменении многих РТ-факторов. В исследованиях **многомерных ситуаций** предложено использовать **одномерный анализ** вдоль оси некоторого «критериального фактора» – приоритетного, базового критерия поведения материала (Cr), в общем случае зависящего от x нелинейно [170, 233]. Анализ на пропорциональной критериальной шкале должен показать: а) какие изменения k РТ-факторов обеспечивают линейное изменение (увеличение, снижение) уровня критерия Cr ; б) как при этом ведут себя остальные критерии Y .

Такой метод анализа может быть осуществлен при реализации вычислительного эксперимента. Впервые подобные эксперименты были выполнены, чтобы проанализировать изменения свойств наполненных полиэфирных связующих (ответить на вопрос «б») при линейном изменении динамического модуля упругости [8, 109].

Достаточно универсальная методика вычислительного эксперимента для анализа связей РТ-факторов и свойств с использованием пропорциональных критериальных шкал, основанная на случайном сканировании РТ-полей (§ 1.5) и ранжировании результатов по тому или иному критерию Cr , была предложена в [6] при рассмотрении комплекса свойств эпоксидных композитов для демпфирующих слоев конструкций [11, 234, 235], управляемых пятью факторами состава. В приложении к той же системе пяти факторов, но при другом критериальном аргументе, применена усовершенствованная методика [233],

использованная также при анализе другой 5-факторной системы, определяющей свойства мелкозернистого бетона [236], и в 9-факторном исследовании автоклавного газобетона [137, 170].

Суть метода и обеспечивающего его вычислительного эксперимента демонстрируются в этой главе на данных об износостойкости карбамидного связующего (§ 1.2) и результатах исследований других рецептурных систем, при большем, чем в тест-задаче, числе факторов.

6.1. Методологические основы вычислительного эксперимента

Как сформулировано в главе 1 (§1.3), полное поле $Y(\mathbf{x})$ критерия Y , с областью Ω_x в пространстве всех k компонентов вектора факторов \mathbf{x} , может быть представлено любым многообразием локальных полей – «частей» полного поля, выделяемых по одному из двух принципов (в соответствии с условиями задачи). Помимо локальных полей в координатах менее k градиентных факторов, в сечениях Ω_{gr} области Ω_x , могут быть рассмотрены локальные поля с критериальными границами, $Y(\mathbf{x}/Cr(\mathbf{x}))$, области которых Ω_{Cr} являются подобластями той же размерности, что и Ω_x (или Ω_{gr}), из которых они могут быть выделены.

Критерий «поведения материала», по уровню которого (при значительном перепаде) поля для анализа следует разделить на локальные, должен быть инженерно полезным, иметь достаточно ясный физический смысл; это может быть некоторый симплекс или другая безразмерная величина.

Описываемый метод анализа базируется на выделении из полных полей, в k -мерной области Ω_x (или из локальных в Ω_{gr}), полей $Y(\mathbf{x}/Cr(\mathbf{x}))$ с областями Ω_{Cr} , «вырезаемыми» изоповерхностями $Cr(\mathbf{x}) = const$ – нелинейными критериальными границами. С изменением границ Ω_{Cr} , заданных уровнями критерия Cr , такое локальное поле будет изменяться, оказываясь в другой зоне Ω_x (или Ω_{gr}); еще одно обозначение для поля с критериальными границами – $Y\{Cr\}(\mathbf{x})$. Анализ изменений $Y\{Cr\}(\mathbf{x})$ при линейном изменении Cr осуществляется по оценкам тех или иных обобщающих показателей этих полей ($G_Y\{Cr\}$).

В вычислительном эксперименте генерируются N точек \mathbf{x} (РТ-вариантов), равномерно распределенных в области РТ-полей, в частности, внутри k -мерного куба (с добавлением 2^k вершин, что поясняется в § 1.5). Для каждой точки по ЭС-моделям рассчитываются значения критериев Y , включая Cr , к которым добавляется (3.13) нормально распределенная ошибка. Массив РТ-вариантов (матрица результатов вычислительного эксперимента – МРВЭ [233]) сортируется по уровню Cr и делится на Q слоев, представляющих для каждого Y дискретные числовые описания локальных полей, области которых

Ω_q ($q = 1 \dots Q$) сохраняют размерность k и имеют границы, обусловленные значениями критериального аргумента.

Возможны 2 принципа разделения массива имитированных данных на Q слоев – локальных полей: а) по равным интервалам ΔCr значений критериального аргумента; б) по равному количеству имитированных РТ-вариантов, $n \cong (N + 2^k) / Q$ (в пределах округления). Для способа «а» закономерно разное представительство данных в разных интервалах (существенно разный объем выборок): «мало» значений в крайних и «много» в средних интервалах, как это иллюстрирует на рис. 6.1, а распределение оценок износостойкости A (ч/г) по модели (1.3) для 10008 РТ-вариантов ($N = 10^4$ плюс $2^3 = 8$).

Более корректен способ «б» – так «разрезать» массив данных, чтобы каждое локальное поле было представлено одинаковым числом вариантов. Но в этом случае разными оказываются размеры областей Ω_q – диапазоны (Cr_{q-1}, Cr_q), «расстояния» ΔCr_q между нижней (Cr_{q-1}) и верхней (Cr_q) границами q -го поля. Столбцы на рис. 6.1, б соответствуют диапазонам ΔA для 10 локальных полей $A\{A_{q-1} \leq A \leq A_q\}(x_1, x_2, x_3)$, каждое из которых представлено значениями износостойкости $n = 10008 / 10 \approx 1000$ композиций. Там же показаны изменения трех других обобщающих показателя этих полей: оценок средних, максимальных и минимальных уровней (по 1000 выборочных значений A , оказавшихся в соответствующем поле).

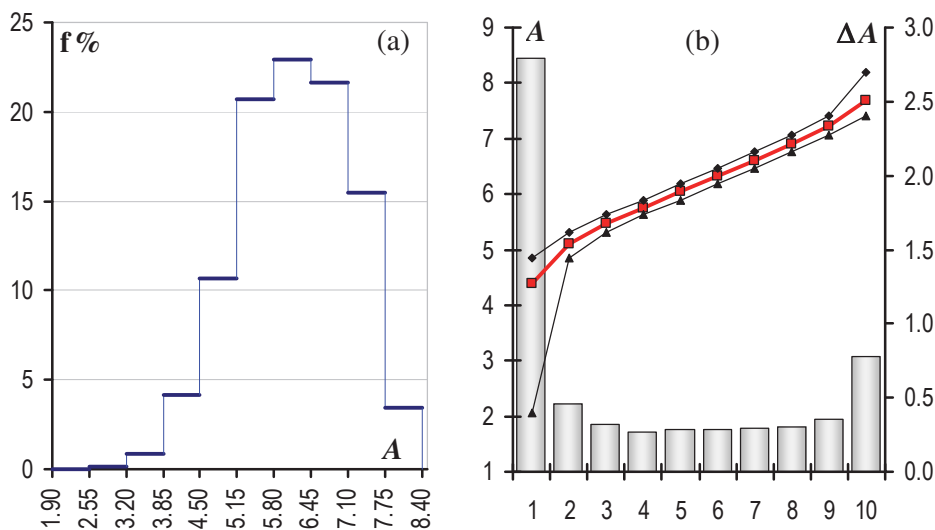


Рис. 6.1. Распределение износостойкости композиций по 10 локальным полям с равными интервалами ΔA между границами полей (а); графики максимальных, средних и минимальных A , а также гистограмма ΔA для 10 полей с равным числом представляющих их композиций (б)

При анализе на критериальной шкале, кроме средних \bar{Y}_q (включая \bar{Cr}_q – своего рода маркер критериального поля), могут потребоваться оценки дисперсии $s^2\{Y_q\}$ (стандартного отклонения) и других числовых характеристик (по случайному набору генерированных РТ-вариантов, попавших в Ω_q).

Именно изменения таких обобщающих показателей $G\{Cr\}$ при линейном изменении критериального аргумента могут показать, как для этого нужно менять значения факторов, что при этом произойдет с другими критериями.

Для демонстрации применения этого метода анализа и его результатов ниже используются данные и модели, полученные при исследованиях более сложных рецептурно-технологических систем (чем тест-задача, по признакам многомерности, обозначенным в начале главы).

6.2. Увеличение декремента затухания композита для демпфирования ударно-вибрационных колебаний – изменения состава и свойств

При разработке представленного в п. 4.5.3 виброгасящего полимерного композита были получены нелинейные ЭС-описания рецептурных полей более 30 именованных и относительных критериев качества материала. Среди них: • призмная прочность R (МПа); • статический и динамический модули упругости, E_{03} (при напряжениях $0.3R$) и E (ГПа); • логарифмический декремент затухания колебаний δ и коэффициент затухания α (s^{-1}) [237]; • предельная деформация при сжатии ε (мм/м), упругая (ε_e) и общая (полная, ε_f) деформации при сжимающей нагрузке $0.3R$.

Оценки по моделям максимальных и минимальных уровней полных полей этих критериев показали, что под влиянием пяти факторов состава свойства композита изменяются более чем в 5 (декремент δ и модуль E) и до 120 раз (модуль деформаций E_{03}). В § 4.5 обозначены причины таких перепадов. Там же показано выявленное различие отношений между E и δ в разных зонах факторной области, измеренное показателем линейной статистической связи, коэффициентом корреляции $r\{E, \delta\}$.

Более полную картину отношений факторов и свойств в «обширной» многомерной рецептурной области позволяет представить анализ их изменений, обусловленных изменением критериальных факторов. В данном параграфе таким рассматривается декремент затухания δ .

Уровень δ рассчитан по пятифакторной ЭС-модели (6.1) для 10032 составов (10^4 генерированных + 2^5 вершин 5-мерного куба). Пятимерное равномерное распределение x (каждый x_i в интервале от -1 до $+1$) дает распределение

$$\delta = 0.365 \begin{matrix} \pm 0 & x_1 \pm 0 & x_1^2 + 0.018x_1x_2 - 0.028x_1x_3 & \pm 0 & x_1x_4 \\ -0.055x_2 - 0.085x_2^2 & & -0.053x_2x_3 & + 0.009x_1x_5 & \\ + 0.018x_3 \pm 0 & x_3^2 & & + 0.015x_2x_4 & \\ & & & + 0.058x_2x_5 & \\ -0.016x_4 + 0.020x_4^2 - 0.016x_2x_3 & & & - 0.008x_3x_4 & \\ \pm 0 & x_5 \pm 0 & x_5^2 & - 0.067x_3x_5 & \end{matrix} \quad (6.1)$$

декремента затухания, представленное на рис. 6.2; оно имеет значимые асимметрию (-0.61) и эксцесс (+0.48).

Из 5-мерной кубической области полных полей $Y(x)$ выделено 10 областей локальных полей, границы которых обусловлены соответствующими уровнями δ . Для этого МРВЭ, с ранжированными по возрастанию δ строками, разрезана на $Q = 10$ слоев. В каждом $n = 1003-1005$ вариантов составов. Оценки для них уровней Y , по аналогичным (6.1) моделям, представляют 10 локальных полей $Y_q(x)$.

Прямая $\delta(\delta)$ на рис. 6.2 проходит через средние уровни $\bar{\delta}$ десяти локальных полей $\delta_q(x)$; вблизи нее лежат и два одиночных «маргинальных» варианта – $\delta_{\min} = 0.15$ и $\delta_{\max} = 0.54$. Внутри коридора ($\bar{\delta} - s_\delta, \bar{\delta} + s_\delta$) находятся около 2/3 попадающих в q -е поле значений декремента затухания. Поскольку назначены равные «концентрации» вариантов (n) для всех Q локальных областей, их «ширина» $\Delta_q\delta = \delta_{\max,q} - \delta_{\min,q}$ не может быть одинаковой (в крайних полях 1 и 10 коридоры Y расширяются).

Если же выделить локальные поля по равному перепаду критериального фактора (в частности, $\Delta\delta = (\delta_{\max} - \delta_{\min})/Q$), то весьма неравномерным может оказаться разделение информации между ними. Так, в силу распределения δ (рис. 6.2), на двух полях, близких к медиане $Me\{\delta\} = 0.353$ сконцентрируются почти 2/3 вариантов.

Уровни рецептурных факторов, обеспечивающие линейное увеличение логарифмического декремента затухания представлены на рис. 6.3 [233] средними значениями \bar{x}_i в 10 областях $\Omega_{\delta,q}$ и границами коридоров $\bar{x}_i \pm s_{xi}$, аналогично рассчитанным для δ .

Вклад модификаторов эпоксидной смолы:

- добавка ПЭ-воска, в среднем не оказывает заметного влияния на средний уровень δ ; «широкий» коридор рассеяния x_1 , в среднем 0.579, идентичен стандарту

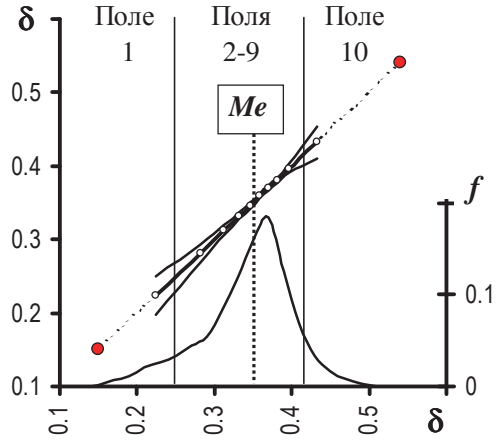


Рис. 6.2. Распределение значений δ в поле $\delta(x)$, средние $\bar{\delta}$ и интервалы $\bar{\delta} \pm s_\delta$ в 10 локальных полях $\delta\{\delta\}(x)$

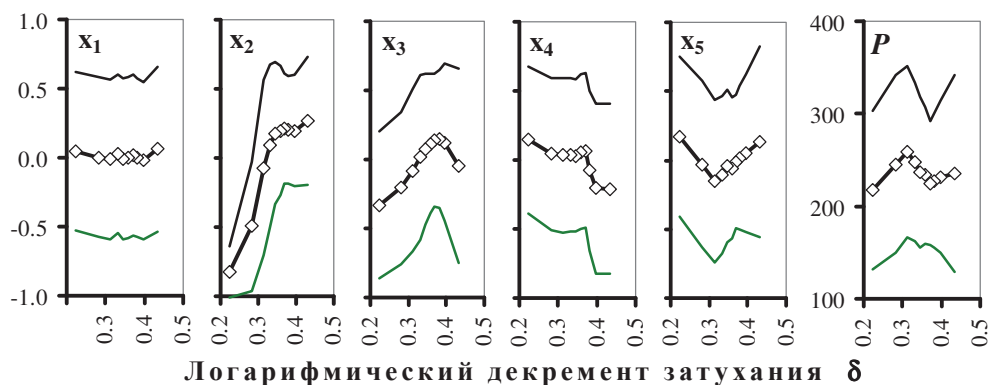


Рис. 6.3. Значения рецептурных факторов, обеспечивающих линейное увеличение δ от 1-й до 10-й зоны рецептурной области

равномерного распределения ($2/12^{0.5}=0.577$ [238]), что также свидетельствует об отсутствии влияния ПЭ-воска на демпфирующие свойства композита;

- содержание бутадиенстирольного латекса в основном и обеспечивает линейное увеличение δ ; поэтому рассеяние по оси x_2 существенно меньше, чем у равномерного распределения; но после $\bar{\delta} \approx 0.38$ интенсивность влияния x_2 снижается;
- с повышением дозировки фурфурола (x_3) $\bar{\delta}$ также растет, но с приближением к максимуму демпфирующей способности влияние становится отрицательным.

Эффекты минерального каркаса:

- влияние количества тонкодисперсного кварца и песка (x_4, x_5) в сравнении с латексом и фурфуролом существенно меньше; для линейного роста δ содержание тонкомолотого кварца в среднем должно снижаться, в то время как количество крупных зерен в зоне повышенных демпфирующих свойств должно возрастать.

Шестой график на рис. 6.3 отражает интегральную связь δ с соотношением минеральной дисперсной фазы и смолы. По-видимому, увеличение расхода смолы (P , кг на 1 т композиции), снижение доли кварцевого каркаса, заметно изменяет декремент затухания только на начальном отрезке его линейного роста, после чего более существенно влияние модификации, в первую очередь латекса.

В качестве меры для сравнительной оценки вклада рецептурных факторов в достижение лучшего уровня того или иного критерия Cr , в частности δ , предложено [233] отношение (6.2) абсолютного прироста среднего уровня x_i по всему диапазону Cr к среднеквадратическому отклонению этого прироста (аналог t -критерия при проверке гипотезы о равенстве средних [9]). Для каждого фактора учитываются два средних (в рассматриваемом случае из $Q=10$) – максимальное среднее значение $\bar{x}_{i,\max}$, определенное с дисперсией $s^2\{\bar{x}_{i,\max}\} = s^2\{x_{i,\max}\}/n$, и минимальное среднее $\bar{x}_{i,\min}$, с дисперсией $s^2\{\bar{x}_{i,\min}\} = s^2\{x_{i,\min}\}/n$.

$$t\{x_i\} = (\bar{x}_{i,max} - \bar{x}_{i,min}) / (s^2\{\bar{x}_{i,max}\} + s^2\{\bar{x}_{i,min}\})^{0.5} \quad (6.2)$$

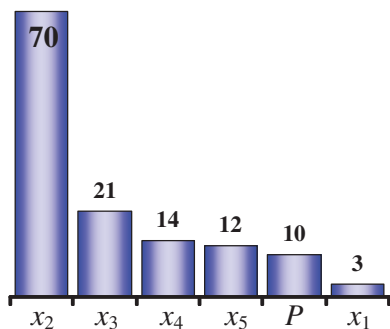


Рис. 6.4. Мера t влияния факторов на линейное изменение δ

На столбчатой диаграмме (рис. 6.4), количество смолы P и пять нормализованных факторов (их линейное «возвращение» к натуральным переменным не меняет результат) ранжированы по убыванию t . При малых t (разница средних менее трех стандартных ошибок) влияние фактора учитывать нецелесообразно.

Изменения ряда свойств эпоксидного композита, обусловленные изменением состава для равномерного увеличения δ , отражают графики на рис. 6.5 [237]. Показанные на них \bar{Y} и $\bar{Y} \pm s_Y$ в 10 областях $\Omega_{\delta,q}$ получены, благодаря ЭС-моделям, по оценкам уровней 10 локальных полей $Y\{\delta\}(x)$ каждого из этих критериев для ≈ 1000 составов, оказавшихся в соответствующей Ω_{δ} . Поскольку в таких условиях определяющие эти поля факторы могут изменяться только на ограниченных участках своих диапазонов (рис. 6.3), любое из свойств, кроме δ , не может изменяться во всем диапазоне уровней полного поля $Y(x)$. Аналогичный (6.2) показатель $t\{Y\}$ – мера вынужденного изменения Y при необходимости изменять δ .

Как видно на рис. 6.5, при равномерном увеличении δ призмочная прочность (МПа) интенсивно и практически линейно снижается, что связано, прежде всего, с повышением содержания латекса. Динамический модуль упругости (ГПа) снижается почти вдвое менее интенсивно; отмечается участок практически постоянного уровня E при $\delta \approx 0.3...0.4$. Предельная деформативность при

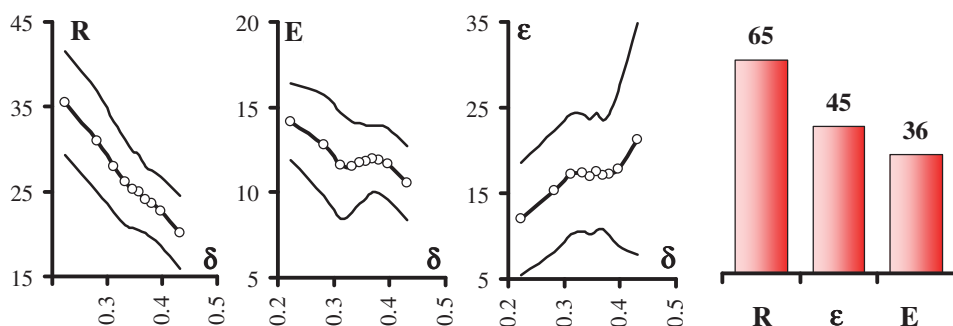


Рис. 6.5. Средние уровни, коридоры значений и степень вынужденных изменений прочности R , динамического модуля упругости E и предельной деформативности ϵ при линейном изменении декремента затухания δ

сжатии (мм/м) возрастает со средней интенсивностью, причем на кривой роста существует (в той же зоне δ , что и у E) участок стабилизации. Для обсуждения этих явлений нужна дополнительная информация.

6.3. Условия и результаты вычислительного эксперимента на локальных полях свойств композитов разной вязкоупругости

Как было показано выше, различия в поведении композиционного материала при существенно разной степени модификации и наполнения матрицы могут быть проанализированы с помощью разделения полных рецептурных полей свойств на локальные по уровню «критерия поведения». Изменение соотношения между упругими и неупругими свойствами материала, к которому приводят изменения параметров минерального каркаса и метаморфозы матрицы рассмотренного в п. 4.5.3 и § 6.2 модифицированного эпоксидного композита, можно охарактеризовать [6, 11, 234, 235] отношением модуля деформации к динамическому модулю упругости, $\beta = E_{03}/E$. В исследованной области составов β изменяется более чем в 20 раз (от 0.035 до 0.840). Этот критерий вязкоупругого поведения материала был использован в вычислительном эксперименте, позволившем проанализировать, как с изменением этого поведения изменяются свойства материала, а также взаимосвязи между свойствами.

В пятифакторной кубической области Ω_x рецептурных полей (всех критериев качества материала, см. § 6.2) генерировано 10000 случайных равномерно распределенных составов; к ним добавлены 2^5 составов в вершинах куба. Для этих 10032 составов рассчитаны уровни случайных полей $Y(x)$, по аналогичным (6.1) ЭС-моделям, с учетом ошибок моделей (3.13), включающих ошибки натурального эксперимента. Уровни $\beta(x) = E_{03}(x)/E(x)$, а также другого симплекса, $\varepsilon_f/\varepsilon$, определены для всех составов как отношения значений случайных величин – оценок по соответствующим моделям.

Генерированные составы ранжированы по уровню β и разделены на Q областей Ω_β с криволинейными пространственными границами – изоповерхностями β (дробно-рациональными функциями 5 аргументов). Каждую q -ю из Q областей $\Omega_{\beta,q}$ локальных полей $Y_q(x)$ определило равное количество составов n , поэтому разности $\Delta_q\beta = \beta_{\max,q} - \beta_{\min,q}$ неодинаковы; максимальное значение β в q -ой области и минимальное в соседней $(q+1)$ -ой отличались не менее чем на 10^4 .

Как уже отмечалось в данной главе, для сравнения выделенных таким образом локальных полей можно использовать интегральные обобщающие показатели (введены в § 1.4, построенные на суммах характеристик попавших в это

поле случайных составов). Кроме средних $\bar{x}_{i,q}$ и \bar{Y}_q , целесообразно определить $s_q\{x_i\}$ (аналог стандартного отклонения), характеризующее «размер» области q -ого поля по направлению x_i , и $v_q\{Y\} = s_q\{Y\} / \bar{Y}_q$ (%), аналог коэффициента вариации), оценивающий усредненный относительный перепад уровня поля. В некоторых случаях полезную информацию могут дать показатель асимметрии расположения точек в локальном поле и показатель концентрации точек вокруг среднего, аналог эксцесса [235]. Показателем связи для пары свойств служит оценка коэффициента корреляции $r_q\{Y_i Y_j\}$ по парным выборкам объема n .

Были выполнены 2 варианта ВЭ, показавшие одинаковые по существу результаты при разных условиях выделения по критерию β локальных областей Ω_β : 1) при $Q = 10$, $n = 1000$ [234]; 2) при $Q = 20$, $n = 500$ [235].

