



Università degli Studi
di Palermo

UNA PROCEDURA AUTOMATIZZATA PER LA DETERMINAZIONE DELLE CURVE MAESTRE DI BITUMI PER USO STRADALE

G. Parla*, C. Celauro, A. Bevilacqua

* Dipartimento di Ingegneria Civile, Ambientale, Aerospaziale, dei Materiali (DICAM)
Università di Palermo

Viale delle Scienze, 90128 Palermo, Italy

e-mails: giuseppe.parla@unipa.it; clara.celauro@unipa.it; antonio.bevilacqua@unipa.it

(Ricevuto 20 Settembre 2014, Accettato 29 Settembre 2014)

Keywords: road paving bitumen, linear viscoelasticity, master curve, shift factor

Parole chiave: bitumi per uso stradale, viscoelasticità lineare; curve maestre; shift factor

Abstract. *Rheological properties of road paving bitumen are usually investigated via Dynamic Mechanical Analysis (DMA), using a Dynamic Shear Rheometer (DSR) within the linear viscoelastic limits of the behaviour of these materials. In these conditions, the DSR is able to measure the Shear complex modulus ($|G^*|$) as well as the phase angle (δ) over a range of testing frequencies and temperature. Master curve of the complex modulus is obtained by horizontally shifting the isotherms of G^* , as evaluated for operating conditions that are compatible with the equipment working conditions. This paper presents an automated procedure for optimizing the shift factors for master curve construction and a comparison of this procedure is carried out with the results obtained by applying the WLF empirical equation associated with time-temperature superposition as well as with the mathematical procedure developed at the French Laboratoire Central des Ponts et Chaussées- LCPC.*

Sommario. *Le proprietà reologiche dei bitumi sono solitamente determinabili per mezzo di prove che simulano gli effetti di imposte sollecitazioni dinamiche (DMA) utilizzando un reometro oscillatorio a taglio dinamico (DSR), generalmente condotto all'interno della regione viscoelastica lineare (LVE). Le grandezze misurate con il DSR sono in particolare il modulo complesso ($|G^*|$) e l'angolo di fase (δ). La determinazione di curve maestre del comportamento meccanico di questi materiali è, dunque, reso possibile applicando soli shift orizzontali ad isoterme del modulo G^* , valutato in un range di temperature compatibile con le modalità operative delle attrezzature di laboratorio. Il presente articolo illustra una procedura automatizzata di ottimizzazione degli shift factor per la costruzione delle Curve Maestre nei bitumi puri o modificati ed mette a confronto i risultati di tale ottimizzazione con quelli ottenuti applicando la relazione empirica per il calcolo degli shift factor proposta da*

Williams-Landel-Ferry (WLF) e con una procedura matematica messa a punto dal Laboratoire Central des Ponts et Chaussées francese – LCPC.

1 INTRODUZIONE

Nell'analisi dei fluidi viscosi, come i bitumi puri o modificati, il materiale che viene caricato, lentamente o velocemente, scorre e conseguentemente non ammette un stato deformato definito (come nei corpi solidi elastici) ma al contrario è soggetto ad un moto deformativo per descrivere il quale non è possibile prescindere dall'identificazione del ruolo del tempo.

Infatti, è noto che, sia in regime di sollecitazione statico quanto in regime di sollecitazione dinamico, sussiste l'evidenza sperimentale che gli effetti del tempo di carico e quelli della temperatura siano sovrapponibili.

Sulla base di tale evidenza il principio di sovrapposizione tempo-temperatura (TTS) prevede che fra le variazioni di temperatura e quelle del tempo (o della frequenza) esiste una relazione e che pertanto gli effetti del tempo e della temperatura risultino sovrapponibili ed interscambiabili. Il principio TTS si concretizza nello sviluppo delle Curve Maestre (CM), curve ottenute dalla traslazione dei dati misurati per diverse temperature di prova che stabiliscono l'andamento della funzione viscoelastica in esame in un nuovo dominio, più esteso rispetto a quello delle singole curve iniziali e nel quale effetti del tempo e della temperatura coesistono.

Le curve maestre (CM) possono così essere utilizzate per rappresentare il comportamento del materiale in un ampio intervallo di tempi o frequenze di carico dove l'andamento sperimentale determinato dall'unica curva racchiude entrambi gli effetti del tempo e della temperatura. L'entità della traslazione – orizzontale - delle singole curve definisce i fattori di traslazione (Shift Factor)

L'identificazione di taluni fattori è piuttosto complessa e spesso in alcune metodologie (Empirical Shift) è arbitraria, ovvero affidata all'analista. Nella presente studio si illustra una metodologia completamente automatizzata che permette di ottimizzare i fattori di Shift Empirici per la costruzione delle Curve Maestre nei bitumi puri o modificati. I risultati della procedura proposta vengono altresì confrontati con i risultati ottenuti applicando il calcolo degli shift secondo la relazione empirica proposta da Williams-Landel-Ferry (WLF) e con la procedura matematica messa a punto presso il Laboratoire Central des Ponts et Chaussées francese [Chailleux *et al.* [1]]

2 METODOLOGIE STUDIATE PER LA COSTRUZIONE DELLE CURVE MAESTRE .

Il principio di sovrapposizione tempi-temperature permette di affermare che incrementi del tempo di carico (o riduzioni della frequenza di oscillazione) producono sulla risposta del materiale viscoelastico effetti del tutto simili, e pertanto sovrapponibili, a quelli di un incremento della temperatura di prova. Ovviamente vale il viceversa e riduzioni del tempo di carico (o incrementi della frequenza di oscillazione) producono effetti equiparabili a quelli di una riduzione di temperatura. Ne consegue che una funzione viscoelastica misurata per un certo tempo di carico t_1 e per una certa temperatura T_1 sia identicamente ottenibile per una diversa coppia di valori di tempo t_2 e temperatura T_2 collegati ai precedenti da precise relazioni matematiche. Medesima situazione vale a priori per tutte le funzioni viscoelastiche,

definite nel dominio del tempo o della temperatura. Sulla base di tale evidenza il principio di sovrapposizione tempo-temperatura (TTS) prevede che fra le variazioni di temperatura e quelle del tempo (o della frequenza) esista una relazione ove gli effetti del tempo e della temperatura risultino sovrapponibili ed interscambiabili. I materiali per i quali può ritenersi valido il principio TTS sono definiti materiali termoreologicamente semplici. In particolare, in tale caso, si assume che ad una variazione di temperatura corrisponda una variazione, pari ad uno stesso fattore, di tutti i tempi di rilassamento λ_i ovvero che tutti i tempi di rilassamento di uno stesso sistema abbiano la medesima dipendenza dalla temperatura.

