УДК630:232.41

ПЛАНИРОВАНИЕ СОСТАВА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ УДОБРЕНИЙ С ОПТИМАЛЬНЫМИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ БЕЗ ТОРФА

Копытков Владимир Васильевич, д.с.-х.н., профессор[1],
Кулик Александр Антонович, соискатель[1],
Министр лесного хозяйства Республики Беларусь,
Авдашкова Людмила Павловна, к.ф.-м.н., доцент[2],
Савченко Виталий Викторович, м.н.с.[1]
[1]Институт леса НАН Беларуси
[2]Белорусский торгово-экономическийуниверситет потребительской кооперации
Kopytkov Vladimir, Doctor of Agricultural Sciences, Professor, kopvo@mail.ru[1]
Kulik Alexander, Minister of Forestry of the Republic of Belarus, mlh@mlh.gov.by
Avdashkova Lyudmila, Ph.D., Associate Professor, avdashkova@mail.ru[2]
Savchenko Vitaly , M.Sc., sav4enko.1994@mail.ru[1]
[1]Institute of Forestry of the National Academy of Sciences of Belarus,
[2]Belarusian University of Trade and Economics of Consumer Cooperation

Аннотация. В статье показаны перспективы использования математического моделирования для получения новых видов органических удобрений. Показаны технологии получения органических удобрений пролонгированного действия с заданными физико-химическими свойствами. Установлены зависимости концентраций всех ингредиентов и целевых добавок для получения оптимальных органических удобрений без использования торфа.

Ключевые слова: математическое моделирование, физико-химические свойства, органические удобрения.

Использование методов планирования эксперимента позволяет значительно сократить объем полевых и лабораторных исследований при изучении многокомпонентных систем, а также отпадает необходимость в закладке лесохозяйственных 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.

При изучении физико-химических свойств органических удобренийпролонгированного действия факторное пространство представляет собой правильный (q-1)-мерный симплекс.Поверхности отклика в многокомпонентных системах имеютсложный 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:

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

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

Модель первого порядка для q-компонентного состава:

$$\hat{y} = \sum_{1 \le i \le q} \beta_i x_i,$$

где $\beta_i = y_i$.

Модель второго порядка для q-компонентного состава:

$$\hat{y} = \sum_{1 \le i \le q} \beta_i x_i + \sum_{m=2}^{n} \beta_{ij} x_i x_j,$$

где $\beta_i = y_i$, $\beta_{ij} = 4y_{ij} - 2y_i - 2y_j$.

Аналогично определяются модели более высоких порядков.

Полный переход к модели более высокого порядка путем достройки симплексной решетки осуществляют в том случае, если модель окажется неадекватной при верификации. Иногда можно не делать полный переход к полиному более высокой степени. Для этого можно добавить к имеющемуся неадекватному полиному некоторые члены из полинома более высокой степени (переход от полинома второй степени к полиному неполной третьей степени), добавить к плану второго порядка тройных точек с равными пропорциями компонентов, увеличить информацию о центральной области симплекса без резкого увеличения степени полинома. В таком случае можно добавлять, например, к планам второго или третьего порядка средние точки из плана четвертого порядка. Аналогичным образом можно усиливать информацию о любой части симплекса.

После определения оценок коэффициентов уравнения регрессии проводится статистический анализ полученных результатов: проверяется адекватность уравнения, строятся доверительные интервалы значений отклика, предсказываемые по уравнению регрессии. «Симплекс-решетчатые» планы Шефе не имеют степеней свободы [1], поэтому для проверки адекватности проводят опыты в дополнительных «контрольных точках». Полученные аппроксимирующие модели различных порядков могут быть использованы для предсказания откликов в любой точке симплекса. Точность предсказания отклика какой-либо фиксированной моделью различна в разных точках симплекса и кроме координат точки зависит также от экспериментальной ситуации (дисперсии опыта, количества параллельных наблюдений в узлах симплексной решетки). Зная дисперсию предсказанного значения отклика и число параллельных опытов r, легко найти ошибку предсказанных значений отклика в любой точке диаграммы «состав-свойство». Так как оптимальные значения концентраций ингредиентов органоминеральных субстратов для одних свойств максимальны, а для других минимальны, то на основании применения коэффициентов значимости можно определить концентрации, которые будут способствовать оптимальному проявлению сразу нескольких ингредиентов.

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)[1].

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 является результатом усреднения n_iи n_{ij} параллельных опытов в соответствующих точках симплекса. Тогда уравнение дисперсии имеет вид:

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

где $a_i = x_i \cdot (2 \cdot x_i - 1)$;

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

Для графического представления результатов исследований использовали средние значения экспериментальной величины, полученной по результатам 5-10 измерениям.

В последние годы большое внимание уделяется вопросам получения и использования органических удобрений для выращивания микоризованного стандартного посадочного материала. Органические удобрения могут совершенствоваться в зависимости от выращивания лесных пород.

Концентрации ингредиентов в органоминеральных субстратах должны обеспечивать получение свойств с максимальной влагоудерживающей способностью (функция отклика $y1$) и содержанием элементов питания (функция отклика $y2$). В связи с этим важно определить концентрации всех ингредиентов в субстрате [2].

Планирование эксперимента в задачах сорганоминеральными субстратами 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:

$$x1+x2+\cdots+xq=1,\ xi\ge 0\ (i=1,\ 2,\ ...,\ q),$$

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.

Увеличение числа ингредиентов в органоминеральных субстратах на одну единицу приводит к рассмотрению четырехкомпонентной смеси. В этом случае для определения координаты $x1$ какой-нибудь точки трехмерного симплекса – правильного тетраэдра – необходимо провести через нее плоскость, параллельную двухмерной грани тетраэдра с ребром пропорций третьего компонента, и взять отсекаемый этой плоскостью на оси $x1$ отрезок.

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.

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.

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 $yijj$ ($i<j$) т.д.

Таблица – 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

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.

Метод математического планирования эксперимента в исследованиях оптимального набора ингредиентов в субстратах в лабораторных условиях, а также в полевых условиях лесного питомника позволяет минимизировать количество проводимых опытов, получить математические модели, устанавливающие оптимальные концентрации целевых добавок композиционного состава для получения максимального лесоводственного и экологического эффекта.

Нами разработаны новые органические удобрения,которые используются в народном хозяйстве не только в Беларуси, но и в Казахстане и Монголии.

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

Список использованных источников

1. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. — М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. — 416 с.

2. ТКП 575-2015 (33090). Устойчивое лесоуправление и лесопользование. Наставление по выращиванию посадочного материала древесных и кустарниковых видов в лесных питомниках Республики Беларусь – Мн.: Минлесхоз, 2015 г. – 60 с.