УДК 630:232.41

В. В. Копытков (kopvo@mail.ru),
д-р с.-х. наук, профессор
Институт леса НАН Беларуси
г. Гомель, Республика Беларусь

А. А. Кулик (mlh@mlh.gov.by),
Министр лесного хозяйства
г. Минск, Республика Беларусь

Л. П. Авдашкова (avdashkova@mail.ru),
канд. физ.-мат. наук, доцент
Белорусский торгово-экономический
университет потребительской кооперации
г. Гомель, Республика Беларусь

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПРИ РАЗРАБОТКЕ НОВЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ УДОБРЕНИЙ И ПОЛИМЕРНЫХ ПРЕПАРАТОВ

В статье показаны перспективы использования информационных технологий и методов моделирования для получения новых видов органических удобрений и полимерных препаратов. Показаны технологии получения органических удобрений пролонгированного действия с заданными физико-химическими свойствами. Установлены зависимости концентраций всех ингредиентов и целевых добавок для получения оптимальных полимерных препаратов.

The article shows the prospects for using information technologies and modeling methods to obtain new types of organic fertilizers and polymer preparations. Technologies for producing long-acting organic fertilizers with specified physicochemical properties are shown. The dependences of the concentrations of all ingredients and target additives for obtaining optimal polymer preparations have been established.

Ключевые слова: моделирование; информационные технологии; физико-химические свойства; органические удобрения; полимерные препараты.

Key words: modeling; information technologies; physical and chemical properties; organic fertilizers; polymer preparations.

Использование методов планирования эксперимента позволяет значительно сократить объем полевых и лабораторных исследований при изучении многокомпонентных систем, отпадает необходимость в закладке натурных опытных объектов. При этом сохраняется возможность графического интерпретирования полученных результатов. При планировании эксперимента для решения задач на диаграммах «состав-свойство» предполагается, что измеряемое свойство является непрерывной функцией аргументов и может быть с достаточной точностью определено полиномом.

Для изучения свойств органических удобрений пролонгированного действия факторное пространство представляет собой правильный $(q - 1)$-мерный симплекс. Поверхности отклика в многокомпонентных системах имеют сложный характер. Для адекватного описания таких поверхностей необходимы полиномы высоких степеней и большое количество опытов. Обычный полином степени n от q переменных имеет C^{n}_{q+n} коэффициентов:

$$y = b_0 + \sum_{1 \le i \le q} b_i \cdot x_i + \sum_{11 \le i \le j \le q} b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{1 \le i \le j \le k \le q} b_{ijk} \cdot x_i \cdot x_j \cdot x_k + \ldots .$$

Шеффе предложил описывать свойства смесей приведенными полиномами, полученными из уравнения с учетом условия нормированности суммы независимых переменных.

Приведенный полином второй степени от трех переменных имеет следующий вид:

$$y = \beta_1 \cdot x_1 + \beta_2 \cdot x_2 + \beta_3 \cdot x_3 + \beta_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + \beta_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + \beta_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 + \beta_{123} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3.$$

В настоящее время для оптимизации органических удобрений наибольшее применение получили симплекс-решетчатые планы. Эти планы обеспечивают равномерный разброс экспериментальных данных по $(q - 1)$-мерному симплексу. Экспериментальные точки представляют $\{q,n\}$-решетку на симплексе (где q – число ингредиентов смеси, n – степень полинома).

По каждому ингредиенту имеется $(n + 1)$ одинаково расположенных уровней $x_i = 0$, $1/n$, $2/n$, …, 1 и берутся все возможные комбинации с такими значениями концентраций ингредиентов.

Для полинома второго порядка трехкомпонентной смеси при предположении, что x_i определяется без ошибок, дисперсия воспроизводимости S_y^2 во всех точках плана одинакова, и значения откликов являются результатом усреднения n_i и n_{ij} параллельных опытов в соответствующих точках симплекса. Тогда уравнение дисперсии имеет следующий вид:

$$S_{\hat{y}}^2 = S_y^2\left(\sum_{1\le i\le q}\frac{a_i^2}{n_i} + \sum_{1\le i\le j\le q}\frac{a_{ij}^2}{n_{ij}}\right),$$

где $a_i = x_i(2\cdot x_i - 1)$;

$a_{ij} = 4\cdot x_i\cdot x_j$.

