

В. А. ВОЗНЕСЕНСКИЙ, д-р техн. наук,  
В. Н. ВЫРОВОЙ, В. Я. КЕРШ, кандидаты техн. наук,  
Т. В. ЛЯШЕНКО, С. Я. АЗАРОВА, Ю. М. ГРИЗАН,  
С. В. КОВАЛЬ, Л. А. МОЖАРОВА, Л. Е. ТРОФИМОВА,  
Е. С. ШИНКЕВИЧ, инженеры

# СОВРЕМЕННЫЕ

## **МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ КОМПОЗИЦИ- ОННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Под редакцией д-ра техн. наук  
В. А. Вознесенского

КИЕВ  
«БУДІВЕЛЬНИК»  
1983

**Современные методы оптимизации композиционных материалов** / Вознесенский В. А., Выровой В. Н., Керш В. Я. и др.; Под ред. д-ра техн. наук Вознесенского В. А. — Киев: Будівельник. 1983. — 144 с.

В книге изложены практические решения типовых технологических задач при создании новых композиционных материалов на основе простых методов математического моделирования.

Описаны принципиально новые методы создания рецептур, выбора режимов, анализа качества и надежности материалов. Даны необходимые для оперативной работы таблицы, графики, формулы.

Нормативные материалы приведены по состоянию на 01.03.83.

Рассчитана на инженерно-технических работников стройиндустрии и проектных организаций.

Табл. 17. Ил. 42. Библиогр.: с. 140—142 (86 назв.)

Рецензенты: д-р техн. наук *Б. В. Гусев*, канд. техн. наук *И. Б. Удачкин*

Редакция литературы по строительным конструкциям, материалам и изделиям  
Зав. редакцией инж. *А. А. Петрова*

*Виталий Анатольевич Вознесенский*, д-р техн. наук,  
*Валерий Николаевич Выровой*, *Владимир Яковлевич Керш*, кандидаты техн. наук,  
*Татьяна Васильевна Ляшенко*, *Светлана Ярославовна Азарова*,  
*Юрий Михайлович Гризан*, *Сергей Владимирович Коваль*,  
*Лидия Анатольевна Можарова*, *Лариса Евгеньевна Трофимова*,  
*Елена Святославовна Шинкевич*, инженеры

## СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Под редакцией д-ра техн. наук В. А. Вознесенского

Редактор *Т. Б. Богданова*  
Обложка художника *А. В. Косяка*  
Художественный редактор *А. А. Стеценко*  
Технический редактор *О. Г. Шульженко*  
Корректор *Н. Н. Басенко*

Информ. бланк № 2179

Сдано в набор 14.03.83. Подп. в печ. 14.06.83. БФ 03847. Формат 60×90 1/16. Бум. тип. № 1. Гарн. лит. Печ. выс. Усл. печ. л. 9. Усл. кр.-отт. 9,25. Уч.-изд. л. 10,5. Тираж 2000 экз. Изд. № 260. Заказ № 3—1162. Цена 85 к.

Издательство «Будівельник». 252053, Киев-53, Обсерваторная, 25

Киевская фабрика печатной рекламы им. XXVI съезда КПСС, 252067, Киев-67, Выборгская, 84.

*«Внедрение в практическую сферу чувства ответственности и тщательности обоснований (хорошо прививаемого математикой) — это важный элемент в обеспечении эффективности в развитии науки и техники» \**

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Определяя задачи народного хозяйства СССР, XXVI съезд КПСС отметил необходимость развития производства композиционных материалов и изделий с заданным комплексом свойств \*\*. Решение этой народнохозяйственной задачи обеспечивается общим развитием науки и техники, необходимыми чертами которого должны стать расширение автоматизации научно-исследовательских работ с применением вычислительной техники \*\*\* и повышение эффективности использования математической теории в прикладных целях \*\*\*\*.

По структуре композиционные материалы (КМ) — гетерогенные среды. По мнению акад. А. А. Илюшина и Б. Е. Победри [39, т. 2, с. 6], к ним можно отнести и поликристаллические среды, и многокомпонентные стохастические смеси (все компоненты смеси равноправны), и матричные смеси (в материале выделяется основа-матрица, а все остальные компоненты считаются включениями), и однородные материалы с пустотами (последние можно трактовать как включения с равными нулю модулями упругости). В области теоретических основ структуры и технологии таких композитов как бетоны на силикатных и полимерных связующих наметилась тенденция к переходу от описательного исследования к аналитическому. «Материаловедение сегодня — это полигон, где испытываются и внедряются последние достижения математики и вычислительной техники, физики (в первую очередь — физики твердого тела), физической химии и целого ряда других отраслей знания. Если справедливо утверждение, что самых необыкновенных открытий следует ожидать на стыке наук, то оно в полной мере применимо к материаловедению» [48, с. 3]. Для развития строительного материаловедения, которое следует рассматривать как часть общей теории композиционных материалов, технологии строительных материалов и конструкций, а следовательно, и для наиболее эффективного решения практических инженерных и технико-экономических задач используют результаты исследований фундаментальных наук в области теоретического обоснования преобразования вещества и энергии, методологии моделирования, приборно-инструментального обеспечения исследований и т. п.

\* Седов Л. И. Размышления о науке и ученых.— М.: Наука, 1980.— 372 с.

\*\* Основные направления экономического и социального развития СССР на 1981—1985 годы и на период до 1990 года.— М.: Политиздат, 1981.— 32 с.

\*\*\* Там же, с. 21.

\*\*\*\* Там же, с. 23.

Разработана, теоретически обоснована и внедряется в научно-исследовательскую и производственную практику *вероятностно-статистическая концепция анализа и оптимизация инженерных решений в области строительного материаловедения и технологии*, в которой *системный подход и многофакторное моделирование на основе алгоритмизированного планирования эксперимента синтезируются с физико-химической механикой и общей теорией композиционных материалов*. Реализация этой концепции при анализе и оптимизации структуры, свойств и технологии плотных и пористых композиционных материалов на силикатных, полимерных и других связующих отражена в работах [7, 8, 15 . . . 18, 20, 21, 27, 34, 58, 64, 65, 82].

Основные направления в решении инженерных задач технологии композиционных материалов \*:

1. *Создание композиционного материала без оптимизации его структуры и свойств технически нецелесообразно и экономически неэффективно*. Оптимизация должна отвечать *целям эксплуатации материала в конструкциях*.

2. *Триединая основа оптимизации рецептурно-технологических решений — системный подход к объектам, алгоритмизированный эксперимент и математическое моделирование*. Оптимальными должны быть как процессы *изготовления* материала, так и процессы его *экспериментального исследования и моделирования*.

3. Оптимизация структуры, свойств и технологии композиционных материалов *базируется на физико-химической механике* и должна, как правило, *соответствовать критериям экономии ресурсов* при заданном уровне качества готовой продукции. Моделирование рецептурно-технологических ситуаций *без учета физических закономерностей* структурообразования и *особенностей* материалов *мало эффективно*, так как дает лишь локальный успех.

4. *Оптимальное математическое обеспечение* решения задач анализа и оптимизации композиционных материалов — *автоматизированные на основе ЭВМ системы, ориентированные на работу с ними инженеров-материаловедов и технологов*. Обязательный элемент таких систем — *блоки решения типовых инженерных рецептурно-технологических задач и синтеза оптимальных планов экспериментально-статистического моделирования*. Инженеры-пользователи должны иметь комплект *справочно-методической литературы*, отражающей особенности объектов оптимизации и содержащей рекомендации по решению задач на микрокалькуляторах и мини-ЭВМ.

Предисловие, гл. I, § 1 гл. IV, § 1 гл. V, § 2, 4, 5 гл. VI написаны В. А. Вознесенским; гл. II — В. Н. Выровым; § 1 . . . 3 гл. III — В. Я. Кершем; § 2, 3, 5 гл. IV, § 1 . . . 3 гл. VI — Т. В. Ляшенко; § 4 гл. V — С. Я. Азаровой; § 6 гл. V — Ю. М. Гризаном; § 2, 3 гл. V — С. В. Ковалем; § 5 гл. V — Л. А. Можаровой; § 1, 4 гл. IV — Л. Е. Трофимовой; § 4 гл. III — Е. С. Шинкевич. Авторы благодарят инж. Г. М. Годунову за помощь в подготовке рукописи.

---

\* Оптимизация в проектно-технологических [49] и организационно-технологических [5] задачах выходит за рамки данной книги.

# ГЛАВА I. СИСТЕМНЫЙ ПОДХОД, ЭКСПЕРИМЕНТ И МОДЕЛИРОВАНИЕ — ТРИЕДИНАЯ ОСНОВА ОПТИМИЗАЦИИ РЕЦЕПТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ

## § 1. ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ

Перед промышленностью, выпускающей строительные материалы, изделия и конструкции, при высоких темпах роста объема производства стоит ряд программных технических задач. Это прежде всего:

создание материалов с *повышенными традиционными показателями качества* (например, высокопрочных бетонов или нестареющих герметиков);

создание материалов с *новыми показателями качества* (например, поглощающих радиоволновое излучение или аккумулирующих солнечную энергию);

повышение *стабильности и надежности* каждого показателя качества как при выпуске, так и во время эксплуатации материалов и конструкций;

создание изделий и конструкций, не только рационально *сочетающих материалы* с разным набором показателей качества, но и имеющих *формы*, соответствующие эксплуатационным нагрузкам и другим факторам внешней среды (например, многослойные плиты или оболочки с переменными радиусами кривизны).

При этом должны быть выдержаны *техничко-экономические условия и ограничения*, что, в свою очередь, содержит в себе постановку новых задач, в частности:

снижение *трудозатрат* при производстве материалов и конструкций повышенной заводской готовности, а также при возведении и эксплуатации сооружений;

уменьшение *времени* изготовления или интенсификации технологии по быстрдействию;

снижение удельного расхода *материальных и энергетических ресурсов* без ухудшения качества продукции;

интенсивная утилизация *отходов* промышленности данного региона, в том числе промышленных стоков, и использование их в качестве основных компонентов или добавок;

*охрана природной среды* от разрушения и загрязнения.

При инженерном решении перечисленных задач требуется принципиально новый *научно-технический подход*, включающий:

углубленное познание общих закономерностей *структурообразования и деструкции* субстанции материалов на всех уровнях от атомно-молекулярного (менее  $10^{-10}$  м) до массивного (более  $10^1$  м) с целью

управления этими процессами с помощью **рецептурно-технологических** и конструктивно-эксплуатационных факторов;

углубленное познание закономерностей **преобразования вещества и энергии** при реализации в существующих технологиях физико-химических, гидродинамических, механических, тепловых, массообменных и других процессов с целью их интенсификации и создания **новых технологий**, в том числе использующих нетрадиционные воздействия (электродинамические, магнитные и т. п.);

повышенную **точность** результатов и экспрессность **измерений** как свойств материалов и конструкций, так и параметров технологических процессов;

**количественные методы** описания взаимосвязей между отдельными рецептурно-технологическими, субстанциональными, конструктивно-эксплуатационными факторами, а также между ними и показателями качества и экономичности готовой продукции, с учетом стохастической природы взаимосвязей, с целью **оптимизации** принятия решений (в том числе с помощью ЭВМ) в автоматизированных системах управления технологическими процессами (АСУТП), проектирования (САПР), научных исследований (АСНИ) и т. п.

Существует три аспекта, принципиально важных для **развития** современного материаловедения и прогрессивных технологий.

Во-первых, происходит процесс усложнения в производстве строительных материалов программных технических задач, технико-экономических условий и научно-технических подходов к их решению. Этот процесс неизбежно приводит к **усложнению** трех основных взаимосвязанных объектов:  $Q_m$  — материалов как конечной продукции, передаваемой строителям;  $O_t$  — собственно **технологии** в промышленности, производящей материалы и конструкции;  $O_n$  — процессов **разработки и исследования** материалов и технологии как основы научно-технического прогресса в данной отрасли.

Во-вторых, интенсивное развитие этих сложных объектов можно обеспечить только в том случае, если при их анализе и синтезе использовать как **единое целое** методы и факты **фундаментальных и прикладных** наук (как внутриотраслевых, так и межотраслевых), вести исследования на **теоретическом и эмпирическом** уровнях познания, рассматривать **комплекс** естественно-научных, технических, технологических и социально-экономических взглядов на поведение объектов. Это диалектическое единство гарантируется **системным подходом** как общеметодическим принципом [45, с. 135], сформулированным в связи с прогрессирующим ростом **потерь** от принятия неправильных решений в отношении усложняющихся объектов.

В-третьих, при всем разнообразии объектов, целей и ограничений в реальных материаловедческих и технологических задачах (как в общих, так и в частных формулировках) — они содержат требование **о доказательном выборе в ограниченных пределах наиболее целесообразного варианта** инженерного решения, и, следовательно, могут рассматриваться как задачи оптимизации.

Поиск условий **оптимума** иллюстрируется на рис. 1.1. Требуется перевести объект из состояния  $Y=0$  в состояние  $Y>0$ , увеличивая расход ресурса  $X$ . Причем можно использовать одну из четырех аль-

тернативных стратегий  $A, B, C$  или  $D$ , примеры которых приведены в табл. I.1.

Каждая стратегия образует в пространстве  $\{Y-X\}$  траекторию управления, описываемую функцией  $Y=\varphi_A(X)$ ,  $Y=\varphi_B(X)$ ,  $Y=\varphi_C(X)$  или  $Y=\varphi_D(X)$ . Оптимальность одной из четырех альтернативных траекторий определяется, прежде всего, целью оптимизации, т. е. прогнозируемыми *конечными результатами*. Качество действия по приближению к цели [45, с. 26] оценивается по количественному критерию эффективности: абсолютному (например, прочность композита  $R, \text{МПа}$ ) или относительному (например,  $R/R_{\text{норм}}$ ). В поставленных задачах (см. табл. I.1), как и в общем случае, цели могут быть двух типов.

Первый тип — достигнуть *максимума*, израсходовав *любую часть* выделенного ресурса  $0 \leq X \leq 100$ . По величине  $Y_{\text{max}} = 10$  этой цели отвечают две траектории:  $Y=\varphi_B(X)$  в точке  $b_{10}$  и  $Y=\varphi_D(X)$  в точке  $d_{10}$ . Для выбора одной из них нужно выдвинуть новые гипотезы, сформулировать и применить *дополнительный критерий* (более низкого уровня иерархии целей). Их может быть, например, *наименьший расход ресурса*  $(X_{\text{opt}})_{\text{min}}$  — лучшая траектория  $\varphi_D(X)$  или *устойчивость*  $dY/dX$  в зоне  $Y_{\text{max}}$  при колебаниях  $(X_{\text{opt}} \pm \Delta X)$  — лучшая траектория, по-видимому,  $\varphi_B(X)$ .

Второй тип — достигнуть *заданного уровня*  $Y=\text{const}$  при *минимальном расходе*  $X_{\text{min}}$ . Здесь *решения* будут зависеть от величины  $Y=\text{const}$ :

$$\left. \begin{aligned} \text{Если } Y = 10, & \text{ то } d_{10} < b_{10}, \\ \text{если } Y = 8, & \text{ то } d_8 < c_8 < b_8, \\ \text{если } Y = 6, & \text{ то } c_6 < b_6 < d_6, \\ \text{если } Y = 4, & \text{ то } b_4 = c_4 < d_4 < a_4, \\ \text{если } Y = 2, & \text{ то } a_2 < b_2 < c_2 < d_2. \end{aligned} \right\} \quad (I.1)$$

Ответ отражает диалектическую природу системы: единой траектории выбрать нельзя. Так, например, для низкопрочных композитов могут быть оптимальны одни технологические решения, а для высокопрочных — другие. В общем случае некорректна постановка двухцелевых задач: достигнуть  $Y_{\text{max}}$  при  $X_{\text{min}}$ .

Если в задаче сформулировано два и более критериев  $Y_i$ , то цель становится неопределенной [45, с. 18]. В *общем случае* два критерия  $Y_1$  и  $Y_2$  (рис. I.1, б) имеют оптимум в *разных точках* факторного пространства  $X_1$  и  $X_2$ . Поэтому можно определить лишь *зону компромисса* между ними. Выбор координаты  $X$  в этой зоне не может быть форма-

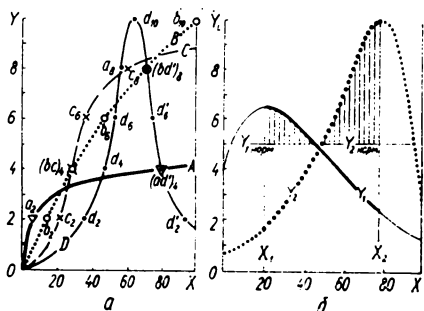


Рис. I.1. Возможные оптимальные решения на четырех траекториях управления системой (а) и зона компромисса  $(X_2 - X_1)$  при двух критериях качества (б).

лизован и решен без дополнительных гипотез (ранжирование  $Y_i$  по приоритету; оценка потерь от выбора неоптимальных  $X_i$  с помощью штрафов; свертка многих  $Y_i$  в один в виде «функции желательности» и т. п.) [1, 18, 45, 50, 60]. Зона компромисса может сократиться, если вводится ограничение  $Y_i > Y_{i\text{норм}}$ . Зона компромисса  $\Delta X\{Y_{i\text{норм}}\}$  в пре-

Таблица 1.1. Примеры оптимизационных задач

Параметр оптимизации	Значения параметров для объекта		
	Качество материала $O_M$	Технология производства $O_T$	Разработка и исследование $O_H$
Увеличиваемый показатель $Y$	Прочность материала	Доля продукции высшей категории качества	Объем информации о влиянии технологии на качество КМ
Расходуемый ресурс $X$	Удельный расход энергии	Затраты на автоматизацию отдельных агрегатов	Количество испытанных образцов
Стратегии $A, B, C, D$	Смесители четырех типов	Агрегаты разных этапов технологического процесса	Различные методики моделирования и анализа технологии

деле может совсем исчезнуть (например, при  $Y_{1\text{норм}} = Y_{2\text{норм}} = 5$ ) (см. рис. 1.1, б), что потребует принятия принципиально иных инженерных решений, например, перехода к многофакторному управлению  $Y_i = \varphi(X_1, \dots, X_K)$  или пересмотра нормативных требований к некоторым  $Y_i$ .

## § 2. ТЕХНОЛОГИЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ КАК СИСТЕМА

В задачах анализа и оптимизации основные объекты: материал  $O_M$ , технологию  $O_T$ , разработку и исследование  $O_H$  — необходимо рассматривать как целенаправленно функционирующие системы, поведение которых оценивают по  $M$  величинам их *выходов* или *откликов*  $Y_j$ , образующих в каждый момент времени  $\tau$   $M$ -мерный вектор поведения системы, изменяющийся в пределах  $Y_{j\text{min}} \leq Y_j \leq Y_{j\text{max}}$  ( $j=1, \dots, M$ ). Целенаправленное изменение поля поведения  $Y_M$  и поддержание его стационарным при воздействиях внешней (по отношению к системе) среды в каждый момент времени  $\tau$  осуществляется за счет управления уровнями  $K$  *входов* или *факторов*  $X_i$ , образующих  $K$ -мерный вектор. Этот вектор может быть изменен внутри области *факторного пространства*, границы которой  $X_{i\text{min}} \leq X_i \leq X_{i\text{max}}$  ( $i=1, \dots, K$ ) определяются объективными возможностями данного фактора или нормативом.

Относительно однородные с точки зрения целей анализа и оптимизации входы  $X_i$  и выходы  $Y_i$  целесообразно выделять в некоторые группы-подсистемы. Так, на схеме 1.1 показана блок-схема технологического процесса как сложной системы [15], в которой выделено шесть групп рецептурно-технологических и три группы эксплуатационных факторов. В семь из них (кроме  $X_p$  и  $X_k$ ) входят факторы, связан-



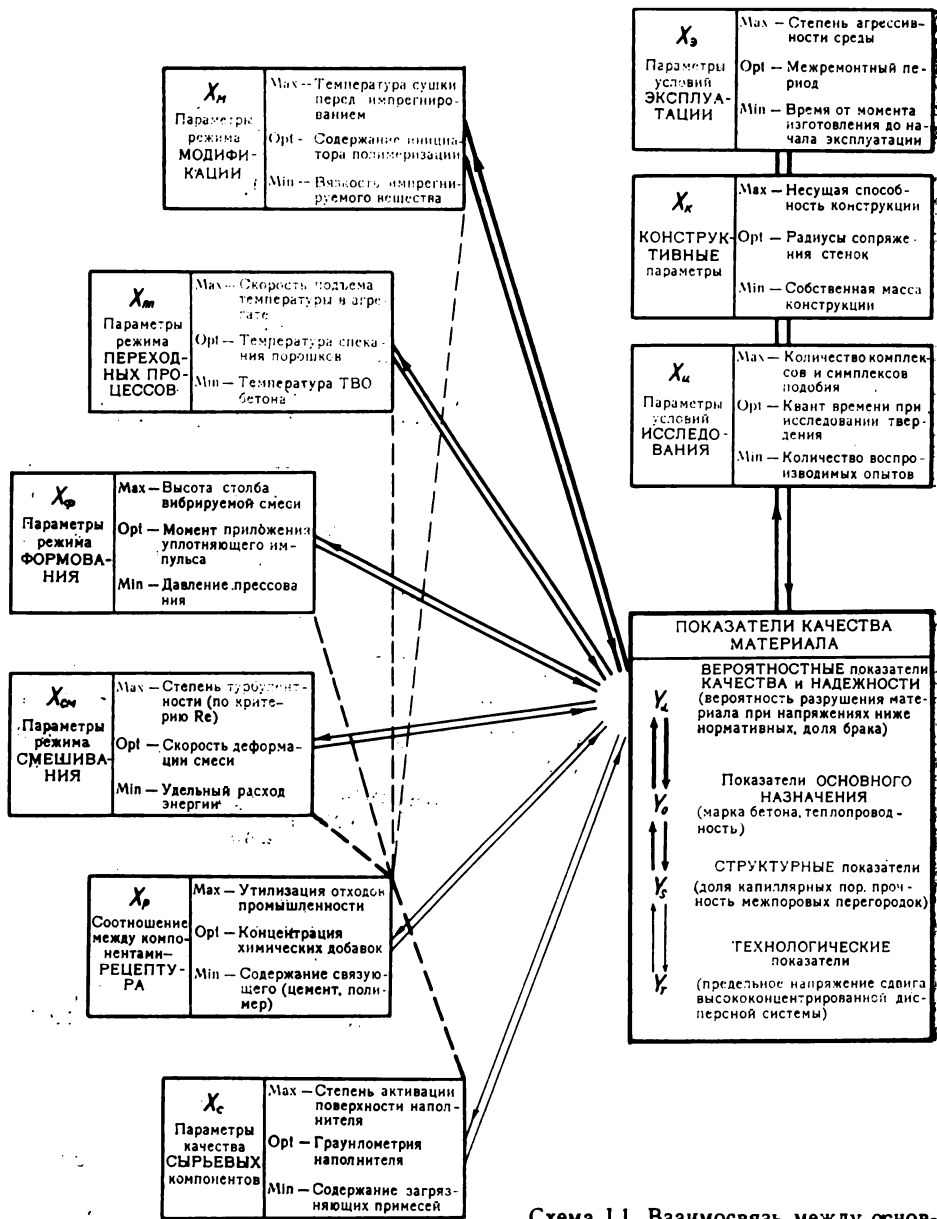


Схема 1.1. Взаимосвязь между основными подсистемами технологии композиционных материалов.

ные со временем протекания процессов (в том числе, например, со старением сырья или скоростью получения оценок качества материала). В каждой группе в качестве примеров приведены факторы, которые при условии  $Y_i = \text{const}$  (второй тип оптимизации — см. рис. 1.1, а) необходимо привести к максимальному  $\text{max}$ , или промежуточному оптимальному  $\text{opt}$ , или минимальному  $\text{min}$  уровню в границах факторного пространства  $X_{i\text{min}} \leq X_i \leq X_{i\text{max}}$  ( $i = 1, \dots, K$ ).

$X_c$  — параметры качества *сырьевых компонентов*.

$X_p$  — *рецептура*, представляемая несколькими равноправными способами:

а) абсолютная на единицу продукции или загрузку технологического аппарата (например, для определения активности цемента: цемент 300 г, песок 900 г, вода 120 мл);

б) относительная к общему количеству, принимаемому за единицу (например, гранулометрический состав зерен: мелкие + средние + крупные =  $w_1 + w_2 + w_3 = 1$ );

в) относительная к основному компоненту, принимаемому за единицу (например, состав бетона — цемент : песок : щебень = 1 : 2 : 3); рецептуру составляют или по *массе*, или по *молям*, или по *объемам*.

$X_{cm}$  — параметры режима *смещения* (для неньютоновских жидкостей с переменными реологическими характеристиками целесообразно в исследуемые факторы включать скорость их деформации  $\dot{\epsilon}$  — см. гл. IV, а для ньютоновских жидкостей — критерий Рейнольдса  $Re$  [58]).

$X_f$  — параметры режима *формования*, под которым понимается не только агрегатирование частиц и формообразование материала в изделие, но и измельчение; если конечный продукт или полупродукт порошкообразный. Может быть несколько стадий формообразования в технологическом процессе, крайне важный фактор в этой группе, в соответствии с общими принципами оптимизации технологии [46] с позиций физико-химической механики, — момент приложения уплотняющего импульса, который должен быть оптимальным.

$X_{pp}$  — параметры режима *переходных процессов*, т. е. приводящих к агрегатным или фазовым изменениям вещества (например, гидратация и полимеризация, сушка и спекание). Они определяют образование в отформованном изделии из подготовленной сырьевой смеси материала как такового.

$X_m$  — параметры режима *модификации*, направленного на улучшение структуры материала без изменения формы изделия. Кроме снятия внутренних напряжений за счет отжига и закалки, важнейшее направление модификации — инпрегнирование полимеризующихся составов в поровое пространство композитов.

Особый подблок образуют конструктивно-эксплуатационные факторы. Он обособлен от заводского производства и нередко выпадает из поля зрения технолога, что приводит к снижению народно-хозяйственного эффекта от применения материалов и конструкций в сооружениях.

$X_n$  — параметры условий *исследований* (контроля качества, испытаний и т. п.). Они оказывают существенное влияние на *правильность* (отсутствие систематических ошибок) и *точность* (минимизация слу-

чайных ошибок) информации [16, с. 34] о свойствах КМ, по которой делают вывод о его применении в строительстве и о регулировании рецептурно-технологических факторов. Особое значение группа  $X_i$  приобретает при назначении нормативных уровней качества, используемых в расчетах сооружений. Учет этих факторов необходим при решении задач моделирования и оптимизации.

$X_k$  — *конструктивные* параметры. Они оказывают решающее влияние не только на производство строительных конструкций (собственная масса, несущая способность, перекрываемый пролет и т. п.), но и на состояние групп факторов  $X_f$ ,  $X_{пп}$ ,  $X_m$ , поскольку накладывают значительные ограничения на область их действия.

$X_s$  — параметры условий *эксплуатации*, определяющие применимость материала или конструкции в конкретном сооружении.

Стрелками показано *прямое и обратное влияние* факторов на качество КМ. Под обратным подразумевается влияние на выбор факторов  $X$  нормируемых свойств материала ( $Y_i = \text{const}$ ), которое необходимо учитывать технологам-проектировщикам. *Взаимовлияние* между группами факторов изображено штрих-пунктирными линиями (на схеме 1.1 приводятся только для группы  $X_p$ ). *Иерархическая структура* влияния групп  $X_i$  на  $Y_i$  отражена в расположении их по вертикали и в увеличивающейся толщине стрелок. Неправильное решение в отношении управления вышестоящими факторами может свести к нулю эффект от оптимизации нижестоящих (например, неправильный режим тепловой обработки нарушает структурообразование, обеспечиваемое оптимальными химическими добавками).

*Выходы* системы образуют четыре иерархически связанные группы:

$Y_T$  — *технологические* показатели качества, необходимые для оценки воздействия факторов нижнего уровня на последующие технологические процессы, например  $X_c$  и  $X_p$  на  $X_{см}$ . В число важнейших  $Y_T$  входят показатели однородности компонентов и смесей, а также оценки реологических свойств неньютоновских жидкостей (см. гл. IV), определяющих процессы смешивания и формования;

$Y_s$  — *структурные* показатели: количество новообразований (например, по интенсивности линий при рентгеноструктурном анализе [22]), прочность контактных зон (гл. II), средний диаметр пор и градиенты полей распределения компонентов (гл. III) и т. п.;

$Y_o$  — показатели качества, характеризующие выполнение композиционным материалом *основного назначения* в данном сооружении. В их число входят приведенные затраты, коэффициенты эффективности использования основных компонентов [27] и другие технико-экономические характеристики;

$Y_a$  — *вероятностные* показатели качества и надежности — новая подсистема выходов, роль которой в инженерных исследованиях интенсивно возрастает.

Одна из их особенностей заключается в том [16, 18], что оценка  $Y_a$  строится с риском  $\alpha$ , отличным от 0,5, т. е. не как среднее арифметическое. Например, прочность материала  $R\{\alpha\}$ , превышающая с риском  $\alpha$  нормативный предел прочности  $R_{норм}$ , или как риск  $\alpha\{R_{норм}\}$  снижения показателя качества ниже норматива (доля брака в партии изделий).

Нередко выходы-показатели качества нижнего уровня иерархии целесообразно использовать как факторы для оптимизации  $Y_j$  более высокого уровня. При этом весьма перспективны работы, в которых анализируются последовательно соединенные подсистемы [13], где технологические  $Y_\tau$  или структурные  $Y_s$  показатели качества служат факторами подсистем с выходами  $Y_o$  или  $Y_a$  [8, с. 157].

Анализ схемы 1.1 показывает, что число  $N_x$  факторов  $X$ , влияющих на результаты работы системы  $Y_M$ , весьма велико ( $N_x \rightarrow \infty$ ). Целенаправленное изменение  $Y_M$  ведется по ограниченному числу  $K$  тех факторов, которые, по мнению технолога, наиболее существенно влияют на выбранный им критерий оптимизации управления системой (см. рис. 1.1). Остальные  $N_x - K$  факторов, вместе с воздействиями внешней среды, образуют группу случайно изменяющихся факторов  $\xi$ . Каждому моменту времени  $\tau$  в управляемой системе соответствует  $K$ -мерный вектор  $X$ , а разным моментам времени  $N_\tau$  — матрица  $X_\tau$  размера  $N_\tau \times K$ . Наличие в технологии группы случайно изменяющихся факторов  $\xi$  обуславливает ее поведение как системы *стохастического* (вероятностного) класса [15], в которой случайность не только действует наряду с необходимостью, но и в значительной мере определяет *причинно-следственные связи*. Таким образом, выходы  $Y_j$  величины *случайные*, в описание которых должны входить законы их распределения или хотя бы характерные оценки этих распределений (средние, дисперсии, квантили и т. п. [3, 8 и др.]).

Каждый из выходов системы  $Y_j$  связан с факторами  $X$  *объективно* существующей *зависимостью*, названной [58], по аналогии с термодинамикой, *уравнением состояния* системы

$$\psi(Y_j, \Theta_\psi, X_\psi, \tau_\psi, \xi_\psi) = 0. \quad (1.2)$$

Решение оптимизационных задач по известному уравнению состояния связано лишь с трудностями вычисления. К сожалению, в технологических, технико-экономических и других реальных сложных системах неизвестны ни вид функции  $\psi$ , ни полный набор факторов  $X_\psi$ , ни числовые значения констант (коэффициентов)  $\Theta_\psi$ , ни законы распределения случайных величин  $\xi_\psi$ , ни граничные условия. Несмотря на такую *неопределенность*, уравнение состояния (1.2) имеет и общеметодический, и технический смысл. Оно отражает и прямые, и обратные связи в системе, поскольку искомой величиной может быть и выход  $Y_j$ , и любой из входов  $X_i$ , и время  $\tau$  (соответствующее заданным  $Y_j$  и  $X_\psi$ ), и закон распределения  $\xi_\psi$ . Кроме того, из зависимости (1.2) следует, что при  $Y_j = \text{const}$  изменение любого  $X_i$  должно повлечь стохастическое изменение хотя бы еще одного фактора.

### § 3. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ПУТИ МИНИМИЗАЦИИ РИСКА АНАЛОГИИ

Решение оптимизационных задач для *конкретной* системы «О» в условиях неполноты информации об истинном уравнении состояния (1.2) возможно в результате построения для нее *математической модели* «М», в частности, вида

$$F_M(Y_j, \Theta, X, \tau, \xi) = 0, \quad (1.3)$$

которая представляет собой формально-знаковое описание объекта — прототипа «О», позволяющее получать *новую информацию*  $I_M$  о системе «О» [16, с. 12; 58, с. 18]. Как и модель любого другого класса [14, с. 30], математическая (1.3) может соответствовать прототипу «О» лишь *ограниченно* в рамках, обусловленных *целями* изучения объекта или управления его поведением. Критерием истинности (1.3) служит инженерная или технико-экономическая *полезность* информации  $I_M$  при последующей проверке ее в системе «О». Чтобы модель (1.3) оказалась полезной, ей *необходимо* обладать двумя диалектически связанными свойствами.

Во-первых, модель «М» должна быть *экономичной*, т. е. позволять достичь поставленной в задаче цели при меньших затратах ресурсов (дешевле, быстрее, безопаснее, удобнее и т. п.), чем при использовании объекта-прототипа «О».

Во-вторых, модель «М» должна обеспечивать возможность *распространения без существенного искажения* информации  $I_M$  на систему-прототип «О», т. е. обладать свойством, называемым транзитивностью [74, с. 44] или традуктивностью [31, с. 11].

Информация  $I_M$  о поведении системы-прототипа «О» и контрольная  $I_O$  тождественны только тогда, когда тождественны «М» и «О», а значит нет моделирования. При любом моделировании перенос информации  $I_M$  с модели на прототип есть логический вывод *по аналогии* [74, с. 54], когда посылка относится к одной системе — «М», а выводы — к другой — «О». Следовательно, *неизбежен риск* неверно решить инженерную задачу, отвергнув верную для прототипа гипотезу как ложную (ошибка первого рода) или же принять неправильную гипотезу как истинную (ошибка второго рода).

Теория и практика моделирования развиваются по разным направлениям, отражающим целевые установки аналогии между моделью и прототипом. Однако общей для всех направлений является разработка *методов учета и минимизации риска от аналогичности модели*. Этот риск складывается из многих компонентов. Для технологов и материаловедов необходимо выделить семь основных: уменьшение размерности факторного пространства при моделировании; обобщение результатов изучения части (выборки) на целое; аппроксимация неизвестной функции веером моделей; масштабирование входов и выходов системы; погрешность измерений; нормализация случайных величин; оценка параметров модели по экспериментальным данным.

*А. Риск от уменьшения размерности факторного пространства.* Невозможно составить полный список действующих факторов, а значит размерность  $X$  меньше  $X_\phi$ , что увеличивает влияние случайных факторов  $\xi$ . Это особенно ощутимо в ситуациях, когда инженер «теряет» один из наиболее существенных факторов  $X_i$ . На рис. 1.2, а показано поле из 50 точек в координатах  $\{Y-x_1\}$ . Вывод о некоррелированности фактора  $x_1$  и выхода системы  $Y$ , сделанный на основе визуального анализа, можно подтвердить расчетом коэффициента корреляции [8, с. 133] и его доверительных интервалов ( $-0,21 \leq \rho \leq 0,35$ ,  $\alpha=0,05$ ). Однако принятая гипотеза ложна — на выход влияет не только фактор  $x_1$ , но и «потерянный»  $x_2$ . Причем влияют они детерминированно, как  $Y = (1-x_1^2)x_2$ . Все 50 точек находятся на поверхности,

показанной на рис. 1.2, б. Формализованных методов снижения риска «А» крайне мало. Это, например, следствия первой теоремы подобия [14, 58], имеющие узкую область применения в задачах технологии и материаловедения. Основную роль в этом случае играет профессионально-логический анализ инженерами априорной (накопленной к началу моделирования) информации о данной конкретной системе, системах того же класса или подобных ей. В перспективе снижение

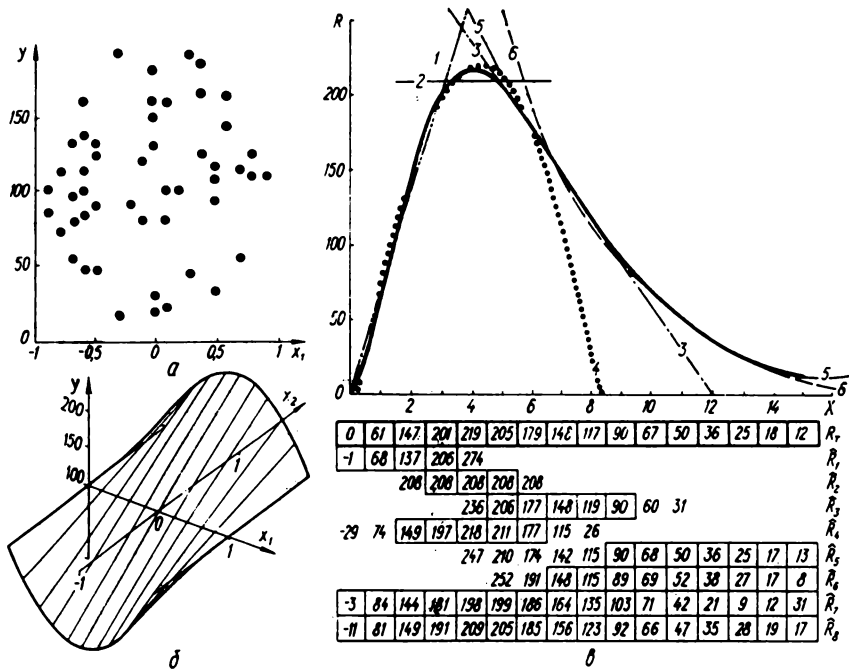


Рис. 1.2. Корреляционное поле (а) при анализе взаимосвязи  $Y$  с  $x_1$  и функциональная поверхность (б)  $Y = (1-x_1^2)x_2$ , а также восемь возможных аппроксимаций кривой  $R_7 = \phi(X)$

риска А будет обеспечиваться проблемно-ориентированными информационно-поисковыми системами, работающими в диалоговом режиме.

Б. Риск от обобщения части на целое. Раскрытие неопределенности уравнения состояния (1.2) и построение математической модели системы (1.3) основывается на анализе эмпирических данных о соответствии  $N$  значений некоторого выхода  $Y_j$  разным векторам  $X$ , отражаемым в информационной таблице (табл. 1.2) [16, 58]. В ней представлены не только отдельные данные, но и их первичное обобщение — статистические оценки: средние  $\bar{y}_u$  и дисперсии  $s_u^2$  по результатам  $m_u$  измерений в каждом  $u$ -м опыте

$$\bar{y}_u = \left( \sum_w y_{uw} \right) : m_u, \quad s_u^2 = \left[ \sum_w (y_{uw} - \bar{y}_u)^2 \right] : (m_u - 1). \quad (1.4)$$

В результате для каждого исследуемого выхода  $Y_j$  будет получена матрица значений факторов  $x$  размером  $N \times K$ ,  $N$ -мерный вектор дисперсий  $s^2$  (составлен из  $y_u$ ),  $N$ -мерный вектор наблюдений  $Y$  (составлен из  $y_u$ ). Как бы велико не было число  $N$ , а его увеличение связано с расходом ограниченных ресурсов, оно всегда конечно и много *меньше* числа возможных состояний системы. Следовательно, изучая свойства *выборки*, инженер должен сделать вывод о свойствах генеральной

Таблица 1.2. Информационная таблица о поведении системы

Номер опыта	Характеристики системы				
	входные (план эксперимента)		выходные (результаты эксперимента)		
	Значение факторов $x_1 \dots x_i \dots x_K$	Число параллельных измерений	Значения $Y$ в каждом измерении	Средний выход $u_u$	Дисперсия выхода $s_u^2$
1	$x_{11} \dots x_{i1} \dots x_{K1}$	$m_1$	$y_{11} \dots y_{1w} \dots y_{1m_1}$	$\bar{y}_1$	$s_1^2$
...	...	...	...	...	...
$u$	$x_{1u} \dots x_{iu} \dots x_{Ku}$	$m_u$	$y_{u1} \dots y_{uw} \dots y_{um_u}$	$\bar{y}_u$	$s_u^2$
...	...	...	...	...	...
$N$	$x_{1N} \dots x_{iN} \dots x_{KN}$	$m_N$	$y_{N1} \dots y_{Nw} \dots y_{Nm_N}$	$\bar{y}_N$	$s_N^2$

совокупности, что неизбежно сопровождается риском допустить ошибки первого или второго рода при проверке статистических гипотез об  $\bar{y}$ ,  $s^2$  и т. п. [16, табл. 1.1]. Риск типа  $B$  уменьшается по мере увеличения числа  $N$ , но такой подход неприемлем для абсолютного большинства и материаловедческих и технологических задач. При их решении используются рекомендации, вытекающие из теории вероятностей и математической статистики [8, 11, 16].

**В. Риск от аппроксимации.** Замена функции  $\psi$  в уравнении состояния (1.2) на основании табл. 1.2 может быть выполнена относительно удачно (с достаточной для данной инженерной цели точностью) на приближающуюся к ней функцию  $F_M$  (1.3) лишь в некоторой доступной для наблюдения в  $N$  точках ограниченной области  $\Omega$ . Выбранная для аппроксимации функция  $F_M$  не единственная, а входит в веер равноправных моделей, отличающихся сложностью математических форм и исходными предположениями их вывода. На рис. 1.2,  $\theta$  показаны возможные аппроксимации гипотетического уравнения состояния для прочности материала  $R$  и репертуарного фактора  $0 \leq X \leq 16$  [15, с. 46]

$$\hat{R}_T - 100X^2e^{-0.5X} = 0; \quad \hat{R}_T = 100X^2e^{-0.5X} \quad (1.5)$$

восемью другими функциями (здесь и далее знак  $\hat{\phantom{x}}$  — «крышка» служит для отличия расчетных величин):

$$\begin{aligned}
 \hat{R}_1 &= -1 + 69X \dots \dots \dots \text{прямая, } 0 \leq X \leq 3, \\
 \hat{R}_2 &= 208 \dots \dots \dots \text{константа, } 3 \leq X \leq 5, \\
 \hat{R}_3 &= 352 - 29X \dots \dots \dots \text{прямая, } 5 \leq X \leq 9, \\
 \hat{R}_4 &= -29 + 117X - 13,7X^2 \dots \dots \dots \text{парабола, } 2 \leq X \leq 6, \\
 \hat{R}_5 &= 436 - 54X + 1,7X^2 \dots \dots \dots \text{парабола, } 9 \leq X \leq 15, \\
 \hat{R}_6 &= -114 + 1830X^{-1} \dots \dots \dots \text{гипербола, } 7 \leq X \leq 15, \\
 \hat{R}_7 &= -3 + 101X - 15,0X^2 + 0,6X^3 \dots \dots \dots \text{полином третьей степе-} \\
 &\hspace{15em} \text{ни, } 0 \leq X \leq 15, \\
 \hat{R}_8 &= -11 + 101X - 7,7X^2 - 1,9X^3 + \\
 &+ 0,28X^4 - 0,013X^5 + 0,0002X^6 \dots \dots \dots \text{полином шестой степе-} \\
 &\hspace{15em} \text{ни, } 0 \leq X \leq 15.
 \end{aligned}
 \tag{1.6}$$

Каждая из функций (1.6) достаточно точно описывает  $R_T = \varphi(X)$  на соответствующем ограниченном участке  $X_{\min} \leq X \leq X_{\max}$ , доступном для наблюдения и анализа по  $N$  точкам информационной таблицы. Однако прогноз поведения системы за пределами этого экспериментально изученного диапазона по аппроксимирующим функциям (1.6), в отличие от истинного уравнения состояния (1.5), может быть далек от истины. Так, при эксперименте в четырех точках при  $5 \leq X \leq 9$  достаточно точна (максимальное отклонение при  $X=5$  составляет 1,7 %)

аппроксимация прямой  $\hat{R}_3$ , но переход к соседней точке  $X=10$  повышает отклонение до  $\approx 11,6$  %. При  $X \geq 12$  значение  $\hat{R}_3$  становится отрицательным, что противоречит физической природе прочности.

Выбор вида функции  $F_M$  — одна из наиболее сложных задач моделирования, которая в области материаловедения и технологии решается обычно одним из трех методов [58, с. 23], отличающихся исходными предположками. Во-первых, на основе фундаментальных законов природы можно составить *дифференциальные уравнения для бесконечно малых изменений* факторов  $X_i$  и решить их при тех или иных ограничениях, начальных и граничных условиях. Эти модели, в силу фундаментальности гипотез, обладают максимальной общностью результатов и образуют наиболее глубокую теоретическую базу отраслевой науки. К сожалению, такие результаты единичны и относятся к сравнительно простым тепловым, диффузионным и другим процессам, не отражающим специфики объектов материаловедения или технологии. В большинстве случаев инженерам приходится ограничиваться или численным анализом дифференциальных уравнений на ЭВМ без восстановления функции  $F_M$  [40], или построением уравнений подобия с заменой  $X_i$  на безразмерные комплексы  $\pi_i$  [14, 58]. Во-вторых, на основе некоторой *концептуальной модели*, написанной технологом на естественном языке с включением в нее совокупности профессиональных гипотез, идеализирующих механизм поведения системы, можно составить ее формализованное описание — математическую



модель для конечных или бесконечных малых изменений в системе. Эти модели будут обладать достаточной общностью результатов и наглядностью взаимосвязей между элементами системы. Они обычно входят в теоретическую базу отраслевой науки до тех пор, пока не будут изменены на основе более глубокой концептуальной модели. Число таких моделей, оказавшихся неэфемерными, также сравнительно невелико: реологические тела [42, 63, 72, 75], модели гранулометрических укладок [6, 7, 19, 81], высококонцентрированных дисперсных систем [44, 62, 75] и т. п.

В абсолютном большинстве случаев инженеры используют третий метод, требующий минимальных исходных предпосылок: выбирается некоторая *группа математических функций* и проверяется точность описания ими *поведения системы*, зафиксированного в табл. I.2. Конкурирующие функции — гипотетические модели могут быть отобраны в такую группу исходя из многообразных неформализуемых практических соображений (визуальное подобие полей эмпирических точек и справочных кривых, наличие априорной информации или некоторой концептуальной модели, традиционность в использовании ограниченного круга функций для данных задач, наличие программного обеспечения ЭВМ и т. п.). Целесообразно окончательно выбирать модель из числа удовлетворяющих требуемой точности, руководствуясь принципом *простоты* математического описания. Полученные по такой методике экспериментально-статистические модели с инженерной точки зрения наиболее полезны для анализа и оптимизации [16 ... 18] внутри исследованного факторного пространства (см. § 6 гл. I), так как наиболее полно учитывают особенности конкретных рецептурно-технологических ситуаций. По ним можно сделать выводы, расширяющие и уточняющие содержательный аспект концептуальных моделей (например, гл. IV). Однако сами по себе такие модели в теоретическую базу науки войти не могут, хотя в инженерной практике сохраняются долго.

*Г. Риск от масштабирования.* Эмпирические данные для табл. I.2 крайне редко полностью собираются на объекте, для которого строится математическая модель (I.3). В абсолютном большинстве случаев необходимо хотя бы часть информации получить на его *предметно-физических моделях*. Прежде всего, речь идет об определении показателей качества композиционных материалов  $Y_j$  на специальных образцах, а не в эксплуатируемых изделиях и постройках (субстанциональные модели [15, 58]), что влечет за собой необходимость введения в расчеты обоснованных переходных или масштабных коэффициентов  $c\{Y_{ij}\}$ . Не менее часто используются предметно-физические модели при решении рецептурно-технологических задач в исследовательских и заводских лабораториях, когда необходимо геометрическое уменьшение агрегатов и формооснастки, неизбежно изменение режимов теплообменных, гидродинамических, физико-химических и других процессов в уменьшенном объеме материалов и т. п. Аналогична картина в задачах анализа влияния группы эксплуатационных факторов (см. схему I.1) на композиционные материалы и изделия, когда в климатических камерах, на вибростендах и других установках предметно-физически моделируется структура внешних воздействий

при увеличении интенсивности циклов и сокращении их периодов. Для снижения риска  $\Gamma$  используют методы теории подобия [14, 58, 73] и справочно-нормативные данные о масштабных коэффициентах. Перспективно построение специальных экспериментально-статистических моделей, связывающих числовые оценки масштабных коэффициентов  $c\{Y_j\}$  с факторами  $X$ , а также развитие теории нелинейного масштабного эффекта в химических реакторах. Пока, к сожалению, в задачах материаловедения и технологии решение не достигается по оптимальной двушаговой схеме «лабораторный результат — промышленный выпуск». Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация ведутся по многошаговой стратегии с обязательной проверкой результатов на полупромышленных и промышленных опытных установках.

*Д. Риск от погрешности измерений.* Числовые значения входов и выходов, фиксируемые в информационной таблице, могут быть найдены только на основе их *измерения приборами* или *оценки экспертами* (по номинальным, порядковым, метрическим шкалам [16, с. 36]). При этом неизбежны *погрешности*, источниками которых могут быть [8, с. 85; 16, с. 37]: сам объект измерений (деактивация компонента во времени, неоднородность его элементов в пространстве и т. п.), оператор-измеритель (недостаточная квалификация, психофизическое состояние и т. п.), измерительный инструмент или испытательный стенд, методика проведения измерений, колебания внешней среды, а также комбинация этих причин. Погрешность условно делится на две части: систематическую, характеризующую *правильность* измерений, и случайную, характеризующую его *точность*. Систематическую нередко удается устранить, а случайная всегда остается в результатах измерений. По этим результатам обычно вычисляют числовое значение среднеквадратической ошибки эксперимента  $s_u$ . Так, в простейшем случае в каждой отдельной  $u$ -й строке табл. 1.2 ( $X_u = \text{const}$ ) оценкой ошибки  $s_{u\mu}$  будет величина  $s_u = + \sqrt{s_u^2}$  (см. (1.4)), в остальных ситуациях связь  $s_u$  с  $s_u$  более сложна и зависит от схемы организации работ по сбору эмпирических данных [8, с. 90; 16, с. 42]. Методы снижения риска  $D$  в задачах материаловедения и технологии непрерывно обогащаются за счет использования достижений метрологии, приборостроения и др. [43]. Два основных пути решения проблемы вытекают из анализа простейшего выражения [16, с. 32] для вычисления границ доверительного интервала, накрывающего с заданной вероятностью  $P = 1 - \alpha$  истинное значение среднего  $\eta_u$  результатов  $m_u$  измерений в  $u$ -й строке табл. 1.2,

$$P \left\{ \bar{y}_u - t \frac{s_u}{\sqrt{m_u}} \leq \eta_u \leq \bar{y}_u + t \frac{s_u}{\sqrt{m_u}} \right\} = 1 - \alpha. \quad (1.7)$$

Из зависимости (1.7) следует, что при постоянной вероятности  $P = 1 - \alpha$  (учитываемой квантилем  $t$ -распределения при числе степеней свободы  $f = m_u - 1$ ) доверительный интервал будет уменьшаться, а значит истинное среднее  $\eta_u$  будет ограничиваться точнее, если уменьшается ошибка эксперимента  $s_u$  (хорошо оснащенный техникой и правильно организованный опыт) и увеличивается число параллельных

измерений  $\eta_u$  (слабые ограничения на материально-временные ресурсы).

**Е. Риск от нормализации случайных величин.** В задачах материального ведения и технологии истинные законы распределения случайных величин  $\xi$  всегда не известны и заменяются теоретическими, среди которых наиболее часто используют *нормальный закон распределения*, который не универсален. С нормальным тесно связаны и такие широко используемые в статистических решениях распределения, как  $\chi^2$  (Пирсона),  $F$  (Фишера — Снедекора),  $t$  (Стьюдента) и др. [8, с. 33]. Существенное отклонение случайных величин  $\xi$  от нормального закона нарушает основные предпосылки статистического анализа экспериментальных данных [3], оценок параметров моделей и принимаемых по ним решений. Так, например, из выражения (1.7) следует: во-первых, что вне интервала случайная величина  $\eta_u$  может оказаться с вероятностью  $\alpha$ , во-вторых, что эта вероятность симметрична, т. е. ниже или выше границ интервала она равна  $\alpha/2$ . Но если величина в действительности распределена резко асимметрично, то эти заключения могут повлечь за собой серьезные практические ошибки (выпуск некондиционной продукции, неправильную регулировку процесса и т. п.). Методы уменьшения риска  $E$  разрабатываются теорией вероятностей и математической статистикой, однако их реализация нередко сопряжена с большими экспериментальными трудностями, поэтому необходимо (а нередко и достаточно) лишь представлять себе действие такого риска при формулировке инженерных выводов.

**Ж. Риск от оценки параметров модели по экспериментальным данным.** После выбора вида аппроксимирующей функции  $F_M$  (1.3) и получения информационной таблицы необходимо так подобрать числовые значения параметров  $\Theta$ , чтобы во всем поле поведения системы отклонение функции  $F_M$  от истинной  $\psi$  (представленной в табл. 1.2  $N$  опытными точками) было минимальным, что будет соответствовать наиболее точной идентификации объекта данной функцией  $F_M$  (1.3) по  $N$  разным опытным точкам. Наиболее распространены (но не единственно возможны) критерии точности, основанные на методе *наименьших квадратов (МНК)*, требующем минимизации суммы квадратов разностей  $\Delta_u$  между экспериментальными «истинными» значениями выхода  $y_u$  и расчетными  $\hat{y}_u$  по функции  $F_M$ :

$$\sum_{u=1}^N (y_u - \hat{y}_u)^2 = \sum_{u=1}^N \Delta_u^2 \rightarrow \min. \quad (1.8)$$

Если при  $K$  факторах аппроксимация осуществляется *линейной моделью* (полином первой степени, описывающей плоскость в пространстве размера  $1+K$ ), в которой оценки неизвестных параметров  $\Theta$  обозначены  $\mathbf{B}$ ,

$$\hat{Y} = \mathbf{x}_L \mathbf{B} = \sum_{i=0}^K b_i x_i = b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_i x_i + \dots + b_K x_K, \quad (1.9)$$

то через матрицу  $\mathbf{x}_L^*$  размера  $N \times (K+1)$  и  $N$ -мерный вектор значений

\*  $\mathbf{x}_L$  — матрица факторов  $\mathbf{x}$ , расширенная от размера  $N \times K$  до  $N \times L$ , где  $L = K+1$ , за счет введения столбца «фиктивной переменной»  $x_0 = +1$  [1, 16, 50], необходимой для расчета  $b_0$ .

выхода-отклика  $Y$  по МНК  $(K+1)$ -мерный вектор неизвестных параметров-оценок коэффициентов  $\mathbf{B}$  определится как

$$\mathbf{B} = (\mathbf{x}_L^T \mathbf{x}_L)^{-1} \mathbf{x}_L^T Y = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{x}_L^T Y = \mathbf{D} \mathbf{x}_L^T Y, \quad (1.10)$$

где  $\mathbf{x}_L^T$  — транспонированная [40] матрица  $\mathbf{x}_L$ ;  $\mathbf{M} = \mathbf{x}_L^T \mathbf{x}_L$  — квадратная матрица размера  $(K+1) \times (K+1)$ , составленная только из суммы произведений уровней факторов  $x$  и называемая матрицей моментов; после деления каждого из ее элементов на число опытов  $N$  такая матрица моментов  $\mathbf{M}_N$  будет называться *информационной матрицей* (ГОСТ 24026—80);  $\mathbf{D} = \mathbf{M}^{-1} = (\mathbf{x}_L^T \mathbf{x}_L)^{-1}$  — квадратная матрица размера  $(K+1) \times (K+1)$ , содержащая информацию о *статистических характеристиках* модели (диагональные ее элементы  $c_{ii}$  связаны с дисперсиями коэффициентов  $s^2\{b_i\}$ , а внедиагональные  $c_{ij}$  оценивают взаимосвязи между ними — ковариации  $\text{cov}\{b_i b_j\}$  [16, с. 94]) и называемая *ковариационной матрицей*;

$$\begin{aligned} \mathbf{D} \sigma_s^2 &= \begin{pmatrix} c_{00} & c_{01} & \dots & c_{0K} \\ c_{10} & c_{11} & \dots & c_{1K} \\ c_{20} & c_{21} & \dots & c_{2K} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{K0} & c_{K1} & \dots & c_{KK} \end{pmatrix} \sigma_s^2 = \\ &= \begin{pmatrix} \sigma^2\{b_0\} & \text{cov}\{b_0 b_1\} & \dots & \text{cov}\{b_0 b_K\} \\ \text{cov}\{b_1 b_0\} & \sigma^2\{b_1\} & \dots & \text{cov}\{b_1 b_K\} \\ \text{cov}\{b_2 b_0\} & \text{cov}\{b_2 b_1\} & \dots & \text{cov}\{b_2 b_K\} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \text{cov}\{b_K b_0\} & \text{cov}\{b_K b_1\} & \dots & \sigma^2\{b_K\} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Все основные свойства модели, характеризующие ее точность в целом, в заданной точке факторного пространства  $\mathbf{x}_p$ , числовых оценок ее коэффициентов, определения координат ( $\mathbf{x}_{\text{opt}}$ ), оптимального значения выхода-отклика  $Y_{\text{opt}}$  и др., — связаны со свойствами информационной матрицы  $\mathbf{M}_N$  и ковариационной  $\mathbf{D}$ . Так, среднеквадратическую ошибку от применения модели оценивают по дисперсии оценки функции отклика  $s^2\{\hat{Y}\}$  (ГОСТ 24026—80), которую рассчитывают для точки с координатами  $\mathbf{x}_p$  как скалярную функцию

$$s^2\{\hat{Y}\} = d_N N s_s^2 = (\mathbf{x}_p^T \mathbf{D} \mathbf{x}_p) s_s^2. \quad (1.12)$$

*Мера точности* или нормированная дисперсия  $d_N$  [69, с. 302], как следует из (1.11), является функцией двух независимых параметров: координат расчетной точки  $\mathbf{x}_p$ , назначаемой *пользователем модели*, и матрицы  $\mathbf{D}$ , характеризующей условия, в которых *ставили эксперимент*, т. е. собирали эмпирические данные в табл. 1.2. Формализованные приемы снижения риска  $\mathcal{J}$  интенсивно развиваются в научной дисциплине, получившей название *планирование эксперимента* (ГОСТ 24026—80) (разработка и изучение оптимальных программ экспериментальных исследований).

Анализ семи основных компонентов риска аналогии показывает, что для некоторых из них пути минимизации его пока плохо форма-

лизуемые (А и в значительной мере В). Поэтому выбор решений здесь в основном обусловлен профессионально-логическими способностями инженера. В то же время методы минимизации других составляющих риска (Б, Д и Ж, а также в значительной мере Г и Е) формализуются достаточно хорошо, что позволяет составлять алгоритмизированные руководства для материаловедов и технологов, а часть решений передавать ЭВМ (см. описание системы COMPEX в гл. VI).

