

МЕТОДОЛОГИЯ ПОСТРОЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ НАНОМОДИФИЦИРОВАННЫХ КОМПОЗИТОВ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМ

А.Н. Бормотов, И.А. Прошин, А.В. Васильков

Предлагается оригинальная методология построения математических моделей наномодифицированных композитов по экспериментальным данным, на основе которой разрабатывается новый метод многокритериального структурно-параметрического синтеза моделей по видам преобразования координат, позволяющий решить одну из основных проблем построения моделей с использованием известных методов определения параметров моделей в преобразованных координатах – неэффективность получаемых оценок ММ, а также разработать метод расчёта параметров преобразованных нелинейных математических моделей, обеспечивающий эффективность, состоятельность и несмещённость оценок моделей в непреобразованных координатах

Ключевые слова: моделирование, многокритериальный синтез, структурообразование, композиты

Введение

Основа исследований, анализа, синтеза и проектирования технических систем любой природы, в том числе и композиционных материалов, – это моделирование, центральным звеном которого является построение математической модели (ММ) исследуемого объекта.

Стремительное развитие средств вычислительной техники, программного обеспечения расширяют возможности применения ММ как на всех этапах автоматизированного проектирования композиционных материалов (КМ), так и управления, что в свою очередь предъявляет более жёсткие требования к используемым математическим моделям и обуславливает актуальность разработки новых методов, алгоритмов и комплексов программ построения моделей.

Независимо от способа построения модели важным звеном её структурной и параметрической идентификации остаётся обработка экспериментально-статистической информации, получаемой либо в лабораторных условиях, либо при натурных испытаниях, либо с функционирующего объекта.

Анализ современного состояния теории и практики построения математических моделей и их использования при управлении, прогнозе и изучении различных явлений природы и техники позволяет выбрать для моделирования композиционных материалов в качестве одних из основных – методы построения нелинейных моделей и расширение области использования нелинейных зависимостей, позволяющих расширить возможности, как по управлению раз-

личными структурами КМ, так и провести более точные и детальные исследования различных КМ специального назначения.

Центральный ключевой вопрос, определяющий решение всех задач теории и практики построения математических моделей по экспериментальным данным при синтезе КМ – это вопрос разрешения противоречия между требуемыми точностью и скоростью получения оценок математических моделей, затратами на проведение эксперимента, нелинейностью большинства свойств и структур КМ и отсутствием общей законченной теории исследования нелинейных систем при наличии детально разработанной теории линейных систем и множества различных методов и методик построения нелинейных моделей КМ [1].

Основные этапы построения математических моделей КМ

Построение и экспериментальная проверка модели, т.е. математическое описание интересующих исследователя связей и отношений между реальными элементами анализируемой системы, обычно основаны на одновременном использовании информации двух видов:

- 1) априорной информации о природе и характере исследуемых соотношений (**априорные знания**);
- 2) исходных статистических данных, характеризующих процесс и результат функционирования анализируемой системы (**апостериорные знания**).

Идентификация включает в себя следующие этапы (рис. 1) [2].

Бормотов Алексей Николаевич - ПГТА, канд. техн. наук, доцент, e-mail: aleks21618@yandex.ru
Прошин Иван Александрович - ПГТА, д-р техн. наук, профессор, e-mail: proshin@pgta.ru
Васильков Александр Васильевич - ОАО НПП «Рубин», соискатель, e-mail: bac@sura.ru