Pertanto, se $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ sono i tempi di rilassamento del sistema alla temperatura di riferimento T_0 , allora alla temperatura T i tempi di rilassamento sono: $a_T \cdot \lambda_1, a_T \cdot \lambda_2, a_T \cdot \lambda_3$, dove a_T è funzione della temperatura e vale 1 per $T = T_0$. La relazione seguente (1) esprime il legame funzionale tra λ_i ed a_T per una data temperatura di riferimento.

$$\lambda_i(T) = a_T * \lambda_i(T_0) \quad (1)$$

Si considera inoltre che, anche le rigidezze $|G_i|$ di tutti i singoli elementi molla, coerentemente al modello di Burger, varino di un identico fattore determinato secondo l'equazione (2) dove ρ è la densità del materiale:

$$G_i(T) = G_i(T_0) * \frac{T * \rho}{T_0 * \rho_0} \quad (2)$$

La dipendenza dalla temperatura può allora essere esplicitata all'interno della formulazione del modulo di rilassamento del modello di Maxwell generalizzato ottenendo un'equazione che descrive l'andamento del modulo ridotto nel dominio del tempo ridotto, contenendo al suo interno entrambe le informazioni relative alla dipendenza dal tempo e dalla temperatura. Pertanto ne risulta che $G_i(t_r, T)$ così come le altre grandezze viscoelastiche, direttamente dipendenti sia dal tempo che della temperatura, possono essere espresse come funzioni di un'unica variabile, il tempo ridotto. La legge di variazione dei fattori di traslazione a_T con la temperatura viene costruita tramite l'analisi dei dati sperimentali e generalmente è descritta dall'equazione (3) di Willimas-Landel-Ferry :

$$\log(a_T) = \frac{-C_1 * (T + T_0)}{C_2 + T - T_0} \quad (3)$$

dove:

C_1 e C_2 sono due costanti di fitting che dipendono dal materiale, mentre T_0 è la temperatura di riferimento. Pertanto, estrapolati dalla relazione precedente i valori di a_T il principio TTS si concretizza nello sviluppo delle curve maestre, curve ottenute, dalla traslazione dei dati misurati per diverse temperature di prova che stabiliscono l'andamento della funzione viscoelastica in esame in un nuovo dominio, più esteso rispetto a quello delle singole curve iniziali, e nel quale, effetti del tempo e della temperatura coesistono.

Le curve maestre (CM) possono così essere utilizzate per rappresentare il comportamento del materiale in un ampio intervallo di tempi o di frequenze di carico dove l'andamento sperimentale determinato dall'unica curva racchiude entrambi gli effetti del tempo e della temperatura. L'entità della traslazione delle singole curve definisce i fattori di traslazione. Per alcuni materiali termo-reologicamente semplici la sovrapposizione delle curve avviene richiedendo solo traslazioni orizzontali. In questo caso i fattori di traslazione coincidono con i

soli horizontal shift factors a_T , definiti anche dalla relazione precedente. Nel caso di dati riconducibili ad analisi in regime oscillatorio sinusoidale si ottiene la traslazione dei dati secondo la determinazione delle frequenze ridotte secondo la relazione (4):

$$f_r(T_0) = a_T * f(T) \quad (4)$$

Pertanto i due parametri, o costanti, associati alla determinazione degli shift orizzontali chiamati, C_1 , e C_2 , sono estrapolabili attraverso la soluzione di un complesso problema di minimizzazione [2] di una funzione a 2 variabili C_1 , e C_2 secondo la seguente funzione di errore E_T :

$$E_T = \sum_i \left| \frac{a_{T(\text{misurato},i)} - a_{T(\text{calcolato},i)}}{a_{T(\text{calcolato},i)}} \right| \quad (5)$$

dove :

- $a_{T(\text{calcolato},i)}$ = al valore degli shift calcolati per mezzo della relazione di Williams-Landel-Ferry
- $a_{T(\text{misurato},i)}$ = al valore degli shift desunti per mezzo della costruzione manuale degli shift (Empirical Shift).

relativi ad una data temperatura di riferimento T_0 (o T_r) e calcolati relativamente per tutte le i -esime frequenze di analisi.

Pertanto il confronto sulla base del quale viene minimizzato l'errore è dipendente dalla precisione degli shift ottenuti manualmente $a_{T(\text{misurati})}$.

Alla luce di ciò nel prossimo paragrafo viene illustrata la procedura automatica per minimizzare l'errore che si commette nella determinazione manuale degli shift e nel contempo la stessa procedura determina automaticamente tutti gli Shift Empirici per la costruzione della curva maestra .

Un altro approccio utilizzato nel presente lavoro è quello LCPC [Chailleux *et al.* [1]], Questa metodologia sostanzialmente, consiste in una procedura di calcolo numerico per costruire le curve maestre partendo da misure dinamiche. Utilizzando le relazioni di Kramers-Kronig e considerando due frequenze vicine (f_i e f_j), hanno mostrato che:

$$\delta_{\text{medio}}^{(f_i, f_j)} * \frac{2}{\pi} = \frac{\log(G^*(T, f_j)) - \log(G^*(T, f_i))}{\log(f_j) - \log(f_i)} \quad (6)$$

dove:

$\delta_{\text{medio}}^{(f_i, f_j)}$ è la media di due angoli di fase calcolati per due frequenze vicine f_j ed f_i ed $G^*(T, f)$ rappresenta il modulo complesso alla generica temperatura di prova T e relativo alla frequenza f .

Pertanto scrivendo la precedente relazione per diverse temperature T_i per $i = 1, \dots, n$ a rif (riferimento), la relazione che permette di definire la Master Curves è data da:

$$\log(a_{(T,T_0)}) = \sum_{j=1}^{j=i} \frac{\log(G^*(T, f_j)) - \log(G^*(T, f_i))}{\delta_{\text{medio}}^{(T_j, T_{j+1})}(f)} \quad (7)$$

il calcolo di a_T con la precedente metodologia si basa sulla teoria della viscoelasticità lineare per mezzo delle sole misure di $G^*(T, f)$ e $\delta^*(j, T)$ senza che necessiti calcolare o desumere altri coefficienti.

Come anzi detto il prossimo paragrafo descrive la procedura che viene proposta in questo studio per la determinazione automatica degli shift empirici.

3 ALGORITMO PER LA DETERMINAZIONE AUTOMATIZZATA DEGLI SHIFT ORIZZONTALI PER LA COSTRUZIONE DELLE CURVE MAESTRE .

Nel precedente paragrafo si è accennato al problema di implementare una metodologia che possa definire numericamente in maniera automatica gli shift empirici per la costruzione delle curve maestre.

Innanzitutto è necessario premettere che le proprietà reologiche dei bitumi sono normalmente descritte in termini di Modulo complesso $|G^*|$, angolo di fase δ o f e dall'insieme delle costanti orizzontali di shift a_{T_i} per la costruzione delle curve maestre con specifico riferimento ad una temperatura di riferimento T_r .

Nel precedente paragrafo, si è inoltre detto che per alcuni materiali termo-reologicamente semplici la sovrapposizione delle curve avviene richiedendo solo traslazioni orizzontali generalmente indicate a_T ed esprimibili attraverso la relazione (8) esplicitata per mezzo della relazione (4)

$$a_T = \frac{f_r(T)}{f(T)} \quad (8)$$

dove a_T è il generico fattore di spostamento o traslazione, f è la frequenza della generica curva isoterma e f_r è la frequenza ridotta ad una temperatura di riferimento T_r . La dipendenza dalla temperatura può essere definita concettualmente nel modo di come cambia il processo deformativo del bitume con la temperatura ed il tempo di carico t . La costruzione delle curve maestre può essere fatta utilizzando una arbitraria temperatura di riferimento T_r a cui però tutte le isoterme vengono riferite e shiftate. Alla temperatura di riferimento, T_r , il valore di a_T è uguale a uno ($\log a_T$ è uguale a zero).