Если к вышеизложенным группам задач, связанных с аналогичностью моделей, получаемых на эмпирической основе, добавить группы задач, связанных с выбором общей стратегии проведения экспериментальных работ (от формулировки целей и гипотез эксперимента до передачи его результатов в практику), с принятием по экспериментально-статистическим моделям инженерных решений (в т. ч. компромиссных), с диалогом между исследователем и ЭВМ на всех этапах предметного и имитационного эксперимента, то будут в какой-то степени очерчены границы более широкого и глубокого, чем планирование эксперимента научного направления — *математической теории эксперимента* (МТЭ) [2, с. 4; 16, с. 3; 47, с. 8].

#### § 4. МНОГОФАКТОРНЫЕ ПОЛИНОМИАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ

При решении абсолютного большинства задач анализа и оптимизации композиционных материалов необходимо получить с заданной точностью *описание поведения системы*, но не обязательно давать полное объяснение механизма явлений, описанных математической моделью. При таких целевых установках естественно стремиться к получению наиболее простых аппроксимирующих многофакторных функций, универсальных как по форме, так и по алгоритмам моделирования. Этим условиям удовлетворяют полиномиальные модели для  $K$  безразмерных факторов  $x_i$ , например, гиперплоскость  $\hat{Y} = x_1 B$  (I.9) — полином первого порядка. Однако заданной точности решений, даже при очень узком диапазоне изменения факторов (см. рис. I.2), с помощью такого упрощенного описания для систем в области КМ добиваются редко. Полиномиальная модель должна учитывать прежде всего *нелинейность* влияния рецептурно-технологических факторов на выход и явление *синергизма*, т. е. не прямо пропорциональное усиление выхода при одновременном изменении двух и более факторов. Нелинейность проще всего учесть добавлением к полиному (I.9) еще  $K$  элементов  $b_{ii}x_i^2$  и получить модель главных эффектов второго порядка

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{i=1}^K b_i x_i + \sum_{i=1}^K b_{ii} x_i^2, \quad (I.13)$$

в которой *каждый* фактор влияет на  $\hat{Y}$  по *квадратичной параболе*. Для многих задач такой учет нелинейности по каждому  $x_i$  достаточен, но при необходимости уточнения описания степень параболы  $m$  можно повышать до  $m \geq 3$  (см. гл. IV). Алгоритм расчета вектора неизвестных оценок коэффициентов по МНК (I.10) в модели (I.13) не усложнился, потому что она, став нелинейной по  $x_i$ , осталась *линейной по*

параметрам  $b_0, b_i, b_{ii}^*$ . Размер вектора  $\mathbf{B}$  при переходе от (I.10) к (I.13) изменится с  $L=K+1$  до  $L=2K+1$ . Синергизм двух факторов учитывается взаимодействиями  $b_{ij}x_i x_j$ , число которых для  $K$  факторов  $S^2_K = 0,5 \times K(K-1)$ . Их добавление к (I.13) переводит модель в полный полином второй степени с числом эффектов  $L=0,5(K+2)(K+1)$

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{i=0}^K b_i x_i + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^K b_{ii} x_i^2. \quad (I.14)$$

Если все квадратичные элементы  $b_{ii}$  отсутствуют, но взаимодей-

Таблица I.3. Число эффектов в полиномиальных моделях при  $K \leq 12$  (отмечена граница  $L < 50$ , не приводятся  $L > 100$ )

Число эффектов	Значения эффектов для $K$											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
а) $L\{b_i\}$												
б) $L\{b_{ii}\}$												
в) $L\{b_{iii}\}$												
г) $L\{b_{ij}\}$												
д) $L\{b_{ijk}\}$												
е) $L\{b_{iii}\}$												
Модель квадратичная												
А. Главных эффектов (а) + (б)	0	1	3	6	10	15	21	28	36	45	55	66
Б. Неполная (а) + (г)	0	6	1	4	10	20	35	56	84	120	165	220
В. Полная (а) + (б) + (г)	0	2	6	12	20	30	42	56	72	90	110	132
Модель кубическая												
Г. Главных эффектов (А) + (в)	4	7	10	13	16	18	22	25	28	31	34	37
Д. Неполная (А) + (д)	0	4	8	15	26	42	64	93				
Е. Неполная (В) + (д)	3	6	11	19	21	48	71					
Ж. Неполная (В) + (в)	4	8	13	19	26	34	43	53	64	76	89	
З. Неполная (В) + (е)	3	8	16	27	41	58	78					
И. Неполная (В) + (д) + (е)	3	8	17	31	51	78						
К. Неполная (В) + (в) + (д)	4	8	14	23	26	54	78					
Л. Неполная (В) + (в) + (е)	4	10	19	31	46	64	85					
М. Полная (В) + (в) + (д) + (е)	4	10	20	35	56	84						

ствия  $b_{ij}$  остаются, то будет получен неполный полином второй степени

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{i=0}^K b_i x_i + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j, \quad (I.15)$$

который, сохраняя линейное описание влияния каждого фактора  $x_i$  на  $\hat{Y}$ , дает общую модель в виде  $(K+1)$ -мерного седловидного параболоида с минимумом в центральной точке.

\* Линейность по параметрам сохраняется, если добавлять элементы типа  $b_i e^{a_i x_i}$ ,  $b_i \log_{a_i} x_i$ , когда  $a_i$  известно априори. Но она исчезает, если ввести элементы типа  $a_i e^{b_i x_i}$ ,  $a_i \log_{b_i} x_i$ , поскольку неизвестный параметр оказывается внутри функционала.

В табл. 1.3 для  $1 \leq K \leq 12$  приведено число эффектов  $L$  для моделей (I.13...15), а также для неполной и полной кубических моделей (учтены взаимодействия более высоких порядков  $b_{iij}x_i^2x_j$  и  $b_{ijk}x_ix_jx_k$ ).

Безразмерность факторов достигается *нормализацией* (ГОСТ 24026—80) именованных величин  $X_i$  (в единицах СИ, рублях, штуках и т. п.) по формуле

$$x_i = (X_i - X_{i0}) : \Delta X_i, \quad (I.16)$$

где  $X_{i0} = (X_{i\max} + X_{i\min}) : 2$  — значение натурального именованного фактора в центре факторного пространства — *основной уровень* (ГОСТ 24026—80);  $\Delta X = (X_{i\max} - X_{i\min}) : 2$  — *интервал варьирования фактора* (ГОСТ 24026—80), равный полудипазону его изменения в эксперименте  $X_{i\min} \leq X_i \leq X_{i\max}$ .

Из зависимости (I.16) следует, что на границах факторного пространства  $x_i = |1|$ , а в его центре  $x_i = 0$ . Таким образом, нормализация по выражению (I.16) переводит факторное пространство из гиперпараллелепипеда в гиперкуб (см. гл. VI). Безразмерные переменные  $x_i$  аналогичны симплекс-инвариантам в теории подобия [58, с. 29]. Они имеют четкий *смысл* и показывают по абсолютной величине, на какую часть от максимально возможного (в пределах эксперимента) интервала изменяется при управлении данный фактор, а по знаку — в какую сторону изменяется фактор от центра эксперимента (в котором числовая оценка свойств  $\hat{Y}$  равна величине свободного члена  $b_0$ ). Размерность всех коэффициентов модели  $b_0, b_i, b_{ii}, b_{ij} \dots$  одинакова с размерностью отклика  $\hat{Y}$ , что дает возможность легко интерпретировать эти числовые оценки в терминах изучаемого выхода системы (например,  $b_i$  — как скорости изменения  $\hat{Y}$ , а  $b_{ii}$  — как ускорения и т. п. [2, 16, 50]).

Не рекомендуется в моделях переводить  $x_i$  в именованные факторы  $X_i$ , так как при этом резко ухудшаются возможности их интерпретации и принятия решений. Во-первых, свободный член модели характеризует отклик  $\hat{Y}$  системы, когда все факторы равны нулю, но при натуральных шкалах это означает, что в *рецептуре композита нет ни связующего, ни наполнителя* и т. п., а в модели может фигурировать «реальная» отрицательная прочность материала [7, с. 338; 68, с. 34]. Такой аллогизм объясняется тем, что модели типа (I.14) строят для *ограниченного* факторного пространства, что видно из самой записи нормализованного фактора (I.16), а рядом с моделью при именованных факторах ограничения обычно не записывают. Во-вторых, переход к именованным факторам приводит к тому, что *все оценки* коэффициентов будут иметь *разную размерность*, нередко трудно интерпретируемую (например, если размерность прочности  $R$  — Па, температуры ТВО  $X_1$  — К и силы тока при электропрогреве  $X_2$  — А, то эффект взаимодействия  $b_{12}$  должен иметь размерность Па/К·А). Ссылка на удобство использования в инженерной работе моделей в натуральных переменных несостоятельна — в уравнении конвективного теплообмена [58] *не расшифровывают* критерии Нуссельта  $Nu$ , Рейнольдса  $Re$  и Прандтля  $Pg$  для того, чтобы *подсократить степени* у коэффициента

динамической вязкости  $\nu$  или представить скорость жидкости  $\omega$  в явном виде.

При алгоритмизированном планировании экспериментов факторы  $x_i$  варьируют обычно на двух (принимают значения  $+1$  или  $-1$ ) или трех уровнях (значения  $+1$ , или  $0$ , или  $-1$ ) через *равные интервалы*  $\Delta X_i$ . Если необходимо многоуровневое варьирование  $x_i$ , то сохраняют принцип равенства кратных интервалов, что обеспечивает и симметричность их изменения по отношению к центру плана [16, с. 79]. Преобразование (I.16) линейно с тангенсом угла наклона  $(\Delta X)^{-1}$ . Однако бывает полезно использовать и нелинейные преобразования. Если известны однофакторные зависимости  $Y=f(X_i)$ , то можно подобрать такую функцию  $V_i=F_i(X_i)$ , чтобы сложная  $Y=\varphi(V_i)$  при минимальном уклонении описывалась отрезком *прямой* или *параболы* (т. е. соответствовала возможностям описания системы полиномиальной моделью  $m \leq 2$ ). Например, при исследовании влияния агрессивных сред на материал [16, с. 177] рассматривались концентрации, равные  $C=0,1\%$ ,  $C=1\%$ ,  $C=10\%$ ; которые можно представить как  $C=10^{-1}$ ,  $C=10^0$  и  $C=10^{+1}$ , что обеспечивает равенство интервалов варьирования показателей степени при константе 10 или  $\lg C$ . Некоторые варианты преобразования переменных по априорной информации даны в § 5 гл. VI.

При исследовании факторного пространства для рецептурных переменных, выраженных как *i-е долевые отношения к сумме всех q составляющих*, нормализация не осуществляется, поскольку такие факторы ( $v_i$ ) безразмерны и изменяются в пределах  $0 \leq v_i \leq 1$  при  $\sum_i v_i = 1$ . Они взаимозависимы, так как любой из них (без потери общ-

ности  $v_i$ ) вычисляется как  $v_i = 1 - \sum_{i=2}^q v_i$ . Такое обозначение рецептур

характерно для языка физической химии и металлургии и плодотворно использовано при исследовании многокомпонентных систем на диаграммах «состав — свойство» и «состав — состояние». Факторное пространство «состав из  $q$  компонентов» в общем случае ограничено объемом *симплекса* — простейшей замкнутой выпуклой ( $q-1$ -мерной) фигурой в виде треугольника, тетраэдра, пентатона и т. д., т. е. объемом гипертетраэдра. В этом случае рецептурную систему описывают с помощью так называемых *приведенных полиномов* [32, 51], учитывающих равенство  $\sum_i v_i = 1$ . Одна из форм таких полиномов не имеет явно выраженных свободного члена и квадратичных эффектов и для  $m=2$  записывается как

$$\hat{Y}_j = \sum_{i=1}^q a_i v_i + \sum_{i < j} a_{ij} v_i v_j. \quad (I.17)$$

Описанный подход очень эффективен, если «свойство»  $Y_j$  зависит только от состава  $\sum_i v_i$ , т. е. является *константой вещества* (температуры плавления и фазовых переходов, растворимости и т. п.). Накоплен опыт геометрического построения многокомпонентных диаграмм в разных отраслевых рецептурных задачах. Расширяется применение в них и полиномов типа (I.17) с  $m=2-5$  [13, 32, 64 и др.], поскольку



результаты исследования легко переводятся на язык трехкомпонентных диаграмм. Однако этот подход по сути исходных предпосылок («свойство есть константа состава») не совместим с условиями большинства реальных рецептурно-технологических задач для отвердевающих КМ, у которых (см. схему 1.1) «свойство есть функция и состава, и технологии, и условий эксплуатации (включая время структурообразования)». Более плодотворен класс моделей, одновременно предложенный в работах советских [26, 34] и болгарских [35] ученых, где одна модель *объединяет* влияние и *зависимых* факторов *состава*  $v_i$  (язык многокомпонентных диаграмм) и *независимых* факторов *технологии*  $x_i$  (язык обычных полиномиальных моделей)

$$\hat{Y} = \sum_{i=1}^q a_i v_i + \sum_{i < j} a_{ij} v_i v_j + \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^K (ab)_{ij} v_i x_j + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^K b_{ii} x_i^2, \quad (1.18)$$

где  $(ab)_{ij}$  — обозначение эффекта взаимодействия смешиваемого фактора  $v_i$  и независимого  $x_j$ .

Еще более перспективен новый класс моделей [34, с. 18; 52, кн. 3, с. 110], в котором объединяются две *физически разнородные группы* «смесевых» факторов  $\sum_i v_i = 1$  и  $\sum_j x_j = 1$  или обе эти группы и независимые технологические факторы  $x_i$  (пример использования таких моделей в задачах реологии КМ см. § 5 гл. IV).

Выбор факторного пространства, учет ограничений и физического существа задачи взаимосвязан с выбором типа модели, гипотетически наиболее точно описывающей поведение рецептурно-технологической системы.

Построение модели можно считать законченным, а саму модель использовать для принятия материаловедческих и технологических решений только после того, как алгебраический расчет оценок коэффициентов  $\mathbf{B}$  и «невязок» (1.8) будет дополнен статистическим анализом как отдельных коэффициентов, так и модели в целом. Поскольку в любом эксперименте значения уровней факторов  $x_i$  изменяются и стабилизируются *целенаправленно* и случайной оказывается лишь величина отклика  $\hat{Y}$ , то используется *регрессионный* анализ. Применение же корреляционного анализа и, в частности, вычисление оценок корреляции как парных, так и множественных, в этом случае некорректно, так как  $x_i$  не случайные величины, а значит не могут образовать  $(K+1)$ -мерное нормальное распределение ни при каких преобразованиях [3, 8].

На первом этапе регрессионного анализа определяют среднеквадратические ошибки  $s\{b_i\}$  оценок коэффициентов моделей по формуле (I.19), следующей из (I.11),

$$s\{b_i\} = s_s \sqrt{c_{ii}} \quad (I.19)$$

и индивидуальные доверительные интервалы для каждого *истинного* коэффициента регрессии  $\beta_i$

$$P \{ b_i - t_{s_s} \sqrt{c_{ii}} < \beta_i \leq b_i + t_{s_s} \sqrt{c_{ii}} \} = 1 - \alpha, \quad (I.20)$$

смысл которых аналогичен (I.7). Причем, для квантиля  $t$  число степе-

ней свободы равно  $f_3$ . По зависимостям (1.19) и (1.20) определяют то критическое значение оценки коэффициента, ниже которого расчетные оценки  $b_i$  целесообразно с *риском*  $\alpha$  считать *незначимыми*, т. е. равными нулю. Для упрощения представления результатов моделирования в системе COMPEX (см. гл. VI) и ускорения принятия инженерных решений при переменном уровне риска  $\alpha$  [16, с. 229] введена как алгебраический критерий информационной возможности каждого эффекта модели величина гауссовской точности \* коэффициентов

$$h\{b_i\} = b_i : \sqrt{c_{ii}} = ts_\alpha, \quad (1.21)$$

которую можно определять без фиксации риска  $\alpha$ , т. е. без выбора числового значения  $t\{\alpha, f_3\}$ .

Если матрица  $D$  (1.11) диагональна ( $c_{ij}=0$ ), то корреляция между оценками коэффициентов  $b_i$  и  $b_j$  отсутствует ( $\text{cov}\{b_i, b_j\}=0$ ) и вышеизложенная процедура *корректна* для всех коэффициентов модели. В этом случае из модели можно удалять статистически незначимые коэффициенты (для них  $h\{b_i\} < h\{b_i\}_{кр}$ ) *без пересчета* числовых оценок остальных коэффициентов.

Если для некоторого коэффициента  $\text{cov}\{b_i, b_j\}$  *не равна нулю*, то индивидуальные оценки интервалов по (1.20) полезны, но недостаточны для характеристики статистической модели [16, с. 55]. Корректно можно оценить лишь *совместную* доверительную (при  $P=1-\alpha$ ) *область* для всех  $L$  параметров  $\beta$  [16, с. 95], которая ограничена  $L$ -мерным эллипсоидом («эллипсоидом рассеяния оценок»), объем которого прямо пропорционален определителю ковариационной матрицы  $D$ .

На втором этапе проверяется гипотеза об *адекватности* (соответствии эксперименту) полиномиальной модели со всеми  $\lambda$ -значимыми коэффициентами регрессии. При этом используется минимизируемая МНК сумма квадратов (1.8), называемая в регрессионном анализе остаточной и обозначаемая далее  $SS_{ост}$ . Эта величина, как и сумма квадратов  $SS_{на}$ , связанная с неадекватностью моделей ( $SS_{на} = SS_{ост} - S_3$ , где  $SS_3$  — сумма квадратов, связанная с воспроизводимостью опытов), в системе COMPEX (см. гл. VI) вычисляется непосредственно из (1.8). Такой подход полезен, потому что анализ невязок  $\Delta y_u$  в *каждой* строке плана позволяет найти ту узкую область факторного пространства, в которой точная модель может давать повышенные расхождения (например, из-за несимметричности ветвей параболы в некотором сечении гиперповерхности). Для проверки *адекватности* формулируется нуль-гипотеза  $H_0: \sigma_{на}^2 = \sigma_3^2$ . Если она по критерию Фишера  $F_a$

$$F_a = \frac{SS_{на}}{\lambda} : s_3^2 = s_{на}^2 : s_3^2 \quad (1.22)$$

будет признана правдоподобной ( $F_a < F_{табл}$ ), обычно при  $\alpha=0,05$ , то модель описывает процесс адекватно эксперименту. С инженерной точки зрения это значит, что модель предсказывает результаты  $\hat{Y}_u$  в сред-

\* Гауссовская точность обратна относительной ошибке  $\delta_u$  или коэффициенту вариации  $v_u = s_u / \bar{y}_u$  (1.4). Чем меньше ошибка  $s_u$ , тем выше мера точности  $h_u$ .

нем с погрешностью  $s_{на}$  большей в  $\sqrt{F_a}$  раз, чем экспериментальная ошибка  $s_{э}$ , но эта разница может быть отнесена к незначительной и объяснена ограниченностью информации (поскольку с риском  $\alpha$  принято, что генеральные  $\sigma^2_{на} = \sigma^2_{э}$ ). Проверка адекватности по критерию (I.22) корректна со статистической точки зрения, однако к ее результатам следует относиться *разумно с технико-экономических позиций* [16]. Возможна такая ситуация, в которой модель неадекватна ( $F_a > F_{табл}$ ) из-за малой ошибки опыта  $s^2_{э,лаб}$  (проводился прецизионный лабораторный эксперимент). Однако, если  $s^2_{на}$  (как характеристика точности модели) по величине удовлетворяет технико-экономическим требованиям, то допустимо заменить  $s^2_{э,лаб}$  в формуле (I.21) на характеризующую производственные испытания величину  $s^2_{э,пр.п} > s^2_{э,лаб}$ .

На третьем этапе статистического анализа необходимо рассчитать дисперсию предсказанного значения выхода по полиномиальной модели  $s^2\{\hat{Y}\}$  (I.12) и ее доверительные интервалы [16, с. 100], после чего модель можно использовать для принятия инженерных решений (§ 6 гл. I).

Вышеизложенный анализ основных типов полиномиальных многофакторных моделей, а также методов их статистического анализа позволяет сформулировать [16, с. 103] три вывода, существенных для *оптимизации всего процесса* экспериментально-статистического исследования.

Во-первых, из зависимостей (I.10) и (I.11) следует, что для определения  $L$  неизвестных оценок  $b_i$  в полиномиальной модели необходимо и достаточно, чтобы матрица плана  $x$  содержала  $L$  разных строк, т. е. *минимальное число опытов в плане* эксперимента  $N_{min} = L$  (насыщенный план). Излишек опытов  $N - N_{min}$  может быть полезен не алгебраически, а лишь статистически.

Во-вторых, важное свойство ковариационной матрицы  $D$  (I.11) в том, что она не зависит от вектора наблюдений, по которому находят числовые оценки параметров модели. Следовательно, свойства матрицы  $D$  могут быть исследованы и сконструированы (например, по заданному соотношению между диагональными элементами  $c_{ii}$ , определяющими ошибки коэффициентов  $\{b_i\}$ ) до того, как собираются данные в информационную таблицу. Поскольку  $D = M^{-1} = (x^T L x L)^{-1}$ , то и матрица  $x$  может быть исследована и *сконструирована оптимально* (по отношению к целям исследователя) *до проведения опытов*.

В-третьих, независимой от результатов эксперимента оказывается и *мера точности* модели — нормированная дисперсия предсказания  $d$  (I.12). Поскольку она зависит от  $x$ , то возникает возможность *априорного конструирования* планов для построения моделей, например, с повышенной точностью в нужных точках факторного пространства  $x_p$ .

Матрицы  $D$  и  $M$ , мера точности  $d$  и другие статистические характеристики модели — основа для *синтеза матриц  $x$  планов* эксперимента  $E$  (см. § 3 гл. VI). Для обеспечения *оптимальности* планов  $E$  используют систему специальных *критериев*  $\psi(E)$ , отражающих *формализованные* требования к свойствам моделей. Эти критерии  $\psi(E)$  в абстрактной математической форме обобщают ту массу пожеланий, которую ква-

лифицированный экспериментатор выдвигает к результатам исследований на профессионально-логическом уровне. Например, требование «хочу оценить роль каждого рецептурно-технологического фактора в системе независимо от других» формализуется как равенство нулю коэффициентов корреляции

$$\rho\{b_i, b_j\} = c_{ij} : \sqrt{c_{ii} c_{jj}}, \quad (1.23)$$

что приводит к требованию диагональности матрицы  $D$  (1.11), которое осуществимо, если  $x$  — ортогональная матрица [16, с. 104], т. е. план  $E$  оптимален по критерию ортогональности. А вот требование «хочу получить модель с наилучшей точностью определения всех входящих в нее эффектов, поскольку все факторы равноценны» формализуется как минимизация обобщенной дисперсии, пропорциональной объему  $L$ -мерного эллипсоида рассеяния всех  $L$  оценок параметров [2, с. 42; 18, с. 58], который крайне упрощенно можно представить [2, с. 39] в виде объема  $L$ -мерного параллелепипеда, полученного от перемножения всех дисперсий  $s^2\{b_i\}$  (1.19). Это приводит к требованию максимизации  $|M|$  — определителя информационной матрицы  $M$  (1.16), т. е. к использованию критерия  $D$ -оптимальности (по первой букве термина детерминант). Синтез  $D$ -оптимального плана  $E$  с приемлемым для экспериментатора числом опытов  $N$  для построения многофакторных полиномов  $m \geq 2$  — задача большой вычислительной сложности [47, 76, 77], решаемая на ЭВМ (см. гл. VI).

В любом эксперименте фиксируется (до его проведения или по его окончании) матрица значений факторов  $x$ , т. е. план эксперимента  $E$ . Он характеризуется значениями критериев оптимальности  $\psi(E)$ , которых насчитывается несколько десятков [1, 16, 47, 50]. Достаточно сложный план  $E$  не может быть оптимальным сразу по многим из существующих критериев, но может быть по ним компромиссно хорошим. Современный подход к синтезу оптимальных планов эксперимента строится именно на поиске численными методами с помощью ЭВМ компромиссных решений [47, с. 30]: задается один важнейший критерий (во многих случаях это  $D$ -оптимальность — критерий, согласующийся с общей концепцией эффективных статистических оценок), а остальные критерии используются или для ограничения области поиска или для сравнительной оценки некоторой группы решений. Синтезировать новые планы эксперимента при решении задач материаловедения и технологии необходимо лишь в исключительных случаях, анализируемых в гл. VI. В относительно стандартных ситуациях, образующихся при решении абсолютного большинства задач, вполне достаточно при построении моделей первого, второго и третьего порядков использовать планы из каталогов [35, 69]. В повседневной оперативной работе производственной направленности нередко достаточно ограничиться очень узким кругом планов: для  $K=2 \div 4$  планами Бокса  $B_2$ ,  $B_3$  и  $B_4$  с одной центральной точкой, для  $K=5$  — планом Хартли  $Ha_5$ , а для  $K=6 \div 10$  — планами Рехтшафнера  $R_6 \dots R_{10}$ , приведенными в [16].

## § 5. СТРАТЕГИЯ АНАЛИЗА И ОПТИМИЗАЦИЯ НОВЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Разработка оптимального построения технико-экономических исследований с использованием математической теории эксперимента относится к наиболее актуальным вопросам. Некоторые общеметодические рекомендации уже сформулированы в ряде работ [1, 13, 16... 18, 29, 64], однако в них не учтены особенности целевых установок отраслевых исследований и особенности субстанции, структуры и функционирования отраслевых объектов.

Таблица 1.4. Стратегия исследования новых композиционных материалов

Элементы стратегии	Этап поиска—ЭП		Рабочие этапы—ЭР, ЭР <sub>2</sub> ...		Этап уточнения—ЭУ	
	+	0	+	0	+	0
<b>Показатели качества НМ:</b>						
экспресс-анализ $Y_1$ и $Y_0$	+++		++		+	
анализ полный $Y_1$ и $Y_0$	+		+++		++	
анализ структурный $Y_3$ в экстремальных точках $U_{i \min}$ и $U_{i \max}$	+		+++		+++	
анализ структурный $Y_3$ во всех точках плана	0		0		++	
анализ вероятностных $Y_{2i}$	0		0		++	
<b>Факторы, планы и модели:</b>						
число факторов $N$	6...10		4...5		2...3	
число воспроизведений опытов $m_i$	1...2		2...5		До 100	
рекомендуемые планы $\xi$	$R_6 \dots R_{10}$		$B_4 \dots B_5$		$B_1, 3^4$	
модели линейные	+		0		0	
квадратичные	+++		+++		+++	
неполные кубические	0		+		+	
кубические	0		0		+	
уровень риска $\alpha$	Более 0,2		0,1...0,2		Менее 0,1	
<b>Инженерные задачи:</b>						
поиск оптимальных $x_{i \text{opt}}$	+++		+++		+++	
стабилизация некоторых $x_{i \text{opt}}$	+++		+++		0	
обоснование причин стабилизации	++		+++		0	
перемещение области эксперимента	+++		+		0	
объяснение роли факторов	+		++		+++	
объяснение механизма явлений	0		+		+	
рекомендации по использованию результатов в практике	+		++		+++	

При анализе и оптимизации композиционных материалов целесообразно использовать вариант стратегии [16, с. 137], приведенный в табл. 1.4. Этот вариант предназначен для решения задач для *новых* композиционных материалов. В нем учтено семь важных особенностей таких исследований.

1. Поскольку материалы новые, а следовательно, оптимизируются при большом *дефиците* априорной информации, то стратегия складывается не менее чем из трех *последовательных* этапов с *возрастающими глубиной и достоверностью* исследования при сокращающейся размерности факторного пространства. Необходимость и целесообразность тех или иных элементов стратегии условно оценена по четырехбалльной системе: «0» — не рекомендуется, «+» — возможно, «++» — предпочтительно, «+++» — необходимо.

2. Поскольку *время ожидания* числовых значений откликов для многих свойств твердеющих композиционных материалов (особенно на силикатных связующих) при определении  $Y$  по стандартным методикам весьма *велико*, то на *первых* этапах исследования (особенно «ЭП») целесообразно выбирать для оптимизации только такие  $Y_T$  и  $Y_0$ , которые определяются *экспрессно*, даже если они лишь косвенно (риск ошибки первого рода при корреляции до 0,2) характеризуют конечное качество  $Y_s$ ,  $Y_0$  и  $Y_a$ . Однако на последних этапах (особенно на «ЭУ») следует стремиться к оценке не только средних результатов (1.4), но и вероятностных показателей качества и надежности композита  $Y_a$ , а также структурных показателей  $Y_s$ , используемых для объяснения полученных результатов.

3. На поисковом этапе «ЭП» в исследование целесообразно включать как можно *больше факторов*  $X_i$ , гипотетически влияющих на качество композита. Эта рекомендация дополнена в табл. 1.4 обязательным требованием использования уже на этапе поиска «ЭП» *квадратичных планов*, позволяющих оценить все  $b_i$ ,  $b_{ii}$  и  $b_{ij}$  раздельно. Как показывает опыт построения и использования нескольких тысяч полиномиальных моделей для композиционных материалов, квадратичные эффекты  $b_{ii}$  и взаимодействия  $b_{ij}$  играют нередко большую роль, чем  $b_i$ . Рекомендуются насыщенные планы второго порядка Рехтшафнера [16, с. 127; 69, гл. 3] с одной центральной контрольной точкой, которые до  $K=10$  дают (см. табл. 1.3) приемлемое для первого этапа количество опытов  $N=66+1=67$ . В условиях жестких ресурсных ограничений лучше синтезировать специальные насыщенные планы (см. гл. VI) для моделей, содержащих только главные эффекты  $b_0$ ,  $b_i$  и  $b_{ii}$  (а может быть и  $b_{iii}$  [69]), чем использовать двухуровневые планы со смешанными эффектами взаимодействия, которые без априорной информации невозможно интерпретировать. В то же время на этапе «ЭУ» целесообразно оставить для исследования лишь 2—3 основных фактора  $x_i$ , но, используя планы третьего порядка [69], получить весьма информативные кубические модели для показателей надежности  $Y_a$  и структуры  $Y_s$ .

4. При переходе от этапа «ЭП» к «ЭР<sub>1</sub>» и т. д. необходимо четко обосновать *причины стабилизации* каждого снимаемого с дальнейшего изучения фактора  $x_i$ . Стабилизация должна осуществляться на оптимальных (или плезиоптимальных [16]) уровнях  $x_{i\text{opt}}$ , найденных

по результатам оптимизации моделей предшествующего этапа. Без этого при изменении размерности факторного пространства в результате будут вноситься большие систематические погрешности субъективного характера. Аналогично формулируется требование в отношении переноса центра эксперимента, диапазонов варьирования, возможных преобразований входов и выходов инженерных решений.

5. Если по мере выполнения работ от «ЭП» к «ЭУ» размерность факторного пространства уменьшается, то число *параллельных* измерений *возрастает* до  $m_u = 50$ . На первом же этапе достаточно во всех строках плана единичных результатов (при определении ошибки  $s_z$ , лишь по дублированным в центре опытам или справочным аналогам при  $f_z = \infty$ ).

6. На первых этапах инструментальный структурный анализ композита (особенно с затратой больших материальных и временных ресурсов на электронную микроскопию, ДТА, рентгеноструктурный анализ и т. п.) не следует применять для всех точек плана. Достаточно глубоко изучить лишь *две контрастные* структуры: *лучшего* из полученных образцов (соответствующего  $y_{j\min}$ ) и *худшего* ( $y_{j\max}$ ). В то же время на этапе «ЭУ» результаты количественной оценки структурных характеристик композитов  $Y_s$  должны быть получены во всех точках плана, что позволит с помощью изопараметрического анализа (см. гл. III) выявить функции типа  $Y_{0,j} = \varphi(Y_{s,j})$ .

7. *Степень достоверности* выводов, характеризуемая риском ошибки первого рода  $\alpha$  при построении доверительных интервалов для параметров  $\mathbf{B}$ , должна *возрастать* по мере перехода от «ЭП» к «ЭУ». На поисковом этапе работ для некоторых откликов  $Y_j$ , особенно определяемых экспрессно, допустим двухсторонний риск  $\alpha \geq 0,5$ .

*Эффективность* стратегии и результатов моделирования можно оценить *ресурсным*  $\mathcal{E}_{\text{мтэ}}^p$  и *информационным*  $\mathcal{E}_{\text{мтэ}}^n$  показателями [16, с. 135]. Первый определяется как отношение числа  $N_T$  опытов, проводимых по традиционным планам исследований, к числу  $N_{\text{мтэ}}$  опытов в планах, рекомендованных математической теорией эксперимента, при условии равенства в обоих случаях объема новой научно-технической информации (количество нетривиальных выводов по работе, совпадение зон оптимума  $x_{i\text{opt}}$ , значений параметров  $\hat{Y}_{j\text{opt}}$  и т. п.).

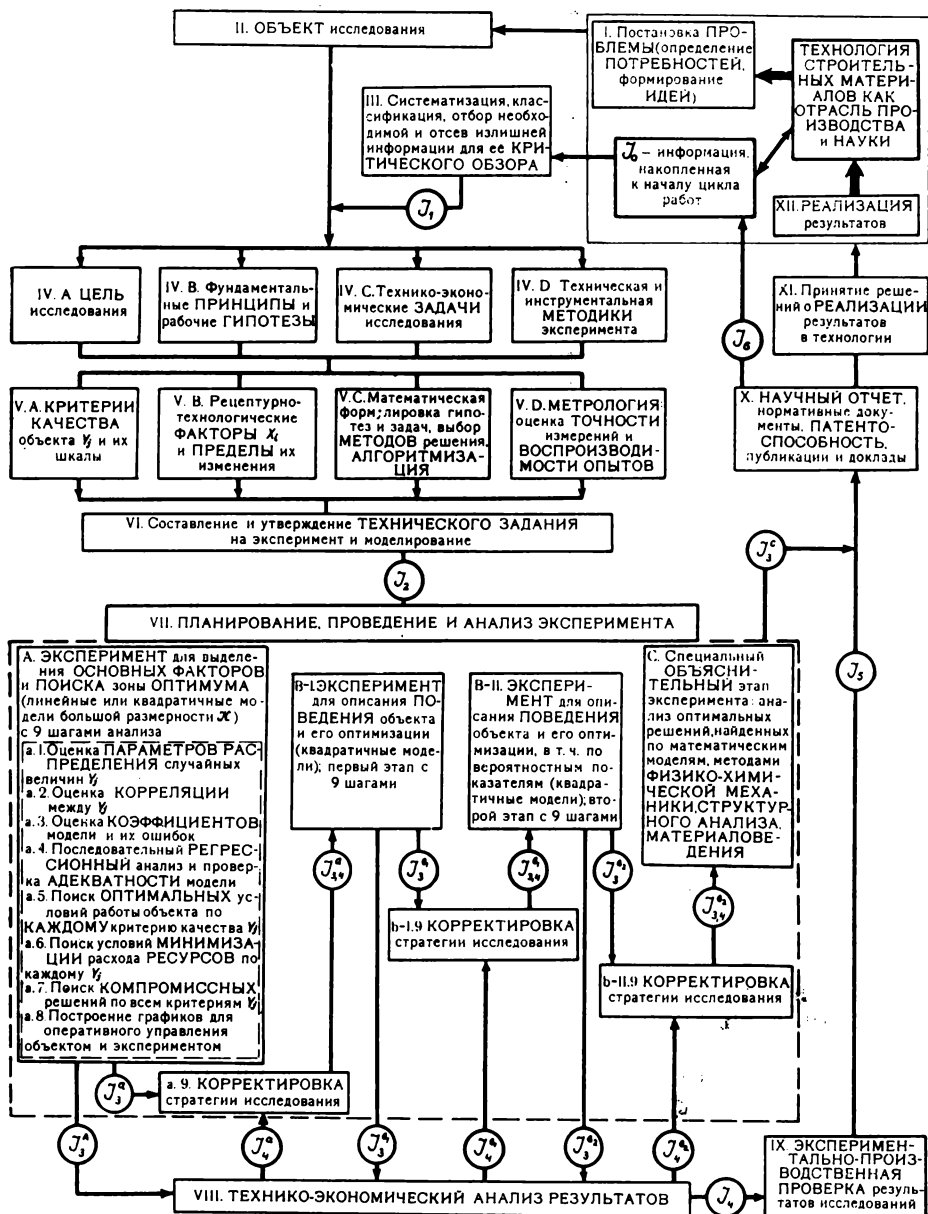
$$\mathcal{E}_{\text{мтэ}}^p = N_T : N_{\text{мтэ}}. \quad (1.24)$$

Информационный показатель учитывает количество  $Q_n$  *новых* ранее неисследованных (судя по анализу априорной информации) факторов  $x_{in}$  и откликов  $Y_{jn}$ , количество  $Q_d$  факторов  $x_{id}$  и откликов  $Y_{jd}$ , по которым существует *дискуссионное* мнение, и количество  $Q_{взд}$  парных взаимодействий факторов  $x_i$  и  $x_j$ , ранее не исследованных *одно- временно*,

$$\mathcal{E}_{\text{мтэ}}^n = (1 + Q_n + 0,5Q_d = 0,2Q_{взд})^1. \quad (1.25)$$

Показатель степени  $\gamma$  в формуле (1.25) зависит от этапа исследований: для поисковых работ  $\gamma = 1,5$ , для «ЭР»  $\gamma = 2$  и для «ЭУ»  $\gamma = 2,5$ . Применение  $\mathcal{E}_{\text{мтэ}}^n$  для оценки результатов моделирования ставит, в какой-

Схема 1.2. Циклическая схема анализа и оптимизации композиционных материалов на основе экспериментально-статистического моделирования.





то степени, барьер на пути работ, дискредитирующих идеи и методы математической теории эксперимента как по постановке, так и по уровню выполнения.

Для работ в области материаловедения и технологии достаточно полная циклическая *блок-схема эмпирических исследований* показана на схеме 1.2. [16]. Она объединяет в единую систему большинство рекомендаций, изложенных выше, и обеспечивает четкое построение всего исследования и логическую взаимосвязь между его элементами; предупреждает возможные упущения в методике проведения эксперимента. Если авторское исследование включает схему такого типа, *конкретизированную* по отношению к изучаемому объекту, то его достоинства и недостатки легче поддаются объективной оценке. Следует обратить внимание на *три принципиальных положения*.

1. При составлении критического обзора (этап III) по информации  $I_0$ , накопленной к началу данного цикла работ, необходимо любой из аспектов (теоретический, методический, технико-экономический) рассматривать так, чтобы выделить: а) *достоверные* научные факты, не вызывающие сомнений и поэтому аксиоматически используемые в рабочих гипотезах; б) *дискуссионные* научные факты и концепции разных научных школ, которые необходимо или подтвердить, или опровергнуть в результате данной работы; в) *отсутствующие* (в рамках доступной информации) научные факты, методы, модели и т. п. Только такая совокупность образует *новую* информацию  $I_1$ , отличную от простого выборочного описания некоторой части информации  $I_0$ .

2. Научная ценность работы и эффективность ее практических результатов обеспечивается *методической базой* исследований и разработок. Низкий методический уровень и небрежность выполнения взаимосвязанных блоков IV—VI не только приводят к ошибочным выводам, но и влекут за собой огромные затраты материальных, временных и трудовых ресурсов.

3. В соответствии с принципами программно-целевого управления новая инженерная информация ( $I^a_3, I^b_3, \dots$ ), полученная после каждой ступени экспериментального исследования, должна направляться в блок VIII на технико-экономический анализ результатов, чтобы *без задержки* быть использованной в отрасли.

Полезность моделирования и оптимизации зависит от всех этапов блок-схемы. При получении отрицательного результата на этапах VII—IX материаловеду и технологу необходимо вернуться к предыдущим этапам (в т. ч. к анализу априорной информации) и откорректировать ранее принятое решение.

## § 6. КОМПЛЕКС ЗАДАЧ, РЕШАЕМЫХ ПО ОДНОЙ МОДЕЛИ

Для оперативного решения инженерных задач в локальных технико-экономических условиях наиболее продуктивен класс полиномиальных многофакторных моделей второго порядка. По каждой такой модели можно решить *комплекс типовых задач*, встречающихся в исследовательской и производственной деятельности. Общие принципы типовых решений сформулированы в работах [16, 17, 18]. Поэтому целесообразно проанализировать их применение в простой трех-

факторной ситуации, включающей наиболее характерные факторы для технологий композиционных материалов типа бетон.

**Технологические условия задачи.** Решается комплекс типовых инженерных задач по модели, описывающей изменение предела прочности на сжатие  $R$ , МПа, мелкозернистого бетона после тепловлажностной обработки (ТВО) при управлении соотношением между песком и цементом  $\Pi/\text{Ц} = X_1 = (2,5 \pm 0,5) : 1$ , концентрацией су-

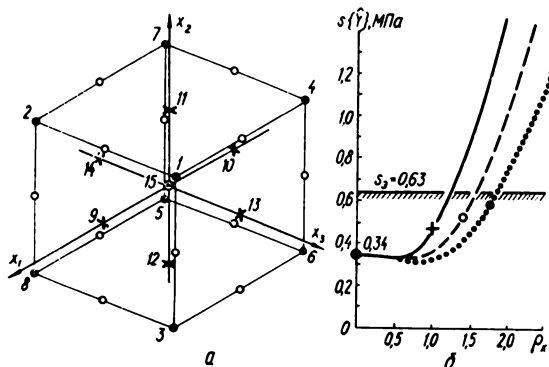


Рис. 1.3. Расположение 15 опытов в трехфакторном пространстве (а) и изменение (б) ошибки

предсказания  $s\{\hat{Y}\} = \varphi\{\rho_x\}$  в зависимости от направления к серединем граней (+) или сторонам (o), или к вершинам (·) куба; уровень ошибки эксперимента  $s_3 = 0,63$  МПа отмечен горизонтальной прямой — среднеквадратические ошибки предсказания  $s\{\hat{Y}\}$  по модели внутри области эксперимента лежат ниже этого уровня.

перпластификатора марки «С-3»  $C = X_2 = 0,35 \pm 0,35$  (процент сухого вещества от массы цемента) и температурой изотермической выдержки при ТВО  $T = X_3 = (60 \pm 20)$  °С. Бетонные смеси имеют равную подвижность, остальные рецептурно-технологические факторы стабилизированы.

Основанием для учета в модели именно этих трех факторов служат следующие *предпосылки*. Отношение  $\Pi/\text{Ц}$  характеризует расход основного материального ресурса — цемента. Чем больше  $\Pi/\text{Ц}$ , тем экономичнее использование наиболее дефицитного компонента. Концентрация  $C$  — главный регулирующий фактор. Температура  $T$  при данной длительности ТВО характеризует энергоемкость этого технологического передела. Ее необходимо минимизировать.

**Выбор модели и планирование эксперимента.** Все факторы  $\Pi/\text{Ц}$ ,  $C$  и  $T$  влияют на  $R$  нелинейно. Предполагается, что воздействие каждого из них может быть описано параболой второго порядка. Таким образом, на первом этапе моделирования необходимо построить трехфакторный квадратичный полином, содержащий 10 оценок коэффициентов [16, с. 81], а на втором — упростить его, исключив статистически равные нулю оценки методом последовательного регрессионного анализа (см. § 4 гл. VI). Поскольку парабола от каждого фактора может быть построена не менее чем по трем точкам, традиционный подход при изучении трех факторов привел бы к необходимости реализации  $3^3 = 27$  опытов, расположение которых в пространстве нормализованных факторов  $x_1^* = (2,5 - X_1) : 0,5$ ;  $x_2 = (X_2 - 0,35) : 0,35$  и  $x_3 = (X_3 - 60) : 20$  показано на рис. 1.3, а. Для определения 10 оценок

\* При такой нормализации  $x_1 = -1$  соответствует малому расходу цемента.

коэффициентов модели информация об  $R$  во всех  $3^3$  точках будет избыточной. Задачу можно решить без потери точности, используя один из типовых планов для трехфакторного эксперимента [16, с. 108].

С учетом стратегии сравнительного исследования добавок (см. гл. V) выбран план  $B_3$  с одной центральной точкой (см. рис. 1.3, а, точки № 1... 15), показанный в табл. 1.5; в соответствии с рекомендациями по моделированию химических добавок (см. § 1 гл. V) введе-

Т а б л и ц а 1.5. Трехфакторный план типа  $B_3$  ( $n_0=1$ )

Номера точек плана	В нормализованных факторах			В натуральных факторах		
	$x_1=x$	$x_2=z$	$x_3=t$	$x_1=П:Ц$	$x_2=C, \%$	$x_3=T, ^\circ C$
1	+1	+1	+1	2:1	0,7	80
2	+1	+1	-1	2:1	0,7	40
3	+1	-1	+1	2:1	0	80
4	-1	+1	+1	3:1	0,7	80
5	-1	-1	-1	3:1	0	40
6	-1	-1	+1	3:1	0	80
7	-1	+1	-1	3:1	0,7	40
8	+1	-1	-1	2:1	0	40
9	+1	0	0	2:1	0,35	60
10	-1	0	0	3:1	0,35	60
11	0	+1	0	2,5:1	0,7	60
12	0	-1	0	2,5:1	0	60
13	0	0	+1	2,5:1	0,35	80
14	0	0	-1	2,5:1	0,35	40
15	0	0	0	2,5:1	0,35	60

ны обозначения безразмерной концентрации  $z$ , а температуры ТВО —  $t$ .

По результатам эксперимента (средняя ошибка  $s_s=0,63$  МПа при  $f_3=30$ ) получена модель со всеми значимыми ( $\alpha=0,1$ ) оценками коэффициентов

$$\hat{R} = 19,5 + 5,5x + 1,9x^2 + 2,0xz + 1,5xt + 0,8z - 1,8z^2 + 0,4zt + 6,8t + 0,6t^2, \quad (1.26)$$

которая использована для решения инженерных задач.

**Задача № 1 — интерполяционная.** Определить расчетное значение прочности  $\hat{R}_1$  для расположенной *внутри* области изученного факторного пространства точки с координатами, отличными от точек плана эксперимента (см. табл. 1.5). Например, для точки с координатами  $x_p=+0,6$ ;  $z_p=-0,5$ ;  $t_p=+0,8$  (П/Ц=2,2;  $C=0,175 \%$ ,  $T=76^\circ C$ )

$$\hat{R} = 19,5 + 5,5(0,6) + 1,9(0,6)^2 + 2,0(0,6)(-0,5) + 1,5(0,6)(0,8) + 0,8(-0,5) - 1,8(-0,5)^2 + 0,4(-0,5)(0,8) + 6,8(0,8) + 0,6(0,8)^2 = 28,4 \text{ МПа}. \quad (1.27)$$

**Задача № 2 — экстраполяционная (прогноз).** Определить расчетное значение прочности  $\hat{R}_2$  для точки, расположенной вне области изученного факторного пространства. Например, для  $x_p = -0,4$ ;  $z = +0,2$ ;  $t_p = +1,5$  по процедуре, аналогичной задаче № 1, будет получено  $\hat{R}_2 = 28,3$  МПа.

Примечание (к задачам № 1 и № 2). Результат  $\hat{R}$ , получаемый в этих задачах для любой точки с координатами  $x_p$ ,  $z_p$  и  $t_p$ , представляет собой среднее случайной нормально распределенной [16, с. 24] величины с дисперсией предсказания  $s^2\{\hat{R}\}$  (I.12). Поэтому решения задач № 1... № 2 имеют инженерный смысл только совместно с задачей № 3.

**Задача № 3 — оценка точности расчетов  $\hat{R}$ .** Определить среднеквадратическую ошибку  $s\{\hat{R}\}$  при расчете прочности бетона  $\hat{R}$  по модели (I.26). Для симметричного плана второго порядка ( $B_3$ ) функцию (I.12) записывают как

$$s^2\{\hat{Y}\} = s^2\{b_0\} + 2 \hat{\text{cov}}\{b_0 b_{ii}\} \sum_{i=1}^K x_i^2 + s^2\{b_i\} \sum_{i=1}^K x_i^2 + s^2\{b_{ij}\} \sum_{i < j} x_i^2 x_j^2 + 2 \hat{\text{cov}}\{b_{ii} b_{jj}\} \sum_{i < j} x_i^2 x_j^2 + s^2\{b_{ii}\} \sum_{i=1}^K x_i^4. \quad (I.28)$$

С учетом значений элементов  $c_{ii}$  и  $c_{ij}$  матрицы  $D$  плана  $B_3$  и обозначений, введенных в задаче № 1, выражение (I.28) при  $s_0 = 0,63$  МПа, приобретает вид

$$s^2\{\hat{R}\} = 0,1156 - 0,0499(x^2 + z^2 + t^2) - 0,0389(x^2 z^2 + x^2 t^2 + z^2 t^2) + 0,1556(x^4 + z^4 + t^4). \quad (I.29)$$

По зависимости (I.29) определяют среднеквадратические ошибки предсказания: а) для точки внутри исследованной области  $\hat{R}_1 = 28,4$  МПа (при  $x_p = 0,6$ ,  $z_p = -0,5$  и  $t_p = 0,8$ );  $s^2\{\hat{R}_1\} = 0,1281$ ;  $s\{\hat{R}_1\} = 0,36$  МПа, что дает относительную ошибку  $\delta\{\hat{R}_1\} = 0,36 \times 100 : 28,4 = 1,26\%$ ; б) для точки вне исследованной области  $\hat{R}_2 = 28,4$  МПа (при  $x_p = -0,4$ ;  $z_p = 0,2$ ;  $t_p = 1,5$ ),  $s\{\hat{R}_2\} = 0,88$  МПа или  $\delta\{\hat{R}_2\} = 3,1\%$ . Результаты расчетов ярко иллюстрируют тот важный факт (к сожалению, обычно не принимаемый во внимание специалистами-материаловедами), что точность расчетов по моделям существенно ухудшается при выходе за экспериментально исследованную область изменения факторов. Зависимость (I.29) имеет вид многомерной (с переменным радиусом  $\rho_x = \sqrt{\sum_i x_i^2}$ ) чаши, центр которой совпадает с центром эксперимента ( $x_i = 0$ ).

**Задача № 4 — анализ влияния каждого фактора на  $\hat{R}$ .** Модель (I.26) — полный полином второй степени (В в табл. I.3). Поэтому воз-

действие каждого из факторов (например,  $x_1$ ) на отклик  $\hat{Y}$ , при условии стабилизации всех остальных на некотором уровне (без потери общности  $x_2 = x_3 = 0$ ), описывается параболой (I.30) с экстремумом (I.31) в точке (I.32)

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 x_1 + b_{11} x_1^2; \quad (I.30)$$

$$\hat{Y}_{ext} = b_0 - 0,25 b_1^2 : b_{11}, \quad (I.31)$$

$$x_{1 ext} = - b_1 : 2b_{11}. \quad (I.32)$$

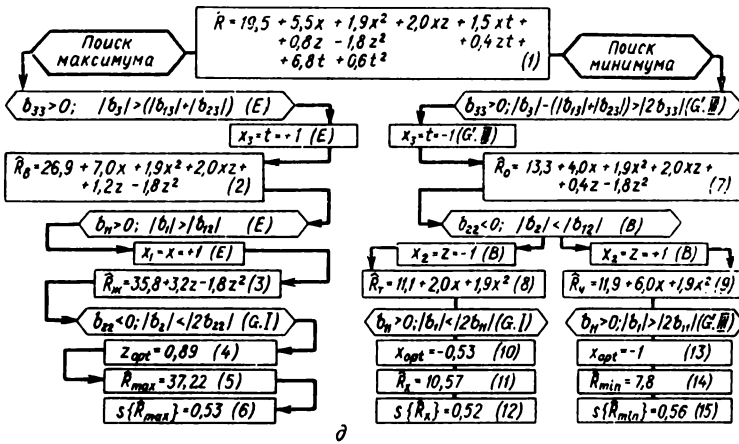
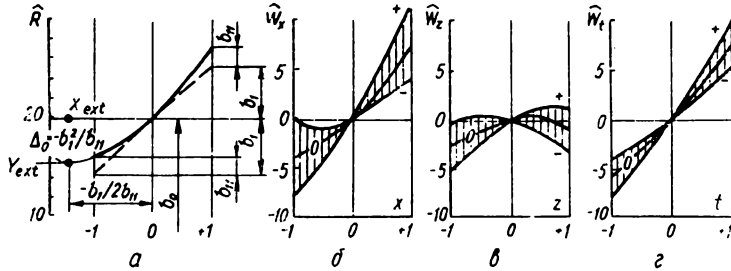


Рис. 1.4. Связь оценок коэффициентов  $b_0$ ,  $b_i$  и  $b_{ii}$  с геометрическим образом параболы (а). Три квазиоднофакторных модели влияния П/Ц (б), суперпластификатора (в) и температуры ТВО (з) на прочность  $R$  и схема (д) поиска  $R_{min}$  и  $R_{max}$  диссоциативно-шаговым методом.

Все элементы параболы ( $b_1 > 0$ ;  $b_{11} < 0$ ) показаны на рис. 1.4, а.

Однако в своем влиянии на выход системы  $\hat{Y}$  фактор  $x_i$  взаимодействует с другими факторами  $x_j$ , что находит количественную оценку в эффектах модели типа  $b_{ij} x_i x_j$ . Поэтому анализировать влияние факторов следует по квазиоднофакторным [16, § 1.6] моделям вида

$$W_i = \hat{Y} \{x_j\} - b_{0j} = (b_i + b_{ij} x_j) x_i + b_{ii} x_i^2, \quad (I.33)$$

где  $b_{0j}$  — свободный член, отражающий влияние на выход всех членов полинома, кроме включенных в модель (I.33). Таким образом, для модели (I.26) получают три квазиоднофакторные модели:

$$\hat{W}_x = (5,5 + 2,0z + 1,5t)x + 1,9x^2; \quad (I.34)$$

$$\hat{W}_z = (0,8 + 2,0x + 0,4t)z - 1,8z^2; \quad (I.35)$$

$$\hat{W}_t = (6,8 + 1,5x + 0,4z)t + 0,6t^2. \quad (I.36)$$

При анализе моделей (I.34...I.35) получены важные результаты. Эффекты взаимодействия  $b_{ij}$  меняют значения линейного эффекта  $b_i$ . Поскольку каждый фактор исследуется в пределах от  $-1$  до  $+1$ , их подстановка в модели (I.34...I.36) приводит от единичной параболы (I.30) к семейству парабол

$$\hat{W}_x = (5,5 \pm 3,5)x + 1,9x^2; \quad 2,0 \leq b_x \leq 9,0; \quad (I.37)$$

$$\hat{W}_z = (0,8 \pm 2,4)z - 0,8z^2; \quad -1,6 \leq b_z \leq 3,2; \quad (I.38)$$

$$\hat{W}_t = (6,8 \pm 1,9)t + 0,6t^2; \quad 4,9 \leq b_t \leq 8,7. \quad (I.39)$$

Такие семейства парабол показаны на рис. 1.4, б...г, на котором нанесены центральная ( $\sum_j |x_j| = 0$ ) и две граничные ( $\sum_j |x_j| < 0$  и  $\sum_j |x_j| > 0$ ) параболы, а зона существования семейств заштрихована. Эффекты взаимодействия передвигают вершину *неизменной* параболы вдоль оси  $x_i$ . Поэтому  $x_{i\text{ext}}$  есть функция не только от  $b_i$  и  $b_{ii}$  (I.32), но и от значений  $b_{ij}$  и уровней  $x_j$

$$x_{i\text{ext}} = -0,5 \left( b_i + \sum_j b_j x_j \right) : b_{ii}. \quad (I.40)$$

Использование (I.40) для квазиоднофакторных моделей (I.34...I.36) приводит к соотношениям

$$x_{\text{ext}} = -1,45 - 0,53z - 0,39t; \quad -2,37 \leq x_{\text{ext}} \leq -0,53; \quad (I.41)$$

$$z_{\text{ext}} = +0,22 + 0,56x + 0,11t; \quad -0,44 \leq z_{\text{ext}} \leq 0,89; \quad (I.42)$$

$$t_{\text{ext}} = -5,66 - 1,25x - 0,33z; \quad -7,25 \leq t_{\text{ext}} \leq -4,08. \quad (I.43)$$

Подстановка функции  $x_{i\text{ext}}$  (I.40) вместо  $x_i$  в полиномиальную модель, т. е. перевод системы в состояние управления при одном оптимальном *переменном* факторе вызовет изменение свободного члена  $b_0$  и всех связанных с ним эффектов \* на следующие величины [16, с. 65]

$$\left. \begin{aligned} \Delta b_0 &= -0,25b_i^2 : b_{ii} \\ \Delta b_j &= -0,5b_i b_{ij} : b_{ii} \\ \Delta b_{jj} &= -0,25b_{ij}^2 : b_{ii} \\ \Delta b_{is} &= -0,5b_{ie} b_{is} : b_{ii} \end{aligned} \right\}. \quad (I.44)$$

\* Для неполных кубических моделей «Д» и «Е» (см. табл. 1.3), содержащих взаимодействия  $b_{ijk}$ , необходимо дополнительно учесть  $\Delta b_{es} = 0,5b_{ies} : b_{ii}$  и  $\Delta b_{jes} = -0,5b_{ij} b_{ies} : b_{ii}$ .

Подстановка (1.40) и использование (1.44) имеет инженерный смысл, если экстремум  $x_{i\text{ext}}$  не выходит за зону эксперимента, т. е.  $|x_{i\text{ext}}| \leq 1$ , что обеспечивается при выполнении условия

$$\left( |b_i| + \sum_{i < j} |b_{ij}| \right) \leq 2|b_{ii}|. \quad (1.45)$$

Анализ квазиоднофакторных моделей (см. рис. 1.4) позволяет сделать и первые технологические выводы: увеличение расхода цемента в смесях постоянной подвижности при любых  $C$  и  $T$  вызывает рост прочности  $\hat{R}$ , причем тем интенсивнее, чем больше одновременно  $C$  и  $T$ ; дозировка суперпластификатора должна иметь оптимальное значение, которое увеличивается с ростом  $\text{Ц}$  и  $T$ , причем изменение  $\text{Ц}$  влияет сильнее, чем изменение  $T$  (1.42); увеличение температуры ТВО при постоянном временном режиме приводит к росту прочности  $\hat{R}$ , причем интенсивность прироста увеличивается при одновременном повышении  $\text{Ц}$  и  $C$ .