Связь отношения статического и динамического модулей упругости с составом композита. Несомненно, что высокий уровень β (0.804 в поле #20, рис. 6.6) свидетельствует о значительной роли упругих свойств, а снижение отношения модулей до сотых (0.063 в поле #1) – о преобладании неупругой составляющей. Однако изменение самого β в каждом из 20 локальных полей $\beta_q(x)$ и от поля к полю, также как изменение локальных полей других Y вдоль оси β , определяется составом композита.

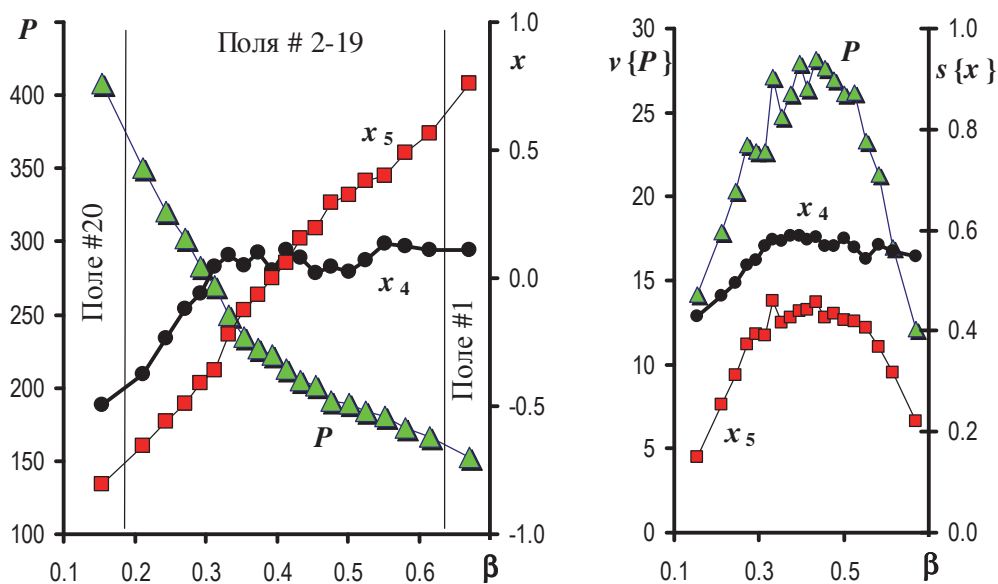


Рис. 6.6. Средние значения и оценки диапазонов количества смолы и факторов минерального каркаса для разных соотношений упругих и неупругих свойств композита

Снижение β обусловлено (рис. 6.6) прежде всего увеличением содержания смолы (по степенной зависимости $P = 117 \cdot \beta^{-0.695}$, для средних \bar{P}_q , с коэффициентом детерминации 0.992), при уменьшении содержания кварцевых зерен (x_4, x_5) и доли смолы в пленочном состоянии. Средний по области $\Omega_{\beta,q}$ диапазон $s_q\{x_5\}$ и коэффициент вариации $v_q\{P\}$ проходят через максимум в зоне $\beta \approx 0.4$, где области локальных полей имеют наибольшие размеры в направлениях P и x_5 . Иной характер влияния тонкомолотого кварца: при снижении β до ≈ 0.3 его среднее количество практически неизменно около нулевого уровня ($x_4 = 0.07 \pm 0.07$, 150-160 м.ч.) при неизменном практически равномерном рассеянии ($s\{x_4\} = 0.57 \pm 0.02 \cong 0.58$). Таким образом, на начальных участках линейного снижения упругих свойств количество кварцевого наполнителя не могло играть значительную роль. Но дальнейшее линейное снижение β (< 0.3) обеспечено одновременным уменьшением в каркасе зерен обеих фракций, что сопровождается более интенсивным приростом расхода смолы; в этой зоне β размеры локальных областей по направлениям x_4, x_5, P сокращаются (рис. 6.6).

Линейному снижению β способствует и модификация эпоксидной матрицы (рис. 6.7). Неоднозначна роль латекса и фурфурола (x_2, x_3) в формировании соотношения между неупругими и упругими свойствами. В верхней части шкалы β (выше 0.3) превалирующую роль в его снижении играет существенное повышение содержания фурфурола, при этом на начальных этапах снижения β размер областей локальных полей $\beta(x)$ в направлении x_3 быстро возрастает, оставаясь в дальнейшем на уровне близком к генерированному равномерному

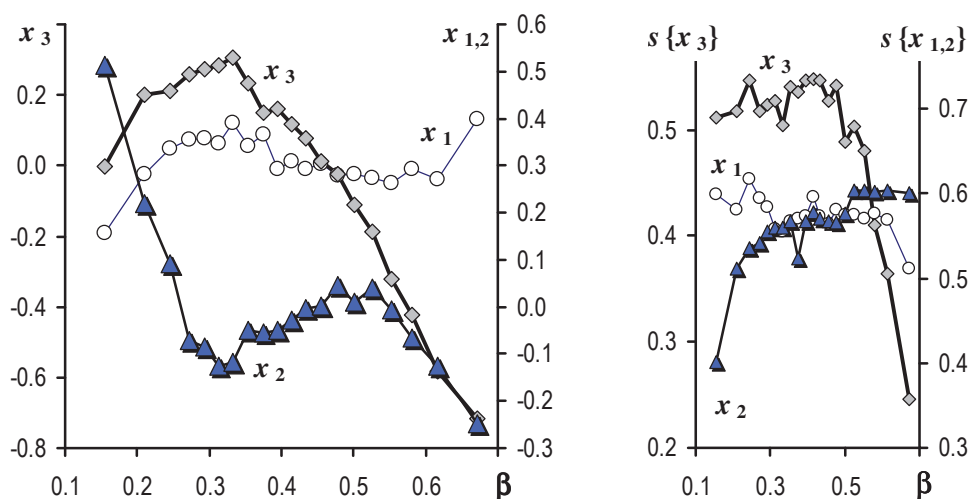


Рис. 6.7. Средние значения и оценки диапазонов дозировок модификаторов матрицы для разных соотношений упругих и неупругих свойств композита

распределению. Латекс способствует увеличению неупругой составляющей при высоких β (пока модифицированная смола находится в тонкопленочном состоянии и структурируется поверхностью кварца). Аналогично влияние латекса на последнем участке снижения упругих качеств ($\beta < 0.3$), когда под нагрузкой начинается течение модифицированной смолы в межзеренном пространстве. Роль ПЭ-воска (x_1) менее существенна, чем фурфурола и латекса.

Линейное снижение $\beta = E_{03}/E$ и изменения физико-механических свойств.

Изменения ряда свойств, сопровождающие линейное изменение критерия вязкоупругости, показаны на рис. 6.8. При переходе от конструкционных мелкозернистых полимербетонов до вязкоупругих материалов пропорционально критерию β снижается средний уровень прочности (на 32 %), E (на 48 %) и E_{03} (почти на 88 %). Уменьшение обоих модулей практически линейное. Их локальные поля имеют почти одинаковые коэффициенты вариации ν , возрастающие с

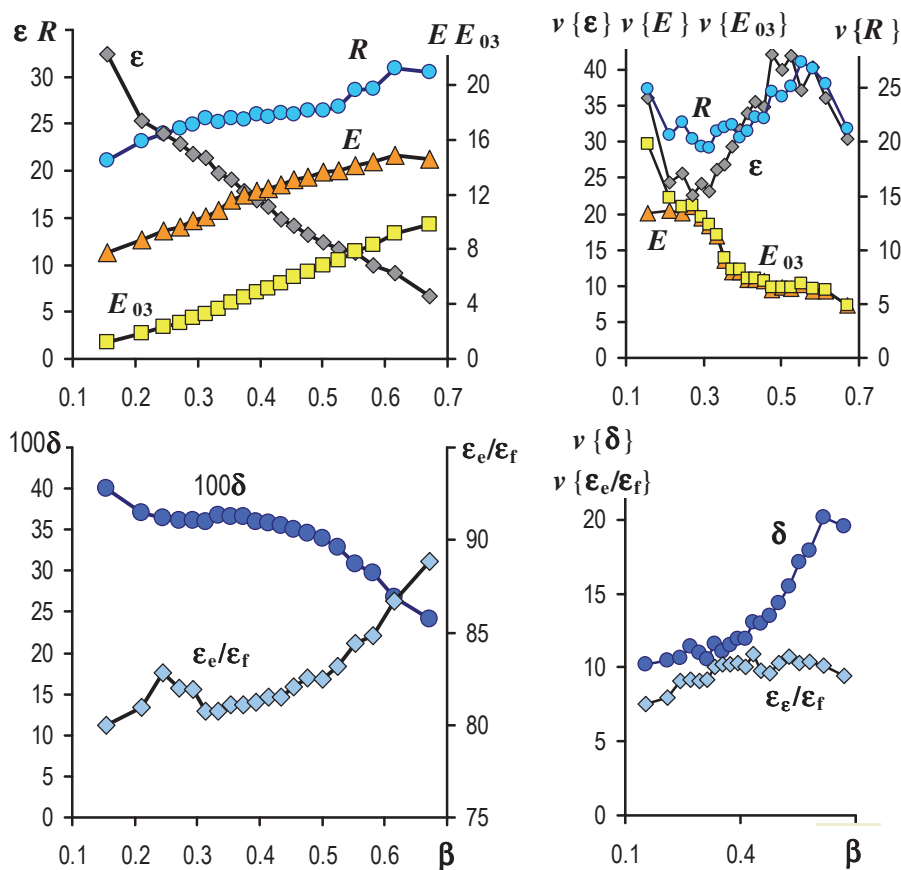


Рис. 6.8. Средние уровни и относительные средние перепады локальных полей свойств эпоксидного композита, выделенных по уровню β

7 до 22 % по мере снижения упругих свойств композита. Аналогично изменяется и прочность, но перепад полей $R\{\beta\}(x)$ с уменьшением β меняется менее регулярно, колеблясь около 22.5 %.

При линейном снижении β (в 4.3 раза) предельные деформации ε возрастают криволинейно (рис. 6.8), подобно содержанию эпоксидной смолы (рис. 6.6). Рост описывается экспоненциальной зависимостью $\varepsilon = 49.5 \cdot e^{-2.78\beta}$ (коэффициент детерминации 0.987). Разброс значений в локальных полях $\varepsilon\{\beta\}$ изменяется подобно $\nu\{R\}$ (при таких напряжениях и фиксировались ε), но диапазон $\nu\{\varepsilon\}$ вдвое больше.

Характер изменения ε подтверждает возможность использования отношения модулей E_{03}/E в качестве меры неупругого, вязко-пластичного поведения полимерных композитов. В пользу такого заключения говорит и изменение симплекса $\varepsilon_e/\varepsilon_f$. Даже при относительно невысоких напряжениях $0.3R$ доля в общих деформациях упругих составляет около 90% в поле #20 и 80% в поле #1, при практически постоянной вариации в пределах локальных полей.

Изменение вместе с β логарифмического декремента затухания колебаний δ (а именно для демпфирующих слоев в строительных сооружениях предназначен рассматриваемый материал) можно разделить на два участка (рис. 6.8). При снижении β до ≈ 0.33 результаты ВЭ показывают рост δ почти в 1.5 раза по кривой с отрицательным ускорением (размер полей, судя по $\nu\{\delta\}$, сокращается вдвое). На втором участке происходит небольшой (10...11%), но ускоряющийся рост. Начиная с $\beta \approx 0.4$, вместе с ним уменьшается и коэффициент затухания α [234].

Очевидно, именно около этого уровня β существенно меняется поведение композитов – превалирующая роль переходит от упругих свойств к неупругим. Допустима гипотеза [6, 11, 234] о том, что диапазон $\beta \approx 0.3...0.35$ соответствует существенным структурным преобразованиям в модифицированном эпоксидном композите. При одновременном уменьшении массы песка и наполнителя в каркасе следует интенсивное увеличение содержания смолы, утолщение межзеренных слоев, снижение структурирующей роли поверхности кварца. При этом в «толстых» слоях смола модифицирована повышенными дозировками и фурфурола, и латекса. Структурные превращения ведут к «ускоренному» приросту предельных деформаций, декремента затухания колебаний, при «ускоренном» снижении призмной прочности.

В вычислительном эксперименте проанализировано и влияние соотношения β на степень взаимосвязи критериев качества композита [6, 11, 234], которая оценивалась парным коэффициентом корреляции. Этот обобщающий показатель случайных полей двух свойств был рассчитан для каждой из 10 зон β

по $n = 1000$ парам генерированных уровней свойств.

При значениях $\beta > 0.60$ наблюдаются ожидаемые из теоретических предпосылок корреляционные связи: кроме $r\{E\alpha\}$, все оценки коэффициентов корреляции, $|r| = 0.4-0.8$, значимы (с очень малым риском).

По мере снижения уровня упругости остается на высоком уровне (0.6-0.8) только корреляция между двумя показателями демпфирующих свойств. Для остальных пар критериев снижение β существенно отражается на степени их связи. Уровень отрицательной взаимосвязи между призменной прочностью и характеристиками демпфирования при уменьшении β пропорционально снижается, но остается статистически значимым.

Интересны закономерности изменения связи динамического модуля упругости, как с пределом прочности, так и с декрементом затухания. В диапазоне β от 0.5 до 0.4 связь между δ и E исчезает, а при меньших β становится положительной. Это указывает на существенное изменение поведения материала в этой зоне β , на переход в иное вязкоупругое состояние. Корреляция между R и E тоже практически исчезает в диапазоне $0.3 < \beta < 0.4$, но снова обнаруживается, когда роль упругих свойств минимальна ($\beta < 0.25$).

6.4. Девятифакторные РТ-поля с критериальными границами при исследовании автоклавного ячеистого бетона

Возможности анализа многомерных РТ-систем на критериальных шкалах позволяет также проиллюстрировать уникальная (по объему и качеству) информация, полученная в спланированном промышленном эксперименте при исследовании влияния девяти параметров рецептуры и процесса производства на структуру и свойства газобетона [137, 138, 170].

В эксперименте варьировались 9 РТ-факторов (нормализованных к $|x_i| \leq 1$):

- ▶ растекаемость растворной смеси по Суттарду ($D = 27 \pm 4$ см $\rightarrow x_1$);
- ▶ влажность песка при совместном помоле с известью ($w_s = 5 \pm 3\%$ $\rightarrow x_2$);
- ▶ удельная поверхность песка ($S_s = 250 \pm 100$ м²/кг $\rightarrow x_3$);

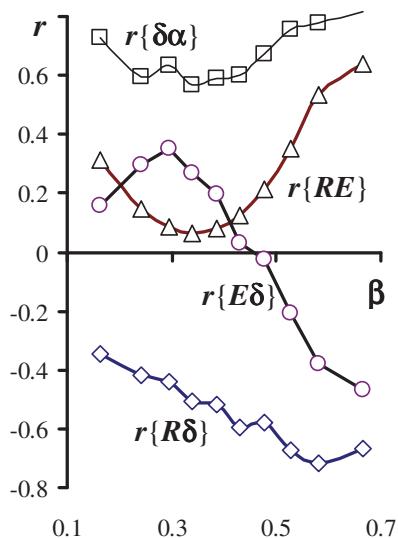


Рис. 6.9. Изменения корреляции свойств с изменением $\beta = E_{03}/E$

- ▶ время изотермической выдержки в автоклаве ($\tau = 8 \pm 4$ ч $\rightarrow x_4$);
- ▶ рабочее давление пара в автоклаве ($p = 1.0 \pm 0.2$ МПа $\rightarrow x_5$);
- ▶ количество алюминиевой пудры ($A = 0.07 \pm 0.03\%$ от массы сухой смеси);
- ▶ активность смеси (доля СаО в смеси извести и песка, $a_{\text{СаО}} = 17 \pm 3\%$ $\rightarrow x_7$);
- ▶ температура воды затворения ($t_w = 35 \pm 10^\circ\text{C}$ $\rightarrow x_8$);
- ▶ количество цемента ($C = 10 \pm 10\%$ от массы смеси $\rightarrow x_9$).

Среди других свойств бетона были определены (для 56 РТ-вариантов): плотность ρ (кг/м³); коэффициент теплопроводности λ (мВт/м/К); прочности при сжатии и изгибе R_c и R_b (МПа); начальный модуль упругости при кратковременном нагружении и упругая составляющая предельной деформативности при изгибе, E (ГПа) и ε (мм/м).

Влияние РТ-факторов на свойства описаны 9-факторными полиномами 2-го порядка (с исключенными незначимыми эффектами из 55 эффектов канонической модели (В. 2) [137, 138]). Модели позволили выполнить ряд ВЭ, в частности для анализа свойств газобетона и факторов его получения при линейном изменении плотности или прочности, или деформативности [137, 170].

В 9-факторной гиперкубической области РТ-полей генерированы 10000 случайных равномерно распределенных вариантов технологии; к ним добавлены $2^9 = 512$ вариантов в вершинах куба. Для 10512 вариантов по ЭС-моделям рассчитаны уровни полных полей свойств*. Матрица результатов ВЭ, упорядоченных по уровню критериального фактора Cr , разделялась на 10 слоев (примерно с 1000 строк) представляющих по 10 локальных полей каждого Y вдоль оси Cr .

На рис. 6.10 показаны изменения свойств материала при линейном увеличении плотности, представленные \bar{Y}_q and $\bar{Y}_q \pm s\{Y_q\}$ ($q = 1 \dots 10$). Естественно, при снижении ρ теплопроводность, прочность и модуль упругости снижаются (R_b менее интенсивно и в наиболее широком интервале). Следует отметить, что при снижении плотности от марки 800 до марки 500 деформативность газобетона может увеличиваться на 30-60% (по границам доверительного коридора).

Изменения \bar{x}_i and $\bar{x}_i \pm s\{x_i\}$, обеспечивающие линейное уменьшение ρ , существенно отличаются от тех, что повышали бы деформативность (рис. 6.11). Чтобы увеличить ε следует, прежде всего, снизить содержание цемента (вплоть до исключения, $x_9 = -1$), при увеличенной дозировке алюминиевой пудры (x_6) и давлении в автоклаве (x_5).

* Из 10512 исключены около 0.5% вариантов, с нереально малыми уровнями Y ; их появление не противоречит методологии моделирования, поскольку реализовано почти в 500 раз меньше натуральных опытов, чем в полном факторном эксперименте 2-го порядка (3^9), и функция дисперсии предсказания $d(x)$ (3.2) в «пустотах» может резко возрастать [9].

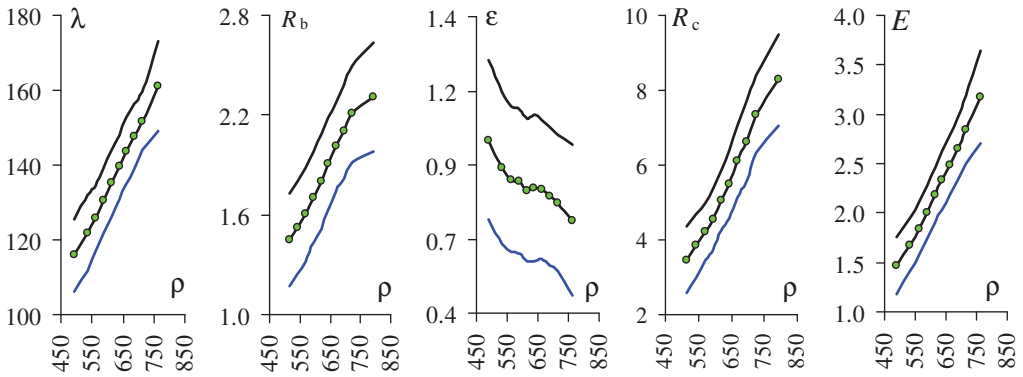


Рис. 6.10. Свойства автоклавного ячеистого бетона в зависимости от плотности в качестве критериального аргумента

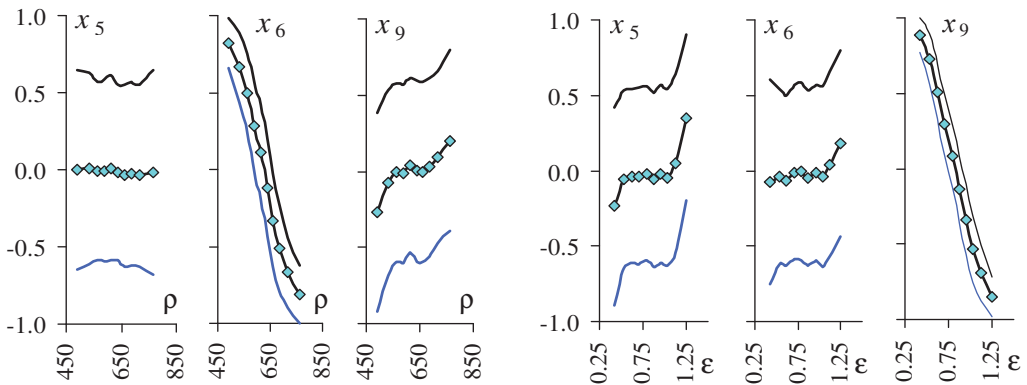


Рис. 6.11. РТ-факторы в зависимости от плотности и деформативности в качестве критериальных аргументов

Мера t (6.2) сравнительной оценки влияния РТ-переменных на линейное изменение плотности образует ранжированный ряд (6.3), без влажности песка и параметров автоклавной обработки, у которых $t < 2$. При другом критериальном аргументе, предельной деформативности, это ряд (6.4). Такая информация может оказаться полезной при решении обратных задач [7], в том числе при поиске лучших рецептур и технологических режимов.

$$t\{A\}=213 \gg t\{S_s\}=t\{D\}=24 > t\{t_w\}=t\{C\}=17 > t\{a_{CaO}\}=8 \quad (6.3)$$

$$t\{C\}=316 \gg t\{p\}=22 > t\{A\} \approx t\{a_{CaO}\} \approx 9 > t\{D\} \approx t\{S_s\} \approx t\{\tau\} \approx t\{w_s\} \approx 7 \dots 5 \quad (6.4)$$

Таким образом реализуются предложенные принцип анализа изменений большого числа свойств многокомпонентных композитов (в широком диапазоне, за счет большого числа РТ-факторов) и соответствующий инструмент компьютерного материаловедения, основанные на выделении из полных рецептурно-технологических полей, локальных полей – по уровню того или иного критерия поведения материала.

Глава 7. МНОГОКРИТЕРИАЛЬНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ В МНОГОФАКТОРНОМ РЕЦЕПТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В этой главе описывается метод, который позволяет решать неисчерпаемое многообразие многокритериальных оптимизационных задач, возникающих при исследовании и проектировании многокомпонентных материалов. Число критериев оптимальности Y_O (которые нужно минимизировать или максимизировать, или компромиссно улучшить) и критериев-ограничений Y_Ω (области их значений специфицированы) принципиально не ограничено.

7.1. Общая постановка задачи

Разнообразие решаемых задач символически можно представить в виде (7.1).

$$Y_{O_i}(\mathbf{x}), (i = 1, \dots, M_O) \rightarrow \min (\max), \mathbf{x} \in \Omega: \{Y_{\Omega_j}(\mathbf{x}) \leq (\geq) Y_{\Omega_j, \text{spec}} (j = 1, \dots, M_\Omega)\} \quad (7.1)$$

Следует отметить, что среди Y_O могут быть и частные, и интегральные критерии качества, например, функция желательности [239-243]. Может быть единственный критерий оптимальности ($M_O = 1$) – тогда это обычная задача условной оптимизации [9], с целевой функцией $Y_O(\mathbf{x})$. Среди критериев оптимальности могут быть РТ-факторы и их линейные комбинации, в частности, связанные с материальными и энергетическими ресурсами, или удлиняющие сроки получения кондиционного материала, которые нужно минимизировать (это показано в [7, 135, 136, 138, 244-252])*.

Запись (7.1) охватывает и задачу определения лишь множества допустимых РТ-вариантов ($M_O = 0$), попадающих в заданную прямыми и функциональными ограничениями (границами факторов $x_i = \pm 1$ и границами $Y_{\Omega_j}(\mathbf{x}) = Y_{\Omega_j, \text{spec}}$) область допустимых решений $\Omega \subseteq \Omega_x$ (эти 2 области совпадают, если $M_\Omega = 0$).

