

СТРУКТУРИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ ФАКТОРОВ. СТРУКТУРИРОВАННЫЕ ЭС-МОДЕЛИ

Т.В. Ляшенко (Одесса)

Рецептурно-Технологическое поле свойства Y (любого критерия, характеризующего объект исследования – композиционный материал) в координатах варьируемых факторов x (параметров рецептуры, технологии, условий эксплуатации – РТ-факторов), как правило, описывают Экспериментально-Статистическими моделями [1-5]. В соответствии с идеологией планирования эксперимента в ЭС-модель включаются все компоненты вектора x . Модель описывает полное поле $Y(x)$ в факторной области Ω_x . Противоречие между «простотой» интегральной полиномиальной модели и структурной сложностью объекта (композиционного материала) смягчается, если модель структурирована – в ней выделено влияние отдельных факторных подсистем и их синергизм [3, 5-7].

Декомпозиция системы факторов в задачах материаловедения осуществляется, начиная с содержательной (технологической) постановки задачи исследования. РТ-факторы разделяют на подсистемы, прежде всего, в соответствии с характером и степенью их влияния на структуру и свойства материала [3, 5-7]. 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. Априорное структурирование может быть дополнено (апостериори, по результатам ЭС-моделирования) выделением других подсистем в системе РТ-факторов при анализе их влияния на свойства.

Структурированная модель полного поля $Y(x = (x_{gr}, x_{ch}))$ представляет многообразие локальных полей свойства $Y(x_{gr})$, в координатах той или иной группы формирующих их градиентных факторов ($x_{gr} \in \Omega_{gr}$, создающих градиент Y в области Ω_{gr}), и трансформацию этих полей под влиянием группы изменяющих их факторов ($x_{ch} \in \Omega_{ch}$). Могут быть рассмотрены любые полезные комбинации выделения из 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...) взаимно-независимых нормализованных факторов x_i , $-1 \leq x_i \leq +1$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_p) \in \Omega_x$; $(q-1)$ -мерные симплексы (отрезки, треугольники, тетраэдры...) линейно связанных смесевых факторов v_i , $0 \leq v_i \leq 1$, $\sum v_i = 1$, $v = (v_1, v_2, \dots, v_i, \dots, v_q) \in \Omega_v$; в системе может быть выделено две смеси (w – второе обозначение для смесевых факторов); вырезанные дополнительными ограничениями на x , v , w подобласти кубов и симплексов, а также призмы и другие произведения полных и ограниченных кубов и симплексов [6, 8-9].

Подсистемы факторов, определяющих набор свойств материала – его качество Q (от *quality*), обозначены: T (от *technology*) – «технология», подсистема **взаимонезависимых** x^* ; при $p \geq 2$ 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.

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

Особенности пространства факторов в задачах разработки материалов [6, 8] приводят к рассмотрению систем «смеси, технологии – свойства» (*ММТТQ*). Вектор факторов для них в общем случае можно записать в виде $\mathbf{z} = (\mathbf{v}, \mathbf{w}, (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)) \in \Omega_z^*$. Система факторов «смеси, технологии» (*ММТТ*) обобщает все рассматриваемые в строительном материаловедении комбинации линейно связанных и взаимонезависимых факторов, включаемых в ЭС-модели. В таблице обозначен ряд типовых систем «смеси, технологии» (не целесообразно рассматривать в задаче более 7 факторов, более 2-х смесей и более 2-х подсистем *T*) и варианты отображения для них факторных областей (подразумеваются и «обратные» отображения, в частности, «квадраты на треугольнике» в дополнение к «треугольникам на квадрате»).

Структурированным системам факторов соответствуют и структурированные ЭС-модели [7-8]; большинство их форм и физический смысл параметров описаны в книге [6]. Для систем *ТТQ* это обычные полиномы $P(\mathbf{x})$, записанные блоками, соответствующими отдельным подсистемам и их синергизму – как показанная ниже модель для вязкости η_1 фиброполимерцементной композиции при скорости сдвига $\dot{\gamma} = 1 \text{ с}^{-1}$, в зависимости от содержания диспергируемого полимера Виннапас ($V - x_1$), молекулярной массы (*ММС* – x_2) и дозировки (*МС* – x_3) метилцеллюлозы, количества полипропиленовой фибры ($F - x_4$) [10-12]. Для систем *МТQ* это приведенные полиномы $P_r(\mathbf{v}, \mathbf{x})$ [13-14]; полиномы $P_r(\mathbf{v}, \mathbf{w})$ и $P_r(\mathbf{v}, \mathbf{w}, \mathbf{x})$ – для систем *ММQ* [14] и *ММТQ* [15] соответственно.

