



рентгеноспектральних установках, які дозволяють урахувати вплив хімічного складу стандартних зразків та аналізованих проб», тобто, кажучи мовою даної роботи – урахування міжелементних ефектів.

Результати аналізу складу вказаного КСЗ представлені на рис. 1 (склад,  $|r|$ -матриця та діаграма нормованих до границь  $\{-1, +1\}$  концентрацій). Перш за все звертає на себе увагу наявність значних кореляційних зв'язків концентрацій між парами елементів  $Mn - Cr$ ,  $Mn - Ni$ ,  $Cr - Ni$ ,  $C - Mo$ ,  $Si - Mo$ ,  $C - V$ ,  $W - Cu$  і особливо  $C - Si$ ,  $Mo - V$ . Крім того в комплекті

має місце наявність протяглих пустих ділянок на заданих інтервалах концентрацій, які перевищують половину всього заданого інтервалу елементів  $C$ ,  $Si$ ,  $Cr$ ,  $Ni$ ,  $Mo$ ,  $V$ ,  $Ti$ , що позбавляє математичний апарат необхідної інформації про належний хід апроксимації в цих ділянках [3]. В світлі всього вищесказаного все це ставить під сумнів обґрунтованість вказаної рекомендації, так що при застосуванні вказаного КСЗ можна прогнозувати неминучість появи значних труднощів при досягненні очікуваних результатів.

#### КСЗ сталі ПГ19а – ПГ23а

Склад, %											
	C	Si	Mn	Cr	Ni	Mo	V	Ti	W	Cu	Nb
1	0,064	0,90	5,63	24,5	17,73	0,166	0,407	0,14	0,206	0,2	0,108
2	0,064	0,81	15,77	14,35	0,673	0,089	0,166	0,093	0,007	0,265	0,75
3	0,169	1,95	6,39	15,53	7,52	0,880	1,71	0,18	0,2	0,170	0,48
4	0,054	0,63	13,41	13,25	3,94	0,121	0,125	0,33	0,137	0,358	0,38
5	0,045	0,49	8,74	18,5	1,98	0,401		0,21	0,30	0,099	0,24

$ r $ -матриця										
	Si	Mn	Cr	Ni	Mo	V	Ti	W	Cu	Nb
C	<b>0,922</b>	0,431	0,177	0,164	<b>0,870</b>	<b>0,894</b>	0,158	0,046	0,211	<b>0,681</b>
Si		0,460	0,093	0,264	<b>0,820</b>	<b>0,859</b>	0,232	0,007	0,193	<b>0,598</b>
Mn			<b>0,717</b>	<b>0,735</b>	<b>0,590</b>	0,642	0,093	<b>0,773</b>	<b>0,663</b>	0,069
Cr				<b>0,817</b>	<b>0,870</b>	0,003	0,371	<b>0,500</b>	<b>0,504</b>	<b>0,634</b>
Ni					0,036	0,130	0,185	0,297	0,130	0,287
Mo						<b>0,993</b>	0,015	0,462	<b>0,559</b>	<b>0,698</b>
V							0,104	0,443	<b>0,578</b>	<b>0,634</b>
Ti								0,302	0,396	0,552
W									<b>0,705</b>	0,128
Cu										0,121

