

## ИЗОПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ НА ПОЛЯХ СВОЙСТВ МОДИФИЦИРОВАННОГО ЭПОКСИДНОГО КОМПОЗИТА

Ляшенко Т.В., Довгань А.Д. (Одесская государственная академия строительства и архитектуры), Шаршунов А.Б. (Институт гидротехники и мелиорации Украинской академии аграрных наук, г. Киев)

**В вычислительном эксперименте выполнен изопараметрический анализ на полях свойств эпоксидного композита, при изучении возможностей модифицировать его матрицу, не изменяя вязкости технологической смеси.**

**Постановка задачи изопараметрического анализа.** В технологии строительных материалов часто возникает необходимость исследовать в зависимости от состава ряд свойств материала (в частности, эксплуатационных) при заданных требованиях к другим (в частности, технологическим). Так, требуется сравнить свойства бетонов из равноподвижных смесей или свойства легких бетонов равной плотности. Экспериментальный подбор разных составов, обеспечивающих один и тот же уровень базового свойства, чрезвычайно трудоемок, а в ряде случаев практически неосуществим (например, в случае ячеистых композитов с равной долей пор в заданном диапазоне размеров). Для таких исследований В.А. Вознесенский предложил [1] использовать изопараметрический анализ (ИПА) на основе экспериментально-статистических моделей. Описанные ЭС-моделями в зависимости от вектора  $x$  нормализованных рецептурно-технологических факторов ( $|x_i| \leq 1$ ), свойства  $Y$  материала анализируются в условиях постоянного уровня одного из них, в частности,  $A(x) = const$ . Метод ИПА был успешно применен в исследованиях ячеистых бетонов (Е.С. Шинкевич [2]), полимерных связующих (Т.В. Ляшенко и Я. Иванов [3, 4]), мелкозернистых бетонов (С.В. Коваль [5]) и других материалов. Однако графоаналитическая реализация этого полезного метода [4, 6] была недостаточно простой и удобной.

Новый подход к изопараметрическому анализу сформирован в рамках концепции полей свойств [7], с которой ИПА связан методологи-

чески. Действительно, достигаемые за счет изменения факторов  $\mathbf{x}$  изопараметрические условия соответствуют движению по поверхности поля  $A(\mathbf{x})$ , в случае двумерной области поля  $\Omega_x$  – вдоль изолинии  $A(\mathbf{x}) = const$ ; на соответствующей траектории в той же области  $\Omega_x$  полей других свойств материала,  $Y(\mathbf{x})$ , фиксируются уровни этих полей.

Изопараметрический анализ осуществляется по результатам вычислительного эксперимента на полях свойств. Использование вместе с ЭС-моделями полей метода Монте-Карло не только избавляет ИПА от сложных процедур движения равными шагами вдоль изолинии [4, 6], но и приближает результаты компьютерного эксперимента к результатам заменяемого им реального эксперимента.

**Компьютерная версия изопараметрического анализа.** Данный подход имеет следующие особенности.

Во-первых, ИПА проводится не по линии  $A(\mathbf{x}) = const = A_{is} = C$ , а в коридоре (1), который учитывает с заданным риском  $\alpha$  «размытость» определяемого по модели детерминированного уровня  $C$ ; ширина доверительного коридора задается ошибкой  $s_A$  экспериментального определения свойства  $A$ , уровнем  $t$ -критерия при риске  $\alpha$  и зависит от координат  $\mathbf{x}$  через функцию дисперсии предсказания  $d$  [4] (иногда допустима замена  $d(\mathbf{x})$  средним по  $\Omega_x$  значением  $\bar{d}$ ).

$$A(\mathbf{x}) = C \pm t_\alpha \cdot s_A \cdot [d_A(\mathbf{x})]^{0.5} = C \pm \Delta A_{is}(\mathbf{x}) \quad (1)$$

Границы доверительного коридора,  $C \pm \Delta A_{is}(\mathbf{x})$ , выделяют в области поля  $\Omega_x$  изопараметрический коридор  $\Omega_{is}$ .

Во-вторых, в анализе участвуют  $N_{is}$  точек, попавших в  $\Omega_{is}$ , из  $N$  генерированных случайных точек (1-ое подключение Монте-Карло), равномерно распределенных во всей области  $\Omega_x$ .