В общем случае выражение (7.1) формулирует задачу многокритериальной компромиссной оптимизации в многомерной ограниченной области. Для решения именно таких задач более всего предназначен описываемый метод многофакторного поиска компромиссного оптимума (оптимального компромисса).

* В учебнике [9] и других источниках задача, в которой единственным критерием оптимальности является ресурсный фактор, называется задачей оптимизации 2-го рода; в задачах 1-го рода критерий оптимальности – один из $Y(\mathbf{x})$. В работе [246] для последних введено обозначение "Q" (quality), при ресурсном критерии – "R" (resource), при наличии и тех и других – "QR"; с математической и алгоритмической точек зрения эти 3 версии не имеют различий.

7.2. Алгоритм поиска компромисса – итерационное случайное сканирование рецептурно-технологических полей

Основные положения, на которых построена процедура поиска, следующие.

1. Генерация принципиально неограниченного числа точек x в области полей критериев $Y(x)$ – в многофакторной области многокритериального поля; таким образом *симулируется любое количество возможных рецептурно-технологических вариантов*.

2. Оценивание для каждого варианта x уровня поля любого свойства из любого принципиально неограниченного набора критериев качества материала, стоимости, ресурсосбережения – по экспериментально-статистической или другой модели, с учетом риска моделирования; так *симулируются отклики в вычислительном эксперименте*.

Положения 1 и 2 обеспечивают возможность выполнить как детерминированное, так и случайное сканирование полей (§ 1.5).

3. Отбор для сравнения (и дальнейшего выбора «лучших») тех вариантов из числа возможных, которые удовлетворяют требованиям нормативов по критериям Y_R .

Положение 3 обеспечивает формирование области допустимых решений Ω .

4. Реализация принципов поиска:

- это итерационный процесс, осуществляемый из некоторого начального приближения (в данном случае из начальной области поиска Ω_x);
- на каждой итерации выполняются действия, приводящие к сокращению области поиска, к сужению интервалов неопределенности для факторов x .

5. Диалог материаловеда с компьютером на каждой итерации*. Можно изменять приоритеты критериев, диапазоны поиска, «скорости» максимизации и минимизации за счет факторов того или иного Y_0 (с технико-экономических позиций и в зависимости от результатов предыдущих итераций), адаптировать параметры поиска к изменениям условий задачи; реализуется гибкая последовательная стратегия вычислительного эксперимента.

На этих положениях построена **процедура итерационного случайного сканирования** описанных ЭС-моделями РТ-полей $Y(x)$, позволяющая решать задачи (7.1). Для ее демонстрации ниже используются (как и в предыдущих главах) представленные в § 1.2 данные о карбамидных композициях и **конкретная постановка задачи их многокритериальной оптимизации** (7.2).

Требуется обеспечить за счет рецептурных факторов ($F \sim x_1$, $SC \sim x_2$, $CA \sim x_3$) насколько возможно высокие уровни модуля упругости E (ГПа) и коэффициента

* Легко осуществим с Excel или другим табличным процессором.

водостойкости K_W при выполнении требований: по вязкости смеси – $30 \leq \eta \leq 60$ Па·с, призмной прочности – $R \geq 70$ МПа, износостойкости – $A \geq 6$ ч/г.

$$E(x) \rightarrow \max, K_W(x) \rightarrow \max, x \in \Omega: \{30 \leq \eta(x) \leq 60, R(x) \geq 70, A(x) \geq 6\} \quad (7.2)$$

Рецептурные поля этих критериев описаны моделями: A – (1.3), R – (4.4), E – (4.10), η – (5.2), K_W – (7.3).

$$\begin{aligned} K_W = & 0.880 - 0.011x_1 \pm 0 \quad x_1^2 \pm 0 \quad x_1x_2 + 0.024x_1x_3 \\ & + 0.029x_2 - 0.011x_2^2 \pm 0 \quad x_2x_3 \\ & + 0.033x_3 \pm 0 \quad x_3^2 \end{aligned} \quad (7.3)$$

Поиск решений осуществляется следующим образом [6, 138, 245, 247-249].

1. Каждая s -ая итерация состоит из двух этапов. На **первом этапе** ($s/1$) в области поиска Ω_s генерируется N равномерно распределенных случайных вариантов рецептуры и параметров процессов, задаваемых k нормализованными переменными x_i .

В рассматриваемом типовом случае Ω_s – k -мерная прямоугольная призма, ограниченная нижними и верхними возможными значениями нормализованных факторов, $x_{i,\min}^{(s)}$ и $x_{i,\max}^{(s)}$. Распределение x_i внутри диапазона возможных значений (*Range of Possible Values, RPV_s{x_i}*) непрерывное или дискретное, если значения фактора обусловлены конкретными возможностями его регулирования [138, 245-247].

На начальной итерации ($s = 1$) область поиска Ω_1 – вся исследуемая факторная область Ω_x , полных РТ-полей специфицируемых критериев-ограничений и критериев оптимальности, описанных ЭС-моделями (в рассматриваемом типовом случае Ω_x – k -мерный куб)*.

2. По моделям рассчитываются значения всех Y (и Y_O , и Y_Ω) в N случайных точках внутри гиперпризмы; на начальной итерации – в N точках внутри k -мерного куба и в базовых (исходных) N_0 точках – 2^k вершинах куба (необходимость последних объяснена в § 1.5). Для остальных итераций исходными являются N_{s-1} «успешных» вариантов, найденных на предыдущей итерации. Таким образом формируется МРВЭ, матрица результатов вычислительного эксперимента размером $(N+N_{s-1}) \times (k+M_O+M_\Omega)$, и определяются диапазоны возможных значений $RPV_s\{Y\}$ для всех критериев.

* На факторную область (с диапазоном каждого i -го фактора от -1 до $+1$, т.е. $\Delta x_i = 2$) как бы наброшена многомерная сетка, со средним по координатным осям шагом между узлами (точками) $\Delta x_i / N^{(1/k)}$ (при непрерывном распределении); в тестовой задаче это $2 / 8000^{1/3} = 0.1$.

3. Из полученной МРВЭ удаляются (после сортировок строк по Y_{Ω}) те РТ-комбинации, в которых не обеспечиваются нормативные ограничения.

Возможны 3 подхода к «вынесению этого приговора»:

"1" – сравнивать с $Y_{\Omega, \text{spec}}$ модельно-детерминированные оценки Y_{Ω} ;

"2" – использовать для сравнения случайные значения Y_{Ω} по (3.13);

"3" – сравнивать модельно-детерминированные оценки Y_{Ω} с **гарантирующим уровнем** $Y_{\Omega, \text{spec}, \alpha}$. Для его определения к уровню $Y_{\Omega, \text{spec}}$ добавляется полуширина доверительного интервала (3.11): со знаком **плюс** – если нужно гарантировать отсутствие отказов, возникающих из-за низких уровней свойства (предела прочности, стойкости и др.); со знаком **минус** – когда неприемлемы высокие значения Y (вязкости, теплопроводности, усадки ...). Очевидно, что при такой замене заданных граничных значений на более жесткие используется, как и в случае "1", простейший расчет оценок в п. 2.

Оставшиеся $N_{s/1}$ РТ-вариантов (после исключения из рассмотрения не отвечающих требованиям спецификации) представляют область допустимых решений $\Omega\{Y_{\Omega j, \text{spec}} (j = 1, \dots, M_{\Omega})\}$ – пересечение допустимых областей $\Omega\{Y_{\Omega j, \text{spec}}\}$ по каждому из критериев-ограничений. Ее размер $\Omega\%$ – обобщающий показатель многокритериального поля (полей $M_0 + M_{\Omega}$ критериев с общей областью Ω_x) – определяется так же, как и для допустимой области по одному критерию (см. § 1.4, 1.5): это отношение (%) числа допустимых РТ-вариантов ($N_{s/1}$ оставшихся в МРВЭ строк) к числу всех ($N + N_{s-1}$) участвующих в вычислительном эксперименте.

Размер Ω несколько различается при разных способах дискриминации вариантов, что видно на рис. 7.1, где показано, для условий задачи (7.2), изменение 3-х оценок площади допустимой области $\Omega\{x_2, x_3\}$ с изменением x_1 ; ниже линии $\Omega = 10\%$ решения «неустойчивы», могут оказаться неприемлемыми. Естественно, что при отборе допустимых решений 3-м способом – при более жестких ограничениях ($31.7 \leq \eta \leq 56.7, R \geq 71.0, A \geq 6.34$), гарантирующих выполнение нормативных требований в (7.2), зоны допустимых составов наполнителя меньше.

Объем допустимой области $\Omega\{x_1, x_2, x_3\}$, за счет управления всеми тремя факторами, для 3-х подходов к отбраковыванию вариантов рецептуры равен: "1" – 22.6%, "2" – 17.7%, "3" – 15.4%. Третий способ (гарантированного выполнения нормативов) целесообразен при повышенных требованиях к надежности.

Образующие Ω диапазоны допустимых значений факторов (*Range of Acceptable Values, $RAV_s\{x_i\}$*), естественно, определяют диапазоны допустимых значений всех критериев $RAV_s\{Y\}$.

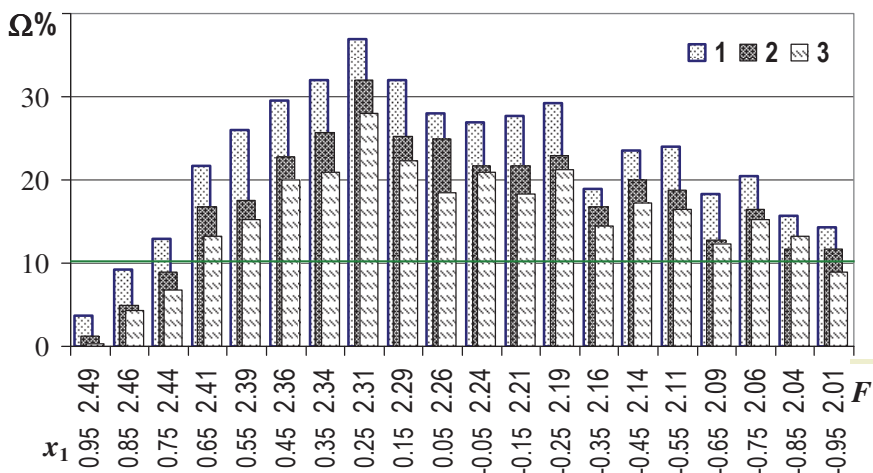


Рис. 7.1. Размер области допустимых составов наполнителя в зависимости от степени наполнения карбамидного связующего для трех подходов к оценке допустимости

4. На **втором этапе** каждой итерации ($s/2$) область оставшихся, допустимых решений сжимается за счет пошагового приближения ее границ к индивидуальным оптимумам критериев оптимальности **поочередно**, становясь областью компромисса. На каждом шаге отбрасываются те из допустимых РТ-вариантов, значения Y_{O_i} ($i = 1, \dots, M_O$) для которых оказываются хуже новой границы $RAV\{Y_{O_i}\}$ на этом шаге; такой границей может быть медианный уровень соответствующего критерия в его диапазоне RAV .

Таким образом формируются диапазоны компромисса для критериев оптимальности (*Range of Compromise*, $RC_s\{Y_{O_i}\}$) и обеспечивающих их факторов ($RC_s\{x_i\}$, $i = 1, \dots, k$), которые сужаются до тех пор, пока в них не остается лишь несколько (N_s) РТ-вариантов (строк в МРВЭ). Тогда дальнейшее сокращение диапазонов компромисса, как правило, теряет смысл, исчерпываются возможности приближения к индивидуальным экстремумам Y_O .

Уменьшенное на несколько порядков (по сравнению с $N + N_{s-1}$) количество N_s «успешных» вариантов является базовым для следующей итерации (к ним в п. 2 добавляются N новых).

5. Для «компенсации» вероятных потерь решений (в промежутках между случайными точками) полученные $RC_s\{x_i\}$ несколько расширяются (на 0.1-0.2 ефп от достигнутых границ, при этом возможны нарушения требований к Y_Ω), образуя область поиска для следующей ($s + 1$)-ой итерации – новую гиперпризму, с новыми границами $RPV_{s+1}\{x_i\}$. Осуществляется переход к п. 1, к генера-

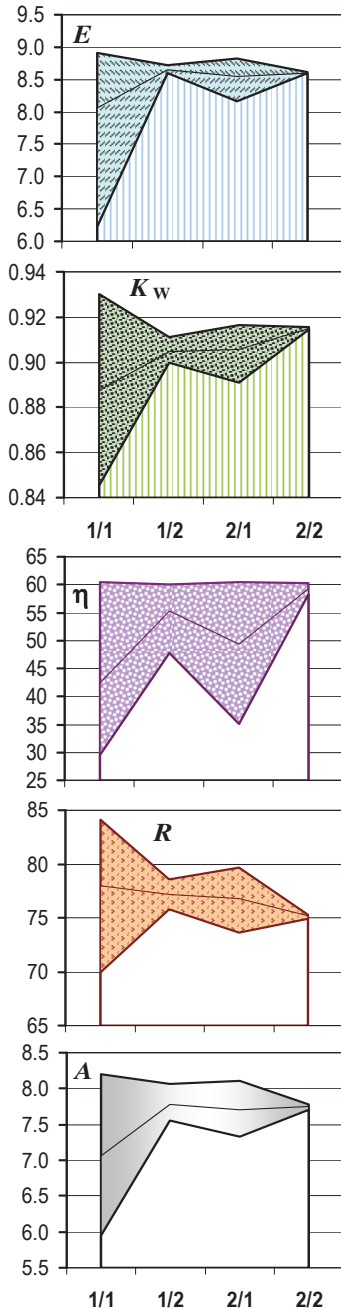


Рис. 7.2. Диапазоны Y_0 и Y_Ω на этапах поиска компромиссного оптимума

ции новых N , в уменьшенной по сравнению с Ω_s области поиска*.

Процесс поиска останавливается, когда верхние и нижние границы диапазонов $RC\{Y_0\}$ практически смыкаются. Как правило, компромиссно оптимальные варианты удается найти за 2-4 итерации.

Для выбора окончательного РТ-решения из оставшихся в области компромисса можно воспользоваться дополнительными критериями или регуляризацией [7, 253], основанной на гипотезе линейности локальных полей свойств в суженных диапазонах компромисса: можно усреднить значения каждого x_i по N_s вариантам, полученным на последней итерации.

После возврата к именованным величинам натуральные значения факторов округляются до технически реализуемых.

Графики на рис. 7.2-7.3 отображают поиск решений задачи (7.2). Окончательное решение:

степень наполнения $F = 2.35$ ($x_1 = 0.4$),

доля карбида кремния $SC = 58\%$ ($x_2 = 0.933$),

количество крупного андезита $CA = 50\%$ ($x_3 = 0.5$).

Этот состав обеспечивает компромисс между максимальными уровнями E и K_w (9.7 ГПа и 0.93) при выполнении требований по другим трем критериям:

$$E = 8.6 \text{ ГПа}, K_w = 0.915,$$

$$\eta = 59 \text{ Па}\cdot\text{с}, R = 75.2 \text{ МПа}, A = 7.8 \text{ ч/г}.$$

При поиске на каждой итерации (на ее нулевом этапе 0/s) генерировалось $N = 8000$ рецептурных вариантов, к которым на 1-й итерации (этап 0/1) было добавлено $2^3 = 8$ составов (вершин факторного куба). Изменение числа рассматриваемых вариантов (N_s), от этапа к этапу, показано на рис. 7.4.

Полученные на этапе 1/1 диапазоны допустимых значений критериев оптимальности $RAV_1\{Y_0\}$ распадаются на 3 линейно связанных диапазона (показанные для тестовой задачи на рис. 7.5): целенаправленно расширяемый диапазон выигрыша $RG\{Y_0\}$ (Range of Gain), диапазон потерь $RL\{Y_0\}$ (Range of Losses), и

* При этом уменьшаются ячейки набрасываемой на Ω_s многомерной сетки и риск «потерять» хорошие допустимые РТ-варианты.

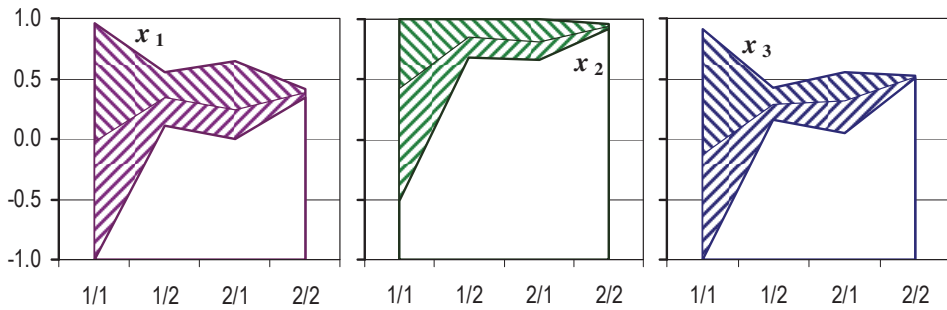


Рис. 7.3. Диапазоны рецептурных факторов на этапах поиска компромиссных составов

«пульсирующий» между ними сужаемый диапазон компромисса $RC\{Y_0\}$. Величины этих диапазонов по отношению ко всему размаху допустимых значений, $RAV_1\{Y_0\}$, можно использовать для оценки «результативности» поиска компромиссного оптимума.

Так **эффективность** оптимизации по модулю упругости после первой итерации $eo_1\{E\} = RG_1\{E\}/RAV_1\{E\} = (8.91-6.22)/2.38 = 0.885$, $eo_1\{K_w\} = 0.647$; окончательная эффективность для двух критериев оптимальности практически одинакова (поскольку приоритеты им не назначались): $eo_2\{E\} = RG_2\{E\}/RAV_1\{E\} = 0.885$, $eo_1\{K_w\} = 0.824$.

Другой показатель, «коэффициент компромисса», $kc_s = RC_s / RAV_1$, позволяет ориентироваться в возможностях улучшения того или иного критерия на следующих итерациях. При решении задачи (7.2) после 1-й итерации коэффициенты $kc_1\{E\}$ и $kc_1\{K_w\}$ существенно отличаются (0.05 и 0.13), чему соответствуют и отображения диапазонов на рис. 7.5.

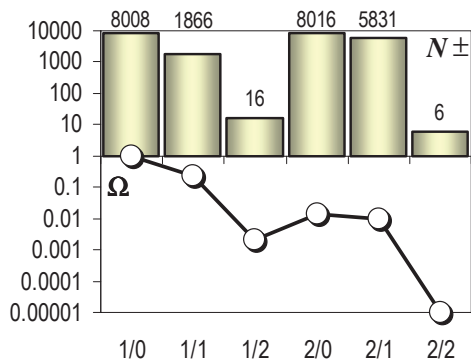


Рис. 7.4. Изменения в процессе поиска числа конкурирующих составов N^\pm и относительного объема области поиска Ω в факторном кубе

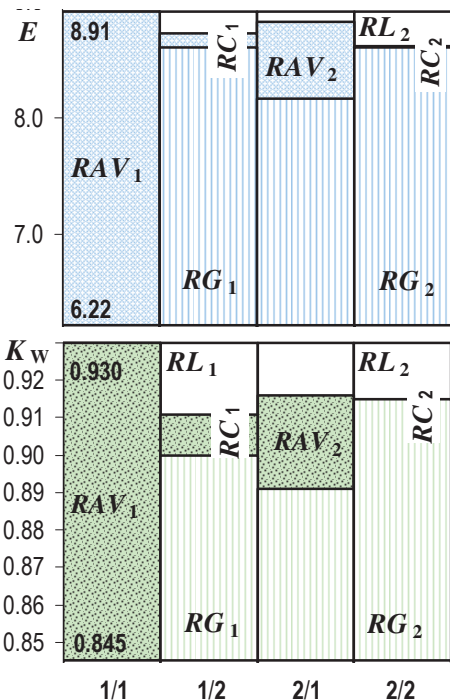


Рис. 7.5. Диапазоны допустимых и компромиссных значений E и K_w , потерь и выигрыша на этапах поиска оптимума

В ряде задач (в частности, когда модели содержат эффекты вида $x_i^2 x_j$, описывая влияние отдельных факторов параболой с переменной канонической формой*) поиск может разветвляться и приводить к «анклавам» решений [254-257].

7.3. О решенных задачах компромиссной оптимизации строительных композитов

Метод итерационного случайного сканирования РТ-полей позволил найти решения многих многокритериальных оптимизационных задач при исследовании и проектировании композитов с силикатными и полимерными матрицами, с разными наполнителями и заполнителями и фиброармированием.

Товарный бетон для монолитного строительства каркасных сооружений.** Число факторов в задаче оптимизации (независимых переменных) $k = 4$, число критериев $M = M_{\Omega} + M_{O} = 6$. После двух итераций поиска был найден состав [79, 219], *гарантированно* удовлетворяющий мультикритериальным требованиям – к марочной прочности, подвижности бетонной смеси, и отношению прочности бетона в нижнем цилиндрическом фрагменте столбчатого элемента к прочности в верхнем цилиндре. Определенные в результате поиска содержание цемента, соотношение количества щебня и песка, дозировки химической добавки и тонкомолотого доломитового наполнителя обеспечивали оптимальный компромисс между максимизируемым модулем упругости, минимизируемой усадкой и также снижаемым специальным коэффициентом неравномерности прочности в столбчатом элементе, равным отношению прочностей наиболее прочного и наиболее слабого фрагментов.

Мелкозернистый бетон для конструкций перерабатывающих предприятий агропромышленного комплекса ($k = 4$, $M_{\Omega} = 2$, $M_{O} = 3$). Материал эксплуатируется в условиях одновременного воздействия растворов органических кислот, сахара, различных микроорганизмов, часто изменяющегося температурно-влажностного режима и других факторов, существенно снижающих его долговечность. Для первичной биозащиты конструкций, работающих в таких сложных эксплуатационных условиях, целесообразна модификация бетона многокомпонентными добавками [259, 260].

* Это может потребоваться в РТ-ситуациях, предполагающих фазовые превращения, смешивание разных дисперсных фаз и т. д.

** Разрабатывался совместно с Институтом стандартов Израиля [79, 159, 175-177, 190, 219, 258]; ему был посвящен п. 4.5.1.

В результате ветвящегося поиска найдены [254] составы 4-компонентной добавки (содержащей бентонитовую глину, гидрофобизатор, лигносульфонат и бензоат натрия), гарантированно обеспечивающей два нормативных требования (к 28-суточной прочности при сжатии и подвижности смеси в нормативном коридоре) и компромиссное увеличение критериев долговечности и биохимической стойкости бетона. Этими критериями оптимальности были: прочность после 180 суток экспозиции в 2% уксусной кислоте, ее отношение к марочной – коэффициент биохимической стойкости, а также показатель стабильности защитных свойств модифицированного бетона (отношение коэффициентов стойкости после 6 и 1 месяцев экспозиции); в рекомендованном лучшем составе гидрофобизатор отсутствует [254, 260].

Фиброполимерцементные сухие смеси для высокопрочных покрытий промышленных полов ($k = 4$, $M_{\Omega} = 2$, $M_{O} = 2$). При их разработке [171, 261] были определены оптимальное содержание полиамидных волокон и диспергируемого полимера (Vinnapas® LL 222) и оптимальный зерновой состав «минерального каркаса» (отношение количества доломитового наполнителя и гранитного отсева к количеству песка), которые обеспечивали: требования к композиту в 28-дневном возрасте (по прочности на сжатие и линейной усадке); повышенную прочность на растяжение при изгибе и пониженную усадку в ранние сроки твердения (способствующие увеличению трещиностойкости).

