

КЛАСТЕРНЫЙ АНАЛИЗ МЕХАНОАКТИВИРОВАННЫХ СТРУКТУР В СВС-МАТЕРИАЛАХ

И.В. Милюкова, П.Ю. Гуляев

Югорский государственный университет
г. Ханты-Мансийск

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
г. Барнаул

Кластерный анализ факторного пространства конечных свойств механоактивированных наноструктур в СВС-материалах базируется на методике парных сравнений, когда каждый результат эксперимента представляется точкой в евклидовом пространстве – порядок между парами объектов (по «сходству») можно представить порядком внутри парных расстояний. Таким образом, экспериментальные точки будут сгруппированы в компактные множества (кластеры) в выбранном факторном пространстве. Внутри кластеров, за счет их близости и сходства, будет обеспечена однородность и воспроизводимость свойств материалов и их функциональных зависимостей от входных параметров.

Целью работы являлось исследование влияния предварительной механоактивации дополнительных компонентов, вводимых в основную шихту на процесс СВ-синтеза и свойства целевых продуктов.

Первичный анализ показал, что поле экспериментальных данных имеет многофакторный характер. Во-первых, это входные параметры исследования: время механоактивации ($t_{ма.}$), тип порошка, процент инертных добавок в шихту и прочее. Параметрами отклика нами были определены следующие экспериментальные данные: тепловая полуширина волны горения (h), скорость волны горения (V), коэффициент адиабатического прогорания (S), температура в зоне догорания ($T_{дог.}$), плотность пикнометрическая (ρ), открытая пористость (Π). В результате попытки установить прямую корреляцию, однозначно характеризующую взаимосвязь времени механоактивации с параметрами реакционной способности шихты и свойств конечного продукта, явной зависимости выявлено не было. В связи с этим был проведен кластерный анализ факторного пространства входных и выходных параметров.

При проведении кластерного анализа использовался следующий алгоритм:

- получения корреляционных зависимостей между входными параметрами процесса

механоактивации и откликами факторов, определяющих реакционную способность СВ-синтеза;

- группирования экспериментальных данных в компактные и однородные, по условиям проведения эксперимента – «кластеры», могут проводиться в разных подпространствах многомерного пространства выходных откликов.

Важнейшим является вопрос, как построить шкалу на ограниченном множестве данных, чтобы она обеспечивала гомоморфизм неприводимой эмпирической системы с отношениями в числовую систему с отношениями [1].

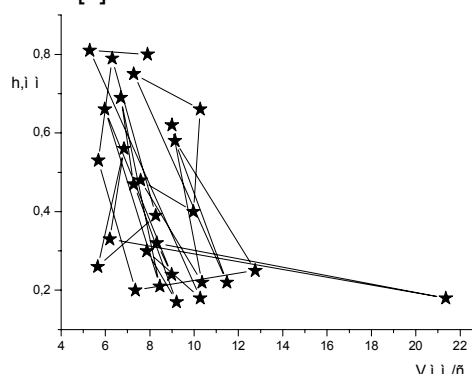


Рисунок 1 – Сортировка факторного пространства hV по времени механоактивации

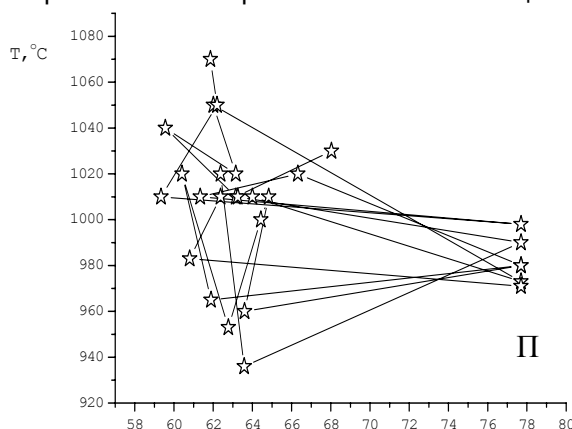


Рисунок 2 – Сортировка факторного пространства TP по времени механоактивации

Для таблицы исходных данных факторное пространство откликов имеет размерность 6 и определяется четырьмя теплофизическими характеристиками волны горения: h , V , T , S и двумя физико-механическими параметрами: r , P . Для обнаружения общих закономерностей влияния режимов механоактивации на технологические параметры синтеза был применен метод кластерного и группового анализа в несмежных факторных подпространствах тепловая полуширина волны горения – скорость фронта горения (hV) и температура-пористость (ТП), для остальных подпространств rV , TV , hR , SV характерно отсутствие регрессионных зависимостей в парных отношениях, и они исключены из дальнейшего анализа.