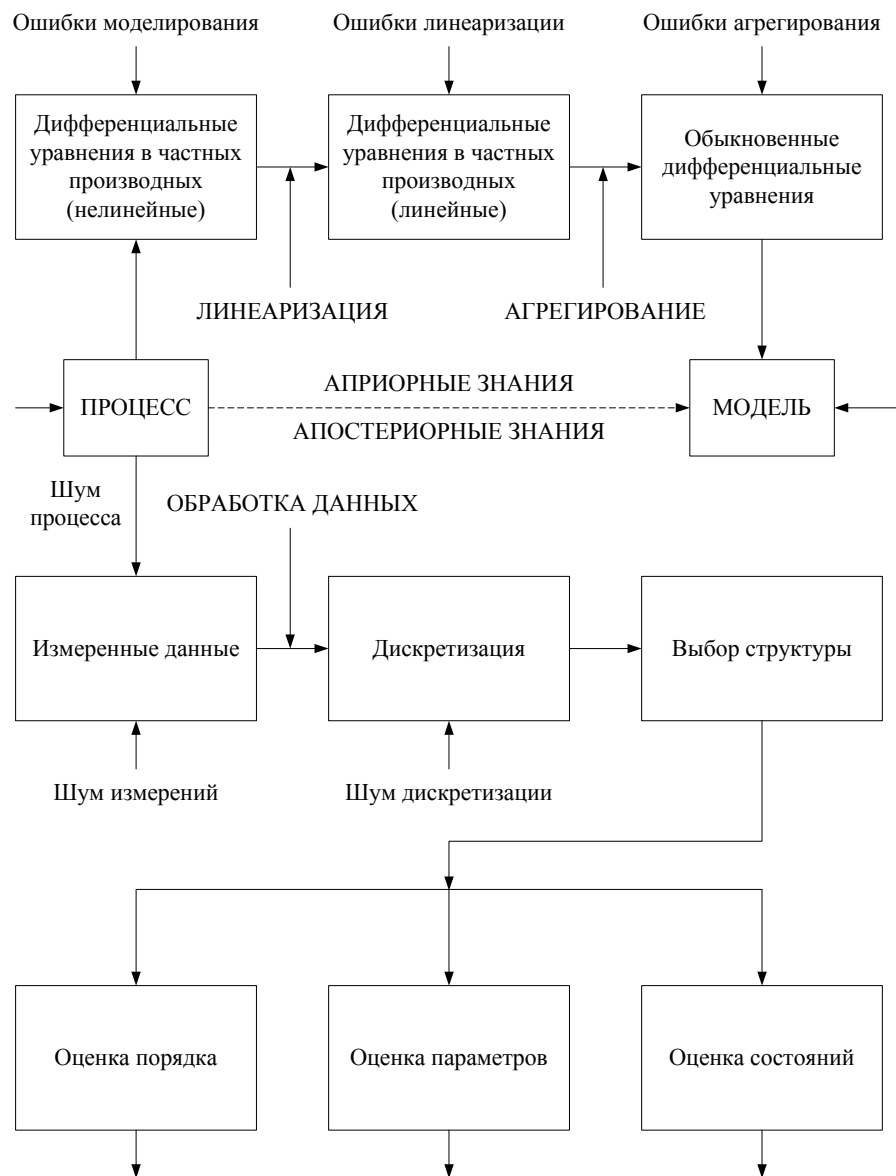


Рис. 1. Этапы построения модели

I. Изучение объекта исследования с точки зрения действующих на него воздействий.

На этом этапе исследователь должен ответить на следующие вопросы:

- какие воздействия действуют на объект (рецептура, технология, окружающая среда);
- какие воздействия, действующие на объект, являются входными, возмущениями, помехами;
- какие переменные, характеризующие поведение объекта могут быть приняты за выходные координаты (эксплуатационные свойства КМ);
- какова рабочая точка объекта (оптимальные структуры и свойства).

Результатом этого этапа должна быть **структурная схема объекта** с указанием действующих на него возмущений.

Из априорных знаний об объекте (уравнений, описывающих физические процессы, протекающие в нем) и из проведенных исследований необходимо ответить на вопрос о:

- линейности (нелинейности);
- стационарности (нестационарности);
- непрерывности (дискретности);
- сосредоточенности (распределенности) параметров.

II. Изучение объекта управления с точки зрения его свойств.

На основании этих данных выбирается класс моделей, используемый в дальнейшем. Таким образом, результатом второго этапа является выбранный класс моделей (рис. 2).

III. Выбор тестирующих сигналов (проведение испытаний) и формирование записей входных-выходных сигналов.

Осуществляется пассивный или активный эксперимент и выявляются функциональные зависимости вида состав-свойство.

