

УДК 004.942:519.237.8:676.26

КЛАСТЕРНЫЙ АНАЛИЗ СВОЙСТВ МЕЛОВАННОЙ БУМАГИ

Пен Р.З., Чендылова Л.В., Шапиро И.Л.

ФГБОУ ВПО «Сибирский государственный технологический университет»,
Красноярск, e-mail: sibgtu@sibgtu.ru

Изучена возможность объединения (кластеризации) одиннадцати свойств $Y_1 \dots Y_{11}$ меловальной суспензии (МС) и мелованной бумаги (МБ). Варьированием долей пигментов (мела, талька, каолина) и связующих (Na-карбоксиметилцеллюлозы, бутадиенстирола, поливинилацетата) в составе МС получены 49 образцов МС и МБ. Изученные свойства: Y_1 – эффективная вязкость МС; Y_2 – индекс течения (степень аномальности течения) МС; Y_3 – энергия активации течения МС; Y_4 – условная вязкость МС; Y_5 – водоудерживающая способность МС; Y_6 – плотность МБ; Y_7 – масса наноса покрытия МБ; Y_8 – сопротивление МБ разрыву; Y_9 – воздухопроницаемость МБ; Y_{10} – смачиваемость покрытия; Y_{11} – жесткость МБ. Кластерный анализ выполнен методом Варда (Ward's method) с использованием нормализованных значений переменных (свойств) и квадрата евклидова расстояния (Squared Euclidean distance) в качестве метрики. Установлена возможность группировки свойств по величине «геометрических расстояний» между ними в три кластера А, В и С. К кластеру А отнесены свойства Y_1, Y_3, Y_4, Y_{11} ; к кластеру В – свойства Y_2, Y_9, Y_{10} ; к кластеру С – свойства Y_5, Y_6, Y_7, Y_8 . Интерпретация результатов согласуется с априорной информацией. Возможность «свертки» 11-мерного пространства измеренных свойств объектов до 3-мерного пространства их «кластерных свойств» может быть использована при выборе параметров оптимизации и критериев оптимальности технологических процессов мелования бумаги.

Ключевые слова: мелование бумаги, свойства бумаги, меловальная суспензия, связующие для мелования, пигменты для мелования, кластерный анализ

CLUSTER ANALYSIS OF PROPERTIES OF COATED PAPER

Pen R.Z., Chendyllova L.V., Shapiro I.L.

Siberian State Technological University, Krasnoyarsk, e-mail: sibgtu@sibgtu.ru

Possibility of union (clustering) eleven properties $Y_1 \dots Y_{11}$ of coating suspension (CS) and coated paper (CP) was studied. By variation of the pigment's proportion (chalk, talc, kaolin) and of the binder's proportion (Na-carboxymethylcellulose, butadienstirol, polyvinylacetate) in the CS composition was received 49 samples of the CS and CP. Studied properties: Y_1 – effective viscosity of the CS; Y_2 – index of current (the level of anomalous current) CS; Y_3 – activation energy current CS; Y_4 – conditional viscosity CS; Y_5 – water-holding capacity CS; Y_6 – density CP; Y_7 – coating mass CP; Y_8 – resistance to breaking CP; Y_9 – air-penetration CP; Y_{10} – wettability of coating; Y_{11} – rigidity CP. Cluster analysis was carried out by Ward's method using normalized values of variables (properties) and the Square Euclidean distance as a metric. Possibility of the properties grouping to value of «geometric distances» between them in to three cluster A, B and C was determined. Properties Y_1, Y_3, Y_4, Y_{11} was attributed to cluster A; properties Y_2, Y_9, Y_{10} – to cluster B; properties Y_5, Y_6, Y_7, Y_8 – to cluster C. Interpretation of the results is consistent with a priori information. Possibility of the «curtailance» of 11-dimensional space of the measured properties of objects up to 3-dimensional space of their «clustering properties» can be used when you select optimization parameters and of optimality criteria of the technological processes of the coating over paper.

Keywords: coating over paper, properties of paper, coating suspension, binders for coating, pigments for coating, cluster analysis

При изучении реологических и бумагомодифицирующих свойств меловальных суспензий сложного многокомпонентного состава объекты исследования (суспензию, мелованную бумагу) характеризовали большим числом непосредственно измеряемых показателей [5, 10]. При этом возникает естественный вопрос: возможно ли объединение некоторых показателей в группы, характеризующие одно и то же физическое свойство объекта, но измеренное разными способами? Ответ может быть получен методами классификации, к числу которых относится кластерный анализ [1, 2, 7]. В случае успеха это позволило бы сократить число ограничений при формулировании и решении оптимизационных задач методами математического программирования.

