

УДК 677.072.6

РЕЗАНОВА В.Г.

Київський національний університет технологій та дизайну

ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЧОТИРИКОМПОНЕНТНИХ СИСТЕМ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Мета. Розробка програмного забезпечення для побудови плану експерименту при дослідженні чотирикомпонентних композицій.

Методика. Для дослідження впливу складу чотирикомпонентних систем на їх властивості застосовано симплекс-центроїдний план.

Результати. Розроблено та протестовано програму для визначення координат точок плану при плануванні експерименту у чотирикомпонентних сумішах, на вміст яких накладені двосторонні обмеження. Обчислення координат точок для плану експерименту у симплексі, що є восьмикутним багатогранником, виконано з використанням методу Макліна – Андерсона.

Наукова новизна. Створено програмне забезпечення в середовищі програмування Delphi 7 для побудови симплекс-центроїдного плану при дослідженні чотирикомпонентних систем.

Практична значимість. Розроблений метод математичного планування експерименту забезпечить підвищення ефективності досліджень, в тому числі у галузі модифікації полімерних композицій за рахунок зменшення витрат часу і матеріалів.

Ключові слова. Симплекс, план, точка, програмне забезпечення

Вступ. Відомо, що на сьогодні лише незначна частина синтетичних матеріалів виробляється на основі чистого полімеру. Технологія полімерів іде по шляху створення композиційних матеріалів, в яких направленим поєднанням компонентів досягається необхідний комплекс властивостей. Композити одержують оптимальною комбінацією полімерів і наповнювачів різних розмірів, форми та хімічної природи. Використання модифікованих полімерів надає можливість створити принципово нові матеріали та різноманітні вироби, сприяє зниженню їх маси, покращенню якості та зовнішнього вигляду.

Постановка завдання. Полімерні 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. Останні пов'язані із значними затратами часу і матеріалів, оскільки вплив кожного фактора досліджується окремо, при фіксованих значеннях інших параметрів. Інколи їх число штучно скорочують шляхом зменшення об'єму досліджуваного факторного простору або числа рівнів варіювання факторів. В обох випадках зменшується ступінь надійності рішень, які приймаються за результатами експериментів. 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.

Результати дослідження. Для планування експерименту в багатокомпонентних композиціях успішно використовується симплексно-гратковий метод [1]. 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 ($q \geq 2$).

Зазначена умова визначає область допустимих змінних, яка має назву симплекс. Так, для трикомпонентної композиції симплекс – це рівносторонній трикутник, кожна вершина якого є самостійним компонентом суміші; точки, що містяться на ребрах трикутника, відповідають бінарним системам пар інгредієнтів, точки в середині симплексу – складу суміші з усіх трьох компонентів. 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. Такі плани вважаються повністю насиченими, тобто кількість експериментів у них дорівнює кількості невідомих коефіцієнтів відповідної моделі. У симплексно-граткових планах експериментальні точки розміщені, зазвичай, на периферії симплексу.

Створена за таким планом модель добре описує результати експериментів на межі симплексу, але може бути досить неточною у центральних областях. Тому бажано проводити більше експериментів у середині симплексу, особливо для сумішей, що містять усі q компонентів. Таку можливість надають симплекс-центроїдні плани [2], [3]. Вони містять точки з координатами: $(1; 0; \dots; 0); (1/2; 1/2; 0; \dots; 0); \dots; (1/q; 1/q; \dots; 1/q)$, а також усі точки, які можна отримати перестановкою цих координат. Тобто, 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.

