

УДК 004.9:677.072.6

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЧОТИРИКОМПОНЕНТНИХ СИСТЕМ

В.Г. Резанова, кандидат технічних наук, доцент
Київський національний університет технологій та дизайну

Ключові слова: програмне забезпечення, чотирикомпонентна система, математична модель, план експерименту.

Стрімкий розвиток науки і техніки у світі, постійно зростаючі потреби людства в товарах з покращеними властивостями, а також обмежені природні ресурси обумовили пошук методів одержання нових речовин і матеріалів із заданим комплексом показників.

Багатокомпонентні системи є досить складними об'єктами дослідження. Для визначення взаємозв'язку між складом композиції та її властивостями необхідно провести значну кількість багатофакторних експериментів, тобто для повного дослідження об'єкта слід розглянути велику кількість комбінацій навіть без урахування паралельних дослідів. Одним із шляхів, що дозволяє вести наукові дослідження прискореними темпами і знаходити рішення, максимально наближені до оптимальних з мінімальними витратами, є використання математичних методів планування і аналізу експериментів [1,2].

Мета роботи – розробка програмного забезпечення для побудови плану експерименту при дослідженні чотирикомпонентних композицій.

Для планування експерименту в багатокомпонентних композиціях успішно використовується симплексно-гратковий метод [1,2]. Співвідношення інгредієнтів у досліджуваних сумішах повинно задовольняти умову:

$$\sum_{i=1}^q x_i = 1, \quad (1)$$

де x_i – відносна концентрація інгредієнтів ($x_i \geq 0$); q – кількість інгредієнтів. Зазначена умова визначає область допустимих змінних, яка має назву симплекс. Для чотирикомпонентної системи область допустимих змінних має вигляд тетраедра. Його грані відповідають симплексам трикомпонентних сумішей трійок складових, а точки у середині – це суміш з чотирьох інгредієнтів. У симплексно-граткових планах для побудови моделей ступеню n експериментальні точки розташовують у симплексі симетрично, використовуючи для кожного компоненту $x_i (i = \overline{1, q})$ $q+1$ рівновіддалених рівнів, що перебувають у межах від 0 до 1: $x_i = 0; 1/n; 2/n; \dots; n/n = 1$. Усі можливі комбінації цих рівнів є планами або симплексними решітками. Більш точними є симплекс-центроїдні плани. Експериментальні точки розміщуються у вершинах симплексу, серединах сторін, центрах граней різної розмірності, одна точка – в центрі симплексу. При цьому з 2^{q-1}

експериментальних даних q точок мають один не рівний нулю компонент; C_q^2 ; C_q^3 ; C_q^4 – два, три та чотири ненульових відповідно, а одна точка містить усі компоненти. Симплекс-центроїдний план для чотирикомпонентної системи наведено на рисунку.

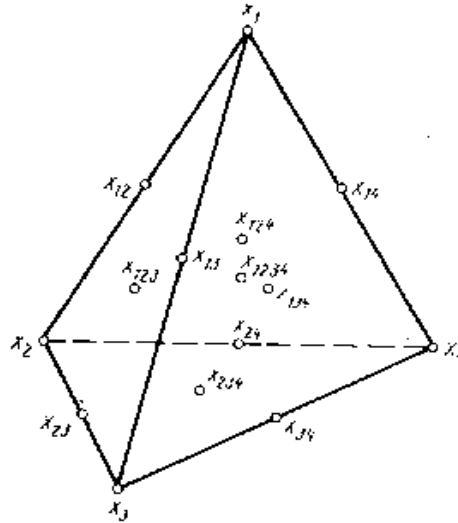


Рисунок 1 - Симплекс-центроїдний план для чотирикомпонентної системи

Основними завданнями при розробці плану експерименту є визначення координат точок-кандидатів, а саме: вершин багатокутника, середин ребер, центрів граней, загального центроїда та формування з точок-кандидатів плану експерименту, який відповідатиме деякому критерію оптимальності. Створений план у подальшому був використаний як тестовий для відлагодження програми. Остання написана авторами мовою C++ [3,4]. Результатом роботи процедури є масив значень, що необхідні для побудови плану експерименту при дослідженні чотирикомпонентних систем.

Таким чином, з використанням симплекс-центроїдного методу розроблено програмне забезпечення для визначення координат точок плану при побудові плану експерименту у восьмикутному багатограннику. Сворене програмне забезпечення має зручний інтерфейс і дає можливість зручно виконувати всі зазначені операції без проведення довготривалих та дорогавартісних ручних обчислень, що зробить значно ефективнішим процес наукових досліджень.

Список використаних джерел

1. Резанова В.Г., Резанова Н.М. Програмне забезпечення для дослідження полімерних систем. Монографія. – К.: АртЕк, 2020. – 358 с.
2. Резанова В.Г., Резанова Н.М. Програмне забезпечення для оптимізації складу багатокомпонентних сумішей. Монографія.- К.:АртЕк. - 2022. 315с.
3. Stroustrup B. Programming: Principles and Practice Using C++ (2nd Edition). Addison-Wesley Professional, 2014. 1312 p.
4. Stroustrup B. The C++ Programming Language Fourth Edition. Addison-Wesley, 2013. – 1366 p.