

А.Ю. Бортников, Н.Н. Минакова
**Многомерный анализ в классификации
 фрактальных структур высоконаполненных
 полимеров**

Одним из определяющих направлений развития науки и техники является создание новых материалов. Среди них важное место занимают композиционные материалы.

При всем многообразии композиционных материалов затруднена оценка их свойств на стадии проектирования из-за неоднородной структуры как на макро-, так и на микроуровнях. Один из способов решения этой проблемы заключается в том, чтобы соотнести новый материал с уже созданными композициями, для которых известны прочностные и электрические характеристики, т.е. выполнить классификацию.

Была поставлена задача подбора и апробации метода классификации структурно неоднородных сред, опираясь на микрофотографии их макроструктуры. В качестве объекта исследования выбрали высоконаполненные полимеры, успешно применяемые в качестве резистивных материалов [1]. Классифицировали макроструктуры, различающиеся степенью проявления агломерирования высокодисперсного наполнителя. Известно, что действие эффекта агломерирования наполнителя значительно изменяет электрофизические и механические характеристики композиционного материала. Изображения на срезах макроструктуры при этом меняются весьма существенно [1].

В качестве входных данных использовали результаты эксперимента, полученные по специально разработанной методике [2], а для классификации – микрофотографии размером 220x220 точек в шкале серого цвета. На микрофотографиях методами мультифрактального анализа обрабатывалась область границ матрицы и наполнителя. Граничная область выделялась с помощью текстурного признака B_A -автокорреляции гистограммы совместного распределения яркостей [3]. Далее полученное изображение граничной области из формата в оттенках серого цвета переводилось в черно-белый формат. После чего это черно-белое изображение обрабатывалось методом мультифрактального анализа. Область границ представляет собой фрактал, для которого рассчитан спектр фрактальных размерностей Реньи по следующей формуле:

$$D_q = \frac{1}{q-1} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln \left[\sum_i p_i^q(\varepsilon) \right]}{\ln \varepsilon},$$

где $p_i(\varepsilon) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n_i(\varepsilon)}{N}$ – вероятность найти в i -й ячейке точку фрактала; N – количество точек, образующих фрактал; ε – размер ячейки; q – порядок размерности.

Полученные значения фрактальных размерностей использовались для классификации полимерных материалов.

В данной работе рассмотрены композиционные материалы на основе бутилкаучука, наполненного техническим углеродом марки ПМ-100 (П-234). Степень наполнения была одинаковой для всех образцов и составляла 80 весовых частей наполнителя на 100 весовых частей полимера. Технический углерод обрабатывался различным образом, что позволяло изменять степень агломерации наполнителя в полимере. Поверхность технического углерода прокаливалась (материал 1, табл. 1); обрабатывалась полициклическими ароматическими углеводородами (материал 2, табл. 1) и ацетонитрилом (материал 3, табл. 1). Материал с немодифицированным (промышленным) техническим углеродом обозначен цифрой 4 в таблице 1. Применялись растворители: ацетон (материал 5, табл. 1) и полиэтиленгликольадипинат (материал 6, табл. 1). Значения удельного объемного электрического сопротивления материалов приведены в таблице 1.

Среди известных методов классификации выбрали методы многомерного анализа, так как

Таблица 1
 Значения удельного объемного электрического сопротивления материалов

Материал	ρ_V , Ом·м
1	6,3
2	0,85
3	4,75
4	5,62
5	10,1
6	22,5

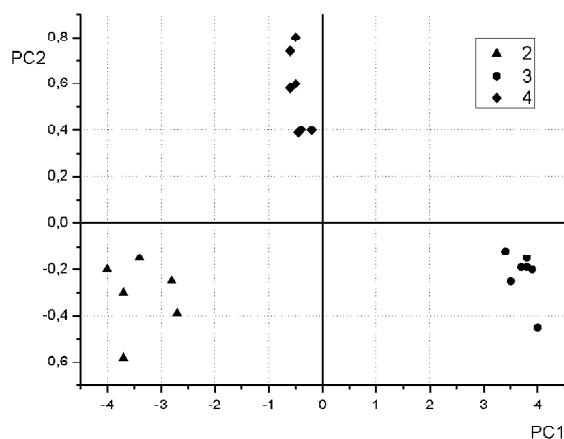


Рис. 1. График счетов модели ПЛС1-регрессия для материалов 2, 3 и 4 (табл. 1)

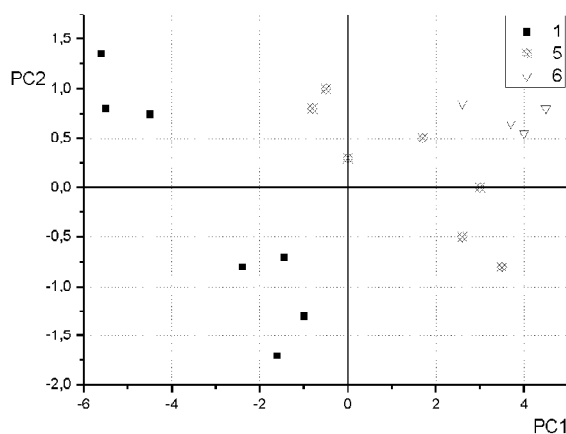


Рис. 2. График счетов модели ПЛС1-регрессия для материалов 1, 5 и 6 (табл. 1)