Кроме того, такая постановка вопроса интересна и в познавательном плане.

Экспериментальная часть

Исследованиям подвергали меловальную суспензию со следующим соотношением компонентов (по массе): пигменты 84%, связующие 14,4%, глицерин 0,7%, Na-полифосфат 0,9%. В качестве пигментов использовали каолин, тальк, мел и их смеси. Массовую долю каждого из пигментов в их смеси варьировали в диапазоне значений от 0 до 1 согласно симплекс-центроидному плану эксперимента (7 уровней) [3, 8]. В качестве связующих использовали натриевую соль карбоксиметилцеллюлозы, бутадиенстирольный латекс, поливинилацетатный латекс и их смеси. Массовую долю (по сухому веществу) каждого из связующих в их смеси варьировали также от 0 до 1 с использованием симплекс-центроидного плана (7 уровней). Меловальные составы наносили на бумагу с помощью лабораторного шаберного устройства.

Свойства объектов (суспензии и мелованной бумаги) характеризовали следующими показателями:

- Y_1 – эффективная вязкость меловальной суспензии, Па·с;
- Y_2 – индекс течения (степень аномальности течения);
- Y_3 – эффективная энергия активации течения суспензии, кДж/моль;
- Y_4 – условная вязкость суспензии, с;
- Y_5 – водоудерживающая способность суспензии;
- Y_6 – плотность мелованной бумаги, г/см³;
- Y_7 – масса наноса покрытия, г/м²;
- Y_8 – изменение сопротивления бумаги разрыву;
- Y_9 – воздухопроницаемость мелованной бумаги, см³/мин;
- Y_{10} – смачиваемость покрытия, г/м²;

Y_{11} – жесткость бумаги, единицы градуировки прибора.

Индекс течения суспензии определяли по кривым течения [4]. Условную вязкость измеряли с помощью вискозиметра ВЗ-4 и характеризовали продолжительностью вытекания 100 см³ суспензии через отверстие диаметром 4 мм. Методы определения остальных показателей приведены в [6].

Объем выборки составил 49 наблюдений. Для статистической обработки (дескриптивный, кластерный и дискриминантный анализы) использован пакет прикладных программ Statistica v.10.

Статистические характеристики свойств $Y_1 \dots Y_{11}$ приведены в табл. 1.

Таблица 1

Статистические характеристики переменных $Y_1 \dots Y_{11}$ (объем выборки $N = 49$)

Переменные	Среднее	Минимум	Максимум	Дисперсия	Коэффициент вариации, %
Y_1	0,875	0,007	2,11	0,4012	72,4
Y_2	0,528	0,384	0,658	0,0037	11,6
Y_3	46,5	12,9	83,4	241,6	33,4
Y_4	12,8	4,50	65,0	106,3	80,6
Y_5	0,362	0,220	1,00	0,0128	31,3
Y_6	0,735	0,690	0,803	0,0007	3,70
Y_7	28,6	14,0	58,2	105,9	36,0
Y_8	1,23	1,08	1,45	0,0055	6,04
Y_9	22,9	2,90	62,0	289,4	74,1
Y_{10}	31,3	11,0	52,8	94,21	31,0
Y_{11}	60,4	49,3	75,5	35,19	9,83

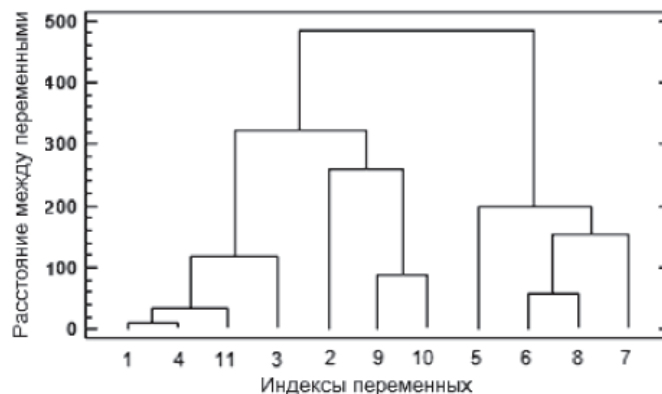
Кластерный анализ выполнен методом Варда (Ward's method) с использованием нормализованных значений переменных (свойств) и квадрата «евклидова расстояния» (Squared Euclidean distance) в качестве метрики.