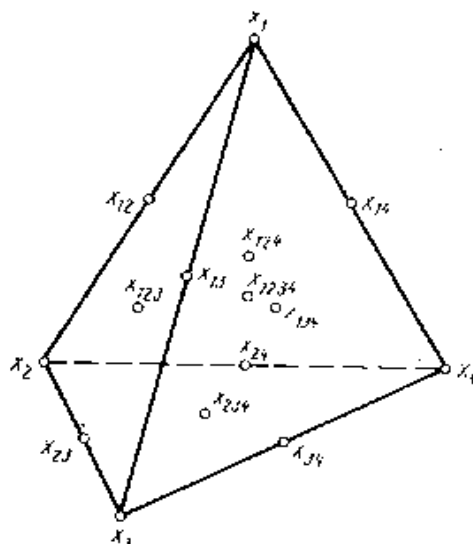


Рис. Симплекс-центроїдний план для чотирикомпонентної системи

Для побудови плану експериментів при дослідженні чотирикомпонентних систем взяли умовну суміш двох полімерів (А,В) та двох модифікуючих добавок (с,d), відносні концентрації яких x_1, x_2, x_3, x_4 відповідно. На вміст окремих інгредієнтів системи, як правило, накладаються двосторонні обмеження $0 \leq a_i \leq x_i \leq b_i \leq 1, i = \overline{1, q}$, де a_i, b_i – верхні і нижні границі обмежень кожного з компонентів, які не повинні дорівнювати одне одному. Якщо ж $a_i = b_i$, то розмір симплексу зменшується на одиницю. На концентрації інгредієнтів досліджуваної композиції накладено наступні обмеження: $0,2 \leq x_1 \leq 0,35$; $0,65 \leq x_2 \leq 0,80$; $0,001 \leq x_3 \leq 0,01$; $0,01 \leq x_4 \leq 0,04$. При цьому повинна виконуватись умова (1).

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. З метою визначення координат точок-кандидатів використали метод Макліна–Андерсона [2], згідно з яким вписали усі можливі комбінації нижніх і верхніх рівнів a_i та b_i для кожного з компонентів, пропускаючи вміст одного з них (табл.1).

Таблиця 1. Координати точок-кандидатів до плану експерименту та відстані між ними

Номер точки-кандидата	Вершини, ребра, грані	Вміст компонентів, частки одиниці				Відстані		
		x_1	x_2	x_3	x_4	від центру d_{i-27}	від точки1 d_{i-1}	від точки5 d_{i-5}
1	1	0.2	0.789	0.001	0.01	0.9684	0	1.3105
2	2	0.2	0.78	0.01	0.01	0.937	1.0018	1.6155
3	3	0.2	0.759	0.001	0.04	0.8755	1.0198	1.5449
4	4	0.2	0.75	0.01	0.04	0.8548	1.4379	1.8174
5	5	0.339	0.65	0.001	0.01	0.9684	1.3105	0
6	6	0.33	0.65	0.01	0.01	0.937	1.6155	1.0018

7	7	0.309	0.65	0.001	0.04	0.8756	1.5449	1.0198
8	8	0.3	0.65	0.01	0.04	0.8548	1.8174	1.4379
9	1-2	0.2	0.7845	0.0055	0.01	0.8106	0.5009	1.383
10	1-3	0.2	0.774	0.001	0.025	0.7695	0.5099	1.3387
11	1-5	0.2695	0.7195	0.001	0.01	0.7131	0.6553	0.6553
12	2-4	0.2	0.765	0.01	0.025	0.7378	1.1294	1.6421
13	2-6	0.265	0.715	0.01	0.01	0.7088	1.1963	1.1963
14	3-4	0.2	0.7545	0.0055	0.04	0.7055	1.1415	1.6106
15	3-7	0.2545	0.7045	0.001	0.04	0.7088	1.2039	1.2039
16	4-8	0.25	0.7	0.01	0.04	0.7131	1.5694	1.5694
17	5-6	0.3345	0.65	0.0055	0.01	0.8106	1.383	0.5009
18	5-7	0.324	0.65	0.001	0.025	0.7695	1.3387	0.5099
19	6-8	0.315	0.65	0.01	0.025	0.7378	1.6421	1.1294
20	7-8	0.3045	0.65	0.0055	0.04	0.7055	1.6106	1.1414
21	1-2-3-4	0.2	0.7695	0.0055	0.025	0.5634	0.719	1.4119
22	5-6-7-8	0.3195	0.65	0.0055	0.025	0.5634	1.4119	0.719
23	1-3-5-7	0.262	0.712	0.001	0.025	0.5005	0.6777	0.8272
24	2-4-6-8	0.2575	0.7075	0.01	0.025	0.5005	1.3008	1.3008
25	1-2-5-6	0.26725	0.71725	0.0055	0.01	0.505	0.8245	0.8245
26	3-4-7-8	0.25225	0.70225	0.0055	0.04	0.505	1.3061	1.3061
27	1-2-3-4-5-6-7-8	0.25975	0.70975	0.0055	0.025	0	0.9684	0.9684