Примечание к задаче № 4. Анализ квазиоднофакторных моделей вида (1.33) и последовательный перевод системы в оптимальное состояние за счет выбора оптимального значения каждого фактора, в т. ч. и переменного  $x_{i\text{ext}}$  (1.40), положены в основу разработанного в ОИСИ [16, с. 61; 18, с. 117] *диссоциативно-шагового метода оптимизации (ДШМ)*. Он — наиболее наглядный и простой для всех квадратичных моделей и некоторых неполных кубических (табл. 1.3, см. «А — Б — В — Д — Е»). Решение принимается на каждом шаге по табл. 1.6 и 1.7.

**Задача № 5 — поиск максимума и минимума  $\hat{R}$ .** Решение задачи качественно оценивают при визуальном анализе семейств квазиоднофакторных моделей (рис. 1.4, б—г). Для максимума  $x_1 = x_3 = +1$  и  $x_2$  расположено внутри зоны эксперимента, для минимума  $x_1 = x_2 = -1$  и  $x_3$  — на его конкурирующих границах. Точное решение по ДШМ показано в виде блок-схемы на рис. 1.4, д.

Поиск максимума выполнен за три шага. Во-первых, после проверки условия (Е) в модель (I) подставлено  $t = +1$  и получена модель (2), во-вторых, аналогично установлено, что  $x = +1$  и получена модель (3); в-третьих, в связи с решением (G.I) по формуле (1.32) определена координата  $z_{\text{opt}} = 0,89$ , в которой  $R_{\text{max}} = 37,22$  МПа (5) со среднеквадратической ошибкой 0,53 МПа (6), рассчитанной по (1.29).

Поиск минимума выполняют за пять шагов. Первый по условию (G.III)  $t = -1$ . Второй — по условию (B) возникают две конкурирующие модели (8) и (9). Третий — по условию (G.I) определяют по зависимости (1.32), что  $x_{\text{opt}} = -0,53$  (10), и находят  $\hat{R}_x = 10,57$  МПа (11) и  $s\{\hat{R}_x\} = 0,52$  МПа (12). Четвертый — для конкурирующей модели (6) по условию (G.III) определяют  $x_{\text{opt}} = -1$  (13);  $R_{\text{min}} = 7,8$  МПа (14) и  $s\{\hat{R}_{\text{min}}\} = 0,56$  МПа. На пятом шаге сравнивают результаты минимизации по двум конкурирующим моделям и определяют, что  $\hat{R}_{\text{min}}$  лежит на ветви 9...15 при  $x = -1$ ,  $z = +1$  и  $t = -1$ . Единственность решения приближенно проверяют по  $t$ -критерию (1.46), в котором  $N$  — число опытов в плане [16, с. 31]

$$t = (\hat{R}_x - \hat{R}_{\min}) \sqrt{N} : \sqrt{s^2 \{\hat{R}_x\} + s^2 \{\hat{R}_{\min}\}} = \\ = (10,57 - 7,80) \sqrt{15} : \sqrt{0,52^2 + 0,56^2} = 14 \geq t_{\text{таб.1}} \{f = 30\}. \quad (I.46)$$

**Задача № 6** — анализ изоповерхностей  $\hat{R}$ . Многофакторные модели типа (I.26) графически представляются изоповерхностями. Каждой из них  $\hat{R} = \text{const}$  соответствует бесчисленное множество комбинаций  $x$ ,

Таблица I.6. Поиск оптимальных  $x_i$  по  $K$ -факторной модели

Поиск решения для					Положение $x_i \text{ ext}$		
min Y		max Y		min Y max Y	$ b_{ii}  + \sum  b_{ij}  < < 2 b_{ii}  \quad (I)$	$ b_{ii}  + \sum  b_{ij}  > 2 b_{ii}  \quad (II)$	
$b_{ii}$	$b_i$	$b_{ii}$	$b_i$	$\sum  b_{ij} $		$ b_{ii}  - \sum  b_{ij}  \geq \geq 2 b_{ii}  \quad (III)$	$ b_{ii}  - \sum  b_{ij}  < < 2 b_{ii}  \quad (IV)$
$< 0$	$> 0$	$\geq 0$	$< 0$	$ b_{ii}  \geq \sum  b_{ij}  \quad (A)$	$-1 \quad (A)$		
				$ b_{ii}  < \sum  b_{ij}  \quad (B)$	$-1 \text{ или } +1 \quad (B)$		
	$0$		$0$	$b_{ij} = 0 \quad (C)$	при $b_{ii} \neq 0$ $-1$ или $+1$ $(C')$ при $b_{ii} = 0$ любое $(C'')$		
				$ b_{ii}  < \sum  b_{ij}  \quad (D)$	$-1$ или $+1 \quad (D)$		
				$ b_{ii}  \geq \sum  b_{ij}  \quad (E)$	$+1 \quad (E)$		
				$ b_{ii}  < \sum  b_{ij}  \quad (F)$	$-1$ или $+1 \quad (F)$		
$> 0$	$< 0$	$0$	$< 0$	$x_{i \text{ ext}}$ находится в зоне эксперимента $(G.I)$	$x_{i \text{ ext}}$ находится за границами эксперимента $-1 \quad (G'. III)$	$x_{i \text{ ext}}$ переходит через границы эксперимента, за которыми равен $1 \quad (G. IV)$	
						—	
						$+1 \quad (G''. III)$	

$z$  и  $t$ , но факторы уже не являются независимыми: любой из них (например, без потери общности  $z$ ) становится функцией остальных

$$z \{ \hat{R} = \text{const} \} = f(x, t). \quad (I.47)$$

К сожалению, обычно функция (I.47) может быть относительно просто записана лишь в неявной форме  $F(x, z, t) = \text{const}$ , что значительно затрудняет ее использование в расчетах. Так, по (I.26), при



$\hat{R}=35$  МПа (бетон марки 500) будет получена функция (I.48) в виде

$$z\{\hat{R}=35\} = (0,22 + 0,56x + 0,11t) \pm (-8,56 + 3,30x + 1,37x^2 + 3,82t + 0,34t^2 + 0,95xt)^{1/2}. \quad (I.48)$$

Значительно проще использовать для инженерных решений графические образы в виде набора поверхностей второго порядка, построен-

Таблица I.7. Типовой алгоритм поиска оптимальных  $x_{i\text{opt}} = |1|$  по ДШМ

Этап	Основное действие	Руководство
1	Провести последовательный регрессионный анализ модели и удалить все незначимые (при риске $\alpha$ ) оценки коэффициентов	Программы системы COMPEX (см. гл. VI)
2	Ввести все факторы $x_{i\text{opt}} = \pm 1$ (по знаку коэффициента $b_i$ ), стабильно находящиеся на границах эксперимента	Решения (A) и (E), потом (G'.III) и (G''III) по табл. I.6
3	Ввести все факторы $x_{i\text{opt}} = \psi(x_i)$ , изменяющиеся в зоне эксперимента, начиная с тех, для которых $(\sum  b_{ij} )_{\text{max}}$	Решение (G.I) по табл. I.6, формулы (I.40) и (I.44)
4	Ввести все факторы на конкурирующих границах эксперимента $x_{i\text{opt}} = -1$ (или $+1$ ), начиная с $(\sum  b_{ij} )_{\text{max}}$	Решения (B), (C'), (D) и (F) по табл. I.6
5	Ввести $x_{i\text{opt}}$ , пересекающие границы эксперимента, и построить совмещенные кусочно-гладкие диаграммы	Решение (G.IV) и § 4 гл. V
6	Определить координаты $x_{i\text{opt}}$ и $\hat{Y}_{\text{opt}}$	Этапы «5»→«4»→«3»→«2»

ных по простым алгоритмам [16], реализуемым при ручном счете или в системе COMPEX. Для (I.26) изоповерхности через  $\hat{R}=5$  МПа показаны на рис. I.5, а. Эти изоповерхности представляют собой вырезку факторным пространством  $|x|=|z|=|t|=1$  части поверхностей гиперболоида (рис. I.5, б). Полный расчет канонической формы уравнения поверхностей второго порядка из моделей типа (I.26) изложен в [16, 17, 50]. Однако обычно достаточно определить вид поверхности и координаты ее центра (если поверхности центральные). Для этого необходимо, во-первых, определить три инварианта [16, с. 16]

$$I_1 = b_{11} + b_{22} + b_{33} = 1,9 - 1,8 + 0,6 = 0,7; \quad (I.49)$$

$$I_2 = b_{11}b_{22} + b_{22}b_{33} + b_{11}b_{33} + 0,25(b_{12}^2 + b_{13}^2 + b_{23}^2) = 1,9(-1,8) + (-1,8)0,6 + 1,9 \cdot 0,6 + 0,25(2,0^2 + 1,5^2 + 0,4^2) = -1,76; \quad (I.50)$$

$$I_3 = b_{11}b_{22}b_{33} + 0,25b_{12}b_{13}b_{23} - 0,25(b_{11}b_{23}^2 + b_{22}b_{13}^2 + b_{33}b_{12}^2) = 1,9(-1,8)0,6 + 0,25 \cdot 2,0 \cdot 1,5 \cdot 0,4 - 0,25[1,9 \cdot 0,4^2 - 1,8 \cdot 1,5^2 + 0,6 \cdot 2,0^2] = -1,42. \quad (I.51)$$

Во-вторых, по знакам произведения  $I_1 I_3 = 0,7(-1,42) < 0$  и  $I_2 < 0$  определить по (I.52) вид поверхностей [40, с. 87] (в данной задаче гиперболоиды):

$$\begin{array}{l} \text{центральные} \\ I_3 \neq 0 \end{array} \left\{ \begin{array}{l} I_1 I_3 \leq 0 \text{ и (или) } I_2 \leq 0 \text{ — гиперboloиды и конус,} \\ I_{13} > 0, I_2 > 0 \text{ — эллипсоиды} \end{array} \right\} \\ \text{нецентральные} \\ I_3 = 0 \end{array} \left\{ \begin{array}{l} I_2 = 0 \text{ — цилиндр параболический,} \\ I_2 < 0 \text{ — параболоиды и цилиндры} \\ \text{гиперболические} \\ I_2 > 0 \text{ — параболоиды и цилиндры} \\ \text{эллиптические} \end{array} \right\}. \quad (\text{I.52})$$

В-третьих, определить по (I.53) три координаты центра  $x_{iS}$  [16, с. 16]

$$x_{iS} = [(b_i b_{iK}^2 + 2b_{iJ} b_J b_{KK} + 2b_{iK} b_{JJ} b_K) - (4b_i b_{ii} b_K + b_{iJ} b_K b_{iK} + b_{iK} b_J b_{iK})] : 8I_3, \quad (\text{I.53})$$

что в данной задаче дает результат  $x_{1S} = 1,8$ ;  $x_{2S} = 0,2$  и  $x_{3S} = -7,5$ , далекий от центра эксперимента, а поэтому мало пригодный для последующей инженерной интерполяции.

На рис. I.5, а нижняя плоскость куба (пространство в координатах  $\{x-t\}$  при  $z = -1$ ) предназначена для отображения свойств бездобавочного эталонного бетона: передние левая и правая стенки — свойственна с переменной концентрацией суперпластификатора и, соответственно, повышенной температурой ТВО ( $80^\circ\text{C}$ ) или содержанием цемента. Анализ изоповерхностей на рис. I.5, а позволяет дополнить *технологические выводы*: при сохранении заданного предела прочности бетона (например,  $\hat{R} = 30$  МПа) введение оптимальной дозировки суперпластификатора позволяет сэкономить цемент (точка А) или снизить расход тепловой энергии на ТВО (точка D); концентрации суперпластификатора, оптимальные с точки зрения максимальной экономии цемента при  $\hat{R} = \text{const}$ , отличаются от оптимальных концентраций по экономии энергии ( $z_A < z_D$ ).

**Задача № 7 — анализ прочности бездобавочного эталонного бетона  $\hat{R}_3$ .** Планирование эксперимента (в соответствии с рекомендациями, изложенными в § 1 гл. V) было проведено так, чтобы нижний уровень  $z = -1$  соответствовал нулевой концентрации добавки. Это позволяет исследовать свойства эталонного бездобавочного бетона  $\hat{R}_3$  по модели (I.26) при подстановке в нее  $z = -1$ :

$$\hat{R}_3 = 16,9 + 3,5x + 1,9x^2 - 1,5xt + 6,4t + 0,6t^2. \quad (\text{I.54})$$

Изолинии  $\hat{R}_3$  показаны на рис. I.5, в. На нижней стороне квадрата для заданных планом значений П/Ц показаны соответствующие расходы воды — В и цемента — Ц, а также воздухоподъемление  $V_{BV}$  (шкалы построены по специальным экспериментам с равноподвижными смесями [44, т. III, с. 489], что позволяет в дальнейшем при инженерном анализе понимать под  $X_1 = \text{Ц}$  — *реальный расход цемента* (экономический фактор).

**Задача № 8** — оценка относительного изменения прочности бетона  $\hat{R}_3$  при переходе факторов с нижнего уровня на верхний. Ответ на вопрос о влиянии на выход системы  $\hat{Y}$  перехода фактора  $x_i$  с нижнего уровня (-1) на верхний (+1) имеет принципиально важное значение для оценки эффективности управления, особенно в тех случаях,

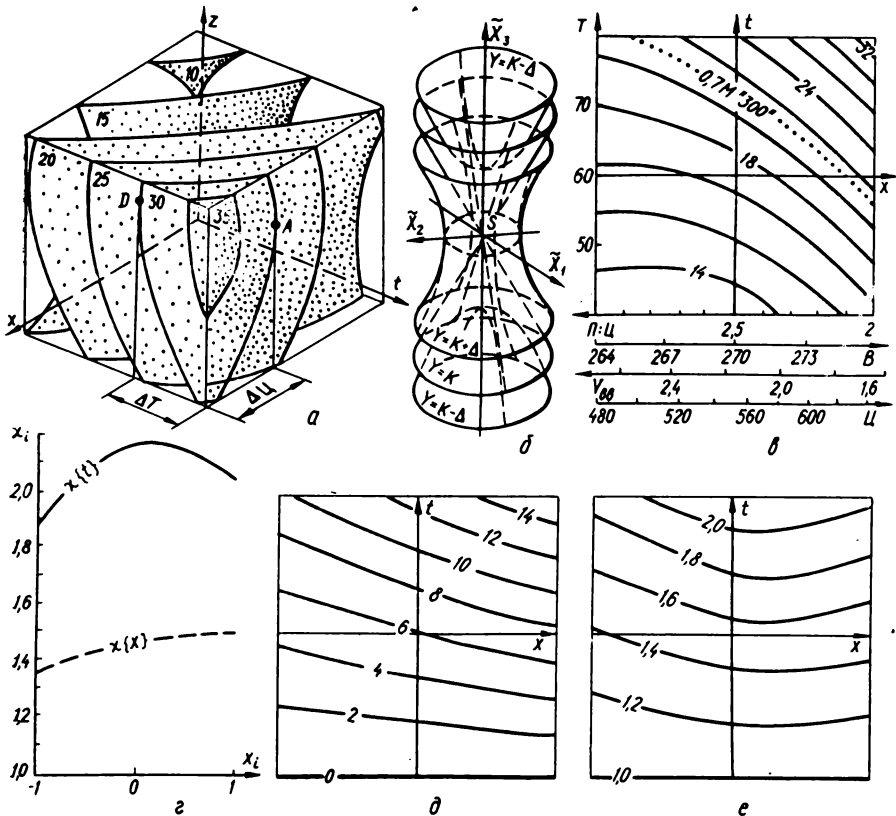


Рис. 1.5. Изоповерхности прочности бетона  $R$  (а — в области эксперимента, б — семейство гиперboloидов); изолинии  $R_3$  для бездобавочного бетона (в), относительное изменение  $x$  этой прочности при переходе факторов с нижнего уровня на верхний (г), а также абсолютный (д) и относительный (е) приросты  $R_3$  при  $-1 \leq t \leq +1$ .

когда  $Y_{opt}$  хотя бы по одной координате находится на границе области эксперимента (или вне ее). Для двухфакторных квадратичных моделей типа (1.54) расчет абсолютного прироста  $\Delta \hat{Y}\{x_i = \pm 1\}$  при переходе от  $x_i = -1$  к  $x_i = 1$  тривиален, поскольку всегда

$$\Delta \hat{Y}\{x_i = \pm 1\} = \hat{Y}\{x_i^+\} - \hat{Y}\{x_i^-\} = 2(b_i + b_{ij} x_j). \quad (1.55)$$

Следовательно, наибольший абсолютный прирост возможен лишь при  $x_j = |1|$ . Более сложно оценить влияние  $x_j$  на *относительный* прирост  $\kappa \{x_i = \pm 1\} = \hat{Y}\{x_i^+\} / \hat{Y}\{x_i^-\}$ . Его рассчитывают по дробно-рациональной функции (I.56), в числителе которой находится прирост (I.55), а в знаменателе — базовая парабола, которая образуется при  $x_i = -1$ .

$$\kappa \{x_i = \pm 1\} = \frac{\hat{Y}\{x_i^+\}}{\hat{Y}\{x_i^-\}} = 1 + \frac{2(t_i + b_{ij}x_j)}{(b_0 + b_{ii} - b_i) + (b_j - b_{ij})x_j + b_{jj}x_j^2}. \quad (I.56)$$

Два экстремума функции (I.56) соответствуют по  $x_j$  корням уравнения

$$(b_{ij}b_{jj})x_j^2 + (2b_i b_{ij})x_j + [b_i(b_j - b_{ij}) - (b_0 + b_{ii} - b_i)b_{ij}] = 0. \quad (I.57)$$

Для модели эталонного бетона (I.54) влияние  $t$  на относительный прирост прочности  $\kappa\{x\}$  описывается функцией (I.58) с координатами экстремума  $+1,12$  и  $-5,8$ , а влияние  $x$  — функцией (I.59) с координатами экстремума  $+0,15$  и  $-8,9$ .

$$\kappa\{x\} = 1 + (7 + 3t) : (15,3 + 4,9t + 0,6t)^2; \quad (I.58)$$

$$\kappa\{t\} = 1 + (12,8 + 3x) : (11 + 2x + 1,9x^2). \quad (I.59)$$

Графики изменения  $\kappa\{x\}$  и  $\kappa\{t\}$  показаны на рис. I.3 г. Из их анализа следует, что повышение  $t$  с нижнего уровня на верхний более эффективно, чем аналогичное повышение  $x$ , причем существует максимум эффективности  $\kappa\{t\}$ , находящийся в зоне средних расходов цемента ( $x=0,15$  или  $\Pi=565$  кг/м<sup>3</sup>).

**Задача № 9** — оценка относительного изменения прочности бетона  $\hat{R}_z$  при увеличении уровня фактора от  $x_i = -1$ . Эта задача — обобщение предыдущей, поскольку позволяет оценить эффективность управления во всей области эксперимента. Абсолютный прирост описывают двухфакторной моделью (гиперболоид)

$$\Delta \varphi \hat{Y}\{x_i\} = \hat{Y} - \hat{Y}\{x_i^-\} = [(b_i - b_{ii}) + b_{ij}x_j] + (b_i x_i + b_{ii}x_i^2 + b_{ij}x_i x_j), \quad (I.60)$$

которая для фактора  $t$ , например, запишется как

$$\Delta \varphi \hat{Y}\{t\} = (5,8 + 1,5x) + (6,4t + 0,6t^2 + 1,5xt). \quad (I.61)$$

Изолинии модели (I.61) показаны на рис. I.5, д. *Относительный* прирост описывают двухфакторной дробно-рациональной функцией (I.62), в числителе которой находится абсолютный прирост (I.60), а в знаменателе — базовая модель при  $x_i = -1$  (аналогично выражению (I.56))

$$x_\varphi \{x_i\} = \frac{\hat{Y}}{\hat{Y}\{x_i^-\}} = 1 + \frac{\Delta_\varphi \hat{Y}\{x_i\}}{(b_0 + b_{ii} - b_i) + (b_j - b_{ij})x_j + b_{jj}x_j^2}. \quad (I.62)$$

Для фактора  $t$  модель (I.63) записывают как

$$x_{\varphi}\{t\} = \frac{\hat{Y}}{\hat{Y}\{t-\}} = 1 + \frac{(5,8 + 1,5x) + (6,4t + 0,6t^2 + 1,5xt)}{11,1 + 2,0x + 1,9x^2}. \quad (I.63)$$

Изолинии относительного изменения прочности по (I.63) показаны на рис. I.5, *е*. По верхней стороне квадрата изменения тождественно описывают выражением (I.59) и кривой на рис. I.2. Аналогично можно оценить изменения по сравнению со второй базовой параболой  $\hat{Y}\{x-\}$ . Основное достоинство моделей типа (I.60) и, особенно, типа (I.62) заключается в том, что по ним можно *сравнивать* между собой результаты испытания *качественно* разных сырьевых материалов, агрегатов, технологических приемов и т. п., поскольку на базовой стороне квадрата всегда  $\Delta\varphi\hat{Y}\{x_i\} = 0$ , а  $x_{\varphi}\{x_i\} = 1$  (пример сравнения разных суперпластификаторов дан в [44, III, с. 489 и в § 2 гл. V]).

Примечание к задачам № 8 и 9. Функции типа (I.60) и (I.62) могут быть построены и для  $K$ -мерного случая ( $K > 2$ ), причем в качестве базовой могут быть приняты  $(K-1)$ -мерные функции. Их целесообразно анализировать на ЭВМ, для чего в системе СОМПЕХ предусмотрены специальные программы (см. гл. VI).

**Задача № 10 — анализ влияния суперпластификатора на  $\hat{R}$ .** Для решения задачи целесообразно выделить влияние добавки суперпластификатора на прирост прочности  $\Delta\hat{R}_d$  в чистом виде. Для этого достаточно из (I.26), описывающей поведение системы во всей области эксперимента, вычесть модель эталонного бетона  $\hat{R}_s$  (I.54)

$$\Delta\hat{R}_d = \hat{R} - \hat{R}_s = (2,6 + 2,0x + 0,4t) + (0,8 + 2,2x + 0,4t)z - 1,8z^2. \quad (I.64)$$

Модель (I.64) — трехфакторный гиперболоид аналогичный (I.60). В данной задаче ее можно рассматривать как семейство парабол (рис. I.6, *а*), проходящих через точку  $\Delta\hat{R}_d = 0$  и  $z = -1$ , что следует из самой постановки задачи. Верхняя парабола характеризует прирост прочности за счет введения суперпластификатора в бетон с повышенным расходом Ц, твердеющий при  $T = 80^\circ\text{C}$ . При таких Ц и  $T$   $\Delta\hat{R}_d$  всегда положителен, оптимальное количество добавки  $z = 0,89$  или  $C = 0,66\%$ . Нижняя парабола относится к малцементному бетону, твердеющему при  $T = 50^\circ\text{C}$ . В этом случае введение суперпластификатора может оказать и отрицательное действие ( $\Delta\hat{R}_d \leq 0$  при  $z \geq 0,12$ ), оптимальная концентрация  $z_{\text{opt}}$  изменяется как  $\varphi(x, t)$  в зависимости от уровней Ц и  $T$ . Это происходит по плоскости

$$z_{\text{opt}} = 0,22 + 0,56x + 0,11t, \quad (I.65)$$

уравнение которой можно получить по (I.64) как решение  $\partial\hat{R}_d/\partial z = 0$  или в задаче № 4 (I.42). Изолинии плоскости (I.65) показаны на рис. I.6, *б*. Его можно рассматривать как технологическую регулировочную диаграмму для выбора оптимальной концентрации суперпластификатора при заданных Ц и  $T$ . Модель (I.65) дает результат с

ошибкой  $s\{z_{opt}\}$ , величину которой можно найти, основываясь на теории ошибок функций многих переменных [16, с. 40]. Для планов типа  $B_i$  получена [18, с. 63] зависимость (I.66), которая для плана  $B_3$  с учетом данных, использованных при выводе формулы (I.29), конкретизируется как (I.67)

$$s^2\{x_{i\ opt}\} = 0,25b_{ii}^{-2} \left( s^2\{b_{ii}\} + \sum_j (x_j^2 s^2\{b_{ij}\}) + b_{ii}^{-2} \left[ b_{ii}^2 + \sum_j (x_j^2 b_{ij}^2) \right] s^2\{b_{ii}\} \right); \quad (I.66)$$

$$s^2\{z_{opt}\} = 0,0308 (0,3657 + 0,6051x^2 + 0,1442t^2). \quad (I.67)$$

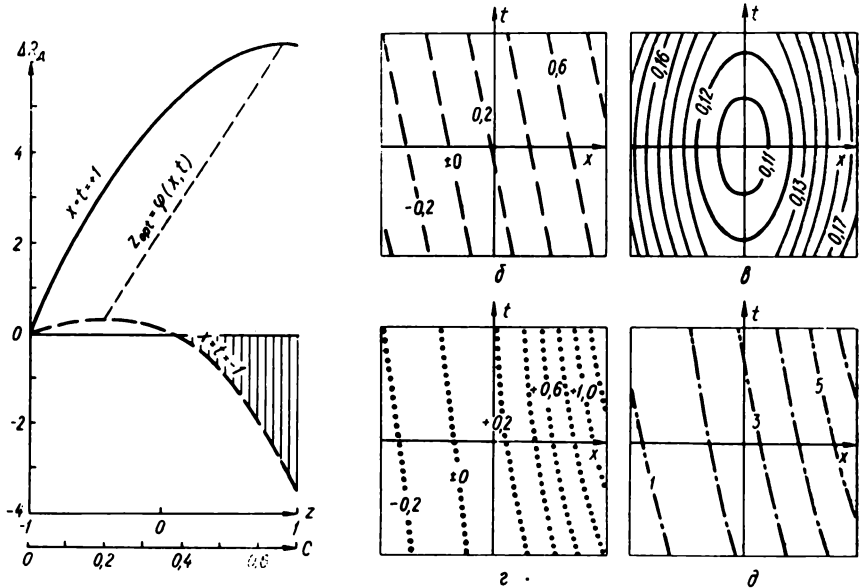


Рис. 1.6. Семейство парабол (а), описывающих влияние добавки на прочность бетонов  $R$ , и изолинии оптимальной переменной концентрации добавки  $z_{opt}$  (б); ошибки в определении ее координат (в), потеря на отсутствие регуляции  $z_{opt}$  (г) и общего прироста  $R$  за счет  $z_{opt}$  (д).

Из анализа (I.66) следует, что для уменьшения ошибки в определении оптимальной переменной добавки необходимо стремиться не только к увеличению точности эксперимента ( $s_s \rightarrow \min$ ), но и к построению таких планов  $\epsilon$ , для которых минимальна ошибка определения оценок квадратичных эффектов ( $s\{b_{ii}\} \rightarrow \min$ ). Изолинии  $s^2\{z_{opt}\}$  в виде семейства эллипсов с центром  $x=t=0$  показаны на рис. 1.6, в. Самый точный расчет по определению  $z_{opt}$  будет в центре эксперимента  $s\{z_{opt}\} = 0,106$ . При удалении от него ошибка увеличивается. Результат  $z_{opt}\{x=t=1\} = 0,89$  следует рассматривать только совместно с  $s\{z_{opt}\} = 0,184$ .

**Задача № 11** — анализ влияния оптимальной переменной концентрации добавки на  $\hat{R}$ . Из решения задачи 10 следует, что суперпластификатор нужно вводить оптимальной переменной концентрации в зависимости от уровней  $x$  и  $t$ , регулируя его количество по (I.65). Реали-

зация такого решения на практике требует дополнительных затрат, например на создание автоматизированных дозаторов добавок. Поэтому целесообразно оценить выигрыш от использования именно переменной (а не некоторой постоянной) концентрации добавки.

Общий прирост прочности  $\hat{\Delta R}_d$  (I.64) состоит из двух слагаемых (I.68): первое показывает результат введения добавки на постоянном «среднем уровне»  $z=0$  ( $C=0,35\%$ ), а второе — прирост за счет оптимальной регулировки  $z_{opt}=\varphi(x, t) \neq 0$

$$\hat{\Delta R}_d = (2,6 + 2,0x + 0,4t) + \hat{\Delta R}_\varphi. \quad (I.68)$$

Функцию  $\hat{\Delta R}_\varphi$  можно найти, используя приросты оценок (I.44) как  $\Delta R_\varphi = -0,25(b_2^2 + 2b_2b_{12}x + 2b_2b_{23}t + b_{12}^2x^2 + b_{23}^2t^2 + 2b_{12}b_{23}xt) : b_{22} =$   
 $= 0,1 + 0,4x + 0,1t + 0,6x^2 + 0,2xt. \quad (I.69)$

Изолинии для (I.69) показаны на рис. I.6, з. Потери от отсутствия регулировки  $z_{opt}$  будут наиболее значительными в зоне повышенных Ц, где они достигают 1,2 МПа, или 20 % общего прироста  $\hat{\Delta R}_d$  (рис. I.6, д). Последний подсчитывают по модели (I.70), полученной при подстановке (I.69) в (I.68),

$$\hat{\Delta R}_{d\,opt} = 2,7 + 2,4x + 0,5t + 0,6x^2 + 0,2xt. \quad (I.70)$$

Модель предела прочности бетона в зависимости от Ц и Т при оптимальной добавке  $z_{opt}=\varphi(x, t)$  может быть получена как сумма  $\hat{R}_s$  (I.54) и  $\Delta R_{d\,opt}$  (I.70) или прямой подстановкой (I.65) в (I.26)

$$\hat{R}_{d\,opt} = 19,6 + 5,9x + 2,5x^2 + 1,7xt + 6,9t + 0,6t^2. \quad (I.71)$$

Изолинии для (I.71) приведены на рис. I.7, а, который может служить технологической регулировочной диаграммой. По ней можно для заданного  $\hat{R}$  по соответствующей изолинии выбрать  $x$  и  $t$  (или любой из них при фиксации другого), а потом найти  $z_{opt}$  по рис. I.7, а для тех же  $x$  и  $t$ .

**Задача № 12** — расчет экономии цемента и тепловой энергии за счет введения добавки (при постоянной прочности бетона). Пути повышения экономичности производства бетона при  $\hat{R}=\text{const}$  можно проанализировать по рис. I.5, а. Однако более удобно построение для заданного  $\hat{R}=\text{const}$  (в данной задаче  $\hat{R}=21$  МПа, или 70 % марки 300) отдельной изоповерхности (см. рис. I.7, б) совместно с плоскостью  $z_{opt}=\varphi(x, t)$ . Если линию пересечения  $LM$  изоповерхности  $\hat{R}_d$  и плоскости  $z_{opt}$  спроектировать на плоскость эталонного бетона ( $z=-1, C=0\%$ ), то проекция  $lm$  будет находиться левее соответствующей линии  $L_sM_s$  для  $\hat{R}_s=21$  МПа, т. е. в области меньшего расхода цемента и пониженной температуры ТВО. Область между линиями  $lm$

и  $L_3M_3$  — это пространство экономии ресурсов за счет оптимальной переменной дозировки добавки суперпластификатора. Аналитическое решение задачи об экономии ресурсов крайне затруднительно, поскольку из координат линии  $L_3M_3$  нужно вычесть соответствующие координаты линии  $lm$ , все они связаны неявными функциями:

$$\text{для } L_3M_3: -4,1 + 3,5x + 6,4t + 1,9x^2 + 0,6t^2 + 1,5xt = 0, \quad (1.72)$$

$$\text{для } lm: -1,4 + 5,9x + 6,9t + 2,5x^2 + 0,6t^2 + 1,7xt = 0. \quad (1.73)$$

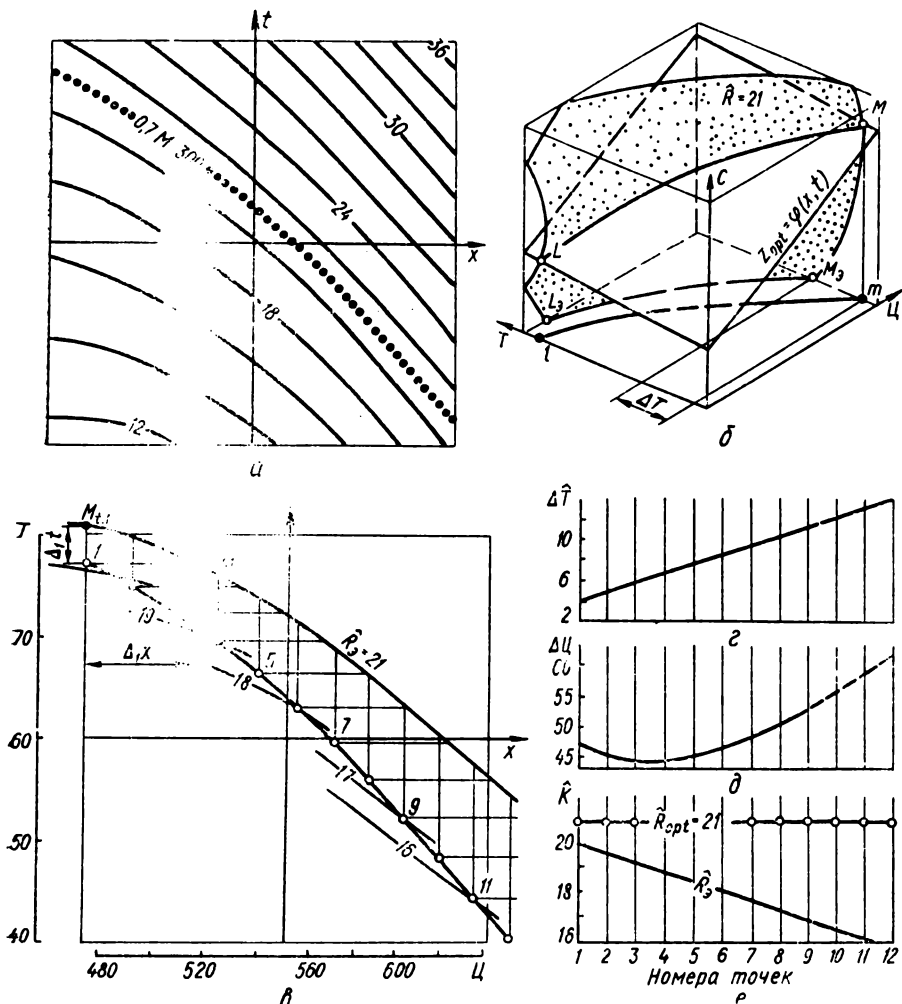


Рис. 1.7. Прочность  $R$  при  $z_{opt} = \varphi(x, t)$  на плоскости  $z_{opt}$  (а) и в трехфакторном пространстве (б — при  $R = 21$  МПа, линии  $LM$  соответствуют минимальные  $\Delta$  и  $T$ ); графоаналитический метод расчета возможной экономии ресурсов (в) и его результаты по уменьшению температуры (г) и расхода цемента (д) вдоль линии  $R = 21$  МПа, а также изменение  $R_3$  в таких условиях (е) (изопараметрический анализ).



Для решения задачи рекомендуется графоаналитический метод (см. рис. I.7, *в*). Изолиния  $lm$  (I.73) квантуется на  $N_L$  равных частей и из каждой точки 1...12 проводят параллельно осям линии до пересечения с изолинией  $L_3M_3$  (I.72). Полученные отрезки, например 1— $M_{x1}$  ( $\Delta_1x$ ) или 1— $M_{t1}$  ( $\Delta_1t$ ), масштабируют по осям  $\Psi$  и  $T$  и используют для построения графиков (рис. I.7, *г*...*д*). Эти графики с достаточной точностью характеризуют возможное снижение  $\Psi$  и  $T$  за счет введения  $z_{opt} = \varphi(x, t)$ . Движение вдоль изолинии (I.73) соответствует переходу от высокотемпературных режимов ТВО бетонов с малым расходом цемента (точка I) к низкотемпературным ТВО для бетонов с повышенным  $\Psi$  (точка II). Выбор того или иного пути от линии  $L_3M_3$  к линии  $lm$  полностью формализован быть не может, так как приоритет критериев  $\Psi$  и  $T$  (или связанной с ними обоими себестоимости бетона) зависит от локальной технико-экономической ситуации на данном производстве.

**Задача № 13 — изопараметрический анализ показателей качества бетона.** В предыдущей задаче при изменении рецептурно-технологических факторов по соотношениям (I.72...I.73) прочность оставалась постоянной, т. е. рассматривался изопропрочностный вариант управления системой. Другие показатели качества  $Y_T, Y_0, Y_s$  и  $Y_a$  при этом будут изменяться. Анализ закономерностей этого изменения при условии *постоянства некоторого*  $Y_j = \text{const}$  назван нами [16, с. 150] *изопараметрическим*. Если считать постоянной  $\hat{R}_{d, opt} = 21$  МПа, то для анализа закономерности изменения при этом  $\hat{R}_s$  по (I.73) можно было бы найти в явном виде один из факторов, например  $x$ , поставить его в (I.54) и исследовать иррациональную функцию вида

$$\hat{R}_s = C_0 + C_1t \pm C_2t^2 \pm C_3\sqrt{C_4 + C_5t + C_6t^2} \pm C_7t\sqrt{C_4 + C_5t + C_6t^2}, \quad (I.74)$$

где  $C_i$  — коэффициенты, рассчитываемые по оценкам  $b$  в (I.54) и (I.73).

Намного проще получить данные для изопараметрического анализа по графоаналитическому методу. Если в каждой из 12 точек на изолинии  $lm$  определить по (I.54) значения  $\hat{R}_s$ , будет получен график (рис. I.7, *е*), из которого следует, что при  $\hat{R}_{d, opt} = 21$  МПа прочность эталонного бетона уменьшается линейно (вдоль  $lm$ ).

Примечание к задаче № 13. Наиболее эффективен изопараметрический анализ серии моделей для  $Y_s$  и  $Y_0$ , построенных в одном и том же факторном пространстве [16, 37, 22]. Он позволяет сконструировать новые обобщенные переменные из  $Y_j$  и оценить формы взаимосвязи между структурой и свойствами КМ (см. § 4 гл. III).

**Задача № 14 — ранжирование факторов по степени их влияния на  $\hat{R}$ .** Эта задача, успешно решаемая [1, 50] по линейным моделям (I.9), для моделей, содержащих эффекты взаимодействия, не имеет единственного решения [16, с. 69]. Это следует из анализа квазиоднофакторных моделей (I.33), в которых  $b_{ij}$  передвигают вершину пара-

болы, а следовательно, в зону эксперимента попадают разные ее участки [16, с. 70] в зависимости от уровней стабилизации  $x_j$ .

Целесообразно сравнивать однофакторные функции, построенные в двух экстремальных вариантах [16, с. 232]: в расчетной точке  $\hat{Y}_{\max}$  с координатами  $x_{1\max}, \dots, x_{i\max}, \dots, x_{k\max}$  последовательно назначая один фактор переменным, а остальные постоянными; то же, в расчет-

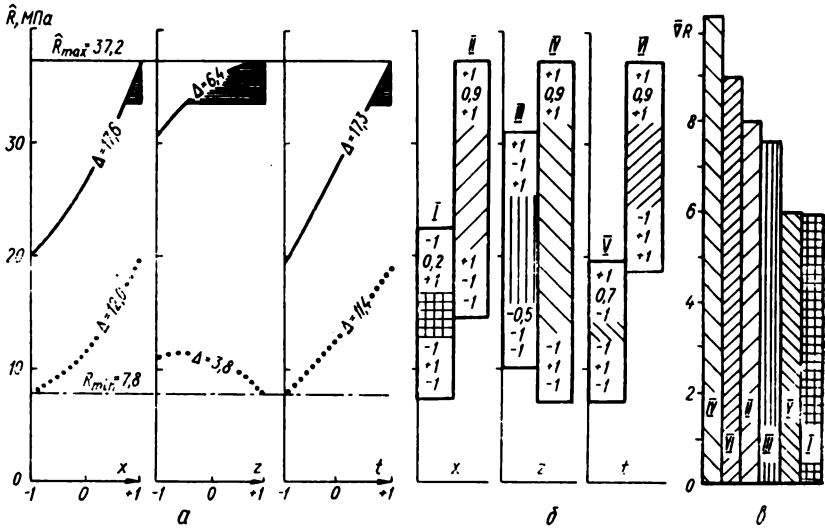


Рис. 1.8. Однофакторные зависимости (а)  $R=f_i(x_i)$  при условии стабилизации  $x_j$  в точке максимума (сплошная линия) и минимума (пунктир); диапазоны  $R_{\max}-R_{\min}$  при одновременном изменении двух факторов (б) и ранжирование усредненных максимальных градиентов  $\bar{\nabla} R$  (в) в тех же условиях.

ной точке  $\hat{Y}_{\min}$ . Ранжирование ведется по наибольшему размаху  $\Delta_{x_i}$  однофакторных зависимостей в пределах  $-1 \leq x_i \leq +1$ . Так,  $\hat{R}_{\max} = 37,2$  МПа имеет координаты  $x=t=+1$  и  $z=0,89$  (задача № 5). Если подставить в (1.26)  $t=+1$  и  $z=0,89$ , то будет получена модель

$$(\hat{R}_{\max})_x = 26,5 + 8,8x + 1,9x^2, \quad (1.75)$$

у которой  $(\hat{R}_{\max})_{x_{\min}} = 19,6$  МПа. Следовательно, размах составляет  $\Delta_x = 37,2 - 19,6 = 17,6$ . Аналогичная процедура для факторов  $z$  и  $t$  приводит к результатам  $\Delta_z = 6,4$  МПа и  $\Delta_t = 17,3$  МПа (рис. 1.8, а), что позволяет проранжировать факторы как  $\Delta_x \geq \Delta_t > \Delta_z$ . В данной частной задаче ранжирование в зоне минимума дает тождественный результат, который позволяет сделать вывод о примерно равном влиянии П/Ц и  $T$  на  $\hat{R}$ , но втрое меньшем влиянии  $C$ .

Задача № 15 — оценка устойчивости каждого фактора в зоне оп-

**тимума.** Решение задачи крайне важно не только для технологов-материаловедов, но и для специалистов по созданию систем автоматизированного контроля и регулирования процессов потому, что ответ на нее концентрирует внимание на том факторе, который должен быть стабилизирован с наибольшей точностью. По моделям типа (1.75) или графикам (см. рис. 1.8, а) определяют ширину изменения в *границах эксперимента* каждого фактора  $H_i$  при  $(1-\xi) R_{\max}$ . Степень потери  $\xi$  при снижении  $R$ , по сравнению с  $R_{\max}$ , задается из технико-экономических соображений. Так, если принять  $\xi=0,1$ , то для  $0,9 R_{\max}=33,5$  МПа будут получены следующие  $H_i$ :

$$H_x = (1 - 0,69) = 0,31 \text{ или } H_{\text{ц}} = 27,3 \text{ кг/м}^3,$$

$$H_z = (1 + 0,54) = 1,54 \text{ или } H_{\text{с}} = 0,54\%,$$

$$H_t = (1 - 0,61) = 0,39 \text{ или } H_{\text{т}} = 7,8 \text{ }^\circ\text{C}.$$

Если считать, что точность регулировки  $0,5 H_i$ , то наибольшее внимание должна вызывать необходимость регулировки в камере ТВО температуры  $T = (80 \pm 3,9)^\circ\text{C}$ .

**Задача № 16** — оценка градиента прочности  $\bar{\nabla}R$  при одновременном изменении нескольких факторов. Решения, полученные в задачах № 14...15, существенно дополняются, если рассматривать влияние на выход системы нескольких факторов одновременно. Для сравнительного анализа целесообразно использовать *усредненный максимальный градиент* выхода в зоне эксперимента  $\bar{\nabla}Y$  [16, с. 61]. Его приближенное значение может быть определено как разность  $R_{\max}-R_{\min}$  по каждой грани куба на рис. 1,5, а, отнесенная к расстоянию между точками, в которых получены эти значения  $R_{\text{ext}}$ . Так, для грани куба при  $z = +1$  в точке  $x_{\max} = +1$  и  $t = +1$  достигается  $R_{\max} = 37,2$  МПа, а в точке  $x_{\min} = -1$  и  $t_{\min} = -1$  прочность  $R_{\min} = 7,8$  МПа, что позволяет определить усредненный максимальный градиент на этой грани как

$$\begin{aligned} \bar{\nabla}R &= (R_{\min} - R_{\max}) : \sqrt{(x_{\max} - x_{\min})^2 + (t_{\max} - t_{\min})^2} = \\ &= (37,2 - 7,8) : \sqrt{[1 - (-1)]^2 + [1 - (-1)]^2} = 10,39 \text{ МПа}. \end{aligned} \quad (1.76)$$

На рис. 1,8, б показаны разности  $R_{\max}-R_{\min}$  для каждой из граней (с указанием по вертикали столбцов координат  $x$ ,  $z$  и  $t$  соответственно), а на рис. 1,8, в градиенты  $\bar{\nabla}R$ . Сравнительный анализ этих данных позволяет заключить, что наиболее сильно на изменение рецептурно-технологических факторов реагирует бетон с повышенным содержанием суперпластификатора (грани IV и VI), наиболее устойчивы к колебаниям факторов решения I и V, характеризующиеся низкими уровнями  $x$  и  $t$ .

**Задача № 17** — модель влияния рецептурно-технологических факторов на прочность бетона в безразмерных переменных и подобные преобразования. В модели (1.26) факторы  $x$ ,  $z$  и  $t$  безразмерны, а все оценки коэффициентов имеют размерность выхода — МПа. Однако для того чтобы анализировать модель  $\hat{R}$  (1.26) в совокупности с моделями других показателей качества  $\hat{Y}_j$  для выявления *подобных*

механизмов явления, эту модель необходимо записать в безразмерной форме. Такое преобразование удобно выполнить за счет деления левой и правой частей модели на свободный член  $b_0$  [15, с. 184] и переноса  $l$  в левую часть, что позволяет трактовать  $\pi_R$  как относительный к центру эксперимента *прирост прочности*:

$$\pi_R = \hat{R}/b_{0R} - 1 = 0,282x + 0,097x^2 + 0,102xz + 0,077xt + \\ + 0,041z - 0,092z^2 + 0,021zt + \\ + 0,349t + 0,031t^2. \quad (1.77)$$

Модель (1.77) целесообразно пронормировать по любому из коэффициентов, например, по линейному влиянию добавки. Тогда при  $C_{Rz} = 41 \cdot 10^{-5}$

$$\pi_R = C_{Rz}(688x + 238x^2 + 250x + 188xt + \\ + 100z - 225z^2 + 50zt + \\ + 850t + 75t^2). \quad (1.78)$$

Подобными могут считаться все модели для других свойств  $Y_j$ , у которых будет совпадать с (1.78) заключенная в скобки правая часть (при частичном совпадении модели будут квазиподобными, приближенно подобными и т. п. [14]).

Описанные задачи не исчерпывают всего многообразия задач, поскольку некоторые из них возникают и требуют нетривиальных решений лишь в многофакторных ситуациях  $K > 3$  (интерпретация при нарастающей степени риска [16, с. 229], анализ условий обеспечения изопараметрами при минимуме расхода ресурса [16, с. 247; 17, с. 15] и др.) и при принятии решений по нескольким моделям одновременно [16, 17, 18], что частично отражено в последующих главах.

## ГЛАВА II. СТРУКТУРНО-ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОПТИМИЗАЦИИ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

### § 1. ОПТИМИЗАЦИЯ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ ЧЕРЕЗ ОПТИМИЗАЦИЮ СТРУКТУРЫ

Конструктивные особенности изделия определяют уровень физико-технических свойств материала, а структурные особенности самого материала, в свою очередь, определяют несущую способность и эксплуатационную надежность конструкции (см. рис. 1.1). Комплекс свойств СКМ связан с параметрами  $Y_s$  его структуры [62]. Под оптимальной понимают структуру, которая обеспечивает получение необходимого комплекса физико-технических свойств конструкции, изготовленной при минимуме затрат энергетических и материальных ресурсов, и где отсутствуют структурные напряжения и дефекты, способные снизить уровень этих свойств при длительных сроках эксплуатации конструкции.

Механические свойства СКМ зависят, при прочих равных условиях, от количества, вида, размера и ориентирования пор и дефектов [39, 83]. Установлено [59], что под действием внешних напряжений  $\sigma$  в материале на границе с порой или дефектом длиной  $a$  и радиусом кривизны  $\rho$  происходит локализация напряжений  $\sigma_K$ , величина которой характеризуется коэффициентом концентрации напряжений  $K$

$$K = \sigma_K / \sigma = 2 \sqrt{a / \rho}. \quad (\text{II.1})$$

Для поры в виде сферы ( $a = \rho$ ) коэффициент концентрации напряжений  $K = 2$  (рис. II.1). По мере трансформации сферической поры в

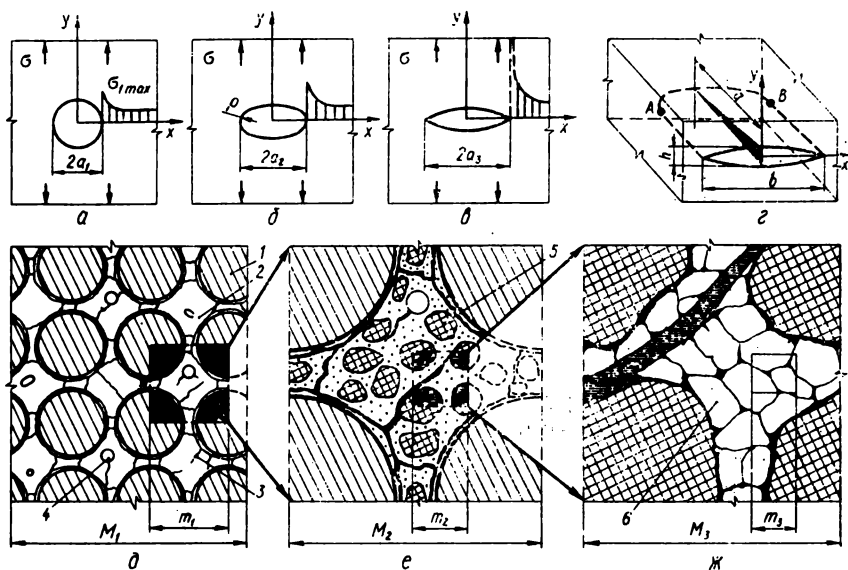


Рис. II.1. Концентрация напряжений на границе со сферической (а) или эллипсоидной (б) порой и трещиной (в), имеющей геометрические параметры (г) и расположенной на разных (д, е, ж) масштабных уровнях композита:

1 — наполнитель, 2 — матричный материал, 3 — трещина, 4 — пора, 5 — наполнитель, 6 — структурный элемент связующего.

эллипсоид и трещину радиус кривизны уменьшается, что вызывает увеличение  $K$  до 200 и более [39]. Радиус кривизны у конца трещины может быть одного порядка с межмолекулярным расстоянием, что при достаточной длине трещины приближает разрушающее напряжение к нулевому. Повышение концентрации напряжений у устья трещин требует считать последние разупрочняющими элементами структуры. В дополнение к величинам  $a$  и  $\rho$  трещина характеризуется фронтом  $L$  (линией, перпендикулярной к направлению движения трещины), шириной раскрытия  $b$ , морфологией и фактурой ее берегов (образующих плоскостей) (см. рис. II.1, г). Особенно опасны трещины при их заполнении жидкостями. Энергии взаимодействия адсорбированных полярных молекул жидкости может быть доста-

точно для вывода трещины из равновесия и ее развития (проявление «эффекта Ребиндера») [62].

С позиций механики разрушения [39, 59] для гетерогенного материала опасной следует считать длину трещины  $a$ , соизмеримую с наибольшей по масштабу *структурной неоднородностью*, под которой понимается изменение качественного состава и свойств (градиент свойств  $\Delta Y$ ) при переходе от одного компонента к другому. Сложное строение самих компонентов превращает СКМ в полиструктурный материал типа структура в структуре или композит в композите [67]. Для инженерного описания системы и выявления влияния отдельных компонентов на свойства композита выделяют структурные уровни [12, 39, 44]. Их целесообразно выделить по структурным неоднородностям. На каждом выделенном уровне (см. рис. П.1,  $\delta$ ,  $\epsilon$ ,  $\zeta$ ) поведение системы может быть описано с позиций макро- и микромеханики КМ [12, 70]. Макромеханический подход позволяет определить осредненные свойства материала  $\bar{Y}$ , в которых нивелируются  $\Delta Y$  отдельных компонентов. Такой подход возможен при выделении достаточного объема материала на каждом структурном уровне  $M_i$ . Для выявления влияния структурных неоднородностей  $m_i$  (градиента свойств  $\Delta Y$ ) на локализацию деформаций и напряжений на выделенном структурном уровне применяют *микромеханику* или структурную механику КМ [12, 70].

Дефекты строительных конструкций можно разделить на два вида: *технологические* [72], или наследственные, связанные с предысторией получения конструкции, и *эксплуатационные*, связанные с воздействием на конструкцию эксплуатационной механической нагрузки и среды. Появление и развитие последних зависит от вида, количества и ориентирования в конструкции наследственных дефектов. В свою очередь, наследственные дефекты можно разделить на заключенные в компонентах материала и возникшие при структурообразовании композиционного материала и конструкций из него. При этом разрушение конструкции следует понимать не как единовременный акт прекращения существования материала, а как достаточно длительный процесс поэтапного накопления и укрупнения дефектов с их прорастанием с одного структурного уровня на другой. В связи с этим в задачи инженера-технолога входит не только изготовление конструкции с заданными параметрами качества, но и получение минимального количества потенциально опасных структурных дефектов в ней.

В общем случае, при проектировании оптимальной структуры СКМ необходимо добиваться, чтобы длина технологической трещины  $a$  была меньше размера структурной неоднородности  $m_i$ ,  $\chi = a/m_i < 1$ . На зарождение и развитие трещин влияют: механические характеристики  $E$  компонентов материала и их объемное содержание  $\phi$ . Характер внутренних деформационных процессов зависит от геометрических параметров отдельных фаз композита  $\Gamma_k$ , а механизм развития и распределения общего деформативно-напряженного состояния конструкции определяется ее геометрическими особенностями  $\Gamma_{кк}$ . Время структурообразования системы  $\tau$  определяет ее реоло-

гические характеристики  $\eta$  (в т. ч. релаксационные) и соотношение скорости протекания объемных деформаций твердеющей системы  $\epsilon$  и кинетики развития собственных напряжений  $\sigma_b$

$$\chi = f\{E, \varphi, \Gamma_k, \Gamma_{kk}, \tau, \eta, \epsilon, \sigma_b\}. \quad (II.2)$$

Сложная функциональная зависимость между размерами технологических трещин и факторами, их определяющими, ставит задачу изучения потенциальной возможности зарождения трещин в гетерогенных твердеющих системах с целью управления технологическими напряжениями для предотвращения их развития до опасных размеров.

## § 2. ОПТИМИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ НАПОЛНЕННЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Цементы с минеральными активными наполнителями, растворы и пасты на неорганическом связующем, полимерные материалы и т. п. относятся к наполненным СКМ, т. е. к материалам, состоящим из вяжущего и наполнителя. Характерным уровнем структурной неоднородности таких материалов является уровень «вяжущее — наполнитель». При этом размер наполнителя может быть меньше, равным или на несколько порядков больше размера *элементарного структурного элемента* (ЭСЭ) вяжущего, под которыми понимают молекулярные и надмолекулярные структуры, консолидация которых образует материал с определенными свойствами  $\bar{Y}$ .

Твердение СКМ сопровождается, как правило, объемными изменениями связующего. Причем большинство СКМ при твердении претерпевают объемные усадочные деформации (цементы, кроме расширяющихся, и материалы на их основе; металлы; полимеры и материалы на их основе; обжиговые высокодисперсные материалы и т. п.). Усадочные деформации могут развиваться и в материалах с уже сложившейся структурой при изменении температурно-влажностного режима их эксплуатации. В основе объемных усадочных деформаций  $\epsilon_0$  всей структуры материала лежат элементарные деформации ЭСЭ [41]. Такое представление усадки наиболее полно отражает объективно существующий процесс — объемные изменения системы структур композита, диалектически связанные с объемными изменениями каждой составляющей структуры.

Слабые межфазные взаимодействия между ЭСЭ на начальных этапах структурообразования вяжущего способствуют образованию в непрерывном материале дискретных объемов, названных нами *усадочными ячейками* (УЯ). Механизм образования усадочных ячеек разных масштабных уровней аналогичен образованию ячеек Вигнера-Зейтца для идеальной решетки и полиэдра Вороного для неупорядоченной системы атомов в кристаллической решетке [30]. Считая ЭСЭ вяжущего сферами с одинаковым диаметром  $d=1$ , можно утверждать, что в условиях протекания поверхностных явлений каждый элементарный элемент может взаимодействовать с шестью соседними на плоскости и с двенадцатью в объеме. Объем, ограничен-

ный плоскостями, проведенными нормально к образующим поверхность совокупностям элементарных элементов, представляет собой *усадочную ячейку* нижнего масштабного уровня — УЯ-1 (рис. II.2, а). Образовавшиеся УЯ-1 представляют собой более сложные упорядоченные структурообразующие элементы — *таксоны* [48, с. 63]. Взаимодействие их ведет к образованию следующей по масштабу *усадочной*

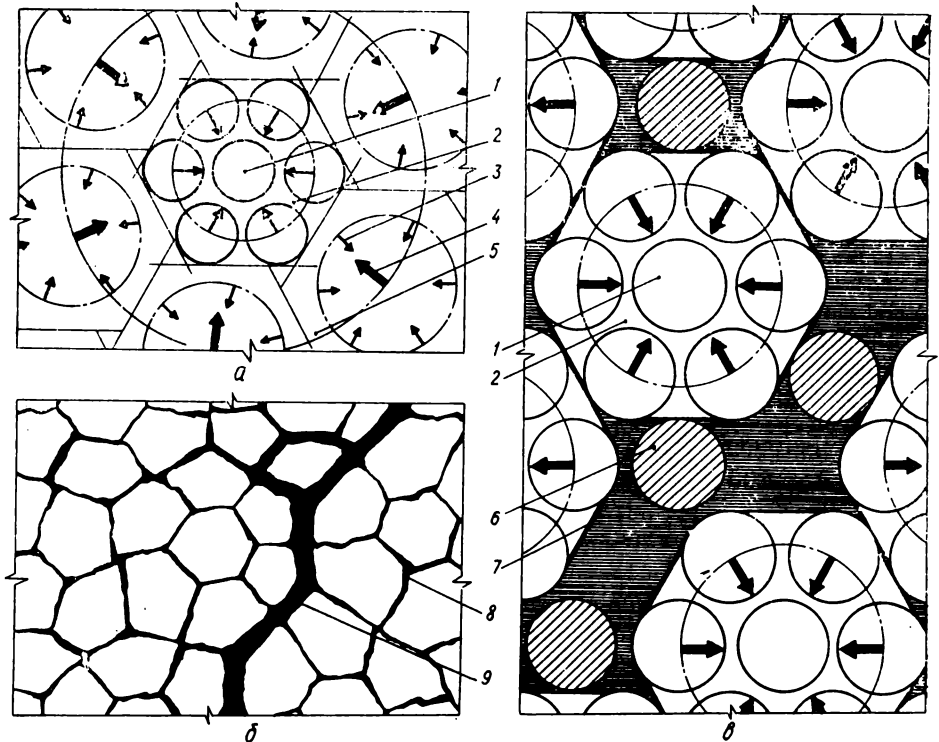


Рис. II.2. Механизм образования в вязущем (а) *усадочных* ячеек — УЯ, их выход на поверхность (б) и деструктивная роль (в) наполнителя неоптимальных размеров: 1 — элементарный структурный элемент вязущего; 2 — «УЯ-1», 3 — направление *усадочных* деформаций внутри «УЯ-1»; 4 — направление *усадочных* деформаций внутри «УЯ-2»; 5 — «УЯ-2»; 6 — наполнитель, 7 — структурные дефекты, создаваемые наполнителем; 8 — поверхности раздела между «УЯ»; 9 — опасная трещина.