Результаты исследования и их обсуждение

На рисунке приведена дендрограмма классификации всех 11 свойств $Y_1 \dots Y_{11}$. Чис-

ла на оси абсцисс соответствуют индексам свойств.

На основании визуальной оценки можно сформулировать гипотезу о возможности группировки свойств по величине «расстояний» между ними в три кластера A , B и C . В кластер A входят свойства Y_1, Y_3, Y_4, Y_{11} ; в кластер B – свойства Y_2, Y_9, Y_{10} ; в кластер C – свойства Y_5, Y_6, Y_7, Y_8 .



Дендрограмма классификации свойств Y ; числа на оси абсцисс соответствуют подстрочным индексам в обозначении свойств

Таблица 2

Статистические характеристики дискриминантных функций

Дискриминантные функции	Собственные числа, EV	Доли EV , %	Лямбда Уилкса, λ	χ^2	p – уровни значимости
1	40,22	95,92	0,0089	58,96	0,0000
2	1,71	4,08	0,369	12,47	0,0059

Кластерный анализ позволяет разделить выборку на группы (кластеры) по принципу «геометрической близости» свойств, однако не дает ни правил, ни статистических критериев оценки качества классификации. Для проверки гипотезы выполнен дискриминантный анализ [1, 7], в котором принадлежность свойств к одному из кластеров А, В или С служит категориальной (группирующей) переменной. Максимальное число дискриминантных функций равно двум (на единицу меньше числа кластеров). Их статистические характеристики приведены в табл. 2.

Основной «вес» в дискриминации приходится на первую дискриминантную функцию, доля её собственного числа EV (Eigenvalue) в сумме собственных чисел обеих функций составляет почти 96%. Близкая к нулю величина критерия λ , большая величина критерия χ^2 и низкий уровень значимости p (меньше 0,05) указывают на высокую достоверность результатов классификации свойств. Это же подтверждается 100%-ным совпадением результатов дискриминантного и кластерного анализов (табл. 3).

Объединение в кластере А показателей Y_1 , Y_3 и Y_4 естественно – все три свойства характеризуют вязкость меловальной суспензии. При шаберном способе нанесения покрытия уменьшение вязкости (при про-

чих одинаковых условиях) сопровождается увеличением массы наноса, что, в свою очередь, приводит к снижению жесткости бумаги Y_{11} [9, 11]. Между всеми четырьмя показателями существуют обусловленные этим статистически значимые положительные корреляции, поэтому свойство Y_{11} также оказалось отнесенным к кластеру А.

Принадлежность показателей воздухопроницаемости Y_9 и смачиваемости Y_{10} бумаги к одному кластеру В объясняется их положительными корреляционными связями с массовыми долями мела в составе пигмента и Na-карбоксиметилцеллюлозы в составе связующего. Эти особенности названных компонентов меловальных суспензий известны и используются для управления промышленными процессами мелования [9, 11]. Отнесение характеристики аномальности течения суспензии Y_2 к кластеру В также обусловлено её связью с особенностями реологических свойств растворов КМЦ [10].

Между переменными, образовавшими кластер С, существуют положительные корреляционные связи. Не останавливаясь на теоретических предпосылках этого явления (они обсуждались в предыдущем сообщении [6]), отметим лишь, что результаты наблюдений согласуются с имеющейся априорной информацией [5, 9, 10, 11].

Таблица 3

Результаты классификации свойств

Объекты, Y_u	Отнесение свойств		
	кластерный анализ	дискриминантный анализ	
		кластеры	вероятность отнесения
Y_1	А	А	1,000
Y_2	В	В	1,000
Y_3	А	А	0,998
Y_4	А	А	0,995
Y_5	С	С	0,999
Y_6	С	С	1,000
Y_7	С	С	0,997
Y_8	С	С	1,000
Y_9	В	В	0,993
Y_{10}	В	В	0,996
Y_{11}	А	А	0,987

Заклучение

Классификационный анализ свойств 49 объектов наблюдения (образцов меловальной суспензии и мелованной бумаги) позволил произвести свертку 11-мерного пространства измеренных свойств объектов до 3-мерного пространства «кластерных свойств» этих объектов. Этот результат может быть полезен для обсуждения проблем квалиметрии при выборе параметров оптимизации и критериев оптимальности технологических процессов мелования бумаги.