Так, для чотирикомпонентної суміші одним із варіантів може бути $a_1; b_2; \dots; b_4$. Загальна кількість комбінацій для q -компонентної системи складає $q \cdot 2^{q-1}$, а при $q=4$ ця кількість становить 32. В подальшому серед отриманих комбінацій вибрали ті, для яких сума концентрацій менша за одиницю, і додали компонент, що було пропущено. Це робили лише тоді, коли не порушувалась умова (1), в протилежних випадках у табл. 1 залишалися порожні місця. Варіанти з доданими компонентами, що задовольняють умовам (1) і (2), являють собою вершини шуканого багатогранника. У досліджуваному прикладі обмеження на вміст компонентів утворюють у симплексі восьмикутний багатогранник, координати кожної вершини якого пронумеровані у табл. 1.

В отриманому багатограннику одержали грані першого і другого порядків. Грані першого порядку – це ребра, які мають дві однакові координати, а грані другого порядку – одну співпадаючу координату. При цьому були виключені вершини, які повторюються. Розмірність отриманого багатогранника завжди становить $q-1$.

Наступним кроком було виділення r -мірних граней, або гіперграней багатогранника, що знаходяться у межах $1 \leq r \leq q-2$. При $r=1$ – маємо ребро, при $r=2$ – грань, при $r=3$ – гіпергрань. Грань з розмірністю r утворюється групою вершин, які мають однакові координати у кількості $q-r-1$. У чотирикомпонентній системі ($q=4$) утворюється тримірний ($4-1=3$) багатогранник. Його ребра мають вершини з двома однаковими координатами ($4-1-1=2$), а грані – вершини з однією однаковою координатою ($4-2-1=1$). При цьому була обрана максимальна кількість вершин, що мають $q-r-1$ однакових координат, тому що саме вони утворюють r -мірну грань. Верхню межу загальної кількості r -мірних граней розраховували за формулою (3):

$$\sum_{q-r-1=1}^{q-2} C_q^{q-r-1} \cdot 2^{q-r-1} \quad (3)$$

У кожній з виділених граней визначали координати центрів (центроїдів), як середнє значення координат вершин, що утворюють відповідну грань. Отримані точки-кандидати вносили в табл.1. Далі обчислювали координати загального центру (центроїда) багатогранника, як середнє значення координат усіх вершин. В результаті отримано 27 точок-кандидатів до плану експерименту (табл.1).

Для розробки моделі, що встановлює взаємозв'язок між вмістом компонентів та властивостями чотирикомпонентної системи, обрали неповну кубічну модель, яка має вигляд:

$$\hat{y} = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k \quad (4)$$

Для визначення числових значень коефіцієнтів даного рівняння необхідно мати 14 точок плану.

З метою вибору точок-кандидатів використали спосіб складення плану, що містить задану кількість експериментів. Він полягає в тому, що вказані точки повинні бути максимально віддалені одна від одної у факторному просторі, виділеному на симплексі обмеженнями. Для цього розраховували відстань між усіма точками-кандидатами та центром багатогранника (d_{mn}) за формулою:

$$d_{mn} = \left[\sum_{1 \leq i \leq q} \left(\frac{x_{mi} - x_{ni}}{b_i - a_i} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

де m і n – одна і друга точки, i – номер компоненту.

Дві точки, що знаходяться на найбільшій відстані від центру, включили до плану. Між кожною з отриманих точок та точками, що лишилися, розраховували відстані ($d_{i-1}; d_{i-5}$) за формулою (4) та занесли їх до табл.1. Потім вибрали нормовану відстань (d'_{mn}), величина якої впливає на кількість точок у плані. Її слід вибирати меншою, коли потрібна більша кількість точок, і більшою, якщо достатньо незначної їх кількості. Нормовану відстань вибирали, керуючись умовою:

$$d_y^{cp} \leq d'_{mn} \leq (2d_y^{cp})^{\frac{1}{2}}, \quad (6)$$

де d_y^{cp} – середня відстань точки від центру.

