



УДК 541.64: 519.81

АНАЛИЗ НЕЧЕТКИХ ДАННЫХ ДЛЯ ОЦЕНКИ РЕЦЕПТУР ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ

*Харитонов М.А.¹, kharitonov@volsu.ru, Гермашев И.В.¹, germasheviv@mail.ru,
Дербишер В.Е.², e-mail: derbisher-28091945@yandex.ru,
Дербишер Е.В.², derbisher1@yandex.ru*

Волгоградский государственный университет, г. Волгоград
Волгоградский государственный технический университет, г. Волгоград

Рассмотрена задача оценки полимерной продукции. Требования к полимерам формируются исходя из потребительских качеств и условий технологического процесса их производства. Оценку предлагается осуществлять путем анализа рецептуры композита. Для этого проводится оценка компонентов полимерной композиции на основе нечеткого анализа их свойств. Приведены конкретные примеры и решение поставленной задачи на этих примерах. Для формализации исходных данных использованы нечеткие числа, в результате чего получено параметрическое пространство, описывающее многокомпонентные системы. Вычисление индекса соответствия каждого параметра системы предъявляемым требованиям позволило перейти к относительным безразмерным вещественным величинам. В качестве агрегатной функции использовалась процедура взвешенного голосования. Полученное значение отражает интегральную меру соответствия полимерной композиции предъявляемым требованиям.

Ключевые слова: полимерная продукция, оценка рецептуры, многокомпонентные системы, нечеткие числа.

THE ANALYSIS OF FUZZY DATA FOR EVALUATION OF POLYMERIC COMPOSITIONS FORMULATIONS

Kharitonov M.A.¹, Germashev I.V.¹, Derbisher V.E.², Derbisher E.V.²

Volgograd State University, Volgograd
Volgograd State Technical University, Volgograd

The problem of polymer products evaluation is considered. Consumer qualities and technological process conditions of polymers form requirements for its. The evaluation is proposed to be carried out by analyzing the formulation of the composite. For this purpose, the components of the polymer composition are evaluated on the basis of fuzzy analysis of their properties. The specific examples and the solution of the problem on these examples are given. Fuzzy numbers are used to formalize the initial data, resulting in a parametric space describing multicomponent systems. The index calculation of the each parameter compliance of the system with the requirements allowed to move to the relative dimensionless real values. The weighted voting procedure was used as an aggregate function. The obtained value reflects the compliance integral measure of the polymer composition with the requirements.

Keywords: polymer products, estimation formulation, multicomponent systems, fuzzy numbers.

В работе дается описание методов нечеткой математики при анализе сложных многофакторных технических систем, в том числе химико-технологических систем (ХТС), для их идентификации и доэкспериментального исследования. Эти системы, как правило, описываются нечеткой информацией: наличием лингвистических описаний, интервалами, отсутствием данных, несовпадающими результатами исследований, разноречивыми мнениями экспертов и т.д. В этих условиях математическое моделирование, использующее эту информацию, имеет также нечеткий характер и множественность решений. Тем не менее, использование средств нечеткой математики, нечеткого моделирования позволяет на предварительной стадии выбрать оптимальную и экономную стратегию эксперимента и оценить ожидаемый технический результат, что напрямую связано с качеством продукции. Отметим, что использование нечетких множеств (НМ) для подготовки исходной информации при моделировании ХТС зарекомендовало себя с положительной стороны, как форма



теоретического анализа полимерных композиций (ПК) и нахождения взаимосвязи между компонентами и свойствами полимерной системы в целом. Здесь необходимым условием является выявление и ранжирование технических функций ингредиентов ПК. Анализ различных математических подходов оценки сложных систем [1] также свидетельствует о целесообразности использования нечеткой математики.

Формирование задачи оптимизации ПК и ее решение базируется на платформе зависимости «состав – свойство – качество – применение» и предусматривает выбор определенного количества ингредиентов с необходимыми техническими функциями с использованием нечеткого моделирования.

Сырьевые ПК, иначе говоря смеси, представляют собой сложные системы. Их основой служат полимерные матрицы в которые добавляют различные ингредиенты. Взаимодействие между такими матрицами, их строение и состав зависят также от химических и технологических процессов их переработки.

Таким образом, ПК представляет в конечном счете многокомпонентную, неоднородную систему, характеристики которой не позволяют вычислять точные значения технических эффектов по его компонентам.

Сегодня теория ПК представляет собой попытку решения задачи о том, как конечные физико-химические свойства готовых изделий зависят от состава, химико-технологических и физико-технических параметров. Конечной целью здесь является получение материалов с заданными свойствами. Для достижения поставленной цели надо, задав конечные свойства проектируемого материала или изделия, узнать параметры их изготовления.