Коридор с  $N_{is}$  значениями  $A(\mathbf{x}_{is})$  по (1) «разворачивается»: либо вдоль линии  $A(\mathbf{x}) = C$ , при соответствующих изменениях вектора факторов; либо вдоль оси одного из факторов, за счет изменения которого предполагается управление свойствами  $A$  и  $Y$ . Для циклических изолиний  $A(\mathbf{x}) = C$  можно построить развертки обеих ветвей эллипса.

В-третьих, уровни полей любого числа других свойств материала рассчитываются, по соответствующим ЭС-моделям  $Y(\mathbf{x})$ , в каждой из  $N_{is}$  точек с координатами  $\mathbf{x}_{is}$ , попавших в изопараметрический коридор  $\Omega_{is}$ . Недоступные в реальном эксперименте данные об  $Y$  в изопараметрических условиях имитируются оценками  $Y(\mathbf{x}_{is}) \pm t \cdot s_Y \cdot [d(\mathbf{x}_{is})]^{0.5}$ , с генерацией случайных значений  $t$ , распределенных по стандартному

нормальному закону (второе подключение метода Монте-Карло). Если важна тенденция изменения  $Y$  в условиях постоянства  $A$ , достаточны оценки  $Y(x_{is})$  – средних уровней полей в точках  $x_{is}$ .

Такой алгоритм ИПА использован при исследовании возможностей модификации эпоксидных композиций, предназначенных для работы в адсорбционно-активных средах. Модификация направлена на улучшение эксплуатационных свойств материала без изменения реологических характеристик смесей.

**Условия эксперимента и моделирование.** Эксперимент по определению свойств эпоксидного композита проводился по 18-ти точечному четырехфакторному оптимальному плану. Варьировались две группы факторов состава (на 100 м.ч. пластифицированной эпоксидной смолы «Макро» при постоянном количестве отвердителя): «Модификаторы полимерной матрицы» и «Минеральный каркас». В первую группу входили дозировки органического модификатора (МО) на уровнях  $X_1 = 5 \pm 5$  и тонкодисперсного минерального модификатора (ММ) на уровнях  $X_2 = 8 \pm 8$  м.ч. Во вторую – количество кварцевого песка  $X_3 = 175 \pm 125$  и диабазовой муки  $X_4 = 70 \pm 20$  м.ч.

Реологические показатели определялись на ротационном вискозиметре РПЭ-1М. Показатели прочности и долговечности определены при испытании образцов  $2 \times 2 \times 8$  см. По данным эксперимента построен комплекс нелинейных структурированных ЭС-моделей (со значимыми при риске 0.1 коэффициентами), которые описывают поля физико-технических характеристик материала в координатах 4 факторов состава. Так, модель (2), с шестью отличными от нуля коэффициентами (при  $s\{\ln\eta\} = 0.075$ ), описывает полное поле эффективной вязкости  $\eta$  (Па·с) при скорости сдвига  $\gamma' = 1 \text{ с}^{-1}$ .

$$\ln \eta = 5.66 \begin{array}{|l} + 0.13x_1 \pm 0 x_1^2 - 0.06x_1x_2 \\ + 0.18x_2 \pm 0 x_2^2 \end{array} \quad \text{(а)} \quad \begin{array}{|l} \pm 0 x_1x_3 \\ \pm 0 x_1x_4 \\ \pm 0 x_2x_3 \\ \pm 0 x_2x_4 \end{array} \quad \text{(в)} \quad \text{(2)}$$

$$\begin{array}{|l} + 1.15x_3 \pm 0 x_3^2 \pm 0 x_3x_4 \\ + 0.23x_4 \pm 0 x_4^2 \end{array} \quad \text{(б)}$$

Основные обобщающие показатели [6, 7] этого поля:  $\eta_{\max} = 1485$  (при  $x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = +1$ ),  $\eta_{\min} = 49$  Па·с (при  $x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = -1$ ) и относительный прирост  $\delta\{\eta\}$  – в 30 раз. На рис. 1 показано локальное поле  $\eta$  в координатах факторов «Модификаторы полимерной матрицы» при средних уровнях факторов «Минеральный каркас» – содер-

жание песка 175 и диабаз 90 м.ч. При этих условиях введение модификаторов увеличивает вязкость только вдвое.