Фиброполимерцементные сухие смеси для машинной технологии подачи и наливки раствора ($k = 4$; $M_{\Omega} = 2, 3$, одно ограничение двустороннее, $M_{O} = 2$). С помощью итерационного случайного сканирования рецептурных полей решен ряд задач компромиссной оптимизации при исследовании и разработке сухих смесей для наливных покрытий полов [23, 24, 140]. Моделями вида (2.1) были описаны поля критериев-ограничений и критериев оптимальности в координатах входящих в (2.1) четырех факторов состава (см. гл. 2). Один из факторов – количество полимерного вяжущего VINNAPAS® 5014F (F – от *Flow*, класс продуктов с высокой растекаемостью без разжижителей, соединяющих функции связующего и суперпластификатора).

Среди критериев Y_{Ω} и Y_{O} следует отметить реологические характеристики. Это, в частности, показанные на рис. 7.6 эффективные вязкости (Па·с): η_0 – при минимальной скорости сдвига $\dot{\gamma}$ (0.066 c^{-1}), η_L – средняя для 3 нижних скоростей, η_{134} – при $\dot{\gamma} = 134.5 \text{ c}^{-1}$, возможно, близкая к вязкости жидкости с предельно разрушенной структурой [262].

Критерием Y_{Ω} или Y_O могла быть эффективная вязкость η_{γ} при любой заданной условиями технологии скорости сдвига или скорость γ'_{η} , обеспечиваю-

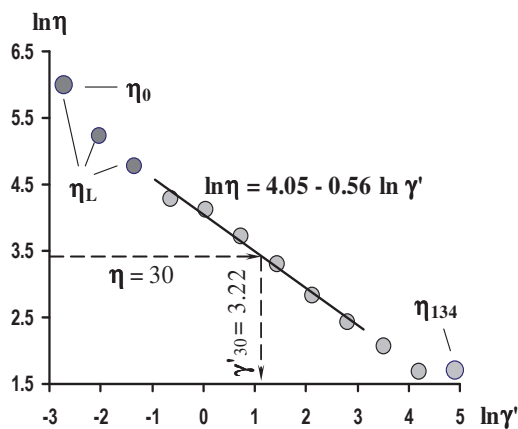


Рис. 7.6. Точки и параметры кривой вязкости для смеси в центре эксперимента

щая требуемую вязкость (в частности, показанная на рисунке γ'_{30}). Последние две характеристики могли быть определены при наличии подходящего реологического уравнения. В диапазоне средних скоростей (0.52-16.81) кривые вязкости для каждой из 18 смесей (по плану эксперимента) были адекватно описаны (средняя ошибка неадекватности около 10%) уравнением Оствальда-де Виля (2.7), показанным на рис. 7.6 для одной из смесей.

Ниже приведены компромиссно оптимальные решения трех задач многокритериальной оптимизации. Во всех трех задачах решения найдены за 2 итерации случайного сканирования рецептурных полей.

В задаче «А», записанной в виде условия (7.4), следовало максимизировать раннюю прочность раствора при изгибе $R_{b3}(x)$ и минимизировать вязкость смеси при самой низкой скорости сдвига $\eta_0(x)$. При этом должны быть выполнены требования по прочности при изгибе и сжатии в 28 суток и вязкости при средних скоростях сдвига.

$$\eta_0 \rightarrow \min, R_{b3} \rightarrow \max; R_{b28} \geq 6, R_{c28} \geq 35 \text{ МПа}, 30 \leq \eta_1 \leq 90 \text{ Па}\cdot\text{с} \quad (7.4)$$

Получены следующие результаты: дозировка Виннапас $V = 3.0\%$ (по массе цемента, $x_1 = -0.56$); молекулярная масса метилцеллюлозы $ММС = 3000$ ($x_2 = +1$); дозировка метилцеллюлозы $МС = 0.4\%$ ($x_3 = +1$); количество фибры $F = 1\%$ ($x_4 = +1$); в пересчете на сухую смесь дозировки составляют: 1.2% Виннапас, 0.15% метилцеллюлозы и 0.4% фибры.

Это низковязкая композиция: средняя эффективная вязкость при низких скоростях сдвига $\eta_L = 170$, при скорости $1 \text{ с}^{-1} - 37 \text{ Па}\cdot\text{с}$; обеспечивает прочность при изгибе через 3 суток 3.8 МПа, через 28 суток – 6.6 МПа, прочность при сжатии через 28 суток 51.7 МПа, адгезионная прочность 1.8 МПа, динамический модуль упругости $E = 20.7 \text{ ГПа}$.

В задаче «Б» (7.5) требовалась бóльшая прочность и не столь низкая вязкость. Поиск компромисса привел к решению с верхними значениями всех

факторов ($x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = +1$): $V = 5.5\%$, $MMC = 3000$, $MC = 0.4\%$, $F = 1\%$. Значения критериев следующие: $R_{b3} = 4.0$, $R_{b28} = 6.9$, $R_{c28} = 55.5$ МПа, $\eta_0 = 600$, $\eta_1 = 134$ Па·с. Это «средневязкая» композиция повышенной прочности (вязкость η_L при низких скоростях в среднем 460 Па·с), отличающаяся от состава "А" содержанием VINNAPAS® 5014 F (2.1% по массе сухой смеси); адгезия не менее 2 МПа, $E = 21$ ГПа.

$$\eta_0 \rightarrow \min, R_{b3} \rightarrow \max; R_{b28} \geq 6.5, R_{c28} \geq 40 \text{ МПа}, 60 \leq \eta_1 \leq 150 \text{ Па·с} \quad (7.5)$$

Задача «В» (7.6) отличается по постановке от «А» и «Б» прежде всего первым критерием оптимальности. Это скорость сдвига, обеспечивающая требуемую технологией вязкость смеси. Минимизация γ_{η} дает возможность потребителю экономить энергию – за счет перемешивания технологической смеси на более низких скоростях. Решены 2 варианта задачи – при $\eta_{\gamma} = 20$ и 30 Па·с.

$$\gamma_{\eta} \rightarrow \min, R_{b3} \rightarrow \max; R_{b28} \geq 6, R_{c28} \geq 35 \text{ МПа} \quad (7.6)$$

Одинаковый для обеих вязкостей компромиссно оптимальный состав отличается от составов "А" и "Б" содержанием Виннапас: $x_1 = -1$, $V = 2.3\%$ (по массе цемента), или 0.9% в пересчете на сухую смесь. Это существенно ниже рекомендуемой производителем средней дозировки – 1.5% и на 0.1% меньше нижней границы рекомендуемого диапазона и таким образом ведет к снижению стоимости смеси.

Эта «легко текущая» композиция (средняя вязкость при низких скоростях менее 100, при скорости 1 с^{-1} менее 20 Па·с) обеспечивает вязкость 20 Па·с при $\gamma = 0.78 \text{ с}^{-1}$, 30 Па·с при $\gamma = 0.34 \text{ с}^{-1}$. После 3-х суток твердения имеет прочность при изгибе 3.4 МПа; через 28 суток прочность при изгибе 6.5, при сжатии 53.5 МПа, адгезионная прочность 1.7 МПа, $E = 19.2$ ГПа.

Система «полимерцементный ремонтный раствор – бетонное основание» ($k = 5$, $M_{\Omega} = 7$, три ограничения двусторонние). При разработке сухих ремонтных смесей учтены условия совместимости (технологически и физико-химически) раствора и ремонтируемого бетона [263]. Выполнено итерационное случайное сканирование полей семи критериев качества системы в координатах трех дозировок компонентов раствора (ускорителя твердения, диспергируемого и суперабсорбирующего полимеров) и двух характеристик основания (условная пористость субстрата и толщина грунтовочного слоя). Определены рациональные значения этих пяти факторов, обеспечивающие требования украинских и европейских норм по следующим свойствам: адгезия в нормальных условиях; адгезия при замораживании / оттаивании; линейная усадка; прочность при сжатии

раствора в возрасте трех суток; прочности при сжатии и изгибе раствора в 28 суток (ограничены снизу и сверху из принципа совместимости раствора с основанием), вязкость при $\dot{\gamma} = 10 \text{ с}^{-1}$ (двустороннее ограничение в силу необходимости заполнить повреждения в конструкции путем экструдирования).

Композиции на основе пластифицированной эпоксидной смолы «Макро»

($k = 4, 5$; M до 6). При разработке композиций разного назначения на этой смоле с помощью итерационного сканирования рецептурных полей был решен ряд многокритериальных задач оптимизации [244, 245, 252, 264, 265]. В частности, найдены составы полимеррастворов для ремонта и защиты бетонных конструкций, подверженных воздействию нефтепродуктов, воды и смесей воды с нефтью [244, 245]. Область составов определяли 5 рецептурных факторов: содержание минерального каркаса (наполнителя и песка), доля в каркасе наполнителя (диабазы и цеолита), доля цеолита в наполнителе, доля «крупных» зерен в цеолитовой составляющей, дозировка фурфурола.

Композиции на смоле «Макро» (модифицированная ЭД-20, патент Украины №112268) проектировались в Институте водных проблем и мелиорации Национальной академии аграрных наук Украины (прежде УкрНИИГИМ) для восстановления и защиты бетонных элементов водотранспортирующих сооружений, водосбросов и дюкеров, опор мостовых переходов на магистральных каналах, для защиты железобетона от истирания донными наносами и т.п.

При ограничениях на прочность при изгибе, прочность после выдержки в воде и вязкость смеси (с границей снизу и сверху) были найдены решения трех оптимизационных задач. В первой следовало компромиссно максимизировать прочности после экспозиции в «легкой» и «тяжелой» нефти. Во второй эти два критерия были ограничены, но следовало минимизировать расход смолы. Третья задача объединила первые две – найден компромисс между прочностью «в нефти» и расходом смолы.

Шлакощелочная вяжущая система «гранулированный доменный шлак – цеолит – сульфат натрия – портландцемент» ($k = 8$; $M = 3, 4$). С помощью итерационного случайного сканирования 8-факторных полей трех свойств щелочного цемента найдены [135, 136]:

- составы вяжущей системы и режимы тепловлажностной обработки, максимизирующие гарантированные уровни прочности и морозостойкости материала при обеспеченности требуемой стойкости в сульфате натрия;
- минимальные расходы ресурсов (щелочной соли, портландцемента, температуры ТВО и ее продолжительности) для гарантированного обеспечения требуемого качества (по трем вышеназванным критериям).

Автоклавный ячеистый бетон ($k = 9$, $M_{\Omega} = 2$, $M_O = 2 \dots 6$). Большое число многокритериальных оптимизационных задач было решено [137-139, 246-251, 253, 266] при анализе данных, полученных в результате уникального эксперимента, выполненного в совместных исследованиях [267] института НИПИ Силикатобетон и кафедры ПАТСМ ОИСИ (см. § 6.4).

На рис. 7.7 и 7.8 представлены результаты решения одной из этих задач [138]. Требовалось найти компромисс между теплопроводностью λ (мВт/м/К), которую следовало минимизировать, и характеристикой вязкости разрушения (трещиностойкости) $H = R_b \cdot \epsilon$ (где R_b , МПа – прочность при изгибе, ϵ , мм/м – деформативность) – ее следовало максимизировать, а также двумя энергоемкими факторами автоклавной технологии – временем нагрева τ и давлением пара p (факторы x_4 и x_5). При этом для бетона марки D800, класса В5 должны были быть выполнены двусторонние ограничения по плотности ($740 \leq \rho \leq 840$ кг/м³) и прочности на сжатие ($6.4 \leq R_c \leq 9.6$ МПа). Отмеченный на рисунке выбранный вариант "F" обеспечивает $\rho = 744$ кг/м³ и $R_c = 9.0$ МПа.

Итерационное случайное сканирование 9-факторных полей свойств газосиликатов было выполнено [138, 139] для 12 «нормативных блоков» – комбинаций четырех марок по плотности (D500-800) и трех классов по прочности на сжатие (B3.5, B5, B7.5).

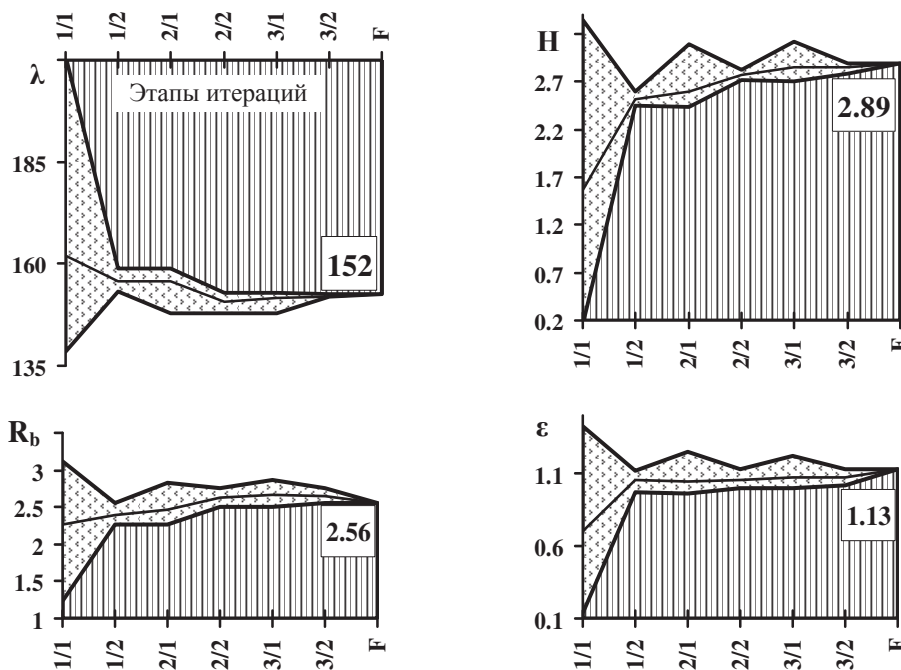


Рис. 7.7. Изменения диапазонов критериев оптимальности газобетона λ и H и контролируемых R_b и ϵ на этапах поиска компромисса

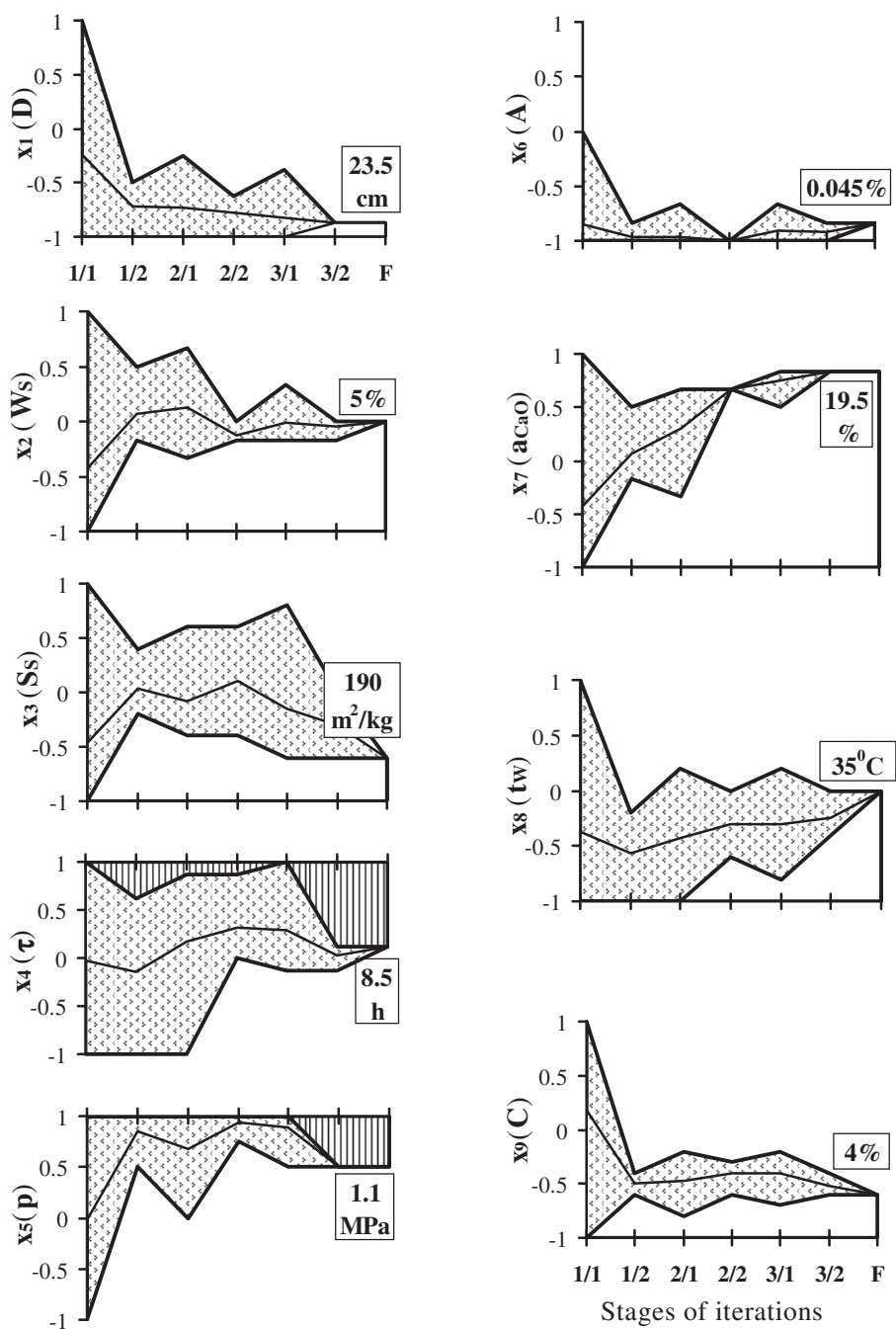


Рис. 7.8. Изменения диапазонов РТ-факторов при поиске компромиссного оптимума для газобетона марки D800, класса B5

Для каждого блока $\{D, B\}$ определены компромиссно оптимальные уровни трех критериев качества (предела прочности и деформативности при изгибе, коэффициента теплопроводности) и двух показателей энергоемкости автоклавного твердения. В каждом блоке определены значения 9 РТ-факторов, обеспечивающие оптимальный компромисс.

Для анализа переходов между блоками нормативов в работе [139] использован обобщающий показатель – предел прочности на сжатие $R_c\{D, B\}$ при компромиссно оптимальных в данном блоке уровнях критериев качества. Непрерывными функциями этого показателя удалось описать (с известными рисками) изменения компромиссных значений критериев и факторов во всем диапазоне нормативов $\{D, B\}$. Компромиссные уровни девяти факторов представляют систему, внутренние связи в которой обеспечивают их взаимную компенсацию для сохранения компромиссной оптимальности.

Другие материалы, при исследовании и проектировании которых использовалось итерационное случайное сканирование РТ-полей: прессованные древопластики [268]; полимерные покрытия для полов спортивных сооружений (сканировались поля с областями неодинаковой размерности) [269]; пенобетоны [255, 257]; облегченные тепло- и звукоизолирующие композиции на основе гипса, наполненные перлитом и ценосферами [206, 270-272].

Представленный алгоритм многокритериальной оптимизации достаточно универсален. Он не имеет принципиальных ограничений на число оптимизируемых критериев. На любой итерации могут быть добавлены в качестве критериев оптимальности ресурсоемкие факторы, требующие целенаправленной минимизации. Алгоритм эффективен, имеет внутреннюю логику, может быть рекомендован для поиска компромисса при большой размерности факторной области ($k \geq 5$).

К преимуществам метода итерационного случайного сканирования РТ-полей можно отнести отсутствие необходимости создавать в многокритериальных задачах комплексный критерий качества с весовыми множителями и возможность проведения поиска в диалоговом режиме, меняя требования по мере получения технологической информации в вычислительном эксперименте, в том числе, изменяя риск гарантированных уровней показателей качества.

При нормализованных переменных области сканируемых полей свойств материала могут иметь неодинаковую размерность. Для описания полей можно использовать не только полиномиальные экспериментально-статистические модели, но и модели иного типа и генезиса. Сканирование полей свойств проводится с помощью равномерно распределенных случайных чисел. Их генера-

ция проводится на непрерывных или дискретных шкалах, которые отражают возможности ступенчатого регулирования факторов в производственных условиях, причем можно использовать оба типа шкал для разных групп факторов. Алгоритм реализуется с помощью либо специального программного обеспечения, либо доступного табличного процессора.

Из высказываний В.А. Вознесенского

Немного грустно оттого,
Что жизнь не оптимальна.
Экстремумов полным-полно,
Но все они локальны.

Строки Томаса Элиота ("The Rock", 1934),
заимствованные из книги
Ю.П. Адлера и В.Л. Шпера
"Статистическое управление процессами"
(М.: МИСиС, 2015)

Where is the Life we have lost in living?
Where is the wisdom we have lost in knowledge?
Where is the knowledge we have lost in the information?

Послесловие

В условиях стремительного, фантастического развития информационных технологий в мире «*Big Data*», когда [273] в мейнстриме разработок находятся программные роботы и искусственные нейронные сети, будущее тех или иных областей исследований и их инструментария оказывается плохо предсказуемым. Как заметил Chris Anderson [274], приведя известное высказывание «*All models are wrong, but some are useful*» (George Box), такие компании как Google могут вообще отказаться от моделей.

Поскольку компьютерное материаловедение охватывает практически все теоретические и прикладные аспекты материаловедения как такового [79], весьма вероятно слияние этих научных областей (когда любое «ведение» будет априори подразумевать использование компьютерного анализа [275], и слово «компьютерное» сможет уйти из названия).

Безусловно, останется материальное рецептурно-технологическое пространство. Не обойтись и без моделей (до тех пор, пока поиск смыслов и приобретение знаний остаются потребностью и предназначением человека).

Представленная в книге методология нацелена на получение высококачественных композиционных материалов (высокофункциональных, технологичных, экологичных ...). Рецептурно-технологические условия их создания отображают многомерные рецептурно-технологические поля критериев качества, описанные многофакторными нелинейными экспериментально-статистическими моделями.

Методология позволяет использовать эту информацию о влиянии состава, режимов технологии, параметров структуры и условий эксплуатации на свойства композитов для получения нового знания, для гарантирования требуемых уровней свойств, для ресурсосбережения. Повышаются шансы прорывных достижений в улучшении качества продуктов и эффективности процессов (разработки, производства, эксплуатации, утилизации).

Tatiana Lyashenko
frabul16@gmail.com

Литература

1. Ушеров-Маршак А.В. Бетонovedение: лексикон. – М.: РИФ «СТРОЙМАТЕРИАЛЫ», 2009. – 112 с.
2. Mindes S. High performance concrete: where do we go from here? // *Brittle Matrix Composites* 8. – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd., Warsaw: ZTUREK RSI, 2006. – P. 15-23.
3. Высокофункциональный бетон – модный термин или философия бетона нового поколения? – *Строительные материалы*, № 11, 2010. – С. 34-35.
4. Our Common Future, Chapter 2: Towards Sustainable Development (1987). UN Documents: Gathering a Body of Global Agreements. – www.un-documents.net/ocf-02.htm
5. Баженов Ю.М., Фаликман В.Р. Новый век: новые эффективные бетоны и технологии // Бетон на рубеже третьего тысячелетия: Мат-лы 1-ой Всерос. конф. по проблемам бетона и железобетона. – М., 2001. – Кн. 1. – С. 91-101.
6. Ляшенко Т.В. Поля свойств строительных материалов (концепция, анализ, оптимизация): Автореф дис. д.т.н.: 05.23.05 / ОГАСА. – Одесса, 2003. – 34 с.
7. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Гаврилюк В.П. Некоторые обратные задачи компьютерного строительного материаловедения // *Сучасні будівельні матеріали: Вісник Донб. НАБА*, 2010-5(85). – Макіївка, 2010. – С. 33-38.
8. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я.П. Иванов, И.И. Николов. – К.: Будивэльнык, 1989. – 240 с.
<http://frabul16.wixsite.com/dvoe/books> <http://mx.ogasa.org.ua/handle/123456789/332>
9. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Огарков Б.Л. Численные методы решения строительного-технологических задач на ЭВМ. – К.: Вища школа, 1989. – 328 с.
<http://frabul16.wixsite.com/dvoe/books> <http://mx.ogasa.org.ua/handle/123456789/331>
10. Вознесенский В.А. Первые элементы компьютерного строительного материаловедения // *Вісник ОДАБА*. – Одеса, 2005. – Вип. 18. – С. 19-25.
11. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. ЭС-модели в компьютерном строительном материаловедении. – Одесса: Астропринт, 2006. – 116 с.
12. Гусев Б.В., Файвусович А.С. О математическом моделировании в строительном материаловедении // *Моделирование и оптимизация композитов*. – Одесса: Астропринт, 2014. – С. 29-32. <http://frabul16.wixsite.com/dvoe/voznensensky>
13. Гусев Б.В., Зазимко В.Г., Нетеса Н.И. Исследование напряженно-деформированного состояния композитов с использованием метода конечных элементов // *Строительство и архитектура. Известия высших учебных заведений*. – 1981. – № 8. – С. 13–16.
14. Процессы и аппараты в технологии строительных материалов: Учебник для вузов / Борщ И.М., Вознесенский В.А., Мухин В.З. и др. – К.: Вища школа, 1981. – 296 с.
15. Fennis S.A.A.M., Walraven J.C., Den Uijl J.A. The use of particle packing models to design ecological concrete. – *Heron*, V. 54, 2009, No 2/3. – P. 185-204.
16. Фролов Ю.Г. Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы. – Москва: Химия, 1982. – 400 с.
17. Дворкин Л.И., Дворкин О.Л. Основы бетонovedения. – СПб.: ООО «Строй-Бетон», 2006. – 692 с.