Отметим что, для частных случаев теоретического анализа свойств ПК, используют многие методы анализа ХТС: дискриминантный, факторный, регрессионный и т.п., для выявления управляющих воздействий и вычисления их последствий, при этом оперируют в числовых пространствах [2 – 4]. Но при наличии нечисловых, например, лингвистических параметров, такие методы становятся малопригодными и требуют дополнительных усилий по согласованию исходных данных и математических методов. Сопоставляя и критически анализируя существующие математические подходы [1, 2 – 5], можно сделать вывод, что важная часть этой проблемы, преодолевается применением НМ, для описания как числовых, так и нечисловых параметров. Решение самой задачи осуществляется методами нечеткой математики. Важные элементы последней, все чаще, применяются в научном анализе ХТС [6 – 9].

Добавим, что современные исследования, ориентированные на обработку нечеткой информации, используют маршрут следующего вида: «исходные данные – фаззификация – анализ – дефаззификация – результат». При этом формулируют переменные, в том числе лингвистические и, используя общепринятые методы фаззификации термов, переходят к НМ и далее, как например, в [10] проводят анализ полученной модели данных в математическом пакете [11].

Проведем общую постановку задачи. Пусть есть некоторая полимерная композиция. Необходимо ее модифицировать активными добавками таким образом, чтобы воздействовать на проявление $x_1, x_2, \dots, x_m$ некоторых свойств $Q_1, Q_2, \dots, Q_m$ соответственно этой композиции. Причем параметры $x_1, x_2, \dots, x_m$ нормированы таким образом, что улучшение свойства, влечет увеличение соответствующего параметра.



Пусть задан набор активных добавок $A_1, A_2, \dots, A_n$ к полимерной композиции. Каждая из этих добавок определенным образом влияет на некоторые из интересующие нас свойств. Это влияние будем описывать по следующей формуле

$$x'_{ij} = a_{ij} x_j,$$

где $i = 1, \dots, n$ — номер активной добавки, n — количество активных добавок, $j = 1, \dots, m$ — номер свойства полимерной композиции, m — количество свойств полимерной композиции, a_{ij} — коэффициент воздействия добавки A_i на j -ое свойство полимерной композиции, x_j — проявление j -го свойства полимерной композиции до модификации, x'_{ij} — проявление j -го свойства полимерной композиции после модификации добавкой A_i . Откуда имеем

$$\frac{x'_{ij}}{x_j} - 1 = a_{ij} - 1 = q_{ij},$$

где q_{ij} — приведенный коэффициент воздействия добавки A_i на j -ое свойство полимерной композиции, который при отрицательном влиянии, принимает отрицательные значения, а при положительном влиянии принимает положительные значения.

При модификации полимерной композиции всеми n активными добавками получаем

$$q_j = \frac{x'_j}{x_j} - 1, \quad (1)$$

где q_j — некоторый приведенный коэффициент, описывающий совокупное влияние всех n добавок на j -ое свойство, x'_j — проявление свойства Q_j после модификации комплексом добавок $A_1, A_2, \dots, A_n$, $j = 1, \dots, m$.

Надо сказать, современные достижения в химии композиционных материалов не позволяют определить q_j для произвольного состава добавок. Это делается экспериментально и только для конкретного состава полимерной композиции. И задачей как раз и является построить оценки q_j , позволяющие хотя бы приближенно оценить совокупное влияние на полимерную композицию комплекса добавок в произвольном составе.

Таким образом, задачей настоящей работы является оценка влияния комплекса добавок $A_1, A_2, \dots, A_n$ на совокупность значений $q_1, q_2, \dots, q_m$.

Если для оценки (1) принять, что максимально возможное совокупное влияние — это сумма возможных воздействий добавок, то получим

$$q_j \leq \sum_{i=1}^n q_{ij} = \bar{q}_j, \quad (2)$$

где $\bar{q}_j = \sum_{i=1}^n q_{ij}$ — верхняя граница возможного совокупного влияния, $j = 1, \dots, m$.

С другой стороны, полагая, что каждая добавка не влияет на действие остальных, получим

$$q_j \geq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n q_{ij} = \underline{q}_j. \quad (3)$$



Оценки (2) и (3) требуют дополнительного соглашения о том, что комплекс добавок формируется таким образом, чтобы не ухудшать совокупное действие, т. е.

$$0 \leq \underline{q}_j \leq \bar{q}_j.$$

Таким образом, совокупное влияние комплекса добавок можно описать нечетким числом [10]

$$\Phi_j(x_j) = e^{-\frac{(x_j - \tilde{q}_j)^2}{\delta_j^2} \ln 2}, \text{ где } \tilde{q}_j = \frac{\bar{q}_j + \underline{q}_j}{2}, \delta_j = \frac{\bar{q}_j - \underline{q}_j}{2}. \quad (4)$$

Пусть задана рецептура полимерной композиции (табл. 1). Необходимо оценить ее согласно потребительским запросам.

Таблица 1

Пример рецептуры полимерной композиции

Обозначение	Полимер, %	Антипирен, %	Антиоксидант, %	Светостабилизатор, %
C	87.4–93.7	5–10	1–2	0.3–0.6

Для этого необходимо определить, как влияет концентрация добавки на соответствующее свойство полимерной композиции (табл. 2).