Для изопараметрического анализа выбрана изолиния  $\eta_{is} = 280$  Па·с, что примерно соответствует уровню вязкости в центре области поля ( $\exp[5.66] = 287$ ). Доверительный коридор  $\Delta\eta_{is}$ , затененный на рис. 1, построен при ошибке  $s_{\eta} = (280 \cdot 0.075) = 21$  Па·с и одностороннем риске  $\alpha = 0.25$  (допустимом на поисковых этапах исследования при изопараметрическом анализе на локальных полях).

На этом же рисунке показаны соответствующие локальные поля пределов прочности  $R_c$  и  $R_b$  (МПа), а также поле плотности  $d$  (г/см<sup>3</sup>). Следует отметить, что введение органического и минерального модификаторов (МО и ММ) по разному влияет на прочности при сжатии и изгибе: первый способствует, главным образом, увеличению  $R_b$ , второй –  $R_c$ .

**Результаты вычислительного эксперимента по ИПА свойств композитов из технологических смесей равной вязкости.** Генерировано множество случайных составов, равномерно распределенных в области двух факторов ( $x_1, x_2$ ); в данном случае это  $1000 + 4$  обязательных состава в вершинах квадрата. Из них отобраны те композиции, вязкость которых (изопараметр)

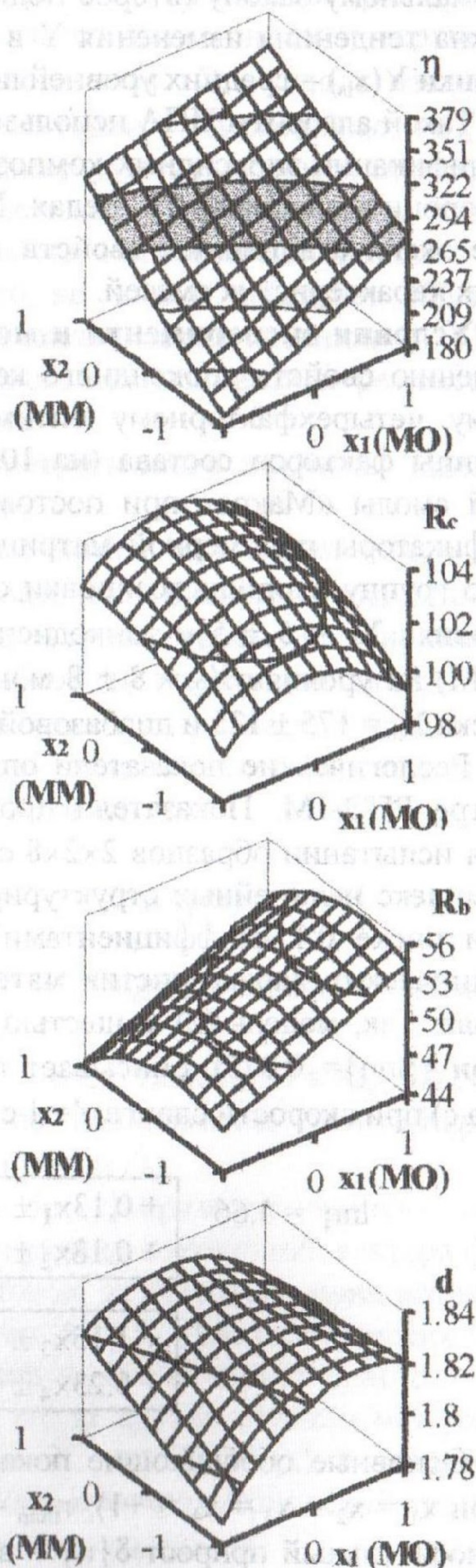


Рис. 1. Локальные поля свойств в координатах  $x_1$  и  $x_2$  при  $x_3 = x_4 = 0$

попадает в доверительный коридор  $265.8 \leq \eta \leq 294.2$  Па·с. Таких составов оказалось 299, то есть, коридор покрывает около трети области локальных полей, показанных на рис. 1. Уровни других свойств для этих 299 составов определены по ЭС-моделям (в данном анализе это модельно-детерминированные уровни полей). Показанные маркерами оценки образуют «коридорные» графики на рис. 2.