На рисунках 1 и 2 изображены соответственно пространства hV и ТП, упорядоченные по входному параметру t_{ma} .

Из графиков видно, что без разделения на кластеры линии сортировки по t_{ma} соединяют далеко топологически расположенные точки и в этих подпространствах необходимо производить более подробный кластерный анализ, как показано на рисунке 3.

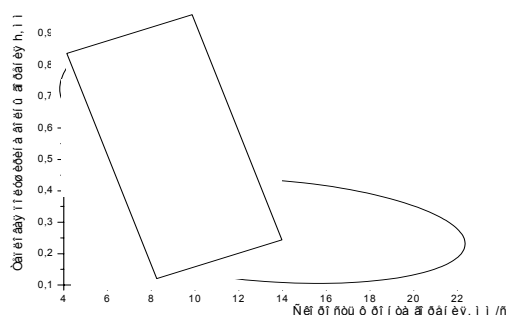


Рисунок 3 – Определение характерных кластеров в факторном пространстве hV

Из двух факторных пространств откликов hV и ТП, выбранных нами по признаку наличия существенной регрессионной зависимости парных отношений, наибольший интерес представляет факторное пространство парных отношений hV . Как известно, скорость распространения фронта горения и фундаментальная длина локализации диссипативных тепловых структур в волне горения СВС (или тепловая полуширина волны горения ТПШ) достаточно полно характеризует реакционную способность шихты. Основной трудностью кластерного анализа в этом пространстве является сильная зависимость ТПШ от скорости горения. Как видно из рисунка 1, при сортировке экспериментальных точек в факторном пространстве hV по вре-

мени механоактивации – t_{ma} , которая изображается линиями, соединяющие экспериментальные точки по мере возрастания t_{ma} , наблюдается топологическая близость линий сортировки, но не самих экспериментальных точек. Наиболее интересным топологическим кластером в фазовом пространстве hV являлся кластер $hV3$ (рисунок 4), в котором наблюдается высокая степень линейной регрессионной зависимости с погрешностью менее 1%. Данный кластер явился опорным планом и основой для построения робастных оценок при дальнейшем проведении неметрического факторного анализа других несмежных подпространств, таких как: ТП, Tt , SV , rV и других.

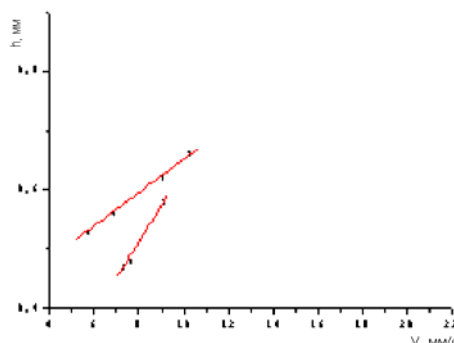


Рисунок 4 – Анализ факторного влияния времени механоактивации в кластере $hV3$

После того, как были выбраны наиболее значимые кластеры в пространстве hV , в них был проведен регрессионный анализ между входными значениями параметров механоактивации и откликами на них среди факторов, определяющих реакционную способность шихты. В методе парных сравнений мы, например, предполагаем, что вероятность P (a_0 , a_1) известна для каждой пары a_0 , a_1 . На практике же мы имеем только оценку вероятности, основанную на конечном числе экспериментов, для конечного числа пар a_0 , a_1 . В этом, однако, кроется несоответствие теоретическому обоснованию шкалы, так как в принципе мы всегда можем сколь угодно близко подойти к сделанному идеализированному предположению.

Вопрос о том, как построить шкалу из ограниченного множества данных, является вопросом оценки и не имеет ничего общего с определением шкалы [1]. В нашем случае, в основу обоснования выбора метрических шкал положен очевидный факт того, что механоактивация наиболее полно характеризуется величиной t_{ma} , а реакционная способность величиной h . На рисунке 5 приведены экспериментально выявленные регрессион-

ные зависимости между этими характеристиками.

