

**И. А. Гарькина, А. М. Данилов, Е. В. Королев** (Пенза, ПГУАС). **Метод главных компонент в управлении качеством материалов для защиты от ионизирующего излучения.**

В последнее время при решении самых разнообразных задач получила широкое распространение хемометрика. Хемометрический подход основан на применении проекционных математических методов, позволяющих выделять в больших массивах данных латентные переменные и анализировать связи в изучаемой системе. К сожалению, несмотря на простоту и эффективность такого (часто и визуального) подхода к анализу экспериментальных данных, он практически не используется в строительном материаловедении.

С использованием метода главных компонент PCA (Principal Component Analysis) в работе, представленной данным сообщением, производилось ранжирование критериев качества  $q_i$ ,  $i = 1, \dots, p$ , по полученным их значениям для  $n$  экспериментальных образцов.

Первая главная компонента определялась как направление наибольшего изменения (разброса вдоль некоторой центральной оси — новой переменной) данных  $\mathbf{q} = \|q_{ij}\|$ ,  $i = 1, \dots, p$ ,  $j = 1, \dots, n$ , в декартовой системе координат  $Oq_1q_2 \dots q_p$  (приблизительно — чисто геометрически; уточнение — на основе наилучшей линейной аппроксимации всех исходных точек  $q_{ij}$  методом наименьших квадратов). Вторая главная компонента принималась (*по определению!*) ортогональной направлению первой (вдоль нее происходит следующее по величине изменение значений  $q_{ij}$ ), а третья компонента — перпендикулярной как первой, так и второй (лежит в направлении, в котором происходит третье по величине изменение данных). Аналогично определялись последующие главные направления. Полученная система главных компонент дает совокупность ортогональных осей, каждая из которых лежит в направлении максимального изменения данных *в порядке убывания* этих величин. В силу ортогональности главных компонент в полученном новом наборе переменные — *линейные комбинации исходных переменных* уже не коррелируют друг с другом. Переход от исходной декартовой системы координат к новому набору ортогональных осей позволяет избавиться от зависимости между критериями. Верхний предел числа главных компонент не превышает  $\max\{n - 1, p\}$ . Эффективная размерность пространства главных компонент определяется рангом матрицы  $\mathbf{q} = \|q_{ij}\|$ . Последняя главная компонента лежит в направлении, в котором разница между образцами будет минимальной (фактически различение образцов здесь невозможно, т. к. все эти отличия есть лишь случайный шум). Главные компоненты с большими номерами рассматривались как направления, в которых основная составляющая является шумом. Так, метод PCA позволил осуществить декомпозицию исходной матрицы данных на структурную часть (несколько главных первых компонент, лежащих в направлениях максимальных изменений) и на шум (направления, в которых разница между положением точек мала, и ей можно пренебречь).

Каждое из свойств (критериев качества) является интегральной характеристикой материала, зависящей от свойств компонентов, состава, условий приготовления, твердения и т. д. При этом оценка качества композита производится по совокупности как зависимых, так и противоречивых критериев (химическая стойкость, морозо-, термостойкость, сопротивление удару и истиранию, радиационный разогрев, адгезионные свойства, защитные свойства по отношению к стальной арматуре и др.). Методом PCA выделялась совокупность линейных комбинаций исходных критериев (практически независимых), что в последующем с использованием методов планирования эксперимента, многокритериальной оптимизации позволило разработать радиационно-защитные и коррозионно-стойкие материалы, не имеющие мировых аналогов.

Работа выполнена по заказу Минобрнауки РФ, № гос. регистрации 01200850940.