При активном эксперименте на этом этапе производится выбор тестирующих сигналов и формирование записей входных-выходных сигналов, а при пассивном – формирование записей входных-выходных сигналов. При этом изготавливаются контрольные образцы материала и проводятся испытания и определяются

основные физико-механические и эксплуатационные свойства КМ в соответствии с действующими ГОСТами.

IV. Определение структуры модели.

Из априорных сведений об объекте необходимо определить максимально возможный порядок модели и произвести структурную идентификацию. Результат этапа – структура модели.

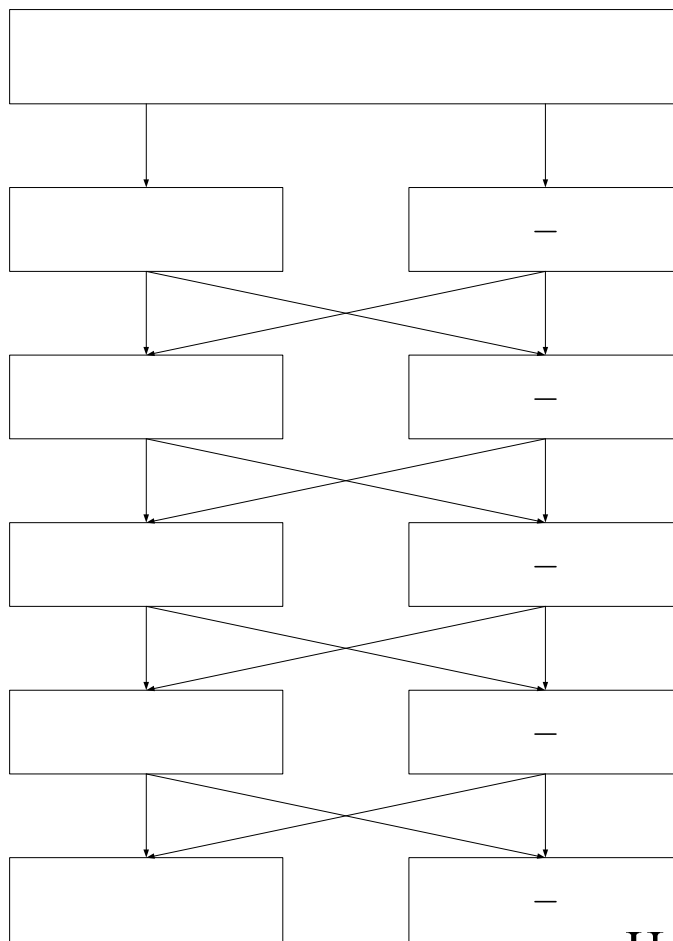


Рис.2. Математические модели объектов

Математ

Непрерывная
Н

V. Оценка коэффициентов модели.

На этом этапе выбирается метод оценивания, и определяются коэффициенты модели.

VI. Проверка адекватности модели объекту.

Для ряда тестовых сигналов проверяется соответствие модели и идентифицируемого объекта.

Этапы I и II относятся к стадии изучения идентифицируемого объекта, когда требуется из множества $M = M(0) = \{M(1)\} \Rightarrow M(1)$ выбрать ММ известного класса, т.е. найти единственную или подкласс моделей $M(1)$ (см. рис.

2), IV – к структурной идентификации, что соответствует повышению ранга неопределённости R модели с первого до второго $M = M(1) = \{M(2)\} \Rightarrow M(2)$, V – к параметрической идентификации, когда ранг неопределённости R модели повышается с второго до третьего $M = M(2) = \{M(3)\} \Rightarrow M(3)$, VI – к проверке модели. Третья (III) стадия – выбор тестирующих, сигналов и формирование записей входных-выходных сигналов и зависимостей состав-свойство.

Стационарная
С

Постановка общей задачи построения математических моделей КМ

При наличии информации обоих типов, используется приём содержательного (реалистического) математического моделирования, т.е. из априорной информации о природе искомым соотношений (математически формализованной в виде некоторых исходных предпосылок или исходных допущений) удаётся вывести общий вид аналитических уравнений, описывающих эти соотношения, после чего с помощью статистической обработки информации на втором этапе оцениваются численные значения параметров, входящих в вышеупомянутые аналитические уравнения. При этом идентификацию детерминированных математических моделей и построение стохастических ММ целесообразно проводить с использованием методов аппроксимации, теории подобия, теории вероятностей, дисперсионного и корреляционно-регрессионного анализа, планирования эксперимента.

