

Современными тенденциями развития материаловедения являются применение эффективных методов планирования и обработки экспериментальных данных, применение большого числа прогнозных моделей физико-механических и технологических свойств, основанных на современных теориях синергетики, структурно-фазовых переходов, теории кристалличности в материалах, а также уровень развития автоматизированных средств (базы данных, базы знаний, элементы искусственного интеллекта, пакеты прикладных программ, имитационное моделирование и т.д.) [1, 2]. В связи с широким применением полимерных композиционных материалов (ПКМ) в машиностроении [3, 4] появилась необходимость разработки автоматизированной информационной системы (АИС) прогнозирования свойств исследуемых материалов на основе регрессионного анализа, которая позволит снизить трудоемкость экспериментальных исследований, повысить качество прогнозирования физико-механических и технологических свойств материалов, снизить себестоимость изготавливаемых изделий. В настоящее время при производстве ПКМ свойства конечных изделий определяются по контрольным образцам, полученным из соответствующей серии партии деталей. Практически не существует эффективных методик, позволяющих прогнозировать свойства конечных изделий на основе информации о компонентах. Конечная концентрация компонентов в КМ зависит от исходных компонентов и параметров технологического процесса их изготовления [5]. Анализ ПКМ, применяемых в машиностроении, методов обработки экспериментальных данных и программных средств, применяемых для исследования свойств материалов, показал возможность использования корреляционно-регрессионного анализа для формирования прогнозных моделей с помощью прикладных программ. Методическое обеспечение формирования прогнозных моделей свойств ПКМ включает два этапа: 1. Выбор математических моделей для расчета физико-механических и технологических свойств; 2. Разработка методики получения прогнозных моделей свойств ПКМ. Для получения прогнозных моделей свойств ПКМ разработан соответствующий используемому математическому аппарату алгоритм (рис. 1). Рис. 1 - Алгоритм получения прогнозных моделей

Алгоритм включает следующие этапы: - формирование исходных данных – на этом этапе экспериментальные данные, поступающие для анализа, представляются в виде переменных (X_i) и результирующих (Y_j) факторов; - корреляционно-регрессионный анализ – данный этап реализует алгоритм корреляционно-регрессионного анализа с получением математической модели зависимости $Y_j(X_i)$; - проверка однородности и адекватности математической модели – рассчитываются основные коэффициенты, строятся графики распределения остатков и проводится анализ результатов, формируется заключение об адекватности полученной математической модели и возможности её использования в качестве прогнозной модели анализируемого свойства; -

исключение резко выделяющихся значений – проводится по методике выявления и исключения промахов из анализируемых экспериментальных данных, описанной в работе [5]; - ранжирование данных - предполагает группировку по компонентам (отвердителям, модифицирующим добавкам, наполнителям); - подбор функциональных зависимостей от компонентов $F(X_i)$; - формирование выходных данных – на этом этапе выбирается математическая модель с наибольшим коэффициентом корреляции, а при отсутствии статистически значимых моделей проводится анализ экспериментальных данных в совокупности с полученными неточными моделями. На основе алгоритма получения прогнозных моделей разработана АИС прогнозирования свойств ПКМ, общая схема которой представлена на рис. 2. Рис. 2 - Структурная модель АИС прогнозирования свойств ПКМ

Структура АИС включает блоки: Блок ввода данных – группируются экспериментальные данные, поступающие для анализа в виде набора значений (X_i) и результирующих факторов (Y_j). При группировке по компонентам КМ в качестве параметров выбираются процентные содержания компонентов - отвердителей, пластификаторов, ускорителей, модификаторов, наполнителей и некоторого элемента « X_i ». Перебор всех элементов для подстановки в качестве неизвестного « X_i » осуществим с помощью определенного алгоритма. Блок обработки данных – выполняет основную функцию АИС. Он формирует на выходе математические модели зависимостей свойств ПКМ от компонентов. Разработка математических моделей включает в себя корреляционно-регрессионный анализ, обрабатывающий исходные данные, формирующий уравнение регрессии (математическую модель зависимости свойства $Y_j(X_i)$). Алгоритм корреляционно-регрессионного анализа является управляющим для данного блока. Подсистема статистической обработки данных осуществляет отсев несущественных значений (промахов). Данные после статистической обработки также подвергаются корреляционно-регрессионному анализу. Необходимость разветвления обусловлена, с одной стороны, тем, что промахи значительно искажают математическую модель, с другой, именно значения, подозреваемые на промахи, могут оказывать основное влияние на исследуемые свойства ПКМ. Подсистема подбора функций от компонентов выполняет поиск математических моделей, эффективно описывающих экспериментальные данные. Блок вывода данных выполняет функцию формирования выходных данных. На этом этапе осуществляется сравнение полученных математических моделей и выбирается математическая модель с наибольшим коэффициентом корреляции. Математическая модель с наибольшим коэффициентом корреляции заносится в базу знаний в качестве искомой прогнозной модели анализируемого свойства. При отсутствии статистически значимых моделей проводится анализ экспериментальных данных экспертом в совокупности с полученными неточными моделями. Основной задачей АИС является формирование прогнозных моделей на основе регрессионного анализа