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

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

Если анализ априорных данных не позволяет выдвинуть гипотезу о связи Y с $\mathbf{z}$, соответствующей приведенному полиному $P_r(\mathbf{z})$, то в качестве ЭС-моделей целесообразно использовать произведения обычных и приведенных полиномов для отдельных подсистем (при возможности реализовать эксперимент для оценки большого числа коэффициентов и эффектов высокого порядка). В моделях-произведениях каждый из коэффициентов модели для одной из подсистем записывается как функция от факторов другой подсистемы. В частности, для описания $Y(\mathbf{v}, \mathbf{x})$ может быть использовано произведение приведенного полинома Шеффе [6, 9] и обычного полинома в форме $P_r(\mathbf{v}) \times P(\mathbf{x}) = \sum \{A_{jv} = [\sum b_{jx} \cdot f_{jx}(x)] \cdot f_{jv}(\mathbf{v})\}$, где jx и jv – номера эффектов в моделях-сомножителях. Через модель-произведение можно соединить с ЭС-моделью «квази-фундаментальную» модель (реологическую, тепломассообменную и т.п.) [16-17]. Так, параметры K и m модели Оствальда-Вилля для вязкости фиброполимерцементной композиции в зависимости от скорости сдвига [10-12], $\eta_{\dot{\gamma}} = K m^{\dot{\gamma}}$ (где K – вязкость η_1 , при единичной скорости, m – темп разрушения), могут быть выражены, как показано выше, функциями ее состава: $\ln \eta_{\dot{\gamma}}(\mathbf{x}) = \ln K(\mathbf{x}) + m(\mathbf{x}) \cdot \ln \dot{\gamma}$.

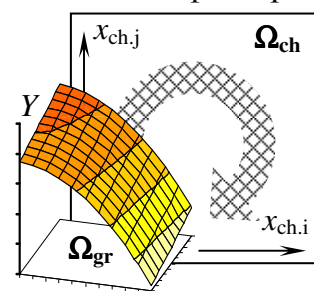
* Структурированная факторная область Ω_z (полного поля) в общем случае записывается как декартово произведение соответствующих подобластей $\Omega_z = \Omega_v \otimes \Omega_w \otimes (\Omega_{x1} \otimes \Omega_{x2})$.

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»	$M_{qv}M_{qw}$			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_3T_2 , « Δ на $\square$ »	M_4T_2 «Тетраэдры на $\square$ » « Δ на кубе»	M_4T_3 «Тетраэдры на кубе»
«Технология, технология»	$T_{p1}T_{p2}$	T_1T_1 «– на – »	T_2T_1 « $\square$ на – »	T_2T_2 , « $\square$ на $\square$ » «Кубы на – »	T_2T_3 «Кубы на $\square$ »		
«Смесь, смесь, технология»	$M_{qv}M_{qw}T$				$M_2M_2T_1$ «Прямоугольные призмы на – »	$M_3M_2T_1$ «Треугольные призмы на – » «Прямоугольные призмы на $\square$ »	$M_3M_3T_1$ «Треугольные призмы на Δ » $M_3M_2T_2$ «Треугольные призмы на $\square$ »
«Смесь, технология, технология»	$MT_{p1}T_{p2}$			$M_2T_1T_1$ «Прямоугольные призмы на – »	$M_3T_1T_1$ «Треугольные призмы на – »	$M_3T_1T_2$ «Треугольные призмы на $\square$ »	

Структурированным факторным областям и структурным особенностям ЭС-моделей соответствуют специальные планы эксперимента, по результатам которого такие модели строятся. Разработанный алгоритм синтеза оптимальных планов [6, 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 ММТТ и их подсистем); вида модели для любой из систем ММТТQ, 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_2Q , «треугольники на квадрате» [19-23 и др.]; планы для систем M_3M_3Q , «треугольники на треугольнике» [24], и $M_3M_3T_1Q$, «призмы на треугольнике» [6]; планы для исследований систем M_4T_2Q и M_3T_3Q (тетраэдры на квадрате [25-27] и треугольники на кубе [28]). В плане на «конфете» – квадрате с отсеченной парой противоположных углов [29], соответствующих нетехнологичным смесям, было предусмотрено включение в модель эффектов до 4-ой степени для описания влияния состава на возможную трансформацию распределений свойств [30-31]. Эффективный план, синтезированный для моделей, включающих неполные кубические и биквадратные пары части факторов, применен в исследованиях композитов на щелочных вяжущих [4, 32]. Разделение факторов и выделение базового блока в плане эксперимента позволяет [33-35] существенно сократить объем экспериментальных работ для решения типовой технологической задачи – выбора наиболее эффективного реагента (добавки, наполнителя, отхода взамен сертифицированного сырьевого компонента и т.д.) из набора альтернатив.

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 [32], который позволяет (при малых рисках) выделить из полного поля несколько взаимонезависимых 1-3-факторных. Для содержательного анализа результатов моделирования используются графики и «карты» локальных полей при разных уровнях изменяющих факторов (что символически показано на рисунке). Это 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.