В данной работе общая задача построения стохастической математической модели РЗКМ представлена следующим образом.

На реальном объекте (КМ) регистрируется вектор входных (управляющих $\vec{U} = [u_1, u_2 \dots u_n]^T$ и возмущающих $\vec{Z} = [z_1, z_2 \dots z_n]^T$) воздействий $\vec{X} = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_m]^T$, который интерпретируется как вектор определённого признака, характеризующий влияние условий функционирования исследуемой системы, и вектор выходных (управляемых) координат $\vec{Y} = [y_1 \ y_2 \ \dots \ y_n]^T$, интерпретируемый как вектор результирующих показателей, функции отклика или результативных признаков, характеризующий поведение или эффективность функционирования (качество) исследуемой системы.

Проблема состоит в построении ММ, устанавливающей причинно-следственную связь между результативными \vec{Y} и определёнными \vec{X} факторами и конструктивном объяснении поведения вектора функций \vec{Y} результативного признака за счёт изменения факторов – аргументов \vec{X} , т.е. в определении класса допустимых решений F и в нахождении такой векторной функции из этого класса, которая давала бы наилучшую, в определённом смысле, аппроксимацию поведения вектора \vec{Y} на множестве точек – наблюдений $\{x_i\} | i = \overline{1, n}$.

Введём невязки $\delta_{ki} = \delta(f_k(x_i))$, характеризующие погрешности в описании результатив-

ного признака \vec{Y} с помощью функции $f_k(x)$ в точке x_i и функционал качества КМ:

$$\Delta(\vec{f}) = \Delta(\{\delta_{ki}\}, k = \overline{1, p}, i = \overline{1, m}, j = \overline{1, n}) \quad (1)$$

как меру адекватности ММ $\vec{Y} \approx \vec{f}(x)$.

Таким образом, задача построения ММ в математической формулировке сводится к нахождению такой векторной функции $\vec{f}(x)$ из класса допустимых решений \vec{F} , которая удовлетворяет решению экстремальной задачи вида

$$\Delta(\vec{f}(x)) = \text{extr}_{f \in \vec{F}} \Delta(f(x)) \quad (2)$$

Конкретный вид невязок δ_{ki} функционала адекватности $\Delta(f)$ и класса допустимых решений \vec{F} определяется в зависимости от природы исследуемых технологических процессов. При этом задача (2) отыскания стохастической ММ объекта, процесса, системы распадается на две.

Первая задача – задача структурного синтеза $M = M(1) = \{M(2)\} \Rightarrow M(2)$ состоит в нахождении класса допустимых решений \vec{F} и определении из этого класса подходящего параметрического семейства функций $\{f(x); \Theta\}$.

Вторая задача – задача параметрической идентификации $M = M(2) = \{M(3)\} \Rightarrow M(3)$ (синтеза, оптимизации) сводится к подбору (статистическому оцениванию) значений параметров Θ , на которых достигается экстремум функционала (1).

Общий подход к построению математических моделей КМ по экспериментальным данным

Одним из наиболее трудоёмких и нерешённых до настоящего времени в материаловедении этапов обработки экспериментально-статистической информации является синтез ММ и выбор вида функциональных зависимостей. Общие формализованные методы такого выбора до настоящего времени не разработаны. Аппроксимация полиномиальными моделями не отражает физической сущности протекающих в КМ процессов и не является адекватной при математическом описании структур строительных материалов. Поэтому в данной работе предпринята попытка решения задач систематизации функциональных зависимостей, синтеза функционально полных и линейно независимых наборов функций, нахождения эффективных оценок, а также разработки методов и методик построения и выбора вида ММ для КМ специального назначения.

Предлагается общий подход построения стохастических ММ, основу которого составляют три следующих [3]:

- систематизация ММ (базисных функций) по видам преобразования координат;
- многоуровневый синтез и выбор пакетов функциональных зависимостей;
- получение состоятельных, несмещённых и эффективных оценок ММ в преобразованных координатах.

