



УДК 691.175

А.М. Сулейманов – доктор технических наук, профессор

Тел.: (843) 510-46-04, e-mail: alfred-sulejmanov@yandex.ru

Казанский государственный архитектурно-строительный университет (КазГАСУ)

А.Л. Померанцев – доктор физико-математических наук, профессор

О.Е. Родионова – доктор физико-математических наук, профессор

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва (ИХФ РАН)

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ДОЛГОВЕЧНОСТИ МАТЕРИАЛОВ ПРОЕКЦИОННЫМИ МАТЕМАТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ*

АННОТАЦИЯ

Разработана многомерная модель процессов старения материалов мягких оболочек для анализа связей в исследуемых системах и их прогноза. Используются проекционные математические методы: метод главных компонент (МГК) и метод проекции на латентные структуры (ПЛС).

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: многомерная модель, прогнозирование, метод главных компонент, метод проекции на латентные структуры.

A.M. Suleymanov – doctor of technical science, professor

Tel.: (843) 510-46-04, e-mail: alfred-sulejmanov@yandex.ru

Kazan State University of Architecture and Engineering (KSUAE)

A.L. Pomerantsev – doctor of physical-mathematical sciences, professor

O.Y. Rodionova – doctor of physical-mathematical sciences, professor

N.N. Semenov Institute of Chemical Physics, RAS, Moscow

PREDICTION DURABILITY OF MATERIALS BY PROJECTIVE MATHEMATICAL METHODS

ABSTRACT

The multivariate model of processes of ageing of materials is developed for soft environments for the analysis of connections in researched systems and their prediction. Projective mathematical methods have been used: a method of Principal Component Analysis (PCA) and a method of a Projection to Latent Structures (PLS).

KEYWORDS: multivariate model, prediction, method of Principal Component Analysis, a method of a Projection to Latent Structures.

При решении прогностических задач важным этапом является построение *прогнозирующей системы*, т.е. системы методов и средств их реализации. Разнообразие и оптимальное сочетание этих методов и средств зависит от природы и сложности *объекта прогнозирования* – процесса, системы или явления, о состоянии которого делается прогноз. От этих же факторов зависит и выбор *модели прогнозирования*, исследование которой позволяет получить информацию о возможных состояниях объекта прогнозирования. Так, при моделировании сложных физико-химических систем, каковыми являются процессы старения и разрушения различных полимерных материалов и изделий в условиях

эксплуатации, можно выделить два принципиально разных подхода:

– содержательное моделирование, так называемые «белые» модели;

– формальное моделирование – «черные модели».

В первом случае детально изучаются процессы, происходящие в системе, и строятся математические модели, обычно в виде дифференциальных или интегрально-дифференциальных уравнений. Далее применяются специальные пакеты и методы для их решения. Во втором случае используется гибкий и достаточно надёжный способ анализа входных (X) и выходных (Y) данных, основанный на многофакторном формальном моделировании. Формально-математический подход особенно эффективен в случаях, когда непонятно, как строить содержательную модель, либо для ее построения и дальнейших вычислений требуются чрезмерные усилия. У каждого подхода есть свои плюсы и минусы, и соотношение

* Работа выполнена в рамках реализации Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (государственный контракт № П2462 от 19.11.2009 г.).