Для графического представления результатов исследований использовали средние значения экспериментальной величины, полученной по результатам 3–10 измерений.

В последнее десятилетие большое внимание уделялось вопросам получения и использования полимерных препаратов для предпосевной подготовки семян, предпосадочной обработки корневых систем растений от иссушения, получения органических удобрений пролонгированного действия и внекорневой обработки сеянцев в период вегетации. В результате проведенной работы получены новые полимерные препараты «Корпансил» и «Фертериз» (рисунок 1). Они могут совершенствоваться в зависимости от поставленной задачи, поскольку состоят из полимеров, ингредиентов природного происхождения и целевых добавок, выполняющих роль элементов питания и стимуляторов роста.

Рисунок 1 – **Обсуждение результатов математического моделирования физико-химических свойств полимерных препаратов для интенсификации лесовыращивания**

Концентрации ингредиентов в полимерных препаратах должны обеспечивать получение свойств с максимальной влагоудерживающей способностью (функция отклика y_1) и прочностью при разрыве покрытий (функция отклика y_2). В связи с этим важно определить концентрации полимерных препаратов.

Планирование эксперимента в задачах со смесями предполагает изучение диаграмм «состав-свойство» и «состав-состояние». Для этого необходимо полное описание системы, при котором приходится учитывать условие нормированности суммы независимых переменных xi ($i = 1, 2, ..., q$), определяющих концентрацию соответствующего ингредиента в композиционном полимерном препарате:

$$x_1 + x_2 + \cdots + xq = 1,\ xi \ge 0\ (i = 1, 2, ..., q),$$

где q – количество ингредиентов в препарате.

При построении диаграмм «состав-свойство» оперируют с факторным пространством в виде симплексов, поэтому целесообразным оказывается определение координат компонент не в обычной системе координат, а в специальной – симплексной, в которой пропорции каждого компонента откладываются вдоль соответствующих граней (ребер) симплекса.

Геометрическое место точек, удовлетворяющее условию нормированности суммы переменных, представляет собой (q – 1)-мерный правильный симплекс (треугольник для $q = 3$, тетраэдр для $q = 4$ и т. д.). Каждой точке такого симплекса соответствует смесь определенного препарата, и, наоборот, любой комбинации относительных содержаний q компонентов соответствует определенная точка на симплексе (рисунок 2).

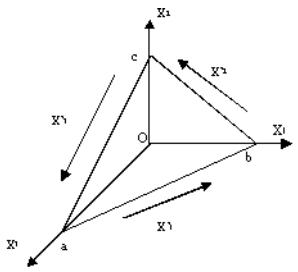

Рисунок 2 – **Связь между двумя координатными системами: обычной декартовой и симплексной для трехкомпонентных полимерных составов**

Очевидно, изменению относительного содержания первого компонента x_1 от 0 до 1 вдоль оси x_1 (в долях от длины отрезка, равного единице) соответствует пропорциональное изменение координаты $x'_1 = \sqrt{2x_1}$ вдоль стороны ab (длины $\sqrt{2}$) от точки a, где компонента x_1 присутствует в пропорции 0, до точки b, т. е. смесь состоит лишь из первого компонента. Число x_1 долей (частей) отрезка ob длиной 1 равно x'_1 долям отрезка ab, т. е. относительное содержание (пропорция) $x_1 = x'_1$. Поэтому в дальнейшем при рассмотрении симплексов штрих опускается – относительное содержание компонентов на его сторонах обозначается просто через xi. Аналогично вдоль оси x_2 от центра координат к точке с координатой $x_2 = 1$ будет соответствовать пропорциональное перемещение точки вдоль стороны bc от точки b, где второй компонент отсутствует, к точке c, где имеется лишь второй компонент. Третий компонент на треугольной диаграмме откладывается вдоль стороны ca, начиная от точки с нулевым содержанием данного компонента до точки a, где $x_3 = 1$.

Увеличение числа компонент смеси на одну приводит к рассмотрению четырехкомпонентной смеси. В этом случае для определения координаты x_1 какой-нибудь точки трехмерного симплекса – правильного тетраэдра необходимо провести через нее плоскость, параллельную двухмерной грани тетраэдра с ребром пропорций третьего компонента x_3, и взять отсекаемый этой плоскостью на оси x_1 отрезок $x_1(M)$ (рисунок 3).

