

Симплексные методы оптимизации состава композиционных строительных материалов

Ю.А. Макаров

*Национальный исследовательский Мордовский государственный университет
им. Н. П. Огарёва, г. Саранск*

Аннотация: В статье рассматривается применение методов симплексного планирования эксперимента для определения оптимального состава композиционных строительных материалов. Композиционные строительные материалы являются многокомпонентными системами, поэтому их свойства зависят от большого количества разнообразных по своей природе и влиянию факторов. Использование ортогональных планов не способно адекватно описать опытные данные при широком диапазоне варьирования факторов. Поэтому в статье предлагается использовать симплекс-решетчатые планы Шеффе. Была разработана модель полного третьего порядка для определения оптимального состава наполненного цементного композита, записано уравнение регрессии. Адекватность уравнения подтверждена в контрольных точках плана по критерию Стьюдента. Предложенный метод планирования может быть использован для оптимизации состава многокомпонентных систем.

Ключевые слова: многокомпонентная система, методы оптимизации, композиционный строительный материал, планирование эксперимента, симплексные планы, полином Шеффе, уравнение регрессии.

В настоящее время активно развиваются исследования многокомпонентных систем в самых разных областях науки и промышленности: биологии, экономике, химической технологии, энергетике, строительном производстве.

Актуальность вопросов, связанных с изучением свойств композиционных строительных материалов (КСМ), объясняется развитием энергосберегающих технологий и потребностью создания новых экономически эффективных строительных материалов [1-3].

При создании новых материалов проводятся сотни экспериментов с целью изучения их свойств. КСМ являются многокомпонентными системами, что приводит к необходимости учитывать большое количество разнообразных по своей природе и влиянию факторов. Поэтому в последнее

время неотъемлемой частью исследования свойств и структуры КСМ становятся методы моделирования [4, 5].

Необходимость изучения закономерностей изменения состава и свойств многокомпонентных систем обусловлено, с одной стороны, сложностью протекающих в КСМ процессов структурообразования, с другой – отсутствием достоверных данных о них. Имеются немногочисленные работы, показывающие возможность использования зависимости «состав-свойство» для изучения многокомпонентных систем [6-8]. Расширение набора свойств, используемых для анализа этих систем, в настоящее время признано важной, весьма актуальной и практически значимой задачей [9].

Оптимальное решение наиболее целесообразно искать, применяя методы теории планирования эксперимента [7], предложенной английским учёным Р. Д. Фишером в 1935 году. Исследование диаграммы «состав-свойство» для нахождения оптимального состава многокомпонентной системы является одной из наиболее распространенных задач оптимизации.

Планирование эксперимента предполагает выбор наиболее существенных факторов, диапазона их варьирования, числа и условий проведения опытов для получения зависимостей между изучаемым параметром и влияющими на него факторами. Эти зависимости носят название функций отклика:

$$y = f(x_1, x_2 \dots x_n),$$

здесь: $x_1, x_2 \dots x_n$ - варьируемые факторы.

Существует огромное количество планов, среди которых наиболее распространенными являются так называемые ортогональные планы типа 2^k , где k – число варьируемых факторов. Однако эти планы не способны адекватно описать опытные данные если принятые факторы имеют широкий диапазон варьирования, как это обычно бывает в начале исследования.

Поэтому для решения поставленной задачи было предложено использовать симплекс-решетчатый план Шеффе [10]. Симплекс-

планирование позволяет минимизировать случайные ошибки предсказания моделями поверхности отклика, в связи с чем является очень эффективным средством достижения областей экстремума.

Если свойства смеси зависят только от соотношения ее компонентов, то факторное пространство можно представить в виде правильного $(k - 1)$ -мерного симплекса. Симплекс – это фигура, имеющая на одну вершину больше, чем размерность факторного пространства. В правильном (регулярном) симплексе расстояния между вершинами фигуры равны между собой.