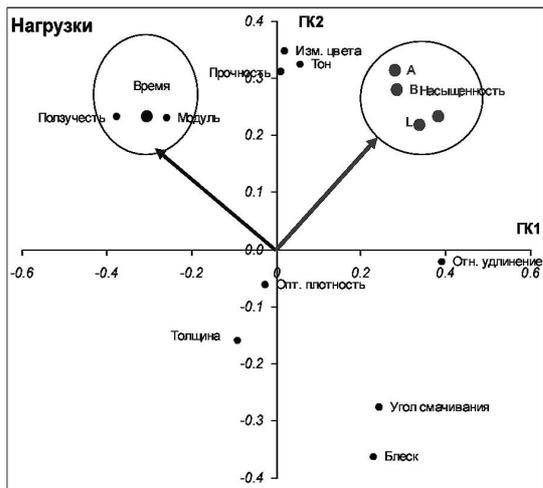


Рис. 1. График нагрузок в ГК1 и ГК2

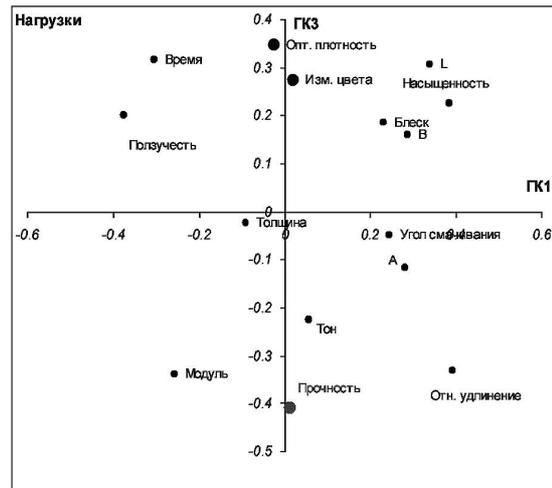


Рис. 2. График нагрузок в ГК1 и ГК3

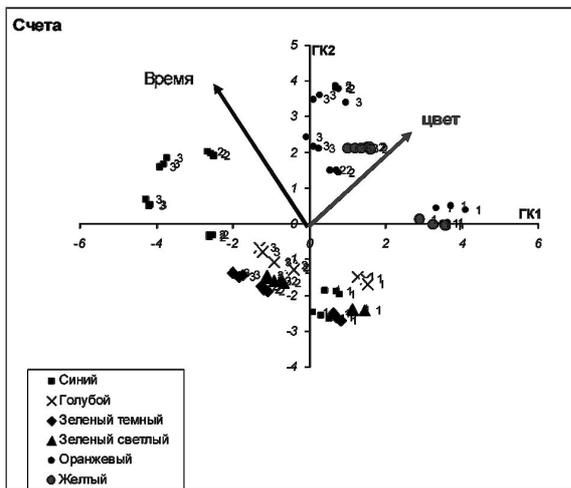


Рис. 3. График счетов по ГК1 и ГК2.
Цвета соответствуют цветам образцов.
Номера соответствуют времени старения:
1-0 час; 2-500 час; 3-1000 час старения соответственно

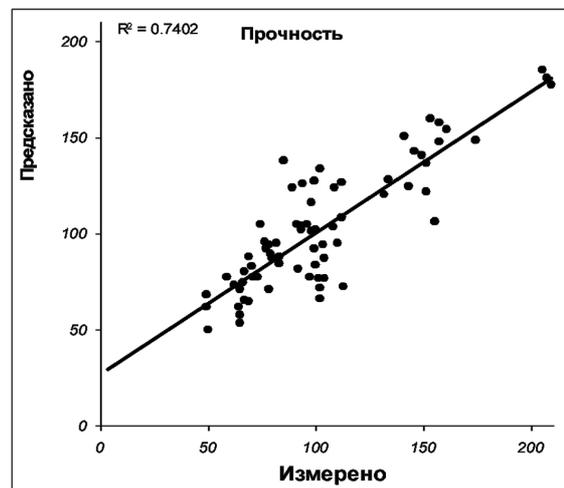
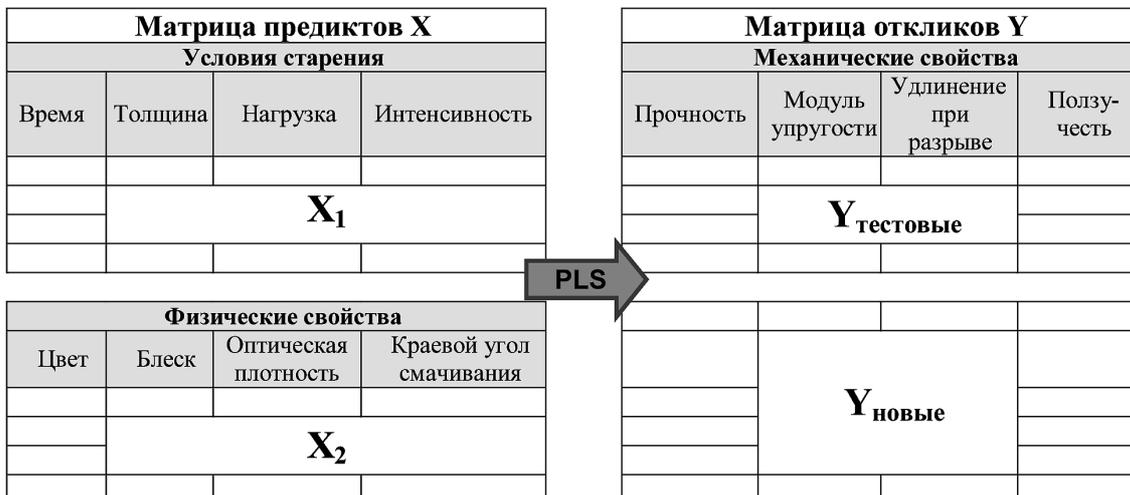