In generale, e come del resto anticipato al paragrafo precedente, esistono diverse funzioni che possono essere utilizzate per modellare le curve maestre e definire i fattori di shift. I fattori di shift ricavabili per mezzo delle equazioni (3) e (7) riguardano solo i movimenti delle isoterme in orizzontale e non tengono in considerazione lo spostamento verticale. Lo spostamento verticale, b_T , rappresenta le variazioni di densità per effetto della temperatura e coinvolge, pertanto, spostamenti lungo l'asse modulo complesso. Raramente nella costruzione delle curve maestre si considerano tali spostamenti.

La correlazione numerica tra gli shift empirici e quelli calcolati (3) è un fattore che influenza fortemente l'entità dello scarto quadratico medio nel processo di minimizzazione dell'errore calcolato con l'impiego della relazione (5), e dunque di conseguenza si riflette nel calcolo delle costanti C_1 e C_2 che sono direttamente correlate agli shift a_{T_i} dalla relazione (3).

Alla luce di talune considerazioni si è strutturata una metodologia, appresso descritta, che determina automaticamente e con elevata precisione gli shift manuali riducendo di conseguenza l'errore nella determinazione degli shift calcolati con la relazione (3).

L' algoritmo implementato shifta le prima curva, ovvero quella alla temperatura minima T_{\min} fino ad un determinato valore di soglia che viene stabilito automaticamente dall'algoritmo. Si è riscontrato sperimentalmente che, per tutti i campioni esaminati, tale valore del primo shift si pone nel prolungamento della isoterma mediana tra quelle relative alle due temperature immediatamente superiore ed inferiore a quella di riferimento T_r . La seguente figura 1 mostra il primo shift a_T nei vari passi iterativi.

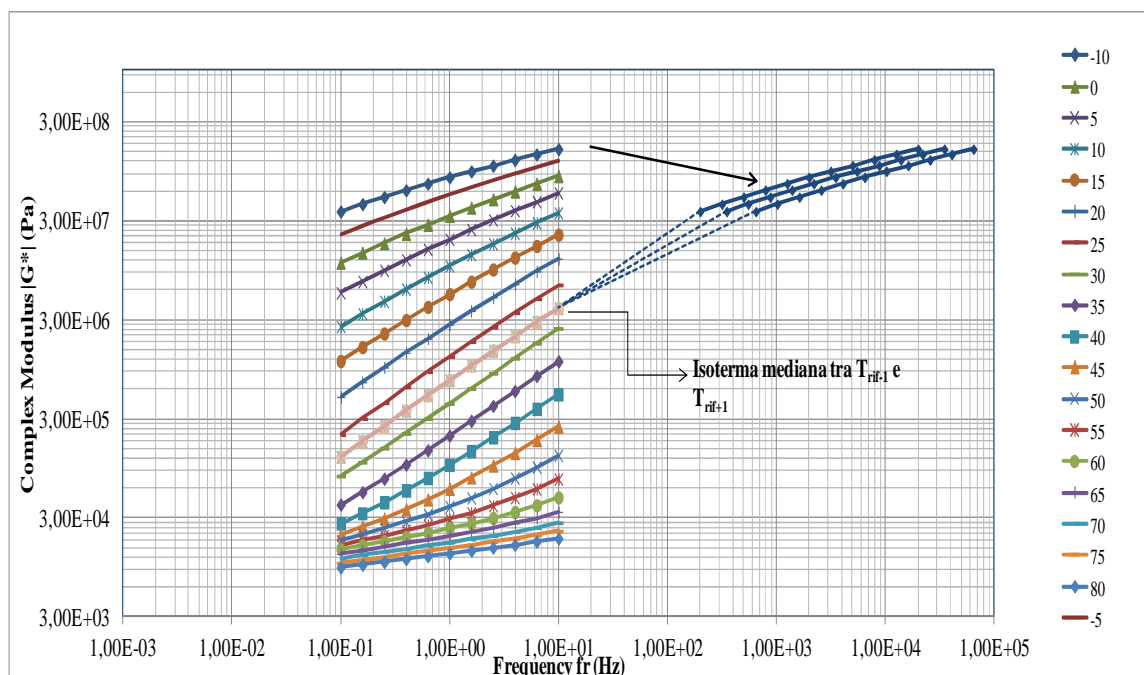


Figura 1 Individuazione automatica del primo shift relativamente alla isoterma di temperatura minima

Al successivo passo computazionale la procedura implementata, determina le minime distanze orizzontali a_{T_i} tra tutte le isoterme, ma processando due isoterme susseguenti alla volta.

Infatti l'algoritmo inizia ad esaminare le prime due isoterme riferite alle temperature T_i e T_{i+1} , che nell'esempio in esame sono per l'appunto, le prime due temperature $T_1 = -10$ °C e $T_2 = -5$ °C. In particolare, l'algoritmo, in una prima fase, attribuisce due shift arbitrari, $a_{(T=-10)}$ e $a_{(T=-5)}$ sposta le due isoterme delle quantità a_{T_1} ed a_{T_2} come viene mostrato dalla Figura 2.

Successivamente un'apposita funzione interpola ogni singola isoterma con delle curve spline di tipo lineare. E' infatti noto che, con il termine spline, si indica in lingua inglese un sottile righello usato nella progettazione degli scafi dagli ingegneri navali, per raccordare su un piano un insieme di punti (x_i, y_i) , $i = 0, \dots, n$.

Imponendo mediante opportune guide che il righello "passi" per i punti assegnati, si ottiene una curva che li interpola tutti i punti. La spline può essere concettualmente rappresentata e generalizzata nel seguente modo:

Sia $\Delta = [a, b]$ una decomposizione dell'intervallo $[a, b]$ dominio dell'asse delle x della generica curva che si vuole interpolare. Questi u_i saranno

poi chiamati nodi. Si dice funzione Spline di grado $g \geq 1$ e relativa alla decomposizione "delta" una funzione $S(x)$ soddisfacente le seguenti proprietà

- $S(x)$ ristretta a ciascun intervallo $[u_i, u_{i+1}]$, $i = 0, \dots, n$, è un polinomio di grado più pari a g ;
- la derivata j -esima $S^j(x)$ di $r(x)$ è una funzione continua su $[a, b]$ per $j = 0, 1, \dots, g-1$

Le funzioni spline utilizzate più comunemente sono quelle che si ottengono per $g = 1$ (spline lineari), e per $g = 3$ (spline cubiche). L'algoritmo implementato considera delle Spline di tipo lineare $g=1$ per ogni singola isoterma.

Le ragioni di ciò risiedono nel fatto che le isoterme nel piano [Frequency, Complex Modulus] hanno generalmente andamento di tipo lineare. Alla luce di ciò, l'algoritmo per ogni curva isoterma dispone da un lato un numero di punti sicuramente molto più elevato dei soli punti relativi alle frequenze di calcolo oltre che poter fruire di un'apposita funzione matematica $S(x)$ che ne descrive puntualmente la sua curvatura e la propria estensione nel dominio delle frequenze.