Так, факторное пространство трехкомпонентной системы можно представить в $(k - 1)$ -мерном пространстве в виде равностороннего треугольника (рис. 1). Здесь каждая вершина соответствует чистому веществу, сторона – двойной системе, точка – составу тройной системы.

Автором статьи была поставлена задача определения оптимального состава КСМ с мелкодисперсной добавкой для достижения наибольшей прочности при максимальной экономии самого дорогого компонента смеси – цемента.

Планирование эксперимента проводили на участке диаграммы «состав-свойство». Был применен симплекс-план для $k = 3$, так как прочность КСМ в основном определяется маркой и количеством цемента, количеством наполнителя и воды. В области исследования принимали следующее содержание компонентов смеси (по массе цемента): мелкодисперсный наполнитель (цеолит) $10\% \leq x_1 \leq 20\%$, отношение песок/цемент $\frac{1}{1} \leq x_2 \leq \frac{4}{1}$, водоцементное отношение $0,6 \leq x_3 \leq 0,9$.

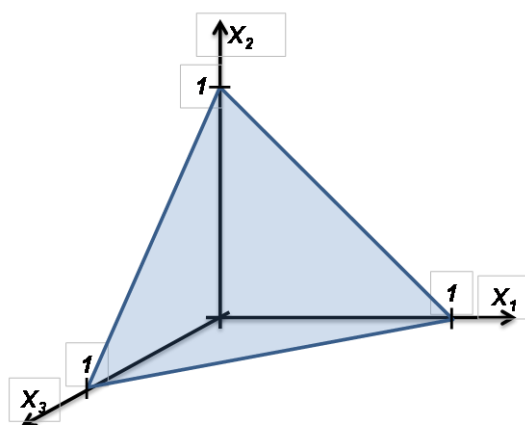


Рис. 1. Представление факторного пространства трехкомпонентной системы как регулярного симплекса

Суммарное массовое количество компонентов во всех опытах поддерживалось постоянным, что соответствует условию нормировки суммы независимых переменных:

$$\sum x_i = 1, \quad 0 \leq x_i \leq 1 \quad (1)$$

Так как истинный вид функции отклика до эксперимента неизвестен, для математического описания поверхности отклика её обычно аппроксимируют полиномом. В многокомпонентных составах поверхности отклика имеют сложный характер, поэтому для адекватного их описания требуется строить полиномы высоких степеней. Условие нормировки (1) упрощает эту задачу, позволяя вместо полных многочленов использовать каноническую форму полинома Шеффе:

$$y = \sum \beta_i x_i + \sum \beta_{ij} x_i x_j + \sum \beta_{i-j} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \dots \quad (2)$$

здесь: $\beta_i, \beta_{ij}, \beta_{i-j}, \beta_{ijk}$ - коэффициенты регрессии.

Для решения поставленной задачи была принята модель полного третьего порядка. Полином Шеффе для трехпараметрической модели:

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{1-2} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \beta_{1-3} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \beta_{2-3} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \beta_{123} x_1 x_2 x_3 \quad (3)$$

Экспериментальные точки симплекс-решётчатого плана Шеффе представляют собой регулярную $\{k, p\}$ -решетку на симплексе, где k – число компонентов смеси; p – порядок полинома.

Количество уровней изменения факторов обычно аппроксимируют со степенью полинома, принимая шаг уровней равным $\frac{1}{p}$. Таким образом, в задаче моделирования по каждому компоненту было принято $p+1$ одинаково расположенных уровней $x_i = 0, x_i = \frac{1}{3}, x_i = \frac{2}{3}, x_i = 1$ и взяты все возможные комбинации с указанными концентрациями компонентов.

Число N экспериментальных точек симплексного плана вычисляли по числу компонентов смеси k и выбранной степени полинома p :

$$N = \frac{(k+p-1)!}{p!(k-1)!} = \frac{(3+3-1)!}{3!(3-1)!} = 10.$$

Записав координаты точек симплексной $\{3, 3\}$ - решетки, получим матрицу планирования эксперимента. Схема факторного пространства эксперимента приведена на рис. 2, матрица планирования – в таблице 1.

