

**Резанова В.Г., Куценко С.І.**

*Київський національний університет технологій та дизайну*

### **РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ**

**Анотація.** Досліджено планування експерименту для сумішей. Враховано особливості планування із попередньою трансформацією симплексної підобласті в силу накладених обмежень на вміст компонентів. Розроблено програмне забезпечення для інтерактивного планування експерименту для трикомпонентної суміші та розрахунку робочого плану експерименту.

**Ключові слова:** програмне забезпечення; інтерактивне планування експерименту; суміш; підобласть; матриця плану.

**Rezanova V.H., Kutsenko S.I.**

*Kyiv National University of Technologies and Design*

### **SOFTWARE DEVELOPMENT FOR EXPERIMENT PLANNING**

**Abstract.** The planning of the experiment for mixtures is investigated. The features of planning with preliminary transformation of a simplex sub-area due to the imposed restrictions on the content of components are taken into account. Software for interactive experiment planning for a three-component mixture and calculation of a work plan of experiment has been developed.

**Keywords:** software; interactive experiment planning; mixture; sub-area; plan matrix.

**Вступ.** У наш час важливим завданням для науки є проведення теоретичних та експериментальних досліджень, що відкривають принципово нові шляхи одержання матеріалів з заданими властивостями та створення і впровадження в промисловість нових безвідходних екологічно чистих малоенергоємних технологій. Ступінь використання полімерних матеріалів є одним із важливих критеріїв оцінки рівня науково-технічного прогресу в країні. Вітчизняний і світовий досвід показує, що найбільш доцільним вирішенням проблеми створення полімерних матеріалів з заданими властивостями є не розробка нової сировини (як правило, дорогої і дефіцитної), а модифікація промислово освоєних полімерів. Це зумовлено тим, що шляхи модифікації практично невичерпні через велику кількість уже існуючих полімерів, а також способів і методів впливу на них. Існують фізичні, хімічні та фізико-хімічні методи модифікації. До останніх належить використання сумішей полімерів, які давно викликали науковий та практичний інтерес.

Простим, доступним та найефективнішим методом їх модифікації є змішування полімерів. При змішуванні досягається не просто поєднання властивостей компонентів в одному виробі, а часто проявляються синергічні ефекти. З часом використання сумішей полімерів започаткувало одержання волокон малого діаметру (від кількох мікрометрів до десятих часток мікрометру) – ультратонких синтетичних волокон або мікрвоволокон. Мова іде про абсолютно новий процес волокноутворення одного полімеру суміші під дією реологічних сил в середовищі іншого (матричного), коли кількість філаментів нитки не визначається кількістю отворів у фільтрі [1–4]. Цей процес на відміну від загальноприйнятих методів формування хімічних волокон комплексна нитка з десятків і сотень тисяч мікрвоволокон утворюється при продавлюванні розплаву через один отвір. Після екстракції із композиційного екструдату матричного полімера інший компонент (волокноутворюючий) залишається у вигляді пучка (комплексної нитки) з надтонких волокон, чітко орієнтованих в напрямку екструзії. Специфіка цього явища полягає в тому, що волокноутворення відбувається не після виходу розплаву з формуючого отвору (як за традиційними технологіями), а ще у вхідній зоні формуючого отвору (фільтри).

Слід враховувати, що волокноутворення протікає у в'язкій полімерній матриці, а не у низькомолекулярних чи газових середовищах, як за сучасними технологіями.

Дослідження явища волокноутворення має великий науковий інтерес з точки зору створення загальної теорії процесів переробки сумішей полімерів, визначення ролі вхідних процесів, які відіграють вирішальну роль не тільки при переробці розплавів сумішей, але й при переробці розплавів індивідуальних полімерів. Зазвичай при створенні полімерних композицій керуються практичними міркуваннями, тобто емпіричний пошук випереджає розвиток теорії. Однак лише науково обґрунтований підхід до вибору хімічної природи полімерів, їх співвідношення, знання закономірностей зміни макрореологічних властивостей суміші від її мікроструктури дасть можливість одержувати полімерні композиції з заданими властивостями [1–4]. За відсутності фундаментальної науки дослідники змушені кожного разу розглядати безліч варіантів, покладаючись при цьому на власний досвід та інтуїцію. Вивчення механізмів процесів та явищ, що спостерігаються при переробці розплавів сумішей полімерів, є важливим і актуальним ті підлягають подальшим дослідженням. Компатибілізація – це найефективніший метод регулювання процесів структуроутворення в сумішах полімерів. Для реалізації явища волокноутворення, полімери мають бути термодинамічно несумісні. Тому необхідно покращити сумісність полімерів. В літературі несумісні компатибілізовані суміші полімерів називаються полімерними сплавами, а сама компатибілізація розглядається як явище модифікації міжфазової поверхні і морфології суміші полімерів.

