



УДК 677.072.6

## ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ ПОБУДОВИ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ ФОРМУВАННЯ МІКРОФІБРИЛЯРНИХ СТРУКТУР

Студ. Д.В. Голодов, гр. МгЗІТ-18(л)-18  
Науковий керівник доц. В.Г. Резанова  
Київський національний університет технологій та дизайну

**Мета і завдання.** Мета роботи – математичне моделювання та розробка програмного забезпечення для дослідження процесів волокнуутворення.

Для досягнення мети необхідно вирішити наступні задачі: відповідно до теорії планування експерименту, розробити план для даної предметної області. За результатами експериментів побудувати математичні моделі залежності критеріїв оптимізації від вхідних факторів задачі.

**Об'єкт та предмет дослідження.** Об'єкт дослідження – Об'єкт дослідження – процес утворення мікрофібрилярних структур. Він реалізується у відповідних умовах при течії розплавів сумішей полімерів. У його основі лежать мікрореологічні процеси - такі, як деформація крапель компоненту дисперсної фази та об'єднання рідких струменів у напрямку течії.

Предмет дослідження – планування експерименту для даного процесу та його математичне моделювання.

**Результати дослідження.** Ступінь використання полімерів є одним з важливих критеріїв оцінки рівня науково-технічного прогресу в країні. Світовий досвід свідчить, що раціональним рішенням проблеми створення нових матеріалів із унікальними характеристиками є змішування полімерів.

Формування мікрОВОЛОКОН переробкою розплаву суміші полімерів – простий ефективний метод одержання комплексних ниток і штапельних волокон з діаметрами від десятих долей до декількох мікрометрів [1, 2]. Одним із класичних методів впливу на міжфазні явища є введення третього компоненту – компатибілізатора, що сприяє підвищенню взаємодії між фазами та утворенню більш тонкої стабільної дисперсії і, як наслідок, приводить до покращення процесу волокнуутворення. Дослідження описаних явищ здійснюється в основному дослідним шляхом, теоретичні методи використовуються суттєво менше. Але математичне моделювання цих процесів є важливим з точки зору можливості отримання теоретично обґрунтованих практичних результатів.

Побудову математичної моделі залежності критеріїв оптимізації від вхідних факторів можна здійснити, застосувавши теорію планування експерименту [3].

Експеримент, в якому реалізуються усі можливі поєднання рівнів всіх незалежних змінних (факторів) - це повний факторний експеримент. Математична модель, що може бути побудована за результатами експериментів і описує процеси, що відбуваються при гідролізі залежно від вхідних факторів, знаходимо у вигляді поліному неповного третього порядку, оскільки дані літератури свідчать, що такі функції досить якісно описують поведінку трикомпонентних сумішевих систем [1, 2]. Відповідно до методики планування експерименту із сумішами використовуємо симплексно-ґратковий план [3]. Останній забезпечує рівномірний розкид експериментальних точок на області, що являє собою симплекс відповідної розмірності (для трикомпонентної суміші це правильний трикутник на площині). Оскільки на вміст компонентів суміші умовами задачі накладаються певні обмеження, на повному симплексі програмним чином виділяємо підобласть, що відповідає цим обмеженням, а потім всередині виділеної підобласті обираємо область, «подібну» вихідному симплексу, тобто трикутник (хоча і не обов'язково правильний). [3]:

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

де:  $\beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ijk}$  – невідомі коефіцієнти поліному;

$x_1, x_2, x_3$  – фактори (вхідні параметри) процесу, а саме:  $x_1$  – вміст волокно утворюючого компоненту;  $x_2$  – вміст матричного компоненту;  $x_3$  – вміст компатибілізатора;

$y_1, y_2, y_3$  – вихідні параметри процесу, а саме:  $y_1$  – середній діаметр мікрволокон;  $y_2$  – масова частка безперервних волокон;  $y_3$  – масова частка коротких волокон.

Перетворимо модель до вигляду узагальненої лінійної залежності:

$$\hat{y} = \beta_1 z_1 + \beta_2 z_2 + \beta_3 z_3 + \beta_{12} z_{12} + \beta_{13} z_{13} + \beta_{23} z_{23} + \beta_{123} z_{123},$$

де  $z_{12}=x_1x_2$ ;  $z_{13}=x_1x_3$ ;  $z_{23}=x_2x_3$ ;  $z_{123}=x_1x_2x_3$ .

Невідомі коефіцієнти, які необхідно обчислити за результатами експерименту, будемо шукати за методом найменших квадратів (МНК) в матричному вигляді [3].

Нехай

$$X = \begin{pmatrix} x_{00} & x_{01} & \dots & x_{0p} \\ x_{10} & x_{11} & \dots & x_{1p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n0} & x_{n1} & \dots & x_{np} \end{pmatrix} - \text{матриця плану, де } n - \text{кількість точок плану, } p - \text{кількість}$$

факторів;

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix} - \text{вектор-стовпчик значень залежної змінної (параметра оптимізації), що}$$

спостерігаються у певних точках плану;

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix} - \text{вектор-стовпчик невідомих коефіцієнтів.}$$

Тоді, згідно з МНК:  $b = (X'X)^{-1} X'Y$ , де «штрих» означає операцію транспонування.

Знайдені за допомогою програмного забезпечення [4, 5] коефіцієнти – компоненти вектора  $b$  – вказують на силу впливу окремих чинників на результат. Побудовану модель необхідно перевірити на адекватність, після чого можна використовувати її для подальших наукових досліджень.

**Висновки.** Розробка програмного забезпечення, що реалізує всі вищеописані кроки, дозволить раціоналізувати роботу дослідника. З'явиться можливість без проведення громіздких ручних розрахунків будувати різні моделі і порівнювати їх. В кінцевому рахунку – застосування математичних та інформаційних методів відкриває можливості для подальших наукових досліджень та отримання важливих практичних результатів. Зокрема – математичні моделі можуть бути використані для оптимізації параметрів процесу та для прогнозування його поведінки у майбутньому.

#### ЛІТЕРАТУРА

1. Rezanova N.M., Rezanova V.G., Plavan V.P., Viltaniuk O.O. The influence of nano-additives on the formation of matrix-fibrillar structure in the polymer mixture melts and on the properties of complex threads // *Vlákna a textil (Bratislava, Slovak Republic)* - №2, 2017. - p. 37-42
2. Rezanova N.M., Plavan V.P., Rezanova V.G., Bohatyrov V.M. Regularities of producing of nano-filled polypropylene microfibers // *Vlákna a Textil*. –2016. – No 4. – P. 3-8.
3. Сидняев Н. Теория планирования эксперимента и анализ статистических данных. – М.: Юрайт, 2012, 400 с.
4. Stroustrup B. Programming: Principles and Practice Using C++ (2nd Edition). Addison-Wesley Professional, 2014. – 1312 p.
5. Мейерс С. Эффективный и современный C++. М.: Вильямс, 2016. - 304 с.