Изменение уровней свойств вдоль линии  $\eta = 280$  связано с увеличением количества органического модификатора, причем для сохранения постоянной вязкости содержание минерального модификатора в композиции должно уменьшаться (примерно от  $x_2 = 0.6$  до  $x_2 = -0.8$ ).

При таком управлении двумя модификаторами прочность при сжатии  $R_c$  и плотность  $d$  изменяются, с инженерной точки зрения, незначительно, а прочность на растяжение при изгибе  $R_b$  возрастает почти на 10 МПа (приблизительно на 20%). При этом также интенсивно растет отношение  $K_b = R_b/R_c$ , которое можно рассматривать [4] как критерий «бездефектности» композиционного материала.

Численно оценить изменение любых свойств в изопараметрических условиях позволяют обобщающие показатели коридоров свойств.

Для этого по оценкам  $Y(x_{is})$  в изопараметрическом коридоре  $\Omega_{is}$  определяется «несущая» корреляционная функция. Если ЭС-модель  $A(x)$  второй степени, то изменение  $Y$  вдоль оси изопараметрической развертки описывает [4] полином четвертого порядка. Так, для  $R_b$  получена функция (3), с коэффициентом детерминации  $R^2 = 0.98$ .

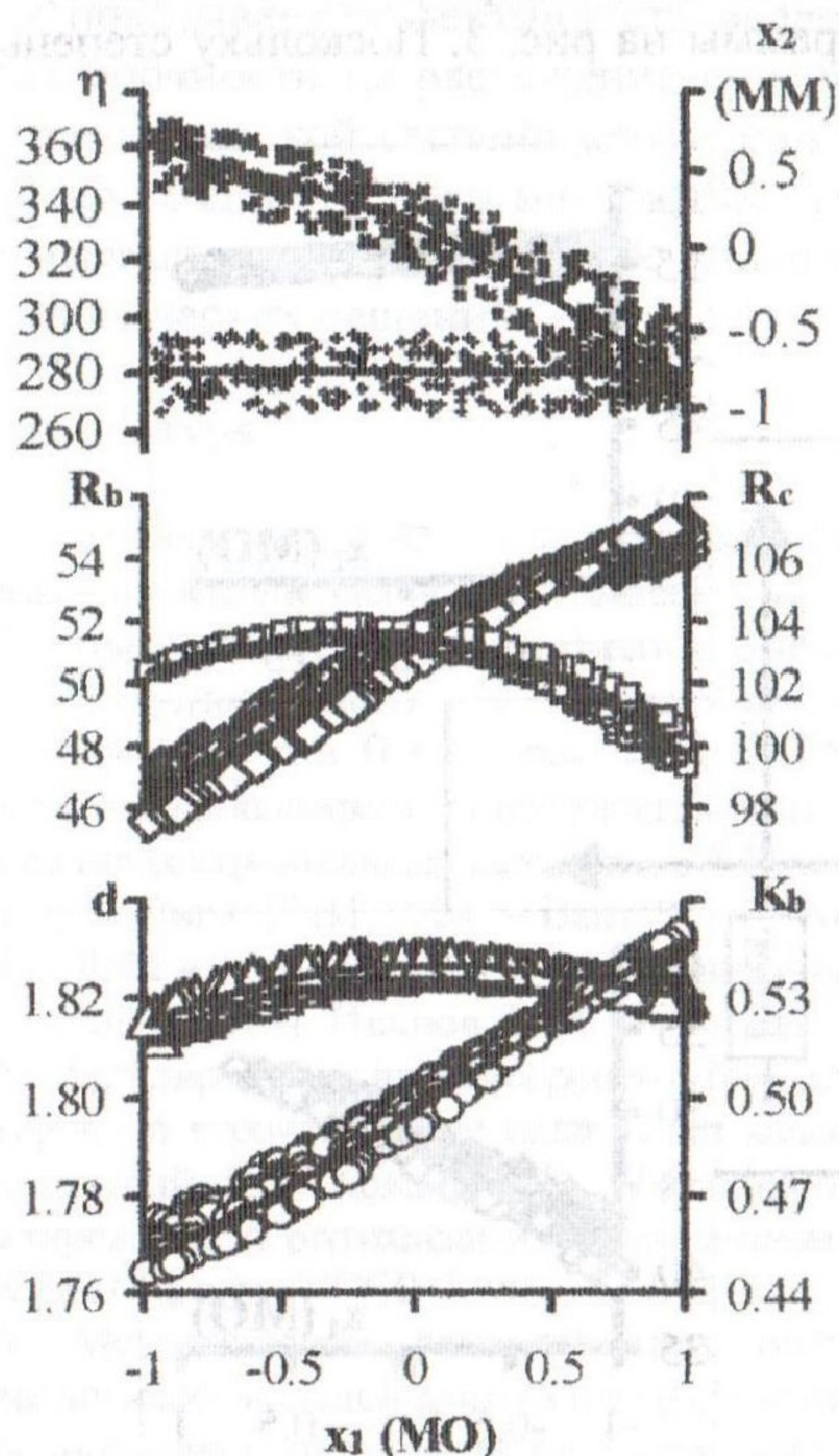


Рис. 2. Изменения содержания ММ и уровней свойств композита в зависимости от содержания МО для составов в коридоре  $\eta = 280 \pm 14.2$

$$R_b \{ \eta_{is} = 280 \} = 51,31 + 4,82x_1 - 0,74x_1^2 - 0,58x_1^3 - 0,15x_1^4 \quad (3)$$

Во сколько раз вариация за счет анализируемого фактора ( $x_1$ ) больше рассеяния значений вокруг несущей функции (3) показывает индекс концентрации  $\Theta = R^2/(1 - R^2)$ . При  $\Theta\{R_b\} = 49$  очевидно влияние МО на  $R_b$  (существенно меньше  $\Theta\{R_c\}$ , равный 17). Максимум и минимум функции (3), 54.67 и 46.19 (при  $|x_1| \leq 1$ ), определяют приросты, абсолютный  $\Delta = 8.48$  и относительный  $\delta_{\Delta} = \Delta/R_{b,\min} = 0.184$  (полезный при сравнении разных свойств; так,  $\delta_{\Delta}\{R_c\}$  составляет лишь 0.041).

**Влияние факторов «Минеральный каркас» на прочность при изгибе в условиях  $\eta = const$ .** Влияние на  $R_b$  содержания песка (sand) и наполнителя (filler) отражают диаграммы на рис. 3. Поскольку степень