Per ognuno di tali $S(x)$ punti l'algoritmo inizia a calcolare le relative mutue distanze tra le due curve prese in considerazione, come viene mostrato attraverso la schematica rappresentazione della Figura 2.

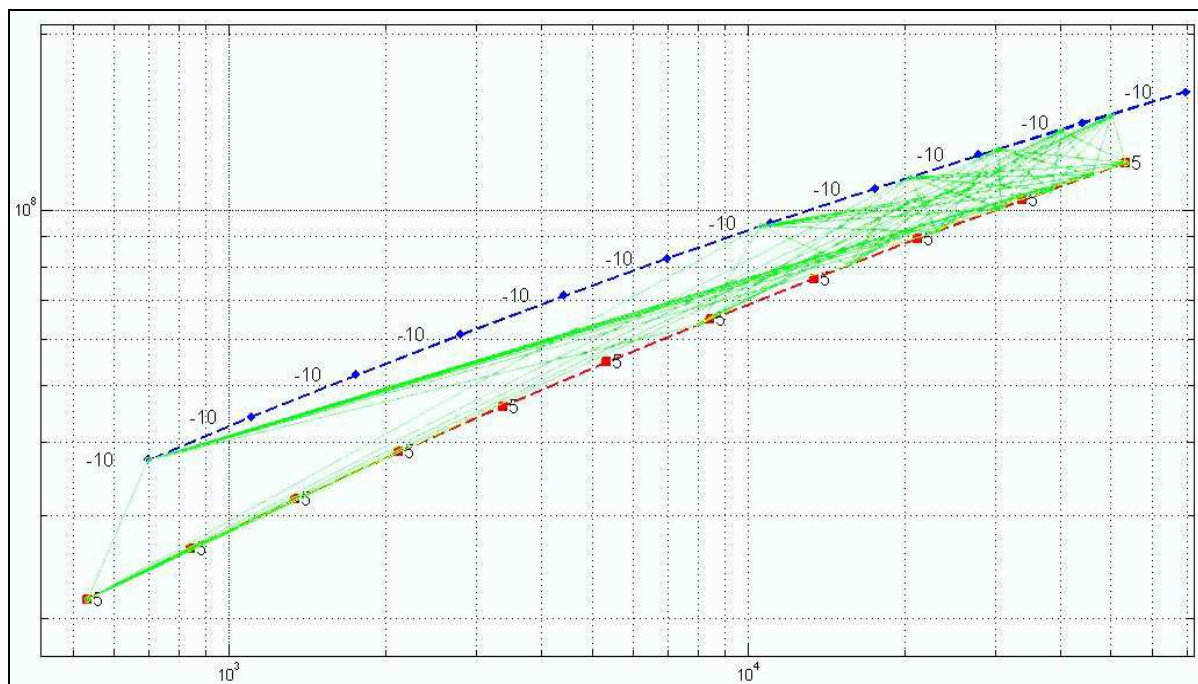


Figura 2 Determinazione delle mutue distanze tra due generiche isoterme.

Alla fine di questo processo l'algoritmo determina la minima distanza, ovvero la più corta distanza orizzontale relativamente agli n punti delle due isoterme (Spline) relative alle due temperature $T_1 = -10$ °C e $T_2 = -5$ °C di analisi. La Figura 3 indica tale distanza con il colore nero:

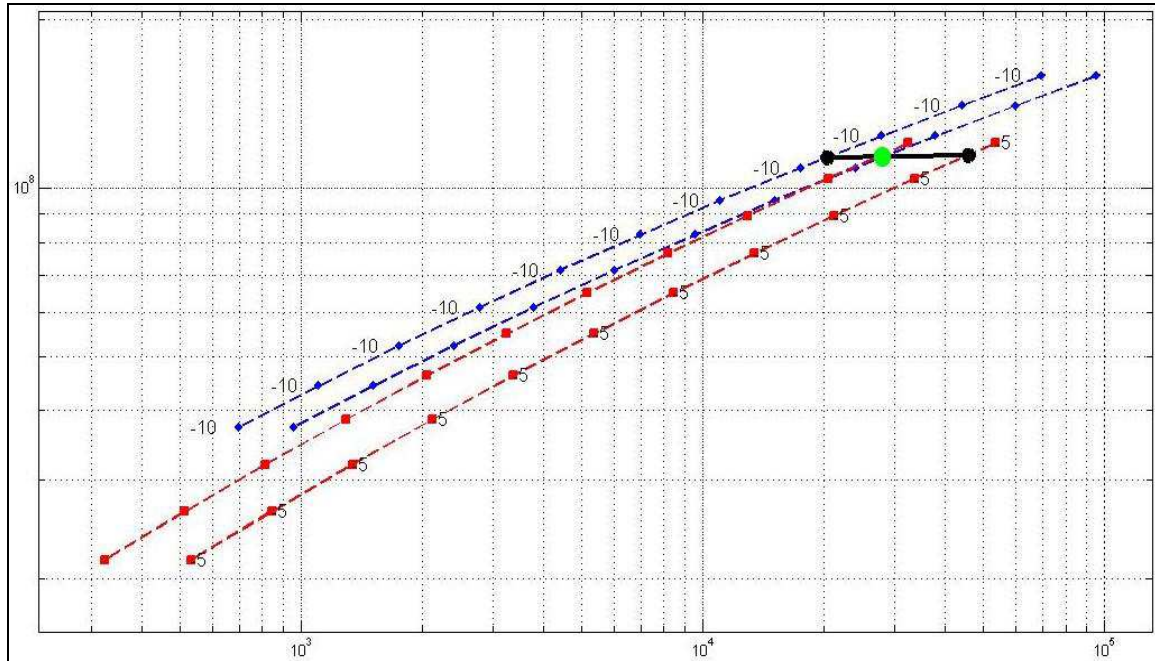


Figura 3 Individuazione della minima distanza e relativa minimizzazione

Fatto ciò, la procedura, per mezzo di una funzione di minimizzazione vincolata azzera la distanza tra le due curve ricavando i nuovi **shift Empirici di calcolo** a_{ET1}^* ed a_{ET2}^* .

Infatti è noto che nei problemi di minimizzazione vincolata (o meno), di una generica funzione $f(x)$ (9) si deve determinare il minimo tale che si abbia:

$$\min_x f(x) \quad (9)$$

Di fatto si deve di trovare un vettore x che rappresenta un minimo locale di una funzione scalare $f(x)$. Nelle funzioni trattate il vettore x è il dominio ove ricade la distanza uguale a zero tra le due curve esaminate, ovvero il dominio per l'appunto individuato dal coefficiente di shift factor a_{Ti} .

L'algoritmo implementato basa la minimizzazione della $f(x)$, che altro non è la distanza orizzontale (shift factor) a_{Ti} indicata nella precedente figura con il colore nero, attraverso l'approccio delle regioni fiducia [2]. Per comprendere l'approccio usato dai trust-region nell'ottimizzazione di funzioni non lineari bisogna considerare il problema di minimizzazione vincolata, dove la funzione richiede argomenti di tipo vettore x (numeri reali) e restituisce scalari .

$$\min_s [q(s), \text{se } s \in N] \quad (10)$$

Supponiamo di essere in un punto x in uno spazio e si vuole minimizzare, cioè passare ad un punto della funzione che assume un valore inferiore.