Построение ММ нелинейных моделей на основе экспериментально-статистической информации включает этап выбора модели, т.е. определение её структуры. В работе ставится задача создания системы автоматизированного выбора структуры нелинейной модели, что определяет необходимость автоматического подбора нужной функциональной зависимости по совокупности экспериментальных данных. Для этого предлагается выбор моделей проводить на базе системы функций с заданным набором преобразования координат.

Определим основные требования к системе математических моделей на заданном наборе нелинейных преобразований координат.

Для обеспечения автоматического выбора структуры ММ совокупность моделей должна удовлетворять двум противоречивым требованиям: содержать все возможные ММ с использованием заданных функциональных преобразований и не иметь моделей с одинаковыми типами функциональных преобразований.

Совокупность моделей на заданном наборе нелинейных преобразований координат, удовлетворяющих сформулированным требованиям, назовём **функционально полным набором моделей** [4].

Таким образом, под функционально полным набором математических моделей будем понимать совокупность моделей, объединяющих все возможные математические модели, которые могут быть синтезированы на заданном наборе нелинейных преобразований координат и одновременно среди которых нет хотя бы одной пары функций, получаемой с использованием одних и тех же преобразований координат.

Предложенный **метод структурно-параметрического синтеза моделей** по видам преобразования координат состоит в формировании функционально-полных наборов пакетов ММ по заданным видам функциональных преобразований $\psi(x)$ и $\varphi(y)$ определённого x и результативного y признаков:

$$\left. \begin{array}{l} \varphi(y) \\ \psi(x) \end{array} \right\} \Rightarrow y = \varphi^{-1}(a_0 + a_1\psi(x)),$$

и в организации для каждого пакета множества линейно-зависимых ММ:

$$\varphi^{-1}(a_0 + a_1\psi(x)) = \{f_i(a_0 + a_1x)\},$$

наиболее полно отражающих физические закономерности исследуемого объекта.

Таким образом, предлагаемый метод синтеза ММ может быть представлен следующими преобразованиями:

$$\left. \begin{array}{l} \varphi(y) \\ \psi(x) \end{array} \right\} \Rightarrow y = \varphi^{-1}(a_0 + a_1\psi(x)) = \{f_i(a_0 + a_1x)\}.$$

При автоматизированном синтезе функционально полных наборов линейно независимых ММ с использованием n видов преобразования координат возможно построение n^2 однофакторных моделей.

С целью расширения набора функций и возможностей учёта различных нелинейностей в моделях предлагается проводить синтез моделей с многократным использованием одних и тех же видов преобразования координат:

$$\left. \begin{array}{l} \varphi_n(\varphi_{n-1}(\dots\varphi_2(\varphi_1(y)))) \\ \psi_m(\psi_{m-1}(\dots\psi_2(\psi_1(x)))) \end{array} \right\} \Rightarrow y = \varphi_n^{-1}(\dots\varphi_2^{-1}(\varphi_1^{-1}(a_0 + a_1\bar{\psi}(x))))',$$

где n и m – количество уровней преобразований результативного и определённого признаков.

Как уже отмечалось, одной из основных проблем построения моделей с использованием известных методов определения параметров моделей в преобразованных координатах является неэффективность получаемых оценок ММ. Для обеспечения построения ММ в преобразованных координатах был разработан **метод расчёта** параметров преобразованных нелинейных ММ, обеспечивающий эффективность, состоятельность и несмещённость оценок моделей в непреобразованных координатах.

Общая структурная схема построения математической модели представлена на рисунке (рис. 3) и включает в себя следующие процедуры.

1. Синтез функционально полных пакетов ММ, т.е. формирование множества моделей второго ранга неопределённости $M(1) = \{M(2)\}$. Наборы пакетов моделей задаются видом и уровнем преобразования координат.

2. Предварительная обработка экспериментально-статистической информации, включающая нормировку, сглаживание и преобразование исходных данных в соответствии с выбранными видами и уровнем координатных преобразований.