Рис. 4. Зависимость предсказанного значения прочности от измеренного

Таблица 1





“белых” и “чёрных” подмоделей в полномасштабной модели исследуемой системы зависит от поставленных задач, уровня наших знаний и научного потенциала в данный период времени.

Для построения содержательных моделей необходимо знание причинно-следственных связей, обуславливающих поведение системы. Для поиска этих связей и научно обоснованной сборки модели необходимо раздельное изучение физических и химических процессов в системе. Для материаловедческих исследований именно такой подход и нужен. Однако, как правило, не всегда удается обойтись только детерминистическими методами. Одно из обстоятельств, обуславливающих принципиальные сложности в моделировании процессов старения и разрушения в различных полимерных композиционных материалах, состоит в том, что эти процессы проходят на различных структурных уровнях с проявлением различных причинно-следственных связей. На сегодняшний день нет общей теории старения и разрушения полимерных композиционных материалов, и качественные переходы в развитии этих процессов ограничивают использование каких-либо единых физических концепций и математических зависимостей при сквозном описании процесса. Ситуация усугубляется также многомерностью и многокритериальностью процессов. Здесь очень эффективно можно применить современные методы анализа многомерных данных, в основе которых лежат проекционные математические методы. Эти методы позволяют выделить в больших массивах данных скрытые (латентные) переменные и анализировать связи, существующие в исследуемой системе. Здесь очень важно отметить, что при таком синтезе «белых» и «чёрных» моделей формальное моделирование не должно заменять собой содержательное. Методы анализа многомерных данных позволяют получить всеобъемлющее представление о структуре данных, которое, как будет показано ниже, можно охватить одним взглядом.

На примере материалов мягких оболочек (МО) строительного назначения (пневматические и тентовые сооружения) была разработана многомерная модель процессов старения этих типов материалов для анализа

связей в исследуемых системах и их прогноза. Для этого были использованы проекционные математические методы: метод главных компонент (МГК) и метод проекции на латентные структуры (ПЛС) [1, 2]. В установках ускоренного старения [3] по разработанному лабораторным режимам [4, 5] были состарены образцы материалов МО различных цветов, т.е. с различным пигментным составом, и различной толщины. В процессе старения определялось изменение физических (цвет, блеск, оптическая плотность, краевой угол смачивания) и механических (прочность, относительное удлинение при разрыве, модуль упругости, ползучесть) характеристик материалов.

По полученным экспериментальным данным в программе *Unscrambler* были построены модели главных компонент и многомерные регрессионные модели для прогнозирования.

На плоскости первых двух главных компонент (ГК1 и ГК2) имеются две группы переменных (рис. 1), вносящих равновеликий вклад в пространство ГК. Первая группа переменных разделяет параметры цвета в колориметрической системе CIE Lab, вторая группа переменных связана со временем старения. Время старения и цвет образца – два ортогональных независимых фактора. Они имеют определяющее значение в модели. Кроме того, в графике счетов (рис. 2) видно разделение образцов на две группы, соответствующие цветовой гамме (1 – сине-зелено-голубые, 2 – желто-оранжевые). Такое расположение цветов на графике счетов (под 45 градусов) говорит о том, что цвет материала (пигментный состав) оказывает сильное влияние и на изменение механических свойств материала в процессе эксплуатации.