У нашому випадку $d_y^{cp} = 0,7424$, а нормована відстань $d'_{mn} = 1,0019$. Точки, які мають відстані до двох вже обраних точок плану, менші за нормовану відстань, включили до плану, а решту відсіяли. Якщо точок у плані не вистачає для побудови моделі, необхідно зменшити обрану норму. Якщо ж точок забагато, то можна або збільшити нормовану відстань, або повторити усі вказані дії для точок-кандидатів, не враховуючи точки, що вже містяться в плані. Для нашого прикладу разом з двома точками, що вже були обрані до плану експерименту, одержали 15 точок, а потрібно лише 14. Тому з цих точок відкинули ту, що має найменшу відстань до загального центру багатогранника. Таким чином, за алгоритмом Макліна–Андерсона розроблено

план експерименту для дослідження чотирикомпонентної системи, який містить 14 необхідних точок (табл. 2).

Таблиця 2. План експерименту

Номер Точки-кандидата	Вміст компонентів, частки одиниці			
	x_1	x_2	x_3	x_4
1	0.2	0.789	0.001	0.01
3	0.2	0.759	0.001	0.04
4	0.2	0.75	0.01	0.04
5	0.339	0.65	0.001	0.01
7	0.309	0.65	0.001	0.04
8	0.3	0.65	0.01	0.04
12	0.2	0.765	0.01	0.025
13	0.265	0.715	0.01	0.01
14	0.2	0.7545	0.0055	0.04
15	0.2545	0.7045	0.001	0.04
16	0.25	0.7	0.01	0.04
19	0.315	0.65	0.01	0.025
20	0.3045	0.65	0.0055	0.04
26	0.25225	0.70225	0.0055	0.04

Створений план у подальшому був використаний як тестовий для відлагодження програми. Остання написана у середовищі програмування Delphi 7 [4], [5]. У ній розроблено декілька процедур, найважливіші з яких описані нижче:

procedure convert

На вході даної процедури подаються обмеження на вміст кожного з компонентів суміші. Вони задаються користувачем на формі, а програма зчитує дані, записані у компоненті Edit. Змінна a приймає значення нижніх рівнів, а змінна b – верхніх рівнів вмісту для кожного компоненту суміші. На виході з процедури отримали чотири одномірні масиви x_1 , x_2 , x_3 , x_4 , елементами яких є значення координат вершин багатогранника.

procedure grani

На вході процедури маємо координати вершин багатогранника, що є одномірними масивами x_1 , x_2 , x_3 , x_4 , елементи яких відповідають вмісту компонентів суміші. У ході процедури порівнюються точки, і ті з них, що мають одну однакову координату, утворюють грань. На виході маємо чотири одномірні масиви ox_1 , ox_2 , ox_3 , ox_4 , що являють собою координати центрів виділених граней.

procedure rebra

На вхід процедури подаються координати вершин багатогранника x_1 , x_2 , x_3 , x_4 . Під час виконання процедури всі точки порівнюються між собою. Відбувається пошук точок, що мають дві однакові координати. Ці точки утворюють ребра багатогранника.

На виході процедури маємо одномірні масиви $dx1$, $dx2$, $dx3$, $dx4$, елементи яких відповідають координатам центрів ребер.

procedure centr

На вхід даної процедури надходять значення координат точок-кандидатів до плану. На виході отримуємо координати загального центру багатогранника $cx1$, $cx2$, $cx3$, $cx4$.

procedure vids_centr

Вхідними параметрами даної процедури є координати точок-кандидатів у план $x1$, $x2$, $x3$, $x4$ та координати іншої точки $cx1$, $cx2$, $cx3$, $cx4$, до якої необхідно знайти відстань (зокрема, це може бути точка – загальний центр фігури). Крім того, до процедури передаються значення обмежень на вміст компонентів суміші (масиви a, b). Результатом роботи процедури є одномірний масив dc , що містить відстані від кожної точки до центру (або іншої точки).