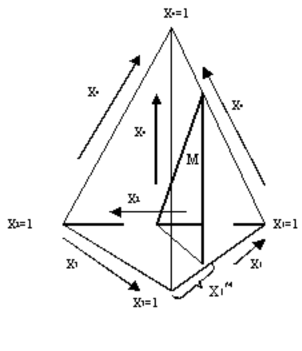

Рисунок 3 – **Определение уровня первого компонента в точке *M* смеси из четырех компонент**

Таким образом, геометрическое место точек, удовлетворяющих условию нормированности суммы независимых переменных, представляет собой (q – 1)-мерный правильный симплекс. Каждой точке такого симплекса соответствует композиция вполне определенного состава, и, наоборот, любому набору уровней компонентов xi, удовлетворяющих условию нормированности суммы независимых переменных, соответствует определенная точка симплекса.

Поверхности отклика в многокомпонентных системах имеют сложный характер. При планировании эксперимента для решения задач на диаграммах «состав-свойство» предполагается, что измеряемое свойство является непрерывной функцией аргументов и может быть с достаточной точностью определено регрессионной моделью – полиномом. Для описания таких поверхностей необходимы полиномы высоких степеней. Полином степени n от q переменных имеет следующий вид:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^{q} b_{ij} x_i + \sum_{1 \le i < j \le q}^{m} b_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \le i < j \le q}^{m} b_{ij} x_i x_j x_k + \ldots \ .$$

Переменные смеси удовлетворяют условию нормированности суммы, значит, не являются независимыми, поэтому оценка коэффициентов в полиномиальной модели невозможна (матрица коэффициентов $B = (X^T X)^{-1} X^T Y$ (X – матрица планирования компонент композиционного полимерного состава, Y – вектор-столбец результатов экспериментов – матрица откликов), но матрица $X^T X$ вырождена, поэтому обратная к ней не существует).

Математическая модель «состав-свойство», включающая все компоненты системы:

$$\hat{y} = \sum_{1 \le i \le q} \beta_i x_i + \sum_{m=2}^{n} \left(\sum_{1 \le i < j \le q} \beta_{ij} x_i x_j (x_i + x_j)^{m-2} \right) + \sum_{m=3}^{n} \left(\sum_{1 \le i_1 < i_2 < \ldots < i_m \le q} \beta_s x_{i_1}^{s_1} \ldots x_{i_m}^{s_m} \right),$$

где $s = i_1^{s_1} \cdot \ldots \cdot i_m^{s_m}$, $s_1 + s_2 + \ldots + s_m = n$.

Полиномы такого вида – приведенные полиномы получаются из обычных полиномов соответствующей степени для q переменных введением соотношения $x_1 + x_2 + \cdots + xq = 1$, $xi \ge 0$ ($i = 1, 2, \ldots, q$), и содержат C_{q+n-1}^{n} коэффициентов.

Для оценки коэффициентов приведенного полинома были предложены планы, обеспечивающие равномерный разброс экспериментальных точек по (q – 1)-мерному симплексу. Точками таких планов являются узлы $\{q,n\}$-симплексных решеток. В $\{q,n\}$-решетке для каждого компонента используется $n + 1$ равнорасположенных уровней в интервале от 0 до 1 ($xi = 0, 1/n, 2/n, \ldots, 1$) и берутся все возможные их комбинации. Число таких комбинаций равно числу оцениваемых коэффициентов в приведенном полиноме степени n, поэтому набор точек $(x_{1u}, x_{2u}, \ldots, x_{qu})$, $u = 1, \ldots, N = C_{q+n-1}^{n}$, где $x_{iu} = 0, \frac{1}{n}, \frac{2}{n}, \ldots, 1$, $\sum_{1 \le i \le q} x_{iu} = 1$, образует насыщенный (число экспериментальных точек в плане равно числу коэффициентов искомого полинома) симплекс-решетчатый план $\{q,n\}$.