L'idea di base è quella di approssimare f con una funzione più semplice q , che riflette ragionevolmente il comportamento della funzione f in un intorno N vicino al punto x . Questo intorno è per l'appunto definito come **regione fiducia N**.

Ad un generico passo iterativo s viene calcola la $f(x)$ ed essa è desunta riducendo il valore scalare di output al minimo sull'intorno di fiducia N . Il punto corrente $x(i)$ viene aggiornato per far in modo che da un lato, il valore della funzione $f(x_i)$ debba trovarsi all'interno della

regione di fiducia N e dall'altro esso deve avere un valore più basso e pari, per l'appunto al valore minimo. Se ciò non dovesse accadere il punto corrente \mathbf{x}_i rimane invariato e si riduce N . In tal caso l'algoritmo, restringe la regione di fiducia ed al passo di calcolo successivo \mathbf{s}_{i+1} viene ripetuto nuovamente il calcolo di $f(\mathbf{x})$ nell'intorno di fiducia N più piccolo.

Gli interrogativi più complessi nella definizione di uno specifico approccio di trust-region per minimizzare una generica funzione $f(\mathbf{x})$ sono di come scegliere e calcolare l'approssimazione q (definita al corrente punto \mathbf{x}), come scegliere e modificare la regione di fiducia N e come esattamente risolvere il trust-region nei sottoproblemi.

Nel metodo trust region standard ([2]), l'approssimazione quadratica q è definita dai primi due termini dell'approssimazione della funzione di Taylor di f in \mathbf{x} (f calcolata in un punto generico del vettore \mathbf{x}) e la regione di fiducia N è generalmente sferica o di forma ellissoidale.

Matematicamente il sottoproblema trust-region viene tipicamente indicato con la seguente relazione:

$$\min_{\mathbf{s}} \left[\frac{1}{2} \mathbf{s}^T \mathbf{H} \mathbf{s} + \mathbf{s}^T \mathbf{g} \quad \text{tale che } \|\mathbf{D}_s\| \leq \Delta \right] \quad (11)$$

dove \mathbf{g} è il gradiente di f nel punto corrente \mathbf{x} . In assenza di alcuna specificazione, il gradiente viene calcolato automaticamente in modo numerico, \mathbf{H} è la matrice Hessiana (la matrice simmetrica di derivate parziali seconde), \mathbf{D} è una matrice diagonale scalata, Δ è uno

scalare positivo, e $\|\mathbf{D}_s\|$ è la norma di ordine secondo. Esistono diversi algoritmi per risolvere

l'equazione di cui sopra ([4 e 5]) che tipicamente comportano il calcolo di un eigensystem e di un processo Newton applicando l'equazione secolare:

$$\frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\|\mathbf{s}\|} = 0 \quad (12)$$

Tali algoritmi offrono una soluzione precisa per Equazione (11) tuttavia, in generale, essi richiedono per funzioni da minimizzare complesse un tempo di calcolo proporzionale alle diverse fattorizzazioni di \mathbf{H} . Nel nostro approccio vista la semplicità della funzione da minimizzare $f(\mathbf{x}) = \text{distanza orizzontale tra due generiche isoterme}$, la risposta in termini di rapidità di calcolo nella minimizzazione della distanza è stata molto soddisfacente raggiungendo di conseguenza una precisione molto elevata.

L'approccio matematico utilizzato e precedentemente descritto, minimizza la distanza $f(\mathbf{x})$ e ricava automaticamente quali nuovi valori di shift si debbano adottare per far in modo che la distanza tra le due generiche e susseguenti curve isoterme sia nulla, ovvero che esse si sovrappongano intersecandosi.

Dunque una volta determinati i nuovi valori degli shift l'algoritmo analizza le successive curve imponendo il **vincolo matematico** che la curva alla temperatura T^{iesima} debba avere uno shift \mathbf{a}_{T_i} pari a quello della curva precedentemente esaminata $\mathbf{a}_{T_{i-1}}$, che nell'esempio in esame è l'isoterma relativa alla $T_{i-2} = -5$ °C. In tal maniera l'algoritmo operando per tutte le isoterme perviene ad un'unica Master Curves mostrata di seguito:

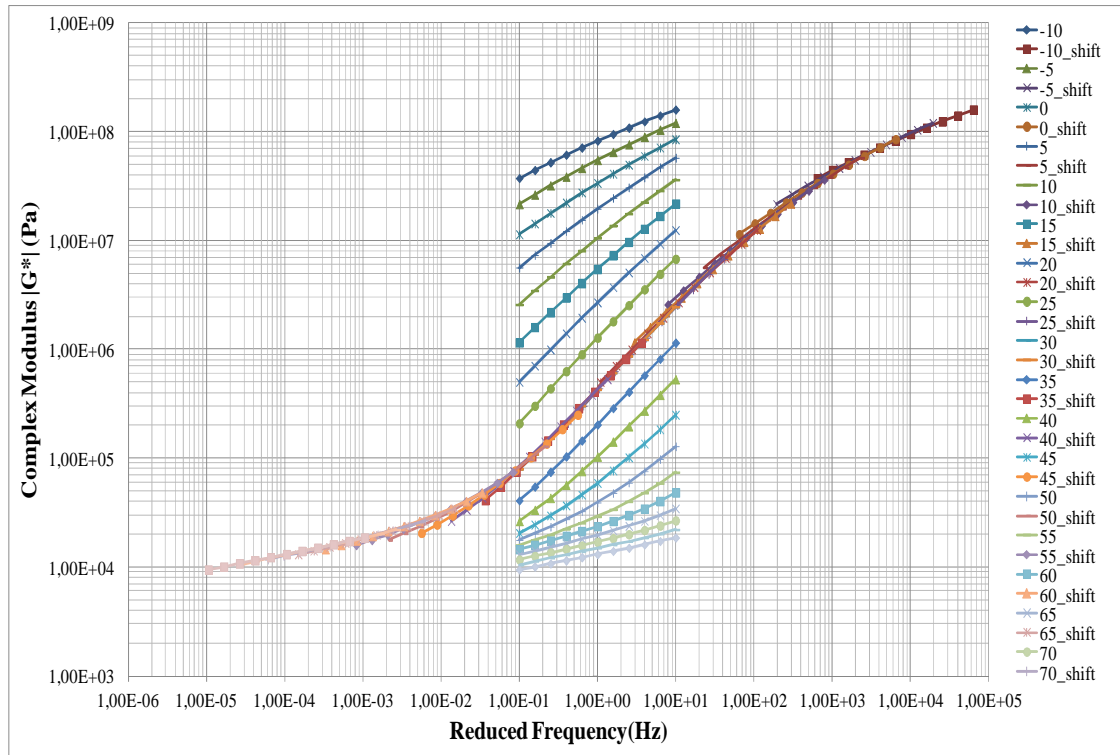


Figura 4 Curva maestra Empirical Shift

Gli shift pertanto determinati in maniera automatica vengono sostituiti nella equazione (5) e viene minimizzato [2] l'errore E_T fin tanto che non si rende minimo lo scarto tra i coefficienti Empirici e quelli determinati con l'equazione di Williams-Landel-Ferry.