Таблица 1

Варьируемый фактор	Номер точки симплекс-плана									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
x_1	1	0	0	2/3	1/3	0	0	2/3	1/3	1/3
x_2	0	1	0	1/3	2/3	2/3	1/3	0	0	1/3
x_3	0	0	1	0	0	1/3	2/3	1/3	2/3	1/3

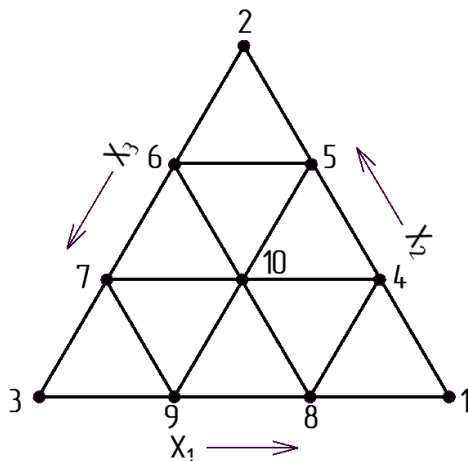


Рис. 2. Схема факторного пространства $\{3;3\}$ -решётки

По разработанному плану изготавливали образцы материала, выдерживали при температуре $20 \pm 2^\circ\text{C}$ и относительной влажности воздуха 100% в течение 28 суток. Испытания образцов на прочность проводили согласно методике ГОСТ 10180-94 при помощи гидравлического пресса. Значения функции отклика занесены в таблицу 2.

Таблица 2

Функция отклика	Номер точки симплекс-плана									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y	23,98	15,22	13,68	27,16	23,14	18,68	15,92	19,12	16,80	20,14

Симплекс-решетчатые планы являются насыщенными, т.е. в них отсутствует влияние эффекта взаимодействия факторов, а число искомых коэффициентов полинома равно числу опытов. Используя свойство насыщенности, вычисляли коэффициенты приведенного полинома подстановкой координат точек матрицы в уравнение (3). Тогда:

$$\beta_1 = y_1; \beta_2 = y_2; \beta_3 = y_3; \beta_{12} = \frac{9}{4}(y_4 + y_5 - y_1 - y_2);$$

$$\beta_{13} = \frac{9}{4}(y_8 + y_9 - y_1 - y_3); \beta_{23} = \frac{9}{4}(y_6 + y_7 - y_2 - y_3); \beta_{1-2} = \frac{9}{4}(3y_4 - 3y_5 - y_1 + y_2);$$

$$\beta_{1-3} = \frac{9}{4}(3y_8 - 3y_9 - y_1 + y_3); \beta_{2-3} = \frac{9}{4}(3y_6 - 3y_7 - y_2 + y_3);$$

$$\beta_{123} = 27y_{10} - \frac{27}{4}(y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8 + y_9) + \frac{9}{2}(y_1 + y_2 + y_3)$$

Найденные значения коэффициентов регрессии приведены в таблице 3.

Таблица 3

β_1	β_2	β_3	β_{12}	β_{13}	β_{23}	β_{1-2}	β_{1-3}	β_{2-3}	β_{123}
23,98	15,22	13,68	24,975	-3,915	12,825	7,425	-7,515	14,9625	-33,795

Записано следующее уравнение регрессии

$$\bar{y} = 23,98x_1 + 15,22x_2 + 13,68x_3 + 24,975x_1x_2 - 3,915x_1x_3 + 12,825x_2x_3 + 7,425x_1x_2(x_1 - x_2) - 7,515x_1x_3(x_1 - x_3) + 14,9625x_2x_3(x_2 - x_3) - 33,795x_1x_2x_3 \quad (4)$$

Адекватность уравнения регрессии (4) проверялась по критерию Стьюдента в контрольных точках плана 6, 7, 10 (таблица 4). Контрольные точки выбирали таким образом, чтобы при неадекватности уравнения регрессии (4) можно было построить полином более высокого порядка.

