10. Braun O. M. Nonlinear dynamics of the Frenkel-Kontorova model / O. M. Braun, Y. S. Kivshar // Physics Repts. — 1998. — Vol. 306. — P. 1–108.
11. Braun O. M. The Frenkel-Kontorova model / O. M. Braun, Y. S. Kivshar. — Berlin : Springer, 2004. — 427 p.
12. Feckan M. Traveling waves in Hamiltonian systems on 2D lattices with nearest neighbour interactions / M. Feckan, V. Rothos // Nonlinearity. — 2007. — Vol. 20. — P. 319–341.
13. Friesecke G. Geometric solitary waves in a 2D math-spring lattice / G. Friesecke, K. Matthies // Discrete and continuous dynamical systems. — 2003. — Vol. 3, №1. — P. 105–114.
14. Srikanth P. On periodic motions of two-dimentional lattices / P. Srikanth // Functional analysis with current applications in science, technology and industry. — 1998. — Vol. 377. — P. 118–122.

The article deals with infinite systems of differential equations that describe infinite system of nonlinear oscillators on 2D-lattice. It is obtained result on existence and uniqueness of global solution to the Cauchy problem in the case of cubic potential.

**Key words:** *nonlinear oscillators, 2D-lattice, Cauchy problem, global solution, cubic potential.*

Отримано: 21.03.2012

УДК 519.24+51-7

**В. І. Баранецький**, молодший науковий співробітник

Дрогобицький державний педагогічний університет
імені Івана Франка, м. Дрогобич

# ДИСПЕРСІЯ ПРОГНОЗОВАНИХ ЗНАЧЕНЬ ЯК КРИТЕРІЙ ОПТИМАЛЬНОСТІ ПОБУДОВИ КОМПОЗИЦІЙНИХ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ПЛАНІВ ДЛЯ ТРЬОХКОМПОНЕНТНИХ СПОЛУК

Описано використання дисперсії прогнозованого значення, як критерію оптимальності при виборі експериментальних планів. Наведено метод побудови композиційних матриць планування експериментів для трьохкомпонентних сполук. Отримано декілька композиційних матриць для експериментальних планів другого та третього порядків.

**Ключові слова:** *композиційні експериментальні плани, планування експерименту, дисперсія прогнозованого значення.*

Із бурхливим розвитком обчислювальної техніки побудова математичних моделей для дослідження задач у фізиці, хімії, біології, матеріалознавстві та інших областях науки є досить актуальною.

 

Класична концепція планування статистичних експериментів плідно використовується для розв'язання багатьох прикладних задач. У плануванні експериментів для розв’язку задач по діаграмах склад-властивість широко застосування набули плани Шеффе, Кіфера, Дрейпера–Лоуренса та і інші [1, с. 268–316].

Серед існуючих планів можна знайти такі, що задовольняють різним критеріям оптимальності планування експерименту, для різного числа факторів і з різною кількістю експериментальних точок, а також з необхідними характеристиками.

**Постановка задачі.** При побудові математичних моделей складних фізичних об'єктів і процесів, як правило, намагаються обмежитись поліномами 1-2 степеня. Проте, часто моделі потребують планів більш високих порядків. Це можна пояснити наявністю нелінійних залежностей між вхідними і вихідними параметрами об'єкту або процесу, а також вимогами щодо досягнення заданої точності результатів прогнозу побудованої моделі.

У багатьох випадках вдається розв’язати задачу, використовуючи вже існуючі плани, в інших випадках їх потрібно модифікувати, чи розбивати досліджувану область на локальні ділянки і досліджувати їх окремо. Одним із недоліків таких підходів є проведення дослідів із іншим співвідношенням компонентів, тобто втрата композиційності дослідів. Так, наприклад, при використанні D-оптимальних чи симплекс-ґраткових планів вищих порядків частково втрачається композиційність. Це призводить до збільшення кількості непотрібних експериментів та зайвих затрат. Використання ж композиційних матриць планування дає можливість усувати згадані недоліки.