экспериментальных данных. Алгоритм корреляционно-регрессионного анализа представлен на рис. 3. Рис. 3 - Алгоритм корреляционно-регрессионного анализа

На первом этапе на вход алгоритма поступают исходные экспериментальные данные в виде набора значений параметров X_i и результирующего фактора Y_j . Второй этап – корреляционный анализ. Определяются значения попарных коэффициентов корреляции по специальным формулам. Цель этого этапа – определить характер связи (прямая, обратная) и силу связи (отсутствует, слабая, умеренная, заметная, сильная, весьма сильная, полная). Если будет обнаружено, что два фактора имеют сильную или полную связь между собой (значение коэффициента более 0,8), то в регрессионное уравнение достаточно будет включить один из них. Третий этап – расчет коэффициентов уравнения множественной регрессии и построение регрессионных моделей. После получения каждого варианта уравнения обязательной процедурой является оценка его статистической значимости, поскольку главная цель – получить уравнение наивысшей значимости. Поэтому второй этап корреляционно-регрессионного анализа неразрывно связан с третьим. На четвертом этапе определяют статистическую значимость, т. е. пригодность постулируемой модели для использования ее в целях предсказания значений отклика. На этом этапе исключительно важную роль играют коэффициент детерминации и F-критерий значимости регрессии. На следующих этапах выполняется сравнение рассчитанных коэффициентов с табличными. Если наблюдаемое значение F_p окажется меньше критического значения F_k , то уравнение нельзя считать значимым. Математическая модель признается несоответствующей критерию адекватности. Если для рассматриваемой модели $R^2 \geq 73\%$ (где R – радиус корреляции), то она считается адекватной [5]. Остальная доля теоретических значений Y_j зависит от других, не участвовавших в модели факторов. Задача исследователя – находить факторы, увеличивающие R^2 , и объяснить вариации прогноза, чтобы получить идеальное уравнение. Если математическая модель удовлетворяет этим условиям, то она признается адекватной и определяет выходные данные алгоритма. Если же обнаружена незначимость, то модель отвергают, предполагая, что истинной окажется какая-то другая форма связи, и продолжают дальнейший поиск. Особенностью разработанной методики, применяемой в АИС, является применение статистической обработки данных, включающей исключение значений, подозреваемых на промах [6], соответствующий алгоритм представлен на рисунке 4. Рис. 4 - Алгоритм исключения резко выделяющихся значений C применением разработанной АИС

была проведена обработка экспериментальных данных предела прочности на сжатие дисперсно-наполненных ПКМ с применением пакетов прикладных программ (STATISTICA, Microsoft Office Excel). Установлено, что предел прочности при одноосном сжатии эффективно описывается перколяционной зависимостью: $R_{сж.с} = R_{сж.м}(1 + \alpha_{сж.в})$, где $R_{сж.с}$ и $R_{сж.м}$ – предел прочности при одноосном

сжатии композиционного и матричного материала; - предел прочности при одноосном сжатии единичного элемента композита; ν - критический индекс; - объемное содержание наполнителя. Получены параметры моделей расчёта предела прочности при одноосном сжатии для анализируемых наполненных композиционных материалов (табл. 1). Таблица 1 - Значения коэффициентов прогнозных моделей предела прочности при одноосном сжатии полимерных композиционных материалов

Вид композита	Наполнитель	$R_{сж.с}$	$\alpha_{сж}$	ν
Эпоксидный маршалит 90	диабаз	1,35	0,82	0,94
	цемент	1,10	0,96	
	аэросил*	0,92		
	Полиэфирный маршалит 70	1,30	0,82	0,93
Эпоксиполиуре-тановый маршалит 120	диабаз	1,25	0,82	0,93
	цемент	1,05	0,96	
	аэросил*	0,90		
	аэросилом	1,10	0,95	

* Для ПКМ, наполненных аэросилом, более высокий радиус корреляции имели полиномиальные зависимости. Установлена эффективность применения разработанных алгоритмов и использования выбранного математического аппарата. Для получения достоверных прогнозных моделей прогнозирования свойств ПКМ необходимо применение нелинейного множественного корреляционно-регрессионного анализа с большим количеством данных (с выборкой большего объёма) и методов планирования эксперимента, в том числе, метода комбинационных квадратов, ротатабельного планирования и т.д., а также пакетов прикладных программ, упрощающих обработку и анализ данных.