Из графика нагрузок (рис. 2) также видно, что блеск отрицательно коррелирует с прочностью. Уменьшение блеска говорит о поверхностной поврежденности материала, что и вызывает падение его прочности. Блеск материала и краевой угол смачивания положительно коррелируют друг с другом (об этом свидетельствует близкое расположение данных показателей на графике нагрузок). То есть поверхностные изменения в материале были замерены двумя методами. Если на графике нагрузок в ГК1 и ГК2 изменение оптической плотности оказывает

Таблица 2

Измеренные и предсказанные значения цветов по результатам теста

Время старения, час	Измерено			Предсказано		
	L	a	b	L	a	b
0	42	-40	30	42	-40	30
500	44	-42	33	46	-33	24
1000	42	-41	32	46	-30	30

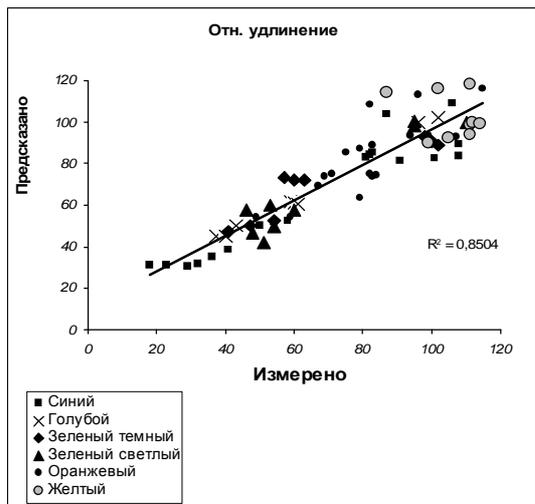


Рис. 5. Зависимость предсказанного значения относительного удлинения при разрыве от измеренного

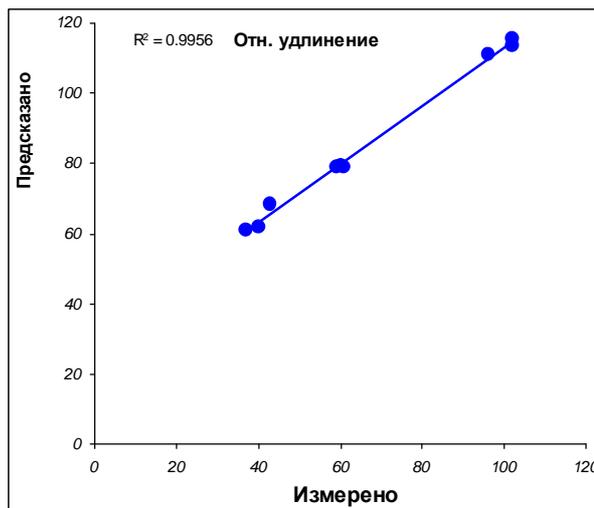


Рис. 6. Зависимость предсказанного значения относительного удлинения при разрыве от измеренного по результатам теста