Таблица 4

№ точки плана	Обозначение отклика	y	\bar{y}	Δy
6	y_6	18,50	18,665	0,165
7	y_7	15,57	15,935	0,365
10	y_{10}	20,00	20,14	0,14

Дисперсия воспроизводимости при числе параллельных опытов $n = 10$:

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = 0,020.$$

При уровне значимости 0,05 значения критерия Стьюдента для всех контрольных точек оказались меньше табличного, следовательно, уравнение (4) является адекватным эксперименту.

На рисунке 3 показаны линии равных значений прочности исследуемого состава, построенные по уравнению (4) при помощи программы TRIANGLE для построения двумерной триангуляции Делоне.

Судя по диаграмме, наибольшая прочность соответствует области со значениями компонент $0,6 \leq x_1 \leq 0,8$; $0,2 \leq x_2 \leq 0,35$; $x_3 < 0,05$.

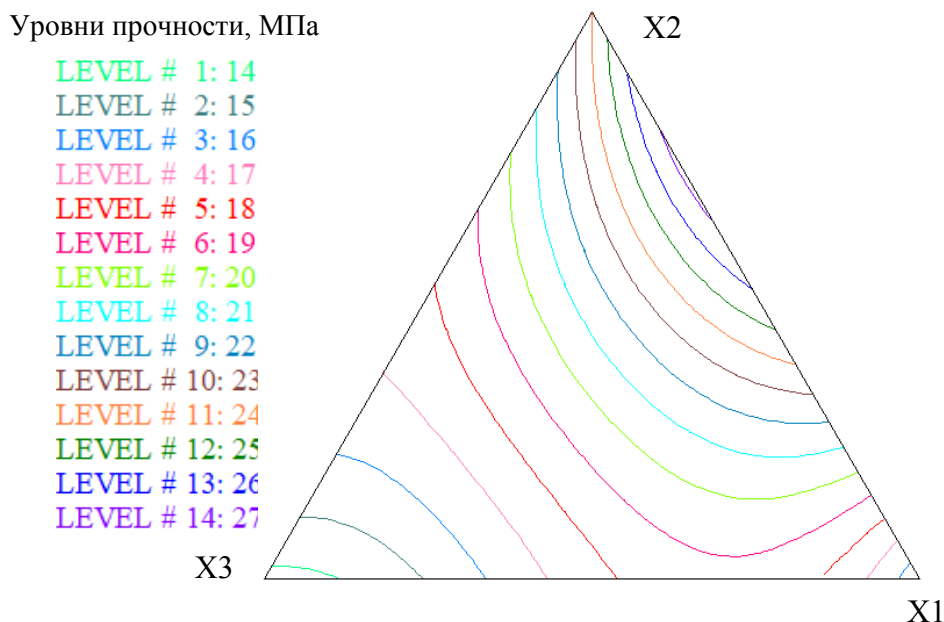


Рис. 3. Изолинии прочности состава,

Исследование указанной области представляет определенный интерес в плане получения новых экономически эффективных КСМ.

Применение с этой целью симплексных методов оптимизации состава многокомпонентных систем показывает хорошую адекватность результатов эксперимента и может быть использовано в дальнейших исследованиях.

Литература

1. Копаница Н.О., Демьяненко О.В., Куликова А.А. [и др.]. Композиционные строительные материалы на основе наномодифицированных цементных систем // Нанотехнологии в строительстве. 2023. Т. 15, №5. С. 443-452. URL: doi.org/10.15828/2075-8545-2023-15-5-443-452
2. Терешкин И.П. Эффективные безгипсовые портландцементные вяжущие с низкой водопотребностью для строительных материалов и конструкций // Инженерный вестник Дона, 2023, №12. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n12y2023/8893
3. Scrivener K.L. Nanotechnology and cementitious materials. In: Bittnar Z, Bartos PJM, Nemecek J, Smilauer V, Zeman J, editors. Nanotechnology in

construction: proceedings of the NICOM3 (3rd international symposium on nanotechnology in construction). Prague: Czech Republic, 2009. pp. 37-42.

