

Методы компьютерного материаловедения при анализе коэффициентов стойкости фуранового бетона в серной кислоте

Антонюк Н.Р., Вознесенский В.А., Гримит А.А., Ильева И.В., Ляшенко Т.В. (Одесская государственная академия строительства и архитектуры)

Методы компьютерного клонирования данных натурального эксперимента позволили получить распределения коэффициентов стойкости полимербетона в серной кислоте и оценить влияние на них ее концентрации и температуры.

Введение. При строительстве объектов химической и нефтехимической промышленности полимерные материалы наиболее часто используются на тех участках, где сооружения и аппаратура входят в прямой контакт с основными продуктами производства, многие из которых являются агрессивными по отношению к конструкционным материалам. Работа материала в агрессивной среде в ряде случаев приводит к такому изменению его свойств, что сооружения могут перейти в аварийное состояние, требующее капитального ремонта или полной замены конструкции (последнее систематически происходит с гидролизными ваннами).

К решению задач повышения стойкости материалов в агрессивных средах целесообразно привлекать разнообразные методы компьютерного материаловедения [1] (в частности, теорию распределения случайных величин, компьютерную статистику, экспериментально-статистическое моделирование).

Некоторые особенности применения одного из методов компьютерной статистики – бутстрепа – анализируются далее при оценке вероятностных показателей качества и стойкости в агрессивной среде полимерного композита на фурановом связующем (по данным исследований, выполненных совместно с Казанским ИСИ [2, 3]).

Условия натурального эксперимента. Изучалось изменение у полимерного композита физико-технических свойств (в частности, ударной вязкости a , кДж/м², и увеличения-уменьшения массы δM %) при воздействии серной кислоты разной концентрации $X_1 = C$ % и температуры $X_2 = T$ °С. Априори предполагалось, что для фуранового связующего наиболее опасными могут оказаться малые концентрации серной кислоты. В то же время необходимо было изучить воздействие в широком диапазоне концентраций, поэтому уровни варьирования X_1 выбираются несимметричными: 0,1; 1и 10 %. Однако логарифмическое преобразование C делает полуинтервалы варьирования равными ($\lg 0.1 = -1$, $\lg 1 = 0$ и $\lg 10 = +1$), и переход к нормализованным переменным осуществляется как $x_1 = (\lg C - 0) : 1 = \lg C$, что учитывает несимметричность уровней C в натуральных переменных, выбранных в эксперименте для повышения точности измерения свойств в области малых концентраций серной кислоты.

Температура кислоты имела уровни 20, 40 и 60°С, переход к нормализованным переменным стандартный. Для построения двухфакторной модели выбран D-оптимальный план ПФЭ 3². В девяти точках плана реализовано по 50 измерений каждого свойства материала.

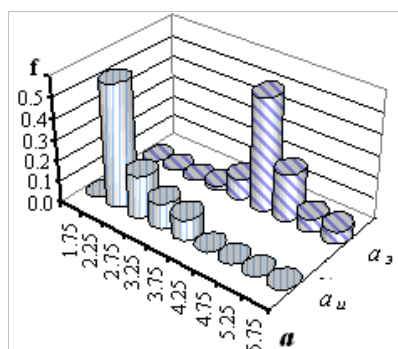


Рис.1. Гистограммы распределений ударной вязкости a (кДж/м²) эталонного состава (a_3) и состава насыщенного серной кислотой (a_5) и их числовые характеристики

	θ_k	
	a_3	$a_{№5}$
a_{av}	4.18	2.37
$s\{a\}$	0.51	0.51
$v\{a\}, \%$	12.2	21.4
$A\{a\}$	0.85	0.96
$E\{a\}$	1.23	-0.13
a_{05}	3.42	1.78

Распределение ударной вязкости полимерного композита в натурном эксперименте. В течение месяца 50_{х9} затвердевших образцов исследуемого материала находились в серной кислоте, а 50 «эталонных» в воздушно-сухих условиях. Гистограммы распределения ударной вязкости эталонной группы a_3 и одной из групп, экспонировавшихся в серной кислоте, показаны на рис.1, там же приведены статистические характеристики этих распределений.