3. Структурная $M(1) = \{M(2)\} \Rightarrow M(2)$ и параметрическая $M(2) = \{M(3)\} \Rightarrow M(3)$ идентификация математических моделей.

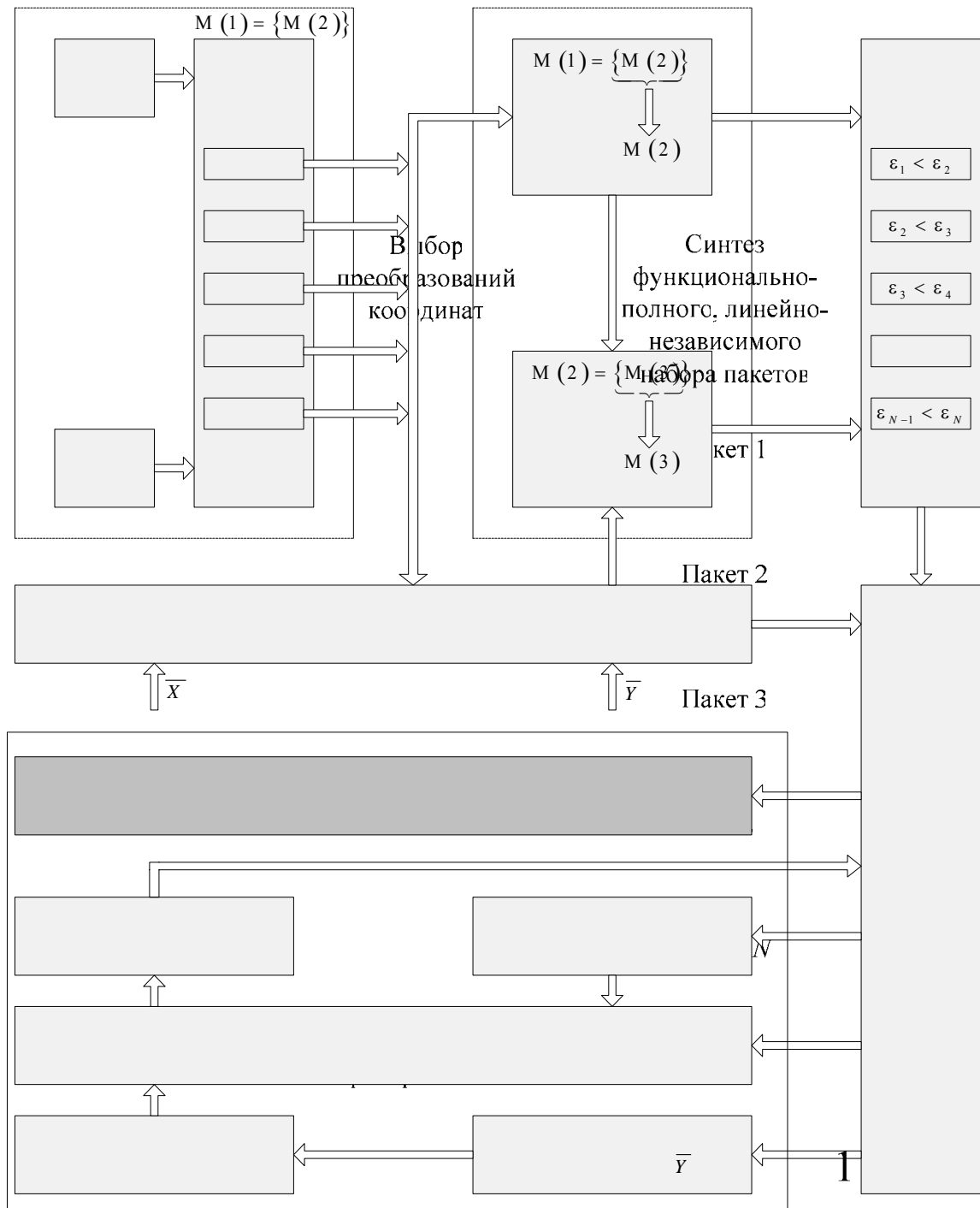


Рис. 3. Схема построения стохастических математических моделей

4. Ранжирование пакетов математических моделей по заданному критерию (минимум среднеквадратического отклонения или относительной ошибки).