Di fatto l'algoritmo opera in maniera più estensiva, infatti come detto, l'intera procedura viene inizializzata in maniera arbitraria, scegliendo il primo coefficiente a_{ET1} sulla base del prolungamento della curva mediana tra le due curve immediatamente superiore ed inferiore alla temperatura di riferimento T_{rif} .

Successivamente alla determinazione della Master Curve Empirica ed alla minimizzazione dell'errore E_T (5), relativo alla equazione di Williams-Landel-Ferry (3) la procedura ricalcola, se necessario, i coefficienti Empirici a_{ETi} fintanto che lo scarto degli errori tra quelli calcolati con le equazioni di Williams-Landel-Ferry (3), LCPC (7) e quelli Empirici sia sotto un determinato valore di soglia stabilito a priori dall'analista. In altre parole, l'algoritmo estende le iterazioni per un numero di volte tale da raggiungere il migliore risultato tra gli scarti degli errori relativamente alle tre metodologie di analisi. Di seguito viene riportato il raffronto tra le tre curve:

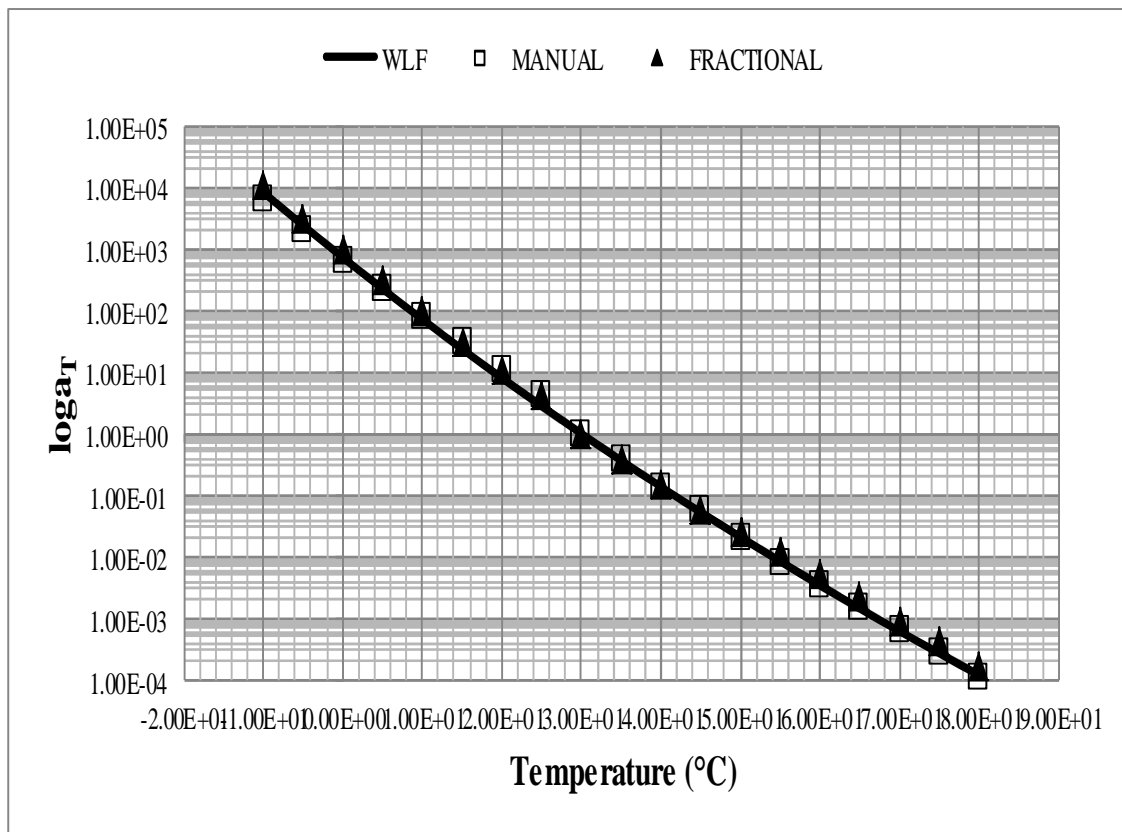


Figura 5 Confronto tra Empirical Shift, Willimas-Landel-Ferry e LCPC

Come si può evincere da un semplice esame visivo della figura precedente, la procedura implementata riesce a determinare i valori degli shift ($\log(a_T)$) Empirici (o Manuali) in maniera tale da renderne minima la differenza numerica nelle tre metodologie studiate. Infatti, sempre dalla stessa figura, si nota, per quasi tutte le temperature di analisi, una quasi perfetta coincidenza dei valori $\log(a_T)$.

Nel prossimo paragrafo si mettono in luce i risultati che sono stati ottenuti su due classi di bitumi, quelli miscelati con polimeri plastici e quelli puri e/o additivati. Il confronto viene esplicitato per mezzo di metodi statistici [28] che ne valutano la bontà dei fit ricavati automaticamente dalla procedura proposta.

4 RISULTATI

Al fine di validare nell'ambito di più bitumi analizzati l'efficacia della metodologia proposta si sono approfonditi diversi metodi statistici [28] per verificare la bontà dei fit. In particolare facendo riferimento alla seguente Tabella 1

Tabella 1 Criteria of the Goodness of Statistics

Criteria	R ²	Se/Sy
Excellent	≥0.90	≤0.35
Good	0.70-0.89	0.36-0.55
Fair	0.40-0.69	0.56-0.75
Poor	0.20-0.39	0.76-0.89
Very Poor	≤0.19	≥0.90

dove:

con Se ed Sy si indicano rispettivamente l'errore della deviazione standard nella Stima di a_T ovvero relativo agli Empirical Shift e l'errore della deviazione standard degli a_T da calcolo per mezzo delle relazioni (3) Williams-Landel-Ferry e (7) LCPC e con R²:il coefficiente di determinazione (13).

$$S_e = \sqrt{\frac{\sum (Y - \hat{Y})^2}{(n-k)}} ; S_e = \sqrt{\frac{\sum (Y - \bar{Y})^2}{(n-k)}} ; R^2 = 1 - \frac{(n-k)}{(n-1)} \left(\frac{S_e}{S_y} \right)^2 \quad (13)$$

Nelle succitate relazioni n, k, Y e \bar{Y} sono rispettivamente il numero di determinazioni di ogni valore di a_T il numero di variabili indipendenti nel modello preso in considerazione, il valore Empirico di a_T ed il relativo valore di calcolo.

Il confronto tra le funzioni Empiriche e quelle calcolate dei fattori di spostamento a_T vengono visualizzati graficamente nelle figure 6 e 7 relativamente a sei bitumi modificati con polimeri, mentre nelle figure 8 e 9 vengono rappresentati i confronti con i bitumi non modificati.

Questi grafici hanno lo scopo di mostrare visivamente e qualitativamente la bontà tra i valori misurati e previsti di $\log_{10}(a_T)$ ed altresì per visualizzare eventuali errori di comparazione o nell'ambito del modello matematico considerato ovvero relativamente al tipo di materiale esaminato [3].

Si è constatato [Tabella 1] che nell'ambito delle due classi dei bitumi analizzati i risultati in termini di bontà dei fit ricadono nella categoria eccellente.