Средняя ударная вязкость $a_{№5}$ снизилась на 1.81 кДж/м² по сравнению с эталонными условиями; типичный коэффициент стойкости K_a равен отношению средних $a_{№5}/a_3 = 0.57$. Распределения существенно отличаются; в агрессивной среде возросли

коэффициент вариации и асимметрия. Анализ гистограмм и оценок A и E показал, что большинство распределений значительно отличаются от нормального распределения. Это затрудняет достоверную оценку качества полимерного композита, если о стойкости судить только по коэффициенту, рассчитанному как отношение средних. Распределения a позволяют оценить дополнительные полезные критерии, и прямые, и симплексные [4].

В вычислительном эксперименте проанализированы не только распределения ударной вязкости, полученные клонированием данных натурального эксперимента, но и кривые распределения критериев стойкости двух типов – традиционного K и «жесткого» H . Последний учитывает граничные вероятностные показатели – квантили (с риском α). Вне гипотезы нормальности исходных распределений (а данные натурального эксперимента показали, что принять такую гипотезу нельзя) интервальные оценки, в частности, доверительные границы с заданным риском, может дать только компьютерная статистика.

Клонирование данных натурального эксперимента и генерация распределений критериев стойкости.

Из данных натурального эксперимента в вычислительном эксперименте формируются новые случайные выборки, попасть в которые имеет равные возможности любой единичный результат опыта. Для этого элемент вариационного ряда отбирается в генерируемую выборку с использованием равномерного распределения и тут же возвращается на место. Таким образом, любой элемент может попасть в новую выборку объема $n = 50$ от 0 до 50 раз, что существенно изменяет все характеристики (θ) генерируемого в вычислительном эксперименте ряда.

Многokратная генерация выборок дает N разных распределений, которые являются случайными репродукциями распределения a в натурном эксперименте. Для каждого u -того из N генерированных распределений рассчитываются любые числовые характеристики $\theta_u\{a\}$. Таким образом, формируются выборки (в данной работе их 500) для любой оценки $\theta\{a\}$. Их распределения в свою очередь, могут быть представлены как «вторичными» статистическими оценками, так и графически. На рис. 2 показаны гистограммы распределений коэффициентов стойкости K_a и H_a .

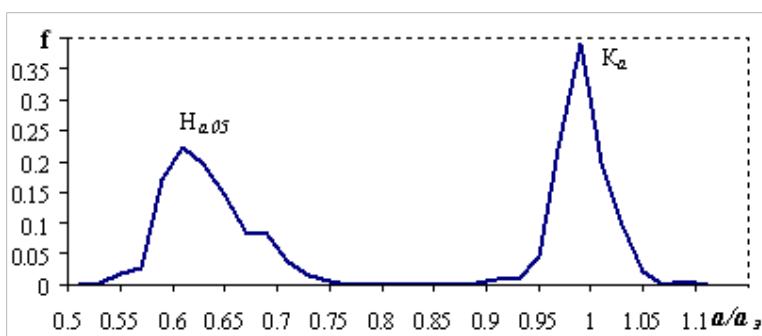


Рис. 2. Гистограммы распределений коэффициентов стойкости H_a и K_a в вычислительном эксперименте

Жесткий критерий стойкости H_a построен так, чтобы учитывать усредненную деградацию. Критерий H_a – отношение «пессимистической» (с риском $\alpha=0.05$) оценки ударной вязкости материала после экспозиции в серной кислоте $a_{0.05}$ к «оптимистической» (с риском $\alpha=0.95$) оценке ударной вязкости исходного материала $a_{0.95}$. В общем случае, следует использовать непараметрические оценки.

Для эталонного ряда $H_{a,0.05} = a_{u,0.05}/a_{0.95} = 0.52$, что на 66% ниже уровня K_a .

Результаты моделирования влияния серной кислоты на полимерный композит. Закономерности изменения коэффициентов стойкости под влиянием двух эксплуатационных факторов описываются неполными кубическими ЭС-моделями. Так, модель (1), с 7 значимыми коэффициентами ($\alpha = 0.1$), описывает поле среднего значения $H_{a,av}$: максимальный уровень 0.72 (при $x_1 = -0.2, x_2 = -1$), минимум 0.37 ($x_1 = +1, x_2 = +0.04$), относительный прирост $\delta H_a = 1.95$.