ной ячейки УЯ-2. В свою очередь, УЯ-2 сама является структурообразующим элементом для УЯ-3 и т. д. (до УЯ-*N*). Объем *усадочных* ячеек  $V_n$  *n*-го масштабного уровня можно определить через объем элементарного структурного элемента  $V_1$

$$V_n = (V_1 + 12V_1)^{n-1}. \quad (\text{II.3})$$

Максимальный размер *усадочных* ячеек  $d_n$  на каждом *n*-м масштабном уровне зависит от размера ЭСЭ  $d_1$  с поправкой на изменение его объема  $\Delta d$  в результате химических реакций

$$d_n = (d_1 + \Delta d) 3^{n-1}. \quad (\text{II.4})$$



Внутри каждой усадочной ячейки взаимодействие между составляющими ее элементами больше, чем поверхностное взаимодействие самих усадочных ячеек. Это ведет к образованию ослабленной межфазной границы раздела, которая превращает непрерывный объем материала в дискретные таксоны.

Рост масштабного уровня усадочных ячеек продолжается до образования критического объема  $V_{кр}$ , при котором усадочные деформации

внутри дискретных элементов приводят к росту напряжений до критического значения  $\sigma_{кр}$ , превышающего энергию связи между усадочными ячейками. Образуются поверхности раздела (зародышные трещины), на которых проявляются все последующие деформационные процессы и которые являются внешними по отношению к усадочным ячейкам и внутренними по отношению к композиционному материалу. Внутренние поверхности раздела при больших усадочных деформациях способны трансформироваться в опасные для данной конструкции трещины.

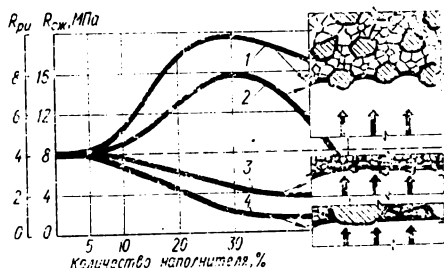


Рис. 11.3. Влияние дисперсности и объемного содержания наполнителя на прочность гипсосодержащих композиций:

1 — крупность наполнителя  $d_n$  в 10 раз больше размера ЭСЭ  $d_1$ ; 2 —  $d_n/d_1 = 3$ ; 3 —  $d_n/d_1 = 1$ ; 4 —  $d_n/d_1 \gg 10$ .

При выходе на поверхность трещины образуют сложный мозаичный рисунок в виде шести- и пятиугольников. Четкость образования многоугольников зависит от соотношения размеров исходных ЭСЭ. Подобный характер трещинообразования можно наблюдать на поверхностях многих материалов (металлов, на высушенных грунте и глине, в полимерных и глазурированных покрытиях, цементных стяжках и т. п.). Опыты, проведенные в ОИСИ, показали, что в цементных образцах с разным В/Ц под действием внешней нагрузки преимущественно развиваются трещины между усадочными ячейками (см. рис. 11.2, б).

Ограничить рост усадочных ячеек и, следовательно, внутренних поверхностей раздела СКМ можно введением строго определенного по отношению к таксону размера наполнителей. Применение их ведет к повышению энергии разрушения, но не всегда вызывает увеличение прочности материала [39].

Оптимальен, по-видимому, размер частичек наполнителя, равный размеру нижней усадочной ячейки УЯ-1. Поверхностная активность частичек такого размера позволяет им взаимодействовать с образовавшимися структурными элементами и органично входить в состав последующих по масштабу усадочных ячеек (УЯ-2, ..., УЯ-N). Наполнители такого размера не только не создают в окружающем вязущем разупрочняющее поле деформаций и напряжений, но и сами являются своеобразными стопорами, сдерживающими рост возникших трещин под внешней нагрузкой [39, 59] (рис. 11.3).

Размер частичек наполнителя  $d_n$  должен быть в 3...10 раз больше размера ЭСЭ  $d_1$ . Это отношение сохраняется при изменении дисперсности вязущего  $d_n/d_1 = 3 \div 10 = \text{const}$ .

Изменение поверхностной активности частичек наполнителя, например, аппретирование их поверхности [39, 44, 79], может изменить оптимальное соотношение размеров их и вяжущего. Это позволит использовать широкий диапазон величины частичек наполнителя для обеспечения повышения прочности СКМ. Перспективно, по данным В. И. Соломатова [44, III, с. 122], использование в качестве наполнителя их агрегатов (кластеров), позволяющих управлять комплексом физико-технических характеристик наполненных композиционных материалов.

### § 3. ОПТИМИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ ЗАПОЛНИТЕЛИ

Отличительная особенность бетонов всех видов — наличие в их структуре *заполнителей* — структурных элементов, размер которых на несколько порядков превышает размер ЭСЭ вяжущего. Это предопределяет, при изучении влияния заполнителей на свойства СКМ, выделение характерного для бетонов уровня структурной неоднородности «растворная часть — заполнитель». Градиент свойств  $\Delta Y$  между выделенными фазами бетона предполагает существование между ними переходной зоны, называемой *поверхностью раздела* [39]. Ее можно определить как область значительного изменения состава материала и его свойств и как область, обеспечивающую связь и передачу нагрузки (технологической и эксплуатационной) между структурами композита [12, 59]. Можно выделить три типа поверхностей раздела между заполнителями и растворной частью, обуславливаемые их физико-химическим взаимодействием: растворная часть и заполнители нереакционно способны; растворная часть и заполнители взаимно растворимы; составляющие элементы растворной части вступают в реакцию с заполнителями и образуют новые химические соединения на поверхности раздела.

Переходные зоны между растворной частью и заполнителями должны быть химически стабильными, поверхности раздела должны равномерно перераспределять возникающие напряжения между фазами композита и сдерживать продвижение в нем трещин при действии эксплуатационных нагрузок.

Формирование поверхности раздела между растворной частью и заполнителями происходит одновременно с процессами твердения бетона. Механизм развития деформационных процессов на границе раздела принято изучать на модели структурной ячейки композита, которая представляет собой диск заполнителя радиусом  $r$ , окруженный растворной частью [20, 39, 43, 68, 75]. При усадке кольца шириной  $(R-r) > 0,1r$  точки на границе раздела взаимодействуют с точками, лежащими на внешней поверхности. Граница раздела  $r$  при усадке стремится увеличиться на  $\Delta r$ , а внешний радиус  $R$  — уменьшается на  $\Delta R$  (рис. II.4, а). Деформации растяжения на внутренней границе раздела переходят в деформации сжатия на внешней части растворного кольца. Это приводит к возникновению окружных напря-

жений растяжения  $\sigma_r^p$  на границе растворной части с заполнителем, которые переходят в окружающие напряжения сжатия на наружной части кольца  $\sigma_\theta^c$ . В зоне перехода концентрируются максимальные радиальные напряжения  $\sigma_r$ . Под действием радиальных  $\sigma_r$  и окружающих  $\sigma_\theta$  напряжений образуются трещины по поверхности раздела с заполнителем и радиальные, направленные от заполнителя в периферийные зоны растворной части.

Опыты, проведенные в ОИСИ [20] с разными материалами

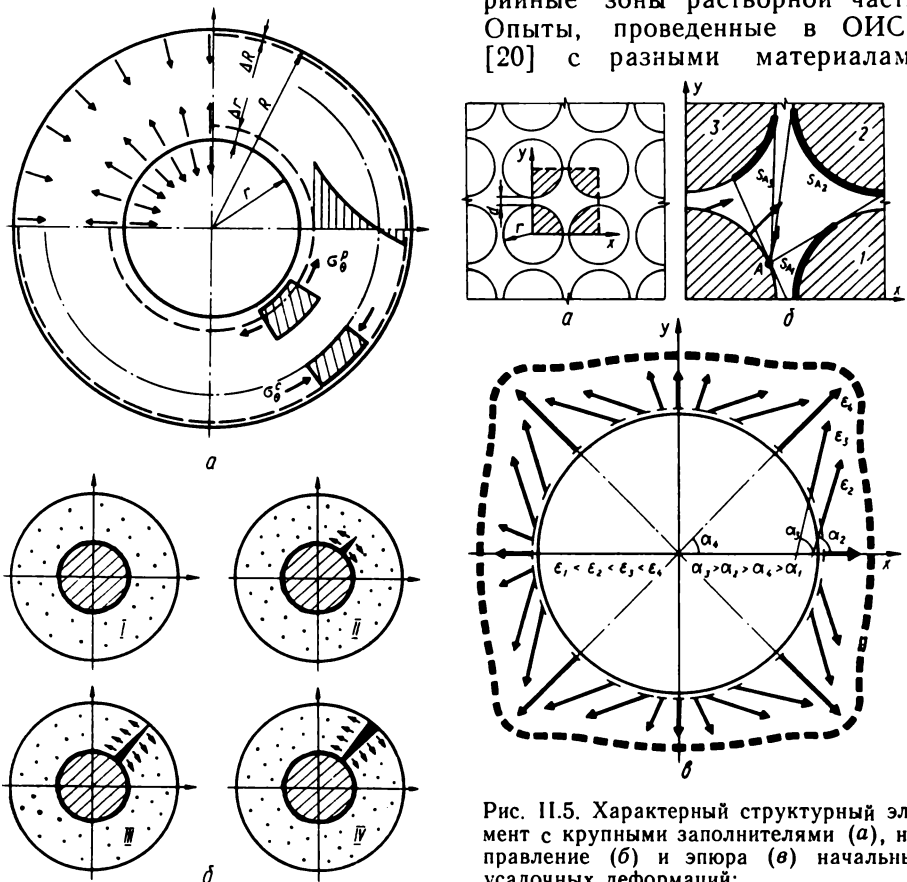


Рис. 11.4. Развитие деформаций усадки (а) и четыре этапа развития трещин (б) в кольце матричного материала вокруг заполнителя.

Рис. 11.5. Характерный структурный элемент с крупными заполнителями (а), направление (б) и эпюра (в) начальных усадочных деформаций:

$SA_i$  — поверхности взаимодействия с точкой  $A$  при усадке матрицы;  $\alpha_i$  — углы, характеризующие направление усадочных деформаций  $\epsilon_i$ .

растворной части, позволили выделить четыре этапа появления и развития трещин (см. рис. 11.4, б, I...IV):

- I — появление трещин сцепления в результате действия радиальных напряжений  $\sigma_r$ ;
- II — зарождение радиальных трещин под действием окружающих напряжений растяжения  $\sigma_r^p$ ;

III — рост радиальных трещин под действием окружных напряжений растяжения  $\sigma_{\theta}^p$  и усадочных деформаций, проявляющихся на берегах трещин  $\Delta \epsilon_T$ ;

IV — раскрытие радиальной трещины под действием окружных сжимающих напряжений  $\sigma_{\theta}^c$ .

Модели СКМ с единичным включением малоинформативны, так

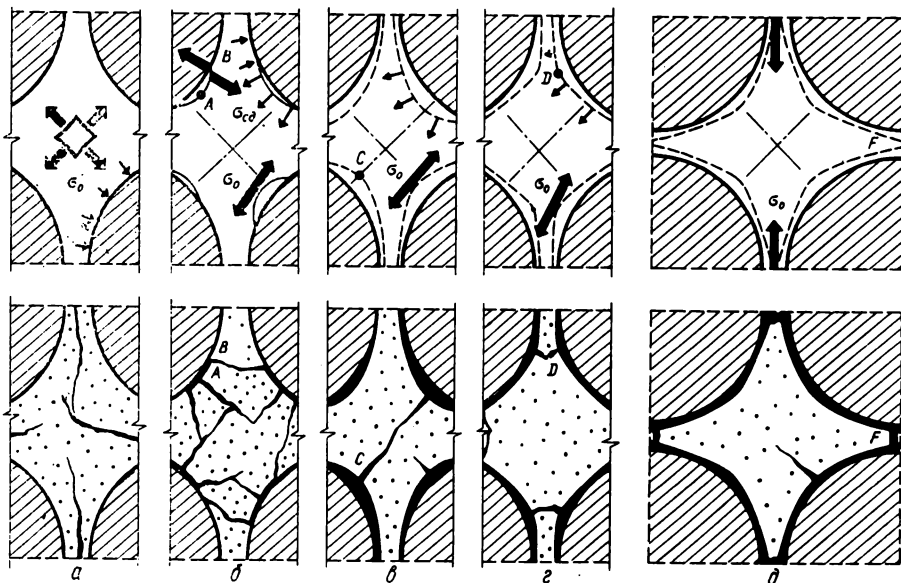


Рис. 11.6. Усадочные деформации, напряжения ( $\sigma_{от}$  — отрыва,  $\sigma_{сд}$  — сдвига) и трещинообразование при разной адгезии матричного материала к заполнителю: совершенной (а), неполной (б), нулевой (в, г, д).

как не позволяют раскрыть механизм развития деформационных процессов на границе растворной части с несколькими соседними заполнителями. Бетон целесообразно представить как осесимметричный композиционный материал, состоящий из матрицы (растворной части) с регулярно расположенными заполнителями. Такие системы анализируют на плоских моделях с заполнителем в виде колец или шайб заданного размера (рис. 11.5, а). Анализ возможных перемещений точек, лежащих на поверхности раздела растворной части с заполнителями, показал, что при объемной усадке раствора возникает градиент деформаций по величине  $\Delta \epsilon$  и направлению  $\Delta \alpha$  (рис. 11.5, б). Можно выделить три таких случая: поверхность раздела совершенна — адгезия между растворной частью и заполнителем  $R_A$  больше ее когезионной прочности  $R_K$  ( $R_A > R_K$ ); адгезия растворной части и заполнителя неполная  $R_A = R_K$ ; адгезия растворной части и заполнителя отсутствует  $R_A < R_K$ .

**При совершенной поверхности раздела** в матричном материале под действием радиальных напряжений  $\sigma_r$ , появляются концентриче-

ские трещины (рис. II.6, а). Они расчленяют бетон на отдельные структурные элементы, в которых возникающие напряжения не перераспределяются между растворной частью и заполнителями.

**Неполная адгезия** растворной части к заполнителю связана с избирательным характером адгезии к полиминеральным заполнителям, изменяющейся поверхностью заполнителей и т. п. [9]. Микрореологические процессы индивидуальны на отдельных участках поверхности раздела, что вызывает изменение качества микрообъемов растворной части. Микроформоизменение твердеющей растворной части на участках поверхности с ослабленной адгезией ведет к локализации деформаций и развитию напряжений сдвига  $\sigma_{сд}$  и отрыва  $\sigma_{от}$  (см. рис. II.6, б). Их концентрация вызывает появление трещин в местах искривления формы (точка А) и на границе с ослабленной адгезией (точка В). Микроконтактный характер адгезии приводит к локализации напряжений на отдельных участках заполнителя под действием внешних нагрузок, что снижает прочность материала. Для предотвращения неравномерного распределения деформаций и напряжений по поверхности раздела (увеличение площади адгезии или ее отсутствие) модифицируют поверхность заполнителя. Целенаправленная модификация улучшит качество смеси, повысит прочность и надежность конструкции.

**Нарушение адгезии** происходит на начальных этапах структурообразования материала. Под действием градиентов усадки по величине  $\Delta \epsilon$  и направлению  $\Delta \alpha$  и явлений пластического гистерезиса твердеющей системы происходит отслоение растворной части от заполнителей [20, 21]. Максимальное искривление поверхности раздела на начальной стадии развития деформационных процессов при кубической упаковке заполнителей происходит в точке С (см. рис. II.6, в). Здесь концентрируются напряжения отрыва  $\sigma_0$ . Пластические деформации твердеющей матрицы позволяют ей деформироваться без разрушения. Продолжающиеся усадочные деформации проявляются на уже искривленных поверхностях, что изменяет характер формоизменения. Зоны максимального искривления мигрируют в точку D (см. рис. II.6, г), в которой при неблагоприятной ситуации могут появиться трещины. Если растворная часть способна выдержать и эти деформации и напряжения без нарушения целостности, максимальное искривление перемещается в точку F (см. рис. II.6, д).

Место зарождения трещин зависит, главным образом, от соотношения кинетики структурообразования  $d\eta/dt$  и скорости протекания в ней объемных деформаций  $d\epsilon/dt$ . Если условия протекания структурообразующих и деформационных процессов одинаковы, то место зарождения трещин и характер их развития зависят от способа укладки и расстояния между заполнителями.

Опыты, проведенные в ОИСИ, показали, что при одинаковом качестве растворной части суммарное раскрытие трещин не зависит от расстояния между заполнителями. Оптимальным следует признать такое расстояние, при котором в растворной части возникает много мелких трещин, незавершенных в своем развитии. Общая целостность выделенной структурной ячейки не нарушается. Отклоне-

ние от оптимального расстояния вызывает появление небольшого количества трещин, которые разделяют структурную ячейку на отдельные элементы. Внутреннее перераспределение напряжений под действием внешней нагрузки в таких системах затруднено. Это ведет к концентрации  $\sigma$  в отдельных местах, быстрому развитию опасных трещин, снижению механических характеристик материала и уменьшению эксплуатационной надежности композитной конструкции.

Качественная картина трещинообразования связана, главным образом, не с особенностями формирования усадочных ячеек в матрице, а с присутствием в системе заполнителей. Являясь равноправным структурным элементом композиционного материала, заполнители сами создают вокруг себя поле деформаций и напряжений и управляют тем самым характером трещинообразования растворной части. Поэтому при проектировании оптимальных структур СКМ с крупными заполнителями необходимо учитывать их роль в структурообразовании системы; управлять скоростью структурных превращений вяжущего в зависимости от геометрических параметров  $\Gamma_k$ ,  $\Gamma_{kk}$  системы для получения в растворной части большого количества незавершенных в своем развитии трещин, что способствует повышению прочности композиции.

Начальные объемные деформации и кинетика структурообразования цементного теста зависят от водоцементного отношения. Изменять В/Ц при сохранении постоянной подвижности смеси можно введением в нее пластифицирующих добавок (в нашем случае в качестве добавки использован суперпластификатор С-3 в количестве  $Z = (0,5 \pm 0,5) \%$  массы цемента). Геометрические параметры модели структурной ячейки бетона целесообразно варьировать шириной кольца цементного теста вокруг податливого заполнителя-датчика диаметром и высотой 2,5 см, которая выражается в долях радиуса  $r$  заполнителя ( $X_2 = (0,6 \pm 0,2) r$ ). Сложная временная зависимость объемных изменений  $\Delta r^*$  от принятых факторов требует применения метода временных сечений (см. § 1 гл. IV).

Полученные модели приращения радиуса  $\Delta r^*$  ( $\Delta r^* = \Delta r \cdot 10^3$  мм) кольца цементного камня на границе с заполнителем через  $\tau = 1, 3, 5, 7$  сут характеризуют качественную и количественную картину протекающих процессов

$$\Delta r^* \{ \tau = 1 \} = 1,6 - 0,4z_1 + 0,1x_2 + 0,3z_1^2 + 0,1x_2^2 + 0,1z_1x_2; \quad (\text{II.5})$$

$$\Delta r^* \{ \tau = 2 \} = 3,3 - 0,4z_1 + 0,2x_2 - 0,4z_1^2 + 0,6x_2^2 - 0,2z_1x_2; \quad (\text{II.6})$$

$$\Delta r^* \{ \tau = 5 \} = 4,0 - 0,1z_1 + 0,6x_2 + 0,1z_1^2 + 0,4x_2^2 - 0,1z_1x_2; \quad (\text{II.7})$$

$$\Delta r^* \{ \tau = 7 \} = 4,6 - 0,4z_1 + 0,8x_2 - 0,1z_1^2 + 0,6x_2^2 - 0,1z_1x_2. \quad (\text{II.8})$$

В начальный период твердения (до трех суток) объемные деформации вяжущего определяются количеством воды затворения (при  $z_1 = +1$  начальное водосодержание уменьшается на 25%). С увеличением времени твердения влияние суперпластификатора, а следовательно, и количества воды затворения, на изменение  $\Delta r$  снижается (модели II.7...II.8). При этом существенный вклад в увеличение  $\Delta r$

вносит изменение ширины кольца цементного камня вокруг заполнителя, т. е. характер структуры материала на уровне структурной неоднородности «растворная часть — заполнитель» является определяющим в развитии деформационных процессов на внутренних границах раздела. Оптимизация полученных моделей показала, что для обеспечения минимального изменения  $\Delta r$  количество воды затворения должно быть наименьшим, а ширина кольца, которая определяет расстояние между заполнителями, составлять 0,4—0,5  $r$ .

Следует ожидать, что минимальные деформации на границе раздела  $\Delta r = \min$  будут способствовать повышению прочности СКМ. Это подтверждают результаты исследований прочности на растяжение при изгибе образцов-балочек сечением  $4 \times 4 \times 16$  см с расположенными по их оси жесткими  $R_{ж}$  и податливыми  $R_{п}$  заполнителями ( $Z_1$  и  $X_2$  такие же, как и в предыдущем опыте). Получены модели для прочности на растяжение при изгибе в возрасте семи суток нормального твердения для образцов с податливыми  $R_{п}$  и жесткими  $R_{ж}$  заполнителями

$$R_{п} = 1,4 + 0,7z_1 + 0,4x_2 + 0,7z_1^2 + 0,3x_2^2 + 0,2z_1x_2; \quad (\text{II.9})$$

$$R_{ж} = 0,7 + 0,2z_1 - 0,4x_2 + 0,5z_1^2 + 0,2x_2^2 - 0,5z_1x_2. \quad (\text{II.10})$$

Анализ этих моделей подтверждает влияние величины деформаций матрицы на границе раздела на прочность композита. Максимальное значение  $R_{п}$  и  $R_{ж}$  достигается при минимальных изменениях на поверхностях раздела ( $z_1 = +1$ ;  $x_2 = -1$ ). Снижение прочности  $R_{ж}$  связано с избирательным характером адгезии цементного камня к поверхностям жестких предварительно обезжиренных металлических заполнителей. Это подтверждается характером поверхности раздела матричного материала с жесткими заполнителями — в зоне контакта много радиальных трещин, снижающих сопротивление материала внешним напряжениям.

Опыты, проведенные на структурных моделях СКМ с различными матричными материалами (цементный камень, технический парафин, глина, тонкомолотые песок и кремнегель), показали, что характер трещинообразования определяется механизмом развития деформаций усадки матричного материала на границе с заполнителями. Поле деформаций и напряжений зависит от величины объемных деформаций твердеющей системы, скорости ее структурирования  $d\eta/d\tau$ , качества поверхности заполнителей  $\Gamma_k$  и геометрических параметров системы  $\Gamma_{kk}$ . Существующие технологические приемы (введение химических пластифицирующих и структурообразующих добавок, повторная вибрация твердеющей системы, модификация поверхности заполнителей и т. п.) позволяют управлять процессами, протекающими на поверхностях раздела с целью получения оптимальной структуры СКМ с крупными заполнителями, обеспечивающей получение заданных параметров качества материала в строительной конструкции.

#### § 4. ОПТИМИЗАЦИЯ ОБЪЕМНЫХ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ТВЕРДЕЮЩИХ КОМПОЗИТАХ

Структурообразование строительных композитов сопровождается, как правило, деструктивными процессами — появлением и развитием внутренних поверхностей раздела, т. е. внутри- и межфазных границ раздела (трещины, поверхности раздела между отдельными компонентами), на которых проявляются объемные деформационные процессы. Распределяясь на внутренних поверхностях раздела, объемные усадочные деформации не проявляются полностью на

внешних поверхностях композитного образца или конструкции, что затрудняет объективно оценить влияние рецептурных и технологических факторов на изменение усадки материала. Представляет интерес анализ механизма развития деформационных процессов на внутренних поверхностях раздела с целью получения оптимальной структуры СКМ. Зародышевая трещина возникает в твердеющем материале и представляет собой вновь образованную поверхность раздела. В зависимости от места появления и ориентирования на ее берегах

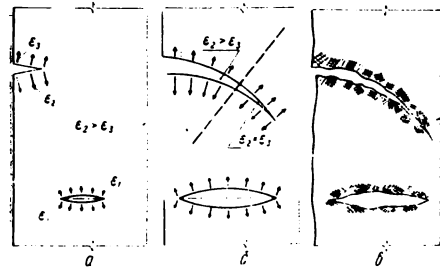


Рис. 11.7. Развитие (а) усадки на поверхностных и внутренних зародышевых трещинах и перераспределение (б) усадочных деформаций при движении трещин, а также качественное изменение берегов трещин в твердеющих системах (в).

могут проявляться одинаковые или разные по величине усадочные деформации (рис. 11.7, а). Направление развития этой трещины определяется градиентом усадочных деформаций на ее берегах — трещина движется в сторону больших деформаций (рис. 11.7, б). По мере продвижения в материале трещина стремится выравнять градиент усадочных деформаций у своего устья. Так как трещина появляется и развивается в твердеющей вязкой среде, то ее поведение нельзя описать с позиций линейной упругой механики разрушения. Поэтому введено понятие «раскрытие трещины» [39], которое характеризует способность движения трещины в пластичной среде. В вязкой системе трещина развивается в том случае, если пластические деформации у ее устья достигнут максимально допустимого значения [59]. Развитие их у вершины трещины связано с объемными усадочными деформациями твердеющей системы. Следовательно, величина усадочных деформаций является причиной как появления в структуре материала трещин, так и их развития.

Траектория движения трещины в твердеющей системе микроизвилистая. Можно предположить, что при определенном общем развитии трещина в процессе роста «находит» энергетически выгодное направление — проходит через ослабленные структурные связи между «усадочными ячейками». Поэтому при последующих усадочных деформациях происходит индивидуальное изменение фактуры берегов, что затрудняет полное смыкание трещин при деформациях об-



ратного знака и под действием внешней нагрузки. Развитие трещин в твердеющих системах сопровождается изменением фактуры и морфологии ее берегов, а это затрудняет «самозалечивание» усадочных трещин в период структурообразования материала. «Самозалечивание» возможно при превышении скорости зарастания продуктами новообразования над скоростью роста трещины (например, скрепления берегов трещины продуктами карбонизации при эксплуатации бетонов в условиях переменной влажности). Во всех других случаях усадочная трещина становится элементом структуры материала и сохраняет возможности дальнейшего роста под действием внешних нагрузок (механических и знакопеременных деформаций, связанных с эксплуатацией конструкции в условиях изменения температуры и влажности). Заполнитель, как дискретный элемент структуры СКМ, своими поверхностями раздела делит окружающую его

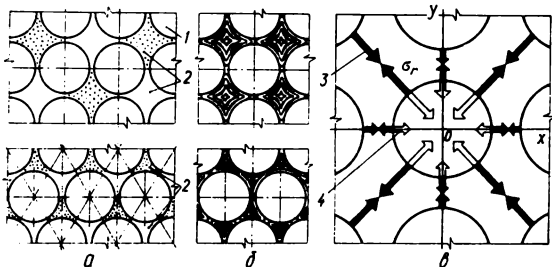


Рис. 11.8. Образование дискретных объемов матрицы (а) под действием заполнителей с различной укладкой, формирование остаточного деформативно-напряженного состояния матрицы (б) и равновесное состояние (в) зерна заполнителя под действием радиальных напряжений  $\sigma_r$ .

1 — зерна заполнителя, 2 — дискретные объемы матричного материала, 3 — радиальные напряжения в матричном материале, 4 — реакция заполнителя на  $\sigma_r$ .

растворную часть на дискретные объемы. Величина дискретных объемов растворной части и их геометрические характеристики  $\Gamma_k$  зависят от расстояния между заполнителями и способов их укладки (рис. 11.8, а). Это подтверждается опытами, проведенными на моделях СКМ, в которых в качестве матрицы использованы оптически чувствительные материалы (эпоксидная и полиэфирная смолы, желатин). Применение их позволяет в монохроматическом свете наблюдать интерференционные полосы (изохромы), характеризующие напряженное состояние матрицы при ее затвердевании [39, 44, 68, 73]. Анализ картины изохром на плоских моделях СКМ с кубической и гексагональной укладкой заполнителей (рис. 11.8, б) показал, что матрица делится заполнителем на отдельные объемы. Распределение изохром внутри каждого выделенного объема одинаково, что подтверждает их дискретность. Изменение расстояния от поверхности раздела характеризует градиенты деформаций матрицы  $\Delta \epsilon$  и, следовательно, ее формоизменение под их действием. Таким образом, заполнитель не только создает внутреннюю дополнительную поверхность раздела СКМ, но и определяет общее деформативно-напряженное состояние системы.

Наличие в твердеющих материалах внутренних поверхностей раздела как внесенных (границы раздела матричного материала и заполнителей), так и образованных в процессе структурообразования (границы раздела между усадочными ячейками и зародышевые трещины) приводит к *деформационной анизотропии* — неравномерным

распределением усадочных деформаций по длине и объему композитных образца или конструкции. Твердеющие СКМ представляют собой упруго-вязко-пластическую среду, деформация которой состоит из упругой и неупругой частей. Неупругая деформация  $\epsilon_n$  делится на склерономную  $\epsilon_c$  (в основном для СКМ с крупными заполнителями) и реономную  $\epsilon_p$  составляющие

$$\epsilon_n = \epsilon_c + \epsilon_p. \quad (II.11)$$

Склерономная часть в период структурообразования материала не изменяется, но приобретает первостепенное значение при знакопеременных деформациях затвердевшего материала. Реономная составляющая изменяется со скоростью, зависящей от скорости изменения реологических характеристик твердеющей системы  $\eta$  и кинетики развития в ней собственных деформаций  $\epsilon_0$ . При этом необходимо учитывать изменение реологических характеристик отдельных структур композита  $\eta_k$ . Поэтому можно утверждать, что деформационная анизотропия возникает не только по длине образца, но и по его объему.

СКМ относятся к статистически однородным системам, что предполагает равномерность распределения в композите структурных элементов. С некоторым приближением можно утверждать, что крупный заполнитель в бетоне распределен равномерно в изотропной матрице (рис. II.8, *в*). В силу симметричности приложенных к заполнителю напряжений он находится в равновесном состоянии. Усадочные деформации матричного материала проявляются на поверхностях границ раздела с заполнителями и не могут определять усадку композитных образца или конструкции.

Изменение крупности заполнителя, изменение адгезии матричного материала к разным участкам поверхности заполнителя, появление трещин в зоне контакта и в матричном материале, а также флуктуация свойств самой матрицы приводят к *нарушению равновесного состояния* заполнителя в твердеющей системе. В таких случаях усадка отдельных структурных элементов и их групп проявляется на внешних границах раздела образца или конструкции, определяя *общую усадку*  $\epsilon_{\text{общ}}$  — объемные изменения СКМ, которые состоят из усадки приповерхностных участков композитов  $\epsilon_l$ , уменьшения объема усадочных ячеек на структурном уровне вяжущее — наполнитель  $\epsilon_{\text{уя}}$ , уменьшения объема дискретных элементов матрицы на уровне растворная часть — наполнитель  $\epsilon_m$

$$\epsilon_{\text{общ}} = \epsilon_l + \epsilon_{\text{уя}} + \epsilon_m. \quad (II.12)$$

Количество образовавшихся внутренних поверхностей раздела, их ориентирование и размер зависят от деформационных процессов, протекающих в твердеющих СКМ на всех структурных уровнях, и определяются величиной  $\epsilon_{\text{уя}} + \epsilon_m$ . Поэтому при оптимизации структуры СКМ необходимо учитывать механизм развития объемных усадочных деформаций отдельных структурных элементов и их взаимодействие при синтезе гетерогенных систем, в частности:

управлять размерами усадочных ячеек, оптимизируя соотношения размеров ЭСЭ вяжущего и наполнителя;

управлять поверхностными явлениями на границах раздела матричного материала и заполнителей, регулируя соотношения величин адгезионной и когезионной прочностей;

назначать наиболее вероятное место зарождения трещин, регулируя кинетику структурообразования матричной части в зависимости от геометрических параметров системы;

ограничить скорость роста и длину трещин, управляя реологическими характеристиками твердеющих материалов за счет применения химических добавок и изменения температуры твердения, использования эффекта повторного вибрирования и т. д.

Учет физических процессов, сопровождающих структурообразование СКМ, позволяет получать строительные детали, конструкции и сооружения оптимальной структуры, обеспечивающей их надежную эксплуатацию.

### **Глава III. СТРУКТУРНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕПЛОЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ**

#### **§ 1. СВЯЗЬ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА С ЕГО ПОРИСТОЙ СТРУКТУРОЙ**

Применение в строительстве материалов с улучшенными теплозащитными свойствами при заданной прочности позволяет эффективно решать многие инженерные задачи, в частности, по экономному использованию топливно-энергетических ресурсов, по поддержанию в помещениях оптимального для человеческого организма микроклимата.

Анализируя с целью оптимизации теплофизические свойства КМ, необходимо рассматривать так называемую ячеистую макроструктуру — двухагрегатную систему «твердое тело — газ», являющуюся основой ячеистых бетонов, пеностекол, вспененных металлов, полимеров и других теплоизоляционных материалов с содержанием газовых пор (общей пористостью)  $P$ , достигающим 0,9 объема. Роль макроструктурных факторов в образовании теплофизических свойств материалов очевидна при сравнении обычного стекла теплопроводностью  $\lambda \geq 1$  Вт/(м·К) и пеностекла (газовая компонента в котором распределена в виде ячеек внутри стеклянной матрицы), характеризующегося значениями  $\lambda \approx 0,05$  Вт/(м·К). В поризованных материалах основные структурные элементы — макропоры (газовые ячейки) и межпоровые перегородки, представляющие твердую фазу материала. Теплоперенос в таком абсолютно сухом теле осуществляется собственно теплопроводностью через твердый скелет (межпоровые перегородки) и находящийся в порах газ, а также путем конвекции и излучения между стенками пор. Поскольку газы плохо проводят тепло, теплозащитные свойства материала тем выше, чем больше общая пористость. Однако даже одинаковые *по общей пористости* (по плотности) материалы близкого вещественного состава нередко существенно *различаются по теплопроводности*. Это различие обусловлено

особенностями *макропористой структуры* — распределением газовых ячеек по размерам (дифференциальной макропористостью), формой ячеек, их ориентацией относительно направления теплового потока и т. п.

Мнение о том, что наилучшими физико-техническими свойствами должны обладать поризованные материалы со сферическими мелкими порами одинакового диаметра, не может быть признано рациональным [24] для теплоизоляционных ячеистых материалов, так как при такой структуре нельзя увеличить общую пористость. Действительно, при наиболее плотной гексагональной укладке шаров одного диаметра, соприкасающихся между собой, возможно заполнение 74,05 % объема [6], но наличие межпоровых перегородок, а также искажение упаковки пор в сторону кубической снижает максимально возможный объем макропористости для равновеликих пор до 54—56 %. Пористость величиной более 90 % достигается плотной упаковкой сферических пор разных размеров, подчиняющихся определенным дифференциальным законам распределения. При этом меньшие сферы должны последовательно укладываться в промежутки между ранее упакованными большими, соотношение диаметров сфер при такой упаковке  $d_{i+1} = 0,156d_i$  [19].

Улучшение теплозащитных свойств при повышении общей пористости сопровождается снижением прочности материала. Поэтому при создании композитов многоцелевого назначения, типичный пример которых — конструктивно-теплоизоляционные ячеистые бетоны, предназначенные для ограждающих конструкций, приходится находить компромиссные решения. Вполне обосновано стремление *снижать теплопроводность* ячеистого бетона при сохранении прочности материала *путем специальной организации его пористой структуры*. Решать оптимизационные задачи подобного типа можно (см. § 2, гл. I) только располагая математическими моделями взаимосвязей между теплофизическими свойствами и параметрами макроструктуры. Процесс накопления информации для построения таких моделей находится пока в начальной стадии. Предложенные рядом авторов зависимости, связывающие теплопроводность с плотностью (или общей пористостью), обнаруживают расхождения с экспериментальными данными, поскольку в них не учитывается влияние других существенных факторов.

Сравнительный анализ имеющихся данных затруднен разнообразием величин, применяемых для характеристики пористости (средний диаметр пор, средняя хорда, коэффициент вариации и др.). Введение этих величин не всегда достаточно обосновано, в связи с чем необходимо выбрать те из них, которые, с одной стороны, оказывают существенное влияние на свойства материала, а с другой — могут быть достаточно просто и быстро определены количественно.

Хотя очевидна зависимость теплофизических свойств композиционных материалов именно от их *пространственной структуры*, ни один из существующих методов контроля не позволяет получить всестороннюю и объективную картину пространственной структуры, выраженную в количественных характеристиках. Поэтому приходится анализировать корреляцию свойств КМ с результатами структурных

измерений на плоскости (в сечении образца), которые выполняются при помощи оптической или электронной микроскопии (ГОСТ 22023—76). В каждом конкретном случае можно выделить от одного до трех экспрессно определяемых структурных параметров, наилучшим образом коррелирующих с исследуемым свойством. Выбор основных информативных параметров структуры — ключевой момент, определяющий всю методику исследования.

Пористая макроструктура может быть смоделирована набором полых сфер разного диаметра. Несмотря на то что в реальных ячеистых бетонах поры имеют как круглую, так и эллиптическую неправильную форму, допущение о сферичности ячеек оправдано тем, что именно такая структура оптимальна с точки зрения изотропности свойств. Устойчивую (хотя и смещенную) оценку среднего размера сферических частиц в структуре дает средняя длина хорды  $\bar{l}$ , отсекаемой случайной секущей на сечениях частиц. Моделирование распределений размеров сферических частиц и их случайных сечений показало [81], что средние диаметры  $\bar{d}$  и хорды  $\bar{l}$  в плоскости сечения дают приблизительно одинаково устойчивую оценку среднего пространственного диаметра  $\bar{D}$ . Более предпочтительна все же оценка по средней хорде  $\bar{l}$ , которая не требует строгих допущений о форме частиц и легко определяется инструментально (с применением сканирующих устройств). Эта величина связана с удельной поверхностью частиц  $S_v$  как  $\bar{l} \approx 4/S_v$  и, кроме того,  $\bar{l}$  хорошо коррелирует со средним пространственным диаметром  $\bar{D}$ . По приведенным данным в [81]  $\bar{l}$  связано со средним объемным размером для моодисперсной системы сфер как  $\bar{D} = 1,5\bar{l}$ , а для полидисперсной — как  $\bar{D} = 1,62\bar{l}$ .

Оценить влияние дифференциальной макропористости на теплопередачу в двухагрегатной пористой системе можно при моделировании структуры многослойной стенкой, на длине  $L$  которой вдоль линии теплового потока расположено  $N$  двухслойных стенок, состоящих из газовой и твердой прослоек толщиной соответственно  $l_{г}$  и  $l_{т}$ , что приводит к соотношению

$$L = \sum_{i=1}^N l_{г} + \sum_{i=1}^N l_{т}. \quad (III.1)$$

Линейная пористость  $\Pi_L$  представляет собой отношение суммарной толщины газовых прослоек к общей длине  $L$

$$\Pi_L = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^N l_{г}. \quad (III.2)$$

Теплопроводность  $\lambda$ , Вт·м<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup>, такой стенки рассчитывается [58, гл. IV] через эквивалентную теплопроводность газовых ячеек  $\lambda_{г}$  и твердых прослоек  $\lambda_{т}$  по соотношению

$$\lambda = L \left( \sum_{i=1}^N \frac{l_{г}}{\lambda_{г}} + \sum_{i=1}^N \frac{l_{т}}{\lambda_{т}} \right)^{-1} \quad (III.3)$$

Фазовой неоднородностью в плотных стенках пор для заданного вещественного состава можно пренебречь и принять теплопроводность постоянной  $\lambda_{ir} = \lambda_r = \text{const}$ , что с учетом формулы (III.1), позволит записать (III.3) как

$$\lambda^{-1} = \left[ \sum_{i=1}^N \frac{l_{ir}}{\lambda_{\text{э}ir}} + \frac{1}{\lambda_r} \left( L - \sum_{i=1}^N l_{ir} \right) \right] L^{-1} = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^N \frac{l_{ir}}{\lambda_{\text{э}ir}} + \frac{1}{\lambda_r} \left( 1 - \sum_{i=1}^N \frac{l_{ir}}{L} \right) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^N \frac{l_{ir}}{\lambda_{\text{э}ir}} + \frac{1}{\lambda_r} (1 - \Pi_L). \quad (\text{III.4})$$

Объемная пористость  $\Pi$  равна [81] поверхностной  $\Pi_s$  и линейной  $\Pi_L$  пористости ячеистого материала. Поэтому

$$\lambda^{-1} = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^N \frac{l_{ir}}{\lambda_{\text{э}ir}} + \frac{1}{\lambda_r} (1 - \Pi). \quad (\text{III.5})$$

В формуле (III.5) неизвестна непрерывная функция (III.6), связывающая эквивалентную теплопроводность  $\lambda_{\text{э}ir}$  и размер  $i$ -й поры

$$\lambda_{\text{э}ir} = \varphi(l_{ir}). \quad (\text{III.6})$$

Если функция (III.6) вырождается в константу  $\lambda_{\text{э}ir} = \lambda_r$ , то (III.5) будет описывать теплопроводность в двухслойной стенке (III.7), зависящую только от пористости  $\Pi$ , что не соответствует экспериментальным данным

$$\lambda^{-1} = \Pi/\lambda_r + (1 - \Pi)/\lambda_r. \quad (\text{III.7})$$

С точки зрения экспериментального определения теплопроводности необходимо представить функцию (III.6) дискретным набором из  $m$  констант  $\bar{\lambda}_v$ , каждая из которых соответствует некоторому узкому интервалу изменения размера пор  $l_{v,\text{max}} - l_{v,\text{min}}$ . Расчленение всей области возможных размеров пор  $L_{\text{max}} - L_{\text{min}}$  на  $m$  интервалов приводит к тому, что в каждый  $v$ -й интервал попадает лишь  $n_v$  пор. Таким образом оценивается вероятность  $p_v$  (III.8) появления в материале поры размером  $l_v$  в интервале  $l_{v,\text{min}} < l_v < l_{v,\text{max}}$  как

$$p_v = n_v : N \left( \text{при } \sum_v^m p_v = 1 \right). \quad (\text{III.8})$$

Допустимо считать, что в  $v$ -м интервале среднему размеру пор [15]  $\bar{l}_v = 0,5 (l_{v,\text{max}} + l_{v,\text{min}})$  соответствует константа  $\bar{\lambda}_v$ . Тогда

$$\sum_{i=1}^N \frac{l_{ir}}{\lambda_{\text{э}ir}} = \sum_v^m \frac{\bar{l}_v \cdot n_v}{\bar{\lambda}_v}. \quad (\text{III.9})$$

Учет в зависимости (III.5) констант  $\bar{\lambda}_v$  и средних размеров пор  $\bar{l}_v$  (III.9) приводит к соотношению

$$\begin{aligned}\lambda^{-1} &= \frac{1}{L} \sum_v^m \frac{\bar{l}_v \cdot n_v}{\bar{\lambda}_v} + \frac{1}{\lambda_\tau} \left( 1 - \frac{1}{L} \sum_v^m \bar{l}_v n_v \right) = \\ &= \frac{1}{\lambda_\tau} + \frac{1}{L} \sum_v^m \left( \frac{1}{\bar{\lambda}_v} - \frac{1}{\lambda_\tau} \right) \bar{l}_v n_v.\end{aligned}\quad (III.10)$$

Интервалы целесообразно выбирать так, чтобы

$$\bar{l}_1 : \bar{l}_2 : \dots : \bar{l}_v : \dots : \bar{l}_m = k_1 : k_2 : \dots : k_v : \dots : k_m, \quad (III.11)$$

где  $k_v/k_{v-1}$  — изменяется по наперед заданному закону, например есть константа.

Из пропорции (III.11) следует, что (III.10) преобразуется в

$$\lambda^{-1} = \frac{1}{\lambda_\tau} + \frac{1}{L} \sum_v^m \left( \frac{1}{\bar{\lambda}_v} - \frac{1}{\lambda_\tau} \right) k_v \bar{l}_1 n_v = \alpha + \frac{1}{L} \sum_v^m \beta_v n_v, \quad (III.12)$$

где  $\frac{1}{\lambda_\tau} = \alpha$  и  $\left( \frac{1}{\bar{\lambda}_v} - \frac{1}{\lambda_\tau} \right) k_v \bar{l}_1 = \beta$  — некоторые константы.

Переход к вероятностям (III.8) появления пор определенных размеров переводит (III.12) в

$$\lambda^{-1} = \alpha + \frac{N}{L} \sum_v^m \beta_v p_v. \quad (III.13)$$

При определении  $\lambda$  по формуле (III.13) *обязательно исключение одного из  $p_v$* , так как они линейно связаны ( $\sum p_v = 1$ ). С учетом (III.8) и (III.9) выражение (III.5) преобразуется в

$$\lambda^{-1} = \frac{N}{L} \sum_v^m \frac{\bar{l}_v}{\bar{\lambda}_v} p_v + \frac{1 - \Pi}{\lambda_\tau}. \quad (III.14)$$

Многофакторная дробно-рациональная функция (III.14) связывает между собой теплопроводность двухфазного пористого материала  $\lambda$  и его твердой фазы  $\lambda_\tau$  с учетом общей пористости материала  $\Pi$  и распределения  $p_v$  пор по размерам  $\bar{l}_v$  (дифференциальной пористости) при гипотезе непостоянства величины  $\lambda_{air} = \varphi(l_{ir})$ ; ( $\lambda_v \neq \text{const}$ ). Ее анализ показывает, что для материала заданного вещественного состава ( $\lambda_\tau = \text{const}$ ) при постоянной общей пористости  $\Pi = \text{const}$  (что должно стабилизировать собственную массу и несущую способность конструкций) *основной параметр оптимизации его теплозащитных свойств — дифференциальная пористость  $p_v$* . Однако использование для количественной оптимизации дробно-рациональной функции неудобно, поэтому целесообразна ее аппроксимация в инженерных задачах многофакторными степенными, полиномиальными и другими моделями.

Чтобы достаточно полно объяснить механизм теплопередачи в порах различных размеров, необходимо от распределения хорд  $l_i$  перейти к распределению по размерам диаметров сферических ячеек или трех главных осей эллипсоидных ячеек (так называемому «истинному» распределению). Задача реконструкции истинного распределения очень сложна [81] и пока не имеет надежных решений.

## § 2. ЭКСПРЕССНЫЕ МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МАКРОСТРУКТУРНЫХ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТОВ

Прямое измерение теплозащитных характеристик материалов обычно связано с большими затратами времени на ожидание отклика, что затрудняет применение таких методов при решении оперативных задач, особенно по организации массового надежного контроля качества продукции. Величина общей пористости  $\Pi$  может быть определена просто и быстро (если не считать времени на высушивание образцов), но сведений о ней (см. формулу (III.14)) не достаточно для точной оценки теплопроводности  $\lambda$ , так как необходимо получение информации о дифференциальной пористости данного материала.

Анализ распределения пор  $p_v$  по размерам  $l_v$  связан с гораздо большими трудностями, чем определение общей пористости  $\Pi$ . Единственное инструментальное средство исследования характеристик макропористой структуры — оптический микроскоп. Кропотливая работа по подготовке образца, трудоемкость измерений и повышенный риск субъективных ошибок (см. § 3 гл. I) в сочетании с длительностью анализа — вот основные недостатки оптической микроскопии. С целью резкого увеличения скорости, повышения точности и надежности измерений в Одесском ИСИ предложен лазерометрический метод автоматизированного анализа макропористой структуры [37], для чего создано лазерное устройство. В качестве источника света использован оптический квантовый генератор — лазер, применение которого обеспечивает возможность фокусирования луча в пятно диаметром порядка 10 мкм и такую высокую интенсивность излучения, которая позволяет исследовать материалы с высокой поглощательной способностью (величина отраженного потока при этом достаточна для восприятия его и преобразования в электрические сигналы малогабаритными фотодиодами, избирательно реагирующими только на лазерное излучение и нечувствительными к колебаниям освещенности и температуры в рабочем помещении).

Стабильность во времени энергетических и геометрических параметров лазерного излучения повышает надежность и достоверность измерений.

Сущность лазерного метода определения дифференциальной макропористости заключается в следующем. Узко сфокусированный в плоскости поверхности образца материала лазерный луч перемещают с постоянной скоростью  $V$  (рис. III.1). Отраженный световой поток собирается линзой, воспринимается фотоприемником и преобразуется в электрические сигналы, величина которых зависит от того,



какой участок поверхности образца облучается в данный момент. Положению сфокусированного луча на поверхности межпоровых перегородок (*A*) соответствует максимальный уровень сигнала, поскольку при использовании короткофокусной оптики все лучи, отраженные поверхностью в фокусной плоскости, собираются линзой. При попадании луча в поры и дефекты структуры (*B*) наблюдается падение уровня сигнала.

При постоянной скорости перемещения луча по отношению к материалу длительность сигналов  $\tau_v$  представляет собой параметр, характеризующий размеры пор,

$$l_v = \tau_v V. \quad (III.15)$$

Таким образом, электронная «сортировка» импульсов по длительности  $\tau_v$  равноценна распределению пор по размерам  $l_v$ . В соответствии с общими положениями (см. § 1 гл. III) вся область размеров разделяется на *m* групп, в каждую из которых попадают импульсы соответствующей длительности  $\tau_{v,\min} \leq \tau_v \leq \tau_{v,\max}$ . Результат может регистрироваться на цифровом табло прибора либо с помощью цифropечатающего устройства. Информация может быть представлена также в виде записи на диаграммной ленте — лазерограммы (см. рис. III.1, б), которая обеспечивает возможность визуальной оценки характера пористой структуры. Минимальный размер обнаруживаемых пор определяется разрешающей способностью установки — диаметром пятна сфокусированного излучения (около  $10^{-5}$  м). Подготовка образцов к измерениям проста. Единственное требование к контролируемой поверхности — ее плоскостность, которая обеспечивается путем высокоскоростного распила алмазным диском либо шлифованием на мелкозернистом круге. Перед измерением необходима продувка поверхности распила сжатым воздухом для очистки пор от забившихся частиц материала. Форма и состояние остальных поверхностей образца не имеют значения, так как опорной при размещении на предметном столике является контролируемая поверхность. Влажность образца на результаты измерений не влияет.

Для построения моделей, аппроксимирующих влияние макроструктурных характеристик  $X_s$  на теплофизические показатели ячеистых материалов типа (III.14), необходима достоверная информация о выходе системы  $Y_j$ , в частности о теплопроводности  $\lambda$ , Вт·м<sup>-1</sup>×К<sup>-1</sup>. Значения теплопроводности могут быть определены для таких тел только на основе эксперимента [53, с. 25], который по методам исследования делится на три группы: стационарного, нестационарного и комбинированного теплового потока. Каждая из этих групп имеет свои достоинства, полезность и ценность которых зависят от конкретных целей эксперимента, агрегатного состояния объекта и тем-

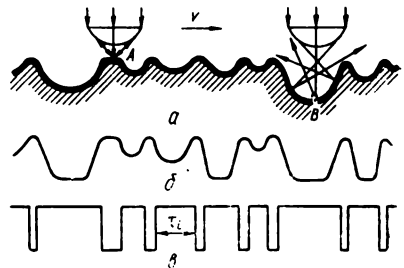


Рис. III.1. Схема перемещения (а) лазерного луча по поверхности образца; электрические сигналы (б), соответствующие профилю этой поверхности, и их преобразование (а) в инвертированные и сформированные импульсы.

пературного диапазона измерений, требуемой точности результатов, ресурса времени на ожидание отклика и др.

Для определения теплопроводности пористых материалов (типа ячеистого бетона) может быть рекомендован предложенный М. И. Поваляевым [55] метод кратковременного плоского импульса, в основе которого лежат закономерности нестационарного теплового поля.

Основные достоинства метода — простота приборного обеспечения и расчетов, непродолжительность эксперимента ( $2 \leq \tau \leq 4$  мин) и незначительный перепад температуры  $1 \leq \Delta T \leq 2\text{К}$ , что позволяет исследовать образцы при равновесной влажности. В расчете  $\lambda$  учитывается тепловой поток  $Q_n$ , Вт, определяемый по потребляемой электроэнергии нагревателем площадью  $F_n$ , м<sup>2</sup>, толщина  $H$ , м, пластинчатого образца со стороны  $L$ , м, а также табличные коэффициенты  $K_d$  и  $\varphi_\lambda$

$$\lambda = \frac{Q_n H}{F_n \Delta T_{\max}} \varphi_\lambda K_d. \quad (\text{III.16})$$

Размеры образца выбирают из условия совпадения температурных полей ограниченной (образец) и неограниченной пластин, что обеспечивается соотношением  $L:H=4$ . Они также определяются мощностью теплового потока, обеспечиваемого нагревателем, и чувствительностью датчика температуры. Размеры образца и площадок, обследуемых за один цикл на лазерном поромере, лучше согласуются при максимально возможном уменьшении образцов, что позволяет, в частности, решать специальные задачи [16, с. 147; 37] по оценке однородности *полей* структуры и свойств композиционных материалов. В эксперименте по определению допустимого уменьшения размеров образца относительно рекомендованных автором —  $100 \times 100$  мм в сечении — изготовлены три кассеты квадратным сечением  $80 \times 80$ ,  $40 \times 40$  и  $20 \times 20$  мм. При этом толщина испытываемой части образцов 20, 10 и 5 мм соответственно. Для каждого размера образцов выполнена серия из пяти измерений. Сравнительный анализ результатов показал, что уменьшение размеров образца до квадратного сечения  $20 \times 20$  мм (толщина испытываемой части 5 мм) не влияет на результат определения теплопроводности (дальнейшее уменьшение нецелесообразно, так как размеры пор становятся соизмеримыми с толщиной образца — сквозная пористость, что ведет к искажению результатов). Однако при этом повышаются требования к качеству подготовки образцов и сложность их обработки.

Нестационарные методы не обеспечивают полной воспроизводимости результатов, поэтому авторы этих методов рекомендуют 4...5-кратное повторение опытов. Установлено, что интервал времени между измерениями (для одного образца), в течение которого устанавливаются начальные условия равновесия, должен быть не менее 30 мин.

### § 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В ЗАДАЧАХ ОПТИМИЗАЦИИ МАКРОСТРУКТУРЫ И ТЕПЛОЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ ЯЧЕИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

Оптимизационная задача сводится к созданию с помощью управляемых рецептурно-технологических факторов такой макроструктуры ячеистого бетона (таких значений  $Y_s$ , в частности параметров распределения пор по размерам), которая бы обеспечивала бы минимальную величину теплопроводности  $\lambda_{\min}$  при заданных плотности ( $\rho \leq \rho_{\text{норм}}$ ), прочности ( $R \geq R_{\text{норм}}$ ) и других нормируемых свойствах материала, а также при условии изотропности структуры и ее однородности по всему объему изделия.

Размеры даже мелких ячеистобетонных блоков достаточны, чтобы проявилась существенная неоднородность их структуры (а следовательно, свойств) по объему материала. Перепады свойств в нижнем и верхнем слоях массива высотой 1,5 м достигают 20...30 %.

Наиболее эффективное решение поставленной задачи при наличии экспрессных измерительных методов — экспериментально-статистический подход, например, по следующему алгоритму: изготовление по оптимальному плану эксперимента серии опытных образцов, плотность (общая пористость) которых изменяется в возможно более широких пределах за счет рецептурно-технологических факторов, экспериментальное определение теплофизических характеристик и структурных параметров  $Y_s$ ; установление корреляционных зависимостей «технология — структура», «структура — свойство», «технология — свойство» и их преобразование в модели удобного для анализа и оптимизации вида. Так, при оптимизации макроструктуры газосиликата опытная серия из десяти крупных блоков была изготовлена по плану  $3^2$  ( $n_0=2$ ) при варьировании водотвердого отношения  $X_1 = B/T = (50 \pm 12)^\circ\text{C}$  и температуры воды затворения  $X_2 = T_b = (33 \pm 12)^\circ\text{C}$ . Остальные рецептурно-технологические факторы сохранены неизменными для всех десяти блоков, в т. ч. автоклавный режим — 6+8+4 ч при избыточном давлении 0,8 МПа (блоки автоклавировались одновременно). В результате получен газосиликат плотностью от 390 до 850 кг/м<sup>3</sup>. Схема отбора из блока микрообразцов для исследований показана на рис. III.2. Из условия равенства и симметричности параметров поля свойств ячеистобетонного блока по осям  $l_1$  и  $l_3$ , но несимметричности по оси  $l_2$  достаточно исследовать не весь блок, а лишь часть вертикальной плиты, выделенной из средней зоны массива и включающей центральную точку блока. Микрообразцы, размеры и форма которых определяются требованиями методики для измерения теплопроводности, выливаются из четырех зон блока (у дна — Д, в центре — Ц, у стенки — С и у свободно вспучиваемой поверхности — В) в виде параллелепипеда длиной 120 мм. Из середины параллелепипеда вырезают пластину толщиной 10 мм. Контактующие между собой поверхности образцов шлифуют, поэтому распределение пор на лазерной установке можно изучать по любой контактной поверхности.

Весь диапазон размеров пор  $l_v$  (от  $10^{-5}$  до  $3 \cdot 10^{-3}$  м) разбит на интервалы  $\Delta l_v$  с шагом 0,1 мм, с учетом чего и были определены ста-

статистические характеристики распределения  $l_u$ , в т. ч. средний размер пор  $\bar{l}$ , дисперсии  $s\{l\}$ , частоты  $n_u$  и частоты  $p_u$ , а также ряд непараметрических характеристик распределения: медиана, мода, вариационный размах, квантили, децили и т. п. Эти статистические характеристики макроструктуры рассматриваются во взаимосвязи с теплофизическими показателями газосиликата. Установлено, что макроструктурные параметры  $p_u$ , характеризующие распределение

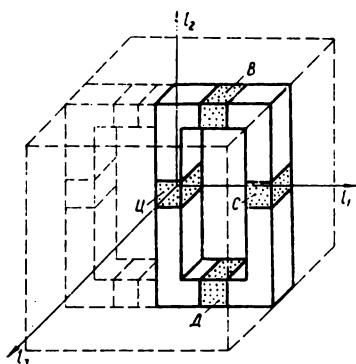


Рис. III.2. Схема отбора микрообразцов из массива экспериментального блока.