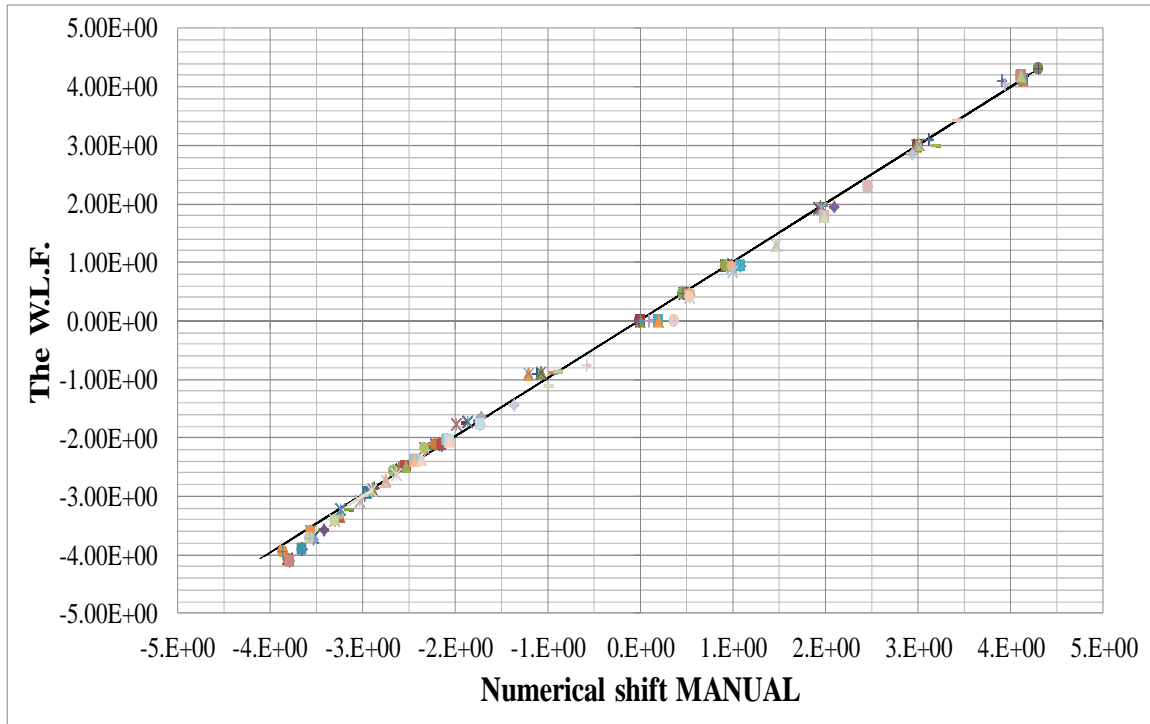


Figura 6 Confronto W.L.F. and MANUAL shift factors Bitumi modificati

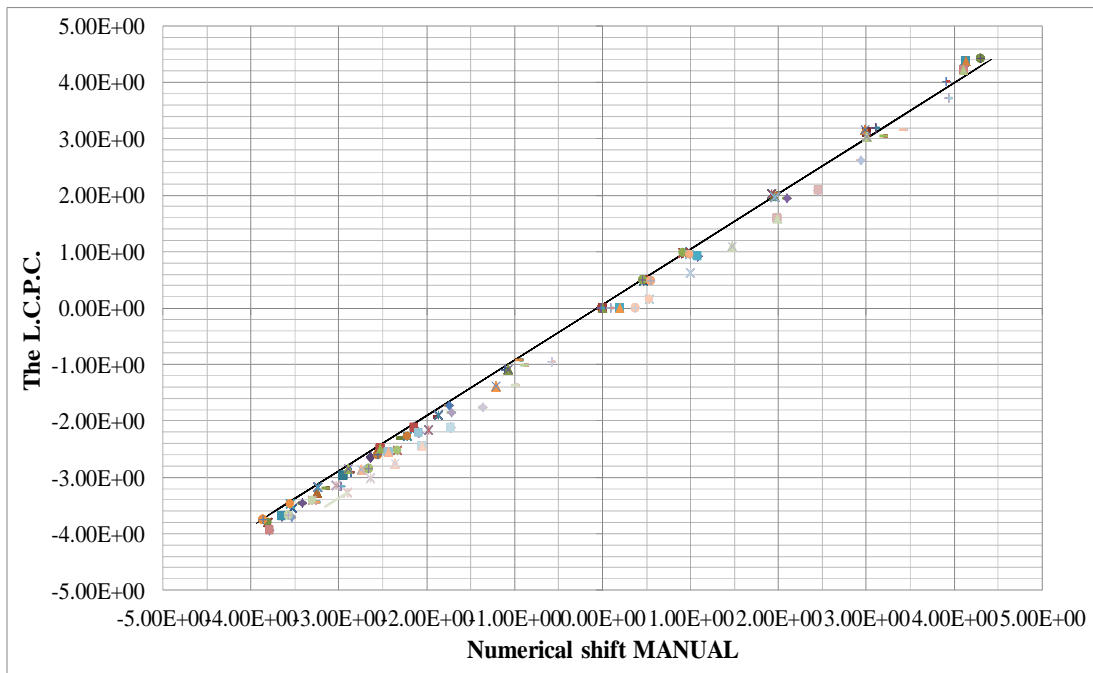


Figura 7 Confronto L.C.P.C. and MANUAL shift factors Bitumi modificati

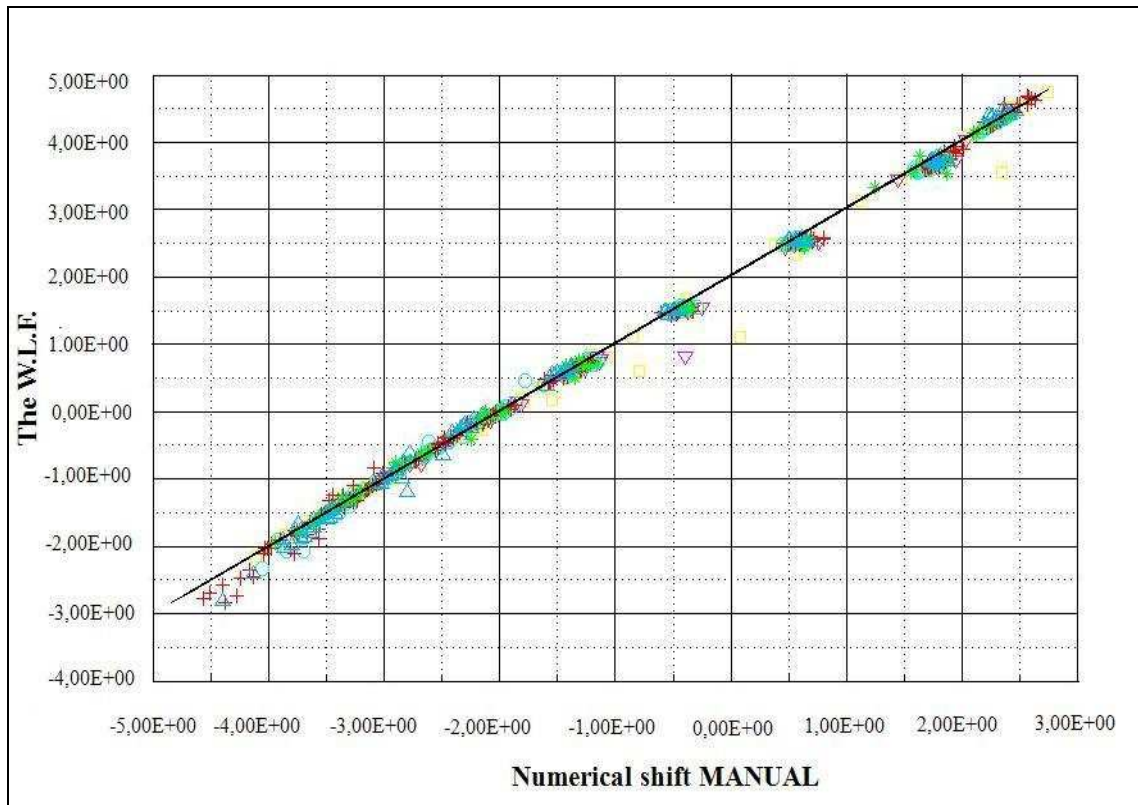


Figura 8 Confronto W.L.F. and MANUAL shift factors bitumi non modificati

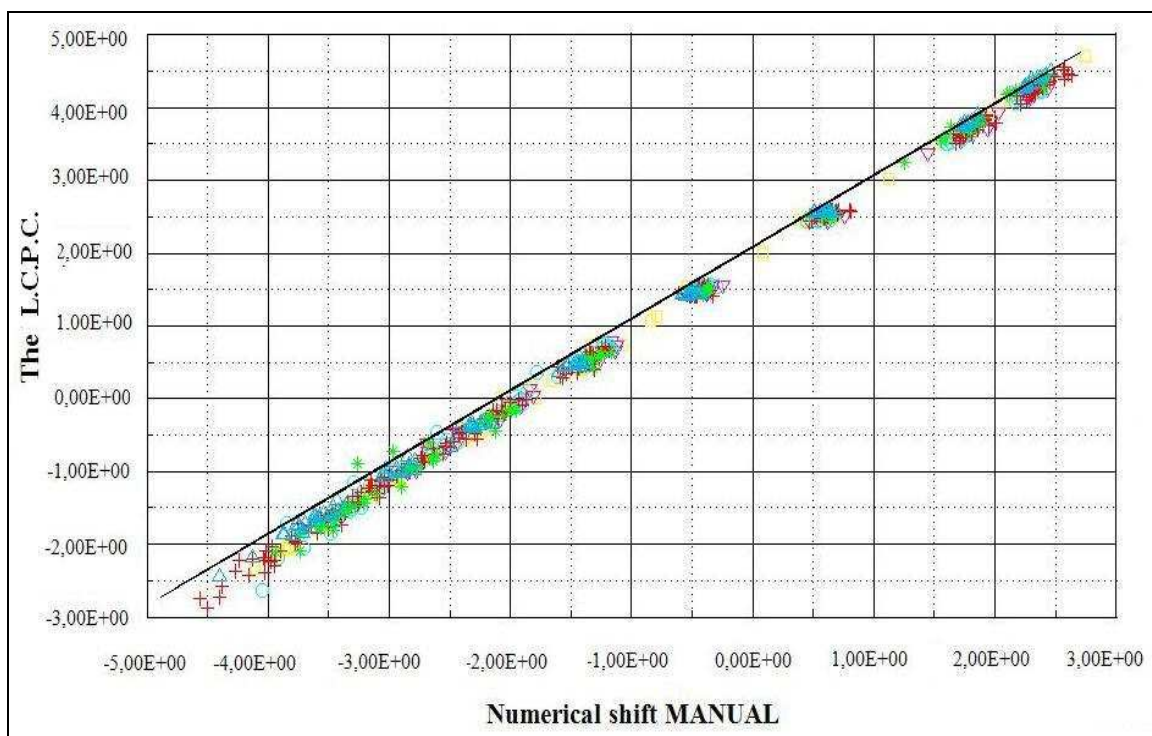


Figura9 Confronto L.C.P.C. and MANUAL shift factors bitumi non modificati

Come del resto può facilmente evincersi da un semplice esame visivo della figure 6, 7, 8 e 9 la correlazione matematica dei fit determinati con le tre succitate metodologie, rispetto alla

linea retta della perfetta regressione presenta molti punti coincidenti. Le ragioni di ciò risiedono nel fatto che l'algoritmo estende le iterazioni sul calcolo di a_T un numero di volte tale da raggiungere il migliore risultato tra gli scarti degli errori relativamente alle tre metodologie di analisi.

6 CONCLUSIONI

Nell'articolo è stato proposto un metodo automatico di ottimizzazione degli shift factor per la costruzione delle Curve Maestre nei bitumi puri o modificati. Vengono messi a confronto i risultati ottenuti dall'ottimizzazione degli shift factors ai quali si assegna legame funzionale tipo Williams-Landel-Ferry (WLF) con quelli ottenuti seguendo la procedura di ottimizzazione degli shift messa a punto dal Laboratoire Central des Ponts et Chaussées - LCPC

Si è constatato che nell'ambito delle due classi dei bitumi analizzati (sia per i bitumi puri che per quelli modificati con polimeri) i risultati in termini di bontà dei fit ricadono in entrambi i casi analizzati nella categoria eccellente. In effetti, sia da un esame