18. Современные методы оптимизации композиционных материалов / Под ред. В.А. Вознесенского. – К.: Будівельник, 1983. – 144 с.
19. Методические рекомендации по применению экспериментально-статистических моделей для анализа и оптимизации состава, технологии и свойств композиционных материалов на основе щелочных вяжущих систем / Науч. ред. В.А. Вознесенский, П.В. Кривенко. – ОГАСА, НИИВМ им. В.Д. Глуховского. – К., 1996. – 105 с.
<http://frabul16.wixsite.com/dvoe/publications>
20. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Проблема построения комплексов математических моделей различной генерации для оптимизации высококачественных материалов в компьютерном материаловедении // Рациональный эксперимент в материаловедении. Мат-лы межд. сем. МОК'39 – Одесса, Астропринт, 2000. – С. 5-7.
21. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. ЭС-модели «КОНСТАНТ» квазифундаментальных моделей в компьютерном строительном материаловедении // Науковий вісник будівництва. – Харків, ХДТУБА, 2007. – Вип. 42. – С. 39-45.
22. Москалева К.М., Ляшенко Т.В., Вознесенский В.А. Оценка структурообразующей роли компонентов полимерминеральных смесей как неньютоновских жидкостей по разностям логарифмических функций вязкости // Сучасні будівельні матеріали. Вісник Донб. НАБА, 2012-1(93). – Макіївка, 2012. – С. 3-12.
<http://frabul16.wixsite.com/dvoe/publications> <http://mx.ogasa.org.ua/handle/123456789/372>
23. Lyashenko T., Kryukovskaya S. Modelling the influence of composition on rheological parameters and mechanical properties of fibre reinforced polymer-cement mortars // Brittle Matrix Composites 10. – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd., Warsaw: IFTR, 2012. – P. 169-178.
24. Ляшенко Т.В., Крюковская С.А. Реологические критерии при оптимизации фиброполимерцементных композиций для наливных покрытий полов // Вісник Донб. НАБА. – Макіївка, 2013. – Вип. 1(99) – С. 101-107.
<http://frabul16.wixsite.com/dvoe/publications> <http://mx.ogasa.org.ua/handle/123456789/375>
25. Вентцель Е.С. Исследование операций: задачи, принципы, методология. – М.: Наука, 1988. – 208 с.
26. Моисеев Н.Н. Математические задачи системного анализа. – М.: Наука, 1981. – 487 с.
27. Подвальный А.М., Проценко А.М. Исследование проницаемости бетона на математических моделях // Защита строительных конструкций промышленных зданий от коррозии / НИИЖБ Госстроя СССР. – М.: Стройиздат, 1973. – С. 149-157.
28. Соболев И.М. Метод Монте-Карло. – М.: Наука, 1978. – 64 с.
29. Wittmann F.H., Zaitsev Y.V. Crack propagation and fracture of composite materials such as concrete // Proc. Int. Conf. on Fracture ICF5, Cannes (France), 1981. – P. 2261-2274.
30. Зайцев Ю.В. Механика разрушения для строителей. – М.: Высш. школа, 1991. – 288 с.
31. Mechtcherine V., Müller H.S. Fractality of fracture surfaces of quasi-brittle materials and numerical modelling of discrete cracks // Моделирование и оптимизация в материаловедении. Мат-лы межд. сем. МОК'40. – Одесса: Астропринт, 2001. – С. 14-16.
32. Le L.B.N., Stroeven M., Sluys L.J., Stroeven, P. A novel numerical multi-component model for simulating hydration of cement. – Computational Materials Science, 78, 2013. – P. 12-21.
33. Le L.B.N., Stroeven P. Porosity of green concrete based on a gap-graded blend // Brittle Matrix Composites 10. – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd., Warsaw: IFTR, 2012. – P. 315-324.
34. Stroeven P., He H., Le L.B.N., Li K. Modeling possibilities of concrete structure for durability purposes // Моделирование и оптимизация композитов. Мат-лы межд. сем. МОК. – Одесса: Астропринт, 2014. – С. 60-63.
35. Донева И.В., Сопов Д.В., Сопов В.П. Имитационное моделирование формирования поровой структуры цементного камня // Науковий вісник будівництва. – Харків: ХДТУБА, ХОТВ АБУ, 2004. – Вип. 29. – С. 318-322.
36. Воробьев В.А., Кивран В.К., Корякин В.П. Применение физико-математических методов в исследовании свойств бетона. – М.: Высшая школа, 1977. – 271 с.

37. Илюхин А.В. Автоматизация технологического процесса приготовления компонентов радиопоглощающего бетона с оптимизацией по электрофизическим характеристикам электропроводной фазы: Автореф дис. д.т.н.: 05.13.06 / МГАДИ/ТУ – М., 2004. – 39 с.
38. Dewar J.D. Computer Modelling of Concrete Mixtures. – London, New-York: E & FN SPON, 1999. – 256 p.
39. Гальберштам Н.М., Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефилов Н.С. Нейронные сети как метод поиска зависимостей структура – свойство органических соединений. – Успехи химии, Т. 72, 2003. – Вып. 7. – С. 706–727.
40. Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефилов Н.С. Многослойные перцептроны в исследовании зависимостей "структура – свойство" для органических соединений. – Российский химический журнал, Т. L, 2006, № 2. – С. 86-96.
41. Wittmann F.H., Martinola G. Optimisation of concrete properties by neural networks //Concrete 2000 – economic and durable construction through excellence: Proc. Int. Conf. – London: E & FN Spon, 1993. – P. 1889-1898.
42. Kasperkiewicz J., Alterman D. Artificial intelligence in predicting properties of brittle matrix composites // Brittle Matrix Composites 6. – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd., Warsaw: ZTUREK RSI, 1994. – P. 485-496.
43. Buenfeld N.R., Hassanein N.M., Glass G.K. Neural networks for modelling the influence of cement chemistry on concrete durability // Proc. 10th Int. Congress on Chemistry of Cement, Gothenburg, 1997. – V.4. – 4iv070, 8 pp.
44. Дьяченко Е.И., Чернышов Е.М., Дьяченко Д.Е. Нейрокомпьютинг в задачах системно-структурного строительного материаловедения // Рациональный эксперимент в материаловедении. Мат-лы межд. сем. МОК'39. – Одесса: Астропринт, 2000. – С. 8-9.
45. Topçu I.B., Sandemir M. Prediction of compressive strength of concrete containing fly ash using artificial neural networks and fuzzy logic. – Computational Materials Science, V. 41, No. 3, 2008. – P. 255-430.
46. Topçu I.B., Sandemir M. Prediction of mechanical properties of recycled aggregate concretes containing silica fume using artificial neural networks and fuzzy logic. – Computational Materials Science, V. 42, No. 1, 2008. – P. 74-82.
47. Erdik T. Discussions on papers [45-46]. – Computational Materials Science, V. 44, No. 3, 2009. – P. 1022-1024.
48. Brouwers H.J.H., Van Eijk R.J. Simulations of cement-hardening in the presence of carbon using HYDRA2D // Proc. 10th Int. Congress on Chemistry of Cement, Gothenburg, 1997. – V.2. – 2ii052, 8 pp.
49. Bentz D.P. Three-dimensional computer simulation of Portland cement hydration and microstructure development. – Journal of the American Ceramic Society, V. 80, No. 1, 1997. – P. 3-21.
50. Bentz D.P., Snyder K.A., Stutzman P.E. Hydration of Portland cement: the effects of curing conditions // Proc. 10th Int. Congress on Chemistry of Cement, Gothenburg, 1997. – V.2. – 2ii078, 8 pp.
51. Chen W., Brouwers H.J.H. The reaction of slag in cement: theory and computer Modelling // Proc. 16 Ibausil. – Weimar (Germany), 2006. – V. 1. – P. 1-0445-0454.
52. Chernyavsky V.L., Dubnitsky V.Y. The investigation of cement concrete corrosion by an imitation model // Proc. 10th Int. Congress on Chemistry of Cement, Gothenburg, 1997. – V.4. – 4iv071, 9 pp.
53. Чернявский В.Л. Адаптация абиотических систем: бетон и железобетон. – Днепр-ск: Издательство Днепр-ского нац. у-та ж.-д. трансп. им. акад. В. Лазаряна, 2008. – 415 с.
54. Roelfstra P.E., Sadouki H., F.H. Wittmann, Le beton numerique. – Materials and Structures, V. 18 [107], Issue 5, 1985. – P. 327–335.
55. Bentz D.P., Garbotci E.J., Jennings H.M., Quenard D.A. Multi-scale digital-image-based modeling of cement-based materials // Microstructure of Cement-Based Systems / Bonding and Interfaces in Cementitious Materials. – Materials Research Society, V. 370, Pittsburgh, 1995. – P. 33-42.

56. Харитонов А.М. Структурно-имитационное моделирование в исследованиях цементных композитов. – Автореф. дис. д.т.н.: 05.23.05 / Петербургский ГУ путей сообщения. – С.-П., 2009. – 38 с.
57. Bentz D.P. Modelling cement microstructure: Pixels, particles, and property prediction. – *Materials and Structures*, V. 32, 1999. – P. 187-195.
58. Van Eijk R.J., Brouwers H.J.H. Modelling the effects of waste components on cement hydration. – *Waste management*, V. 21, No 3, 2001. – P. 279-284.
59. Кондращенко В.И. Оптимизация составов и технологических параметров получения изделий брускового типа методами компьютерного материаловедения: Автореф. дис. д.т.н.: 05.23.05 / МГУПС (МИИТ). – М., 2005. – 48 с.
60. Garbotczi E.J. The computational materials science of concrete: Past, present and future. – *American Ceramic Society Bulletin*, Vol. 92, No. 4, 2013. – P. 40-45.
61. <http://ciks.cbt.nist.gov/~bentz/phpct/cmml.html>
62. Комохов П.Г., Харитонов А.М. Многоуровневое представление структуры цементного камня с позиции компьютерного моделирования // Компьютерное материаловедение и прогрессивные технологии. Мат-лы межд. семинара МОК'47. – Одесса: Астропринт, 2008. – С. 26-29.
63. Garbotczi E.J., Bentz D.P. Computer simulation of the diffusivity of cement-based materials. – *Journal of Materials Science*, V. 27, 1992. – P. 2083-2092.
64. Ерофеев В.Т., Меркулов А.И., Митина Е.А. и др. Оптимизация композиционных материалов с использованием численного моделирования // Моделирование и оптимизация в материаловедении. Мат-лы межд. сем. МОК'43. – Одесса: Астропринт, 2004. – С. 62-64.
65. Оптимизация составов бетонов с применением численного моделирования / В.Т. Ерофеев, И.И. Меркулов, А.И. Меркулов, П.С. Ерофеев. – Саранск: Изд-во Мордовского гос. ун-та, 2006. – 100 с.
66. Ляшенко Т.В. Образ компьютерного материаловедения в журнале *Computational Materials Science* // Моделирование и вычислительный эксперимент в материаловедении. Мат-лы межд. сем. МОК'35. – Одесса, 1996. – С. 3-4.
67. Вознесенский В.А. Компьютерное материаловедение и экспериментально-статистическое моделирование в задачах технологии древесных композиционных материалов // Древесина и композиционные материалы в строительстве: Сб. реф. межд. симп. – Одесса, 1992. – С. 10-11.
68. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация в материаловедении. – К.: О-во “Знание” Украины, 1993. – 16 с.
69. Вознесенский В.А. Компьютерное материаловедение, экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация композиционных строительных материалов // Строительство в России: прогресс науки и техники. – М.: Инженерная академия РФ, 1993. – №1. – С. 98-101.
70. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. Experimental-statistical modeling in computational materials science // Proc. 3rd Int. Applied Statistics in Industry Conf., V. 1. – Wichita, KS (USA): ACG Press., 1995. – P. 287-298. <http://frabul16.wixsite.com/dvoe/publications>
71. Voznesensky V., Lyashenko T. Experimental-statistical modelling in computational materials science. – Одесса: Астропринт, 1998. – 32 с.
72. Landman U., Nieminen R. Editorial, *Computational Materials Science*, V. 1, No. 1, 1992. – P. v.
73. Garbotczi E.J. Theory and experiment for concrete: A necessary partnership // Proc. 2nd Int. Symp. on Advances in Concrete through Science and Engineering, RILEM, Quebec, 2006. – P. 31-40.
74. Garbotczi E.J., Bentz D.P. Computational Materials Science of Cement-Based Materials. – *MRS Bulletin*, V. 18, 3, 1993. – P. 50-54.
75. Bentz D.P. CEMHYD3D: A Three-Dimensional Cement Hydration and Microstructure Development Modelling Package. Version 2.0. – NIST (National Institute of Standards and Technology), Gaithersburg, Md (USA), 2000. – 233 p.

76. An electronic monograph: Modeling and Measuring the Structure and Properties of Cement-Based Materials / E.J. Garbotczi, D.P. Bentz, K.A. Snyder, et al. Available at: <https://ciks.cbt.nist.gov/~garbotczi/monograph/>
77. Garbotczi E.J., Bullard J.W., Dale P., Bentz D.P. Virtual Testing of Cement and Concrete-USA 2004. Concrete International, V. 26, No. 12, 2004. – P. 33-37. Available at: <http://ciks.cbt.nist.gov/~bentz/phpct/cmml.html>
78. Вознесенский В.А., Кровяков С.А., Ляшенко Т.В. Элементы компьютерного материаловедения при исследовании бетонов // Науково-практичні проблеми сучасного залізобетону / Будівельні конструкції. Вип. 50. – К.: НДІБК, 1999. – С. 310-318.
79. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Методы компьютерного материаловедения и технология бетона // Сучасні проблеми бетону та його технологій / Будівельні конструкції. Вип. 56. – К.: НДІБК, 2002. – С. 217-226.
80. До МОК'40 ... // Моделирование и оптимизация в материаловедении. Мат-лы межд. сем. МОК'40. – Одесса: Астропринт, 2001. – С. 189-193.
81. Ляшенко Т.В., Антонок Н.Р. МОК'35-47 – тринадцать встреч по дороге к компьютерному материаловедению // Компьютерное материаловедение и прогрессивные технологии. Мат-лы межд. сем. МОК'47. – Одесса: Астропринт, 2008. – С. 220-223.
82. Строительные материалы, 2006, №3. – Приложение: Наука № 7. – 36 с.
83. Вознесенский В.А. Оптимизация состава многокомпонентных добавок в композиты. – Киев: О-во «Знание» Укр. ССР, 1981. – 20 с.
84. Карповский Е.Я., Ляшенко Т.В., Чернецкий А.Ф. Повышение качества и эффективности исследований при использовании математической теории эксперимента. – Киев: О-во «Знание» Укр. ССР, 1981. – 26 с.
85. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Особенности планирования эксперимента и решения инженерных задач в системах «смесь I, смесь II, технология – свойства». – Заводская лаборатория, Т. 52, №12, 1986. – С. 52-53.
86. Кормош Ж., Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Планирование эксперимента и принятие решений при исследовании композитов с многофракционными заполнителями и наполнителями // Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация композиционных материалов. – Киев: УМК ВО Минвуза УССР, 1990. – С. 24-32.
87. Lyashenko T., Voznesensky V., Qawasmeh K. Experimental-Statistical Modeling and Analysis of Properties of Mortars with Additives // Proc. 13 Ibausil, Weimar, 1997, V.2. – P. 607-618.
88. Коваль С.В. Моделирование и оптимизация состава и свойств модифицированных бетонов. – Одесса: Астропринт, 2012. – 424 с.
89. Налимов В.В., Голикова Т.И. Логические основания планирования эксперимента. М.: Металлургия, 2-е изд., 1981. – 152 с.
90. Вознесенский В.А. Статистические методы планирования эксперимента в технико-экономических исследованиях. – 2-ое изд. – М.: Финансы и статистика, 1981. – 263 с.
91. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 2-е изд., 1976. – 279 с.
92. Breugel K.Van. Bridging the gap between material science and engineering practice // Concrete 2000. Economical and durable construction through excellence. – E & FN Spon, 1993. – V. 2. – P. 1677-1692.
93. Несис Е.И. Методы математической физики. – М.: Просвещение, 1977. – 199 с.
94. Политехнический словарь. Изд. 3-е – М.: Сов. энциклопедия, 1989. – 656 с.
95. Каазик Ю.А. Математический словарь. – Таллин, Валгус, 1985. – 296 с.
96. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Иванов Я.П. Экспериментально-статистические модели и вычислительный эксперимент в реологических задачах с рецептурными факторами // Технологическая механика бетона. – Рига: РПИ, 1986. – С. 63-71.
97. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. Modelling, analysis and optimization of brittle matrix composites properties fields // Brittle Matrix Composites 4. – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd., Warsaw: Institute of Economic Education, 1994. – P. 255-263.

98. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. Non-traditional experimental-statistical modelling and analysis of results for composites on alkaline binders // Alkaline Cements and Concretes : Proc. 1-st Int. Conf. – Kiev: Vipol, 1994. – V.1. – P.387-398.
99. Ляшенко Т.В. Обобщающие показатели полей свойств для разработки эффективных композитов // Строительные материалы, конструкции и инженерные системы. – Одесса, ОГАСА, 1996. – С. 172-186.
100. Вознесенский В.А. Математическая теория эксперимента и управление качеством композиционных материалов. – К.: Общ-во “Знание” Укр. ССР, 1979. – 27 с.
101. Выровой В.Н., Ляшенко Т.В. Физико-химическая механика и оптимизация композиционных материалов. – К.: Изд. общ-ва “Знание” УССР, 1987. – 19 с.
102. Ляшенко Т.В. Оптимальность искусственного материала от рождения до деградации // Оптимизация в материаловедении. Мат-лы междунар. сем-ра МОК’38. – Одесса: Астропринт, 1999. – С. 3-6.
103. Ляшенко Т.В. Структурированные экспериментально-статистические модели в компьютерном материаловедении / Модели и системы. – Харьков: Харьков. воен. ун-т., 1999. – Вып. 1. – С. 53-57.
104. Ляшенко Т.В. Компьютерные эксперименты для анализа влияния состава композита на корреляцию свойств / Наук. вісник будівництва. – Харьков: ХДТУБА, ХОТВ АБУ, 1999. – Вып. 7. – С. 83-91.
105. Ляшенко Т.В. Поля свойств строительных материалов (концепция, анализ, оптимизация) // Прогнозирование в материаловедении. Мат-лы междунар. сем. МОК’41. – Одесса: Астропринт, 2002. – С. 9-14.
106. Червяков В.А. Концепция поля в современной географии. – Новосибирск: Наука, 1978. – 149 с.
107. Берлянт А.М. Образ пространства: карта и информация. – М.: Мысль, 1986. – 240 с.
108. Вознесенский В.А., Ковальчук А.Ф. Принятие решений по статистическим моделям. – М.: Статистика, 1978. – 192 с.
109. Ляшенко Т.В. Оптимизация наполнителей полиэфирных связующих на основе моделей нового класса: Дис. канд. техн. наук: 05.23.05. – Одесса, 1984. – 234 с.
110. Баженов Ю.М. Строительные композиты гидратационного твердения // Вест. отделен. строительных наук. – М.: РААСН, 1999. – Вып. 2. – С. 27-31.
111. Brandt A.M. Cement-based Composite Materials. Mechanical Properties and Performance. – E & FN Spon, 1994. – 456 p.
112. Optimization Methods for Material Design of Cement-based Composites / Ed. A.M. Brandt. – E & FN Spon, 1998. – 328 p.
113. Выровой В.Н., Ляшенко Т.В. Физико-химическая механика и оптимизация композиционных материалов. – К.: Изд. общ-ва “Знание” УССР, 1987. – 19 с.
114. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация в материаловедении. – К.: О-во “Знание” Украины, 1993. – 16 с.
115. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. – М.: Наука, 1968. – 720 с.; 4-е изд., 1977. – 830 с.; 6-е изд., СПб: Лань, 2003. – 832 с.
116. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся вузов. – Лейпциг: Тойбнер, М.: Наука, 1981. – 720 с.; СПб: Лань, 2009. – 608 с.
117. Online Encyclopaedia of Mathematics (Edited by Michiel Hazewinkel). Springer-Verlag. www.encyclopediaofmath.org
118. Бримкулов У.Н., Круг Г.К., Саванов В.Л. Планирование экспериментов при исследовании случайных полей и процессов. – М.: Наука, 1986. – 153 с.
119. Компьютерный анализ полей однородности армированного набрызгбетона для повышения его долговечности / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Л.Г. Парамонова, О.А. Файзулина // Повышение долговечности и эффективности работы сельскохоз. зданий и сооружений: Мат-лы междунар. конф. – Челябинск, 1992. – С. 39-41.