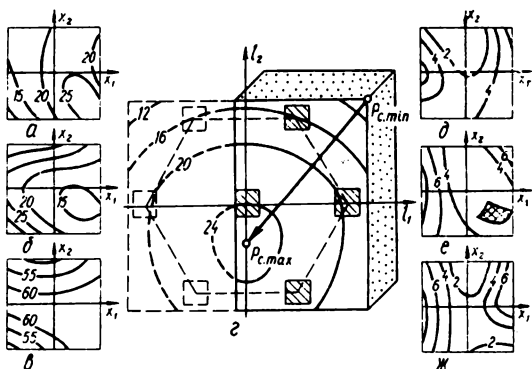


Рис. III.3. Зависимость от рецептурно-технологических факторов параметров поля пористости: средней доли пор ( $a, б, в$  — соответственно  $P_K, P_C$  и  $P_M$ ) и абсолютной величины их градиента ( $д, е, ж$  —  $\nabla P_K, \nabla P_C, \nabla P_M$ ), определяемого по схеме  $z$ .

пор по размерам, оказывают наибольшее влияние на теплопроводность материала и ряд других  $Y_0$ .

Поры дифференцируют по размерным группам с учетом теплофизических свойств на основе идей и методов теории распознавания образов и кластерного анализа. Под «образом» понимается такая комбинация параметров макроструктуры, в частности объединение расположенных ранжированно интервалов  $\Delta l_u$  в новый интервал  $\Delta l_u$ , при которой частота  $p_u$  обеспечивает наиболее тесную связь с теплопроводностью материала — свойством, рассматриваемым как «класс». Мерой соответствия классов и образов выбрана точность зависимостей, включающих разные комбинации  $p_u$ . Анализ характера и степени влияния разных параметров  $p_u$  на теплопроводность позволил образовать  $m$  групп пор, которые объединяются в три основных размерных класса:

Мелкие . . . . .	до 0,2 мм,
Средние . . . . .	от 0,2 до 0,8 мм и
Крупные . . . . .	более 0,8 мм
(группировка может быть иной при изменении диапазона размеров).	

Анализируя модели взаимосвязи теплопроводности с макроструктурными параметрами, следует рассматривать вид моделей, как построенных исходя из предпосылок (см. гл. III), приводящих к функциям типа  $\lambda_u = F(\hat{\Theta}, \rho, p_u)$ , так и моделей типа  $\lambda_u = f(L, n_u)$ , учитываю-

щих только информационные характеристики лазерной порометрии. Дискриминация моделей для газосиликата, изготовленного по плану В<sub>2</sub>, позволяет рекомендовать, кроме нелинейных полиномиальных моделей, и степенные зависимости типа (III.17) и (III.18) с оценками  $K, C, \alpha_u, \beta_u, \delta$

$$\lambda = K \rho^\delta \prod_u p_u^{\alpha_u}, \quad (\text{III.17})$$

$$\lambda = C \prod_u p_u^{\beta_u}. \quad (\text{III.18})$$

Для зависимости (III.18) нет необходимости в экспериментальном определении плотности  $\rho$ , однако она достаточно точна лишь для ячеистого бетона заданного вещественного состава при узком диапазоне изменения  $\rho$ , т. е. в пределах конкретного производства.

В более сложной рецептурно-технологической ситуации (см. § 4 гл. III) полезными оказались модели полиномиального типа (модели главных эффектов см. в табл. I.3), в которых учитываются только прямые результаты лазерометрического контроля. Лучшие результаты расчетов получаются при использовании модели

$$\begin{aligned} \lambda^{-1} = & 5,4 - 2,7n_1 + 0,5n_2 - 0,7n_3 + 1,0n_4 + \\ & + 3,5n_1^2 + 1,0n_3^2 + 0,7n_5^2, \end{aligned} \quad (\text{III.19})$$

где  $n_i$  — частоты распределения пор по размерам, указанным в § 4 гл. III.

Зависимость (III.19) можно использовать в широком диапазоне  $\rho$  при разных рецептурах (вид газообразователя, содержание активной СаО, дисперсность кремнеземистого компонента и другие факторы) и технологических режимах. При этом, определение  $\rho$  в сухом состоянии не требуется.

#### § 4. ИЗОПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ЯЧЕИСТОГО БЕТОНА

Изопараметрический анализ комплекса из  $G$  многофакторных моделей представляет собой новый [16, с. 150] методический прием, позволяющий исследовать поведение системы при условии постоянства некоторого ее выхода  $Y_j$  (т. е. в изопараметрических условиях).

Чтобы экспериментально решить такую задачу и обеспечить у  $q$  образцов композита равенство  $Y_j = \text{const}$  хотя бы одного свойства при вариации рецептурно-технологических факторов  $X$ , приходится проводить большое число предварительных опытов  $Q = aq$  ( $a > 4$ ). В то же время метод изопараметрического анализа позволяет не только резко снизить объем эксперимента, но и с известной точностью анализировать такие показатели  $Y_j$ , для которых экспериментальное обеспечение  $Y_j = \text{const}$  или весьма трудоемко (например, обеспечение изореологии) или невозможно (например, обеспечение равного количества синтезируемого материала — изокристалличность). При этом инженер может получить принципиально новую технико-экономическую информацию о процессе, в т. ч. вскрывающую механизм

дифференцированного воздействия рецептурно-технологических факторов на  $G$  показателей структуры и свойств композиционных материалов.

Если исследуется двухфакторное пространство, то алгоритм анализа прост. Для одного из свойств  $Y_j$  (обычно для свойства, определяющего состояние материала в целом, например, плотности ячеистого бетона) по модели строится геометрический образ поверхности отклика  $Y_j = f(x_1, x_2)$  и проводится изолиния, соответствующая значению свойства на требуемом по технико-экономическим условиям уровне  $Y_j = \text{const}$ . Выбранную изолинию разбивают на ряд равных отрезков точками (узлами). Последним присваивают номера в порядке возрастания, причем направление движения вдоль изолинии не имеет значения. Определяют (для инженерных расчетов достаточная точность обеспечивается графическим путем) координаты узлов внутри кодированного факторного пространства ( $-1 \leq x_i \leq +1$ ) и в этих точках рассчитывают как значения всех остальных свойств композита, так и описываемых другими ( $G-1$ ) моделями в факторном пространстве ( $x_1, x_2$ ). Этот алгоритм кратко иллюстрирован при решении задачи № 13 (см. гл. I).

Построенные графически однофакторные зависимости изменения ( $G-1$ ) показателей свойства и структуры композита вдоль афинно преобразованной (выпрямленной) изолинии стабилизируемого свойства  $Y_j = \text{const}$  позволяют объяснить механизм влияния каждого из структурных параметров и их разных комбинаций на исследуемое свойство. Изопараметрические методы успешно используют при анализе и оптимизации плотных и пористых композитов на силикатных и полимерных связующих [22, IV, с 152]. Так, при варьировании расчетной плотности ( $X_1 = (600 \pm 300)$  кг/м<sup>3</sup>), ассимилирующей все количественные закономерности структурообразования композитов, вида газообразователя  $X_2$  (верхний предел — обычная алюминиевая пудра ПАК-3, нижний — специально обработанная алюминиевая пудра, средний уровень — их смесь в равных долях), вводимого для модификации ячеистой пористости и длительности изотермической выдержки в автоклаве ( $X_3 = (11,5 + 3,5)$  ч), изменяющей параметры структуры цементирующего вещества и порового пространства, для принятых значений общей пористости и количества цементирующего вещества анализируется изменение теплофизических характеристик ячеистого композита, плотности и прочности, а также показателей макропористой структуры.

Газовую пористость можно дифференцировать по интервалам, возрастающим в геометрической прогрессии, и учитывать определяемое лазерометрическим методом содержание  $p_i$  пор в пяти группах:  $10 \leq l_1 \leq 200$  мкм,  $200 \leq l_2 \leq 400$  мкм,  $400 \leq l_3 \leq 800$  мкм,  $800 \leq l_4 \leq 1600$  мкм и  $1600 \leq l_5 \leq 3200$  мкм (поры с хордой  $l \geq 3,2$  мм отнесены к дефектам). Значения  $p_i$  моделируются в зависимости от  $x_1, x_2, x_3$  и служат одной из основ экспрессного метода оценки физико-химических свойств ячеистого бетона.

В соответствии с требованиями, сформулированными в § 1 настоящей главы, в качестве константы принимается прочность на сжатие ячеистого композита. При этом разыскиваются условия структу-

рообразования, обеспечивающие минимальную теплопроводность материала. На рис. III.4, а показано изменение прочности на сжатие  $R=f(x_1, x_2)$  для ячеистого бетона на обычном газообразователе. На этой диаграмме выбрана изолиния  $R=2,5$  МПа (что соответствует по ГОСТ 13015—75 прочности материала теплоизоляционно-конструкционного назначения при  $\rho=500$  кг/м<sup>3</sup>), которая разделена на  $m$  рав-

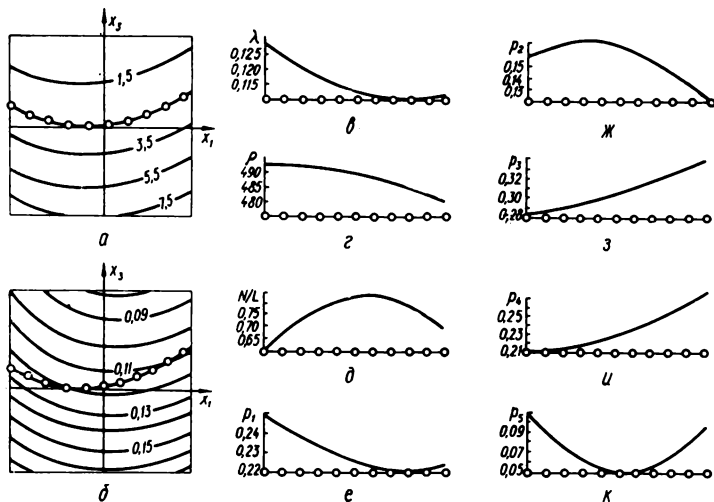


Рис. III.4. Зависимость прочности на сжатие (а) и теплопроводности (б) газосиликата от рецептурно-технологических факторов  $x_1$  и  $x_3$  и изопараметрический анализ при  $R_c=2,5$  МПа = const теплопроводности (в), плотности (г), линейного числа пор (д) и относительного содержания пор (е...к) разных размеров (размерности указаны в тексте).

ных по длине дуг. Координаты соответствующих условных точек нанесены на диаграммы других показателей структуры и свойств композита (так, как это показано на рис. III.4, б для теплопроводности  $\lambda$ , Вт/(м·К), и найдены соответствующие оценки  $Y_s$  и  $Y_o$ . Результаты представлены в виде кривых (в общем случае это, как следует из формулы (I.74), кривые четвертого порядка) (см. рис. III.4, в...к).

Теплопроводность ячеистого композита при  $R=2,5$  МПа изменяется (см. рис. III.4, в) от 0,110 до 0,128 Вт/(м·К), или на 16 % при плотности  $\rho=475-495$  кг/м<sup>3</sup> (см. рис. III.4, г), изменяющейся лишь на 4 %, т. е. в пределах ошибки воспроизводимости эксперимента. Из этого следует, что снижение теплопроводности (при движении вдоль изолинии на рис. III.4, а слева направо) возможно за счет изменения дифференциальной пористости композита, что подтверждается анализом кривых на рис. III.4, д...к. Снижение теплопроводности, при  $R=2,5$  МПа = const (при  $\rho=485$  кг/м<sup>3</sup> = const), обеспечивается одновременно увеличением долей пор в диапазонах  $400 \leq l_3 < l_4 \leq 1600$  мкм, причем  $p_3$  возрастает в  $0,34 : 0,28 = 1,21$  раза, а  $p_4$  — в  $0,27 : 0,21 = 1,29$  раза и уменьшением доли мелких ( $10 < l \leq 200$  мкм) пор с 0,25

до 0,22, т. е. в 1,14 раза, а также отрицательным эффектом взаимодействия линейного числа пор  $N/L$  и доли крупных пор  $p_5$  (если  $N/L$  растет, а  $p_5$  уменьшается, или  $N/L$  уменьшается, а  $p_5$  растет, то  $\lambda$  уменьшается). Несмотря на то что такие выводы носят в основном качественный характер, они не только способствуют разработке концептуальных моделей механизмов структурообразования поризованных композитов (гипотетически различных в разных рецептурно-технологических условиях), но и могут служить основанием для выбора функции  $F_m$  (1.3), что снижает риск аппроксимации (см. § 3 гл. I) при построении математических моделей.

## Г л а в а IV. ОПТИМИЗАЦИЯ РЕОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СМЕСЕЙ КОМПОЗИТОВ

### § 1. ОСОБЕННОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СМЕСЕЙ КОМПОЗИТОВ

Строительные изделия должны не только удовлетворять нормативным уровням комплекса показателей качества  $Y_{o,норм}$  и надежности  $Y_{a,норм}$  для материала, из которого они изготовлены, но и обладать рядом свойств  $Y_{изд}$ , характерных для готовых изделий. Наиболее общие и важные из этих свойств: *однородность* распределения *структурных показателей*  $Y_s$  (следовательно, и показателей  $Y_o$  и  $Y_a$ ) по объему изделия (или его слоям для анизотропных конструкций); *отсутствие* внутренних *каверн* — пустот, соизмеримых с размерами изделия (а не со структурными элементами материала); *воспроизведение* с заданной точностью проектной геометрической *формы* изделия. Нормативный уровень  $Y_{изд,норм}$  обеспечивается, главным образом, факторами *смешивания*  $X_{см}$  и *формования*  $X_f$ , при минимизации среди них тех  $X_i$ , которые характеризуют *энергоёмкость и продолжительность* технологических процессов.

Однако оперативно управлять приготовлением технологических смесей композитов и формованием из них готовых изделий целесообразно не по конечным показателям качества  $Y_o$  или  $Y_{изд}$ , а по специфическим промежуточным *показателям*  $Y_T$ , необходимым только *технологам*, выпускающим данную продукцию (например, железобетонные панели) на заводах или непосредственно на строительном объекте (например, защитно-декоративные полимербетонные покрытия емкостей), но не ее потребителям — строителям или эксплуатационникам, которые заинтересованы в комплексах  $Y_o$ ,  $Y_a$  и  $Y_{изд}$ . Для выполнения целевой технологической функции показатели  $Y_T$  должны объективно характеризовать поведение смеси в процессах: *образования* из исходных компонентов в агрегатах-смесителях; *перемещения* в формирующих агрегатах без потери однородности (за счет сепарации, седиментации и т. п.); *заполнения* форм без каверн; *сохранения* геометрических размеров изделием после удаления формооснастки.

Во всех этих процессах за время  $\tau$ , с, происходит при температуре



$T$ ,  $K$ , под действием некоторых целенаправленно вызываемых напряжений  $\sigma$ , Па, требуемая деформация  $\epsilon$ , м/м, технологической смеси (или, наоборот, первичны заданные деформации  $\epsilon$ , вызывающие напряжения  $\sigma$ ). Если в процессах напряжения  $\sigma$  линейно связаны со скоростью деформаций  $d\epsilon/d\tau = \dot{\epsilon}$  (закон Ньютона [58]), то деформируемая технологическая смесь относится к *ньютоновским* жидкостям, характеризуемым динамической вязкостью  $\eta$ , кг/м·с. У этих жидкостей (к ним относятся некоторые низкомолекулярные жидкости, растворы и расплавы при давлении  $p$ , не вызывающем увеличения их плотности  $\rho$ ) вязкость изменяется только от температуры  $T$ , быстро снижаясь с ее увеличением по закону Френкеля—Андрэде ( $C$  и  $K$  — константы,  $\omega$  — энергия активации молекул [58]).

$$\eta = C \cdot \exp, \omega/KT. \quad (IV.1)$$

Течением ньютоновских жидкостей можно управлять на основе закономерностей классической гидродинамики. К сожалению, абсолютное большинство технологических смесей композитов деформируется не как ньютоновские жидкости, а как *упруговязкопластичные тела* [58, с. 76], проявляя, в зависимости от скорости деформаций  $\dot{\epsilon}$ , уровня напряжений  $\sigma$ , времени их действия  $\tau$  и других факторов, свойства как твердого тела, так и жидкости. Течение неньютоновских жидкостей и других сплошных деформируемых сред изучается *реологией* [44, 63, 72 и др.].

Сплошные деформируемые среды в технологии композиционных материалов обычно представляют собой высококонцентрированные дисперсные системы, структурообразование которых изменяется во времени за счет упрочнения фазовых контактов (гидратационное твердение, полимеризация и т. п.). Управление структурообразованием таких систем осуществляется на основе закономерностей *физико-химической механики* [42, 46, 75], среди которых одно из ведущих мест принадлежит принципу оптимального разрушения (деформации) технологических смесей в период обратимого формирования их структуры (при атомных и коагуляционных контактах) и недопущения разрушения материала в период необратимого конденсационно-кристаллизационного структурообразования. Этот принцип активно используется [72, вып. 1, с. 7] в новой прикладной отрасли механики сплошной среды, так называемой технологической механике. В ней задачи, связанные с течением твердеющего упруговязкопластичного материала (например, плотных и ячеистых бетонов, полимерных композитов и т. п. [63, 72]), решаются преимущественно методами реологии.

В реологии используются дифференциальные уравнения и идеальные модели-представления (составленные из упругих элементов Гука, вязких Ньютона и пластических — Сен-Венана, так называемые реологические тела Максвелла, Бингама и т. п. [6, 42, 58 и др.]). В описании систем используются в качестве  $Y_\tau$  *прямые реологические характеристики*  $E$  (множество, включающее начальную  $\eta_0$  и эффективную  $\eta$  вязкости, вязкость предельно разрушенной структуры  $\eta_\infty$ , пластическую прочность  $P_m$ , предельное напряжение  $\tau_0$  и модуль

сдвига  $G$  и т. п.). Эти характеристики рассматриваются во взаимосвязи с *реологическими* факторами  $U$  (множество, включающее параметры напряженно-деформированного состояния, время, температуру и давление среды, а также геометрические симплексы  $\Gamma_i$ ). В результате получаются или *детерминированные* модели (IV.2) с коэффициентами  $\lambda$ , имеющими достаточно ясный *физический* смысл, или *стохастические* модели (IV.3) с оценками коэффициентов  $\Theta$ , которые определяются эмпирически (на фоне воздействия случайных величин  $\gamma$ ), и для раскрытия физического смысла которых требуются *дополнительные* гипотезы.

$$F_E(E_i, \lambda, U) = 0; \quad (IV.2)$$

$$\Phi_E(E_i, \Theta_E, U, \gamma) = 0. \quad (IV.3)$$

К сожалению, большинство технологических расчетов пока не может быть построено на моделях типа (IV.2) и (IV.3) по двум достаточно веским причинам. Во-первых, в таких реологических моделях не учитываются рецептурные факторы  $X_c$  и  $X_p$ , а также некоторые существенные технологические факторы из подсистем  $X_{cm}$ ,  $X_{\phi}$ ,  $X_{\kappa}$  и т. п. Во-вторых, в многолетней технологической практике выработаны удобные инженерные критерии  $Y_{\tau}$ ,  $H$ , характеризующие реологические свойства смесей (подвижность, жесткость, удобоукладываемость, формуемость, липкость, комкуемость, густота и т. п.) хотя *косвенно* и *интегрально* (по отношению к  $E_i$ ), но *целенаправленно* на обеспечение качественного выполнения некоторой отраслевой задачи. Построение зависимости  $H_i$  от рецептурно-технологических факторов  $X$  (III.4) — традиционная инженерная задача, успешно решаемая на основе идей и методов математической теории эксперимента,

$$H_j = \varphi H(\Theta_H X, \gamma). \quad (IV.4)$$

Наиболее удобны модели (IV.4) полиномиального типа. Причем нередко критерии  $Y_{\tau} = H$  полезно использовать как факторы (обычно вместо  $X_c$  и  $X_p$ ) при построении моделей типа (IV.5) для показателей качества  $R$ . Множество, включающее показатели  $Y_s$ ,  $Y_o$ ,  $Y_a$ ,  $Y_{изд}$  более высокого уровня иерархии (см. рис. I.2),

$$R_i = \Phi_H(\Theta_{HX}, H, X, \gamma). \quad (IV.5)$$

На рис. IV.1, *a* приведена блок-схема связей между объектами моделирования, на которой отражены не только достаточно развитые направления моделирования (толстые стрелки), обсужденные в основном выше, но и те направления, по которым работы лишь начаты. Так, опыт совместных советско-болгарских исследований [72, вып. 7, с. 15; 78, с. 9] показывает, что весьма продуктивными должны быть модели типа (IV.6), объединяющие рецептурные  $X$  и реологические  $U$  (в частности, скорость деформаций  $\epsilon$ ) факторы при исследовании прямых  $E_i$  или косвенных  $H_j$  реологических критериев оптимизации, а также конечных параметров качества композита  $R_k$

$$E_i (\vee H_j \vee R_k) = f(\Theta_{UX}, U, X, \gamma). \quad (IV.6)$$

С научной и практической точек зрения интересны модели (IV.7), связывающие косвенные  $H_j$  и прямые  $E_i$  реологические показатели

$$\varphi_{EH}(\Theta_{EH}, E_i, H_j, U, X, \tau) = 0, \quad (IV.7)$$

в которых целесообразно дополнительно учитывать реологические  $U$  и рецептурно-технологические  $X$  факторы, имеющие большие эффекты взаимодействия с  $Y_T$ . Весьма перспективно построение комбиниро-

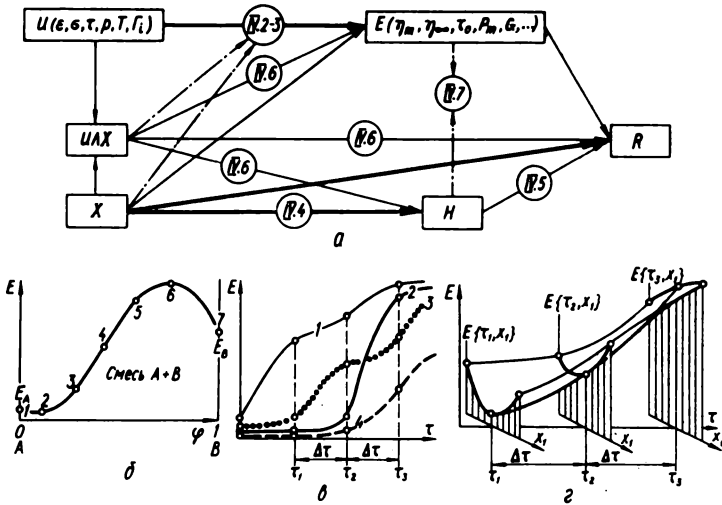


Рис. IV.1. Схема взаимодействия (а) объектов моделирования в реологии (обозначения соответствуют нумерации формул); общий вид кривой изменения (б) свойства  $E$  при насыщении компонента  $A$  компонентом  $B$  и кривых структурообразования ( $\sigma \dots 2$ ) композитов (1 — с интенсификатором, 2 — типичной, 3 — оптимальной, 4 — с замедлителем); схема анализа влияния фактора  $x_1$  на  $E$  по методу временных сечений (плоскость  $E-x_1$  в аксонометрической проекции);  $\varphi$  — коэффициент насыщения.

ванных моделей, связывающих коэффициенты  $\lambda$  и  $\Theta_E$  реологических моделей (IV.2) и (IV.3) с рецептурно-технологическими факторами  $X$  (например, для оценки изменения показателя степени  $n$  в уравнении Освальда-де-Вилля [58, с. 77] или  $\beta$  в уравнении, предложенном в Проблемной лаборатории механики бетона Рижского политехнического института [72, вып. IV, с. 4]), а также моделей типа (IV.5), учитывающих вместо косвенных реологических показателей  $H_j$ , прямые  $E_i$ , причем при минимуме вводимых в такую модель рецептурно-технологических факторов  $X$ .

Можно сформулировать ряд методических рекомендаций, учет которых позволяет избежать ошибок при построении полиномиальных моделей и их интерпретации.

1. Реологические показатели  $E_i$  (или  $H_j$ ) существенно положительные величины  $E_i \geq 0$ , которые могут изменяться в пределах эксперимента на несколько порядков (например, в зависимости от со-

отношения между жидкой и твердой фазами [6, с. 91; 75, с. 30]). При этом остается постоянной не абсолютная ошибка измерения  $s_3\{E_i\}$ , а относительная  $\delta_3\{E_i\} = s\{E_i\}/\bar{E}_i$ . Выше изложенные условия  $E_i \geq 0$  и  $\delta_3\{E_i\} = \text{const}$  могут быть обеспечены [16, с. 40] только при введении *логарифмического* преобразования  $\ln E_i$ , которое достаточно часто используется и в классической реологии, особенно при составлении моделей типа (IV.3).

2. При инженерном анализе результатов моделирования одной из наиболее распространенных является задача об оценке относительного изменения выхода  $\kappa\{x_i\} = \hat{Y}/\hat{Y}\{x_i^-\}$  (I.62) при управлении некоторым фактором  $x_i$ , которая обычно решается по дробно-рациональным функциям. Однако введение преобразования  $\ln E$  существенно упрощает расчеты, поскольку

$$\kappa\{x_i\} = \frac{\hat{E}}{\hat{E}\{x_i^-\}} = \exp \left[ \ln \left( \frac{\hat{E}}{\hat{E}\{x_i^-\}} \right) \right] = \exp (\ln \hat{E} - \ln \hat{E}\{x_i^-\}). \quad (\text{IV.8})$$

3. При изучении влияния на реологические показатели  $E_i$  факторов  $x_{\text{нп}}$ , отражающих качество и количество *наполнителей* и изменяющихся в достаточно *широком диапазоне*, целесообразно на рабочих этапах исследования (см. табл. I.4) принимать гипотезу [72, вып. 7, с. 15] о S-образной форме кривой  $E = f(\theta_x, X_{\text{нп}}, \nu)$ . Анализ большого числа экспериментальных кривых [44, 63, 75, 78], описывающих, например, изменение  $E$  при переходе от компонента  $A$  к компоненту  $B$  (рис. IV.1, б) через смесь  $A+B=1$ , показывает, что наиболее общим случаем следует считать: уменьшение величины  $E$  при малом коэффициенте насыщения  $\varphi = B/(A+B)$  смеси компонентом  $B$  (дуга 1...2); нарастающий темп прироста  $E$  (дуга 2...3); близкое к прямой пропорциональности (дуга 3...5) изменение  $E = f(\varphi)$ ; замедляющийся темп прироста (дуга 5...6), связанный с пересыщением смеси компонентом  $B$  и падение  $E$  от максимума до  $E_B$  (дуга 6...7). Кривая на рис. IV.1, б — парабола третьего порядка.

$$E = a_0 + a_1\varphi + a_2\varphi^2 + a_3\varphi^3 \quad (\text{IV.8,a})$$

при  $a_1 > 0$ ,  $a_3 < 0$ ,  $(3a_1a_3 - a_2^2) < 0$ . Она хорошо может описывать ситуацию без явных экстремумов с торможением изменения  $E$  при приближении смеси к чистым компонентам (достаточно  $A$  поместить в точку 2, а  $B$  — в точку 6), одноэкстремальные зависимости (дуга 1...4 с минимумом или дуга 4...7 с максимумом), линейный случай (дуга 3...5) и др. При этом компоненты  $A$  и  $B$  могут быть как «чистыми», так и «смесями» (например,  $A = c_1C + d_1D$  и  $B = c_2C + d_2D$  и т. д.). Если известно положение точки 4 перегиба кривой, то можно (см. § 4 гл. VI) за счет априорного преобразования  $\Psi = f(\varphi)$  (или применения сплайн-функций) описывать процессы с резко несимметричными ветвями S-образной кривой. Принятие описанной гипотезы как правдоподобной рабочей требует перехода от квадратичных моделей к полиномам более высоких степеней (см. § 2 гл. IV). Модели должны содержать эффекты третьего порядка  $b_{iii}x_i^3$ , придающие однофак-

торным кривым S-образность, и взаимодействия  $b_{iii}x_i^3x_j$ , меняющие степень S-образности в многофакторном пространстве. Оптимальные планы для таких моделей можно синтезировать в системе COMPEX (см. гл. VI).

4. При анализе влияния времени  $\tau$  на изменение реологических свойств  $E_i$  твердеющих смесей включение  $\tau$  (или  $\ln \tau$ ) в число варьируемых в трехуровневом плане факторов нецелесообразно\* по двум причинам. Во-первых, обычно число замеров  $E_i$  во времени много более трех (следовательно, часть информации будет потеряна); во-вторых, априори известно, что показанные на рис. IV.1, в кривые твердения  $E=f(\tau)$  отражают кинетику как коагуляционного, так и конденсационно-кристаллизационного структурообразования, дающего разные скорости  $\partial E/\partial \tau$  и ускорения  $\partial^2 E/\partial \tau^2$ , изменения свойств упруговязкопластичного тела, а поэтому эти кривые *не описываются параболой второго порядка* (даже при преобразованиях  $\ln E$  и  $\ln \tau$  — см. § 5 гл. VI) на достаточно больших участках  $\tau$ . Более того, как показано в работах института физической химии АН СССР [75, с. 24], кривая  $E=f(\tau)$  может состоять из ряда скачкообразно поднимающихся площадок. Для решения задач управления формой кривой твердения композиционных материалов [16, с. 147] с помощью рецептурно-технологических факторов  $x_i$  предложен [22, III. с. 152; 78 с. 26] новый подход — полиномиальное моделирование по «временным сечениям». По этой методике на первом этапе для каждого из  $M$  фиксированных моментов времени  $\tau$  через равные интервалы  $\Delta \tau$  (или  $\Delta \ln \tau$ ) строят модель влияния рецептурно-технологических факторов на  $\ln E$

$$\ln E = b_0\{\tau\} + \sum_{i=1}^K b_{i1}\{\tau\} \cdot x_i + \sum_{i < j} b_{ij}\{\tau\} \cdot x_i x_j + \sum_{i=1}^K b_{ii}\{\tau\} \cdot x_i^2 + \dots \quad (IV.9)$$

Затем по  $M$  моделям можно графоаналитически исследовать однофакторные функции (IV.10) [78, с. 26], описывающие (рис. IV.1, г) изменение во времени каждой оценки коэффициентов моделей типа (IV.9), а также проанализировать двухфакторные функции (IV.11) [72, вып. 7, с. 23] с осями времени  $\tau$  и рецептурно-технологического фактора  $x_i$  (например, без потери общности  $x_1$ ), описывающие (рис. IV.1, д) *формоизменение парабол во времени*

$$b_0 = \Phi_0(\tau), \quad b_i = \Phi_i(\tau), \quad b_{ij} = \Phi_{ij}(\tau), \quad b_{ii} = \Phi_{ii}(\tau). \quad (IV.10)$$

$$\ln E\{\tau, x_1\} = \Phi(\tau, \Psi_1) \quad \text{при} \quad \Psi_1 = (b_0 + b_1x_1 + b_{11}x_1^2). \quad (IV.11)$$

Анализ моделей типа (IV.11) при разной стабилизации уровней факторов  $x_j (j \geq 2)$  хотя и трудоемок, но более информативен, чем анализ изменения коэффициентов по (IV.10). Он позволяет, как показано в § 4 гл. IV, делать нетривиальные технологические выводы.

\* Исключение составляет изучение свойств бетонов в поздние ( $\tau \geq 3$  сут) сроки нормального твердения, когда целесообразно варьировать через равные интервалы величину  $\log_a \tau$  (нами рекомендуется  $a=3$ ).

## § 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ ВЗАИМОСВЯЗИ РЕОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ И РЕЦЕПТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ ДЛЯ ЗОЛОЦЕМЕНТНОГО КОМПОЗИТА

Реология золоцементных композитов изучена недостаточно [72, вып. 4, с. 21], что создает трудности при назначении оптимальных режимов смешивания и формования, которые должны отличаться от таковых для композитов на «чистых» цементных связующих в силу особенностей процессов структурообразования.

В работе [63, IV, с. 81; 72, вып. 7, с. 15] проанализированы закономерности влияния на реологические характеристики золоцементных композитов ряда рецептурных факторов и скорости деформаций  $\dot{\epsilon}$ . В частности, при моделировании варьировалась удельная поверхность  $S$ , см<sup>2</sup>/г, золы-уноса на четырех неравноотстоящих уровнях  $X_1 = 4640 \pm 1260$  (золы являются отходами ТЭС, но среднеквадратичные отклонения в химическом составе позволяют считать их практически равноценными: SiO<sub>2</sub> = (60,8 ± 0,4) %, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = (22,0 ± 0,8) %, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = (6,5 ± 0,4) %, CaO = (2,3 ± 0,3) %; MgO = (1,2 ± 0,2) % и SO<sub>3</sub> = (2,7 ± 0,3) %). Кроме того, варьировалась на пяти уровнях доля золы-уноса в цементном вяжущем  $X_2 = \varphi = (35 \pm 30) \%$ , а также скорость деформации смеси, которая при моделировании по плану  $4 \times 5 \times 4$  [16] учитывалась в виде обратной величины  $(\dot{\epsilon})^{-1} = x_3 = (667 \pm 381) \cdot 10^{-5}$  с (по аналогии с предложениями, высказанными в работе [72, вып. 1, с. 18]). Для выбора наиболее точного описания изменений эффективной вязкости  $\eta$  (10<sup>-1</sup> Па·с) в работе рассматривался веер моделей с преобразованием выхода  $Y = \ln \eta$  в форму  $(\ln \eta + C)^m$  при изменении степени трехфакторных полиномов от второй до четвертой. Модели с преобразованием  $W = \sqrt{\ln \eta + 1}$  в некоторых случаях дают примерно на 5...10 % меньшую остаточную дисперсию, чем при прямом моделировании  $\ln \eta$ . Однако такое усложнение выхода существенно затрудняет инженерную интерпретацию моделей. Поэтому признано целесообразным выбирать в качестве рабочих модели типа

$$\begin{aligned} \hat{Y} = & 1,44 + \\ & + 0,98x_1 + 0,36x_1^2 - 0,19x_1^3 + \\ & + 1,49x_2 - 0,46x_2^3 + \\ & + 0,38x_3 - 0,19x_3^2 + \\ & + 0,64x_1x_2 + 0,33x_1x_3 + 0,07x_1^2x_3 - 0,30x_1^3x_2 - 0,30x_1^3x_3 - \\ & - 0,21x_2x_3 - 0,35x_1x_2^2 - 0,12x_1x_2^3 + 0,20x_2^3x_3. \quad (\text{IV.12}) \end{aligned}$$

Модель (IV.12) адекватна при  $\alpha = 0,05$ ,  $s_3 = 0,125$ ,  $f_3 = 20$ . Незначимые оценки коэффициентов удалены при  $\alpha = 0,1$  последовательным регрессионным анализом, реализованным в системе COMPEX. Изоперехности эффективной вязкости (ряд 2<sup>а</sup> при  $a = -1,0 \dots, 5$ ) показаны на рис. IV.2, а.

На модели (IV.12) решен комплекс инженерных задач по методикам, изложенным в § 6 гл. I. Следует отметить результаты решения задач типа № 8, 9 и 12. Так, на рис. IV.2, а видно, что переход к *повышенным скоростям* деформации технологической смеси обеспечивает или *увеличение утилизации* золы в композите  $\Delta\varphi$  (для изоповерхности  $\eta=1,6$  Па·с доля золы при  $S=5900$  см<sup>2</sup>/г в точке В больше чем в точке А в 1.78 раза) или при той же эффективной вязкости, *переработку* золы *повышенной удельной поверхности* (при максимальном насыщении композита  $\varphi=65\%$  удельная поверхность в точке D больше, чем в точке С в 1,25 раза).

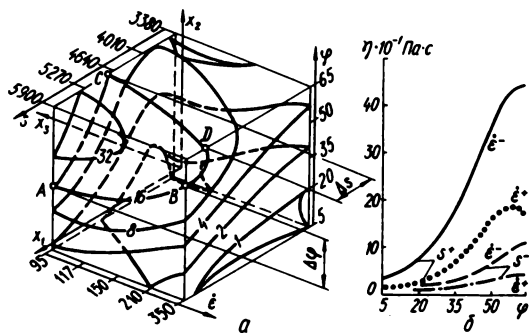
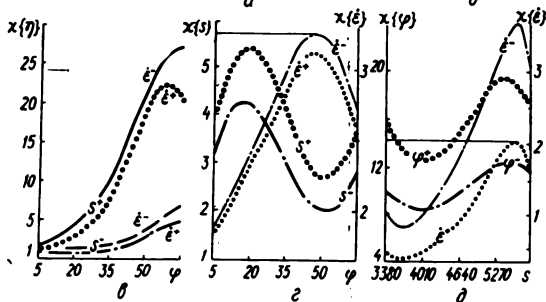


Рис. IV.2. Изоповерхности (а) эффективной вязкости в системе  $\{S, \varphi, \varepsilon\}$  и однофакторные зависимости  $\eta$  от насыщения композита золой (б), а также относительное изменение  $\kappa$  при переходе: от цементных паст к композиту  $\kappa\{\eta\}$  (в), от малых  $\varepsilon$  к большим  $\kappa\{\varepsilon\}$  (г...е), от малой к большой дисперсности золы  $\kappa\{S\}$  (з), от насыщения  $\varphi=5\%$  к  $65\%$   $\kappa\{\varphi\}$  (д).



Для анализа изменения эффективной вязкости под влиянием одного из факторов были рассчитаны по (IV.12) модели, показанные в табл. IV.1 и на рис. IV.1, б ( $\hat{Y}_1 \dots \hat{Y}_4$ ).

По моделям  $\hat{Y}_1 \dots \hat{Y}_{12}$  решены две группы задач. Во-первых, определен относительный рост вязкости  $\kappa\{\eta\}$  за счет введения золы по сравнению с эффективной вязкостью чистого цементного теста  $\eta_{ц}$ ; величина  $\kappa\{\eta\}$  рассчитывается по аналогии с (IV.8) как  $\kappa\{\eta\} = \eta : \eta_{ц} = \exp[\ln\eta - \ln\eta_{ц}]$ . Для построения графиков (рис. IV.2, в) достаточно из моделей  $\hat{Y}_j$ , для которых фиксированы пары факторов, вычесть значения  $\ln(\eta_{ц} \cdot 10^{-1} \text{ Па} \cdot \text{с}) = f(\varepsilon^{-1})$ , полученные в специальном эталонном эксперименте. Во-вторых, определен относительный рост вязкости  $\kappa\{S\}$ ,  $\kappa\{\varphi\}$  и  $\kappa\{\varepsilon\}$  за счет перехода от нижних уровней варьирования  $x_i$  к верхним (или наоборот — в соответствии с физическим смыслом  $\kappa$ ).

Для расчета используется формула (IV.8), по которой получено 12 зависимостей типа

$$\begin{aligned}
 \kappa\{\varepsilon\} &= \exp(\hat{Y}_1 - \hat{Y}_2) = \exp(0,972 - 0,416x_2 + 0,406x_2^3), \\
 \kappa\{S\} &= \exp(\hat{Y}_1 - \hat{Y}_3) = \exp(1,609 + 0,688x_2 - 0,696x_2^2 - 0,242x_2^3), \\
 \kappa\{S\} &= \exp(\hat{Y}_5 - \hat{Y}_7) = \exp(1,346 - 0,060x_3), \\
 \kappa\{\varphi\} &= \exp(\hat{Y}_7 - \hat{Y}_8) = \exp(1,612 - 0,010x_3), \\
 \kappa\{\varphi\} &= \exp(\hat{Y}_9 - \hat{Y}_{10}) = \exp(2,562 + 1,038x_1 - 0,785x_1^3)
 \end{aligned}
 \tag{IV.13}$$

На рис. IV.1, г...д представлены зависимости  $\kappa$  от  $\varphi$  и  $S$  (графический анализ  $\kappa=f(\varepsilon^{-1})$  — тривиален). По моделям и графикам можно сделать ряд важных технологических выводов. В частности:

Т а б л и ц а IV.1. Однофакторные модели  $\hat{Y}_j=f(x_i)$

Исследуемый фактор	Факторы $x_i/x_j$			Модель
	$x_1/S$	$x_2/\varphi$	$x_3/\varepsilon^{-1}$	
Степень насыщения $\varphi$	+1	Аргумент	+1	$\hat{Y}_1 = 2,905 + 1,625x_2 - 0,348x_2^2 - 0,378x_2^3$
	+1		-1	$\hat{Y}_2 = 1,923 + 2,041x_2 - 0,348x_2^2 - 0,784x_2^3$
	-1		+1	$\hat{Y}_3 = 1,286 + 0,937x_2 + 0,348x_2^2 + 0,348x_2^3$
	-1		-1	$\hat{Y}_4 = 0,387 + 1,353x_2 + 0,348x_2^2 - 0,542x_2^3$
Скорость деформаций $1/\varepsilon$	+1	+1	Аргумент	$\hat{Y}_5 = 3,499 + 0,481x_3 - 0,186x_3^2$
	+1	-1		$\hat{Y}_6 = 0,995 + 0,491x_3 - 0,186x_3^2$
	-1	+1		$\hat{Y}_7 = 2,153 + 0,421x_3 - 0,186x_3^2$
	-1	-1		$\hat{Y}_8 = 0,541 + 0,431x_3 - 0,186x_3^2$
Удельная поверхность $S$	Аргумент	+1	+1	$\hat{Y}_9 = 2,661 + 1,488x_1 + 0,430x_1^2 - 0,785x_1^3$
		-1	+1	$\hat{Y}_{10} = 0,099 + 0,450x_1 + 0,430x_1^2 - 0,193x_1^3$
		+1	-1	$\hat{Y}_{11} = 1,901 + 0,822x_1 + 0,288x_1^2 - 0,179x_1^3$
		-1	-1	$\hat{Y}_{12} = -0,137 - 0,216x_1 + 0,288x_1^2 + 0,413x_1^3$

на кривых  $\kappa\{\varepsilon\} = f(\varphi)$  явно выражен (см. рис. IV.1, г) минимум, по нашему мнению, связанный с оптимальным распределением в объеме гранул золы и цемента, окруженных коллоидными оболочками; при такой оптимальной укладке гранул заданный уровень механических воздействий уже не может существенно улучшить способность смеси к течению за счет разрушения коагуляционных структур;



из анализа кривых  $\kappa\{S\}=f(\varphi)$  следует, что увеличение поверхности золы вызывает рост  $\kappa$  (см. рис. IV.1, з) лишь до определенного предела  $\varphi=40-45\%$ , после чего, по-видимому, наступает пересыщенные системы наполнителем, при котором коллоидных новообразований цементного клея не хватает на создание тиксотропирующих оболочек;

на кривых  $\kappa\{\varepsilon\}=f(S)$  наблюдается минимум (см. рис. IV.1, д), который, по нашему мнению, определяется оптимальным соотношением между зернами различных фракций золы, вводимой в композит.

### § 3. МИНИМИЗАЦИЯ РАСХОДА ВЯЖУЩЕГО ПРИ ПОЛУЧЕНИИ ИЗОРЕОЛОГИЧЕСКИХ СМЕСЕЙ

Задача получения технологических смесей, имеющих на фиксированный момент времени *равные* величины вязкости, предельного напряжения сдвига и т. п. (называемые в дальнейшем *изореологическими*), часто возникает как при заданных параметрах формирующего агрегата, так и при сравнительном исследовании свойств композитов. Экспериментальное решение задачи трудоемко, так как требует в каждом варианте рецептуры *многократного приготовления пробных смесей*. Кроме того, при таком решении трудно минимизировать расход *дефицитных* компонентов. Степень сложности решения резко увеличивается для смесей, содержащих многокомпонентные добавки.

В широком диапазоне изменения  $\Pi/\Pi^*=X_1=(3\pm 1)$  и  $B/\Pi=X_2=(0,40\pm 0,05)$  изучена [63, III, с. 20] смесь, приготовленная на 9 цементах из одного исходного клинкера (тонкость помола  $X_3=(4000\pm \pm 1000)$  см<sup>2</sup>/г и добавка гипса  $Z_4=(3+2)\%$ ).

По плану  $R_7$  [16, с. 127], кроме указанных факторов, изменяется состав (дозировка по массе цемента) добавки, состоящей из суперпластификатора ( $Z_5=(2\pm 2)\%$  раствора 20-процентной концентрации), сернокислого натрия ( $Z_6=(1,5\pm 1,5)\%$ ) и пластификатора СДБ ( $Z_7=(0,1\pm 0,1)\%$  сухого вещества), с целью получения *изореологических смесей* (глубина пенетрации конуса  $H$  должна быть не менее чем у лучшей бездобавочной смеси во всем диапазоне изменения  $B/\Pi$  и  $\Pi/\Pi$ , т. е.  $H\geq H_{z,\max}$ ) при минимальном расходе вяжущего (расчетный показатель  $X_{1,\max}$ ).

Для реологического показателя  $H$  получена модель со всеми значимыми ( $\alpha=0,2$ ) коэффициентами

$$\begin{aligned} \hat{H} = & 55 + 14x_1 - 9x_1^2 + 2x_1z_5 + 2x_1z_6 \\ & + 12x_2 + 4x_2x_3 + 2x_2z_4 + 4x_2z_5 + 2x_2z_6 + 2x_2z_7 + \\ & + 3x_3 - 4x_3z_4 - 3x_3z_6 - 3x_3z_7 + \\ & + 2z_4 - 2z_4z_6 - 3z_4z_7 + \\ & + 13z_5 + 2z_5z_6 + 2z_5z_7 + \\ & + 4z_6^2 - 4z_6z_7 + \\ & + 3z_7 \end{aligned} \quad (IV.14)$$

Минимизация расхода цемента ведется при переводе всех технологически легко оптимизируемых факторов  $z_i$  на лучшие уровни (по максимизации  $H$ ) во всем диапазоне  $x_1, x_2$  и  $x_3$ .

\*  $\Pi:\text{Ц}=4:1$  соответствует  $x_1=-1$  (для удобства интерпретации моделей).

А. На основе диссоциативно-шагового метода оптимизации (см. § 6 гл. I) найдено, что  $z_5 = +1$ , а  $z_4 = z_6 = z_7 = \pm 1$ , и получено восемь конкурирующих моделей. Например, для

$$z_4 = z_5 = z_6 = z_7 = \pm 1$$

$$H = 72 + 24x_1 - 9x_1^2 + 12x_2 - 7x_3 + 4x_2x_3. \quad (\text{IV.15})$$

Б. По моделям типа (IV.15) в девяти точках факторного пространства  $x_2 \dots x_3$  (центр + 4 угла + 4 середины сторон квадрата) (рис. IV.3)

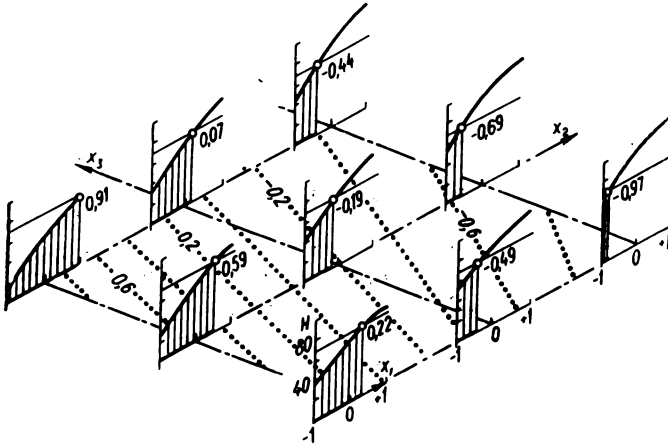


Рис. IV.3. Полученные изореологических ( $H=70$  мм) смесей при минимальном расходе цемента (изолинии  $x_1$ ) во всей области изменения В/Ц ( $x_2$ ) и удельной поверхности цемента ( $x_3$ ).

рассчитаны модели  $H = \varphi\{x_1\}$ , по которым легко найти  $x_{1\min}$  при условии  $H = \text{const}$ . Например, для указанных в (А) условий для точки  $x_2 = x_3 = +1$ , при  $H = 70$  мм (что больше  $H_{\text{э, max}} = 67$  мм), получено

$$H = 70 = 91 + 20x_1 - 9x_1^2 \quad \text{и} \quad x_{1\min} = -0,78. \quad (\text{IV.16})$$

В. Сравнительный анализ  $x_{1\min}$  по конкурирующим моделям (А) в каждой из девяти точек позволяет выбрать лучший технологический вариант. Для  $H = 70$  оказалось, что всегда  $z_6 = -1$  (без электролита) и  $z_7 = +1$  (ввод СДБ), а добавка гипса переменна ( $z_4 = \pm 1$ ) и в зоне высоких тонкостей помола цемента находится на нижнем уровне  $Z_4 = 1$  %).

Г. Поскольку лучшие  $x_{1\min}$  найдены в точках, образующих план  $3 \times 3$ , можно построить квадратичную модель минимального расхода цемента при получении изореологических смесей ( $H = 70$  мм)

$$x_{1\min} = -0,53 - 0,44x_2 + 0,06x_2^2 + 0,07x_3 - 0,04x_3^2. \quad (\text{IV.17})$$

Модель (IV.17), показанная на рис. IV.3 в виде изолиний на плоскости (в изометрической проекции), хорошо интерпретируется в технологических терминах и может быть использована для анализа свойств затвердевшего композита, полученного из изореологических смесей. Для этого достаточно подставить (IV.17) вместо  $x_1$  в соответствующие модели.

**§ 4. ОПТИМИЗАЦИЯ КИНЕТИКИ ИЗМЕНЕНИЙ РЕОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДИСПЕРСНО-АРМИРОВАННОГО КОМПОЗИТА ПРИ НОРМИРОВАНИИ КАЧЕСТВА ЗАТВЕРДЕВШЕГО МАТЕРИАЛА**

Описанный в § 1 гл. IV метод временных сечений позволяет из множества рецептурно-технологических условий  $(X_{i,\min})_{\text{норм}} \leq X_i \leq (X_{i,\max})_{\text{норм}}$ , обеспечивающих комплекс показателей качества готового материала  $R_i \geq R_{i,\text{норм}}$ , выбрать то их подмножество, которое дополнительно обеспечивает кинетику изменения реологических характеристик смеси, оптимальную для заданных условий ее переработки в изделия.

Таблица IV.2. Оценки коэффициентов  $(b \cdot 10^2)$  моделей

$b_i$	Модели пластической прочности технологической смеси $\ln P_m$ для разных $\tau$ , мин						Модели физико-механических свойств			
	15	30	60	120	240	480	$\ln R_c$	$\ln R_n$	$\ln \varepsilon$	ВНП
$b_0$	887	888	894	904	925	985	331	258	305	390
$b_1$	-10	-12	-15	-22	-24	-31	-14	-16	-1	-40
$b_2$	5	9	15	17	15	12	-12	-13	5	40
$b_3$	-14	-15	-16	-15	-15	-27	-6	0	2	30
$b_4$	-41	-53	-66	-84	-104	-128	-12	0	1	-10
$b_5$	19	24	28	34	28	14	-17	53	-5	40
$b_{11}$	0	0	0	0	0	0	11	0	0	-90
$b_{22}$	0	0	0	12	11	34	0	-7	0	-40
$b_{33}$	0	0	0	12	36	56	-17	0	0	60
$b_{44}$	42	54	64	55	52	60	-15	0	0	0
$b_{55}$	0	0	0	0	-14	-55	16	8	2	60
$b_{12}$	0	0	0	0	3	14	9	-4	-1	-20
$b_{13}$	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	-10
$b_{14}$	15	18	20	30	30	41	0	5	-2	-60
$b_{15}$	-15	-16	-17	-18	-6	0	0	0	0	50
$b_{23}$	10	12	12	13	3	-9	0	4	3	20
$b_{24}$	-5	-10	-16	-18	-19	-24	-4	-4	1	0
$b_{25}$	0	0	0	3	5	15	16	5	-4	10
$b_{34}$	17	17	16	14	8	19	0	-6	0	-10
$b_{35}$	0	0	0	0	0	0	9	0	-2	20
$b_{45}$	-19	-23	-29	-30	-23	-23	0	5	-1	50

Такой подход был реализован при создании дисперсно-армированного стекловолокном композиционного материала, к которому предъявляют жесткие требования по прочности на изгиб ( $13 \leq R_n \leq 20$  МПа) и сжатие ( $20 \leq R_c \leq 25$  МПа), величине деформаций расширения ( $0 \leq \varepsilon \leq 3$  мм/м), а также водонепроницаемости (ВНП  $\geq 0,3$  МПа), плотности и другим специальным эксплуатационным показателям. При этом технологическая смесь должна удовлетворять широкому диапазону изменения условий производства работ на возводимых и ремонтных объектах. Исходя из опыта создания аналогичных рецептур и ряда физико-химических гипотез, для оптимизации выбрана при  $V/C = X_i = 0,4 \pm 0,04$  рецептура на основе портландцемента. Значения оценок коэффициентов для ряда  $\tau = 60 \cdot 2^a$  ( $a = -2, -1, 0, +1, +2$ ) приведены в табл. IV.2. По ним строят и анализируют функции  $\ln P_m = f(\tau)$  для разных сочетаний факторов [20; 23, III, с. 152], анализируют ки-

нетику изменения во времени степени влияния каждого из компонентов и их сочетаний. Совместная реализация этих двух подходов обеспечивает получение полной информации о процессе структурообразования.

Так, реализация первого подхода для латекса  $z_3 \leq [1]$  ( $z_2 = z_4 = z_5 = -1$ ) при разных В/Ц начинается с построения функций  $\ln P_m = f(\tau)$  для каждого момента времени из ряда  $\tau = 60 \cdot 2^a$ . Далее плавной кривой соединяются минимумы парабол, их левые и правые ветви

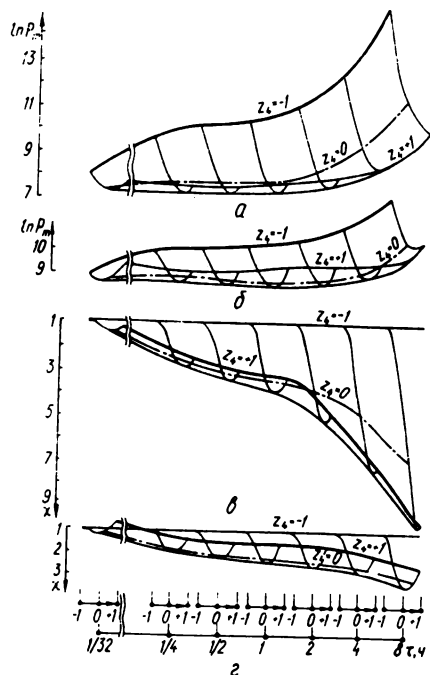


Рис. IV.4. Поверхности функций  $\ln P_m = f(\tau, z_3)$  (а, б) и  $\kappa = \varphi(\tau, z_3)$  (в, г), образуемые при изменении во времени (шкалы  $\tau = 2^a$  и  $-1 \leq z_3 \leq +1$  расположены в одной фронтальной плоскости) характера влияния латекса при В/Ц = 0,36 и В/Ц = 0,44 (б, г) на пластическую прочность смеси.

(рис. IV.4, а, б). При втором подходе для оценки относительного изменения пластической прочности  $P_m$  от введения латекса (рис. IV.4, в, г), по сравнению с чистым цементным тестом, осуществляется переход к  $\kappa \{z_i\}$  по формуле (IV.8). Дальнейшие построения аналогичны описанным выше, но значение  $\kappa$  при  $z_3 = -1$  совпадает с осью абсцисс.

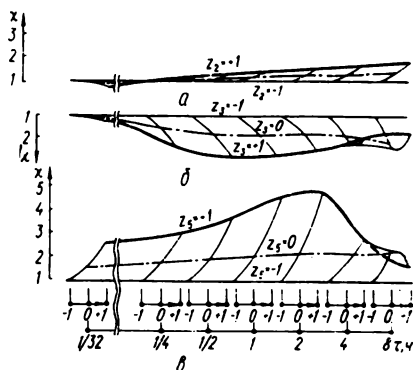


Рис. IV.5. Поверхности функции  $\kappa = \varphi(\tau, z_i)$ , характеризующие при В/Ц = 0,36 изменение во времени степени влияния ГГЦ (а), СДБ (б) и стекловолокна (в) на пластическую прочность.

Анализ поверхностей на рис. IV.4 подтверждает замедляющее влияние латекса на процессы структурообразования. Сразу после затворения глобулы латекса и стабилизатора начинают адсорбироваться на поверхности зерен цемента и препятствуют росту новообразований. Увеличивается индукционный период структурообразования, причем при концентрации латекса больше 10 % замедляется нарастание пластической прочности во времени. Эти данные хорошо согласуются с исследованиями ВНИИстройматериалов [33], в которых показано, что при содержании латекса больше 10 % степень гид-

ратации цемента уменьшается и наблюдается интенсивное подавление процессов кристаллообразования гидратов. Концентрация латекса, вызывающая максимальное падение  $P_m$ , изменяется во времени, а характер влияния латекса зависит от его концентрации в системе. Добавленный в количестве до 10...15 %, он действует подобно пластификатору. По сравнению с чистым цементным тестом  $P_m$  уменьшается с увеличением концентрации латекса. Однако дальнейшее повышение

Т а б л и ц а IV.3. Конкурирующие уровни  $z_3 \cdot opt$  и  $z_4 \cdot opt$

Факторы	Критерии качества			
	основной	дополнительные		
		ВНП	$R_c$	$R_{II}$
СДБ— $z_3$ Латекс— $z_4$	+1 +1	-0,2+0,2 $z_3$ -0,2	$z_3 \ll 1$ $z_4 \ll 1$	+1 -1

содержания латекса вызывает увеличение пластично-вязких свойств системы, которое, очевидно, можно объяснить насыщением поверхности зерен цемента глобулами латекса.

По аналогичной методике анализируют кинетику изменения влияния на структурообразование ГГЦ, П и S (рис. IV.5, а, б, в). При исследовании структурообразования КМ, содержащего только ГГЦ ( $Z_2$ ), первоначально наблюдалось уменьшение  $P_m$  по сравнению с чистым цементным тестом, что можно объяснить образованием на зернах цемента замедляющих дальнейшую их гидратацию оболочек из кристаллов этtringита. Именно скорость диффузии сульфатных ионов через такие оболочки становится в этот период определяющим фактором быстроты процесса гидратации. После разрушения оболочек растущими под ними кристаллами этtringита процессы гидратации ускоряются. В результате к  $\tau=60$  мин образуется достаточное количество этtringита для завершения, в основном, формирования кристаллического каркаса. Упрочнение системы по сравнению с чистым цементным тестом увеличивается с ростом концентрации ГГЦ и определяется, вероятно, количеством выкристаллизовавшегося этtringита (см. IV.5, а).