Список литературы

1. Дубров А.М., Мхитарян В.С., Трошин Л.И. Многомерные статистические методы. – М.: Финансы и статистика, 2003. – 352 с.
2. Дюк В. Обработка данных на ПК в примерах. – СПб: Питер, 1997. – 240 с.
3. Пен Р.З. Планирование эксперимента в Statgraphics. – Красноярск: Кларетанум, 2003. – 246 с.
4. Пен Р.З., Чендылова Л.В., Шапиро И.Л. Реологические свойства меловальных суспензий. 1. Аппроксимация кривых течения // Химия растительного сырья. – 2004. – № 1. – С. 11–14.
5. Пен Р., Шапиро И., Чендылова Л. Мелование бумаги. – Saarbrücken: LAP Lambert Academic Publishing, 2012. – 210 с.
6. Пен Р.З., Чендылова Л.В., Шапиро И.Л. Математическое моделирование свойств многокомпонентных меловальных суспензий и мелованной бумаги // Фундаментальные исследования. – 2015.
7. Прикладная статистика: классификация и снижение размерности / С.А. Айвазян, В.М. Бухштабер, И.С. Енюков, Л.Д. Мешалкин. – М.: Финансы и статистика, 1989. – 607 с.
8. Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей / В.З. Бродский, Л.И. Бродский, Т.И. Голикова и др. – М.: Metallurgy, 1982. – 752 с.
9. Фляте Д.М. Свойства бумаги. – СПб.: Лань, 2012. – 384 с.
10. Чендылова Л.В. Реологические и бумагомодифицирующие свойства многокомпонентных меловальных суспензий: дис. ... канд. техн. наук. – Красноярск, 2007. – 148 с.
11. Шапиро И.Л. Обработка и переработка бумаги и картона. – Красноярск: Красноярский писатель, 2012. – 204 с.

References

1. Dubrov A.M., Mkhitarian V.S., Troshin L.I. *Mnogomernye statisticheskie metody* [Multidimensional statistical methods]. Moscow, Finances and Statistics, 2003. 352 p.
2. Dyuk V. *Obrabotka dannykh na PK v primerakh* [Data processing computer-simulated in example]. St. Petersburg, Piter, 1997. 240 p.
3. Pen R.Z. *Planirovanie eksperimenta v Statgraphics* [Design of experiment in Statgraphics]. Krasnoyarsk, Klaretianum, 2003. 246 p.
4. Pen R.Z., Chendyylova L.V., Shapiro I.L. *Khimiya rastitel'nogo syr'ya*, 2004, no. 1, pp. 11–14.
5. Pen R., Shapiro I., Chendyylova L. *Melovanie bumagi* [Coating over paper]. Saarbrücken, LAP Lambert Academic Publishing, 2012. 210 p.
6. Pen R.Z., Chendyylova L.V., Shapiro I.L. *Fundamental'nye issledovaniya*, 2015.
7. Ayvazyan S.A., Bukhshtaber V.M., Enyukov I.S., Meshalkin L.D. *Prikladnaya statistika: klassifikatsiya i snizhenie razmernosti* [Applied statistics: classification and reduction of dimension]. Moscow, Finances and statistics, 1989. 607 p.
8. Brodskiy V.Z., Brodskiy L.I., Golikova T.I. *Tablitsy planov eksperimenta dlya faktornikh i polinomial'nykh modelyey* [Tables of designs experiment for factorial and polynomial model]. Moscow, Metallurgy, 1982. 752 p.
9. Flyate D.M. *Svoystva bumagi* [Properties of Paper]. St. Petersburg, Lan' 2012. 384 p.
10. Chendyylova L.V. *Reologicheskie i bumagomodifitsiruyushchie svoystva mnogokomponentnykh meloval'nykh suspenziy: dis. ... kand. tekhn. nauk* [Rheological and modifying properties of multicomponent coating suspension: dissertation]. Krasnoyarsk, 2007. 148 p.
11. Shapiro I.L. *Obrabotka i pererabotka bumagi i kartona* [Treatment and working of paper and board]. Krasnoyarsk, Krasnoyarsk writer, 2012. 204 p.

Рецензенты:

Алашкевич Ю.Д., д.т.н., профессор, заведующий кафедрой «Машины и аппараты промышленных технологий», ФГБОУ ВО «Сибирский государственный технологический университет» Министерства образования и науки РФ, г. Красноярск;

Доррер Г.А., д.т.н., профессор, заведующий кафедрой «Системотехника», ФГБОУ ВО «Сибирский государственный технологический университет» Министерства образования и науки РФ, г. Красноярск.