4. Вертинская Н.Д. Математическое моделирование многофакторных и многопараметрических процессов в многокомпонентных системах на базе конструктивной геометрии. Ч.1. Иркутск: Изд-во ИрГТУ, 2009. 230 с.

5. Dvorkin L., Dvorkin O., Ribakov Y. Mathematical Experiments Planning in Concrete Technology. Nova Science Publishers, New York, USA, 2012. 173 p.

6. Калиногорский Н. А. Планирование эксперимента при изучении диаграмм состав-свойство: метод. указ. Новокузнецк: Изд. центр СибГИУ, 2011. 12 с.

7. Селяев В. П. Статистические методы планирования и анализа эксперимента в строительстве: учеб. пособие. Саранск: Изд-во Мордов. ун-та, 2004. 140 с.

8. Макаров Ю.А. Изучение зависимости прочности цементных композитов от их фрактальной размерности // Инженерный вестник Дона, 2020, №7. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N7y2020/6549

9. Смирнов В.А. Моделирование и инструментальные средства численного анализа в нанотехнологии и материаловедения: обзор / В.А. Смирнов, Е.В., Королев, А.В. Евстигнеев // Нанотехнологии в строительстве. 2014. Т. 6, № 5. С. 34-58.

10. Ахназарова С. Л., Кафаров В. В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии: учеб. пособие. 2-е изд., перераб. и доп. М.: ВШ, 1985. 327 с.

References

1. Kopanicza N.O., Dem`yanenko O.V., Kulikova A.A. [i dr.]. Nanotexnologii v stroitel'stve, 2023. Т. 15, №5. pp. 443-452. URL: doi.org/10.15828/2075-8545-2023-15-5-443-452

2. Tereshkin I.P. Inzhenernyj vestnik Dona, 2023, №12. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n12y2023/8893

3. Scrivener K.L. Nanotechnology and cementitious materials. In: Bittnar Z, Bartos PJM, Nemecek J, Smilauer V, Zeman J, editors. Nanotechnology in construction: proceedings of the NICOM3 (3rd international symposium on nanotechnology in construction). Prague: Czech Republic, 2009. pp. 37-42.

4. Vertinskaya N.D. Matematicheskoe modelirovanie mnogofaktornyx i mnogoparametricheskix processov v mnogokomponentnyx sistemax na baze konstruktivnoj geometrii [Mathematical modeling of multifactorial and multiparameter processes in multicomponent systems based on constructive geometry]. Ch.1. Irkutsk: Izd-vo IrGTU, 2009. 230 p.

5. Dvorkin L., Dvorkin O., Ribakov Y. Mathematical Experiments Planning in Concrete Technology. Nova Science Publishers, New York, USA, 2012. 173 p.

6. Kalinogorskij N. A. Planirovanie eksperimenta pri izuchenii diagramm sostav-svoystvo: metod. ukaz. [Planning an experiment when studying composition-property diagrams: method. decree.] Novokuzneczk: Izd. centr SibGIU, 2011. 12 p.

7. Selyaev V. P. Statisticheskie metody planirovaniya i analiza eksperimenta v stroitelstve: ucheb. posobie [Statistical methods of planning and analysis of experiment in construction: a tutorial]. Saransk: Izd-vo Mordov. un-ta, 2004. 140 p.

8. Makarov Y. A. Inzhenernyj vestnik Dona, 2020, №7. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N7y2020/6549

9. Smirnov V.A. Nanotexnologii v stroitelstve, 2014. T. 6, № 5. pp. 34-58.

10. Axnazarova S. L., Kafarov V. V. Metody optimizacii eksperimenta v ximicheskoy texnologii: ucheb. posobie [Methods of optimizing experiment in chemical technology: a tutorial]. 2-e izd., pererab. i dop. M.: VSh, 1985. 327 p.

Дата поступления: 24.01.2024

Дата публикации: 2.03.2024