#### Діаграма розподілу нормованих концентрацій

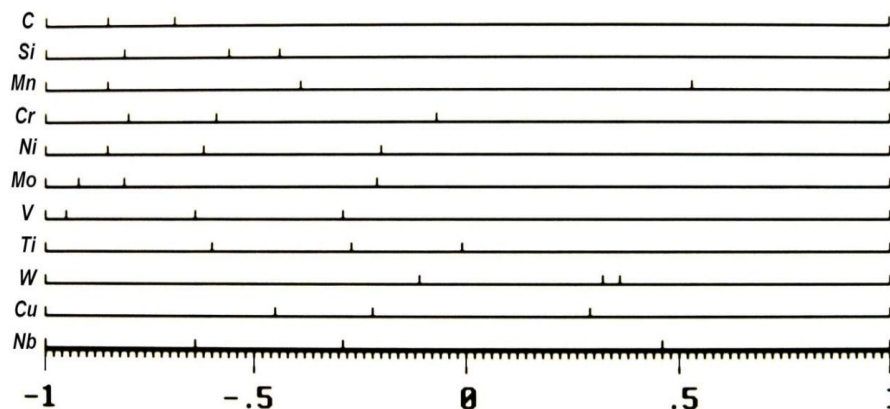


Рис. 1. Склад,  $|r|$ -матриця та діаграма розподілу концентрацій прототипу

Подібна ситуація аналізувалась в роботах [1 – 3], в результаті чого сформульовані як обов'язкові дві основні вимоги до складу КСЗ, призначеного для спектрального аналізу з урахуванням міжелементних ефектів: рівномірність розподілу концентрацій всіх елементів вздовж заданих діапазонів та взаємна ортогоналізація всіх пар вектор-стовпців концентрацій всіх елементів. Остання вимога визначається як мінімізація до нуля всіх елементів відповідної матриці коефіцієнтів кореляції  $|r|$ . В якості математичних моделей таких КСЗ пропонуються знайдені методом комбінаторики натуральні циклічні ортогоналізовані латинські квадрати.

Спробуємо скласти відповідний цим двом вимогам склад КСЗ, прототипом якого візьмемо розглянутий вище КСЗ: незмінними залишимо як набір елементів, так і задані в ньому верхні границі діапазонів концентрацій.

Взаємна ортогональність одинадцяти вектор-стовпців концентрацій та фіктивного вектора  $x_0 = 1$ , відповідного вільному члену шуканого полінома

коефіцієнтів регресії, може бути здійснена лише в гіперпросторі не менш ніж дванадцятого порядку. А оскільки порядок гіперпростору КСЗ визначається числом стандартних зразків [1], то шуканий КСЗ з необхідністю повинен складатись не менш як з дванадцяти зразків. Тому математичною моделлю комплекту був вибраний натуральний циклічний латинський квадрат дванадцятого порядку, побудований на твірній перестановці

$$P = \begin{Bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 \\ 1 & 2 & 6 & 11 & 8 & 4 & 10 & 9 & 3 & 12 & 5 & 7 \end{Bmatrix},$$

$|r|$ - матриця якого складається виключно з елементів 0,084, 0,105 та 0,91.

Всі інші деталі побудови шуканого КСЗ не потребують спеціальної уваги. В результаті був побудований КСЗ, склад якого, його  $|r|$ -матриця та діаграма розподілу нормованих концентрацій представлені на рис. 2.

### Оптимізований КСЗ

Склад, %											
	C	Si	Mn	Cr	Ni	Mo	V	Ti	W	Cu	Nb
1	0,168	1,76	9,17	4,08	7,35	0,657	0,42	0,112	0,25	0,03	0,32
2	0,154	1,12	2,62	10,20	13,23	0,219	0,56	0,28	0,025	0,24	0,24
3	0,098	0,32	6,55	18,36	4,41	0,292	1,40	0,028	0,20	0,18	0,48
4	0,028	0,80	11,79	6,12	5,88	0,73	0,14	0,224	0,15	0,36	0,44
5	0,07	1,44	3,93	8,16	14,70	0,073	1,12	0,168	0,30	0,33	0,28
6	0,126	0,48	5,24	20,40	1,47	0,584	0,84	0,336	0,275	0,21	0,08
7	0,042	0,64	13,10	2,04	11,76	0,438	1,68	0,308	0,175	0,06	0,20
8	0,056	1,60	1,31	16,32	8,82	0,876	1,54	0,196	0,05	0,15	0,36
9	0,14	0,16	10,48	12,24	17,64	0,803	0,98	0,056	0,125	0,27	0,12
10	0,014	1,28	7,86	24,48	16,17	0,511	0,28	0,14	0,225	0,09	0,16
11	0,112	0,96	15,72	22,44	10,29	0,146	0,70	0,252	0,075	0,12	0,40
12	0,084	1,92	14,41	14,28	2,94	0,365	1,26	0,084	0,100	0,30	0,04