120. Сравнительный анализ критериев неоднородности пространственно-геометрических полей свойств композитов в тонкостенных конструкциях / В.А. Вознесенский, С.В. Коваль, Т.В. Ляшенко, О.А. Файзулина // Ресурсосберегающие решения в технологии строительных материалов и конструкций. – Одесса. – 1993. – С. 3-12.
121. Voznesensky V., Koval S., Lyashenko T., Kushneruk V. The application of experimental-statistical models to multicriterion design of claydite concrete // Structural Lightweight Aggregate Concrete: Proc. Int.Symp. – Sunfiord, 1995. – P. 650-661.
122. Карабаев А.Н. Повышение вероятностных показателей качества карбамидного полимербетона для гидромелиоративного строительства: Автореф. дис. канд. техн. наук: 05.23.05 / Одес. инж.-строит. ин-т. – Одесса, 1988. – 22 с.
123. Вознесенский В.А., Карабаев А.Н. Шламы карбида кремния как наполнители полимерных композитов // Использование отходов, попутных продуктов в производстве строительных материалов. – М.: ВНИИЭСМ, 1987. – №12. – С. 3-4.
124. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V., Karapuzov E.K. Experimental-statistical modeling of polymer composites for concretes. Proc. 8th Int. Congress on Polymers in Concrete. – Ostende, 1995. – P. 337-342.
125. Lyashenko T., Voznesensky V. Modeling the influence of composition on probabilistic indices of building polymer composites quality. Proc. 9th Int. Congress on Polymers in Concrete. – Bologna, 1998. – P. 201-208.
126. Lyashenko T., Voznesensky V. The use of experimental-statistical modelling in multicriteria optimization of polymer compositions for floors. In: Proc. Int. Col. "Industrial Floors'99", Technische Akademie Esslingen, Ostfildern 1999. – P. 497-508.
127. Самитов Н.А., Соломатов В.И. Технология карбамидного полимербетона. – Ташкент: Фан, 1987. – 108 с.
128. Михайлов Н.В., Патуроев В.В., Крайс Р. Полимербетоны и конструкции на их основе. – М.: Стройиздат, 1989. – 304 с.
129. Figovsky O., Beilin D. Advanced Polymer Concretes and Compounds. – CRC Press, 2014. – 267 p.
130. Резник В.Б. Новые материалы и конструкции на основе полимеров в водохозяйственном строительстве. – Киев: Будівелник, 1987. – 176 с.
131. Lyashenko T. Brittle matrix composites optimisation on the base of structured experimental-statistical models // Brittle matrix composites 3: Proc. 3rd Int. Symp. London, New-York: Elsevier Applied Science, 1991. – P. 448-457.
132. Ляшенко Т.В. Области допустимых технологических решений в полном и локальных полях свойств композитов // Вісник Одес. ДАБА. – Одеса: Місто майстрів, 2001. – Вип. 5. – с. 75-80.
133. Вознесенський В.А. Моделі с генерированной ошибкой эксперимента для специальных критериев качества композитов // Строительные материалы, конструкции и инженерные системы. – Одесса, ОГАСА, 1996. – С. 144-155.
134. Ляшенко Т.В. Структурирование системы факторов. Структурированные ЭС-модели // Моделирование и оптимизация композитов. Мат-лы межд. сем. МОК. – Одесса: Астропринт, 2014. – С. 69-73. frabul16.wix.com/dvoe/voznensensky
135. Lyashenko T., Voznesensky V. Compromise optimisation of slag alkaline binders with computational materials science methods. Alkali Activated Materials – Research, Production and Utilization. Proc. Int. Conf. Prague, CRA, 2007. – P. 447-458. frabul16.wixsite.com/dvoe/publications
136. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Довгань А.Д. Компромиссная многофакторная оптимизация гарантированного качества шлакощелочных вяжущих (максимизация прочности и морозостойкости, минимизация расхода ресурса). – Modern Industrial and Civil Construction, 2007, т. 3, №1. – С. 5-15.
137. Вознесенский В.А., Гаврилюк В.П., Керш В.Я., Ляшенко Т.В., Ткачук А.В., Хлыцов Н.В. Автоклавный газобетон: Десятифакторное квадратичное моделирование (1981-85) и компьютерное материаловедение (2007-08) // Компьютерное материаловедение и прогрессивные технологии. Мат-лы междунар. сем. МОК'47. – Одесса: Астропринт, 2008. – С. 97-104. frabul16.wixsite.com/dvoe/publications

138. Lyashenko T.V., Voznesensky V.A., Gavriliuk V.P. Multicriteria optimisation of autoclaved aerated concrete properties and expenditure of energy resources // *Brittle Matrix Composites 9: Proc. 9th Int. Symp.* – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd., Warsaw: IFTR, 2009. – P. 219-226.
139. Вознесенский В.А., Гаврилюк В.П., Ляшенко Т.В. Газосиликат с компромиссными уровнями предела прочности и деформативности при изгибе, теплопроводности и энергоемкости твердения // *Сучасні будівельні матеріали: Вісник Донб. НАБА*, 2011-1(87). – Макеевка, 2011. – С. 91-98. frabul16.wixsite.com/dvoe/publications
140. Соха В.Г., Карапузов Е.К., Ляшенко Т.В., Крюковская С.А. Реологические характеристики и механические свойства полимерцементных растворов с полипропиленовой фиброй и VINNAPAS® 5014 F. – *Строительные материалы и изделия*, № 4, 2012. – С. 24-29.
141. Ляшенко Т.В. Алгоритм и программа расчета точных оптимальных планов на выпуклых многогранниках. – *Методы математической теории эксперимента и ЭВМ в задачах разработки материалов*. М: ЦНИИЭлектроника, серия 6, вып. 2 (115), 1978. – С.16-18.
142. Даниленко Е.Л., Ляшенко Т.В. Расчет точных оптимальных планов на выпуклых многогранниках. – *Заводская лаборатория*, 1979, т.45, №3. – С. 249-251.
143. Вучков И., Йончев Х. Планиране и анализ на эксперимента при изследване на свойствата на смеси и сплави. – *София: Техника*, 1979. – 356 с.
144. Ляшенко Т.В. Планирование эксперимента по описанию систем с группами линейно связанных входов // *Организация и автоматизация на эксперименталните изследвания*, 81. – Русе (Болгария), 1981. – С. 110-113.
145. Ляшенко Т.В. Планирование и анализ эксперимента для систем класса «состав, состав, технология – свойство» // VII всесоюзн. конф. по планированию и автоматизации эксперимента. – М.: МЭИ, 1983. – ч. II. – С. 188-189.
146. Scheffe H. Experiments with mixtures. *Journal of Royal Statistical Society*, B20, No. 2, 1958. – P. 344-360.
147. Cornell J.A. *Experiments with Mixtures: Designs, Models, and the Analysis of Mixture Data.* – John Wiley & Sons, 3rd ed., 2011. – 680 p.
148. Анализ влияния гранулометрии песка и добавок на качество мелкозернистого бетона / В.А.Вознесенский, Дао Дат, Т.В. Ляшенко, Н.В. Циганенко // *Обычные и специальные бетоны на минеральных вяжущих.* – Казань: КХТИ, 1985. – С. 39-42.
149. Методические указания по моделированию систем смеси, технология – свойства» с использованием ЭВМ в курсовом и дипломном проектировании // В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, В.В. Абакумов, А. Абдыкалыков. – Одесса: ОИСИ, 1985. – 64 с.
150. Модели «Смесь, технология – свойство» в исследованиях бетонополимеров и полимербетонов гидромелиоративного назначения / Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Резник В.Б. и др. // *Науч. исслед. по гидротехнике и мелиорации.* – К.: УкрНИИГиМ, 1990. – С. 197-204.
151. Композиционные строительные материалы и конструкции пониженной материалоемкости / В.И. Соломатов, В.Н. Выровой, В.С. Дорофеев, А.В. Сиренко. – К.: Будивельник, 1991. – 144 с.
152. Lyashenko T., Barabash I., Shinkevich E., Shcherbina S., Voznesensky V. Experimental-statistical modelling the effect of multi-fractional filler on rheological indices of compositions // *Progress and Trends in Rheology. 5th European Rheology Conf.* – Darmstad: Springer, 1998. – P. 104-105.
153. Дорофеев В.С., Выровой В.Н. Технологическая поврежденность строительных материалов и конструкций. – Одесса: Город мастеров, 1999. – 168 с.
154. Voznesenskii V.A., Lyashenko T.V. Computational experiments with experimental-statistical models for composites on alkaline binders / *Alkaline Cements and Concretes. Proc. 2nd Int. Conf.*, Kyiv, 1999. – P. 507-517.
155. Меркин А.П., Мурадов А.Н. Бесцементные отделочные составы повышенной белизны для бетонных панелей. – *Строительные материалы*, №7, 1990. – С. 18-19.

156. Методические рекомендации по оптимизации наполнителя для полимерных композитов в гидромелиоративном строительстве. – К.: УкрНИИГиМ, 1984. – 64 с.
157. Лисенко В.А. Защитно-конструкционные полимеррастворы в строительстве. – К.: Будівельник, 1985. – 132 с.
158. Voznesensky V. A., Koval S.V., Lyashenko T.V., Savchenko S.V. The estimation of synergism in hardening cement composites with modifier "mixture of silica fumes + superplasticizer" // *Mechanics and technology of composite materials. Proc. 7th Int. Conf.* – София: БАН, 1994. – P. 139.
159. Маргаль И., Вознесенский В., Коваль С., Ляшенко Т., Бойко Ш. Экспериментально-статистическое моделирование и анализ полей свойств бетона // *Problemy budownictwa: 4 conf. – cz. 1 – Rzeszow*, 1995. – С. 219-225.
160. Шинкевич Е.С., Ляшенко Т.В., Чесский Ю.В. Моделирование и анализ влияния дисперсности минеральных добавок на свойства активированных силикатных композиций // *Прогнозирование в материаловедении. Мат-лы междунар. сем-ра МОК'41.* – Одесса, Астропринт, 2002. – С. 15-17.
161. Ляшенко Т.В. Опыт синтеза специальных планов при исследовании многокомпонентных систем // *Математические методы планирования эксперимента: Тез. респ. конф.* – Киев: РДНТП, 1991. – С. 31.
162. Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация вероятностных показателей качества композиционных материалов / В.А. Вознесенский, С.В. Коваль, Т.В. Ляшенко Т.В., В.А. Феофанов. – К.: Общ-во «Знание» Украины, 1991. – 32 с.
163. Ляшенко Т.В., Пищева Т.И., Крюковская С.А., Огарков Б.Л. Влияние полимерной фибры на тиксотропию полимерминеральных композиций для ремонта железобетонных конструкций // *Будівельні конструкції: Сучасні технології бетону.* – К.: НДІБК, 2009. – Вип. 56. – С. 392-399.
164. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Крюковская С.А., Пищева Т.И. Влияние полимерной фибры на эффективную вязкость полимерминеральных композиций при разных скоростях сдвига // *Сучасні будівельні матеріали: Вісник Донб. НАБА*, 2010-1(81). – Макеевка, 2010. – С. 226-232.
165. Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д. Прикладная статистика: Исследование зависимостей. – М.: Финансы и статистика, 1985. – 487 с.
166. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизация эксперимента в химической технологии. 2-е изд. – М.: Высшая школа, 1985. – 327 с.
167. Большев Л.Н., Смирнов Н.В. Таблицы математической статистики. – 3-е изд. – М.: Наука, 1983. – 416 с.
168. Ляшенко Т.В. Концепция полей свойств – методическая основа извлечения информации из ЭС-моделей в компьютерном материаловедении // *Вісник Одес. ДАБА. – Одеса, Місто майстрів*, 2003. – Вип. 12. – С. 171-179.
169. Ляшенко Т.В. Статистические испытания на полях свойств строительных материалов // *Зб. наук. пр. Луганського національного аграрного університету.* – Луганск: Видавництво ЛНАУ, 2004. – № 40(52). – С. 249-256.
170. Lyashenko T.V. Composition-process fields methodology for design of composites structure and properties // *Brittle Matrix Composites 11.* – Insitute of Fundamental Technological Research PAS, 2015. – P. 289-298.
171. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Соха В.Г., Карапузов Е.К. Элементы компьютерного материаловедения при поиске составов сухих смесей для фиброполимерцементных композитов с компромиссными уровнями прочности и усадки. – *Строительные материалы и конструкции*, №4, 2004. – С. 16-19.
172. *Quality Control of Concrete Structures: Proc. 2nd Int. RILEM/CEB Symp.* – E & FN Spon, 1991. – 567 p.
173. *Guidebook on non-destructive testing of concrete structures.* – Vienna: Int. Atomic Energy Agency, 2002. – 242 p.

174. Emerging Technologies in Non-Destructive Testing VI: Proc. 6th Int. Conf. (Brussels, 27-29 May 2015), CRC Press, 2015. – 578 p.
175. Lyashenko T., Voznesensky V., Boiko S., Shtakelberg D. Experimental-statistical modeling and analysis of the chain "composition – NMR-signal – properties" of cement. Proc. 10th Int. Congress on Chemistry of Cement, V.3. – Gothenburg, 1997. – P. 4v003, 8 p.
176. Boiko S.V., Shtakelberg D.I., Osipov B.M., Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. Control of structural state of concrete in process of hardening by means of NMR method. Non-destructive Testing and Experimental Stress Analysis of Concrete Structures. Proc. 7th RILEM conf., Bratislava, 1998. – P. 105-109.
177. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Бойко Ш., Муравин Г. Многомерные градуировочные зависимости в системе «механические свойства - акустическая активность твердеющего бетона» // Моделирование и вычислительный эксперимент в материаловедении. Мат-лы межд. сем. МОК'35. – Одесса, Астропринт, 1996. – С. 7-8.
178. Баракхис В.А., Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Николов И.И., Новак В.И. Оптимизация состава полимербетона для демпфирования динамических нагрузок агропромышленного оборудования // Повышение долговечности конструкций сельскохозяйственных зданий и сооружений. Междун. сб. науч. тр. – Новосибирск, 1994. – С. 6-20.
179. Ляшенко Т.В., Вознесенский В.А., Пищева Т.И., Иванов Я. Вычислительные эксперименты при анализе корреляции полей реологических показателей композиций // Моделирование и оптимизация в материаловедении. Мат-лы межд. сем. МОК'40. – Одесса, Астропринт, 2001. – С. 7-9.
180. Использование метода Монте-Карло при анализе взаимосвязи между полями реологических показателей композиций для отделочных работ / Т.В. Ляшенко, В.А. Вознесенский, Т.И. Пищева, Я. Иванов // Вісник Одес. ДАБА. – Одесса: Місто майстрів, 2001. – Вип. 3. – С. 57-64.
181. Lyashenko T., Voznesensky V., Ivanov Y. Modelling the influence of mix proportions on correlation between destruction pace and thixotropy of suspensions. Abstracts: 3rd Int. Meeting of the Hellenic Society of Rheology, Patras (Greece), 2001. – P. 76.
182. Lyashenko T., Voznesensky V., Ivanov Ya., Pischeva T. On the use of Monte Carlo method for the analysis of the interrelation between rheological characteristics of finishing composites // Proc. Balkan Seminar on Rheology & 9th Nat. Rheological Workshop. – Sofia: Bulgarian Academy of Science, 2001. – P. 49-58.
183. Крамер Г. Математические методы статистики. – М.: Мир, 1975. – 648 с.
184. Хальд А. Математическая статистика с техническими приложениями. – М.: ИЛ, 1956. – 664 с.
185. Fisher R. On the "probable error" of a coefficient of correlation deduced from a small sample. – Metron, 1, part 4, 1921. – P. 3-32.
186. РАО С.Р. Линейные статистические методы и их применение. М.: Наука, 1968. – 548 с.
187. Lyashenko T.V., Voznesensky V.A. Modeling and analysis of varying correlation between properties of brittle matrix composites // Brittle Matrix Composites 5: Proc. V Int. Symp. – Warsaw: Woodhead Publ. Ltd. – 1997. – P. 417-426.
188. Ляшенко Т.В., Вознесенский В.А. Методы компьютерного материаловедения при анализе взаимосвязи реологических показателей композиций // Вісник Дон. ДАБА. Композиційні матеріали для будівництва. – Макіївка: Дон. ДАБА, 2001. – Вип. 2001-1(26). – С. 67-74.
189. Lyashenko T.V. Does abrasion resistance correlate to strength? Bulletin of Odessa State Academy of Civil Engineering and Architecture, 64, 2016. – P. 153-159.
<http://mx.ogasa.org.ua/bitstream/123456789/589/1/Does%20abrasion%20resistance%20correlate%20to%20strength.pdf>
frabul16.wixsite.com/dvoe/publications
190. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Мастеренко Е.В., Бойко Ш. Трансформация взаимосвязи между пределом прочности и модулем упругости бетона при разных парах градиентных факторов // Компьютерное материаловедение и обеспечение качества. Мат-лы междун. сем. МОК'36. – Одесса, Астропринт, 1997. – С. 10-11.

191. Соколова Ю.А., Готлиб Е.М. Модифицированные эпоксидные клеи и покрытия в строительстве. – М.: Стройиздат. – 1990. – 176 с.
192. Соломатов В.И., Бобрышев А.Н., Химмлер К.Г. Полимерные композиционные материалы в строительстве. – М.: Стройиздат, 1988. – 312 с.
193. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Кривенко П.В., Пушкарева Е.К., Мхитарян Н.М., Станецкий Г.С. Анализ на основе вычислительных экспериментов влияния состава жаростойкого бетона на взаимосвязь пределов его прочности при 800 и 1000 °С // Моделирование в материаловедении: Мат-лы межд. сем. МОК'37. – Одесса: Астропринт, 1998. – С. 5-9.
194. Lyashenko T., Voznesensky V., Krivenko P., Mkhitaryan N., Pushkareva E., Stanetskiy G. Correlation between heat-resistant concrete strength at 800 and 1000°C // Рациональный эксперимент в материаловедении: Мат-лы межд. сем. МОК'39. – Одесса: Астропринт, 2000. – С. 5-9.
195. Shapetko S.V. Studies of hydration process and structure formation in system CA-CA₂-MgO-Cr₂O₃-Na₂O-mSiO₂-nH₂O // Alkaline Cements and Concretes. Proc. 1st Int. Conf. – Kiev, Vipol, 1994, V.1. – P. 493-504.
196. Вознесенский В.А., Кровяков С.А., Ляшенко Т.В. Вычислительные эксперименты при оценке взаимосвязи показателей прочности, упругости и трещиностойкости водонасыщенного бетона//Гидротехнические сооружения. Морские и речные порты: Сб. науч. тр. – Одесса: ОГАСА, 1999. – Вып. 2. – С. 11-16.
197. Lyashenko T., Voznesensky V., Krovvyakov S. Analysis of water effect on fracture toughness in cement-based composites using computational materials science methods // Brittle Matrix Composites 6. Proc. 6th Int. Symp. BMC6. – Warsaw: Woodhead Publ. Ltd., ZTUREK RSI, 2000. – P. 210-219.
198. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Щерев Щ., Абаджиева Ц. Вычислительные эксперименты при анализе влияния легирующих ингредиентов покрытия электрода на критерии появления горячих трещин при сварке. – Металеві конструкції, 1998, Т. 1, № 1. – С.55-60.
199. Щерев Щ., Ляшенко Т.В. Оценка влияния ингредиентов покрытия электрода на взаимосвязь критериев технологической прочности сварного шва // Оптимизация в материаловедении. Мат-лы междунар. сем. МОК'38. – Одесса: Астропринт, 1999. – С. 25-28.
200. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Рецептурно-технологические поля свойств материала в компьютерном строительном материаловедении. Строительные материалы, 2006, №3 – Приложение: Наука № 7 – С. 8-11.
201. Анализ взаимосвязи коэффициентов водо- и нефтестойкости модифицированного эпоксидного композита методами компьютерного материаловедения / Ляшенко Т.В., Довгань А.Д., Вознесенский В.А., Лауринавичус А., Подагелис И. // Вісник ОДАБА. – Одеса: «Місто майстрів», 2005. – Вип.. № 20. – С. 196-204.
202. Lyashenko T., Voznesensky V., Dovgan A., Podagelis I. Correlation between bending resistance of epoxy composite specimens maintained in water and in petroleum // Brittle Matrix Composites 8: Proc. 8th Int. Symp. BMC8. – Warsaw: Woodhead Publ. Ltd., ZTUREK, 2006. – P. 459-466.
203. Ляшенко Т.В., Гара А.А. Трансформации корреляции свойств защитных эпоксикаучуковых композитов // Современные строительные конструкции из металла и древесины. – Одесса: ОГАСА, 2011. – №15, Ч. 2. – С. 130-135.
204. Ляшенко Т.В., Крюковская С.А., Довгань А.Д. Прочность полимерцементных композитов с короткой полимерной фиброй // Современные строительные конструкции из металла и древесины. – Одесса: ОГАСА, 2011. – №15, Ч. 3. – С. 125-129.
205. Ляшенко Т.В., Воронов Ю.Н., Крюковская С.А. Динамический модуль упругости полимерцементных композитов с короткой полимерной фиброй // Вісник ОДАБА. – Одеса: Зовнішрекламсервіс, 2011. – Вип. 44. – С. 174-180.
206. Lyashenko T., Kersh V., Kersh D. Modelling the effect of composition on the properties of gypsum concrete containing cenospheres // Proc. 18 Ibausil. – Weimar (Germany), 2012. – V. 1. – P. 1-0416-0423.

207. Керш Д. В., Ляшенко Т.В. Анализ влияния состава на свойства сферогипсобетона // Вісник ОДАБА. – Одеса: Зовнішрекламсервіс, 2013. – Вип. 50. – С. 131-136.
208. Aïtcin P.-C. High Performance Concrete. – CRC Press, 1998. – 624 p.
209. Aïtcin P.-C. Binders for Durable and Sustainable Concrete. – Taylor & Francis, 2007. – 528 p.
210. ACI 213R-03. Guide for Structural Lightweight-Aggregate Concrete. – American Concrete Institute, 2003. – 38 p.
211. Holm T.A., Ries J.P. Specified Density Concrete – a Transition for the Concrete Industry. – Expanded Shale, Clay & Slate Institute (ESCSI, United States), 2005. – 10 p.
212. Aroni S. Autoclaved Aerated Concrete – Properties, Testing and Design. – CRC Press, 1993. – 428 p.
213. Figovsky O., Beilin D. Advanced Polymer Concretes and Compounds. – CRC Press, 2013. – 267 p.
214. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Иванов Я.П. Анализ подобия изменений механических свойств полимерных композитов под влиянием дисперсного наполнителя // Механика композитных материалов. – Рига: Зинатне, 1983. – №6. – С. 1122-1124.
215. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Иванов Я.П. Влияние гранулометрии дисперсного наполнителя на реологические и другие свойства связующих для композиционных строительных материалов // Технологическая механика бетона: Сб. науч. тр. – Рига: РПИ, 1984. – Вып. 9. – С. 70-78.
216. Вознесенский В.А., Иванов Я.П., Ляшенко Т.В., Соломатов В.И. Анализ эффективной вязкости наполненной полимерной системы на основе моделей «смесь I, смесь II, технология – свойства» // Физико-химическая механика дисперсных структур: Сб. тр. – Киев: Наукова думка, 1986. – С. 122-128.
217. Моделирование влияния рецептурно-технологических и эксплуатационных факторов на вероятностные показатели качества композитов / С.В. Рябых, В.А. Вознесенский, С.В. Коваль, Т.В. Ляшенко // Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация композиционных материалов: Сб. науч. тр. – Киев: УМК ВО Минвуза УССР, 1990. – С. 4-12.
218. Вознесенский В.А., Коваль С.В., Ляшенко Т.В., Рябых С.В., Феофанов В.А. Изопараметрический анализ кинетики изменения вероятностных показателей водопоглощения мелкозернистого бетона с полифункциональной добавкой // Межвуз. сб. – Казань, 1990. – С.54-60.
219. Lyashenko T., Voznesensky V., Boiko S., Shtakelberg D. Analysis of concrete property fields and search for the best compositions using Monte Carlo method // Brittle Matrix Composites 7. – Cambridge and Warsaw: Woodhead Publ. Ltd., ZTUREK RSI, 2003. – P. 351-358.
220. Lyashenko T.V., Dovgan A.D. Isoparametric analysis when studying composite materials. Bulletin of Odessa State Academy of Civil Engineering and Architecture , 66, 2017. – P. 72-78. www.researchgate.net/publication/316716645_Isoparametric_analysis_when_studying_composite_materials
<http://frabul16.wixsite.com/dvoe/publications>
221. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Довгань А.Д. Изопараметрический анализ в компьютерном материаловедении строительных композитов // Зб. наук. пр. Луганського національного аграрного університету. – Луганск: Видавництво ЛНАУ, 2004. – № 40(52). – С. 240-248.
222. Изопараметрический анализ эксплуатационных свойств композитов на смоле «Макро», работающих в контакте с нефтепродуктами / В.А. Вознесенский, А.Д. Довгань, Т.В. Ляшенко, И. Подагелис, А.Б. Шаршунов // Моделирование и оптимизация в материаловедении. Мат-лы 42-го междунар. сем. МОК'42. – Одесса, Астропринт, 2003. – С. 43-45.
223. Наполнители для полимерных композиционных материалов / Под ред. Г.С. Каца, Д.В. Милевски. – М.: Химия, 1981. – 736 с.
224. Анализ на структурообразующата роля напълнителите в течен и втвърден полимерен композит / Я.П. Иванов, В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, В.И. Соломатов // Физико-химическа механика. – София: БАН, 1986. – Кн. 13. – С. 6-14.
225. Инвариантность основных закономерностей влияния гранулометрии наполнителей на эффективную вязкость полимерных связующих / В.А. Вознесенский, Я.П. Иванов, Т.В. Ляшенко и др. // Механика и технология композиционных материалов: IV нац. конф. – София: БАН, 1985. – С 49-52.

226. Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей. Спр. изд. / под ред. Налимова В.В. – М.: Металлургия, 1982. – 752 с.
227. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Полиmodalность распределения толщины межзеренных слоев как причина уменьшения эффективной вязкости / Реология бетонных смесей и ее технологические задачи: Тез. докл. VI всесоюз. симпоз. – Рига, 1989. – С. 92-94.
228. Липатов Ю.С. Физическая химия наполненных полимеров. – М.: Химия, 1977. – 304 с.
229. Липатов Ю.С. Межфазные явления в полимерах. – К.: Наук. думка, 1980. – 260 с.
230. Ляшенко Т.В., Коваль С.В. Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация многокомпонентных рецептурно-технологических систем. – Киев: Общество «Знание» Украинской ССР, 1990. – 16 с.
231. Ляшенко Т.В., Довгань А.Д., Шаршунов А.Б. Изопараметрический анализ на полях свойств модифицированного эпоксидного композита // Вісник Одес. ДАБА. – Одесса: Місто майстрів, 2004. – Вип. 13. – С. 101-107.
232. Вознесенский В.А., Довгань А.Д., Ляшенко Т.В. Анализ влияния состава на прочность эпоксидного композита на основе концепции полей свойств материалов // Современные материалы и технологии в строительстве: Международ. сб. науч. тр. – Новосибирск, 2003. – С. 5-7.
233. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Компьютерный анализ свойств материала и факторов его получения при линейном изменении одного из критериев качества // Компьютерное материаловедение и прогрессивные технологии. Мат-лы междунар. сем. МОК'47. – Одесса: Астропринт, 2008. – С. 3-7.
234. Ляшенко Т.В. Анализ свойств эпоксидного композита в вычислительном эксперименте на локальных полях с нелинейными границами // Вісник ОГАСА. – Одеса, ОДАБА, 2005. – Вип. 18 – С. 131-137.
235. Ляшенко Т.В., Вознесенский В.А. Анализ свойств строительных композитов на многофакторных локальных рецептурных полях с критериальными границами // 36. наук. пр. Луганськ. нац. аграр. ун-ту. – Луганск: Видавництво ЛНАУ, 2007. – № 71(94). – С. 182-188.
236. Кровяков С.А. Анализ влияния демпфирующих частиц на трещиностойкость композитов в сухом и водонасыщенном состоянии с использованием пропорциональных критериальных шкал // Компьютерное моделирование и прогрессивные технологии. Мат-лы междунар. сем. МОК'47. – Одесса: Астропринт, 2008. – С. 61-63.
237. Николов И., Барахим А. Композити за демпферни слоеве в строителни конструкции. – Физико-химическа механика, 22. – София: БАН, 1993. – С. 58-66.
238. Айвазян С.А., Енюков Е.С., Мешалкин Л.Д. Прикладная статистика: Основы моделирования и первичная обработка данных. – М.: Финансы и статистика, 1983. – 471 с.
239. NIST/SEMATECH e-Handbook of Statistical Methods.
<http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/pri/section5/pri5322.htm>
240. Optimization of polymer concrete composites: final report / L. Czarnecki, A. Garbacz, P. Lukowski, J.R. Clifton. – NIST Report (NISTIR 6361), 1999. – 59 p.
241. Czarnecki L., Lenarcik A., Lukowski P., Piasta Z. A multicriteria optimization of epoxy concrete using the desirability function approach // Brittle Matrix Composites 4. – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd., Warsaw: Institute of Economic Education, 1994. – P. 245-254.
242. Czarnecki L., Garbacz A., Sokołowska J.J. Fly Ash Polymer Concretes. Proc. 2nd Int. Conf. on Sustainable Construction Materials and Technologies (SCMT), Ancona, 2010. – P. 127-137.
243. Czarnecki L., Sokołowska J.J. Optimization of polymer-cement coating composition using material model. Key Engineering Materials, V. 466, 2011. – P. 191-199.
244. Ляшенко Т.В., Гара Ан.А. Компромиссная оптимизация эпоксидных композиций по прочности в разных средах // Современные строительные конструкции из металла и древесины. – Одесса, ОГАСА, 2008. – С. 185-190.
245. Lyashenko T., Gara A., Podagelis I., Gailiene I. Epoxy compositions for protecting road structure units in contact with water-oil mixtures. Environmental Engineering. Vilnius, 2008. – V. 3. – P. 1186-1192.

246. Вознесенский В.А., Гаврилюк В.П., Ляшенко Т.В. Сравнительный анализ результатов компромиссной оптимизации автоклавных газобетонов Д-800 различных классов прочности // Вісник ОДАБА. – Одеса: «Місто майстрів», 2008. – Випуск № 31. – С. 72-79.
247. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Гаврилюк В.П. Компьютерный поиск компромисса между теплопроводностью, механическими свойствами и энергоемкостью ячеистых материалов // Будівельні матеріали, вироби та санітарна техніка. – К.: Товариство «Знання» України, 2009. – Вип. 32. – С. 16-21.
248. Voznesensky V., Lyashenko T., Gavrilyuk V. Compromise optimisation of heat insulating and mechanical properties of high performance autoclaved aerated concrete // Proc. 17 Ibausil. – Weimar (Germany), 2009. – V. 2. – P. 2-1181-1186.
<http://frabul16.wixsite.com/dvoe/publications>
249. Вознесенский В.А., Гаврилюк В.П., Ляшенко Т.В., Тымняк А.Б. Связь результатов компромиссной оптимизации с нормативами по плотности и прочности газобетона // Вісник ОДАБА. – Одеса: Зовнішрекламсервіс, 2009. – Випуск № 35. – С. 56-63.
250. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Гаврилюк В.П. Компромиссная оптимизация свойств газосиликата при дискретных равномерно распределенных уровнях девяти рецептурно-технологических факторов // Сучасні будівельні матеріали : Вісник Донб. НАБА, 2009-1(75). – Макіївка, 2009. – С. 139-146.
251. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Гаврилюк В.П. Поиск компромиссных решений случайным сканированием полей свойств газосиликата // Наук. вісник Луганського нац. аграрного університету. – Луганськ: Видавництво ЛНАУ, 2010. – № 14. – С. 137-148.
252. Lyashenko T., Voznesensky V., Dovgan A., Podagelis I., Sharshunov A. Design of repair compositions for concrete by workability and durability criteria with methods of Computational materials science. Proc. Int. Conf. Life Cycle 2004. – Brno, 2004. – P. 112-117.
<http://frabul16.wixsite.com/dvoe/publications>
253. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Гаврилюк В.П. Анализ вариантов обратной задачи на заключительных этапах компромиссной оптимизации газосиликата // Вісник ОДАБА. – Одеса: Зовнішрекламсервіс, 2010. – Вип. № 39, Ч. 1. – С. 70-76.
254. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Руссу И.В. Ветвящийся поиск компромиссного состава четырехкомпонентной добавки в бетон с гарантированными уровнями нормируемых критериев качества // Вісник ОДАБА. – Одеса: «Місто майстрів», 2006. – Вип. № 23. – С. 11-19.
255. Антонюк Н.Р., Вознесенский В.А., Довгань А.Д., Ляшенко Т.В., Мартынов Е.В. Пенобетон с компромиссными уровнями свойств – «анклавы» составов, обнаруживаемые компьютерным поиском // Моделирование и оптимизация в материаловедении. Мат-лы междунар. сем. МОК'44. – Одесса: Астропринт, 2005. – С. 44-47.
256. Многофакторные ЭС-модели с переменной канонической формой прабол (анализ критериев качества пенобетона) / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, В.И. Мартынов, Е.В. Мартынов // Моделирование в компьютерном материаловедении. Мат-лы междунар. семинара МОК 46. – Одесса: Астропринт, 2007. – С. 90-95.
257. Комбинированный поиск компромиссных решений случайным сканированием и совмещением диаграмм полей свойств материала (пенобетон неавтоклавного твердения) / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, В.И. Мартынов, Е.В. Мартынов // Вісник ОДАБА. – Одеса: Місто майстрів, 2007. – Випуск № 27. – С. 68-77.
258. Experimental-statistical modeling and analysis of concrete properties fields / V.A. Voznesensky, T.V. Lyashenko, E.V. Masterenko, S. Boiko // Proc. VI Scientific Conf., Koshice, 1997. – P. 66-71.
259. Rusu I. Coroziunea și protecția betonului expus mediilor lichide alimentare. – Chișinău, Primexcom, 2004. – 151 p.
260. Русу И.В. Коррозионная стойкость и защита бетона конструкций предприятий по переработке плодов и овощей. Автореф. дис. д-ра. техн. наук. – Кишинэу, 2005. – 54 с.

261. Voznesensky V., Lyashenko T., Sokha V., Karapuzov E. Search for optimal compromise compositions of fibrous polymer-cement dry mixes with computational materials science methods // Proc. 16 Ibaasil. – Weimar (Germany), 2006. – V. 2. – P. 2-0327-0334.
<http://frabul16.wixsite.com/dvoe/publications>
262. Урьев Н.Б., Иванов Я.П. Структурообразование и реология неорганических дисперсных систем и материалов. – София: БАН, 1991. – 210 с.
263. Koval S., Gedulyan S. Search of multicomponent compositions of repair composites during computational experiment // EUREKA: Physical Sciences and Engineering. – Tallin : OÜ «Scientific Route», 2015. – №1. – P. 16-21.
264. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Довгань А.Д., Подагелис И., Шаршунов А.Б. Компромисная минимизация полимероемкости и максимизация водо- и нефтестойкости защитного композита // Ресурсоекономні матеріали, конструкції, будівлі та споруди. – Рівне: УДУВГП, 2004. – Вип. 11. – С.11-16.
265. Ляшенко Т.В., Довгань А.Д., Гара Ан.А., Подагелис И. Компьютерный поиск составов модифицированного эпоксидного композита, работающего в контакте с нефтью // Совершенствование качества строительных материалов и конструкций (модели, составы, свойства, эксплуатационная стойкость. – Новосибирск, 2005. – С. 18-21.
266. Вознесенский В.А., Гаврилюк В.П., Ляшенко Т.В. Компьютерный поиск компромиссных параметров энергосберегающей технологии высококачественного газосиликата марки Д500 // Сучасні тенденції розвитку і виробництва силікатних матеріалів. – Львів, 2008. – С. 12-15.
267. 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, Л.И. Острат, В.А. Вознесенский, В.Я. Керш, Н.В. Хлыцов // Производство и применение силикатных бетонов. – Таллин, НИПИ Силикатобетон, 1985. – С. 5-34.
268. Методы компьютерного материаловедения при оптимизации биотехнологии пресованных древопластиков / В.И. Кондращенко, В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко и др. // Науковий вісник будівництва. – Харків: ХДТУБА, 2005. – Вип. 34. – С. 136-141.
269. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Меркин А.П. Поиск компромиссных составов и режимов твердения олигомер-полимерного композита на полях свойств различной размерности // Компьютерное материаловедение и обеспечение качества: Мат-лы 45-го междуна. сем. МОК'45. – Одесса, Астропринт, 2006. – С. 38-42.
270. Керш Д.В., Ляшенко Т.В. Оптимизация состава сферогипсобетона // Строительные материалы, изделия и санитарная техника, 2013. – №48. – С. 149-153.
271. Ляшенко Т.В., Керш В.Я., Колесников А.В. ЭС-модели и многокритериальная оптимизация при разработке теплоизоляционных гипсовых штукатурных композиций // Вісник ОДАБА, 2015. – Вип. 54. – С. 134-138.
272. Lyashenko T., Kersh V., Kolesnikov A. Heat-insulating gypsum based plaster compositions. Proc. Int. Conf. 19 ibausil, Weimar (Germany), 2015. – P. 1-783-790.
273. Ляшенко Т.В. О нейронных сетях и экспериментально-статистическом моделировании // Мат-лы междуна. сем. Modelling and Optimization of Building Composites. – Одесса, 2016. – С. 86-90.
<http://mx.ogasa.org.ua/handle/123456789/382> <http://frabul16.wixsite.com/dvoe/publications>
274. Anderson C. The end of theory: the data deluge makes the scientific method obsolete // Wired Magazine, 2008. wired.com/science/discoveries/magazine/16-07/pb_theory
275. Asimov I. The Last Question // Nine Tomorrows: Tales of the Near Future.
<https://www.physics.princeton.edu/ph115/LQ.pdf>

ОБ ИСТОРИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Т.В. Ляшенко

В строительном материаловедении эксперимент, главный источник информации, как правило, ресурсоемкий (по материальным затратам, по протяженности во времени процессов структурообразования и деструкции). Вероятно, это одна из причин того, что в этой области исследований сформировалась и широко применяется методология Экспериментально-Статистического Моделирования. Термин появился в написанной В.А. Вознесенским блестящей (по глубине, новизне, масштабу обобщения и конкретизации условий и задач, тонкости методического инструментария) первой главе книги [1]¹.

Глава называется «Системный подход, эксперимент и моделирование – триединая основа оптимизации рецептурно-технологических решений». В ней сформулированы аспекты, принципиально важные для развития материаловедения и прогрессивных технологий, положение о необходимости и принципы решения оптимизационных задач. Показана взаимосвязь между основными подсистемами технологии композиционных материалов, рассматриваемой как сложная стохастическая система [2-4]. Названы и проанализированы 7 связанных с моделированием рисков аналогии. Определены основные пункты стратегии и приведена циклическая схема анализа и оптимизации композиционных материалов (конкретизируя общие положения, сформулированные в [4] и ранее). Приведены постановки и решения 17 задач, «решаемых по одной модели».

ЭС-моделирование, ЭСМ – это совокупность представлений, методов и алгоритмов, которая *связывает* математическое планирование эксперимента, регрессионный анализ и другие средства прикладной статистики с содержательным анализом моделей и *направлена* на наиболее полное извлечение из опытных данных информации об исследуемом объекте (системе) [1, 5-9]. Этот комплекс средств исследования² включает четыре основных блока взаимосвязанных действий.

1. Определение, обоснованный выбор условий эксперимента, его «предпланирование» [4, 11-12], «метризация» [13]. Отбор (на основе системного подхода) варьируемых в эксперименте факторов (управляемых входов, уровни которых могут быть назначены, зафиксированы) и измеряемых критериев (вы-

* Статья из сборника: Моделирование и оптимизация композитов. Мат-лы к междунар. семинару МОК, посвященному 80-летию Виталия Анатольевича Вознесенского, Одесса, 22-23.04.2014. Ссылки в тексте на список литературы в конце статьи.

¹ Возможно, термин встречается и в более ранних работах В.А. Вознесенского. В главе VI той же книги [1] описан 1-ый вариант известной системы СОМПЕХ, реализованный в виде комплекса разработанных Т.В. Ляшенко программ (ДОС ЕС, Фортран).

² Часть из них соответствуют известной в США «Методологии поверхности отклика» [10].

ходов, откликов, свойств объекта), а также определение диапазонов варьирования проводятся с учетом физико-химических, технологических и других априорных по отношению к данному эксперименту знаний. Все это согласуется с его методическими и метрологическими особенностями, инструментальными возможностями исследования объекта.

2. Планирование оптимального многофакторного эксперимента [1, 4, 6, 11, 14-18]. Учитываются структура вектора факторов, рациональная для данной задачи форма регрессионной модели, заранее заданные «технологом» обязательные опыты (при определенных сочетаниях уровней факторов) и «запрещенные» зоны факторной области [1, 5-7, 19-23].

3. Построение по опытным данным регрессионных моделей, очищенных от статистически незначимых эффектов и признаваемых адекватными результатам эксперимента (при принятом риске или уровне погрешности); в ряде ситуаций допустимо использовать алгоритм «с генерируемой ошибкой эксперимента» [8, 24-25].

4. Решение научных и технологических задач по каждой отдельной ЭС-модели и их комплексу [1, 5-6, 8], с помощью специальных средств визуализации («квазиоднофакторных» кривых, диаграмм «квадраты на квадрате», «треугольники на квадрате» и т.д.). Это задачи анализа, интерпретации, оптимизации; более 20 из них – типовые: определение допустимых и оптимальных решений, минимизация ресурсов, оценка роли факторов, оценка доверительных интервалов для инженерных рекомендаций и др.

Введенное в книге [1] понятие рассмотрено с философской точки зрения в работах [26-27] и вошло как одно из основополагающих в учебник [6]. Необходимость экспериментальной базы для перехода от теоретических представлений к конкретным композиционным материалам и их многокомпонентность делают ЭС-модели **незаменимым инструментом** при их разработке. Корректное ЭС-моделирование **обеспечивает** [5]: **а)** минимизацию интеллектуальных, временных и материальных ресурсов **при поиске** требуемого инженерного решения в сложной технологической ситуации; повышение достоверности и информативности экспериментальных исследований; **б)** улучшение качества и **конкурентоспособности продукта**, ресурсосбережение при обеспечении многокритериальных требований к качеству.

Идеологическое и методическое ядро ЭС-моделирования – **планирование эксперимента** (ПЭ), теоретической основой которого является математическая теория эксперимента (МТЭ). Идея планировать многофакторный эксперимент, для агробиологических опытов, принадлежит Р. Фишеру (конец 1920-х, моно-

графия – 1935, [28]). Для химико-технологических и физико-технических исследований методика моделирования на основе математической статистики и других разделов математики впервые была изложена в 1951 г. (G. Vox, K. Wilson [29]). В последующее двадцатилетие Дж. Бокс и его сотрудники в Принстонском и Висконсинском университетах, хорошо понимая проблемы экспериментаторов, разработали варианты ПЭ в зависимости от изученности объекта, постановки задачи, характера факторов, метрологических возможностей, что нашло отражение в фундаментальной работе [30].

В СССР идеологом и организатором широкого применения ПЭ практически во всех областях науки и техники, а также развития МТЭ был Василий Васильевич Налимов [31-34], создавший в 60-70 годах плодотворную научную школу, в которую неформально входили группы из МГУ им. Ломоносова, Совета по кибернетике АН СССР, Гиредмета, МЭИ и др. Участники этого «незримого коллектива» за первое десятилетие подготовили ряд книг методического характера (Ю.П. Адлер [35], В.А. Вознесенский [2, 15], Ю.П. Адлер, Е.В. Маркова, Ю.В. Грановский [11]), оказавшихся привлекательными для экспериментаторов из разных областей знаний. В это же время появляются фундаментальные работы [16, 36-37], представляющие новые результаты (по сравнению с американскими публикациями). Следует отметить, что в книге [2] (1969) уже нашел отражение принцип управления качеством «до производства», которому соответствует концепция G. Taguchi (*Off-Line Quality Control*, [38-40]); этот принцип аргументирован [4] разницей на порядки в стоимости исправления ошибок на предпроектной и производственной стадиях создания продукта.

В последующее до 1991 г. время МТЭ и ПЭ в СССР интенсивно развивались. Были изданы десятки книг теоретического, прикладного и отраслевого



Учебно-методический семинар по ПЭ в Чирчике (апрель 1969), слева Т.И. Голикова, в центре Е.В. Маркова, В.В. Налимов, справа Ю.В. Грановский, В.А. Вознесенский

характера, в частности, посвященные исследованиям смесевых систем [41-43]. В программы вузов разных профилей были включены специальные курсы, изданы учебные пособия. Среди них важную роль в экспериментальных науках сыграли два издания книги С.Л. Ахназаро-

вой и В.В. Кафарова [44-45], а в прикладной математике – С.М. Ермакова и А.А. Жиглявского [46]. Глава III, «Элементы математической теории эксперимента», занимает половину объема учебника [6] для студентов специальности «Производство строительных изделий и конструкций»!

В сотрудничестве с советскими коллегами разные аспекты МТЭ развивали И. Вучков в Болгарии [47-49], К. Hartmann в ГДР [50] и др. Прошло 10 Всесоюзных конференций по планированию и автоматизации эксперимента в Москве (и много других конференций, школ, семинаров). Для НИИ и заводских лабораторий были выпущены многочисленные отраслевые рекомендации, вышел ГОСТ 24026-80 «Исследовательские испытания. Планирование эксперимента. Термины и определения». Тиражом 6200 экземпляров издан каталог планов [51], объемом более 700 с. Интенсивно применялось ПЭ в диссертационных работах, поднимая эмпирические исследования на качественно новый, более высокий уровень.

В последние годы ПЭ оказалось широко востребованным в развитых странах, особенно в США, в силу необходимости создавать в рекордное время, в компьютеризованной среде, конкурентоспособные продукты (обеспечивая для этого качество, закладывая его в проект продукта – *Built-in-Quality, BiQ*) [52]. Это стимулирует разработку стратегий исследований (*Strategy of Experiments, SoE*), общих подходов и специальных планов, издание монографий [10, 53-54], обсуждение на многочисленных конференциях (ежегодных *Joint Statistical Meetings, Fall Technical* и *Applied Statistics in Industry Conferences* и др.), дорогостоящие обучающие курсы и вебинары. Большинство программных систем по статистике (*Statgraphics, Statistica* и др.) включают мощные подсистемы по *DOE (Design of Experiments)*; специализированная система *Design-Expert Software* позволяет выбрать для реализации практически все известные подходы и возможности ПЭ.

Начало применения ПЭ в исследованиях строительных материалов (с 1964 г.) отмечено статьями, посвященными: мелкозернистым бетонам [55] и полимеро-содержащим композитам (В.А. Вознесенский*, Кишиневский ПИ), трехфракционным смесям щебня (И.Г. Зедгенидзе, ГрузПИ), режимам обогащения заполнителей (А.С. Ильин, ВНИИжелезобетон), жаростойким и теплоизоляционным материалам (Ю.М. Климов, УралНИИСтромпроект), стекловолокну (М.С. Асланова, НИИстекловолокно), легким заполнителям (А.Е. Рохваргер, ВНИИСтром), обжигу клинкера (З.Б. Энтин, НИИцемент). Для координации растущего числа исследований с применением ПЭ в 1968 г. Минпромстройматериалов СССР создало научный совет (его возглавил В.В. Налимов). Сформировались группы в Москве (НИИЖБ – Э.Г. Соркин, МИСИ – А.П. Меркин, НИИстекло – В.Е. Маневич, НИИасбестоцемент – Э.О. Долинская), в Ленинграде (ЛТИ им. Ленсовета – М.М. Сычев), в Тольятти (ВНИИНеруд – Э.М. Менчер), в Братскгэсстрое (Гершанович Г.Л.), а также в вузах Харькова (под руководством О.П. Мчедлова-Петросяна

* Здесь и далее названы первые соавторы работ.

защитили диссертации А.М. Питерский, В.И.Шеин и др.), Днепропетровска (В.Г. Зазимко, Б.В. Гусев), Ровно (Л.И. Дворкин), Одессы (Э.Н. Репьев). Кроме общеметодических книг [2, 15] вышли в свет работы, связанные с исследованиями бетона [56-57], пористых заполнителей и керамики [58]. В 1975 г. в Одессе (при участии более 150 докторов и кандидатов наук) прошла Всесоюзная конференция по применению математического моделирования в строительстве и технологии стройматериалов, которая фактически завершала первый этап «экспансии» ПЭ в эти области науки и техники.

К этому времени стала проявляться дискредитирующая планирование эксперимента ограниченность результатов исследований, в которых ПЭ проводилось без выполнения всех четырех составляющих ЭС-моделирования. Анализ априорной информации не был связан с планируемым экспериментом, отсутствовало его методическое и метрологическое обоснование. Формы модели выбирались без учета цели исследования (много ошибок было сделано из-за использования удобных для ручных расчетов линейных моделей и моделей со смешанными эффектами взаимодействия). Проявились последствия формального применения ПЭ: только расчета моделей, без какой-либо интерпретации; формального поиска оптимума, без анализа конкретных путей оптимизации; интерпретации линейной части модели, пренебрегая именно той частью, где заложены возможности нетривиальных решений [59]. Яркий пример более полного извлечения информации из экспериментальных данных, по модели, показан в [3], где к 6 выводам, опубликованным в одной из статей, добавлено еще 7, полученных по 27 из 427 приведенных в ней результатов.