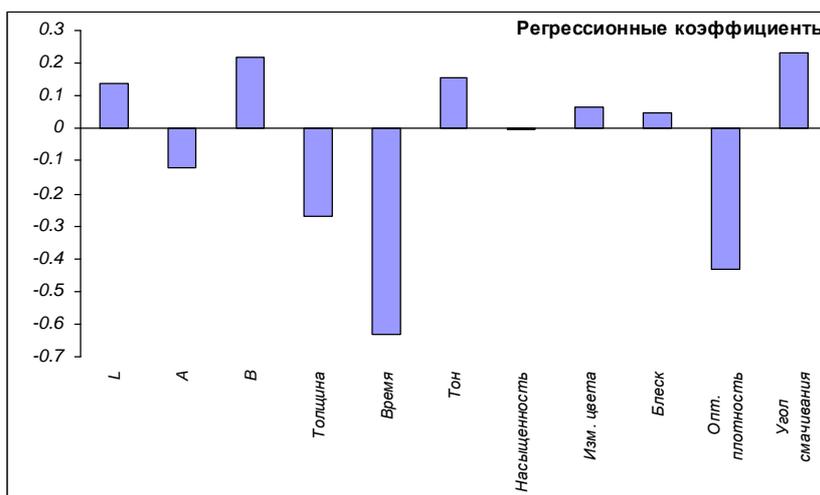


Рис. 7. Регрессионные коэффициенты по относительному удлинению при разрыве

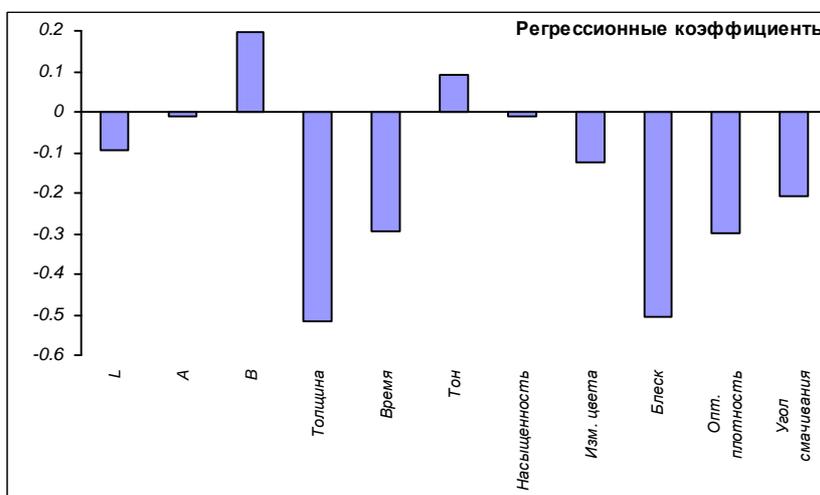


Рис. 8. Регрессионные коэффициенты по прочности при разрыве

незначительное влияние на прочность материала, то в координатах ГК1-ГК3 (рис. 2) видна большая отрицательная корреляция между ними. Следовательно, на изменение прочности материала оказывают влияние как поверхностные явления, так и структурные изменения. Таким образом, для построения модели, связывающей механические и физические свойства, нельзя ограничиваться рассмотрением парных зависимостей, а необходимо учитывать взаимовлияние самых разных факторов. Учесть взаимовлияние факторов возможно, применив метод ПЛС.

Из проведенного МГК-анализа следует, что механические и физические свойства материалов связаны между собой. Это предположение обосновывается наличием характерных корреляционных связей между указанными переменными (например, прочностью и оптической плотностью, рис. 2).

При построении многомерной регрессионной модели для прогнозирования эксплуатационных свойств методом ПЛС в блок независимых переменных X (табл. 1) были включены следующие факторы: параметры цвета в колориметрической системе CIE Lab; цветовой тон; насыщенность и полное изменение цвета; блеск; краевой угол смачивания; оптическая плотность; толщина образца; время старения. Блок зависимых переменных Y включал механические свойства: прочность; модуль упругости; относительное удлинение при разрыве; ползучесть.

Четыре ПЛС-компоненты хорошо описывают имеющиеся данные. Например, в модели относительного удлинения 70 % изменений X объясняют 85 % изменений Y . На рис. 4 и 5 показаны зависимости предсказанного значения прочности и относительного удлинения от измеренного.

Проверка прогностических способностей построенной модели была проделана следующим образом. Из полного массива набора данных были исключены все данные, относящиеся к образцам материалов голубого цвета. На оставшихся данных была построена модель, которая впоследствии была

применена к материалам голубого цвета (тестовый набор). Результат теста приведен на рис. 6. Квадрат коэффициента корреляции равен 0,99. Таким образом, разработанная ПЛС-модель позволяет по измеренным физическим характеристикам материала предсказывать механические характеристики с высокой точностью.

Аналогичная процедура была сделана для предсказания изменения цвета материала. В таблице показано изменение цвета светло-зеленых образцов после 500 и 1000 часов старения в климатической камере.

Как показывают регрессионные коэффициенты (рис. 7 и 8), ни одно свойство не предсказывается каким-либо одним фактором, а является результатом комбинации нескольких факторов.

Литература

1. Esbensen K.H. Multivariate Data Analysis. – In Practice 4-th Ed., CAMO, (2000), 598 p.
2. Sulejmanov, A.M. Optimization of a Structure of a Composite Material by a Method of Data Analysis / A.M. Sulejmanov // Modern Methods of Data Analysis. Fourth Winter Symposium on Chemometrics. – Chernogolovka, 2005. – S. 29-30.
3. Сулейманов А.М. Установка для моделирования воздействия эксплуатационных факторов на материалы мягких оболочек // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – М.: 2005. – Том 71, № 12. – С. 44-46.
4. Сулейманов А.М. Работа, старение и разрушение материалов ограждений мягких оболочек / А.М. Сулейманов // Строительные материалы, 2005, № 11. – С. 62-65.
5. Сулейманов А.М. Исследования эксплуатационных свойств композиционных материалов для мягких оболочек // Материалы докладов Академических чтений РААСН, посвященных 75-летию со дня рождения Ю.М. Баженова. Часть II. – Белгород, 2005. – С. 150-162.