5. Накопление пакетов полученных математических моделей и исходных данных.

6. Получение однофакторных и многофакторных моделей удобной формы записи, описывающих общие закономерности рассматриваемых явлений.

Рассмотренные принципы систематизации и многоуровневого преобразования координат для первичной обработки экспериментально-статистических данных позволяют синтезировать функционально-полных линейно независимых наборов пакетов математических моделей в первом блоке.

Применение численного метода расчета оценок параметров моделей, основанной на преобразованной во втором блоке в соответствии с заданными видами и уровнем преобразования координат, экспериментальными данными обеспечивает получение состоятельных, несмещенных и эффективных оценок при струк-

турной и параметрической идентификации математических моделей (блок 3).

Накопленная в блоке 5 экспериментально-статистическая информация и ранжированные в блоке 4 пакеты моделей используются на заключительном этапе построения математических моделей в блоке 6. В блоке 6 решаются четыре основные задачи:

- получение однофакторной математической модели удобной формы записи (выбор из пакета линейно зависимых моделей модели удобной формы записи);
- выбор единой системы координат для результирующего признака \bar{Y} и синтез многофакторных моделей по совокупности однофакторных экспериментов;
- выбор общих оценок параметров моделей по совокупности разнородных экспериментов с однотипными переменными;
- пересчет оценок параметров математических моделей для выбранной структуры и формы.

Заключение

Предложенный новый метод многокритериального структурно-параметрического синтеза моделей по видам преобразования координат позволяет решить одну из основных проблем построения моделей с использованием известных методов определения параметров моделей в преобразованных координатах – неэффективность получаемых оценок ММ, и разработать метод расчёта параметров преобразованных

нелинейных ММ, обеспечивающий эффективность, состоятельность и несмещённость оценок моделей в преобразованных координатах.

На основе изложенных теоретических предпосылок был разработан программный комплекс с применением которого выполнен многоуровневый синтез и выбор пакетов функциональных зависимостей и получены состоятельные, несмещённые и эффективные оценки параметров математических моделей структуры и свойств наномодифицированных КМ для защиты от радиации в преобразованных координатах.

Литература

1. Развитие научных основ и методов синтеза композиционных материалов для защиты от радиации с регулируемой структурой и свойствами / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов // Известия высших учебных заведений. Строительство. – 2006. – № 1. – С. 24-29.
2. Многокритериальный синтез композита как задача управления / А.Н. Бормотов // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2010. – Т. 16. – № 4. – С. 924-937.
3. Математическое моделирование и обработка информации в исследованиях на ЭВМ / И.А. Прошин, Д.И. Прошин, Н.Н. Мишина, А.И. Прошин, В.В. Усманов; Под ред. И.А. Прошина. – Пенза: ПТИ, 2000. – 422 с.
4. Моделирование реологических процессов в глетглицириновых композитах / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин, А.Ю. Кирсанов, Е.М. Бородин // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2010. – Т. 16. – № 3. – С. 682-693.

Работа выполнена при поддержке гранта АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2011 годы)» на тему «Математическое моделирование и многокритериальный синтез строительных материалов специального назначения», рег. № 2.1.2/11488.

Пензенская государственная технологическая академия

Открытое акционерное общество «Научно-производственное предприятие «Рубин»»

METHODOLOGY OF CONSTRUCTION OF MATHEMATICAL MODELS NANOMODIFICATION COMPOSITES ON EXPERIMENTAL DATA

A.N. Bormotov, I.A. Proshin, A.V. Vasilkov

The original methodology of construction of mathematical models nanomodification composites on experimental data on the basis of which the new method multicriterion structural-parametrical synthesis of models by kinds of transformation of the coordinates is developed is offered, allowing to solve one of the basic problems of construction of models with use of known methods of definition of parameters of models in the transformed coordinates – an inefficiency of received estimations of MM and also to develop a method of calculation of parameters of the transformed nonlinear mathematical models, providing efficiency, a solvency and no displaced estimations of models in the not transformed coordinates

Key words: modelling, multicriteria synthesis, structurization, composites