

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Проф. Ковчур С.Г., доц. Ольшанский В. И., доц. Тимонов И.А., ст. преп. Потоцкий В.Н. (ВГТУ)

Известно, что физико-химические и механические свойства композиционных материалов отличаются от указанных характеристик исходных компонентов. Для определения основных свойств многокомпонентных композиционных материалов необходимо, с одной стороны, выбрать основные параметры, характеризующие физико-химические и механические свойства композиционных материалов, а с другой, определить минимальное содержание исходных компонентов, обеспечивающих получение указанных свойств в оптимальном диапазоне. Такими параметрами являются плотность, термостойкость, температура кристаллизации, механическая прочность, химическая устойчивость. В качестве критерия оптимизации можно принять массовое содержание исходных компонентов на 100 г композиционного материала.

Решение сформулированной выше задачи можно выполнить на базе применения концепции математического планирования многофакторного эксперимента с последующей оптимизацией. Задача решается в несколько последовательных этапов с помощью ЭВМ.

Этап N 1. На этом этапе исследователь определяет основные факторы, уровни их варьирования, координаты нулевой точки, интервал варьирования. Указанная информация предоставляется в виде соответствующей таблицы [1].

Этап N 2. В соответствии с количеством основных факторов составляется матрица планирования полного 2^n факторного эксперимента [1], где n - число основных факторов.

Этап N 3. Реализация матрицы планирования полного 2^n факторного эксперимента на ЭВМ и получение адекватной математической модели вида:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i x_i + \sum_{i,j=1}^n b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n b_{ii} x_i^2$$

где: \hat{y} - расчетные значения параметра оптимизации;

b_0, b_i, b_{ij}, b_{ii} - расчетные коэффициенты модели.

Алгоритм вычисления расчетных коэффициентов математической модели реализуется на ЭВМ на основе матричного соотношения

$$B = (F'F)^{-1} F'y,$$

где: B - вектор-столбец коэффициентов модели;

F - матрица плана эксперимента;

F' - транспонированная матрица;

$(F'F)^{-1}$ - матрица обратная матрице $F'F$;

y - вектор-столбец.

Этап N 4. Определяется адекватность математической модели с помощью критерия Фишера и значимость коэффициентов по критерию Стьюдента.

Коэффициенты математической модели можно считать значимыми с 95 % доверительной вероятностью, если величина коэффициента больше доверительного интервала, определяемого соотношением:

$$b_i - 2S^2(b_i) < \beta_i < b_i + 2S^2(b_i),$$

где: b_i - расчетное значение коэффициента;

β_i - истинное значение коэффициента;

$S^2(b_i)$ - квадратичная ошибка коэффициента.

Доверительный интервал Δb (погрешность в оценке коэффициентов) определяется как $\Delta b = \pm 2S^2(b_i)$.

Этап N 5. Оптимизация физико-химических и механических свойств на ЭВМ.

Для оптимизации составляется матрица исходных данных.

Этап N 6. Графическое интерпретирование математической модели представляется в виде номограммы, что позволяет определить влияние физико-химических и механических свойств (отдельных факторов) на целевую функцию Y .

В этом случае удобно в качестве фиксированных значений факторов принять их нулевые уровни в матрице планирования. Тогда размерные промежутки изменения физико-химических и механических свойств отображаются на один промежуток единичной длины с помощью линейной функции:

$$X = \frac{X'_i - X'_{i\min}}{X'_{i\max} - X'_{i\min}}, \text{ или}$$

$$X'_i = (X'_{i\max} - X'_{i\min})X + X'_{i\min}$$

где штрих означает значение фактора в натуральном выражении.

В качестве примера рассмотрим влияние массового содержания оксида неодима на физико-химические свойства окрашенных стекол.

В результате реализации матрицы планирования полного 2^4 факторного эксперимента [1] на ЭВМ получена адекватная линейная модель вида:

$$y = 2.5 + 0.375X_1 + 0.375X_2 - 0.375X_3 - 0.375X_4. \quad (1)$$

Соответственно, получены следующие оценки дисперсии адекватности $S_{ад}^2 = 2.1$ и дисперсии воспроизводимости $S_{(y)}^2 = 1.9$. Расчетное значение критерия Фишера равно 0.93, т.е. $F_p < [F]$.

Доверительный интервал для оценки значимости коэффициентов модели, соответственно равен $\Delta b_i = 0.19$. Анализ математической модели зависимости содержания Nd_2O_3 на физико-химические свойства стекол показывает, что с увеличением их массового содержания увеличиваются плотность, термостойкость и почти пропорционально уменьшаются химическая устойчивость и температура кристаллизации. Эти закономерности, полученные методом математического планирования эксперимента, хорошо согласуются с проведенными нами экспериментальными исследованиями влияния концентрации оксида неодима (и других редкоземельных элементов) на физико-химические свойства синтезированных стекол [2,3].

ЛИТЕРАТУРА

1. Лецкий Э.К., Хартман К., Шефер В. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов. М.: Мир, 1977, 547с.
2. Ковчур С.Г., Федорова В.А., Гайдук А.П. Использование редкоземельных элементов в производстве цветного стекла.-Мн.: Вышэйшая школа, 1982, 169с.
3. Ковчур С.Г., Окрашивание стекла переходными и редкоземельными элементами.-Мн.: Университетское, 1993, 231 с.