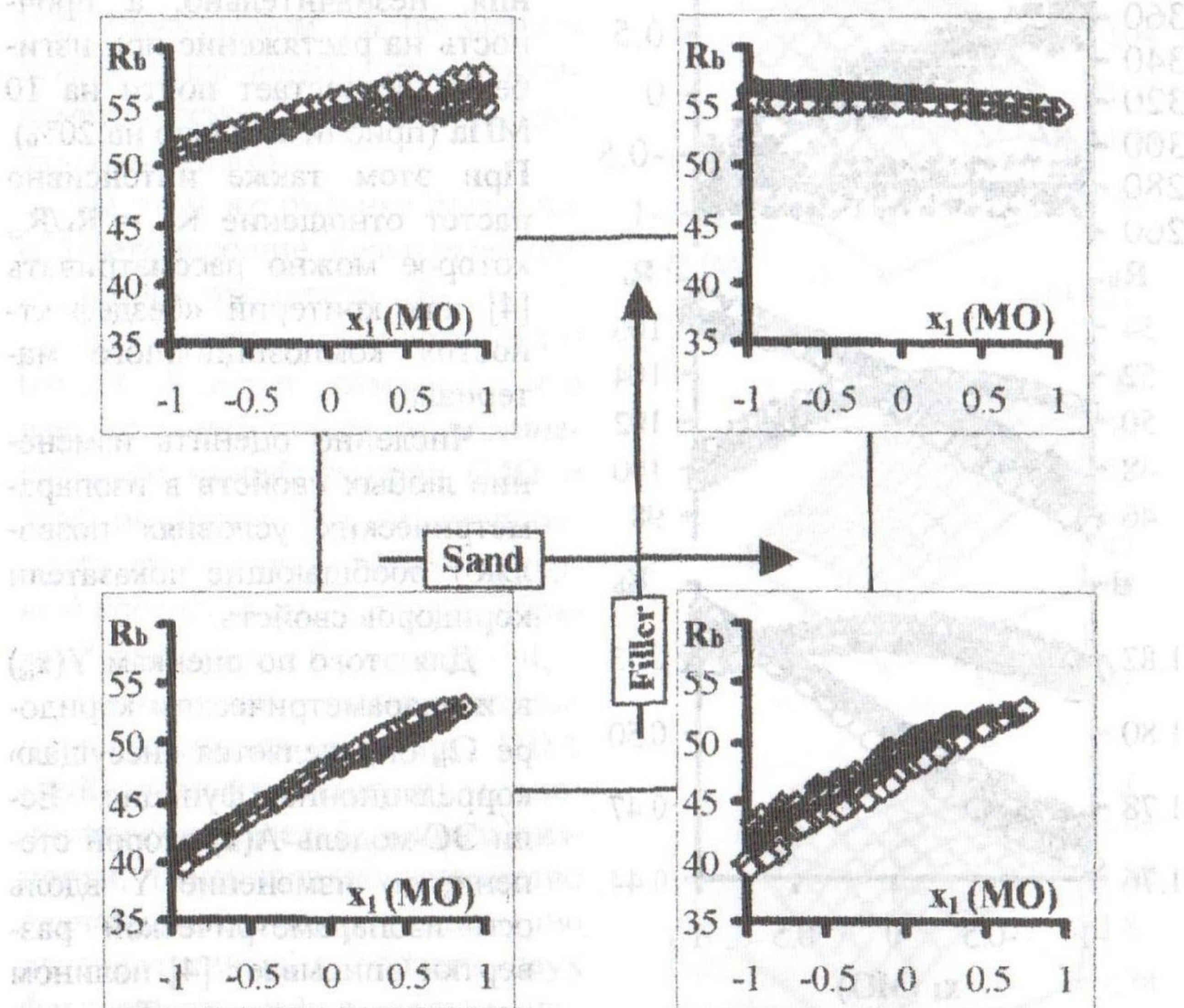


Рис. 3. Влияние органического модификатора на прочность  $R_b$  изовязких эпоксидных композиций при минимальном и максимальном содержании песка и наполнителя

наполнения сильно влияет на вязкость технологической смеси, условия изопараметрии различны для каждого из четырех локальных полей  $R_b(x_1, x_2)$ . В нижнем левом углу (самое низкое наполнение,  $x_3=x_4=-1$ )  $\eta_{is} = 70$  Па·с. С переходом к  $x_3=+1$  вязкость больше в 10 раз, а к  $x_4=+1$  – примерно в 1.6 раза; таким образом при  $x_3=x_4=+1$   $\eta_{is} = 1100$  Па·с.

Чтобы сравнить приросты  $R_b$  на рис. 3, следует учесть расстояния  $L$  между  $R_{b,max}$  и  $R_{b,min}$  ( $L \leq 2$  единиц однофакторного пространства), перейдя к градиентам  $\nabla = \Delta/L$  [6, 7]. При минимальном наполнении  $\nabla R_b = 7.1$ ;  $\Theta = 91$ . С повышением наполнения  $\nabla R_b$  резко снижается и даже становится отрицательным ( $-0.7$ ); индекс  $\Theta$  падает до 2.

**Заключение.** Изопараметрический анализ композиций равной вязкости показывает эффективность введения модификаторов для повышения прочности на растяжение при изгибе и критерия бездефектности при невысокой степени наполнения (примерно до 1 : 3). ИПА как средство компьютерного материаловедения позволяет извлечь из экспериментальных данных новое знание, необходимое для принятия технологических решений.

### Литература

1. Вознесенский В.А. Статистические методы планирования эксперимента в технико-экономических исследованиях. – М.: Финансы и статистика, 1981. – 263 с.
2. Современные методы оптимизации композиционных материалов / под ред. В.А. Вознесенского. – К.: Будівельник, 1983. – 144 с.
3. 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.
4. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я.П. Иванов, И.И. Николов. – К.: Будівельник, 1989. – 240 с.
5. 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. – К.: УМК ВО Минвуза УССР, 1990. – С. 4-12.
6. 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. – К., 1996. – 105 с.
7. 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.