Планирование эксперимента вошло в практику исследований строительных материалов в Болгарии (Н. Баровски, В. Велев, Я. Иванов, И. Николов – во многом, благодаря работе там и циклам лекций В.А. Вознесенского), в Польше (L. Czarnecki, Z. Piasta).

Среди важных шагов к ЭС-моделированию следует отметить: типовые технические задания по ПЭ, а также бланки априорной информации о факторах и выходах [4]; преобразования факторов и выходов при неравных интервалах варьирования и моделировании вероятностных показателей, принимающих значения от 0 до 1 [4, 60]; модели «смеси, технология – свойство» [5, 21, 61], для которых по специальным алгоритмам [1, 5, 20, 62] синтезировались оптимальные планы; применение в десятках исследований отражающей их логику и структуру циклической схемы [1, 4] – анализа и оптимизации композиционных материалов на основе ЭСМ. Накапливаемый опыт планирования эксперимента дополнялся работами, направленными на более полное извлечение из результатов моделирования содержательных знаний (материаловедческих, технологических...). Это привело в 80-х годах к формированию той ветви количественного

анализа в строительном материаловедении, которая была названа [1] экспериментально-статистическим моделированием.

Полезные для методологии ЭС-моделирования результаты нашли отражение в нескольких версиях (с начала 80-х годов) программной системы COMPEX (созданной в ОИСИ – ОГАСА), а затем также в системе MIORIT (кафедра кибернетики химико-технологических процессов КПИ, Киев).

Наиболее полно экспериментально-статистическое моделирование как ветвь моделирования в материаловедении представлено в монографии «ЭВМ и оптимизация композиционных материалов» [5], изданной (1989) советско-болгарским коллективом*. Книга не только отразила достигнутый уровень возможностей ЭСМ в исследованиях и разработках строительных композитов, но и наметила качественный скачок этих возможностей – через включение ЭС-моделей (как моделей рецептурно-технологических полей) в компьютерное материаловедение [25, 63-65].

1. Современные методы оптимизации композиционных материалов / Под ред. В.А. Вознесенского. – К.: Будівельник, 1983. – 144 с. 2. Вознесенский В.А. Статистические решения в технологических задачах. – Кишинев: Картя молдовеняскэ, 1968. – 232 с. 3. Вознесенский В.А. Статистические решения в задачах анализа и оптимизации качества строительных материалов (методология и опыт применения): Автореф. дис. д-ра техн. наук: 05.23.05 / Моск. инж.-стр. ин-т. – М., 1970. – 44 с. 4. Вознесенский В.А. Статистические методы планирования эксперимента в технико-экономических исследованиях. – 2-е изд. – М.: Финансы и статистика, 1981. – 263 с. 5. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я. Иванов, И. Николов. – К.: Будивельник, 1989. – 240 с. 6. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Огарков Б.Л. Численные методы решения строительно-технологических задач на ЭВМ. – К.: Выща школа, 1989. – 328 с. 7. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. Experimental-statistical modeling in computational materials science // Proc. 3rd Int. Applied Statistics in Industry Conf., v. 1. – Wichita,



KS (USA): ACG Press. – 1995. – P.287-298. 8. Методические рекомендации по применению экспериментально-статистических моделей для анализа и оптимизации состава, технологии и свойств композиционных материалов на основе щелочных вяжущих систем / Науч. ред. В.А. Вознесенский, П.В. Кривенко. – ОГАСА, НИИВМ им. В.Д. Глуховского. – К., 1996. – 105 с.

* За эту книгу авторы награждены премией Госкомобразования СССР (1990).

9. Voznesensky V., Lyashenko T. Experimental-statistical modelling in computational materials science. – Одесса: Астропринт, 1998. – 32 с. 10. Myers R.M., Montgomery D.C. Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments. – 2nd ed. – John Wiley & Sons, 2002. – 814 p. 11. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука. – 2-е изд., 1976. – 279 с. 12. Предпланирование эксперимента / Ю.П. Адлер. – М.: Знание, 1978. – С. 17-36. 13. Адлер Ю.П. Метризация // Повторение неповторимого. – М.: Стандарты и качество, 2007. – С. 47-60. 14. Налимов В.В., Чернова Н.А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. – М.: Наука, 1965. – 340 с. 15. Вознесенский В.А. Статистические методы планирования эксперимента в технико-экономических исследованиях. – М.: Статистика, 1974. – 192 с. 16. Федоров В.В. Теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 312 с. 17. Mitchell T.J. An Algorithm for the Construction of «D-optimal» Experimental Designs // *Technometrics*, V. 16, 1974, N 2. – P. 203-210. 18. Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей. Спр. изд. / под ред. Налимова В.В. – М.: Металлургия, 1982. – 752 с. 19. Ляшенко Т.В. Построение Д-оптимальных экспериментальных планов // *Вопросы строительства*. – Рига: Звайгзне, 1975. – Вып. 4. – С. 222-229. 20. Даниленко Е.Л., Ляшенко Т.В. Расчет точных оптимальных планов на выпуклых многогранниках. – Заводская лаборатория, 1979, Т. 45, №3. – С. 249-251. 21. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Особенности планирования эксперимента и решения инженерных задач в системах «смесь I, смесь II, технология – свойства». – Заводская лаборатория. – 1986. – Т. 52, №12. – С. 52-53. 22. Ляшенко Т.В. Опыт синтеза специальных планов при исследовании многокомпонентных систем // *Математические методы планирования эксперимента: Тез. респ. конф.* – Киев: РДНТП. – 1991. – С. 31. 23. Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация вероятностных показателей качества композиционных материалов / В.А. Вознесенский, С.В. Коваль, Т.В. Ляшенко, В.А. Феофанов. – К.: Общ-во «Знание» Украины, 1991. – 32 с. 24. Вознесенский В.А. Модели с генерированной ошибкой эксперимента для специальных критериев качества композитов // *Строительные материалы, конструкции и инженерные системы*. – Одесса: ОГАСА. – 1996. – С. 144-155. 25. Вознесенский В., Ляшенко Т. ЭС-модели в компьютерном строительном материаловедении. – Одесса: Астропринт, 2006. – 116 с. 26. Вовк С.Н. Математический эксперимент и научное познание. – К.: Вища школа, 1984. – 195 с. 27. Вовк С.Н., Вознесенский В.А. Роль математической теории эксперимента в повышении эффективности инженерных исследований и разработок // *Философские проблемы современного естествознания*. – К.: Изд-во КГУ. – 1988. – Вып. 66. – С. 120-126. 28. Fisher R.A. *The Design of Experiments*. 6-th ed. – London, Oliver and Boyd, 1951*. 29. Vox G.E.P., Wilson K.G. On the experimental attainment of optimum conditions // *J. of the Royal Statistical Society*, B. – 1951. – V. 13. – P. 1-45. 30. Vox G.E.P., Hunter W.G., Hunter J.S. *Statistics for Experimenters*. – John Wiley & Sons, 1978. – 667 p. 31. Налимов В.В. Статистические методы описания химических и металлургических процессов. – М.: Металлургия, 1963. – 59 с. 32. Налимов В.В., Чернова Н.А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. – М.: Наука, 1965. – 340 с. 33. Налимов В.В. Теория эксперимента. М.: Наука, 1971. – 208 с. 34. Налимов В.В., Голикова Т.И. Логические основания планирования эксперимента. М.: Металлургия. – 1-е изд., 1976. – 128 с. – 2-е изд., 1981. – 152 с. 35. Адлер Ю.П. Введение в планирование эксперимента. – М.: Металлургия, 1969. – 155 с. 36. Новые идеи в планировании эксперимента / Под ред. В.В. Налимова. – М.: Наука, 1969. – 336 с. 37. Успенский А.Б., Федоров В.В. Вычислительные аспекты метода наименьших квадратов при анализе и планировании регрессионных экспериментов. – М.: изд-во МГУ, 1975. – 168 с. 38. Kackar R.N. Off-line quality control, parameter design, and the Taguchi method // *Journal of Quality Technology*, 1985, V. 17, N4. – P. 176-188. 39. Hunter J.S. Statistical design applied to product design // *Journal of Quality Technology*. – 1985. – V. 17, N4. – P. 210-221. 40. Адлер Ю.П.

* Указана ссылка из книги [11].

Новое направление в статистическом контроле качества – методы Тагути // Качество и надежность изделий. – М.: Знание, 1988. – №2. – С. 3-25. **41.** Зедгендизе И.Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. – М.: Наука, 1976. – 390 с. **42.** Новик Ф.С., Арсов Я.Б. Оптимизация процессов технологии металлов методами планирования экспериментов. – М.: Машиностроение, София: Техника, 1980. – 304 с. **43.** Новик Ф.С. Планирование эксперимента на симплексе при изучении металлических систем. – М.: Metallurgia, 1985. – 256 с. **44.** Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. – М.: Высшая школа, 1978. – 319 с. **45.** Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. 2-е изд. – М.: Высшая школа, 1985. – 327 с. **46.** Ермаков С.М., Жиглявский А.А. Математическая теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1987. – 320 с. **47.** Божанов Е.С., Вучков И.Н. Статистические методы за моделиране и оптимизиране на многофакторни обекти. – София: Техника, 1973. – 529 с. **48.** Вучков И.Н., Йончев Х.А. Планиране и анализ на эксперимента при изследване на свойствата на смеси и сплави. – София: Техника, 1979. – 356 с. **49.** Вучков И.Н., Стоянов С.К. Математическо моделиране и оптимизация на технологични обекти. – София: Техника, 1980. – 336 с. **50.** Хартман К., Лецкий Э., Шефер В. Планирование эксперимента в исследованиях технологических процессов. – М.: Мир, 1977. – 552 с. **51.** Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей. Спр. изд. / под ред. Налимова В.В. – М.: Metallurgia, 1982. – 752 с. **52.** Hann G., Hoerl R. Key Challenges for Statisticians in Business and Industry // *Technometrics*, 1998, V. 40, N 3. – P. 195-213. **53.** Cox D.R., Reid N. The Theory of the Design of the Experiments. – Chapman & Hall / CRC PRESS, 2000. – 336 p. **54.** Cornell J.A. Experiments with Mixtures: Designs, Models, and the Analysis of Mixture Data. 3rd ed. – John Wiley & Sons, 2002. – 670 p. **55.** Вознесенский В.А. Планирование эксперимента по технологии мелкозернистого бетона. – Заводская лаборатория. – 1964. – Т. 30, №3. – С. 337-339. **56.** Баженов Ю.М., Вознесенский В.А. Перспективы применения математических методов в технологии сборного железобетона. – М.: Стройиздат, 1974. – 192 с. **57.** Львовский Е.Н. Пассивный и активный эксперимент при исследовании механических характеристик бетона. – Кишинев: Картя молдовеняскэ, 1970. – 176 с. **58.** Рохваргер А.Е., Шевяков А.Ю. Математическое планирование научно-технических исследований (статистический подход). – М.: Наука, 1975. – 440 с. **59.** Вознесенский В.А., Ковальчук А.Ф. Принятие решений по статистическим моделям. – М.: Статистика, 1978. – 192 с. **60.** Вознесенский В.А. Математическая теория эксперимента и управление качеством композиционных материалов. – К.: Общ-во «Знание» Укр. ССР, 1979. – 27 с. **61.** Ляшенко Т.В. Оптимизация наполнителей полиэфирных связующих на основе моделей нового класса: Автореф. канд. техн. наук: 05.23.05. – Харьков, 1984. – 20 с. **62.** Ляшенко Т.В. Алгоритм и программа расчета точных оптимальных планов на выпуклых многогранниках // Методы математической теории эксперимента и ЭВМ в задачах разработки материалов. – М: ЦНИИЭлектроника, сер. 6. – 1978. – Вып. 2 (115). – С.16-18. **63.** Вознесенский В.А. Компьютерное материаловедение и экспериментально-статистическое моделирование в задачах технологии древесных композиционных материалов // Древесина и композиционные материалы в строительстве: Сб. реф. междунар. симп. – Одесса, 1992. – С. 10-11. **64.** Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация в материаловедении. – К.: О-во «Знание» Украины, 1993. – 16 с. **65.** Вознесенский В.А. Компьютерное материаловедение, экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация композиционных строительных материалов // Строительство в России: прогресс науки и техники. – М.: Инженерная академия РФ, 1993. – №1. – С. 98-101.

НЕСКОЛЬКО СИНТЕЗИРОВАННЫХ ПЛАНОВ ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ ФАКТОРНЫХ СИСТЕМ «СМЕСЬ, ТЕХНОЛОГИЯ»

Показанные ниже планы оптимальны по D -критерию – минимизировался определитель дисперсионной матрицы коэффициентов ЭС модели вида

$$Y(v, \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^q A_i v_i + \sum_{j>i} A_{ij} v_i v_j + \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^p C_{ij} v_i x_j + \sum_{i=1}^p b_{ii} x_i^2 + \sum_{i<j} b_{ij} x_i x_j, \quad (\text{П2.1})$$

где q – количество смесевых переменных v , $0 \leq v_i \leq 1$, $\sum v_i = 1$

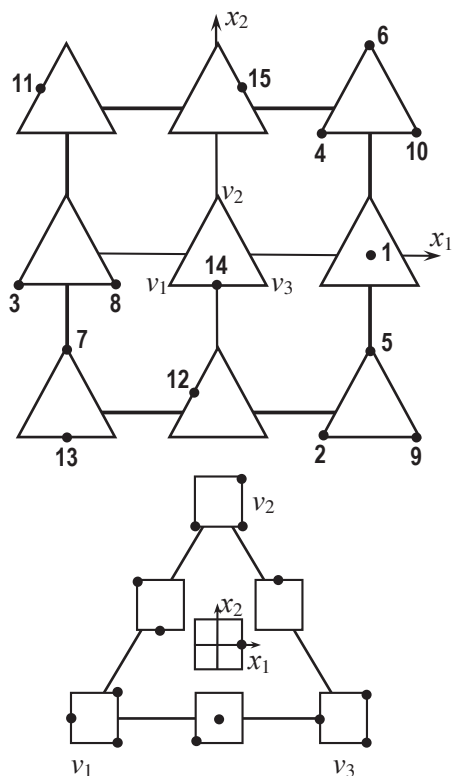
p – число взаимонезависимых $|x| \leq 1$.

Планы "1" и "2" – для системы « M_3T_2 » (3 смесевых и 2 взаимонезависимых фактора, см. гл. 2). План "1" насыщенный; при синтезе точка 1 включена как обязательная.

Матрица плана "1"

	v_1	v_2	v_3	x_1	x_2
1	1/3	1/3	1/3	1	0
2	1	0	0	1	-1
3	1	0	0	-1	0
4	1	0	0	1	1
5	0	1	0	1	-1
6	0	1	0	1	1
7	0	1	0	-1	-1
8	0	0	1	-1	0
9	0	0	1	1	-1
10	0	0	1	1	1
11	0.5	0.5	0	-1	1
12	0.5	0.5	0	0	-1
13	0.5	0	0.5	-1	-1
14	0.5	0	0.5	0	0
15	0	0.5	0.5	0	1
$ D = 0.544 \cdot 10^{-2}$					

Расположение точек плана "1"
в факторном пространстве



* Планы эксперимента, синтезированные Т.В. Ляшенко (1985) при выполнении работ по программе АН СССР (направление «Коллоидная химия и физико-химическая механика», проблема «Физико-химическая механика дисперсных структур как основа получения материалов с заданной дисперсной структурой и повышения их прочности и долговечности»).

Матрица плана "2"

	v_1	v_2	v_3	x_1	x_2
1	0.3	0	0.7	1	1
2	0.6	0	0.4	0	0
3	1	0	0	-1	-1
4	0	1	0	-1	-1
5	0	1	0	1	-1
6	1	0	0	1	1
7	0	1	0	1	1
8	0	0	1	-1	-1
9	0.5	0.5	0	0	-1
10	0	0	1	1	-1
11	0	0.4	0.6	0	-1
12	0	0.5	0.5	-1	0
13	0	1	0	-1	1
14	0.5	0	0.5	1	-1
15	0.7	0.3	0	-1	1
16	0	0	1	-1	1
$ D = 0.122 \cdot 10^{-2}$					

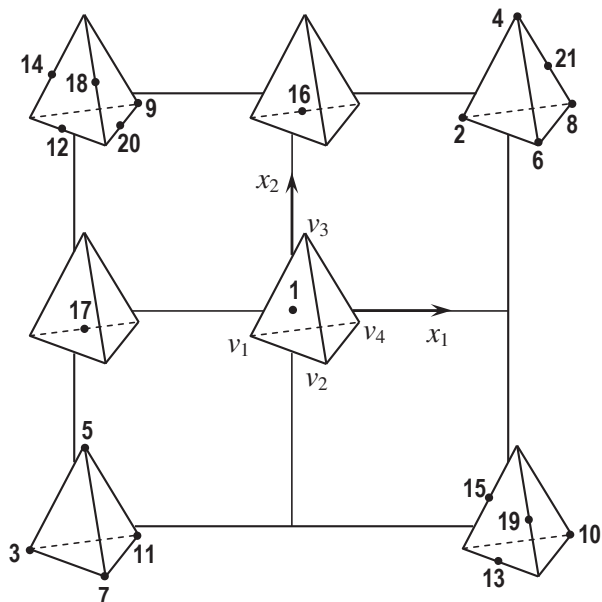
План "3" – насыщенный, для системы « M_4T_2 » (4 смесевых и 2 взаимонезависимых фактора)*.

Матрица плана "3"

	v_1	v_2	v_3	v_4	x_1	x_2
1	0.25	0.25	0.25	0.25	0	0
2	1	0	0	0	1	1
3	1	0	0	0	-1	-1
4	0	1	0	0	1	1
5	0	1	0	0	-1	-1
6	0	0	1	0	1	1
7	0	0	1	0	-1	-1
8	0	0	0	1	1	1
9	0	0	0	1	-1	1
10	0	0	0	1	1	-1
11	0	0	0	1	-1	-1
12	0.5	0.5	0	0	-1	1
13	0.5	0.5	0	0	1	-1
14	0.5	0	0.5	0	-1	1
15	0.5	0	0.5	0	1	-1
16	0.5	0	0	0.5	0	1
17	0.5	0	0	0.5	-1	0
18	0	0.5	0.5	0	-1	1
19	0	0.5	0.5	0	1	-1
20	0	0.5	0	0.5	-1	1
21	0	0	0.5	0.5	1	1

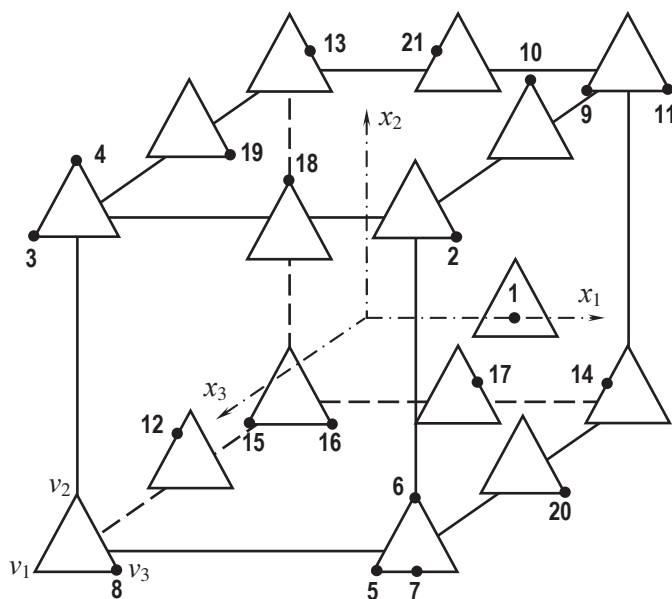
* Опубликовано в «Рекомендациях по применению новых типов защитно-конструкционных полимеррастворов для реставрации и консервации памятников и исторических зданий из камня и бетона» (НИЛЭП ОИСИ, Ч. 2), М.: Стройиздат, 1987.

Расположение точек плана "3" в факторном пространстве



Планы "4", "5", "6" – насыщенные, для системы « M_3T_3 » (3 смесевых и 3 взаимонезависимых фактора). В планах "4" и "5" точка 1 включена при синтезе как обязательная.

Расположение точек плана "4" в факторном пространстве



Матрицы планов "4" ("5")

	v_1	v_2	v_3	x_1	x_2	x_3
1	1/3	1/3	1/3	1	0	0
2	0	0	1	1	1	1
3	1	0	0	-1	1	1
4	0	1	0	-1	1	1
5	1	0	0	1	-1	1
6	0	1	0	1	-1	1
7	0.5	0	0.5	1	-1	1
8	0	0	1	-1	-1	1
9	1	0	0	1	1	-1
10	0	1	0	1	1	0
11	0	0	1	1	1	-1
12	0.25(0)	0.75(1)	0	-1	-1	0
13	0	0.5	0.5	-1	1	-1
14	0.5	0.5	0	1	-1	-1
15	1	0	0	-1	-1	-1
16	0	0	1	-1	-1	-1
17	0	0.5	0.5	0	-1	-1
18	0	1	0	-1	0	-1
19	0	0	1	-1	1	0
20	0	0	1	1	-1	0
21	0.5	0.5	0	0	1	-1
$ D = 0.329 \cdot 10^{-8}$ – план "4" $ D = 0.361 \cdot 10^{-8}$ – план "5"						

Матрица плана "6"

	v_1	v_2	v_3	x_1	x_2	x_3
1	0	0	1	1	1	1
2	1	0	0	-1	1	1
3	0	1	0	-1	1	1
4	1	0	0	1	-1	1
5	0	1	0	1	-1	1
6	0.5	0	0.5	1	-1	1
7	0	0	1	-1	-1	1
8	1	0	0	1	1	-1
9	0	1	0	1	1	0
10	0	0	1	1	1	-1
11	0	0.5	0.5	1	0	-1
12	0	0.5	0.5	-1	1	-1
13	0.5	0.5	0	1	-1	-1
14	1	0	0	-1	-1	-1
15	0	0	1	-1	-1	-1
16	0	1	0	0	-1	-1
17	0	1	0	-1	0	-1
18	0	0	1	-1	1	0
19	0	0	1	1	-1	0
20	0	1	0	-1	-1	0
21	0.5	0.5	0	0	0	0
$ D = 0.242 \cdot 10^{-8}$						

Представлена методологія досліджень і проектування багатокомпонентних композиційних матеріалів. Викладено базові положення та основні поняття, методи аналізу зв'язків рецептури, параметрів технології, структури і властивостей композитів, їх багатокритеріальної оптимізації. Розглянуто приклади застосування методології при розробці будівельних композитів різного призначення з різними матрицями. Методологія допомагає отримати нове знання про матеріали, забезпечити необхідні властивості матеріалів, зберегти ресурси.

Книгу адресовано науковцям, інженерам, викладачам, студентам й аспірантам в галузі розробок і виробництва високоякісних композиційних матеріалів.

Наукове видання

**ЛЯШЕНКО Тетяна Василівна
ВОЗНЕСЕНСЬКИЙ Віталій Анатолійович**

**МЕТОДОЛОГІЯ РЕЦЕПТУРНО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ
ПОЛІВ У КОМП'ЮТЕРНОМУ БУДІВЕЛЬНОМУ
МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ**

Монографія

Російською мовою

Надруковано в авторській редакції з готового оригінал-макета

Формат 70×100/16. Ум. друк. арк. 13,65.
Тираж 300 прим. Зам. № 478 (108).

Видавництво і друкарня «Астропринт»
65091, м. Одеса, вул. Разумовська, 21
Тел.: (0482) 37-07-95, 37-14-25, 33-07-17, (048) 7-855-855
e-mail: astro_print@ukr.net; www.astroprint.ua; www.stranichka.in.ua
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 1373 від 28.05.2003 р.