### Діаграма розподілу нормованих концентрацій

$ r $ - матриця										
	Si	Mn	Cr	Ni	Mo	V	Ti	W	Cu	Nb
C	0,084	0,105	0,084	0,091	0,084	0,105	0,084	0,091	0,084	0,105
Si		0,084	0,105	0,084	0,091	0,084	0,105	0,084	0,091	0,084
Mn			0,084	0,105	0,084	0,091	0,084	0,105	0,084	0,091
Cr				0,084	0,105	0,084	0,091	0,084	0,105	0,084
Ni					0,084	0,105	0,084	0,091	0,084	0,105
Mo						0,084	0,105	0,084	0,091	0,084
V							0,084	0,105	0,084	0,091
Ti								0,084	0,105	0,084
W									0,084	0,105
Cu										0,084

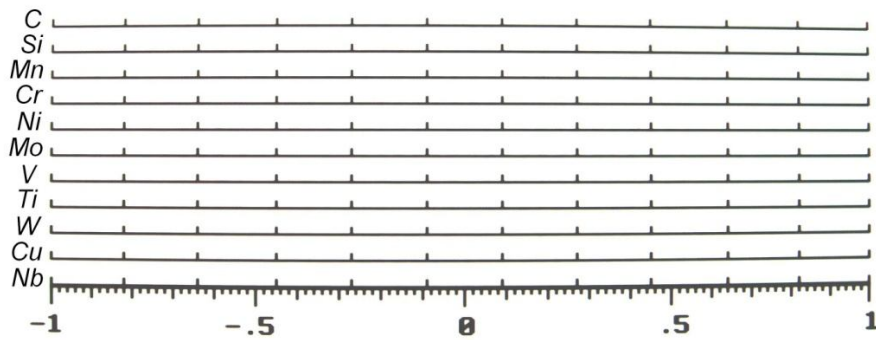


Рис. 2. Склад,  $|r|$ - матриця оптимізованого КСЗ та діаграма розподілу нормованих концентрацій

Порівнюючи одержаний КСЗ з прототипом, неважко переконатися, що в ньому дійсно має місце як рівномірність розподілу концентрацій всіх елементів по заданих діапазонах, так і те, що всі його вектор-стовпці концентрацій утворюють майже повністю ортогоналізовану систему. Ця властивість комплексу забезпечує йому перевагу в тім, що при такому ортогональному плануванні вся система рівнянь розпадається на ряд незалежних лінійних рівнянь, з яких знаходять коефіцієнти регресії з мінімальними дисперсіями, причому фактори з незначущими коефіцієнтами можна зразу ж відкидати без перерахунку значущих коефіцієнтів, що залишилися, як це необхідно робити при неортогональному плануванні [5].

Специфіка структури плану як натурального латинського квадрату автоматично забезпечує рівномірність подачі інформації аналітичних сигналів вздовж заданих діапазонів концентрацій.

Все вищесказане свідчить про те, що планування складу стандартних зразків комплексу з застосуванням планів, побудованих по принципу натуральних ортогоналізованих циклічних латинських квадратів як максимально компактних по складу дозволяє досягти максимального рівня результатів при затраті мінімальних засобів.

На закінчення слід зазначити, що сучасні загальноприйняті методи виготовлення стандартних зразків нездатні в повній мірі відтворити склад зразків, який вимагає запропонована дана математична модель.

Найбільш перспективним способом належного їх виготовлення може бути метод порошкової металургії.

#### ЛІТЕРАТУРА

1. Северин Э. Н. Ортогонализированный равномерно распределенный план комплекта стандартных образцов для спектрального анализа материалов черной металлургии. Днепропетровск: Изд. Центрального Совета НТО металлургов Украины. «Пороги», 1993. — 36 с.
2. Северин Э. Н., Буравлев Ю. М. Математическое моделирование поиска оптимального плана эксперимента при количественном спектральном анализе с нелинейной градуировочной характеристикой // Математическое моделирование. — 2007. — 1 (16). — С. 61 — 64.
3. Северин Э. Н., Буравлев Ю. М. Ортогонализированный латинский квадрат как математическая модель оптимального плана эксперимента при количественном спектральном анализе многокомпонентных систем // Математическое моделирование. — 2008. — 1 (18). — С. 68—74.
4. Каталог утвержденных стандартных образцов. ЗАО «Институт стандартных образцов». — М.: Металлургия. — 2008.
5. Налимов В. В., Голикова Т. И. Логические основания планирования эксперимента. М.: Металлургия. — 1981. — 152 с.