они позволяют выполнить классификацию по большому количеству переменных [4]. Проанализировано несколько методов, в том числе МЛР (множественная линейная регрессия), РГК (регрессия на главные компоненты), методы проекции на латентные структуры (ПЛС1 и ПЛС2) [4]. Был выбран метод ПЛС1-регрессия. Такой выбор объясняется следующим:

- МЛР плохо подходит для спектроскопических данных, не работает при высокой коллинеарности в независимых переменных X . В методе МЛР решается совокупность n уравнений вида $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_px_p + e$ с p неизвестными. При количестве независимых переменных большем, чем количество образцов, уравнения не имеют решения. Следовательно, этот метод не пригоден для нашего случая.

- Метод РГК не учитывает, например, наложение спектров, структуру матрицы зависимых переменных Y , связь между наборами независимых переменных X и зависимых переменных Y .

- Методы ПЛС лишены этих недостатков и являются хорошим решением для большинства практических задач.

- ПЛС1 применяется в случае моделирования одной зависимой переменной Y для набора независимых переменных X .

- ПЛС2 применяется в случае моделирования сразу нескольких зависимых переменных.

На основании проведенного анализа и был выбран метод ПЛС1-регрессия. При его использовании в модели одновременно участвуют переменная X (в данном случае это значения фрактальных размерностей) и переменная Y (номер композиционного материала из таблицы 1). Происходит моделирование той структуры в переменных X , которая коррелирует с Y .

Программная реализация методов многомерного анализа имеется в ряде пакетов, например, MatLab, The Unscrambler, SPSS, SAS, и т.д. Однако схема классификации во многом зависит от формата входных данных. При решении поставленной в работе задачи на первом этапе прорабатывался вариант построения одной общей модели для всей совокупности данных фрактальных размерностей анализируемых структур. Оказалось, что такой подход не позволяет классифицировать часть объектов.

В результате проработки различных вариантов оказалось, что целесообразно строить несколько моделей: одну – для тех образцов, которые удовлетворительно классифицируются общей моделью, вторую – для образцов, которые общая модель различить не смогла. Таким образом, построено две модели классификации: первая – для материалов, стоящих в таблице 1 под номерами 2, 3 и 4, а вторая – для материалов с номерами 1, 5 и 6. На рисунке 1 представлен график счетов для первой модели ПЛС1-регрессия (материалы 2, 3 и 4). Модель дает коэффициент корреляции 0,97. В таблице 2 представлен результат подстановки тестового набора в эту модель. Здесь n – номер полимерного композита, к которому модель относит микрофотографии из тестовой выборки. Он рассчитывается самой моделью. Полученные данные показывают, что модель удовлетворительно определяет, к какому материалу относится неоднородная структура на микрофотографии.

Вторая модель классифицирует те неоднородные структуры, которые не классифицировались общей моделью. График счетов для этой модели изображен на рисунке 2. Полученная модель дает коэффициент корреляции 0,96. В таблице 2 представлены результаты подстановки тестовой выборки.

Таблица 2
 Результаты подстановки тестовой выборки
 в модель ПЛС1-регрессия для ряда композитов

Материал	n	Δ
1	0,796	0,204
2	1,92	0,08
3	2,985	0,015
4	4,054	0,054
5	4,613	0,387
6	6,147	0,147

Таким образом, разработанная последовательность действий позволяет разделять на группы выбранные объекты исследования, несмотря на различие анализируемых материалов только по модификации поверхности наполнителя. Классификация материалов по макро-

структуре дает возможность решения ряда практических задач, например, сравнительной оценки нового материала с уже созданными композициями по комплексу электрофизических и прочностных характеристик.

Методы многомерного анализа позволяют классифицировать высоконаполненные полимерные материалы по их микрофотографиям. Разработан и реализован алгоритм классификации, обладающий рядом преимуществ:

- высокой скоростью классификации;
- гибкими настройками модели, позволяющими адаптировать или перестроить ее под конкретную прикладную задачу;
- возможностью применения данного метода на производстве при условии обеспечения удовлетворительного качества микрофотографий.

Литература

1. Гуль В.Е. Электропроводящие полимерные композиции / В.Е. Гуль, Л.З. Шенфильд. – М., 1984.
2. Бортников А.Ю. Текстурно-фрактальный анализ микроскопических срезов образцов композиционных материалов, наполненных техническим углеродом / А.Ю. Бортников, Н.Н. Минакова // Известия Томского политехнического университета. – 2006. – Т. 306. – №6.
3. Прэтт У. Цифровая обработка изображений : пер. с англ. – М., 1982. – Кн. 2.
4. Эсбенсен К. Анализ многомерных данных : сокр. пер. с англ. / под ред. О. Родионовой. – М., 2005. [К.Н. Esbensen. Multivariate Data Analysis – In Practice 4-th Ed., САМО, 2000].