procedure max_d

Вхідними параметрами процедури є одномірні масиви $x1$, $x2$, $x3$, $x4$, що відповідають координатам багатогранника, та одномірний масив dc , елементи якого – це відстані від точок багатогранника до його центру. В результаті роботи процедури одержимо номер елемента масива, що має максимальне значення цієї відстані.

procedure vibir_tochok

На вхід процедури як параметри подаються координати точок багатогранника $tx1$, $tx2$, $tx3$, $tx4$, вектор відстаней від яких до центру dc та нормована відстань dn , вибирається з умови (5). У процедурі визначають дві точки, що знаходяться на найбільшій відстані від центру та від цих точок до решти точок-кандидатів. Точки-кандидати розташовуються у порядку зменшення відстані від них до центру багатогранника. Першими у масивах знаходяться точки, які розташовані найдалі від центру фігури. Потім відкидають точки, що мають відстань до двох обраних, меншу за нормовану. На виході процедури отримуємо чотири одномірні масиви px , $px2$, $px3$, $px4$, що містять координати точок, які ввійшли до плану.

Результатом роботи процедури є масив значень, що необхідні для побудови плану експерименту при дослідженні чотирикомпонентних систем.

Висновки. Вперше з використанням симплекс-центроїдного методу розроблено програмне забезпечення у середовищі програмування Delphi для визначення координат точок плану при побудові плану експерименту у восьмикутному багатограннику. Обчислення координат точок плану проведено за допомогою теорії Макліна–Андерсона.

Список використаної літератури

1. Зедгинидзе И.Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. – М.: Наука, 1976. – 392 с.
2. Новик Ф.С. Планирование эксперимента на симплексе при изучении металлических систем. – М.: Металлургия, 1985. – 256 с.
3. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. – М.: Высшая школа, 1978. – 319 с.

4. Куйтин Н. Основы программирования в Delphi 7. С-Пб.: БХВ-Петербург, 2007. – 608 с.
5. Фленов М. Библия Delphi, 3-е издание С-Пб.: БХВ-Петербург, 2011. – 688 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ЧЕТЫРЁХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

РЕЗАНОВА В.Г.

Киевский национальный университет технологий и дизайна

Цель. Разработка программного обеспечения для построения плана эксперимента при исследовании четырёхкомпонентных композиций.

Методика. Для исследования влияния состава четырёхкомпонентных систем на их свойства применен симплекс-центроидный план.

Результаты. Разработана и протестирована программа для определения координат точек плана при планировании эксперимента в четырёхкомпонентных смесях, на содержимое которых наложены двухсторонние ограничения. Вычисление координат точек для плана эксперимента в симплексе, являющимся восьмиугольным многогранником, выполнено с использованием метода Маклина – Андерсона.

Научная новизна. Создано программное обеспечение в среде программирования Delphi для построения симплекс-центроидного плана при исследовании четырёхкомпонентных систем.

Практическая значимость. Разработанный метод математического планирования эксперимента обеспечит повышение эффективности исследований, в том числе у отрасли модификации полимерных композиций за счет уменьшения затрат времени и материалов.

Ключевые слова. *Симплекс, план, точка, программное обеспечение.*

RESEARCH OF QUATERNARY SYSTEMS PROPERTIES BY MATHEMATICAL MODELING METHOD

REZANOVA V.G.

Kiev National University of Technology and Design

Purpose. Software development for carrying out plan of experiment in quaternary compositions researching.

Methods. To study the effect of quaternary systems structure on their properties simplex centroid plan was used.

Results. Developed and tested a program to determine the coordinates of the points in the planning of the experiment in quaternary mixtures, the contents of which are imposed by the bilateral constraints. Calculating the coordinates of points for the experiment plan in the simplex, which is octagonal polyhedron, was made using the Maclean – Anderson method.

Scientific novelty. The software for carrying out the simplex centroid plan in researching of quaternary systems was developed in the programming environment Delphi 7.

The practical significance. The developed method of mathematical planning of the experiment will improve the efficiency of research, including the branch of polymer compositions modification, by reducing the time and materials.

Keywords: *simplex, plan, point, software.*