Существенно изменяет процесс структурообразования также введение пластификатора (см. рис. IV.5, б). Сразу после затворения его молекулы, адсорбируясь на поверхности зерен цемента, оказывают стабилизирующее и пластифицирующее действие. Эти адсорбционные слои, с одной стороны, тормозят процессы структурообразования и гидратации (в основном, в результате замедления диффузии воды вглубь зерен), а с другой — ускоряют их, вызывая адсорбционную пептизацию клинкерных минералов и прежде всего  $C_3A$ . Как видно на рис. IV.5, б, стабилизирующее действие СДБ приводит, по сравнению с чистым цементным тестом, к снижению  $P_m$ , увеличивающемуся с ростом ее процентного содержания. Увеличение концентрации  $Z_3$  до

0,4% вызывает возникновение явно выраженного индукционного периода структурообразования, вызванного присутствием добавки в жидкой фазе. Первоначальная ее адсорбция на зернах цемента завершается в течение нескольких минут, а в дальнейшем добавка поглощается продуктами гидратации цемента, в основном, новообразованиями алюминатных минералов. С течением времени молекулы пластификатора связываются новыми поверхностями, образующимися

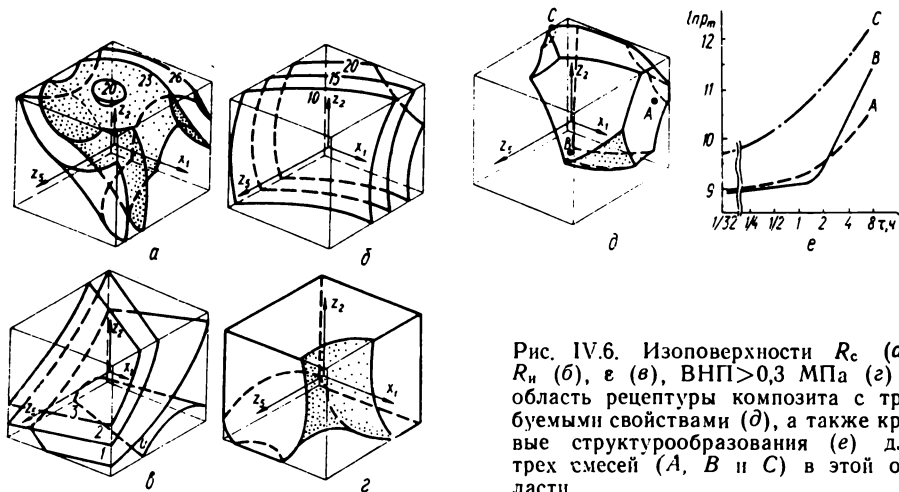


Рис. IV.6. Исоповерхности  $R_c$  (а),  $R_n$  (б),  $VNP$  (в),  $VNP > 0,3$  МПа (г) и область рецептуры композита с требуемыми свойствами (д), а также кривые структурообразования (е) для трех смесей (А, В и С) в этой области.

как при адсорбционном диспергировании  $C_3A$ , так и в начальной стадии выкристаллизовывания алюминатных новообразований. Индукционный период сменяется резким ростом  $P_m$  из-за образования кристаллизационной структуры алюминатной составляющей. Этот процесс более интенсивно проходит в системе, содержащей максимальную концентрацию добавки  $Z_3 = 0,4\%$ , что, вероятно, связано с повышением пептизирующего эффекта, приводящего к увеличению активной поверхности, а следовательно, и прочности образующейся структуры. В дальнейшем рост прочности такой системы замедляется, что вызвано, очевидно, тормозящим действием СДБ на структурообразование гидросиликатов. В целом при  $0 \leq \tau \leq 480$  мин и  $Z_3 > 0$  замедляются процессы структурообразования системы по сравнению с чистым цементным тестом.

Волокнистая структура со сложными контактами оказывает существенное влияние на кинетику структурообразования КМ. В результате переплетения волокон образуется так называемая вторичная макроструктура в виде пространственной сетки-каркаса, которая резко увеличивает  $P_m$  (рис. IV.5, в). В качественном отношении увеличение  $z_5$  подобно уменьшению В/Ц системы. При содержании волокна 2% величина  $\chi$  постепенно увеличивается за  $\tau = 0 \div 480$  мин от 1,5 до 2. Однако увеличение  $Z_5$  до 4% изменяет характер влияния стекловолокна: примерно от  $\tau = 120$  мин (см. рис. IV.5, в) наблюдалось снижение  $\chi$ , что объясняется изменением процессов структурообразования

при упрочнении этого КМ. В частности, при кристаллизации новообразований возможно возникновение собственных напряжений в системе от давления растущих кристаллов на препятствие — волокно. Это давление не зависит от природы отталкивающей грани; чем оно больше, тем выше возникающие собственные напряжения. Внешним проявлением действия собственных напряжений в системе может быть: понижение с течением времени интенсивности  $\chi\{S\}$ .

Т а б л и ц а IV.4. Содержание добавок

Точка	В/Ц	ГГЦ	СДБ.	Латекс.	Волокно.
		Проц. массы цемента			
А	0,44	6	0,4	3	3
Б	0,40	1	0,4	3	2
С	0,36	12	0,4	3	3

Анализ кинетики изменения во времени роли каждого компонента в дальнейшем позволил, за счет комбинации разных сочетаний  $z_i$ , конструировать кривые структурообразования, необходимые для соответствующей схемы организации строительных работ.

На втором этапе рецептура оптимизировалась по комплексу показателей  $Y_{o,j} : R_n, R_c, \epsilon$  и ВНП. Для этого по моделям (табл. IV.3) диссоциативно-шаговым методом [16, 18] найдены индивидуальные оптимальные решения по  $Y_{o,j}$ , конкурирующие для  $z_2, z_3$  и  $z_4$  в факторном пространстве  $x_1$  и  $z_5$ . Такое разделение факторов необходимо для технико-экономического анализа решений.

Для поиска компромиссного решения критерии качества разбиты в табл. IV.3 в порядке приоритета на основной (ВНП) и дополнительные. Исходя из такого приоритета целесообразна следующая стабилизация:  $z_3 = +1$  и  $z_4 = -0,2$ , что существенно не отразится на остальных  $Y_{o,j}$ . После подстановки  $z_3$  и  $z_4$  получены четыре трехфакторные модели, изоповерхности которых показаны на рис. IV.6, а, б, в, г. Совмещение этих диаграмм позволяет определить *зону компромиссных решений* (см. рис. IV.6, д), удовлетворяющих всем требованиям, предъявляемым к качеству композита, а именно:  $\text{ВНП} \geq \geq 0,3$  МПа;  $13 \leq R_n \leq 20$  МПа;  $20 \leq R_c \leq 25$  МПа;  $0 \leq \epsilon \leq 3$  мм/м. Для любой из разрешенных рецептур можно построить кривую кинетики  $P_m$  и выбрать ту из них, которая наиболее удовлетворяет заданной схеме работ. Так, для трех рецептур, приведенных в табл. IV.4 и на рис. IV.6, е построены кривые, отличающиеся по скорости структурообразования.

Анализ этих кривых позволяет выбирать рецептуры КМ исходя как из требований широкого диапазона изменения условий производства ремонтных и гидроизоляционных работ на объектах (например, нанесение гидроизоляции непосредственно после изготовления — кривая С или же после транспортировки — кривая А и В), так и из необходимости экономии того или иного компонента.

**§ 5. ПРИМЕНЕНИЕ НОВОГО КЛАССА МОДЕЛЕЙ  
«СМЕСЬ — СМЕСЬ — СВОЙСТВА» В ЗАДАЧАХ АНАЛИЗА  
РЕОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ**

Значение оптимизации реологических характеристик технологических смесей композиционных материалов резко возрастает при использовании полимерных связующих. Этот рост по сравнению с силикатными композитами объясняется, прежде всего, увеличением технико-экономических потерь от принятия неоптимальных решений, обусловленных высокими требованиями к надежности и долговечности относительно тонкостенных конструкций (или их элементов, например швов, покрытий и т. п.) из полимерных композитов. Важнейшее средство регулирования свойств полимерсодержащих материалов — целенаправленное изменение количества и качества высокодисперсного наполнителя в полимерном связующем. Для решения задач анализа и оптимизации введения наполнителя перспективно использование моделей нового класса «смесь — смесь — свойства», предложенного в работах [34; 52, вып. 3, с. 110] и примененного в советско-болгарских исследованиях полиэфирных композитов [63, т. IV, с. 77].

Рассмотрим влияние *одновременного* изменения *минералогического* состава и *гранулометрии* дисперсного наполнителя, вводимого в смолу в соотношении 150 : 100 (т. е. 60% объема занимает наполнитель, что соответствует рецептуре ряда полимербетонов):

$v_1$  — доля в смеси *кварцевого* наполнителя ( $0 \leq v_i \leq 1$ ),  $v_2$  — то же, *мраморного* (карбонатного),  $v_3$  — то же, *цементного* клинкера в наполнителе.

$\Sigma v_i = v_1 + v_2 + v_3 = 1$ , т. е. факторы взаимозависимы и образуют «смесь» (§ 4, гл. I). Каждый из минеральных порошков подготовлен в виде трех фракций: мелкой с предельным размером зерен около  $80 \cdot 10^{-6}$  м (80 мк = 0,08 мм), средней — с диаметром в диапазоне  $(160 \div 315) \cdot 10^{-6}$  м, крупной — в диапазоне  $(315 \div 640) \cdot 10^{-6}$  м. Условно можно считать, что диаметры частиц образуют ряд, близкий к 1 : 4 : 8. Гранулометрия наполнителя также образует смесь  $\Sigma w_i = w_1 + w_2 + w_3 = 1$ , где  $w_1$  — доля в смеси (моно- или полиминерального состава) *мелких* зерен ( $0 \leq w_i \leq 1$ );  $w_2$  — то же, *средних*;  $w_3$  — то же, *крупных*.

На приборе типа «Реотест-2» оценивают эффективную вязкость, Па·с, при разных скоростях деформации  $\dot{\epsilon}$  смеси, образующих ряд  $\dot{\epsilon} = 3^m \cdot c^{-1}$  ( $m = 0-4,5$ ). Затвердевшие композиты испытывают для определения комплекса структурно-механических свойств. В качестве базовой принята модель «смесь—смесь» в виде приведенного полинома (IV.18), который может быть расширен включением технологического фактора  $x_i$ , поскольку  $\dot{\epsilon}$  варьируется на нескольких равноотстоящих уровнях

$$\begin{aligned} \hat{Y} = & A_{12}v_1v_2 + A_{13}v_1v_3 + A_{23}v_2v_3 + \\ & + B_{12}w_1w_2 + B_{13}w_1w_3 + B_{23}w_2w_3 + \\ & + C_{11}v_1w_1 + C_{12}v_1w_2 + C_{13}v_1w_3 + \\ & + C_{21}v_2w_1 + C_{22}v_2w_2 + C_{23}v_2w_3 + \\ & + C_{31}v_3w_1 + C_{32}v_3w_2 + C_{33}v_3w_3 . \end{aligned} \quad (IV.18)$$



Коэффициенты  $C_{ij}$  в модели (IV.18) имеют четкий физический смысл — они равны величине свойства композитов с девятью основными комбинациями наполнителя. Так,  $C_{22} = \hat{Y}$  для мраморного наполнителя из зерен средней величины, а  $C_{31} = \hat{Y}$  для цементного наполнителя крупной фракции. Эффекты  $A_{ij}$  и  $B_{ij}$  указывают на сте-

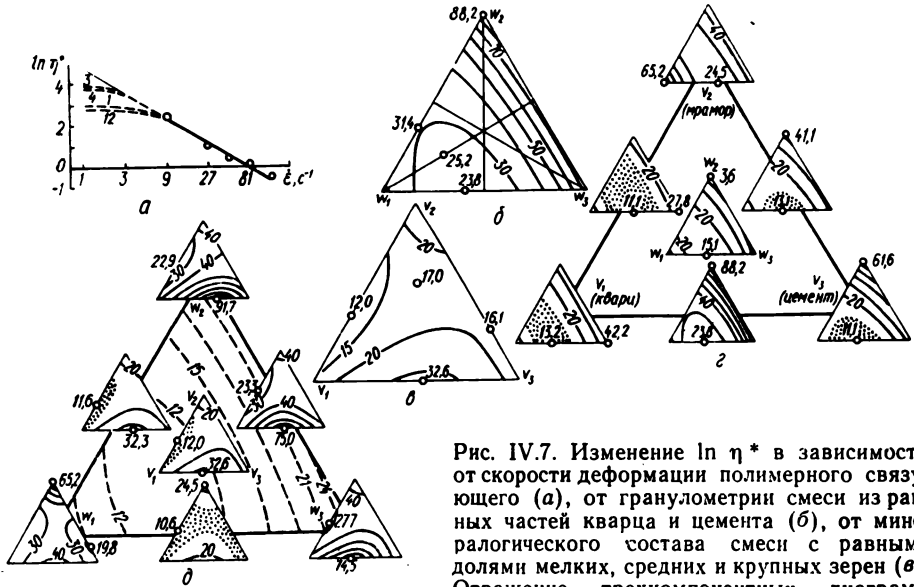


Рис. IV.7. Изменение  $\ln \eta^*$  в зависимости от скорости деформации полимерного связующего (а), от гранулометрии смеси из равных частей кварца и цемента (б), от минералогического состава смеси с равными долями мелких, средних и крупных зерен (в). Отражение трехкомпонентных диаграмм «гранулометрия — вязкость» на диаграмме наполнителей разного минералогического состава (г), а также диаграмм «минералогия — вязкость» и изолиний наименьшей вязкости на диаграмме «гранулометрия» (д).

пень нелинейности  $\hat{Y}$  при смешивании двух компонентов. Если, например,  $A_{23} > 0$ , то смешивание равных долей мрамора с цементом дает значение  $\hat{Y}$  большее, чем среднее  $0,5 (C_{2i} + C_{3i})$ , т. е. парабола будет иметь ветви, обращенные вниз. Если, например  $B_{13} < 0$ , то смешивание мелких зерен с крупными приведет к снижению  $\hat{Y}$  по сравнению со средним  $0,5 (C_{i1} + C_{i3})$ . Ясно, что при  $A_{ij} = B_{ij} = 0$  отклонения от линейности при смешивании не будет.

В модели (IV.18) 15 неизвестных коэффициентов, для определения которых по экспериментальным данным был синтезирован в системе СОМРЕХ (см. гл. VI) специальный план. План был синтезирован как насыщенный и содержал лишь 15 опытов. Использование насыщенного плана при стандартном полиномиальном квадратичном моделировании, т. е. при замене  $v_i$  и  $w_i$  восемью независимыми факторами  $x_i$  — отношениями основных комбинаций наполнителя между собой, — привело бы к необходимости поставить 45 опытов.

Предварительная обработка результатов исследования 15 составов наполнителя при разных  $\epsilon$  показала (рис. IV.7, а), что эффективная вязкость  $\eta^*$  зависит от  $v_i$  и  $w_i$  только при малых скоростях деформации  $\epsilon < 9 \text{ с}^{-1}$ , а в остальном диапазоне с точностью до 2,5% описывается функцией  $\eta^* = 100,27 (\epsilon)^{-0,999}$ , близкой по структуре модели для псевдопластичного течения, успешно использованной при исследовании полимерсодержащих композитов в Болгарской АН [44, II, с. 31]. Наибольший научный и практический интерес представляет модель (IV.19) для малых скоростей деформаций  $\epsilon = 1 \text{ с}^{-1}$

$$\begin{aligned} \ln \eta^* = & -1,964v_1v_2 + 2,713v_1v_3 - 0,935v_2v_3 - \\ & -2,587w_1w_2 - 3,377w_1w_3 - 0,323w_2w_3 + \\ & + 3,140v_1w_1 + 3,484v_1w_2 + 3,742v_1w_3 + \\ & + 4,178v_2w_1 + 3,782v_2w_2 + 3,891v_2w_3 + \\ & + 3,002v_3w_1 + 4,120v_3w_2 + 3,523v_3w_3. \end{aligned} \quad (\text{IV.19})$$

Для интерпретации модели (IV.19) используется прием анализа реологических характеристик, предложенный в [63, III, с. 20]. Согласно этой методике каждый «смесевой» треугольник, например  $\Sigma v_i = 1$ , отражается в определенных точках другого смесового треугольника  $\Sigma w_i = 1$  (или соответственно  $\Sigma w_i = 1$  на треугольнике  $\Sigma v_i = 1$ ). Достаточно рассмотреть таких точек семь — три в вершинах треугольника, три в серединах сторон и одну — в центре тяжести треугольника (все они центроиды). Процедуру построения графических образов системы «смесь — смесь — свойство» для обеспечения полноты интерпретации целесообразно проводить в обоих вариантах.

Переход от модели (IV.19) к треугольной диаграмме осуществляется подстановкой соответствующих координат другой группы смесевых факторов. На рис. IV.7, б построена диаграмма для анализа влияния зернового состава  $\Sigma w_i = 1$  на вязкость полимерсодержащего композита на полиминеральном наполнителе с равными долями кварца и цемента  $v_1 = v_3 = 1/2$  при  $v_2 = 0$ . Подстановка этих фиксированных координат  $v_i$  в модель (IV.18) приводит ее к виду

$$\hat{Y} = D_1w_1 + D_2w_2 + D_3w_3 + B_{12}w_1w_2 + B_{13}w_1w_3 + B_{23}w_2w_3, \quad (\text{IV.20})$$

где  $D_i$  — имеют вышеуказанный физический смысл и вычисляются как

$$\left. \begin{aligned} D_1 &= \sum_{i=1}^3 C_{i1}v_i + \sum_{i < j} A_{ij}v_i v_j; & D_2 &= \sum_{i=1}^3 C_{i2}v_i + \sum_{i < j} A_{ij}v_i v_j; \\ D_3 &= \sum_{i=1}^3 C_{i3}v_i + \sum_{i < j} A_{ij}v_i v_j. \end{aligned} \right\} \quad (\text{IV.21})$$

Таким образом, получена модель

$$\begin{aligned} \ln \hat{\eta}^* \{v_1 = v_3 = 1/2\} = & 3,479w_1 + 4,480w_2 + 4,310w_3 - 2,587w_1w_2 - \\ & - 3,347w_1w_3 - 0,323w_2w_3, \end{aligned} \quad (\text{IV.22})$$

которая в любом сечении, проходящем через вершины треугольника, описывает параболическое изменение  $\ln \eta^*$ . Так, каждая из сторон (от угла  $j$  к углу  $i$  с учетом  $\sum w_i = w_1 + w_2 + w_3 = 1$ ) описывается параболой (IV.23) с экстремумом в точке (IV.24), достигающем величины (IV.25)

$$\hat{Y}(i-j) = D_j + (D_i - D_j + B_{ij})w_i - B_{ij}w_i^2, \quad (\text{IV.23})$$

$$w_{i.\text{ext}} = (D_i - D_j + B_{ij}) : 2B_{ij}, \quad (\text{IV.24})$$

$$\hat{Y}(i-j)_{\text{ext}} = D_i + (D_i - D_j + B_{ij})^2 : 4B_{ij}. \quad (\text{IV.25})$$

По каждой из медиан, выходящей из  $i$ -го угла, описание также параболическое

$$\begin{aligned} \hat{Y}\{\triangleleft i\} = & 0,25(2D_j + 2D_k + B_{jk}) + \\ & + 0,5[(2D_i - D_j - D_k) + (B_{ij} + B_{ik} - B_{jk})]w_i + \\ & + 0,25(B_{jk} - 2B_{ij} - 2B_{ik})w_i^2. \end{aligned} \quad (\text{IV.26})$$

Формулы (IV.23)...(IV.26) дают возможность легко построить геометрический образ для моделей типа (IV.20) и определить координаты наиболее характерных точек. При «переносе» трехкомпонентной диаграммы  $\sum w_i$  в любую точку диаграммы  $\sum v_i$  коэффициенты  $B_{ij} = \text{const}$ , а следовательно, форма для парабол (IV.23) и (IV.26) инвариантна — парабола лишь «скользит» по плоскости  $\hat{Y}-w_i$  [16, с. 70].

На рис. IV.7, в изображена диаграмма для анализа влияния минералогического состава  $\sum v_i = 1$  на вязкость композита с наполнителем «равномерного» состава  $w_1 = w_2 = w_3 = 1/3$ . В отличие от диаграммы на рис. IV.7, б, отображающей сечения деформированного эллипсоида (в модели (IV.22) все оценки  $b_{ij} < 0$ ), она отражает гиперлоид

$$\begin{aligned} \ln \eta^* \{w_1 = w_2 = w_3 = 1/3\} = & 2,760v_1 + 3,255v_2 + 2,853v_3 - \\ & - 1,964v_1v_2 + 2,713v_1v_3 - 0,935v_1v_3. \end{aligned} \quad (\text{IV.27})$$

Полные диаграммы системы «смесь—смесь» представлены на рис. IV.7, г...д. Их анализ позволяет сделать ряд важных технологических выводов:

эффективная вязкость наполненного полимерного композита зависит не только от степени наполнения ( $\varphi = 60\% = \text{const}$ ), скорости деформации смеси ( $\dot{\epsilon} = 1 \text{ с}^{-1} = \text{const}$ ) и удельной поверхности наполнителя  $S$ , но и от *гранулометрического* и *минералогического* составов наполнителя:

за счет варьирования гранулометрии и минералогии заполнителя вязкость изменилась от 10,6 до 91,7 мПа·с, т. е. в 8,6 раза. При этом минимальная эффективная вязкость изменилась в 2,6 раза (27,7 : 10,6), максимальная — в 3,7 раза (91,7 : 24,5);

наиболее чувствительна к изменению гранулометрии вязкость смеси на клинкерном наполнителе (5,5 раза), наименее — на бинарной смеси «кварц + мрамор» (2,3 раза);

наиболее чувствительна к изменению *минералогии* вязкость смеси на наполнителях средней фракции (4 раза), наименее — на бинарной смеси мелких и крупных зерен (2,3 раза);

*наименее вязкие смеси* получены на *бинарных* ( $w_1+w_2$ ,  $w_1+w_3$ ) и *тройных* гранулометриях наполнителя кварцево-мраморного, клинкерного, кварцевого и клинкерно-мраморного составов;

регулирование одновременно гранулометрического и минералогического составов наполнителя позволяет получать смеси при *минимальном расходе энергии* на измельчение наполнителя, перемешивание и формование смеси.

Рекомендации по оптимизации наполненного полимерного связующего использованы при изготовлении полимербетонных конструкций на одном из предприятий НРБ.

## **§ 6. ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ПЕРЕРАБОТКИ ГЕРМЕТИКА ЗА СЧЕТ ИЗМЕНЕНИЯ ЕГО РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ УЛЬТРАЗВУКА**

Задача герметизации стыков в сборном строительстве актуальна, так как от ее разрешения зависит надежность объекта в целом и его способность выполнять функциональное назначение. Абсолютное большинство герметиков — полимерсодержащие композиты, для управления реологическими свойствами которых целесообразно в период их укладки в стыки применять высокочастотные колебания, не ухудшающие, подобно большинству растворителей и пластификаторов, сохранности эксплуатационных свойств композитов во времени.

Технология герметизации стыков строительных конструкций вулканизирующимися герметиками предусматривает приготовление рабочего состава мастики и наполнение туб на специальной установке, заполнение швов с помощью переносных инструментов. Использование ультразвуковых насадок, устанавливаемых на выходные сопла установок и инструментов, позволяет создавать в зоне формирования высокочастотные периодические деформации сдвига. Это приводит к структурным изменениям материала, образованию пограничного слоя, обеспечивающего пристенное скольжение герметика и существенное снижение давления в формирующей головке. Снижение внешнего трения при подведении ультразвуковых вибраций позволяет интенсифицировать процесс, уменьшить затраты мощности для достижения заданного значения вязкости материала, улучшить качество изделия и т. п.

Опытно-промышленное применение ультразвуковой насадки на установке, используемой как для заделки швов гидромелиоративных сооружений, так и для наполнения туб герметиком, показало, что можно существенно изменять физико-механические, реологические, эксплуатационные характеристики материала. Герметик, приготовленный на основе жидкого полисульфидного каучука, состоит из двух паст: герметизирующей и отверждающей. После их смешения при нормальной температуре за  $\tau=1-6$  ч он превращается в эластичную резину. Оценка влияния ультразвука на реологические свойства герметика ( $P_m\{\tau\}$ ) и оптимизация подводимой мощности ультразвуковых коле-

баний ( $X_1 = (4 \pm 1)$  кВт), скорости прохождения герметика в насадке ( $X_2 = (1,87 \pm 1,17)$  с<sup>-1</sup>), толщины обрабатываемого слоя материала ( $X_3 = (4 \pm 2)$  мм) показывают пути интенсификации процесса.

Наибольший практический интерес представляет комплекс моделей для оценки *производительности установки* при подаче ультразвука  $Q_{y_3} = f(x_1, x_2, x_3)$  и без таковой  $Q_0 = f(x_2, x_3)$ , а также *прироста производительности*

$$\Delta Q_{y_3} = f(x_1, x_2, x_3) - f(x_2, x_3) = 35,8 - 5,0x_1 - 4,8x_1 - 5,8x_1x_2 + + 16,0x_1x_3 + 18,1x_1x_2x_3 + 6,5x_3 - 7,4x_2^2 + 3,4x_2x_3 - 13,9x_3 + 2,1x_3^3. \quad (IV.28)$$

Из решения оптимизационных задач следует, что максимальная  $Q_{y_3} = 178$  г/мин достигается при  $x_1 = x_2 = x_3 = +1$ . Это на *45% выше, чем без использования ультразвука*  $Q_0$  (при  $x_2 = x_3 = +1$ ). Однако максимальный прирост по (IV.28) достигается при меньших энергетических затратах  $x_1 = -1$  (при  $x_2 = +1$ ). Такие уровни факторов ультразвукового воздействия благоприятны и для комплекса показателей качества герметика  $Y_0$  и  $Y_a$ .

## Глава V. УПРАВЛЕНИЕ КАЧЕСТВОМ КОМПОЗИТОВ И МАТЕРИАЛЬНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ РЕСУРСАМИ ИХ ПРОИЗВОДСТВА С ПОМОЩЬЮ ХИМИЧЕСКИХ ДОБАВОК

### § 1. ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Управление физико-химическими явлениями, происходящими на поверхности раздела фаз [42, 46, 62, 75], невозможно без изменения энергетического баланса систем. Широко применяющиеся в практике технологические воздействия (тепловые, механические и т. п.) хотя и эффективны, но энергоемки. Прогрессивное направление — введение в композиты химических добавок (ХД), которые позволяют направленно менять реологию смесей на стадии перемешивания и формования, воздействовать на процессы структурообразования, модифицировать наполнители, повышать гидрофобность и долговечность готовых изделий и т. п. Особое значение ХД приобретают при решении таких актуальных задач:

А. *Уменьшение энергоемкости* технологических процессов как на стадии приготовления технологических смесей и формования изделий из них (за счет создания оптимальных реологических характеристик смесей — см. гл. IV), так и на стадии переходных процессов без увеличения времени их протекания за счет ускорения структурообразования.

Б. *Использование* в композитах отходов и побочных продуктов промышленности [36], загрязняющих окружающую среду, и *уменьшение расхода дефицитных компонентов* без ухудшения конечных свойств материала.

В последнее двадцатилетие началось массовое применение ХД при интенсивном *расширении их номенклатуры*, в т. ч. за счет создания *суперпластификаторов* СП [10, 33, 56, 57] и *многокомпонентных*

добавок полифункционального воздействия на бетон, а также за счет привлечения в качестве добавок или их компонентов отходов побочных продуктов химической, фармацевтической, легкой, пищевой промышленности [22, 23, 44, 56, 63]. На основе научных достижений по изучению физико-химического действия ХД на процессы структурообразования и на конечные свойства бетонов [23, 44, 46, 61, 75]

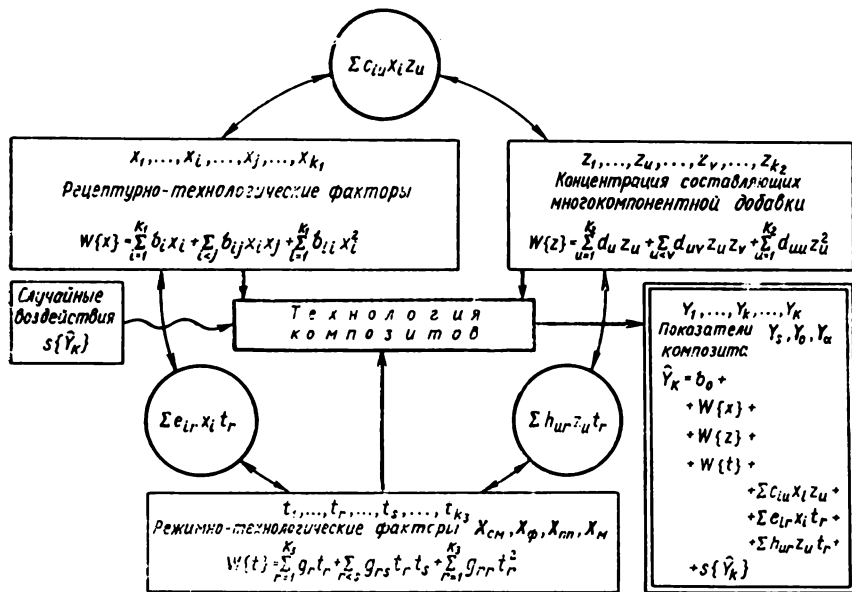


Рис. V.1. Структурная схема технологической системы с введением химических добавок в композит и описывающей ее полиномиальной модели.

технолог может выбрать необходимую ему группу добавок, оценить наиболее рациональную область их применения с учетом основных рецептурно-технологических факторов  $X$ , определить направление и ориентировочные пределы изменения свойств бетона  $Y$  и т. п. Однако для получения количественных оценок с приемлемым для данного производства доверительным интервалом  $Y_j \pm \Delta Y_j$ , а тем более для получения зависимостей  $Y_j = fX$  для управления технологическими процессами и оптимизации рецептуры композитов необходимы многочисленные дополнительные данные.

В силу неполноты знаний о механизме воздействия на показатели бетона большинства индивидуальных ХД, усложнением физико-химических систем при введении многокомпонентных добавок, нестабильностью состава отходов промышленности, зависимостью результата воздействия добавок от уровней других рецептурно-технологических факторов, как показывает многолетний опыт [16, 17, 18, 23, с. 14], наиболее эффективно такие системы анализируются, управляются и оптимизируются на основе математических моделей.

На рис. V.1 в развитии общей блок-схемы (см. схему I.1) показана структурная схема технологической системы с введением в

композит (в частности, бетон) многокомпонентных химических добавок, в которой выделены три группы детерминированных факторов и случайные воздействия [17, с. 5].

В первую группу объединены факторы из подсистем  $X_c$  и  $X_p$  (см. схему I.1), характеризующие химический и минералогический составы, гранулометрию и другие свойства связующих, наполнителей, заполнителей, а также соотношения между ними, без которых *получение материала невозможно*. Для решения технико-экономических задач в число моделируемых факторов целесообразно включать расход цемента, полимера или другого связующего. Этот расход, при условии постоянства уровня качества продукции, необходимо минимизировать.

В специальную группу из подсистем  $X_c$  и  $X_p$  выделены *добавки*: электролиты, поверхностно-активные вещества (ПАВ), высокомолекулярные соединения (ВМС) и т. д., концентрации которых обычно свободно оптимизируются. На поисковом этапе (ЭП) в модели целесообразно учитывать и введение местных *отходов* промышленности для решения задачи о возможности их утилизации (при заданном уровне качества бетона концентрация отходов максимизируется). На этапе ЭП рекомендуется вводить в модель и лучшие по воздействию на бетон добавки (даже в том случае, когда по технико-экономическим соображениям вероятность их немедленного практического применения на данном предприятии невелика), что позволяет оценить перспективные пути внедрения новых технических решений.

В третью группу  $t$  объединены *режимно-технологические* факторы  $X_{cm}$ ,  $X_\phi$ ,  $X_{np}$ ,  $X_m$  и др. (см. схему I.1), среди которых особое значение имеют *продолжительность* технологических этапов и их *энергоемкость*, которые необходимо минимизировать.

Структура квадратичной модели (см. рис. V.1) позволяет учесть влияние на показатели качества  $Y$  всех исследуемых факторов, а также случайных воздействий с помощью дисперсии предсказания  $s^2\{Y\}$  (I.12). Кроме того, модель учитывает взаимное влияние факторов как внутри групп  $\sum b_{ij}x_i x_j$ ,  $\sum d_{uv}z_u z_v$ ,  $\sum g_{rst}t_s$ , так и между ними ( $\sum c_{iu}x_i z_u$ ,  $\sum e_{ir}x_i t_r$ ,  $\sum h_{ur}z_u t_r$ ), что позволяет максимально приблизить результаты моделирования к поведению реальной технологической системы. Опыт моделирования таких систем показывает, что абсолютные числовые оценки основных эффектов ( $b_i$ ,  $b_{ii}$ , ...,  $g_{rr}$ ) и эффектов взаимодействия ( $b_{ij}$ , ...,  $h_{ur}$ ) имеют один порядок, потому что *оптимальный состав* многокомпонентной *добавки* ( $z_{1opt}$ , ...,  $z_{k_{2opt}}$ ) является *переменным для каждой технологической зоны* ( $x_1$ , ...,  $x_{k_1}$ ,  $t_1$ , ...,  $t_{k_2}$ ). На основании этого опыта сформулированы [17, с. 7; 52, № 3, с. 12] и другие методические рекомендации, обеспечивающие эффективность моделирования систем с химическими добавками. В частности:

1. Оптимизация состава ХД по линейным моделям или моделям со смешанными оценками парных взаимодействий не имеет смысла, поскольку все  $z_u$ , как правило, связаны эффектами взаимодействия  $d_{uv}$ . Особенно опасны часто встречающиеся [63, III, с. 24; 63, III,

с. 75] попытки анализа системы по моделям со смешанными эффектами [1, с. 97; 50, с. 87], поскольку по ним нельзя определить (без дополненной информации о механизме процесса), о каком конкретно из смешанных эффектов идет речь. Так, например, при плане — полуреплике  $2^{4-1}$  с определяющим контрастом  $x_1x_2x_3x_4=1$  совместные оценки связаны соотношениями  $x_1x_2=x_3x_4$ ,  $x_1x_3=x_2x_4$  и  $x_1x_4=x_2x_3$ , из которых в моделях, построенных по таким планам, можно на выбор фиксировать левую или правую часть каждого неравенства. Следовательно, если в такой модели получены значимые оценки  $b_{12}=+10$ ,  $b_{13}=+20$  и  $b_{14}=-15$  (а такой набор индексов наиболее типичен), то это соответственно и оценки  $b_{34}$ ,  $b_{24}$  и  $b_{23}$ . Поэтому в результате моделирования остается открытым вопрос: «Управлять ли фактором  $x_1$ , учитывая  $x_2$ ,  $x_3$  и  $x_4$ , или факторами  $x_2$ ,  $x_3$  и  $x_4$ , не учитывая  $x_1$ »? На поисковом этапе необходимо использовать или насыщенные квадратичные планы на кубе [16] или на призмах (см. § 3 гл. VI) с включением в модель факторов всех групп  $x$ ,  $z$ ,  $t$ .

2. Нижний уровень варьирования добавок  $z_u=-1$  целесообразно (а на этапе ЭП — обязательно) совмещать с нулевой концентрацией добавки  $Z_u=0$ . При этом по одной модели при подстановке разных сочетаний  $z_u=z_v=-1$  анализируются один бездобавочный композит,  $K_2$  композитов с индивидуальными добавками,  $C^2K_2$  — с парными ХД,  $C^3K_2$  — с тройными ХД и т. д. Так, например, для четырех компонентов добавки  $A+B+C+D$  будут исследованы по одной модели [16, с. 243] дополнительно 14 композитов ( $A, B, C, D, AB, AC, AD, BC, BD, CD, ABC, ABD, ACD, BCD$ ). Если  $Z_u=0$ , то можно для любого промежуточного значения  $0 \leq Z_{пр} \leq Z_{max}$  (наиболее полезного из априорной информации) получить  $z_{пр}=0$  при  $z_{max}=+1$ , используя специальную нелинейную нормализацию по (VI.14).

Эти методические рекомендации использованы при анализе и оптимизации рецептурно-технологических решений для композитов с разными добавками (индивидуальными и многокомпонентными, жидкими и твердыми, специальными продуктами и отходами промышленности и т. п.). Четыре наиболее характерные задачи рассмотрены ниже.

## § 2. ОЦЕНКА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ И ЭФФЕКТИВНОСТИ НОВЫХ ДОБАВОК ПО ПОКАЗАТЕЛЯМ КАЧЕСТВА КОМПОЗИТА

При синтезе новых суперпластификаторов в СССР достигнуты значительные успехи [10, 56, 57]. Однако стоимость этих добавок высока. Поэтому одна из актуальных задач технологии СКМ — поиск путей получения СП из побочных продуктов промышленности, в частности нефтехимии. Так, получение этилена сопровождается выходом побочного продукта в виде смеси ароматических углеводородов, бензольных смол и асфальтенов с непостоянным соотношением фракций. Данный продукт после сульфирования [84] обладает достаточно сильным поверхностно-активным эффектом и растворяется в воде, что позволяет рассматривать его как пластифицирующую добавку в бетон. Однако непостоянство состава исходного сырья



отражается на растворимости и химическом составе добавки. Роль этих колебаний должна сглаживаться при введении химических добавок (ХД) в бетон в оптимальном переменном количестве. Исходя из данной гипотезы, было принято решение об экспериментально-статистической оптимизации режимов получения добавки \* из побочных продуктов нефтепереработки, главным образом, по критериям качества бетона:  $OK$  — осадка конуса бетона постоянного состава с добавкой по ГОСТ 10181.1—81 ( $OK_{\text{норм}} \geq 20$  см);  $R_1^T$  —

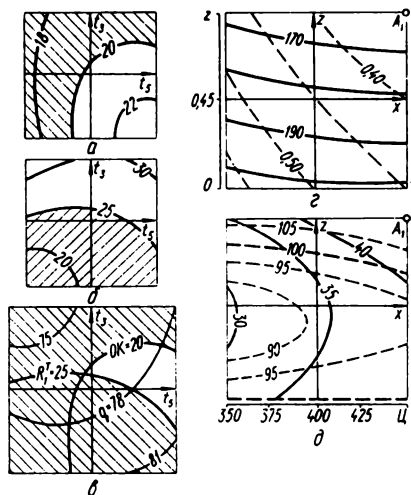


Рис. V.2. Выбор периода сульфирования  $t_3$  и времени процесса  $t_5$  при получении из нефтепродуктов добавки по условиям  $OK \geq 20$  см (а),  $R_1^T \geq 25$  МПа (б) и по максимуму выхода продукта  $q$  в компромиссной зоне (в); изолинии  $B$  ( $z$  — сплошные),  $B/C$  ( $z$  — штриховые),  $R_{28}^n$  (д — сплошные) и  $\kappa(R_{28}^n)$  (д — штриховые) для добавки СНП.

терий, устанавливаемый ее производителем:  $q$  — глубина выхода сульфопродукта (максимизируется доля растворившегося в воде вещества в процентах массы исходного сырья).

Из совокупности факторов, гипотетически определяющих скорость реакции и выход сульфопродуктов  $q$ , было отобрано семь, уровни которых варьировались по плану  $R_7$  [16, с. 127]. После индивидуальной оптимизации каждого из критериев  $OK$ ,  $R_1^T$ ,  $q$  было принято решение о стабилизации пяти факторов на плезиоптимальных уровнях [16, с. 68] и анализе ситуации в зависимости от двух факторов, характеризующих этап дозирования и смешения: периода сульфирования  $t_3$  и суммарного времени продолжительности процесса  $t_5$  (рис. V.2, а...в). Подвижность бетонной смеси  $OK$  возрастает по мере увеличения  $t_5$  и сокращения периода контакта углеводородного сырья с концентрированной серной кислотой  $t_3$ . Однако оптимум  $R_1^T$

прочность на сжатие бетона после тепловлажностной обработки (ТВО), которая должна быть  $R_1^T \geq 25$  МПа и др. Кроме критериев, установленных потребителем добавки, учитывался и кри-

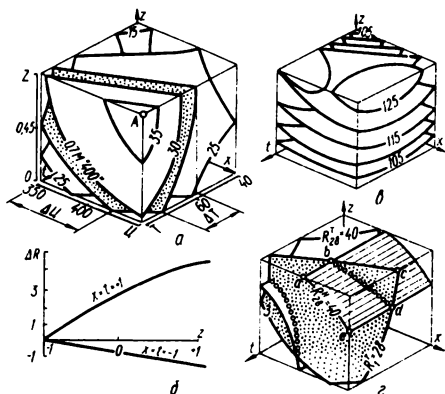


Рис. V.3. К оценке экономии ресурсов от введения СНП: изоповерхности  $R_1^T$  (а), прирост  $\Delta R = \Phi(z)$  при разных  $x$  и  $t$  (б), изоповерхности  $\kappa(R_1^T, z)$  (в) и выделенные (г) зоны а—б—с—д, в которой  $R_{28}^n \geq R_{28}^T \geq R_1^T$ .

\* Экспериментальные работы выполнены совместно с инж. Д. Н. Шабановым.

находится в другой части факторного пространства, причем  $R_{1T}$  обладает повышенной чувствительностью к изменению фактора  $t_3$  (прочность возрастает на 25—30% при увеличении периода сульфирования на 11—13 мин). Учет ограничений  $OK \geq 20$  см и  $R_{1T} \geq 25$  МПа выявляет область, удовлетворяющую требованиям потребителя (на рис. V.2, в не заштрихована). При этом растворимость сульфированного нефтепродукта (СНП) составляет 78—80%.

На втором этапе были проведены детальные исследования влияния новой добавки, названной «СНП», на свойства бетонов из равноподвижных смесей ( $OK=4 \div 6$  см) в зависимости от изменения расхода цемента ( $\Pi = X = (400 \pm 50)$  кг/м<sup>3</sup>), концентрации добавки ( $Z = (0,45 \pm 0,4)$  % массы вяжущего) и температуры изотермической выдержки ТВО ( $T = 60 \pm 20$ ) °С). Исследования включали как получение типовых решений по методикам, описанным в § 6 гл. I (для них ниже приводится номер соответствующей задачи), так и специфический для данного класса объектов анализ.

Трехфакторная ситуация для  $x, z, t$  исследовалась по плану  $B_3$  (см. табл. I.5), а двухфакторная для  $x$  и  $z$  (анализ свойств технологических смесей и прочности бетонов нормального твердения  $R_{28}^n$ ) — по плану  $B_2$ , возникающему из  $B_3$  при исключении  $t$  (особенности таких экспериментов обсуждены в [44, III, с. 489]).

Один из основных критериев эффективности добавок ПАВ — способность понижать водопоглощаемость бетонной смеси В, что влечет за собой улучшение структуры порового пространства цементного камня и всего бетона [6, 7, 68, 83].

Введение СНП в максимальных дозировках снижает показатель В (рис. V.2, г) на 18..20% по сравнению с эталонным бетоном  $B_3$  (определена аналогично задаче 7). С увеличением расхода цемента эффект несколько возрастает, что можно объяснить снижением трения в системе за счет увеличения слоя цементного теста на зернах заполнителя [7]. Водоцементное отношение (см. рис. V.2 — штриховые линии) снижается до 0,35..0,45 с введением СНП, минимум В/Ц достигается при  $Z=0,9\%$  и  $\Pi_{\max}$  в точке  $A_1$ . Уменьшение В/Ц повышает прочность структуры вследствие увеличения концентрации дисперсной фазы и степени уплотнения системы [75], что подтверждается моделью (V.1) прочности на сжатие  $R_{28}^n$  бетона 28-суточного возраста (рис. V.2, д)

$$R_{28}^n = 35,0 + 3,6x - 1,1x^2 + 1,3z + 3,9z^2 + 0,4xz. \quad (V.1)$$

Максимальное значение показателя  $R_{28}^n = 44,3$  МПа отмечено в той же точке  $A_1$ . Новый технологический вывод следует из рассчитанной по методике задачи 9 модели относительной эффективности  $\chi\{R_{28}^n, z\}$  (на рис. V.2, д обозначена штрихом)

$$\chi\{R_{28}^n, z\} = 1 + \frac{(3,6 + 0,4x) + (1,3z + 3,9z^2 + 0,4xz)}{32,6 + 3,2x - 1,1x^2}. \quad (V.2)$$

При повышенных расходах цемента ( $400 \leq \Pi \leq 450$  кг/м<sup>3</sup>) целесообразно применять СНП, начиная с дозировок  $Z = 0,55 \div 0,60$  %; при

$C \leq 373 \text{ кг/м}^3$  эффективность соединения проявляется лишь при  $Z \geq \leq 0,67 \%$ , что указывает на необходимость применять добавку в повышенных концентрациях. По модели (V.2) установлено, что за счет дозировки  $Z=0,9 \%$ , при обеспечении нормативной прочности  $R_{28\text{норм}}^n=40 \text{ МПа}$ , возможно *сокращение расхода* цемента на  $50 \text{ кг/м}^3$ .

Влияние СНП на свойства бетона после ТВО исследовалось по трехфакторным моделям типа (I.26). Исоповерхности модели прочности бетона  $R_1^T$  показаны на рис. V.3, а. Максимальная прочность  $R_1^T=37,6 \text{ МПа}$  отмечена в точке  $A_2$ . По методике задачи 10 определено, что при  $x=t=-1$  любое увеличение концентрации СНП может привести к снижению прочности бетона (рис. V.3, б). Однако при повышенных значениях  $C$  и  $T$  в области пространства, близкой к  $x=t=+1$ , введение переменной оптимальной концентрации добавки (определена по задаче 4) ведет к повышению  $\Delta R_1^T$ , что открывает возможности для *экономии цемента* и *снижения температуры* ТВО. Так, при обеспечении нормируемой  $R_1^T\text{норм}=28 \text{ МПа}$  (см. рис. V.3, а) возможна максимальная экономия  $\Delta C=75 \text{ кг/м}^3$  (при  $T=80^\circ\text{C}$ ), а при  $C=450 \text{ кг/м}^3$  — снижение температуры на  $17^\circ\text{C}$ .

Анализ модели относительного прироста прочности  $\kappa\{R_1^T, z\}$  (рис. V.3, в), рассчитанной как дробно-рациональная функция типа (V.2), показал, что максимум эффективности СНП (125...128 %) обеспечивается только при повышенных значениях  $C \geq 415 \text{ кг/м}^3$ , причем изменение  $T$  не оказывает существенного влияния на параметр  $\kappa\{R_1^T, z\}$ . Однако при переходе на малоцементные бетоны влияние температуры более заметно (при  $C=350 \text{ кг/м}^3$  добавка наиболее эффективна при  $T=65 \div 80^\circ\text{C}$ ). При повышенных концентрациях с уменьшением значений  $C$  и  $T$  эффективность добавки резко снижается.

По данным на рис. V.2,  $\delta$  можно в трехфакторном пространстве  $(x, z, t)$  построить изоповерхность  $R_{28}^n=40 \text{ МПа}$  (за счет переноса соответствующей изолинии в плоскости  $\{x, z\}$  параллельно оси  $t$ ) и рассмотреть ее совместно с изоповерхностью  $R_1^T=40 \text{ МПа}$ . Это позволяет оценить влияние температуры на изменение прочности бетона во времени (совмещение изоповерхностей показано на рис. V.3, з). Если в этом пространстве рассмотреть дополнительно изоповерхность  $R_1^T=28 \text{ МПа}$  (0,7 марки 400), то можно определить область  $\{abcde\}$ , где *гарантированно выполняется условие*  $R_{28}^n \geq R_1^T \geq \geq 0,7R_{28}^n$  ( $R_1^T$ ). Совместный анализ изоповерхности  $R_{28}^n=40 \text{ МПа}$  и  $R_1^T=28 \text{ МПа}$  показывает, что в зоне средних концентраций добавки и повышенной температуры для малоцементных бетонов появляется «запрещенная» область, где  $R_{28\text{норм}}^n$  не обеспечивается.

Для прогнозирования эксплуатационных свойств бетонов целесообразно проанализировать *параметры структуры*  $Y_3$ ; в частности параметры порового пространства. Они играют определяющую роль в формировании таких важных и взаимосвязанных показателей, как водопоглощение  $W$  и морозостойкость бетона [6, 7, 41, 46, 68, 83]. Показатель  $W$ , определенный по методике ГОСТ 12730.4—78, позволяет расчетным путем оценить два параметра порового пространства, характеризующих [83, с. 25] «однородность пор по размерам»  $\alpha$  и «средний размер пор»  $\lambda$ . На возможность управления с помощью

рецептурно-технологических факторов величинами  $\alpha$  и  $\lambda$  указано в работе [83], однако имеющаяся информация крайне ограничена. Поэтому далее достаточно подробно показана (рис. V.4) последовательность анализа изоповерхностей моделей  $W$ ,  $\alpha$ ,  $\lambda$  и их относительных значений  $\kappa$  в факторном пространстве  $x$ ,  $z$ ,  $t$ .

Как видно из анализа изоповерхностей, водопоглощение бетона  $W$  (рис. V.4, а) снижается от 4,4...4,7% до 3,3...3,7% по массе, что

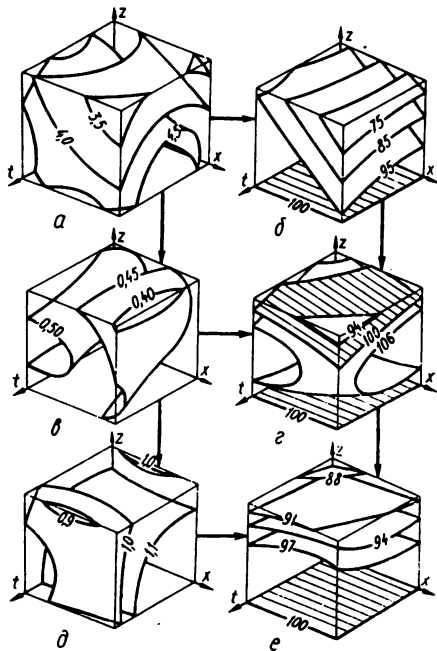


Рис. V.4. Схема анализа изоповерхностей моделей параметров пористой структуры  $\alpha$  и  $\lambda$ , определяемых по водопоглощению  $W$ :  $W$  (а),  $\kappa\{W, z\}$  (б),  $\alpha$  (в),  $\kappa\{\alpha, z\}$  (г),  $\lambda$  (д) и  $\kappa\{\lambda, z\}$  (е).

свидетельствует о повышении плотности бетона при введении добавки СНП, причем минимальные значения  $W$  находятся в зоне как низких, так и высоких температур ТВО при повышенных расходах цемента. Более четко прослеживается влияние факторов  $x$ ,  $z$ ,  $t$  по изоповерхностям относительного уменьшения водопоглощения  $\kappa\{W, z\}$  (рис. V.4, б). На эту величину изменение температуры ТВО влияния не оказывает, а значительный эффект от введения СНП проявляется лишь при повышенных расходах цемента.

Анализ модели  $\alpha$  (рис. V.4, в) показал, что однородность размера пор с увеличением расхода цемента и концентрации СНП изменяется в пределах исследуемой области от 0,56 до 0,47. Роль температуры в изменении показателя  $\alpha$  существенна лишь для малоцементных бетонов. Сложный характер влияния рецептурно-технологических факторов на изменение показателя дифференциальной пористости  $\alpha$  иллюстрируют изоповерхности модели  $\kappa\{\alpha, z\}$  (рис. V.4, г) по которым, в частности, установлено, что с увеличением температуры ТВО эффект от добавки возрастает в большей мере для бетонов с повышенным содержанием цемента. При  $Z=0,65 \div 0,90\%$  существует область (заштрихована), сдвиг от которой в сторону пониженных  $\alpha$  и  $T$  ведет к формированию более однородной поровой структуры, так как в этих условиях  $\alpha$  (рис. V.4, в) стремится к единице (при  $\alpha=1$  капиллярно-пористое тело становится монокапиллярным [83]).

Снижение показателя среднего размера пор  $\lambda$  (рис. V.4, д) с повышением температуры ТВО может иметь обоснованную по [6, 83] интерпретацию: с повышением скорости гидратации быстрее заполняются новообразованиями капиллярные поры. Эти процессы протекают менее интенсивно в бетонах, твердеющих при пониженной температуре.

Как видно на рис. V.4,  $\delta$ , добавка СНП обладает способностью модифицировать структуру порового пространства цементного камня: эффект от введения повышенных концентраций  $Z$  равнозначен влиянию температуры на показатель  $\lambda$ . Анализ модели  $\kappa \{\lambda, z\}$  (рис. V.4,  $e$ ) показал, что для уменьшения среднего размера пор в бетоне целесообразно применять лишь повышенные концентрации добавки, причем на величину  $\kappa \{\lambda, z\}$  изменение уровней  $T$  и  $\Pi$  влияния не оказывает.

Далее выявляются закономерности влияния параметров структуры на основные свойства бетонов для целенаправленного управления качеством материала. Так, видна тесная корреляционная связь между водопоглощением бетона  $W$ , особенно  $\kappa \{W, z\}$ , (см. рис. V.4,  $a...б$ ) и В/Ц (см. рис. V.2,  $\delta$ ). Это дает возможность с достаточной точностью прогнозировать водопоглощение бетона  $W$ . На рис. V.2  $\delta$  и рис. V.4,  $в$  видно, что характер изменения  $R^{n_{28}}$  подобен изменению параметра структуры  $\alpha$  (вне зависимости от изменения температуры). Выявленные закономерности прослеживаются и при анализе моделей  $\kappa \{R^{n_{28}}, z\}$  (см. рис. V.2,  $\delta$ ) и  $\kappa \{\alpha, z\}$  (см. рис. V.4,  $г$ ). Минимальные значения  $\kappa \{\lambda, z\}$  характерны для высокого уровня  $T$  и  $\Pi$ . При этом параметр  $\kappa \{\alpha, z\}$  максимизируется, что свидетельствует о преимущественном влиянии однородности пор  $\alpha$  на прочность бетона  $R^T_1$  (см. рис. V.3,  $a$ ) после тепловлажностной обработки.

### § 3. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СУПЕРПЛАСТИФИКАТОРОВ ДЛЯ ПОИСКА ОПТИМАЛЬНЫХ МЕТОДОВ ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ТЕХНОЛОГИЮ И СВОЙСТВА БЕТОНА

При проектировании оптимальной технологии выбор из многообразия химических добавок конкретных веществ для эффективного управления процессами и качеством композитов — один из важных этапов работ, ошибочные решения на котором могут привести к существенным технико-экономическим потерям. Особое значение этот этап приобретает при выборе добавок типа суперпластификаторов (СП). Заключение о необходимости применения новых СП можно признать обоснованным лишь после комплексного исследования их влияния на основные (а в некоторых случаях и специальные свойства бетонов [10, с. 6]). В его состав обязательно входит *сравнительное исследование* данного СП с известными добавками этого класса. При этом сравнение должно проводиться *не в одной жестко фиксированной точке* факторного пространства и при изменении одного (пусть даже гипотетически главного, например, В/Ц или  $\Pi$  в бетоне) фактора, а *в некотором множестве технологических ситуаций* при одновременном изменении нескольких факторов. Полезность такого подхода следует из анализа особенностей технологических систем с введением химических добавок (см. § 1, гл. V). Однако следует еще раз подчеркнуть, как обоснование подхода, тот факт, что химические добавки действуют неодинаково в разных областях факторного пространства и их оптимальная концентрация переменна и зависит от  $x_i$  и  $t_r$ , а это определяет особые преимущества моделирования свойств композитов в задачах сравнения ХД перед традиционными «точечными» методами сопоставления результатов.

Принципы сравнения СП по моделям основаны на общей стратегии исследования новых КМ (см. § 5, гл. I) и учитывают как методические особенности моделирования ХД (см. § 1, гл. V), так и ряд дополнительных положений, позволяющих наиболее объективно определить рациональную область применения суперпластификаторов.

1. На стадии принятия решений сравнение проводится по моделям *размерности*  $K \leq 3$  с отображением их в плоскости  $(x, z)$  или в пространстве  $(x, z, t)$ . Для уменьшения количества опытов эксперимент с эталонным бетоном можно использовать при построении моделей показателей качества  $Y$  для всех сравниваемых добавок [44, 111, с. 489].

2. Для получения новой информации решают не только задачу об относительной эффективности по модели  $\kappa \{Y, z\}$  (см. § 6 гл. I), но и определяют границы зоны приоритета каждой из добавок по новому критерию — *индексу эффективности* ХД  $\chi \{Y_1, z_1, z_2\} = \kappa \{Y_1, z_1\} : \kappa \{Y_1, z_2\}$ , который тождественно равен единице для любых свойств эталонных композитов (несмотря на возможные отклонения расчетных значений  $Y_u$  по модели за счет описанных в § 2 гл. I источников «риска аналогии»).

3. Во всех случаях СП оценивают по способности *экономить* материально-энергетические ресурсы. Окончательное решение по добавке принимают с учетом ее стоимости в бетоне. В компромиссных ситуациях выбирают добавку, обеспечивающую максимально возможную экономию сырья и технологической энергии.

4. Полезно включать в ряд сравниваемых СП и добавки на основе отходов промышленности для определения возможности замены (без ущерба для качества материала) дефицитного соединения или его части.

Основные элементы этого подхода иллюстрируются примером сравнения по влиянию на свойства мелкозернистых бетонов из равноподвижных смесей в факторном пространстве  $x, t$  ( $\Pi = 560 \pm 80$  кг/м<sup>3</sup> и  $T = 60 \pm 20$  °С аналогично § 6 гл. I) известных СП: продукта конденсации нафталинсульфоокислоты С-3 ( $Z_1 = (0,35 \pm 0,35) \%$ ) и меламиноформальдегидных добавок БП-2 ( $Z_2 = (0,45 \pm 0,45) \%$ ), Melment-10L ( $Z_3 = (0,25 \pm 0,25) \%$ ) и Viscoment-V ( $Z_5 = (0,30 \pm 0,30) \%$ ). Особенности планирования эксперимента для решения задачи описаны в [44, III, с. 489].

Способность СП значительно снижать водопотребность В смесей широко используется в современной технологии для повышения качества бетонов [57]. Все сравниваемые добавки (рис. V.5, а...г) значительно снижают параметр В, причем нафталинформальдегидная добавка С-3 не уступает суперпластификаторам на меламиновой основе. С увеличением концентрации  $Z_1$  и  $Z_2$  водопотребность смеси снижается на 18...20%. За счет максимальных дозировок  $Z_3$  и  $Z_4$  можно снизить расход воды на 30...35 дм<sup>3</sup>/м<sup>3</sup>.