1. 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.
2. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. Modelling, analysis and optimization of brittle matrix composites properties fields // Brittle Matrix Composites 4: Proc. 4th Int. Symp. – Cambridge, Warsaw : Woodhead Publ. Ltd. – 1994. – P. 255-263.
3. Ляшенко Т.В. Обобщающие показатели полей свойств для разработки эффективных композитов // Строительные материалы, конструкции и инженерные системы. – Одесса: ОГАСА. – 1996. – С. 172-186.
4. 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.
5. Ляшенко Т.В. Структурированные экспериментально-статистические модели в компьютерном материаловедении // Модели и системы: Сб. научн. тр. – Харьков: Харьк. военный ун-т. – 1999. – Вып. 1. – С. 53-57.
6. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я.П. Иванов, И.И. Николов. – К.: Будивэльнык, 1989. – 240 с.
7. 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.
8. 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.

9. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Огарков Б.Л. Численные методы решения строительно-технологических задач на ЭВМ. – К.: Выща школа, 1989. – 328 с. 10. 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. – Warsaw: Woodhead Publ. Ltd., 2012. – P. 169-178. 11. 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. 12. Ляшенко Т.В., Крюковская С.А. Реологические критерии при оптимизации фиброполимерцементных композиций для наливных покрытий полов // *Вісник ДонНАБА – Макіївка* – 2013. – Вип. 1(99) – С. 101-107. 13. Вучков И., Йончев Х. Планиране и анализ на експеримента при изследване на свойствата на смеси и сплави. – София: Техника, 1979. – 356 с. 14. Ляшенко Т.В. Планирование эксперимента по описанию систем с группами линейно связанных входов // *Организация и автоматизация на експерименталните изследвания*, 81. – Русе (Болгария). – 1981. – С. 110-113. 15. 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. 16. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Проблема построения комплексов математических моделей различной генерации для оптимизации высококачественных материалов в компьютерном материаловедении // *Рациональный эксперимент в материаловедении: Матлы междун. сем. МОК’39*. – Одесса, Астропринт, 2000. – С. 5-7. 17. 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. 18. Современные методы оптимизации композиционных материалов / Под ред. В.А. Вознесенского. – К.: Будівельник, 1983. – 144 с. 19. 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. 20. Методические указания по моделированию систем смеси, технология – свойство» с использованием ЭВМ в курсовом и дипломном проектировании // В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, В.В. Абакумов, А. Абдыкалыков. – Одесса: ОИСИ, 1985. – 64 с. 21. 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. 22. Композиционные строительные материалы и конструкции пониженной материалоемкости / В.И. Соломатов, В.Н. Выровой, В.С. Дорофеев, А.В. Сиренко. – К.: Будивельник, 1991. – 144 с. 23. Дорофеев В.С., Выровой В.Н. Технологическая поврежденность строительных материалов и конструкций. – Одесса: Город мастеров, 1999. – 168 с. 24. Меркин А.П., Мурадов А.Н. Бесцементные отделочные составы повышенной белизны для бетонных панелей // *Строительные материалы*. – 1990. – №7. – С. 18-19. 25. Лисенко В.А. Защитно-конструкционные полимеррастворы в строительстве. – К.: Будівельник, 1985. – 132 с. 26. 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. 27. ЭСМ и анализ полей свойств бетона // Маргаль И., Вознесенский В., Коваль С. и др. // *Problemy budownictwa: 4 conf. – cz. 1 – Rzeszow*. – 1995. – С. 219-225. 28. Шинкевич Е.С., Ляшенко Т.В., Чесский Ю.В. Моделирование и анализ влияния дисперсности минеральных добавок на свойства активированных силикатных композиций // *Прогнозирование в материаловедении: МОК’41*. – Одесса, Астропринт, 2002. – С. 15-17. 29. Ляшенко Т.В. Опыт синтеза специальных планов при исследовании многокомпонентных систем // *Математические методы планирования эксперимента: Тез. респ. конф.* – Киев: РДНТП. – 1991. – С. 31. 30. 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. 31. 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. 32. 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. 1st Int. Conf.* – К.: Vipol, 1994. – V. 1 – P.387-398. 33. Вознесенский В.А. Оптимизация состава многокомпонентных добавок в композиты. – К.: Об-во «Знание» УССР, 1981. – 20 с. 34. Lyashenko T., Voznesensky V., Qawasmeh K. Experimental-Statistical Modeling and Analysis of Properties of Mortars with Additives // *Proc. 13 Int. Cong. Ibausil.* – Weimar, 1997. – V. 2. – P. 607-618. 35. Коваль С.В. Моделирование и оптимизация состава и свойств модифицированных бетонов. – Одесса: Астропринт, 2012. – 424 с.