Множество координат точек симплексной решетки образует матрицу планирования. Оценки коэффициентов аппроксимирующего приведенного полинома степени n, учитывая свойство насыщенности плана, получаются методом подстановки: для получения расчетных формул в полином последовательно подставляются координаты всех точек плана $\{q,n\}$-решетки, реализуются опыты (таблица), определяются отклики системы y и подставляются вместо выходов системы.

Число опытов для полиномов разных степеней

Число компонентов, q	Степень полиномов, n			
	2	3 (неполная)	3	4
3	6	7	10	15
4	10	14	20	35
5	15	25	35	70
6	21	41	56	126
8	36	92	12	330
10	55	175	220	715

Под y могут подразумеваться как результаты единичного определения, так и средние значения нескольких определений. Удобно ввести специальные обозначения для этих откликов. Отклик для смесей, содержащих только один ненулевой компонент (вершины симплекса, т. е. точки с координатами (0, …, 0; 1; 0, …, 0)), обозначается через yi, отклик для 1:1 бинарной смеси компонентов i и j – через yij ($i < j$), отклик для 1:1:1 тройной смеси компонентов i, j, k –

через $yijk$ ($i < j < k$), отклик для 2:1 и 1:2 бинарных смесей компонентов i и j соответственно – через $yiij$ и $yijj$ ($i < j$) и т. д. В общем случае индексы у откликов y вводятся с тем расчетом, чтобы их общее число было равно n; число различных индексов указывало бы количество компонентов, применяемых в соответствующей данной точке смеси; число одинаковых индексов показывало бы относительное содержание компонентов.

Дисперсию предсказанного значения отклика можно определить по закону накопления ошибок. Формулы для расчета дисперсии предсказанных значений исследуемого свойства могут быть получены из самих аппроксимирующих уравнений с учетом того, что регрессионные коэффициенты являются линейными функциями откликов в узлах симплекса. Если в каждой точке симплексной решетки проводится одинаковое число наблюдений, равное r, то формулы для дисперсии предсказанного значения исследуемого свойства примут следующий вид:

$$\sigma^2(\hat{y}) = \sigma^2(y)\frac{\xi}{r},$$

где $\xi = \sum a_i^2 + \sum a_{ij}^2,\ a_i = x_i(2x_i - 1),\ a_{ij} = 4x_i x_j$ – для модели второго порядка;

$$\xi = \sum b_i^2 + \sum b_{ij}^2 + \sum b_{ijk}^2,$$

где $b_i = \frac{1}{2}x_i(6x_i^2 - 2x_i + 1) - 3\sum_{1 \le j \le q} x_j^2,$

$b_{ij} = 4x_i x_j(3x_i + 3x_j - 2),$

$b_{ijk} = 27x_i x_j x_k$ – для неполной кубической модели и т. д.

Зная дисперсию предсказанного значения отклика и число параллельных опытов r, легко найти ошибку предсказанных значений отклика в любой точке диаграммы «состав-свойство», воспользовавшись для этого соответствующей величиной ξ.

Величина t, распределенная по закону Стьюдента, сравнивается с табличным значением $t_{p/2l}(f)$, где p – уровень значимости; l – число контрольных точек; f – число степеней свободы дисперсии. Гипотеза об адекватности уравнения принимается, если $t_{\text{эксперимента}} < t_{\text{табличное}}$ для всех контрольных точек. Так как оптимальные значения концентраций ингредиентов полимерных составов для одних свойств максимальны, а для других минимальны, то на основании применения коэффициентов значимости можно определить концентрации, которые будут способствовать оптимальному проявлению сразу нескольких факторов.

Доверительный интервал для значений отклика имеет следующий вид:

$$\hat{y} - \Delta \le \hat{y} + \Delta,$$

где $\Delta = t_{p/2l}(f) \cdot \sigma_{\hat{y}}^2 = t_{p/2l}(f)\frac{\sigma_{\hat{y}}}{\sqrt{r}}\sqrt{\xi}.$

В настоящее время ведутся исследования влияния внекорневой обработки композиционными полимерными составами на биометрические показатели сеянцев дуба черешчатого с целью определения оптимального набора ингредиентов в каждом из таких составов.

Разработаны новые органические удобрения и полимерные препараты, которые используются в народном хозяйстве не только Беларуси, но и в Казахстане и Монголии.

Исследования выполнены при финансовой поддержке БРФФИ в рамках международного проекта № Б23МН-001.