У даній роботі для розв’язку задач по діаграмах склад-властивість при дослідженні локальних ділянок (коли всі експериментальні точки знаходяться всередині області дослідження) пропонується метод побудови композиційних планів для 3-х компонентних сполук.

**Побудова математичної моделі.** Оскільки точність прогнозування відклику неоднакова в різних точках симплекса, то як характеристику оптимальності планів використаємо дисперсію прогнозованого значення відклику.

Її можна визначити за законом накопичення помилок, адже вона, здебільшого, залежить від числа і розподілу паралельних дослідів між окремими точками плану. Збільшуючи кількість паралельних дослідів дисперсію $\sigma^2\{\hat{y}\}$ можна зробити досить малою. Проте на практиці число паралельних дослідів завжди обмежене і для полегшення розрахунків часто проводять однакову кількість паралельних дослідів для всіх експериментальних точок .

У такому випадку дисперсію прогнозованого значення відклику шукають за формулою:

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

де $\sigma^2\{y\}$ — дисперсія відтворюваності, $r$ — число паралельних дослідів, $\xi$ — деяка функція, що залежить лише від розташування експериментальних точок. Оскільки математична модель паралельних дослідів не передбачає, то $r = 1$.

Для симплекс-ґраткових та D-оптимальних планів формули для розрахунку регресійних коефіцієнтів апроксимуючих поліномів (зведених поліномів Шеффе) отримані з урахуванням того, що вони є лінійними функціями відкликів у вершинах симплекса [1, с. 275–281]. Формули для розрахунку дисперсії прогнозованих значень отримують із самих апроксимуючих поліномів.

Коли ж експеримент проводиться тільки з $q$-компонентними сполуками, або використовуються ненасичені чи перенасичені плани оцінку коефіцієнтів відповідних поліномів та дисперсії прогнозованих значень можна провести використовуючи метод найменших квадратів [3].

Зважаючи на те, що часто експериментатору важко оперувати складними сполуками із дробовими співвідношеннями компонентів та досить значним збільшенням дисперсії у вузлах симплекса, обмежимось значеннями $x_1, x_2, x_3 \le 0.8$.

При побудові композиційних планів у даній роботі використовуються формули координат точок планів Дрейпера–Лоуренса [2, с. 260]:

$$\left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}p\right), \left(\pm\frac{1}{2}p, -\frac{\sqrt{3}}{6}p\right), \left(0, -\frac{1}{\sqrt{3}}g\right), \left(\pm\frac{1}{2}g, \frac{\sqrt{3}}{6}g\right) \qquad (1)$$

Так, підставивши в (1) $0.1 \le p \le 0.85$ і $0.05 \le g \le 0.45$ отримаємо декілька матриць планування другого порядку. Іншими словами, проводиться табуляція формул (1), змінюючи параметри $p$ та $g$ із певним заданим кроком. Крок вибирається таким, щоб у значенні експериментальних точок число значущих знаків після коми не було надто великим.

Вибірка найбільш оптимальних матриць проводилась за критерієм $S_{\xi_{1.4}} - S_{\xi_{0.6}} \to \max$, де $S_{\xi_{1.4}}$ та $S_{\xi_{0.6}}$ — площі фігур, обмежені границями досліджуваної області (сторонами трикутника $X_1 X_2 X_3$) та лініями $\xi = 1.4$ і $\xi = 0.6$ відповідно.

Графічне представлення ізоліній $\xi$ для однієї з таких матриць наведено на рис. 1, а значення експериментальних точок — в таблиці 1.

Для побудови композиційного плану вищого порядку фіксуються координати точок одного з найбільш оптимальних планів та додаються нові. І знову, шляхом вибірки, отримуємо найбільш оптимальні матриці (при заданих параметрах $\xi$).