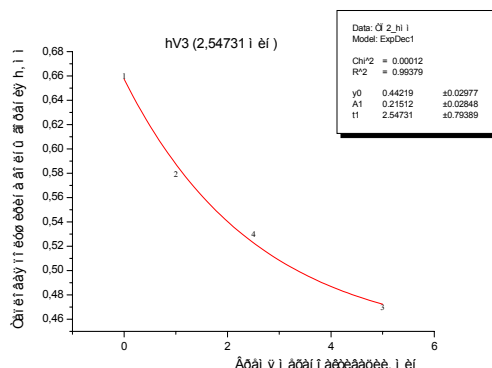


Рисунок 5 – Экспериментальная зависимость тепловой полуширины волны горения от времени механоактивации в кластере hV3

Обратный экспоненциальный закон регрессионной кривой был выявлен в кластерах hV3, hV4 как наиболее близко аппроксимирующий результаты экспериментов из целого класса применявшихся нелинейных законов регрессии (степенных полиномов и сплайнов, экспоненциальных от 1 до 3 порядка и логарифмических).

Как видно, из рисунка 6, квадрат корреляционного коэффициента равен 0,99379, при относительной квадратической ошибке 0,00012, что подтверждает высокую достоверность выбранного закона.

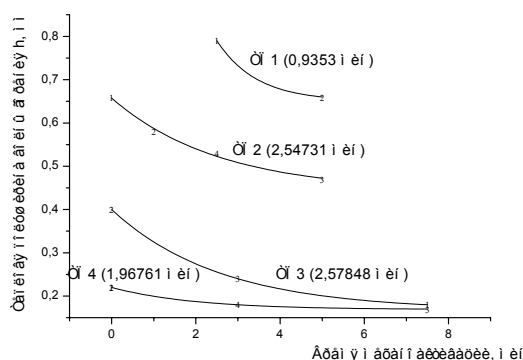


Рисунок 6 – Семейство экспериментальных зависимостей тепловой полуширины волны горения от времени механоактивации по всем кластерам TP1 – TP4

Групповой анализ факторного пространства в подпространстве TP по всей сводной

таблице экспериментальных данных позволил выделить 13 точек, которые по топологическому признаку близости были разбиты на четыре кластера TP1–TP4. Необходимо отметить, что 70 % однокластерных данных из подпространства hV сгруппировались в кластеры в подпространстве TP.

Интересным результатом, который дал групповой анализ зависимости h от времени механоактивации t_{ma} , в четырех кластерах подпространства TP, явилось проявление во всех случаях обратной экспоненциальной зависимости $h(t_{ma})$ (рисунок 6), что хорошо коррелирует с данными, полученными для кластеров подпространства hV. Такое совпадение не представляется случайным, особенно с учетом того, что в наиболее репрезентативных кластерах TP2 и TP3 эффективное время механоактивации совпало с точностью до 1 %.

Выводы:

- использование режимов с большими временами механоактивации (более 5 минут), проявляющееся в выравнивании и усреднении формы и размеров частиц, не приводит к повышению реакционной способности шихты;
- малые времена механоактивации (менее 1 мин.) эффективны для порошков кратковременного хранения или непосредственного использования в СВС синтезе сразу после активации;
- оптимальная величина времени механоактивации составляет примерно 2,5 мин. для всех типов составов шихты.

Список литературы

1. Пфанцгаль И. Теория измерений / И. Пфанцгаль – М.: Мир, 1976. – 248 с.
2. Гуляев П.Ю., Гумиров М.А., Евстигнеев В.В. Способ измерения температуры фронта горения самораспространяющегося высокотемпературного синтеза смеси дисперсных материалов. Патент РФ № 2094787 на изобретение по заявке № 96113415/25 (019337), G 01 N25/28, G01 J 5/12, приоритет от 01.07.96.- опубл. 27.10.97 в Бюл. И. № 30.
3. Коротких В.М., Гуляев П.Ю., Гумиров М.А., Есков А.В., Евстигнеев В.В. Способ измерения яркостной температуры объекта. Патент РФ № 2099674 на изобретение по заявке № 96113418/25 (019338), G 01 J 5/52, приоритет от 01.07.96.- опубл. 20.12.97 в Бюл. И. № 35.