visivo delle precedenti figure che dai valori numerici relativi ai due indicatori statistici discriminanti del giudizio della bontà dei fit, ovvero il rapporto delle deviazioni standard Se/Sy ed il coefficiente di determinazione R^2 , si sono evidenziate lievi differenze numeriche tra i confronti con Williams-Landel-Ferry e con la procedura Laboratoire Central des Ponts et Chaussées - LCPC. Per tutti i campioni analizzati, infatti, l'ottimizzazione della funzione di shift secondo Williams-Landel-Ferry, di fatto, porta a valori di bontà statistica del fit (valutata rispetto ad un'ottimizzazione manuale) leggermente superiori a quelli ottenuti per il metodo LCPC ($R^2 > 0.985$ e $Se/Sy < 0.085$ a fronte di $R^2 > 0.92$ e di $Se/Sy < 0.15$).

BIBLIOGRAFIA

- [1] Chailleux, E., Ramond, G., Such, C., and de la Roche, C. (2006). A Mathematical-based Master Curve Construction Method Applied to Complex Modulus of Bituminous Materials, *Road Materials and Pavement Design*, 7, pp. 75–92.
- [2] Moré, J.J. and D.C. Sorensen, "Computing a Trust Region Step," *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, Vol. 3, pp 553–572, 1983.
- [3] Molinas, A. and Wu, B. (2000). Comparison of Fractional Bed-Material Load Computation Methods in Sand-Bed Channels, *Earth Surface Processes and Landforms*, 25, pp.1045–1068.
- [4] Byrd, R.H., R.B. Schnabel, and G.A. Shultz, "Approximate Solution of the Trust Region Problem by Minimization over Two-Dimensional Subspaces," *Mathematical Programming*, Vol. 40, pp 247–263, 1988.
- [5] Steihaug, T., "The Conjugate Gradient Method and Trust Regions in Large Scale Optimization," *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 20, pp 626–637, 1983.