Таблица 2

Влияние добавок на полимерную композицию C

j	Обозначение	Антипирен	Антиоксидант	Светостабилизатор
		i		
		1	2	3
1	q_{i1}	0.2–0.3	0.03–0.05	0
2	q_{i2}	0.02–0.03	0.3–0.4	0
3	q_{i3}	0	0.1–0.15	0.5–0.7

Здесь $j = 1, 2, 3$ означает устойчивость полимерной композиции к горению, окислению, фотодеструкции соответственно.

Для композиции C, согласно (2) и (3) получим

$$\bar{q}_1 = \sum_{i=1}^3 q_{i1} = 0.3 + 0.05 + 0 = 0.35,$$

$$\underline{q}_1 = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 q_{1i} = \frac{1}{3} (0.2 + 0.03 + 0) \approx 0.083,$$

Проводя аналогичные вычисления, получим результаты, приведенные в табл. 3.

Таблица 3

Результаты вычисления верхних и нижних оценок изменения свойств модифицированного полимера C

j	$\underline{q}_j$	$\bar{q}_j$
1	0.083	0.35
2	0.11	0.43
3	0.2	0.85

Согласно (4) получим следующее совокупное влияние комплекса добавок на полимерную композицию C



$$\phi_1(x_1) = e^{-\frac{(x_1-0.22)^2}{0.015} \ln 2}, \quad \phi_2(x_2) = e^{-\frac{(x_2-0.27)^2}{0.026} \ln 2}, \quad \phi_3(x_3) = e^{-\frac{(x_3-0.53)^2}{0.11} \ln 2}.$$

Часто возникающая задача на начальных этапах проектирования — это задача выбора наилучшего варианта из множества допустимых, которые удовлетворяют некоторым заданным требованиям. При попытке получить решение в условиях неполной и нечеткой информации об объекте проектирования возникает довольно большая вероятность неправильных решений. Поэтому использование ясной стратегии может свести к минимуму эту вероятность, снижая затраты времени, интеллектуальных и материальных ресурсов.

Предлагаемый подход позволяет в условиях нечетко сформулированных рецептов выбирать те, которые ведут к получению полимерной композиции в наибольшей степени удовлетворяющей пожеланиям потребителя. Этот метод можно использовать для получения информации, позволяющий принимать обоснованное решение инженером-технологом при планировании производства.

Представленное исследование проведено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Волгоградской области, грант №18-48-340011

Список цитируемой литературы

1. Ким Дж.-О., Мьюллер Ч.У., Клекка У.Р., Олдендерфер М.С., Блэшфилд Р.К. Факторный, дискриминантный и кластерный анализ. — Москва: Финансы и статистика, 1989. — 215 с.
2. Ikeda T., Tamura H., Sakurai T., Seki S. Control of optical and electrical properties of nanosheets by the chemical structure of the turning point in a foldable polymer // *Nanoscale*. 2016. Vol. 8, №30. — pp. 14673–14681.
3. Kobayashi A., Nakaza T., Hirano T., Kitagawa S., Ohtani H. Variation in the chromatographic, material, and chemical characteristics of methacrylate-based polymer monoliths during photoinitiated low-temperature polymerization // *J. of Separation Science*. 2016. vol. 39, №13. — pp. 2459–2465.
4. Strachota B., Hodan J., Matejka L. Poly(N-isopropylacrylamide)-clay hydrogels: Control of mechanical properties and structure by the initiating conditions of polymerization // *European Polymer J.* 2016. №77. — pp. 1–15.
5. Chou L.Y.T., Song F., Chan W.C.W. Engineering the structure and properties of DNA-nanoparticle superstructures using polyvalent counterions // *J. of the American Chem. Society*. 2016. Vol. 138, №13. — pp. 4565–4572.
6. Гермашев И.В., Дербишер В.Е., Кокорина Т.М., Мурашкина И.А. Оценка качества трикотажа с применением теории нечетких множеств // *Изв. вузов. Технология текстильной промышленности*. 1999. № 4. — с. 7–10.
7. Derbisher V.E., Germashev I.V., Bodrova G.G. Fuzzy-set-based quantitative estimates of the efficiency of thermo- and photostabilizing additives in polymeric compositions // *Polymer Science, series A*. 1997. Vol. 39, №6. — pp. 630–633.
8. Khidhir B.A., Al-Oqaiel W., Kareem P.M. Prediction models by response surface methodology for turning operation // *Am. J. of Model. and Optim.* 2015. Vol. 3, №1. — pp. 1–6.
9. Emami M.R.S. Fuzzy logic applications in chemical processes // *The J. of Math. and Comput. Sci.* 2010. Vol. 1, №4. — pp. 339–348.
10. Germashev I.V., Derbisher V.E. Properties of unimodal membership functions in operations with fuzzy sets // *Russian Mathematics*. 2007. Vol. 51, №3. — 72–75.
11. Гермашев И.В., Дербишер В.Е., Дербишер В.Е. Вычисление арифметических операций над нечеткими числами для анализа сложных систем // *Математические методы в технике и технологиях – ММТТ-29: сб. трудов XXIX Междунар. науч. конф. : в 12 т., 2016. Т. 2.* — С. 63–65.