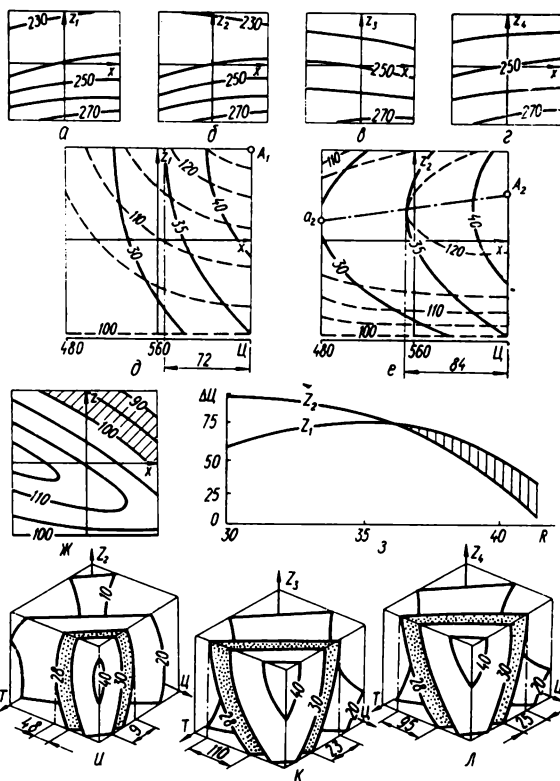
При снижении В (что ведет к уменьшению В/Ц) возможно при всех добавках, в т. ч.  $Z_1$  и  $Z_2$  (рис. V.5, д...е), получение бетона марки 400 и выше. Для С-3 максимум  $R^{n_{28}} = 45,3$  МПа в зоне эксперимента находится в точке  $A_1$  ( $x = +1, z = +1$ ), а повышение концентрации обеспечивает прирост прочности для всей гаммы бетонов ( $\kappa \{R^{n_{28}}$ ,

$z_1$ ) — см. штриховые линии на рис. V.5, д. В тех же условиях для БП-2 получена  $R_{28\max}^n = 43,3$  МПа в точке  $A_2$  с координатами  $x = +1$  и  $z_2 = +0,528$  (рис. V.5, е). Во всей факторной плоскости  $z_{2\text{opt}}$  (определена по методике задачи 5, описанной в § 6, гл. I) переменна и изменяется по линии  $a_2A_2$ . Снижение эффективности добавки  $\chi \{R_{28}^n, z_2\}$  (см. штриховые линии на рис. V.5, е) при дозировках, превышающих оптимальные, может объясняться [10, с. 6; 57, с. 10] увеличением толщины пленки олигомера, что ведет к блокированию процессов гидратации и снижению прочности бетонов в заданные сроки.

Границы области приоритета СП по показателю  $R_{28}^n$  определяются по модели индекса эффективности  $\chi \{R_{28}^n, z_2, z_1\} = \chi \{R_{28}^n z_2\} : \chi \{R_{28}^n, z_1\}$  (рис. V.5, ж).

В заштрихованной зоне при повышенных значениях  $Z$  и  $\text{Ц}$  преимущество по параметру  $R_{28}^n$  имеет С-3, однако БП-2 более эффективна при средних дозировках для малоцементных бетонов. Преимущество С-3 увеличивается

Рис. V.5. Сравнение группы суперпластификаторов по основным показателям качества и возможной экономии ресурсов.



чивается по мере возрастания расхода цемента и достигает максимума при  $Z=0,7$  и  $\text{Ц}=640$  кг/м<sup>3</sup>. В подобной ситуации для принятия окончательного решения используют критерии, связанные с экономией материально-энергетических ресурсов. Для поиска  $\Delta\text{Ц}$  (рис. V.5, д...е) используют методику задачи 6. При изменении требований к качеству бетонов (например, в связи с переходом на другую продукцию) экономическая эффективность будет меняться (рис. V.5, з): С-3 имеет приоритет по максимально возможной экономии цемента при получении бетонов марки 400 и выше.

В мировой практике отмечена тенденция к расширению области применения СП, в т. ч. за счет использования их для экономии ресурсов [57]. Применение всех добавок:  $Z_2$  (рис. V.5, и),  $Z_3$  (рис. V.5, к),  $Z_4$  (рис. V.5, л) и  $Z_1$  (рис. I.7, а), — может дать значительную экономию цемента и снижение температуры ТВО.

Далее в сравнительный анализ включена добавка СНП, полученная (см. § 2 гл. V) из отходов нефти. Сравнение ведется по отношению к базовой добавке С-3 ( $Z = (0,4 \pm 0,4) \%$ ), имеющей относительно низкую стоимость (из всех применяемых в настоящее время СП) по критериям  $\chi$  и  $\chi$ . Так, на рис. V.6, а показаны изоповерхности модели  $\chi \{R_{T_1}, \text{С-3}\}$ , которые исследуются совместно с моделью этого показателя для СНП (см. рис. V.3, в). Оба соединения обладают некоторыми общими свойствами:

при максимальных концентрациях в условиях повышенных температур и низких значений Ц эффективность добавок снижается. С повышением концентрации С-3 показатель относительной эффективности добавки по водопоглощению бетона  $\chi \{W, \text{С-3}\}$  (рис. V.6, б) возрастает в любой ситуации, в отличие от СНП (см. рис. V.4, б). На рис. V.6, в показана модель  $\chi \{R_{T_1}, \text{СНП}, \text{С-3}\}$ , где изоповерхность «100%» определяет примерное равенство показателя  $R_{T_1}$  для обеих добавок.

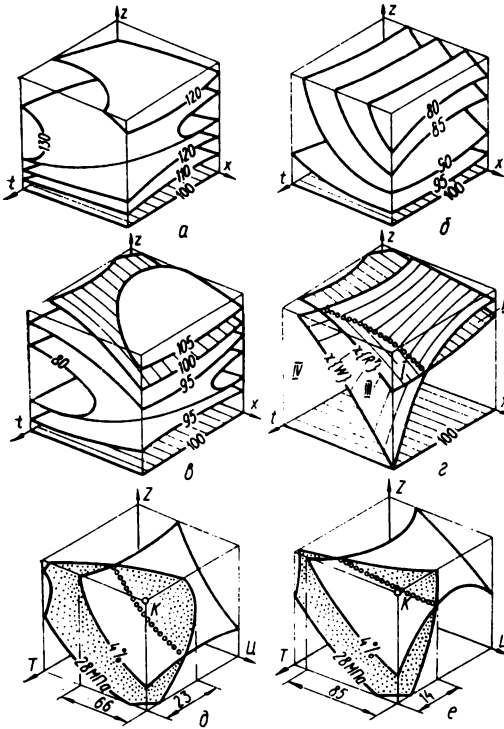


Рис. V.6. Изоповерхности параметров эффективности  $\chi \{R_{T_1}, \text{С-3}\}$  (а) и  $\chi \{W, \text{С-3}\}$  (б) и определение границ области рационального применения добавки по показателю  $\chi \{R_{T_1}\}$  (в) и по двум показателям  $\chi \{R_{T_1}\}$  и  $\chi \{W\}$  одновременно (г); возможная экономия Ц и Т при получении  $R_{T_1} \geq 28$  МПа и  $W \leq 4 \%$  для С-3 (д) и СНП (е).

Совместный анализ моделей  $\chi \{R_{T_1}, \text{СНП}, \text{С-3}\}$  и  $\chi \{W, \text{СНП}, \text{С-3}\}$  на рис. V.6, г показывает нетривиальность решения задачи выбора добавки хотя бы по двум свойствам:  $R_{T_1}$  и  $W$ . В пространстве существуют четыре области, где возможны следующие ситуации: I — преимущество СНП по  $R_{T_1}$  и  $W$ ; II — преимущество только по  $R_{T_1}$ ; III — преимущество только по  $W$ ; IV — приоритет С-3 по обоим показателям, что показывает необходимость оценивать добавки по максимально возможной экономии цемента и снижению температуры ТВО.

Для решения используются изоповерхности нормируемых свойств  $R_{T_1} \geq 28$  МПа и  $W \leq 4 \%$  для бетонов с добавками С-3 (рис. V.6, д) и СНП (рис. V.6, е). При традиционном сравнении при фиксированных факторах, например в точке К, условию задачи удовлетворяют обе добавки. Однако сравнение по экономии Ц и снижению Т во всей области заданных свойств показывает, что несмотря на преимущест-



ва СНП по экономии Ц, введение С-3 позволяет снизить температуру в большей степени при меньшей концентрации Z. При предъявлении дополнительных требований (например, по стойкости к агрессивным средам в условиях увлажнения и высушивания, морозостойкости) область компромиссных решений деформируется.

#### § 4. ОПТИМИЗАЦИЯ РЕЦЕПТУРЫ ГИПСОВЫХ КОМПОЗИТОВ ПРИ УТИЛИЗАЦИИ ОТХОДОВ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

К ряду изделий из гипсового вяжущего не предъявляются повышенные требования по механическим характеристикам. Так, материал для блоков межкомнатных перегородок размером  $80 \times 400 \times 600$  мм, широко применяемых в сборном строительстве жилых и общественных зданий, должен иметь пределы прочности на растяжение при изгибе  $R_{и.норм} \geq 1,7$  МПа и на сжатие  $R_{с.норм} \geq 3,5$  МПа при плотности  $\rho \leq 1100$  кг/м<sup>3</sup>. Производство таких изделий из чистого гипсового камня нельзя признать рациональным, поскольку требуемые показатели можно получить и у *композиционных гипсовых материалов*, в которых в качестве наполнителя использованы *отходы* промышленности. При этом будет одновременно решено несколько народнохозяйственных задач, в частности, возрастет объем выпуска строительной продукции (межкомнатных перегородок) при постоянном расходе гипсового вяжущего и будут утилизированы отходы, загрязняющие окружающую среду. Исходя из региональных условий производства, в качестве наполнителей для гипсовых композитов в поисковых исследованиях использовались кремнегель, зола-унос ТЭС, перлитовый песок и другие тонкодисперсные материалы [21].

При производстве суперфосфата [36] в виде побочных продуктов выделяются фосфогипс и *кремнегель* (КГ). Кремнегель представляет собой тонкодисперсный порошок белого цвета удельной поверхностью 11 000 см<sup>2</sup>/г и насыпной плотностью 300 кг/м<sup>3</sup>. Он состоит из 97 % SiO<sub>2</sub> и 3 % AlF<sub>3</sub>. При производстве суперфосфата кремнегель первоначально выделяется не в виде порошка, а как труднотранспортируемая водная дисперсия, что требует термообработки отходов перед их отгрузкой любому из вышеуказанных потребителей. Если же эту водную дисперсию непосредственно направлять к месту изготовления гипсовых композитов, то возможна полная утилизация таких отходов без дополнительных затрат тепловой энергии.

Поскольку производство межкомнатных перегородок не должно полностью зависеть от получения кремнегеля (например, в случае останова суперфосфатного завода на капитальный ремонт), как замещающий кремнегель компонент рассматривается *перлитовый песок* (ПП) — наполнитель с низкой плотностью. Кремнегель и перлитовый песок могут приводить к снижению механических характеристик гипсового композита, поэтому исследуют возможность использования и упрочняющего наполнителя (см. гл. II) — *золы-уноса* (ЗУ) — отхода тепловых электростанций. С целью перспективного управления реологическими параметрами гипсосодержащих смесей и прочностными свойствами готового продукта вводят суперпластификатор С-3.

Таким образом, для оптимизации рецептуры гипсовых композитов для перегородок целесообразно проанализировать свойства следующих материалов: чистого гипсового камня (Г) и семи композитов — «гипс-кремнегель (Г+КГ)», «гипс-зола (Г+ЗУ)», «гипс-перлит (Г+ПП)», «гипс-кремнегель-зола (Г+КГ+ЗУ)», «гипс-кремнегель-перлит (Г+КГ+ПП)», «гипс-зола-перлит (Г+ЗУ+ПП)», «гипс-кремнегель-зола-перлит (Г+КГ+ЗУ+ПП)», как с суперпластифика-

Т а б л и ц а V.1. Критерии качества и их оценки

Группа	Критерии и направление их оптимизации	Размерность	Значение критериев при оценке		
			отлично	хорошо	удовлетворительно
I	$R_c \rightarrow \max$ $R_n \rightarrow \max$ $\rho \rightarrow \min$ $K_w \rightarrow \max$	МПа МПа кг/м <sup>3</sup> %	Более 4,5 Более 2,3 Менее 900 Более 60	4,0 ... 4,5 2,0 ... 2,3 900 ... 1000 40 ... 60	3,5 ... 4,0 1,7 ... 2,0 1000 ... 1100 30 ... 40
II	$\tau_n \rightarrow \max$ $\tau_k \rightarrow \min$	мин мин	6 ... 7 8 ... 10	5 ... 6 10 ... 12	4 ... 5 12 ... 14

тором, так и без него. Эту задачу необходимо решать с помощью квадратичных полиномиальных моделей, в которых каждый из компонентов  $Z_u$  изменяется так (см. § 1, гл. V), чтобы нижний уровень  $z_u = -1$  совпадал с его нулевой концентрацией. В соответствии с этим приняты следующие уровни варьирования (в процентах от массы гипса):  $Z_1 = (15 \pm 15) \%$  — зола-унос,  $Z_2 = (5 \pm 5) \%$  — кремнегель,  $Z_3 = (5 \pm 5) \%$  — перлит,  $Z_4 = (0,4 \pm 0,4) \%$  — суперпластификатор С-3. Верхние границы  $Z_1 - Z_4$  выбраны из технико-экономических соображений. Все технологические смеси при разной водопотребности имеют пластичность, соответствующую нормальной густоте по прибору Суттарда. Критерии оптимизации:  $R_c - R_n$  — соответственно пределы прочности при сжатии и на растяжение при изгибе высушенных до постоянной массы образцов (основные механические характеристики);

$\rho$  — средняя плотность материала перегородок, определяющая общую массу здания и санитарно-гигиенические условия его эксплуатации, тепло- и звукопроводность;

$K_w$  — коэффициент размягчения — отношение прочности при сжатии увлажненных образцов к прочности образцов, высушенных до постоянной массы, как основной показатель их водостойкости (дополнительный показатель санитарно-гигиенических условий эксплуатации зданий);

$\tau_n$  и  $\tau_k$  — начало и конец схватывания гипсосодержащей композиции как показатель ее технологической жизнеспособности, связанный с периодом структурообразования.

Указанные в табл. V.1 оценки гипсосодержащих композиций назначены с учетом нормативных документов на гипсовые изделия,

технологических особенностей их производства и опроса инженеров-технологов. Критерии разбиты по группам в порядке приоритета:  $R_i$ ,  $\rho$ ,  $K_w$  — основные,  $\tau_n$  и  $\tau_k$  — дополнительные.

Цель работы — получение при максимальной утилизации отходов промышленности достаточно водостойкого гипсового композита, удовлетворяющего комплексу требований к малогабаритным перегородкам.

Таблица V.2. Коэффициенты оптимизационных моделей

$b_i$	Критерий качества гипсовых композиций						
	$R_c$	$R_{II}$	$\rho$	$K_w$	$\tau_n$	$\tau_k$	В/Г
$b_0$	3,84	2,22	1066	67,3	6,00	8,70	0,70
$b_1$	0,47	0,12	31,8	-7,2	-1,19	-0,72	0
$b_2$	-0,92	-0,44	-90,1	-6,3	0,54	1,11	0,14
$b_3$	-1,93	-0,97	-173	-4,3	0,83	1,54	0,20
$b_4$	0	0	0	0	1,02	0,96	-0,06
$b_{11}$	0	0	-104,6	-6,5	1,25	2,13	0,11
$b_{22}$	0	0,28	0	-8,1	-0,60	-0,92	0,11
$b_{33}$	0,48	0,61	0	-8,4	0,55	0,53	0
$b_{44}$	1,02	0	0	-12,5	0	-0,72	0
$b_{12}$	0,40	0,26	36,4	3,3	0,70	0,42	0
$b_{13}$	-0,18	-0,67	0	-1,7	0,42	0,23	-0,04
$b_{14}$	0,59	0,33	0	-1,7	-0,3	0,64	0
$b_{23}$	0,35	0,13	0	0	0,3	0,67	0
$b_{24}$	0,58	0,30	39,1	0	0	-0,62	0
$b_{34}$	-0,23	-0,78	-40,4	-1,9	0	-0,28	0
$b_{123}$	-0,16	0	0	2,8	0	0	0
$b_{124}$	-0,31	-0,19	0	1,3	0	0	0
$b_{134}$	-0,22	-0,10	0	1,8	0	0	0
$b_{234}$	0	0	0	0	0	0	0

Построенные по экспериментальным данным адекватные конечные модели со всеми значимыми коэффициентами ( $\alpha=0,2$ ) показаны в табл. V.2, в которую добавлена модель для водогипсового отношения В/Г, как контрольного критерия, используемого в технологическом анализе. Подстановкой  $z_1=z_2=z_3=z_4=-1$  в полученные модели можно оценить свойства чистого гипсового камня из технологической смеси нормальной густоты:  $R_{II}=3,2$  МПа,  $R_c=9,1$  МПа,  $\rho=1230$  кг/м<sup>3</sup>,  $K_w=42\%$ . Как видно, прочность материала значительно выше требуемой, причем он тяжелее, чем допустимо для межкомнатных перегородок. По данным табл. V.2 можно проанализировать свойства всей исследуемой гаммы гипсовых композитов. Так, в табл. V.3 приведены для каждого материала модели изменения прочности на изгиб в зависимости от введения суперпластификатора.

Из анализа табл. V.3 следует ряд инженерных выводов, в частности: а) по всей гамме материалов (кроме композита с максимальным насыщением КГ+ЗУ+ПП) может быть получено  $R_{II} \geq 1,7$  МПа; б) для некоторых композитов (Г+ЗУ, Г+ПП, Г+КГ+ЗУ) можно получить прочность на изгиб на 40...55% выше, чем у чистого гипсо-

вого камня (при условии постоянства пластичности технологической смеси); в) введение суперпластификатора улучшает свойства композитов,  $b_4 > 0$ , если они содержат КГ или ЗУ, но не содержат ПП. Аналогично проанализированы модели для  $R_c$ ,  $\rho$ ,  $K_w$ . Результаты анализа позволили сделать заключение о том, что «удовлетворительные» и «хорошие» технико-экономические решения (см. табл. V.1) при оптимизации четырехкомпонентной смеси следует искать в областях, близких к центру факторного пространства.

Таблица V.3. Изменение  $R_n$  восьми гипсовых композитов в зависимости от содержания суперпластификатора

Тип композита	Уровень $z_n$			Функция $R_n = f(z_s)$	$R_n$ . min ... $R_n$ . max
	$z_1$	$z_2$	$z_3$		
Г	-1	-1	-1	$3,72 - 0,14z_4$	3,58 ... 3,86
Г+ЗУ	+1	-1	-1	$4,78 + 1,10z_4$	3,68 ... 5,88
Г+КГ	-1	+1	-1	$2,06 + 0,84z_4$	1,22 ... 2,90
Г+ПП	-1	-1	+1	$2,86 - 1,50z_4$	1,36 ... 4,36
Г+КГ+ЗУ	+1	+1	-1	$4,16 + 1,32z_4$	2,84 ... 5,48
Г+ЗУ+ПП	+1	-1	+1	$1,24 - 0,66z_4$	0,58 ... 1,82
Г+КГ+ПП	-1	+1	+1	$1,72 - 0,52z_4$	1,20 ... 2,24
Г+КГ+ЗУ+ПП	+1	+1	+1	$1,14 + 0,44z_4$	0,70 ... 1,58

Поиск оптимального решения для  $R_n$  приведен на рис. V.7, а. Поскольку в модели (1)  $b_{11} = 0$  и  $|b_{11}| < \sum |b_{1j}|$ , то оптимум  $z_1$  может находиться только на границах эксперимента  $z_1 = \pm 1$  (см. табл. I.6). Подстановкой этих значений в модель (1) получены модели (2) и (3). На следующем этапе из этих моделей подстановкой оптимальных  $z_4$ , также находящихся на границе эксперимента, получено четыре конкурирующие модели (4)...(7) в координатах  $z_2$  и  $z_3$  (выбор таких координат связан с необходимостью решения технико-экономической задачи о взаимозаменяемости КГ и ПП). Из результатов сравнения оценок свойства в девяти точках, соответствующих плану  $3 \times 3$ , видно, что *лучшие результаты* получаются для *разных композитов*: в верхней части точечной диаграммы модели (4), соответствующей композиту Г+КГ+ПП, и в нижней части диаграммы модели (7), описывающей свойства композита Г+ЗУ+КГ+ПП (с суперпластификатором). Приравнивание моделей (4) и (7) позволяет [18, с. 80] определить границу перехода от одной рецептуры композита к другой:

$$0,24 + 1,12z_2 - 2,14z_3 = 0. \quad (V.3)$$

Эта граница изображена на регулировочной диаграмме (см. рис. V.7, а), совмещающей рабочие области. В верхней области композит «Г+КГ+ПП» везде имеет прочность выше  $R_{н.норм.}$ , причем  $R_n$  возрастает по мере уменьшения содержания «КГ» (вплоть до его полного исключения из рецептуры на левой стороне квадрата) до величины 4,36 МПа, что на 13% выше прочности гипса. Выше нормативной прочности и характеристики композита в нижней области, где рецептура отличается от предыдущей введением ЗУ и суперпла-

стификатора: здесь лучший результат (на 52% выше  $R_n$  {Г}) получен для композита типа «Г+ЗУ» (в левом нижнем углу из рецептуры исключаются и КГ и ПП). Таким образом, регулировочная диаграмма фиксирует множество рецептов, удовлетворяющих требованию  $R_n > 1,7$  МПа, причем среди них есть и весьма экономичные с интенсивным использованием отходов (до 10% КГ и до 30% ЗУ — правая сторона квадрата).

Аналогично проведена и проанализирована оптимизация других свойств I группы (рис. V.7, б...г):  $R_{сж}$  — лучшие результаты (10,2 МПа) для композита Г+ЗУ+КГ+ПП с суперпластификатором, (см. зону  $\sigma_2$  на рис. V.7, б);  $K_w$  — лучшие результаты (73%)

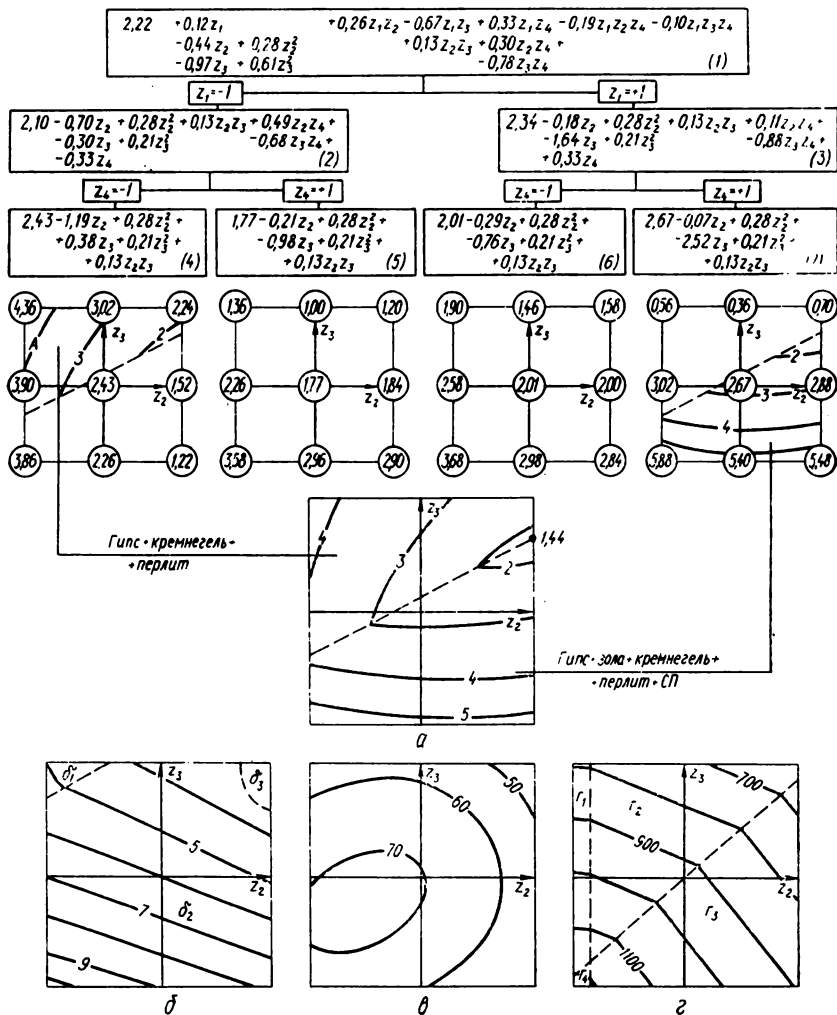


Рис. V.7. Поиск рецептуры, обеспечивающей  $R_{n,max}$  (а) для гипсового композита, и результаты индивидуальной оптимизации  $R_c$  (б),  $K_w$  (в) и  $r$  (г).

для композита Г+КГ+ЗУ+ПП с переменным по области  $\{z_2, z_3\}$  содержанием суперпластификатора;  $\rho$  — лучшие результаты ( $640 \text{ кг/м}^3$ ) для композита Г+КГ+ПП с суперпластификатором (см. зону  $g_2$  на рис. V.7, г). Результаты индивидуальной оптимизации не совпадают по координатам  $z_i$ . Поэтому необходимо ввести некоторые добавочные инженерные предпосылки, которые должны лечь в основу компромиссных плезиоптимальных решений [16, с. 68; 18, с. 71], обеспечивающих выполнение комплекса требований к продукции с наилучшими оценками (см. табл. V.1). Так, в одном из случаев дополнительной предпосылкой послужило требование ряда потребителей о получении максимальной водостойкости композита, что связано с необходимостью обеспечения строгих гигиенических норм в помещениях. Эта предпосылка приводит к тому, что условия получения

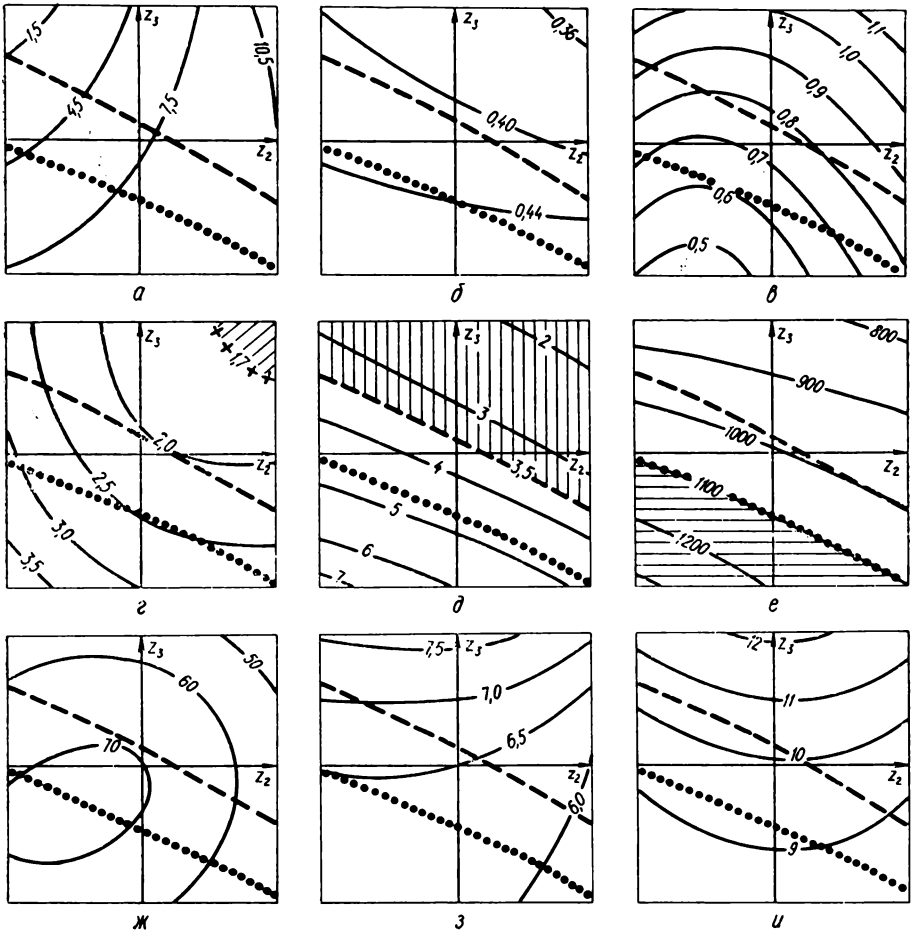


Рис. V.8. Регулировочные диаграммы, полученные для условий  $K_{w,\max}$  при  $R_c \geq 3,5 \text{ МПа}$  и  $\rho \leq 1100 \text{ кг/м}^3$ , для управления содержанием золы-уноса (а) и суперпластификатора (б) водоцементного отношения (в) и для оценки шести свойств гипсового композита:  $R_n$  (г),  $R_c$  (д),  $\rho$  (е),  $K_w$  (ж),  $\tau_n$  (з) и  $\tau_k$  (и).

$K_w \rightarrow \max$  (см. рис. V.7, *в*) принимаются как оптимальные для всех критериев  $R_n, R_c, \rho, \tau_n, \tau_k$ . При этом  $z_1$  и  $z_4$  переменны (рис. V.8, *а...б*) и зависят от  $z_2$  и  $z_3$  как

$$z_{1\text{opt}} = -0,55 + 0,25z_2 - 0,12z_3 + 0,21z_2z_3, \quad (\text{V.4})$$

$$z_{4\text{opt}} = 0,04 - 0,05z_2 - 0,11z_3 - 0,01z_2z_3. \quad (\text{V.5})$$

В результате подстановки (V.4)...(V.5) в четырехфакторные модели (см. табл. V.2) получено семь двухфакторных диаграмм (рис. V.8, *в...и*), отражающих свойства композитов с максимально возможным  $K_w$  в зоне эксперимента. На всех диаграммах (см. рис. V.8) нанесены границы зоны, удовлетворяющей нормативным требованиям к композиту, причем на диаграммах  $R_n$  (см. рис. V.8, *з*),  $R_c$  (см. рис. V.8, *д*) и  $\rho$  (см. рис. V.8, *е*) заштрихованы «запрещенные» зоны. В результате получается *полоса решений*, в которой полностью удовлетворяются нормативные требования к *материалу* конкретного вида изделий. В этой полосе обеспечивается: прочность на сжатие в пределах от 3,5 МПа до 4,7 МПа, что до 35% выше, чем нормативная (лучшая оценка «хорошо»); прочность на изгиб в пределах от 2 МПа до 2,5 МПа, что составляет 118...147%  $R_{н,норм}$  (лучшая оценка «отлично»); водостойкость в диапазоне от 53% до 73% (лучшая оценка «отлично»); плотность в пределах от 980 до 1100 кг/м<sup>3</sup>, что позволяет при лучшей оценке качества «хорошо» снизить на 12% массу изделия; сроки начала схватывания — от 6 до 7 мин, сроки конца схватывания — от 8,5 до 10 мин, что также соответствует высоким нормативным оценкам. В этих же границах содержание золы-уноса должно изменяться (см. рис. V.8, *а*) в пределах от 1,5 (при большом количестве ПП и отсутствии КГ) до 10% (при большом количестве КГ и малом содержании ПП), а оптимальная добавка суперпластификатора оказывается постоянной  $0,40 \leq z_{4\text{opt}} \leq 0,45$ , что упрощает управление технологическим процессом. Водогипсовое отношение В/Г для композитов по сравнению с чистым гипсовым тестом повышается (рис. V.8, *в*); в зоне рекомендуемых составов  $0,60 \leq \text{В/Г} \leq 0,92$ , а водотвердое отношение меньше (0,52...0,81).

Для изготовления малогабаритных межкомнатных перегородок рекомендован гипсовый композит Г+КГ+ЗУ (см. рис. V.8 — правая нижняя часть диаграмм) с добавкой в технологическую смесь суперпластификатора. Композит включает 10% золы-уноса ТЭС и 10% кремнегеля, причем последний используется в виде водной дисперсии, образующейся как побочный продукт суперфосфатного производства. Экономическая эффективность такого рецептурно-технологического решения, определяемая по рекомендациям [80], составляет до 2,7 руб/м<sup>3</sup> [21].

Как следует из диаграмм на рис. V.7 и V.8, малогабаритные межкомнатные перегородки — это не единственный вид продукции, который можно выпускать из гипсовых композитов исследованной гаммы. Так, по механическим показателям композиты типа Г+ЗУ (левая нижняя область диаграмм) удовлетворяют требованиям к материалу для подготовки под полы, а композиты типа Г+КГ+ПП (правая верхняя область диаграмм) — требованиям к тяжелым теплоизоляционным материалам [23] и т. п.

## § 5. КОМПРОМИССНЫЕ РЕШЕНИЯ ПРИ ОПТИМИЗАЦИИ СОСТАВОВ БЕТОНОВ И РЕЖИМОВ ТЕПЛОВОЙ ОБРАБОТКИ ЖЕЛЕЗОБЕТОННЫХ КОНСТРУКЦИЙ

Для условий завода железобетонных и строительных конструкций г. Хмельницка была решена задача оптимизации производства железобетонных изделий с использованием золы-уноса ТЭЦ (ЗУ). В рецептуру бетона ввели суперпластификатор С-4 для стабилизации качества бетонной смеси и затвердевшего бетона (по механическим характеристикам  $R^T$ ,  $R^T_{28}$  и  $R^{H_{28}}$ ).

Цель оптимизации — при заданных уровнях качества продукции  $R = \text{const}$  на поисковом этапе выявить пути экономии: а) цемента за счет максимального использования ЗУ; б) тепловой энергии в процессах ТВО за счет интенсификации твердения бетонной смеси постоянной подвижности (в частности,  $OK = (5 \pm 1)$  см). Варьировались четыре рецептурных фактора  $x_i$  и  $z_i$ : расход цемента  $X_1 = C = (380 \pm 40)$  кг/м<sup>3</sup>, доля песка в смеси заполнителей  $X_2 = r = 0,38 + 0,04$ , количество от массы цемента ЗУ  $Z_3 = (10 \pm 10)$  % и суперпластификатора  $Z_4$ . Этот фактор необходимо было изменять на трех неравноотстоящих уровнях — 0; 0,75 и 1 %, что потребовало нормализования по формуле  $z_4 = (Z_4/0,75)^{2,41} - 1$ , обеспечивающей (см. § 5 гл. VI) стандартные трехуровневые изменения  $z_4$ . Кроме того, варьировались четыре режимно-технологических фактора группы  $t$ : время предварительной выдержки изделий  $T_5 = (2 \pm 1)$  ч, скорость подъема температуры в камерах  $T_6 = (15 \pm 5)$  град/ч, температура  $T_7 = (65 \pm 15)$  °С и время изотермической выдержки  $T_8 = (8 \pm 3)$  ч. Кроме восьми детерминированно изменяемых факторов, по плану  $R_9$  [16, с. 127] можно было бы на следующих этапах исследования учесть в моделях девятый фактор  $X_9$  — фактическое цементно-водное отношение, получаемое при обеспечении  $OK = \text{const}$  на всех 24 рецептурах. Таким образом, план был насыщен при учете Ц/В в моделях  $R^T$ , то имел степени свободы  $f_{на} > 0$  во всех остальных случаях за счет дублирования некоторых опытов.

В результате расчетов и последовательного регрессионного анализа по системе COMPEX (см. § 4 гл. VI) были получены, в частности, модели для прочности бетона  $R^T$ ,  $R^T_{28}$  и  $R^{H_{28}}$  (МПа).

$$\begin{aligned}
 R^T = & 21,0 + 3,1x_1 & + 0,6x_1x_2 + 0,6x_1z_4 & - 0,9x_1t_7 + 0,3x_1t_8 - \\
 & - 0,3x_2 - 3,5x_2^2 & + 0,3x_2z_4 & - 0,5x_2t_6 + \\
 & + 2,9z_3 - 1,8z_3^2 & + 1,1z_3z_4 + 2,5z_3t_5 - 0,6z_3t_6 & - 0,6z_3t_7 - 0,4z_3t_8 - \\
 & + 3,1z_4 - 4,9z_4^2 & - 0,9z_4t_5 - 0,6z_4t_6 + & \\
 & + 1,1t_5 - 2,1t_5^2 & - 0,8t_5t_6 & - 0,5t_5t_7 - \\
 & + 1,7t_6 + 4,9t_6^2 & & + 0,8t_6t_7 + 0,3t_6t_8 - \\
 & - 0,9t_7 + 3,8t_7^2 & & - 0,5t_7t_8 + \\
 & + 0,3t_8 + 2,8t_8^2, & & (V.6)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 R^T_{28} = & 34,5 + 4,5x_1 + 5,9x_2^2 & + 0,7x_1z_4 - 1,0x_1t_5 - 0,6x_1t_6 & + 0,7x_1t_8 + \\
 & - 1,7x_2 & + 0,5x_2z_3 & - 0,8x_2t_7 - 0,8x_2t_8 - \\
 & + 2,7z_3 - 4,8z_3^2 & + 1,0z_3z_4 + 0,9z_3t_5 + & \\
 & + 2,7z_4 - 4,4z_4^2 & - 0,6z_4t_5 & - 0,4z_4t_7 - 0,4z_4t_8 - \\
 & - 2,5t_5^2 & & + 0,6t_5t_8 - \\
 & - 1,2t_6 & & - 0,7t_6t_8 + \\
 & - 2,5t_7 + 3,0t_7^2 & & - 2,4t_7t_8 + \\
 & - 1,6t_8, & & (V.7)
 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 R_{28}^H = & 29,2 + 3,5x_1 + 4,5x_1^2 - 1,0x_1x_2 + 0,9x_1z_4 - \\
 & - 2,2x_2 + 3,1x_2^2 + 0,6x_2z_3 - \\
 & - 3,3z_3^2 - 1,2z_3z_4 + \\
 & + 1,7z_4 - 2,9z_4^2.
 \end{aligned}
 \tag{V.8}$$

На рис. V.9, *a...в* показаны графические образы квазиоднофакторных моделей для безразмерных выходов  $\pi_{Ri}$  (1.77), что позволяет вести сравнительный инженерный анализ относительного влияния

Т а б л и ц а V.4. Результаты индивидуальной оптимизации прочности бетона

Факторы	Значения факторов для двухфакторных моделей $R=x_1, z_3$			Решение о стабилизации факторов
	$R_1^T=37,6+4,4x_1+5,5z_3-1,0z_3^2$	$R_{28}^T=45,7+6,0x_1+6,1x_1^2+2,4z_3-4,6z_3^2$	$R_{28}^H=35,0+4,7x_1+4,6x_1^2-1,0z_3-3,2z_3^2$	
	$R_{1,max}^T=46,5$ МПа	$R_{28,max}^T=58,1$ МПа	$R_{28,max}^H=44,4$ МПа	
$x_1$	+1	+1	+1	Не принято
$x_2$	-0,10+0,09 $x_1$	-1	-1	-0,7
$x_3$	+1	+0,26	-0,16	Не принято
$x_4$	0,33+0,06 $x_1$ +0,07 $z_3$	0,41+0,09 $x_1$ -0,11 $z_3$	0,3+0,15 $x_1$ -0,21 $z_3$	Не принято
$x_5$	0,50+0,6 $z_3$	-0,10+0,17 $z_3$	Нет	Не принято
$x_6$	-1	-1	Нет	-1
$x_7$	-1	-1	Нет	-1
$x_8$	+1	+1	Нет	+1

каждого фактора на прочность бетона  $W_{\tau_i}$ . По моделям (V.6)...(V.8) и рис. V.9, *a...в* можно сделать ряд предварительных технологических выводов: увеличение расхода цемента в равноподвижных смесях всегда вызывает рост прочности бетона  $R_{T1}$ , а при  $\Pi \geq 380$  кг/м<sup>3</sup> — и рост прочности  $R_{T28}$  и  $R_{H28}$ ; максимуму  $R$  соответствует верхний уровень расхода  $\Pi$ ; добавка золы-уноса наиболее интенсивно влияет на прочность  $R_{T1}$ , причем, в зависимости от уровней других факторов, она может оказывать как положительное, так и отрицательное действие; добавка ЗУ должна вводиться в оптимальной дозировке, переменной в зависимости от уровней факторов  $x_i$  и  $t_i$ ;  $d$  — оптимальная добавка суперпластификатора также должна быть переменной в зависимости от уровней других факторов, причем особенно сильно она влияет на  $R_{T1}$ ; к изменению факторов тепловой обработки  $t_5...t_8$  наиболее чувствительна прочность бетона  $R_{T1}$  с ЗУ и суперпластификатором, для ее роста, по-видимому, наиболее благоприятны нижние уровни  $t_6$  и  $t_7$  при оптимальном времени предварительной выдержки  $t_5$ ; прочность  $R_{T28}$  наиболее чувствительна к времени выдержки изделий при ТВО, при этом росту прочности бетона будут способствовать, судя по эффекту  $t_7t_8$ , «мягкие» режимы ТВО; прочности  $R_{T1}$ ,  $R_{T28}$  и  $R_{H28}$  могут тесно коррелировать между собой лишь в ограниченных областях факторного пространства  $\{x_i, z_i, t_i\}$ . На основе последнего вывода было принято решение о поиске на начальном этапе оптимизации

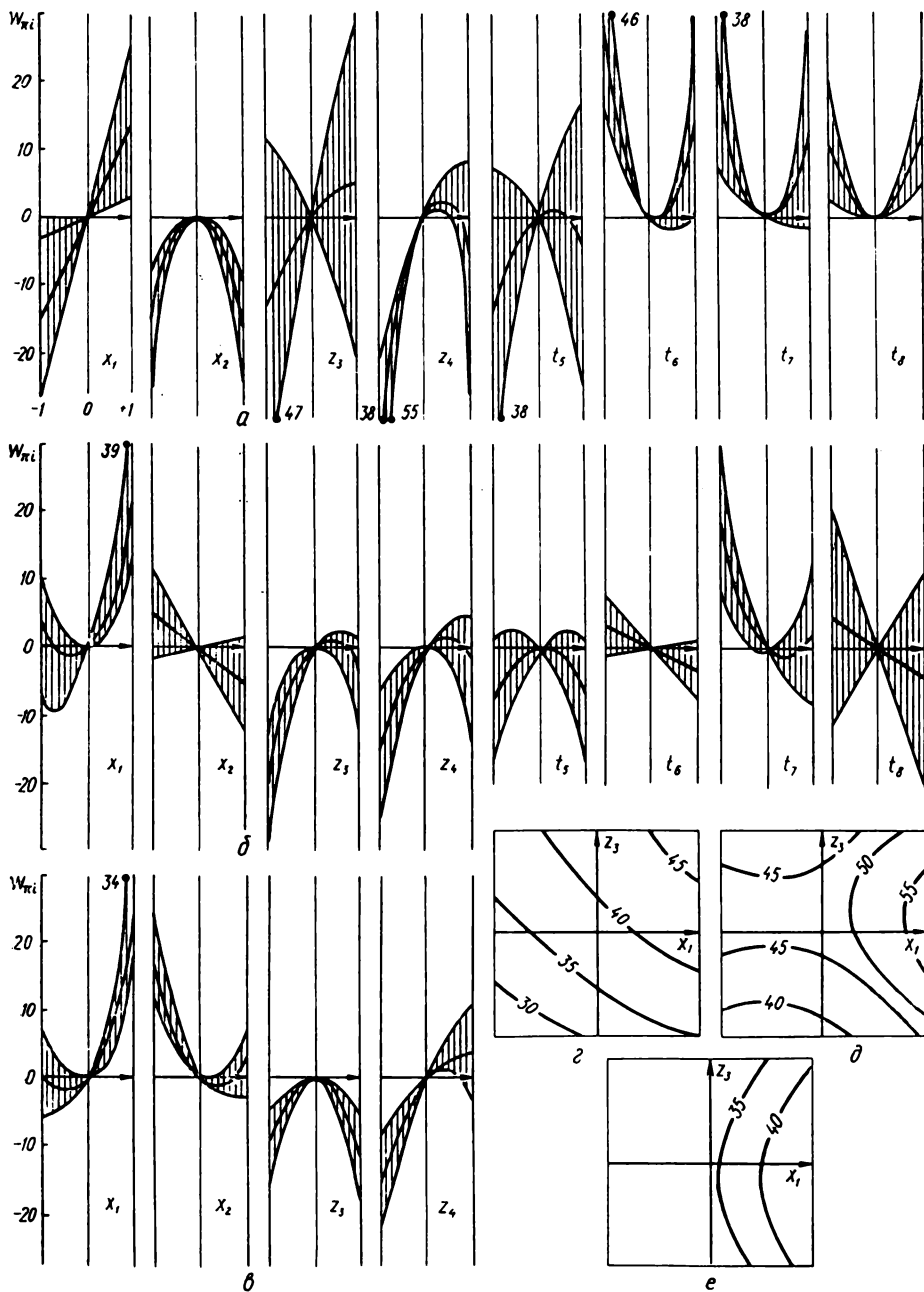


Рис. V.9. Квазиднофакторные безразмерные модели влияния восьми рецептурно-технологических факторов на  $R^r_1$  (а),  $R^r_{28}$  (б) и  $R^n_{28}$  (в), а также результаты индивидуальной оптимизации этих свойств бетона (г, д, е — соответственно).

ции координат индивидуального оптимума факторов по каждой из моделей (V.6)...(V.8) с целью последующего выявления области компромиссных плезеооптимальных решений [18]. Факторы  $x_1$  и  $z_3$  были составлены в двухфакторных диаграммах с целью выявления возможности экономии цемента при введении ЗУ ТЭЦ и поддержания остальных факторов оптимальными.

Результаты индивидуальной оптимизации по моделям (V.6)...(V.8) сведены в табл. V.4. Бетон, не подвергнутый ТВО  $R_{28}^H$  за счет введе-

Таблица V.5. Значения коэффициентов моделей после принятия компромиссных решений

Коэффициент	Первое компромиссное решение ( $x_2 = -0,7; t_6 = t_7 = -1$ ), (I)				Третье компромиссное решение (I) + ( $z_4 = 0,34 + 0,1 x_1$ $t_6 = 0,30 + 0,12 x_1 + 0,39 z_3$ ), (III)			
	$R_1^T$	$R_{28}^T$	$R_{28}^H$	$B$	$R_1^T$	$R_{28}^T$	$R_{28}^H$	$B$
$b_0$	35,2	41,4	32,3	144,5	36,3	42,0	32,6	142,4
$b_1$	3,8	5,8	4,2	0	3,9	5,9	5,1	-0,7
$d_3$	3,7	2,4	-0,4	2,9	5,2	2,6	-0,8	2,9
$d_4$	3,5	3,6	1,7	-10,6	—	—	—	—
$g_5$	2,4	0,6	—	—	—	—	—	—
$b_{11}$	0	5,9	4,5	7,4	0	6,0	4,3	7,4
$d_{33}$	-1,8	-4,9	-3,3	-5,0	-1,2	-4,8	-3,3	-5,0
$d_{44}$	-4,9	-4,4	-2,9	13,0	—	—	—	—
$g_{55}$	-2,1	-2,7	—	—	—	—	—	—
$c_{13}$	0	0	0	1,6	0	0	0	1,7
$c_{14}$	0,6	0,7	0,9	-1,8	—	—	—	—
$e_{15}$	0	-1,0	—	0	—	—	—	—
$d_{34}$	1,1	1,0	-1,2	0	—	—	—	—
$h_{35}$	2,5	0,9	—	—	—	—	—	—
$h_{45}$	-1,0	-0,6	—	—	—	—	—	—

ния золы, имеет прочность почти на марку меньше, чем  $R_{28}^T$ , что связано с условиями структурообразования золокомпозитов. Однако, поскольку задача решается для заводских условий при обязательной тепловлажностной обработке, то  $R^T$  можно использовать как нормативный «марочный» показатель.

По двухфакторным моделям, приведенным в табл. V.4, построены номограммы (рис. V.9. *г, д, е*). После ТВО можно получить бетон марок 500 и 400, а при нормальном твердении бетоны марок 400 и 300 в зависимости от расхода цемента и золы. Ожидаемая экономия цемента до 80 кг/м<sup>3</sup>.

Из результатов индивидуальной оптимизации (см. табл. V.4) видно, что  $R_{max}$  для бетонов, твердеющих при ТВО, достигается при точно одинаковых значениях уровней факторов теплового режима: медленный подъем температуры ( $t_6 = -1$ ) до нижнего уровня  $T = 50^\circ C$  ( $t_7 = -1$ ) при удлиненном времени изотермической выдержки — 11 ч ( $t_8 = +1$ ). Эти уровни могут быть сразу учтены в моделях (V.6)...(V.7). В отношении фактора  $X_2$  допустимо плезеооптимальное решение

$x_2 = (-2,1 + 0,09x_1) : 3 = -0,70 + 0,03x_1 = 0,70$ , рассчитанное как среднее трех точных оптимумов.

Принятие плезиоптимальных решений в отношении других свободно оптимизируемых факторов  $z_4$  и  $t_5$  на начальном этапе представлялось преждевременным, поэтому в модели  $R^T$  были подставлены значения  $x_2$ ,  $t_6$ ,  $t_7$  и  $t_8$ , что привело  $R^T$  от восьмифакторных моделей к четырехфакторным. Новые оценки коэффициентов моделей приведены в табл. V.5 (в нее дополнительно внесены модели фактического расхода воды В).

На втором шаге поиска компромиссных решений использованы модели (1) из табл. V.5. По ним найдено, что  $t_{5\text{opt}}$  для  $R^{T_1}$  есть функция (V.9), а для  $R^{T_{28}}$  — (V.10). Их можно объединить только средней плоскостью (V.11), понеся потери на плезиоптимальность,

$$t_{5\text{opt}} = 0,59 + 0,59z_3 - 0,22z_4, \quad (\text{V.9})$$

$$t_{5\text{opt}} = 0,12 - 0,20x_1 - 0,18z_3 - 0,12z_4, \quad (\text{V.10})$$

$$t_{5\text{pl.opt}} = 0,36 - 0,10x_1 + 0,39z_3 - 0,17z_4. \quad (\text{V.11})$$

После подстановки (V.11) в модели  $R^{T_1}$  и  $R^{T_{28}}$  оптимизация была проведена в третий раз и найдены  $z_{4\text{opt}}$  для  $R^{T_{28}}$  (V.12),  $R^{T_{28}}$  (V.13) и  $R^{T_1}$  (V.14), объединяемые плезиоптимальным решением (V.15).

$$z_{4\text{opt}} = 0,31 + 0,06x_1 + 0,07z_3, \quad (\text{V.12})$$

$$z_{4\text{opt}} = 0,41 + 0,10x_1 + 0,11z_3, \quad (\text{V.13})$$

$$z_{4\text{opt}} = 0,29 + 0,15x_1 - 0,21z_3, \quad (\text{V.14})$$

$$z_{4\text{pl.opt}} = 0,34 + 0,10x_1 - 0,01z_3 = 0,34 + 0,1x_1. \quad (\text{V.15})$$

Результаты учета (V.15) показаны в табл. V.5 и на двухфакторных диаграммах (рис. V.10, а...в). Сравнение изолиний  $R^{T_1}$  и  $R^{T_{28}}$  (прочность бетона с золой-уносом при нормальном твердении в сравнении, как указано выше, может не участвовать) показывает, что в качестве рабочей регулировочной диаграммы можно выбрать изображенную на рис. V.10, б, поскольку во всей области факторного пространства  $\{x_1 - z_3\} R^{T_1} > 0,7R^{T_{28}}$ . Для того чтобы получить бетон марок 500 (правая область диаграммы V.10, б), 400 и 300 (нижняя левая область той же диаграммы), необходимо:

обеспечить водопотребность бетонных смесей (равной подвижности  $OK = (5 \pm 1)$  см), равную В на диаграмме V.10, г (изолинии по модели в табл. V.5 — решение II);

вести суперпластификатор С-4 в количестве, указанном на диаграмме V.10, д,  $Z_4 = (0,85 \pm 0,02)$  % массы цемента;

использовать постоянное соотношение между заполнителями  $r = 0,35$ ;

обеспечить переменное время выдержки железобетонных конструкций до начала ТВО в зависимости от количества использованного для бетона цемента и ЗУ (рис. V.10, е);

проводить ТВО по «мягкому» режиму: скорость подъема температуры 10 град/ч, температура изотермической выдержки 60° в течение 11 ч (режим ТВО от состава бетона, определяемого по диаграммам V.10, г...д, не зависит).

Потери от принятия плезиоптимальных решений по сравнению с результатами индивидуальной оптимизации составляют для бетонов марок 400 и 500 лишь 3...8% прочности, что видно по рис. V.10, ж, на котором в десяти точках плана  $3^2$  первым числом отмечены потери для  $R_{T1}$ , вторым — для  $R_{T28}$  и третьим — для  $R_{H28}$ .

На следующем этапе — ЭР-1 заводских исследований можно стабилизировать на лучших уровнях этапа ЭП три фактора  $x_2$ ,  $t_5$  (по

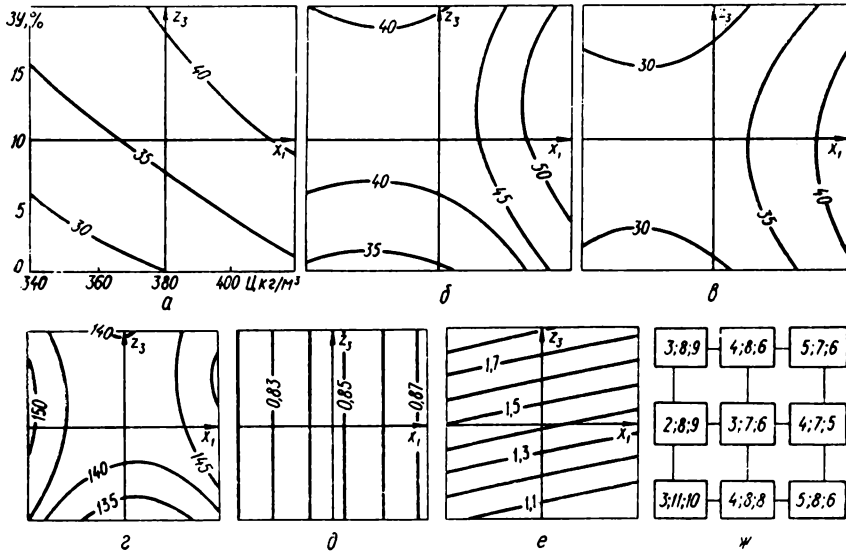


Рис. V.10. Результаты принятия компромиссных плезиоптимальных решений:

$R_{T1}^T$  (а),  $R_{T28}^T$  — рабочая регулировочная диаграмма (б),  $R_{H28}^H$  (в), В (з), концентрация суперпластификатора (д), время предварительной выдержки до ТВО (е), потери на плезиоптимальность (ж).

рис. 10, е с учетом возможностей производства на заданных технологических линиях) и  $t_6$ . Остальные пять факторов  $x_1$ ,  $t_3$ ,  $t_4$ ,  $t_7$  и  $t_8$  необходимо исследовать по новым моделям, построенным по плану  $Ha_5$  при изменении границ области факторного пространства в соответствии с результатами этапа ЭП. Одновременно рассмотрена возможность применения золы-уноса разных ТЭС УССР в бетонах различной удобоукладываемости. Результаты этапа ЭР-1 позволили осуществить опытно-промышленный выпуск на заводе железобетонных панелей типа ПК-8-59-12 (этап «ЭР-2») по экономичным рецептурно-технологическим параметрам. Испытание панелей показало, что они полностью удовлетворяют требованиям ГОСТ 8829—77: по прочности контрольный коэффициент  $C_q = 1,52$  выше нормативного 1,4, по жесткости — действительный прогиб на 8% меньше нормативного, кратковременная ширина раскрытия трещин 0,05 мм, а при длительной нагрузке 0,10 мм.

Заводу рекомендованы бетоны с пониженным на 17% расходом цемента при введении 80 кг/м<sup>3</sup> золы уноса и 0,5% суперпластифи-

катора С-4 (от массы цемента). Длительность изотермической выдержки при ТВО сокращена на 3 часа. Экономический эффект от внедрения таких рецептурно-технологических решений составляет 0,59 руб/м<sup>3</sup> (экономия от сокращения расхода цемента +0,69 руб., от сокращения расхода пара +0,48 руб.; перерасход за счет введения золы-уноса — 0,16 руб., суперпластификатора — 0,42 руб.).

Вышеизложенные алгоритмы оптимизации рецептурно-технологических решений рекомендуются авторами как типовые для заводов сборного железобетона.

## **Глава VI. СОМПЕХ — СИСТЕМА ОБРАБОТКИ ДАННЫХ, МОДЕЛИРОВАНИЯ, ОПТИМИЗАЦИИ И ПРИНЯТИЯ ИНЖЕНЕРНЫХ РЕШЕНИЙ ПРИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОМ ИССЛЕДОВАНИИ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

### **§ 1. РОЛЬ ЭВМ В ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ В ОБЛАСТИ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ И ТЕХНОЛОГИИ**

Современные методы моделирования и оптимизации инженерных решений в области строительного материаловедения в значительной степени предполагают использование *вычислительной техники*. В Одесском ИСИ разрабатывается математическое и программное обеспечение автоматизированной обработки данных, моделирования, оптимизации и принятия инженерных решений при экспериментальном исследовании композиционных материалов и конструкций. — проблемно-ориентированная система СОМПЕХ (*composite, experiment*). Методической основой ее разработки служит ряд базовых представлений о роли ЭВМ в решении экспериментально-статистических задач [2, 4, 13, 28, 52, 54, 71].

Традиционное направление применения вычислительной техники — *автоматизация расчетов*. На ЭВМ с помощью *отдельных программ* (стандартных, типовых, уникальных) обрабатываются данные, независимо от того, где и когда они получены. В рамках этого направления память и быстродействие ЭВМ используются для выполнения большого объема *вычислительных операций*, необходимых для получения некоторого *числового* результата на *разных* этапах моделирования, нередко разобобщенных друг с другом в общей схеме исследования. Управление процессом моделирования (связь между этапами, подключение к расчетам тех или иных программ и т. п.) осуществляется пользователем ЭВМ — экспериментатором.

Специальное направление — *экстремальные задачи* (поиск оптимальных решений по одному или многим критериям), которые без ЭВМ не разрешимы в реальном времени. К этому направлению относятся и задачи *синтеза оптимальных планов эксперимента* (см. § 3 гл. VI). На базе ЭВМ возможна организация машинного каталога — *банка*, в котором хранятся и накапливаются описания известных и вновь созданных планов.