Таблиця 1

*Значення експериментальних точок для* $p = 0.7$ *і* $g = 0.44$

| **n** | **x1** | **x2** | **x3** | **ζ** |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 0,1 | 0,1 | 0,8 | 1 |
| 2 | 0,1 | 0,8 | 0,1 | 1 |
| 3 | 0,8 | 0,1 | 0,1 | 1 |
| 4 | 0,48 | 0,48 | 0,04 | 1 |
| 5 | 0,04 | 0,48 | 0,48 | 1 |
| 6 | 0,48 | 0,04 | 0,48 | 1 |

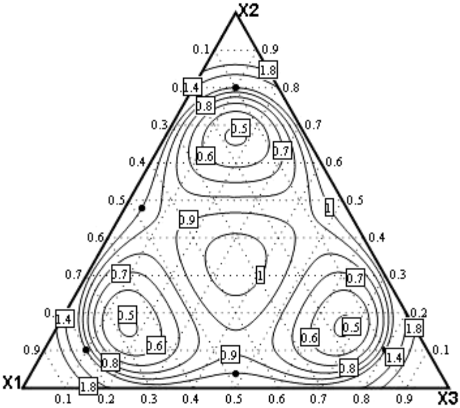


***Рис. 1.*** *Ізолінії* $\xi$ *для плану 2-го порядку*

На рисунку 2 наведені лінії рівних значень $\xi$ для плану 3-го порядку, а матриця планування для цього плану — у таблиці 2.

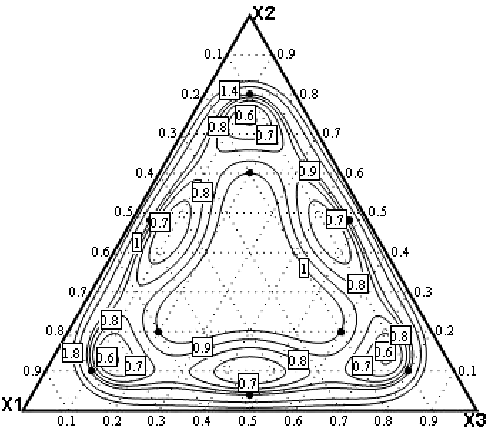


***Рис. 2**. Ізолінії* $\xi$ *для плану 3-го порядку*

Таблиця 2

*Значення експериментальних точок для* $p_1 = 0.7$, $p_2 = 0.4$ *і* $g = 0.44$

| **n** | **x1** | **x2** | **x3** | ζ |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 0.1 | 0.1 | 0.8 | 1 |
| 2 | 0,1 | 0.8 | 0.1 | 1 |
| 3 | 0,8 | 0.1 | 0.1 | 1 |
| 4 | 0.48 | 0.48 | 0.04 | 1 |
| 5 | 0.04 | 0.48 | 0.48 | 1 |
| 6 | 0.48 | 0.04 | 0.48 | 1 |
| 7 | 0.2 | 0.2 | 0.6 | 1 |
| 8 | 0.2 | 0.6 | 0.2 | 1 |
| 9 | 0.6 | 0.2 | 0.2 | 1 |

Таким чином можна отримати композиційні матриці планування і для вищих порядків.

Наведений метод побудови композиційних планів може бути застосований не лише тоді, коли експериментальні точки знаходяться всередині досліджуваної області, а й для випадку коли вони розташовуються на гранях симплекса.

## Список використаних джерел:

1. Ахназарова С. Л. Оптимизация эксперимента в химической технологии / С. Л. Ахназарова, В. В. Кафаров. — М. : Высш. школа, 1985. — 327 с.
2. Зедгинидзе И. Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем / И. Г. Зедгинидзе. — М. : Наука, 1976. — 390 с.
3. Баранецький В. І. Побудова апроксимаційних поліномів та ізоліній дисперсій передбачених значень із використанням систем комп’ютерної математики / В. І. Баранецький, І. В. Гадзаман // Системний аналіз та інформаційні технології : матеріали Міжнародної науково-технічної конференції SAIT 2011, Київ, 23-28 травня 2011 р. / ННК «ІПСА» НТУУ "КПІ". — К. : ННК «ІПСА» НТУУ "КПІ", 2011. — С. 51.

The using of dispersion predicted value as a criterion of optimality at the selection of experimental plans is described. The method of construction of the composition matrices of design of experiments for three factors is considered. A few composition matrices for experimental design for the second and third orders are obtained.

**Key words:** *composition experimental models, design of experiment, dispersion of the predicted value.*

Отримано: 19.03.2012