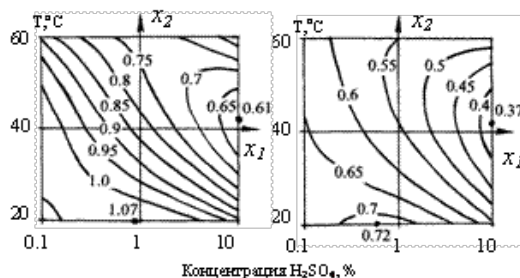


Рис. 3. Зависимость K_a и H_a от концентрации и температуры кислоты

$$H_{a,av} = 0.55 - 0.14x_1 - 0.04x_1^2 + 0x_1x_2 + 0.065x_1^2x_2 - 0.08x_2 + 0.08x_2^2 + 0.095x_1x_2^2$$

(1)

На рис. 3 приведены диаграммы коэффициентов стойкости в зависимости от С и Т. По диаграммам можно определить зону безопасной работы материала. При температуре 60°C максимальная безопасность в зоне концентраций между 0.1-1 %.

Взаимосвязь между квантилями Y_α ударной вязкости и изменения массы композита при разном риске $\alpha=0.05$ и $\alpha=0.95$. Неоднократно отмечалось, что под действием агрессивной (в широком смысле) среды происходит не только снижение (повышение) среднего уровня критериев качества, но и «расшатывание» структуры, отражающееся в трансформации распределений – увеличении рассеяния [5]. Исследования могут быть расширены за счет проверки новых гипотез (в частности, о корреляции между граничными квантилями распределения двух свойств, об изменении меры и формы корреляции под воздействием внешней среды). На рис. 4 приведены полученные в поисковом вычислительном эксперименте корреляционные поля двух квантилей, при малом и большом риске, ударной вязкости и изменения массы. Если квантили, относящиеся к правой части распределения, сильно коррелируют (риск принятия неверной гипотезы менее 0.05), то в области «плохих» уровней качества Y_{05} риск почти на порядок больше.

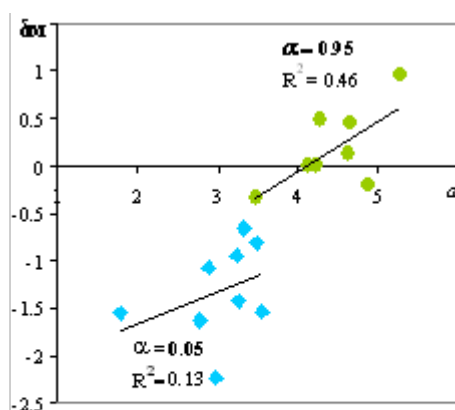


Рис. 4. Корреляционные зависимости между квантилями ударной вязкости и изменения массы при $\alpha=0.05$ и $\alpha=0.95$

Вывод. Новые задачи в области структурообразования и деструкции возможно решить при «равновесном» сочетании натурного и вычислительного экспериментов.

1. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. ЭС-модели в компьютерном строительном материаловедении: – Одесса: Астропринт, 2006 – 116 с.
2. Моделирование и анализ вероятности разрушения полимера в агрессивной среде / Р.З Рахимов, А.А. Зарипов, В.А. Вознесенский, Е.О. Репьева // Работоспособность строительных материалов в условиях воздействия различных эксплуатационных факторов: Межвуз. сб. – Казань, 1980. – С. 23-27.
3. Вознесенский В.А. Статистические методы планирования эксперимента в технико-экономических исследованиях. – М., Финансы и статистика, 1981. – 263 с.
4. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Компьютерное размножение данных эксперимента для извлечения скрытой информации о свойствах материала // Композиційні матеріали для будівництва: Вісник ДонНАБА, 2005-1 (47). – Макеевка, 2005. – С. 3-10.
5. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я.П. Иванов, И.И. Николов – К.: Будівельник, 1989. – 240 с.