Перспективное направление применения ЭВМ — *имитационный эксперимент* — полная или частичная замена *вычислительными процедурами предметно-физического* эксперимента со сложными системами. В таком эксперименте испытываются на ЭВМ модели, имитирующие поведение изучаемой системы, т. е. исследователь получает машинный отклик *у*. Таким образом, ЭВМ используется и для анализа данных, и для получения «экспериментальных» данных о поведении сложных объектов, для которых натурный эксперимент невозможен по техническим, экономическим, социальным, этическим и другим причинам. При имитационном эксперименте целесообразно использовать идеи и методы математической теории эксперимента [38], что обеспечивает тесный методический контакт между всеми тремя названными направлениями.

Вероятно, и имитационный эксперимент, и машинные каталоги планов могут оказаться достаточно эффективными только при развитии четвертого направления — *в диалоговых системах «исследователь — ЭВМ»*. Через диалог происходит *соединение формальных и неформальных этапов* решения задач. В работах [2, 28] подчеркивается *консультирующая* функция диалоговых систем и отмечается их особое значение как консультанта экспериментаторов — не математиков. Для математика-экспериментатора диалог не менее важен. Он позволяет «экспериментировать» с математическими моделями: быстро и непосредственно обратиться к ЭВМ, получить ответ в наглядной форме, оперативно проанализировать варианты решений, вмешиваться в процесс вычислений на любом этапе, оценить последствия применения той или иной стратегии эксперимента, выбрать наиболее подходящую для конкретной задачи (или текущего этапа ее решения) процедуру вычислений. Таким образом, в более полной мере реализуется естественный для исследователя путь от анализа ситуации к выбору методики решения задачи и к ее решению.

Использование ЭВМ в экспериментальных исследованиях осуществляется через *комплексы прикладных программ*, обеспечивающих сбор, хранение и обработку данных, планирование эксперимента и управление им. Возможны следующие формы организации таких комплексов: *библиотеки, пакеты* и *диалоговые системы* программ. Основу каждого из них составляют *расширяемые библиотеки программных модулей*, реализующих необходимый набор математических методов [2, 4, 28, 29]. Первый «стартовый» вариант системы COMPEX организован в виде библиотеки объектных модулей, работающей под управлением ДОС ЕС (язык ФОРТРАН).

## § 2. КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ СИСТЕМЫ COMPEX

Система COMPEX ориентирована на решение инженерных задач, поставленных при исследовании композиционных материалов и технологии их получения. В ней учтены *особенности* технологии КМ как сложной стохастической системы и стратегии ее исследования (см. гл. I), которые наложили на структуру и организацию COMPEX ряд ограничений и потребовали включения в нее некоторых *специальных блоков*. В частности, на данном этапе в ней не предусмотрены про-

граммы для анализа временных рядов и зависимостей марковского типа [28, с. 7], для планирования эксперимента при нелинейной параметризации [4, с. 187] и др. В то же время в состав СОМРЕХ входят блок принятия типовых инженерных решений по полиномиальным моделям при одном и нескольких критериях оптимизации (см. § 6 гл. I), программа изопараметрического анализа (см. § 4 гл. I), а также оригинальный блок синтеза планов эксперимента для моделей и областей действия, характерных для исследования композиционных материалов (см. § 3 гл. VI) и др. Состоит СОМРЕХ из четырех библиотек.

**Библиотека А** — первичная статистическая обработка данных — включает следующие разделы: а) вычисление оценок основных числовых характеристик распределений: среднего  $\bar{y}$ , дисперсии  $s^2$ , среднеквадратических отклонений  $s$ , относительных ошибок  $\delta$ , числа степеней свободы  $f$  по совокупности из  $m$  измерений в  $v$ -м дублируемом (воспроизводимом) опыте, по совокупности  $n$  воспроизводимых опытов в  $u$ -й серии опытов, по совокупности  $N$  опытов в разных точках факторного пространства (в зависимости от целей эксперимента и схемы его организации [16, с. 42]); для больших массивов предусмотрено определение оценок параметров формы распределения (асимметрии и эксцесса), а также вычисление  $v$ -х квантилей для заданных эмпирических частностей  $p\{v\}$  [16, с. 27]; б) проверка однородности средних, дисперсий, квадратов относительных ошибок  $\delta^2$  и т. п. при равных и неравных числах степеней свободы [16]; в) анализ резко выделяющихся (аномальных) измерений; д) для больших массивов экспериментальных данных построение гистограмм и куммулятивных кривых и проверка с помощью критерия  $\chi^2$  [8] гипотезы о согласии эмпирического закона распределения случайной величины с равномерным, нормальным, логнормальным, бэ́та- и гамма-экспоненциальным, биномиальным, Пуассона, Джонсона [8] теоретическими законами распределения.

Библиотека А используется для обработки результатов прямых и косвенных измерений, а также для преобразованных (см. библиотеку Б и § 5 гл. VI) выходов  $Y$ .

Развитие библиотеки А предусматривает включение программ восстановления пропущенных наблюдений, расширение числа теоретических законов распределения для проверки гипотез о виде эмпирических распределений и др.

**Библиотека Б** — статистическое исследование зависимостей и построение полиномиальных моделей — является основной и включает следующие разделы: а) корреляционный анализ результатов эксперимента, вычисление оценок коэффициентов корреляции  $r\{Y_i, Y_j\}$  [16, с. 25] для уменьшения числа критериев качества системы; б) преобразование факторов  $X_i$  и выходов  $Y_j$  для построения веера однофакторных моделей с вычислением критериев адекватности  $SS_{на}$ ,  $s^2_{на}$ ,  $f_{на}$ ,  $F_a$ ,  $s_{на}$ ,  $\delta_{на}$  и информативности  $F_{\pi}$  [16], а также координат максимальных абсолютных «невязок»  $|\hat{y}_u - y_u|$  в измеренных и преобразованных  $Y_j$  (см. § 5, гл. VI); в) построение многофакторных полиномиальных моделей (линейных по параметрам) с вычислением выше-



указанных критериев адекватности и информативности, а также статистических характеристик оценок коэффициентов и критериев плана эксперимента (см. § 4, гл. I); г) последовательный регрессионный анализ (методом исключения) многофакторных полиномиальных моделей с вычислением всех вышеуказанных статистических характеристик модели и плана эксперимента (см. § 4 гл. VI).

Библиотека Б базируется на программах линейной алгебры, метода наименьших квадратов, включающих псевдообращение матриц (в т. ч. с удвоенной точностью), рекуррентных процедур обращения матриц при изменении размерности и т. п.

Развитие библиотеки Б предусматривает включение программ регрессионного анализа с учетом ошибок в варьировании уровней факторов, непараметрической регрессии, дисперсионного анализа, а также расширение классов моделей, включая «сплайновую» аппроксимацию.

**Библиотека В** — синтез оптимальных планов эксперимента описана в § 3 гл. VI.

**Библиотека Г** — принятие типовых инженерных решений по полиномиальным моделям — включает: а) диссоциативно-шаговый метод оптимизации с выводом его блок-схемы для каждой модели; б) решение типовых задач по одной полиномиальной модели (см. § 6 гл. I); в) поиск компромиссных решений при плезиоптимальной стабилизации уровней факторов для группы моделей с выпечаткой пошаговых потерь на плезиоптимальность (см. § 5 гл. V); г) изопараметрический анализ по группе моделей (см. § 6 гл. III).

Библиотека Г базируется на программах расчета выходов по полиномиальным моделям и дисперсий их предсказания в измеряемых и преобразованных величинах, построения изолиний на плоскости, в т. ч. на развертках и «сечениях» кубов и симплексов и др.

Расширение библиотеки Г предусматривается за счет включения в нее математических задач, возникающих при новых формулировках инженерных задач в терминах материаловедения и технологии композиционных материалов.

**Библиотека Д** — вспомогательные математические процедуры — содержит модули, реализующие общие математические методы, в т. ч. операции с матрицами, интегрирование и дифференцирование экспериментальных табличных данных, процедуры безусловной и условной оптимизации, датчики случайных чисел и т. п.

Из большого числа процедур, включенных в систему COMPEX, ниже описаны только три. Их выбор обусловлен тем, что, с одной стороны, их описание в методической литературе, доступной инженерам-материаловедам, крайне ограничено, с другой — целесообразно их включение в состав матобеспечения каждого отраслевого ВЦ.

### § 3. СИНТЕЗ ОПТИМАЛЬНЫХ ПЛАНОВ ЭКСПЕРИМЕНТА

План Е эксперимента для установления связи между факторами  $x$  и наблюдаемым свойством  $Y$  определяется как множество  $\{x_u\}$  (спектр плана) точек факторного пространства  $R^K$ , в которых распределены  $N_m$  наблюдений за величиной  $Y$ ,

$$\varepsilon = \left\{ \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_u, \dots, \mathbf{x}_N \right\}, m_u \geq 1, u = 1, \bar{N}, \Sigma m_u = N_m \quad (\text{VI.1})$$

Точки  $\mathbf{x}_u$  принадлежат некоторой области действия  $\Omega_x (\mathbf{x}_u \in \Omega_x \subset \subset R^k)$ , определяемой инженерными ограничениями на факторы. Выбор плана эксперимента диктуется условиями соответствующей регрессионной задачи. В предыдущих главах рассмотрены частные случаи *типовой задачи регрессионного анализа* [3, 76]

$$Y_u = F(\mathbf{x}_u, \Theta) + \xi_u, u = \bar{1}, N \geq L, \quad (\text{VI.2})$$

где  $F(\mathbf{x}_u, \Theta)$  — функция отклика, задаваемая математической моделью,  $\Theta = \|\Theta_1, \Theta_2, \dots, \Theta_L\|$  — параметры регрессии,  $\xi_u$  — независимые случайные ошибки, распределенные по нормальному закону с математическим ожиданием  $E\{\xi_u\} = 0$  и дисперсией  $E\{\xi_u^2\} = \lambda^{-1}(\mathbf{x}_u)$ ,  $\lambda(x)$  — так называемая функция эффективности (в случае однородной в области  $\Omega_x$  ошибки эксперимента  $E\{\xi^2\} = \lambda^{-1}(x) = \text{const} = \sigma^2$ ).

Решить регрессионную задачу означает получить на основании (VI.1) и (VI.2), после эксперимента оценки параметров  $\Theta$ , оценку функции  $F(\Theta)$  и других функций от регрессионных параметров. Точность оценок  $\Theta$  (их ковариационная матрица — см. гл. I) зависит, помимо ошибки эксперимента, от метода получения оценок и плана эксперимента [76].

Для линейных по параметрам моделей функции отклика

$$F = \Theta^T f(x), \quad (\text{VI.3})$$

где  $f(x) = \|f_1(x), f_2(x), \dots, f_L(x)\|$  — базисные функции, оценки метода наименьших квадратов (МНК) совпадают с наилучшими линейными оценками [76, 77]:

$$\Theta = DY_f = M^{-1} Y_f, \quad (\text{VI.4})$$

где  $D$  — ковариационная матрица оценок параметров  $\Theta$ ;  $M$  — информационная матрица Фишера, предполагаемая неособенной,

$$M = \sum_{u=1}^N \lambda(\mathbf{x}_u) \cdot f(\mathbf{x}_u) \cdot f^T(\mathbf{x}_u), \quad (\text{VI.5})$$

$Y_f$  — вектор, учитывающий результаты эксперимента  $y_u$ ,

$$Y_f = \sum_{u=1}^N \lambda(\mathbf{x}_u) f(\mathbf{x}_u) y_u. \quad (\text{VI.6})$$

Наилучшая линейная оценка функции отклика  $F$

$$F = \Theta^T f(x). \quad (\text{VI.7})$$

Ковариационная матрица  $D$ , как видно по (VI.4...5), зависит только от плана и точности эксперимента, а функционалы  $\Psi(D)$  используются в качестве критериев оптимальности планов (см. § 5 гл. I).

Задача *синтеза плана*  $E^*$ , оптимального по критерию  $\psi$ , сводится к *экстремальной задаче* [76, 77]:

$$E^* = \arg \min_{E \in \mathcal{E}} \psi[D(E)], \quad (\text{VI.8})$$

где  $\Omega_E$  — множество возможных планов, содержащих  $N_m$  точек из области  $\Omega_x$ .

Задача (VI.8) чрезвычайно сложна. Ее решение оказалось возможным для различных критериев оптимальности с помощью численных методов, учитывающих свойства соответствующих функционалов  $\psi(D)$ . Вид и значения критериев оптимальности определяют цель задачи синтеза плана эксперимента (выражают требования к решениям регрессионной задачи). Условия (VI.2) определяют остальные входы задачи выбора плана: вид модели, область действия, функцию эффективности, число наблюдений, наличие и учет ранее реализованных опытов.

Для некоторых часто встречающихся (типовых) комбинаций значений входов возможные решения могут быть найдены (для постоянной функции эффективности  $\lambda(x)$ ) в каталогах планов [35, 69 и др.].

Для факторных и полиномиальных моделей опубликованы *таблицы планов эксперимента* [69]. Входные данные каталога, относящиеся к полиномиальным моделям, таковы: а) область действия  $\Omega$  —  $K$ -мерный куб или  $K$ -мерная сфера; модели — полиномы второй степени для  $1 \leq K \leq 7$ , полные полиномы  $m=3$  и некоторые частные виды полинома третьей степени для  $1 \leq K \leq 4$ ; б) область действия  $(q-1)$ -мерный симплекс; модели — полные и неполные приведенные полиномы степени  $1 \leq m \leq 4$  для  $2 \leq q \leq 9$ . В каталог включены (соответственно): а) планы с разным числом точек, полученные аналитически или рассчитанные на ЭВМ, удовлетворяющие тем или иным критериям оптимальности  $\psi$ ; б) симплекс-решетчатые планы для полных полиномов и неполные симплекс-решетки для неполных полиномов (насыщенные планы,  $N=L \leq 100$ ).

**Каталог последовательно генерированных планов** [35]. Область действия: а) куб; б) призма, образованная произведением куба (область взаимонезависимых факторов) и симплекса (область взаимозависимых факторов); модели: а) полные полиномы второй степени, полные и неполные полиномы третьей степени; б) приведенные полиномы до третьей степени относительно взаимозависимых факторов и до второй степени относительно взаимонезависимых факторов. В каталог включены планы, построенные на ЭВМ с помощью различных процедур синтеза  $D$  — оптимальных планов — для каждого случая области действия и вида модели представлены последовательности планов с числом наблюдений  $N_m$  от  $L$  до  $3L$ .

Указанные *каталоги* (и любые другие возможные) *не могут охватить* многообразия реальных задач планирования эксперимента. Ниже приведены примеры наиболее простых ситуаций, для которых целесообразно (или необходимо) рассчитать план на ЭВМ, решая задачу вида (VI.8).

**А.** Исследователю известно, что полиномиальная модель должна содержать *линейный эффект* одного из факторов  $x_i$  и эффект *третьего* порядка другого  $x_j$ . При необходимости экономить опыты реализация плана третьего порядка нецелесообразна.

**Б.** В стандартной ситуации (например, для случая полиномиальной модели второго порядка на кубе) исследователю необходимо включить в план эксперимента точки, не содержащиеся ни в одном

из планов каталога. Если при этом он ограничен числом опытов, целесообразно сформулировать и решить задачу синтеза плана, зафиксировав необходимые опыты как обязательные точки плана.

В. Область действия представляет собой часть куба, из которого «вырезаны» запрещенные области, соответствующие комбинациям значений факторов, при которых наблюдение невозможно (например, смесь взрывоопасна) или бессмысленно (например, переход в другое агрегатное состояние).

Г. При исследовании многокомпонентных смесей с ограничениями на содержания компонентов число опытов в планах типа Мак-Лина и Андерсона (см. [32]) значительно превосходит количество оцениваемых параметров. Насыщенные или близкие к ним планы можно рассчитать на ЭВМ.

Наибольшее развитие получили численные процедуры синтеза  $D$ -оптимальных планов ( $\psi(D) = \det D$ , см. гл. I). Популярность  $D$ -критерия объясняется в значительной степени тем фактом, что  $D$ -оптимальные планы оказываются «хорошими» по многим критериям (низкая дисперсия оценок параметров, низкая корреляция между оценками и др.). Большинство алгоритмов расчета оптимальных точных планов [35, 86] основано на предложенном В. В. Федоровым [77] методе последовательного замещения точек некоторого исходного невырожденного  $N$ -точечного плана. Исключается точка  $x_j$  и включается точка  $x$  в соответствии с критерием улучшения плана. При расчете  $D$ -оптимальных планов таким критерием является [77] приращение  $\Delta_i(x_j, x)$

$$|M(E_{i+1})| : |M(E_i)| = 1 + \Delta_i(x_j, x), \quad (VI.9)$$

где  $i$  — номер итерации.

Метод позволяет найти приближенное решение задачи (VI.8). Различия алгоритмов [86], использующих функцию  $\Delta_i(x_j, x)$ , заключаются в способе и точности решения вспомогательной задачи — найти  $x_j^*$  и  $x^*$ , обеспечивающие максимальное приращение определителя

$$\Delta_i(x_j^*, x^*) = \max_{x_j \in \{x_u\}} \max_{x \in Q_x} \Delta_i(x_j, x). \quad (VI.10)$$

Разнообразие алгоритмов вызвано стремлением сократить затраты машинного времени за счет меньшей, но достаточной для практики точности решения. Чем лучше алгоритм с точки зрения экономии машинного времени, тем хуже построенный план в смысле  $D$ -эффективности. Эмпирическое сравнение различных процедур [86] показывает, что (в среднем) для построения достаточно эффективных планов при относительно небольших затратах лучшими являются алгоритмы Уинна—Митчелла и Ван Шелквика, а для построения высокоэффективных  $D$ -оптимальных планов целесообразно использовать модифицированный алгоритм Федорова. Очевидно, в составе программных средств полезно иметь реализации процедур обоих классов, чтобы обеспечить возможность выбора алгоритма решения в зависимости от конкретных условий задачи планирования эксперимента.

Реализация процедур построения точных планов более всего связана со следующими условиями:

*тип модели* функции отклика определяет вид целевой функции задачи оптимизации, а следовательно, и наиболее подходящий алгоритм ее решения; целесообразно иметь набор алгоритмов оптимизации для эффективного решения задачи;

*область действия* определяет ограничения задачи оптимизации и, следовательно, наиболее эффективный алгоритм ее решения; часто оказывается удобной (а в некоторых постановках задач и необходимой) замена области действия конечным множеством точек — кандидатов в план (точки спектра непрерывного плана, вершины, центры и т. д.);

степень информированности о начальном приближении и множестве точек-кандидатов в план; могут оказаться полезными или необходимыми вспомогательные процедуры: для расчета непрерывного плана, для расчета вершин и центроидов многогранника области действия, для определения невырожденного начального плана и др.

В системе СОМРЕХ программная реализация процедуры расчета точного оптимального плана строится из набора модулей: *стандартных* (операции с матрицами, датчики псевдослучайных чисел); нескольких модификаций *универсальных* (вычисление значений базисных функций, пересчет ковариационной матрицы по рекуррентным формулам, расчет дисперсий предсказания, поиск экстремума и др.); нескольких модификаций *специальных* (расчет значений критерия замещения точек плана, основная программа).

«Структурные» входы задачи синтеза плана, задающие набор и модификации модулей и алгоритм расчета в целом:

А. Класс *эффективности плана* (пусть первый класс определяет высокоэффективные планы, практически лучшие по данному критерию, второй — достаточно эффективные).

Б. Вид *критерия* оптимальности  $\Psi$ .

В. Вид *модели* функции отклика.

Г. Вид *области* действия  $\Omega_x$ .

Д. Вид *функции эффективности* эксперимента  $\lambda(x)$ .

Е. Наличие *начального приближения* и заданных точек плана.

В исходном «стартовом» варианте СОМРЕХ предусмотрены следующие значения входов «А...Е».

А. *Класс эффективности плана*: для расчета планов I класса используется процедура Федорова или ее модификация [86], а для II класса — более быстродействующий алгоритм Уинна—Митчелла [86].

Б. *Вид критерия оптимальности*: D-оптимальность.

В. Вид модели — (VI.11), где  $p_{ij}$  — вещественные числа,

$$Y(x, \theta) = \sum_{j=1}^L \theta_j \prod_{l=1}^K x_l^{p_{lj}} \quad (\text{VI.11})$$

и приведенные полиномы для описания систем, содержащих взаимозависимые факторы.

Г. Вид области действия:

Г.1 — параллелепипед  $\Omega_1 = \Omega_x = \{a_i \leq x_i \leq b_i\} \subset R^K$  (рис. VI.1, а; ограничения показаны только по  $x_1$ ; пример см. в § 6 гл. I);

Г. 2 — симплекс  $\Omega_2 = \Omega_{v,1} = \{\sum_{i=1}^q k_i v_i = C, 0 \leq v_i \leq C\} \subset R^{q-1}$  (рис. VI.1, б; типичный пример — диаграммы «состав — свойство»; пример — [64, с. 339]);

Г.3 — выпуклый многогранник  $\Omega_3 = \Omega_{v,2} = \{\sum_{i=1}^q k_i v_i = C; 0 \leq a_i \leq v_i \leq b_i \leq C\} \subset R^{q-1}$  (рис. VI.1, в — ограничения даны по  $v_2$ , который не

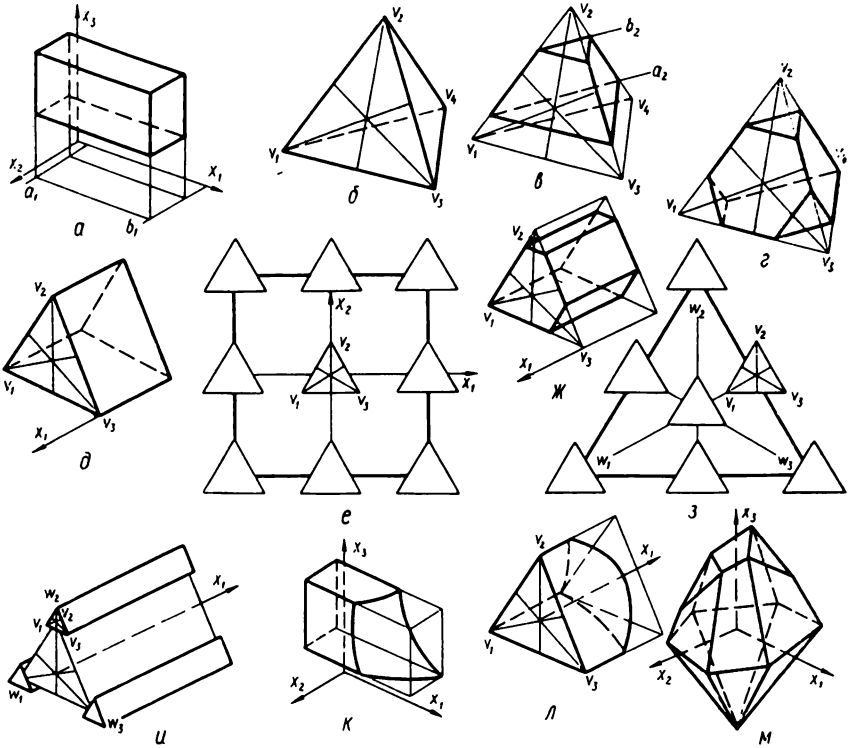


Рис. VI.1. Возможные области действия факторов при синтезе оптимальных планов эксперимента (обозначения в тексте).

может как полностью отсутствовать в системе, так и составлять в ней 100 %; рис. VI.1, з — ограничения даны на три компонента  $v_1$ ,  $v_2$  и  $v_3$ , которые не могут содержаться в системе в чистом виде; пример — [32, с. 313]);

Г.4 — призма  $\Omega_4 = (\Omega_x \times \Omega_{v,j}) \subset R^{K+q-1}$ , где знак  $\times$  — декартово произведение (рис. VI.1, д...е, соответственно один и два независимых от смеси фактора; пример [34, с. 19]; рис. VI. 1, ж — призма с ограничениями на компоненты  $v_2$  и  $v_3$ );

Г.5 — выпуклый многогранник  $\Omega_5 = (\Omega_v \times \Omega_w) \subset R^{q_v+q_w-2}$  (рис. VI.1, з — системы типа «смесь—смесь»; пример см. § 5 гл. IV);

Г.6 — выпуклый многогранник  $\Omega_6 = (\Omega_x \times \Omega_v \times \Omega_w) \subset R^{K+q_v+q_w-2}$  (рис. VI.1,  $u$  — системы типа «смесь — смесь — технология»);

Г.7 — области, образованные пересечением вышеуказанных областей  $\Omega_1$ — $\Omega_6$  с дополнительной ограничивающей поверхностью  $Q(x, v, w)$  (рис. VI.1,  $\kappa$  — ограничение на часть параллелепипеда, возникающее, в частности, в термодинамических задачах; рис. VI.1,  $l$  —

Таблица VI.1. Насыщенный  $D$ -оптимальный план эксперимента для модели (VI.12)

Номер точки	$v_1$	$v_2$	$v_3$	$w_1$	$w_2$	$w_3$
1	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3
2	1	0	0	1	0	0
3	1	0	0	0	1	0
4	1	0	0	0	0	1
5	0	1	0	0	0	1
6	0	1	0	1/2	0	1/2
7	0	1	0	0	1	0
8	0	0	1	1	0	0
9	0	0	1	1/2	1/2	0
10	0	0	1	0	0	1
11	0	0	1	0	1/2	1/2
12	0	1/2	1/2	1/2	1/2	0
13	1/2	0	1/2	1/2	1/2	0
14	1/2	1/2	0	1	0	0
15	1/3	1/3	1/3	0	1	0

ограничение на часть призмы, возникающее, в частности, при изучении многокомпонентных добавок с разной растворимостью составляющих);

Г.8 — оболочка, натянутая на конечное множество точек (рис. VI.1,  $m$  — выпуклый нерегулярный многогранник с 13 вершинами);

Г.9 — конечное множество точек (например, вершины и центры любых из вышеуказанных многогранников).

Д. Функция эффективности эксперимента:  $\lambda(x) = \text{const}$ , нормируемая к  $\lambda(x) = 1$ .

Е. Начальное приближение: исходный план может быть задан (точки спектра непрерывного плана, вершины и др.) или выбран случайно; при необходимости учета уже реализованных опытов соответствующие точки задаются как несмещаемые точки исходного плана.

В табл. VI.1 показан насыщенный план для модели

$$\hat{Y} = \sum_{j>i=1}^3 A_{ij} v_i v_j + \sum_{j>i=1}^3 B_{ij} w_i w_j + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 C_{ij} v_i w_j \quad (\text{VI.12})$$

и области действия типа  $\Omega_5$

$$(\Omega_v \times \Omega_w) = \left\{ \sum_{i=1}^3 v_i = 1, \sum_{i=1}^3 w_i = 1; 0 \leq v_i, w_i \leq 1 \right\}. \quad (\text{VI.13})$$

План рассчитан с помощью процедуры, основные элементы которой описаны в [26]. Точка № 1 задавалась как *обязательная* точка плана. Кроме нее исходный план включал набор из 14 вершин и центроидов. Основные характеристики полученного плана: во всех его точках отношение дисперсии предсказания по модели к дисперсии воспроизводимости  $d/\sigma^2_3=1$ ; определитель ковариационной матрицы  $|D|=0,21 \cdot 10^9$ ; определитель нормированной информационной матрицы  $|M|_N^m=0,11 \cdot 10^{-25}$ ; максимальный коэффициент корреляции оценок  $\rho_{\max}=0,78$ . План синтезирован для решения задачи о влиянии гранулометрии и минералогического состава наполнителя на свойства полимербетона (см. § 5 гл. IV).

#### § 4. ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЙ РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ КАК ИНСТРУМЕНТ УПРОЩЕНИЯ МОДЕЛЕЙ И ПОВЫШЕНИЯ ИХ ТОЧНОСТИ

Начальная модель, как правило, задается в виде полинома степени  $m$  полного или неполного (без  $x_i^m$  и т. п. — см. табл. I.3), все  $L$  оценок  $\hat{\Theta}_i$  коэффициентов которого определяются по экспериментальным данным и являются случайными величинами, доверительный интервал которых накрывает истинные значения коэффициентов  $\Theta_i$  с заданным риском  $\alpha$ . Естественно, что могут появляться (практически во всех моделях появляются!) оценки  $\hat{\Theta}_j$ , у которых *доверительный интервал накрывает ноль*. Такие оценки называются статистически *незначимыми*; соответствующий им эффект может быть с риском  $\alpha$  *исключен* из модели. Для крайне ограниченного круга моделей, построенных по ортогональным планам (все корреляции  $\rho\{\hat{\Theta}_i, \hat{\Theta}_j\}=0$ ), исключение незначимой оценки не требует пересчета всех оставшихся оценок. Для моделей, построенных по планам с блочно-диагональной структурой матрицы  $D$  [16, с. 118], может быть без пересчета остальных оценок исключена та  $\hat{\Theta}_i$ , для которой  $\rho\{\hat{\Theta}_i, \hat{\Theta}_j\}=0$  (для всех  $i \neq j$ ). В остальных случаях исключение оценки  $\hat{\Theta}_i$  обязательно требует пересчета остающихся  $\hat{\Theta}_j$ , величина которых будет меняться в зависимости от  $0 < \rho\{\hat{\Theta}_i, \hat{\Theta}_j\} < 1$ . Процедура исключения  $\hat{\Theta}_i$  недостаточно корректна с математической точки зрения, поскольку должна оцениваться доверительная (при  $P=1-\alpha$ ) область для *всех* параметров [16, с. 96], ограниченная  $L$ -мерным эллипсоидом рассеяния оценок». Однако в целях *упрощения* вида модели в инженерных задачах допускается исключение незначимых  $\hat{\Theta}_i$ , поскольку при этом увеличивается число степеней свободы  $f_{на}$ , то нередко *повышается точность* моделей, так как  $s^2_{на} = SS_{на} \cdot f_{на}$  уменьшается. Процедура исключения называется «*последовательный регрессионный анализ*».

В системе COMPEX последовательный регрессионный анализ ориентирован на исключение оценок, имеющих наименьшую гауссов-



скую точность  $h\{b_i\} = b_i \sqrt{c_{ii}} = ts_\alpha$  (1.20), которая может определяться без фиксации риска  $\alpha$ , т. е. без выбора числового значения  $t\{\alpha, f_\alpha\}$  (см. гл. I).

На рис. VI.2 показаны результаты такого анализа для модели  $R_{T_{28}}$  (V.8). По мере уменьшения числа эффектов в модели средне-квадратичная ошибка неадекватности в начале падает от  $s_{на} = 2,40$  МПа (точка А, полная квадратичная модель адекватна по  $F$ -критерию,  $F_{на} = 1,15 < F_{табл}$ ) до  $(s_{на})_{min} = 1,69$  МПа (точка В, модель с 30 эффектами).

Далее  $s_{на}$  начинает возрастать по сложной закономерности (гармонические колебания около ветви параболы высокого порядка), связанной с гауссовской точностью  $h\{b_i\}$  исключаемого эффекта. При  $s_{на} = 2,92$  модель становится неадекватной (точка С, модель с восемью эффектами,  $F_{на} = 1,70 > F_{табл}$ ). При этом  $h\{b_i\}$  коэффициента-кандидата на исключение возрастает от 0,14 МПа и достигает: в точке В, при  $\alpha = 0,5$  (двухсторонний риск [16, с. 251]), — 1,81; в точке D, при  $\alpha = 0,4 - 2,05$ ; в точке F, при  $\alpha = 0,1 - 4,6$ ; в точке E, при  $\alpha = 0,02 - 5,54$  и в точке С, при  $0,005 \leq \alpha \leq 0,01 - 6,52$ . Столчатая диаграмма не показывает монотонного роста  $h\{b_i\}$  для исключаемой оценки, поскольку коэффициенты корреляции оценок  $\rho\{b_i b_j\} \neq 0$ .

Остановку последовательного регрессионного анализа можно выбирать в зависимости от целей эксперимента и моделирования в любой из точек от В до С. Целесообразно делать несколько остановок с выводом результатов на печать для построения серии графов моделей (рис. VI.2, б...г) при *возрастающей степени риска* [16, с. 229]. Это позволяет формулировать инженерные *выводы* от наиболее достоверных (риск  $\alpha = 0,02$ ) к осторожным «равновозможным» выводам ( $\alpha = 0,50$ ), полезным на стадии поисковых работ.

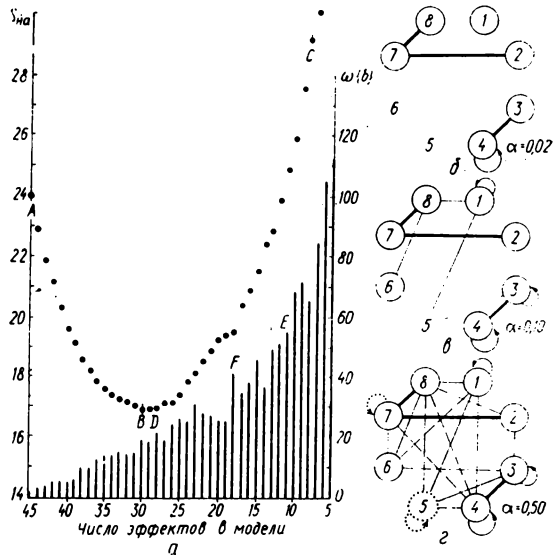


Рис. VI.2. Результаты последовательного регрессионного анализа (а) для модели  $R_{T_{28}}$ : Изменение  $s_{на}$  (точечная диаграмма) и  $h\{b_i\}$  для оценки кандидата на исключение (столчатая диаграмма), а также графы моделей при разной степени риска (б...г).

**§ 5. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФАКТОРОВ И ВЫХОДОВ  
НА ОСНОВЕ АПРИОРНОЙ ИНФОРМАЦИИ  
О КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ**

Большинство многофакторных полиномиальных моделей, применяемых в материаловедении и технологии, являются квадратичными. Из этого следует, что влияние любого из факторов  $X_i$  на выход  $Y$  (при остальных  $X_j = \text{const}$ ) может быть описано только квадратичной параболой  $Y = b_0 + b_i X_i + b_{ii} X_i^2$  (см. рис. 1.6, а) или при  $b_{ii} = 0$  — прямой. В то же время анализ однофакторных зависимостей  $Y = \varphi(X)$ , опубликованных в литературе по материаловедению и технологии в виде графиков и таблиц, показывает, что во многих ситуациях влияние рецептурно-технологических факторов на отклик  $Y$  системы нельзя аппроксимировать с достаточной для инженерных задач точностью квадратичной параболой даже на ограниченных границах эксперимента участков.

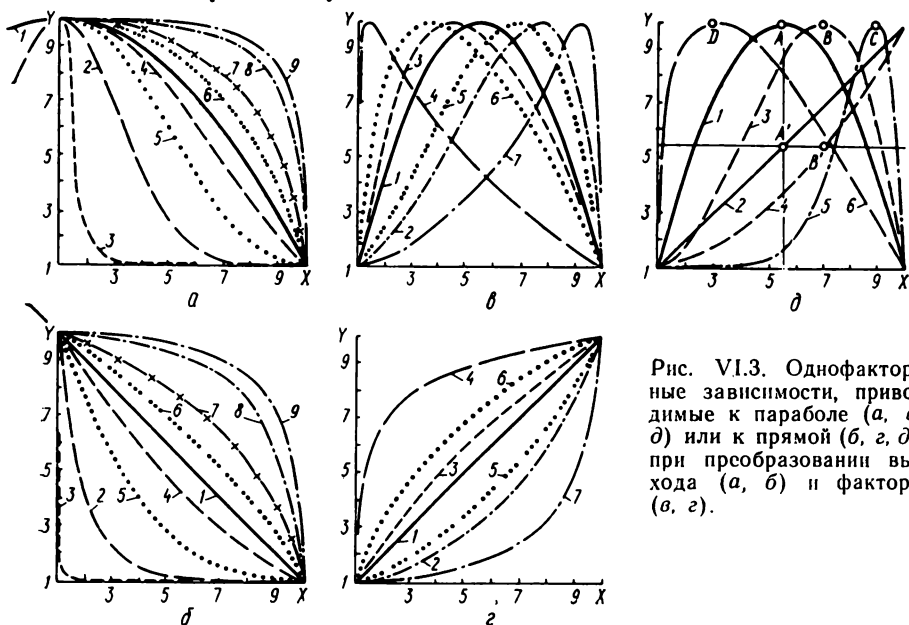


Рис. VI.3. Однофакторные зависимости, приводимые к параболе (а, в, в) или к прямой (б, г, д) при преобразовании выхода (а, б) и фактора (в, г).

Разрешение этой трудности можно, по-видимому, искать в трех направлениях. Во-первых, можно изменить вид многофакторной модели, что трудно признать удобным, поскольку при этом необходимо отказаться от использования каталогизированных планов эксперимента. Во-вторых, можно искать такие преобразования факторов  $Z = f(X)$ , при которых функционал  $Y = \Psi(Z) = \Psi(f(X))$  будет близок к параболе. В-третьих, провести аналогичное преобразование для выхода  $Y$ , т. е. искать такое  $V = F\{Y\}$ , при котором будет получена параболка  $V = b_0 + b_i X_i + b_{ii} X_i^2$ . Возможен, конечно, и синтез всех трех направлений.

На рис. IV.3 показаны однофакторные зависимости  $Y = \varphi(X)$ , приводимые к параболам или прямым за счет преобразования  $X$  или  $Y$ . Они нормированы так, чтобы  $1 \leq X \leq 10$  и  $1 \leq Y \leq 10$ .

На рис. VI.3, а к параболе «1», описываемой уравнением  $Y = 9,889 + 0,222X - 0,111X^2$  (а на рис. VI.3, б — к прямой «1»  $Y = 11 - X$ ), приводятся за счет преобразования  $Y$  следующие функции: 2 — экспонента  $e^Y$  за счет логарифмирования, 3 — функция  $e^{Y^2}$  — логарифмированием с последующим извлечением корня квадратного ( $V = \sqrt{\ln Y}$ ), 4 — функция  $e^{Y^3}$  за счет логарифмирования и возведения в квадрат, 5 — кубическая форма  $Y^3$  извлечением корня ( $V = \sqrt[3]{Y}$ ), 6 — функция  $\sqrt{Y}$  возведением в квадрат, 7 — логарифм  $\ln Y$  экспоненцированием, 8 — гипербола  $Y^{-1}$  обратной функцией, 9 — экспонента  $e^{1/Y}$  логарифмированием и взятием обратной функции.

На рис. VI.3, в к параболе «1», описываемой уравнением  $Y = -3,444 + 4,889X - 0,444X^2$  (а на рис. VI.3, г...к прямой  $Y = X$ ), за счет преобразования факторов приводятся функции: 2 — от аргумента, полученного логарифмированием  $\ln X$ , 3 — полученного показательной функцией  $1,1^X$ , 4 — аналогично функцией  $2^X$ , 5 — степенной функцией  $X^{1/3}$ , 6 — введением  $X^2$ , 7 — обратной функцией  $1/X$ .

На рис. VI.3, д показано преобразование к параболе «1» с максимумом в точке «А» и к прямой 2 функций с известной координатой максимума в точке «В» (или «С» или «D») за счет нелинейного преобразования в нормализованные переменные  $-1 \leq x \leq +1$  типа

$$x = \left( \frac{X - X_{\min}}{X_B - X_{\min}} \right)^\gamma - 1, \quad (\text{VI.14})$$

где  $\gamma = \ln 2 : \ln \left( \frac{X_{\max} - X_{\min}}{X_B - X_{\min}} \right)$ ;  $X_{\min}$ ,  $X_{\max}$  — нижняя и верхняя границы эксперимента.

Возврат к именованным переменным осуществляется как

$$X = X_B (x + 1)^\gamma. \quad (\text{VI.15})$$

У каждого из вышеприведенных приемов учета априорной информации есть свои достоинства и недостатки. Преобразование  $Y$  можно вести и после проведения эксперимента, но при этом следует проверять не нарушены ли предпосылки регрессионного анализа [2, 5, 8 и др.]. Кроме того, преобразование выхода на основе анализа одного  $X_i$  может оказаться непригодным для других  $X_j$ . Преобразование факторов  $X$  удобно в силу их независимости, однако при этом нередко усложняется интерпретация многофакторной модели. Преобразование (VI.15) весьма полезно при исследовании действия химических добавок и их сравнении с эталонным бездобавочным материалом ( $X_{\min} = 0$ ), но при этом также усложняется интерпретация модели.

Проблема использования априорной информации не может считаться решенной, так как это один из наиболее трудно формализуемых этапов исследования (см. рис. I.4). Однако предусмотренные в СОМРЕХ специальные программы, реализующие набор преобразований  $X$  и  $Y$ , облегчают экспериментаторам решение инженерных задач за счет возможности исследования «веера» однофакторных зависимостей и их профессионально-логического анализа.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Адлер Ю. П., Маркова Е. В., Грановский Ю. В.* Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий — 2-е изд.— М.: Наука, 1976.— 279 с.
2. *Адлер Ю. П., Грановский Ю. В., Маркова Е. В.* Теория эксперимента: Настоящее, прошлое, будущее.— М.: Знание, 1982.— 64 с.
3. *Айвазян С. А.* Статистическое исследование зависимостей.— М.: Металлургия, 1968.— 227 с.
4. Алгоритмическое и программное обеспечение прикладного статистического анализа / Науч. ред. С. А. Айвазян, И. С. Енюков.— М.: Наука, 1980.— 421 с.
5. *Антоненко Г. Я.* Организация, планирование и управление предприятиями строительных изделий и конструкций.— Киев: Вища школа, 1981.— 312 с.
6. *Ахвердов И. Н.* Основы физики бетона.— М.: Стройиздат, 1981.— 464 с.
7. *Баженов Ю. М.* Технология бетона.— М.: Высш. школа, 1978.— 454 с.
8. *Баженов Ю. М., Вознесенский В. А.* Перспективы применения математических методов в технологии сборного железобетона.— М.: Стройиздат, 1974.— 192 с.
9. *Басин В. Е.* Адгезионная прочность.— М.: Химия, 1981.— 208 с.
10. Бетоны с эффективными суперпластификаторами: Сб. науч. тр./Под ред. Ф. М. Иванова.— М.: НИИЖБ Госстроя СССР, 1979.— 228 с.
11. *Блехман И. И., Мыйжис А. Д., Пановко Я. Г.* Прикладная математика. Предмет, логика, особенности подходов.— Киев: Наук. думка, 1976.— 267 с.
12. *Болотин В. В.* Механика композитных материалов и конструкций из них.— В кн.: Стронт. механика: Современное состояние и перспективы развития. М.: Стройиздат, 1972, с. 65—98.
13. *Бондарь А. Г., Статюха Г. А., Потяженко И. А.* Планирование эксперимента при оптимизации процессов химической технологии.— Киев: Вища школа, 1979.— 220 с.
14. *Веников В. А.* Теория подобия и моделирования.— М.: Высш. школа, 1976.— 479 с.
15. *Вознесенский В. А.* Статистические решения в технологических задачах.— Кишинев: Картя Молдовеняскэ, 1968.— 232 с.
16. *Вознесенский В. А.* Статистические методы планирования эксперимента в технико-экономических исследованиях.— 2-е изд.— М.: Финансы и статистика, 1981.— 263 с.
17. *Вознесенский В. А.* Оптимизация состава многокомпонентных добавок в композиты.— Киев: О-во Знание, 1981.— 20 с.
18. *Вознесенский В. А., Ковальчук А. Ф.* Принятие решений по статистическим моделям.— М.: Статистика, 1978.— 192 с.
19. *Воробьев В. А., Кивран В. К., Корякин В. Н.* Применение физико-математических методов в исследовании свойств бетона.— М.: Высш. школа, 1977.— 271 с.
20. *Выровой В. Н., Гризан Ю. М., Трофимова Л. Е.* Применение математической теории эксперимента в задачах реологии новых композиционных материалов.— Киев: О-во Знание, 1980.— 18 с.
21. *Выровой В. Н., Абакумов В. В., Азарова С. Я.* Оптимизация безотходных и энергосберегающих технологий композиционных материалов.— Киев: О-во Знание, 1982.— 24 с.
22. Гидратация и твердение вяжущих: Тез. докл. всесоюзн. совещ.— Львов: Изд-во ЛГУ, 1981.— 332 с.
23. Гидратация и твердение цемента: Тр. VI Междунар. конгр. по химии цемента.— М.: Стройиздат, 1976, т. 2, кн. 2.— 224 с.
24. *Горлов Ю. П., Меркин А. П., Устенко А. А.* Технология теплоизоляционных материалов.— М.: Стройиздат, 1980.— 399 с.
25. *Гусев Б. В., Засимко В. Г., Нетеса Н. А.* Бетон: яким йому бути?— К.: Т-во Знання, 1978.— 48 с.
26. *Даниленко Е. Л., Ляшенко Т. В.* Расчет точных оптимальных планов на выпуклых многогранниках.— Заводская лаб., 1979, № 3, с. 249—251.
27. *Дворкин Л. И.* Оптимальное проектирование составов бетона.— Львов: Вища школа, 1981.— 159 с.
28. *Денисов В. И.* Математическое обеспечение системы ЭВМ — экспериментатор.— М.: Наука, 1977.— 251 с.
29. *Ееипко В. М.* Организация и проектирование систем автоматизации научно-технических экспериментов.— Киев: Наук. думка, 1978.— 232 с.

30. *Займан Дж.* Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем.— М.: Мир, 1982.— 592 с.
31. *Закгейм А. Ю.* Введение в моделирование химико-технологических процессов.— М.: Химия, 1982.— 288 с.
32. *Зедгендзе И. Г.* Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных смесей.— М.: Наука, 1976.— 390 с.
33. Исследование влияния латекса СКО-65 ГП на структуру и свойства полиминеральных материалов / *Черкинский Ю. С., Слипченко Г. Ф., Слипченко Ф. Г.* и др.— В кн.: Полимерные строительные материалы / ВНИИ новых строительных материалов. М.: Стройиздат, 1970, вып. 27 (35), с. 150—160.
34. *Карповский Е. Я., Ляшенко Т. В., Чернецкий А. А.* Повышение качества и эффективности исследований при использовании математической теории эксперимента.— Киев: О-во Знание, 1981.— 26 с.
35. Каталог последовательно генерированных планов / *Вучков И. Н., Йончев Х. А., Дагалиев Д. Л.* и др.— София: ВХТИ, 1978.— 266 с.
36. *Кафаров В. В.* Принципы создания безотходных химических производств.— М.: Химия, 1982.— 288 с.
37. *Керш В. Я.* Новые электрофизические методы и устройства в системах контроля качества композиционных материалов. Киев: О-во Знание, 1981.— 22 с.
38. *Клейнен Дж.* Статистические методы в имитационном моделировании.— М.: Статистика, 1978, вып. 1.— 222 с.; вып. 2.— 335 с.
39. Композиционные материалы.— М.: Мир, 1978, тт. 1.— 438 с., 2.— 564 с., 5.— 484 с., 6.— 294 с.; М.: Машиностроение, 1978, тт. 3.— 510 с., 4.— 504 с., 7.— 344 с., 8.— 262 с.
40. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров.— М.: Наука, 1978.— 720 с.
41. *Красильников К. Г., Никитина Л. В., Скоблинская Н. Н.* Физико-химия собственных деформаций цементного камня.— М.: Стройиздат, 1980.— 225 с.
42. *Круглицкий Н. Н.* Основы физико-химической механики.— Киев: Вища школа, 1975, ч. 1.— 267 с.; 1976, ч. 2.— 207 с.; 1977, ч. 3.— 135 с.
43. *Лещинский М. Ю.* Испытание бетона: Справочное пособие.— М.: Стройиздат, 1980.— 360 с.
44. Механика и технология на композиционных материалах: Материалы I—III нац. конф.— София: БАН, 1976.— 919 с.; 1979.— 883 с.; 1982.— 805 с.
45. *Моисеев Н. Н.* Математические задачи системного анализа.— М.: Наука, 1981.— 487 с.
46. *Мчедлов-Петросян О. П.* Химия неорганических строительных материалов.— М.: Стройиздат, 1971.— 224 с.
47. *Налимов В. В., Голицова Т. И.* Логические основания планирования эксперимента.— М.: Металлургия, 1981.— 151 с.
48. Научные основы материаловедения / Отв. ред. Ч. В. Копецкий.— М.: Наука, 1981.— 259 с.
49. *Николаев С. В.* Сборный железобетон: Выбор технологических решений.— М.: Стройиздат, 1978.— 239 с.
50. *Новик Ф. С., Арсов Я. Б.* Оптимизация процессов технологии металлов методами планирования экспериментов.— М.: Машиностроение; София: Техника, 1980.— 304 с.
51. Новые идеи в планировании эксперимента / Под ред. Налимова В. В.— М.: Наука, 1969.— 334 с.
52. Организация и автоматизация на экспериментальных исследованиях: Докл. III нац. науч.-техн. конф.— Русе, 1981, кн. 1.— 262 с.; кн. 3.— 202 с.; кн. 4.— 158 с.
53. *Осипова В. Е.* Экспериментальное исследование процессов теплообмена.— М.: Энергия, 1979.— 320 с.
54. Планирование экспериментов в исследовании технологических процессов / *Хартман К., Лецкий Э., Шефер В.* и др.— М.: Мир, 1977.— 552 с.
55. *Поваляев М. И.* Определение коэффициентов переноса тепла методом плоского теплового импульса.— В кн.: Сб. тр. МИИТ. М.: Трансжелдориздат, 1959, вып. 122, с. 210—214.
56. Повышение качества и эффективности изготовления бетонных и железобетонных конструкций за счет химических добавок: Тез докл. Всесоюз. конф.— М.: ЦПНТОстройиндустрии, 1981.— 285 с.

57. Применение суперпластификаторов в бетоне / *Батраков В. Г., Иванов Ф. М., Силина Е. С., Фаликман В. Р.*—Стр-во и архитектура: Обзорная инф. Сер. Строит. материалы и изделия, 1982, с. 59.
58. Процессы и аппараты в технологиях строительных материалов / *Борщ И. М., Вознесенский В. А., Мухин В. М.* и др.—Киев: Вища школа, 1981.— 296 с.
59. Разрушение.— М.: Мир, 1976, т. 7, ч. 1.— 634 с.; т. 7, ч. 2.— 470 с.
60. *Растргин Л. А.* Современные принципы управления сложными объектами.— М.: Сов. радио, 1980.— 232 с.
61. *Рапинов В. Б., Розенберг Т. И.* Химические добавки в бетон.— М.: Стройиздат, 1973.— 207 с.
62. *Рембиндер П. А.* Поверхностные явления в дисперсных системах. Физико-химическая механика: Избр. тр.— М.: Наука, 1979.— 384 с.
63. Реология бетонных смесей и ее технологические задачи: Тез. докл. III и IV Всесоюз. симп.— Рига: Рижск. политех. ин-т, 1979.— 235 с.; 1982.— 411 с.
64. *Рохваргер А. Е., Шевяков А. Ю.* Математическое планирование научно-технических исследований.— М.: Наука, 1975.— 448 с.
65. *Сиденко В. М., Грушко И. М.* Основы научных исследований.— Харьков: Вища школа, 1977.— 225 с.
66. *Сироткина Н. Л., Смелянский В. Л.* Электронно-микроскопическое исследование полимерцементных составов.— В кн.: Физико-химическое исследование процессов создания и разрушения структур новых строительных материалов. М.: Госстройиздат, 1963, вып. 8, с. 43—56.
67. *Соломатов В. И.* Элементы общей теории композиционных строительных материалов.— Изв. вуз.: Стр-во и архитектура, 1980, № 8, с. 61—70.
68. Состав, структура и свойства цементных бетонов / *Горчаков Г. И., Ориентлихер Л. П., Савин В. И.* и др.— М.: Стройиздат, 1976.— 145 с.
69. Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей: Справ. изд. / Под. ред. В. В. Налимова.— М.: Металлургия, 1982.— 751 с.
70. *Тамуж В. П., Куксенко В. С.* Микромеханика разрушения полимерных материалов.— Рига: Зинатне, 1978.— 294 с.
71. Тезисы докладов VI Всесоюз. конф. по планированию и автоматизации эксперимента в научных исследованиях.— М.: Моск. энерг. ин-т, 1980, ч. 1.— 156 с.; ч. 2.— 155 с.
72. Технологическая механика бетона: Межвуз. науч.-техн. сб.— Рига: Рижск. политех. ин-т, 1976, № 1.— 148 с.; 1979, № 4.— 120 с.; 1982, № 7.— 167 с.
73. *Третьяченко Г. Н.* Моделирование при изучении прочности конструкций.— Киев: Наук. думка, 1979.— 232 с.
74. *Уемов А. И.* Логические основы метода моделирования.— М.: Мысль, 1971.— 311 с.
75. *Урьев Н. Б., Дубинин И. С.* Коллоидные цементные растворы.— Л.: Стройиздат, 1980.— 192 с.
76. *Успенский А. Б., Федоров В. В.* Вычислительные аспекты метода наименьших квадратов при анализе и планировании регрессионных экспериментов.— М.: Изд-во МГУ, 1975.— 168 с.
77. *Федоров В. В.* Теория оптимального эксперимента.— М.: Наука, 1971.— 312 с.
78. Физико-химическая механика.— София: БАН, 1979, кн. 5.— 83 с.
79. Физико-химические основы композиции неорганическое вяжущее стекловолокно / *Пашенко А. А., Сербин В. П., Клименко В. С.* и др.— Киев: Вища школа, 1979.— 223 с.
80. *Цыганков А. П., Балацкий О. Ф., Сенин В. Н.* Технический прогресс — химия — окружающая среда.— М.: Химия, 1979.— 296 с.
81. *Чернявский К. С.* Стереология в металловедении.— М.: Металлургия, 1977.— 280 с.
82. *Шейн В. И.* Физико-химические основы оптимизации технологии бетона.— М.: Стройиздат, 1977.— 272 с.
83. *Шейкин А. Е., Чеховский Ю. В., Бруссер М. И.* Структура и свойства цементных бетонов.— М.: Стройиздат, 1979.— 344 с.
84. *Шехтер Ю. Н., Крейн С. Э.* Поверхностно-активные вещества из нефтяного сырья.— М.: Химия, 1971.— 488 с.
85. Элементы технологической механики ячеистых бетонов / *Куннос Г. Я., Лапса В. Х., Линдербург Б. Я.* и др.— Рига: Зинатне, 1976.— 95 с.
86. *Cook R. D., Nachtsheim C. I.* A comparison of Algorithms for constructing Exact D-Optimal Designs.— Technometrics, 1980. v. 22, N 3, p. 315—324.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . .	3
<b>Глава I. Системный подход, эксперимент и моделирование — триединая основа оптимизации рецептурно-технологических решений . . . . .</b>	<b>5</b>
§ 1. Задачи оптимизации . . . . .	5
§ 2. Технология изготовления композиционных материалов как система . . . . .	8
§ 3. Математические модели и пути минимизации риска аналогии . . . . .	12
§ 4. Многофакторные полиномиальные модели . . . . .	21
§ 5. Стратегия анализа и оптимизация новых композиционных материалов . . . . .	29
§ 6. Комплекс задач, решаемых по одной модели . . . . .	33
<b>Глава II. Структурно-физические основы оптимизации механических свойств композиционных материалов . . . . .</b>	<b>52</b>
§ 1. Оптимизация свойств материалов через оптимизацию структуры . . . . .	52
§ 2. Оптимизация структуры наполненных композиционных материалов . . . . .	55
§ 3. Оптимизация структуры композиционных материалов, содержащих наполнители . . . . .	58
§ 4. Оптимизация объемных деформационных процессов в твердеющих композитах . . . . .	64
<b>Глава III. Структурная оптимизация теплозащитных свойств композитов . . . . .</b>	<b>67</b>
§ 1. Связь теплофизических показателей композиционного материала с его пористой структурой . . . . .	67
§ 2. Экспрессные методы определения макроструктурных и теплофизических характеристик композитов . . . . .	72
§ 3. Экспериментально-статистические модели в задачах оптимизации макроструктуры и теплозащитных свойств ячеистых материалов . . . . .	75
§ 4. Изопараметрический анализ структуры и свойств ячеистого бетона . . . . .	77
<b>Глава IV. Оптимизация реологических характеристик технологических смесей композитов . . . . .</b>	<b>80</b>
§ 1. Особенности математического моделирования технологических смесей композитов . . . . .	80
§ 2. Моделирование и анализ взаимосвязи реологических параметров и рецептурно-технологических факторов для золоцементного композита . . . . .	86
§ 3. Минимизация расхода вяжущего при получении изореологических смесей . . . . .	89
§ 4. Оптимизация кинетики изменения реологических характеристик дисперсно-армированного композита при нормировании качества затвердевшего материала . . . . .	91
§ 5. Применение нового класса моделей «смесь — смесь — свойства» в задачах анализа реологических характеристик полимерных композитов . . . . .	96
§ 6. Интенсификация переработки герметика за счет изменения его реологических свойств при воздействии ультразвука . . . . .	100
<b>Глава V. Управление качеством композитов и материально-энергетическими ресурсами их производства с помощью химических добавок . . . . .</b>	<b>101</b>
§ 1. Особенности моделирования . . . . .	101
§ 2. Оценка технологических решений и эффективности новых добавок по показателям качества композита . . . . .	104

§ 3. Сравнительный анализ суперпластификаторов для поиска оптимальных методов воздействия на технологию и свойства бетона . . . . .	10
§ 4. Оптимизация рецептуры гипсовых композитов при утилизации отходов промышленности . . . . .	11
§ 5. Компромиссные решения при оптимизации составов бетонов и режимов тепловой обработки железобетонных конструкций . . . . .	12
<b>Глава VI. COMPEX — система обработки данных, моделирования, оптимизации и принятия инженерных решений при экспериментальном исследовании композиционных материалов . . . . .</b>	<b>12</b>
§ 1. Роль ЭВМ в экспериментальных исследованиях в области материаловедения и технологии . . . . .	12
§ 2. Краткое описание системы COMPEX . . . . .	12
§ 3. Синтез оптимальных планов эксперимента . . . . .	13
§ 4. Последовательный регрессионный анализ как инструмент упрощения моделей и повышения их точности . . . . .	14
§ 5. Преобразование факторов и выходов на основе априорной информации о композиционных материалах . . . . .	14
Список литературы . . . . .	14

**Современные методы оптимизации композиционных материалов / В. А. Вознесенский, В. Н. Выровой, В. Я. Керш и др.; Под ред. В. А. Вознесенского. — К.: Будівельник, 1983. — 144 с., ил. Библиогр.: с. 140—142.**

В книге изложены практические решения типовых технологических задач при создании новых композиционных материалов на основе простых методов математического моделирования. Описаны принципиально новые методы создания рецептур, выбора режимов, анализа качества и надежности материалов. Даны необходимые для оперативной работы таблицы, графики, формулы. Нормативные материалы приведены по состоянию на 01.03.83. Рассчитана на инженерно-технических работников стройиндустрии и проектных организаций.

С 320200000—097 44.83  
М203(04)—83