**Постановка завдання.** Полімерні дисперсії є складними об'єктами для дослідження. Тому для визначення оптимальних параметрів переробки та встановлення взаємозв'язку між складом суміші і процесами структуроутворення як факторами, що визначають властивості виробів на їх основі, необхідно проведення значної кількості багатофакторних експериментів. Останні пов'язані зі значними затратами часу і матеріалів, оскільки вплив кожного фактора досліджується окремо, при фіксованих значеннях інших параметрів. При цьому часто параметри мають не менше 4–5 різних значень (рівнів варіювання). Таким чином, для повного дослідження об'єкта слід розглянути велику кількість комбінацій навіть без урахування паралельних дослідів. Іноколи число дослідів штучно скорочують шляхом зменшення об'єму досліджуваного факторного простору або числа рівнів варіювання факторів. В обох випадках зменшується ступінь надійності рішень, які приймаються за результатами експериментів. Одним із шляхів, що дозволяє вести наукові дослідження прискореними темпами і знаходити рішення максимально наближені до оптимальних з мінімальними затратами, є використання математичних методів планування і аналізу експеримента.

**Результати досліджень.** Планування експерименту – процедура вибору числа та умов проведення дослідів, необхідних та достатніх для вирішення задачі досліджень із заданою точністю.

Розглянемо планування експерименту для систем, що являють собою суміші  $q$  різних компонентів [5]. Змінні  $x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, q$ ) таких систем являють собою пропорції (відносно вмісту)  $i$ -тих компонентів суміші і задовольняють умові:

$$\sum_{1 \leq i \leq q} x_i = 1 \quad (x_i \geq 0) \quad (1)$$

Геометричне місце точок, що задовольняють умові (1), являє собою  $(q-1)$  – мірний правильний симплекс (трикутник для  $q = 3$ ; тетраedr для  $q = 4$  і т.д.). Кожній точці такого симплекса відповідає суміш певного складу і навпаки, будь-якій комбінації відносних вмістів  $q$  компонентів відповідає певна точка симплекса.

В подальшому ми будемо оперувати факторним простором у вигляді симплексів, тому доцільно перейти від звичайних декартових координат до спеціальної симплексної системи, в якій відносні вмісти кожного компонента відкладається вздовж відповідних граней симплекса. На вершинах симплекса кожне  $x_i = 1$ , інші значення визначаються за лініями рівня.

Математична модель задачі склад-властивість може бути вирішена за допомогою побудови шуканої функції у вигляді поліному:

$$\hat{y} = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i x_i + \sum_{m=2}^n \left\{ \sum_{1 \leq i \leq j \leq q} \beta_{ij}^{(m)} x_i x_j (x_i - x_j)^{m-2} \right\} + \sum_{m=3}^n \left\{ \sum_{1 \leq i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_m \leq q} \beta_s x_{i_1}^{s_1} x_{i_2}^{s_2} \dots x_{i_m}^{s_m} \right\} \quad (2)$$

де  $s_1 + s_2 + \dots + s_m = n$ .

Для оцінки коефіцієнтів приведенного полінома (2) було запропоновано плани, що забезпечують рівномірний розкид експериментальних точок по  $(q-1)$ -мірному симплексу [5]. Точками таких планів є вузли  $\{q, n\}$  – симплексних ґраток. В  $\{q, n\}$  – ґратці для кожного фактора (компонента) використовується  $(n+1)$  рівнорозміщених рівней в інтервалі від 0 до 1  $\left(x_i = 0, \frac{1}{n}, \frac{2}{n}, \dots, 1\right)$  і беруться різноманітні їх комбінації. Так, число таких комбінацій  $C_{q+n-1}^n$  дорівнює числу коефіцієнтів в приведенному поліномі, що можна отримати з (2) з урахуванням умови (1). Набір точок  $(x_{1u}, x_{2u}, \dots, x_{qu})$ ,  $u = 1, 2, \dots, N = C_{q+n-1}^n$ , де  $x_{iu} = 0, \frac{1}{n}, \frac{2}{n}, \dots, 1$ ,  $\sum_{1 \leq i \leq q} x_{iu} = 1$  утворює насичений симплексно-ґратковий план  $\{q, n\}$ .

Планування із попередньою трансформацією симплексної підобласті.

При розв'язанні  $q$  – компонентних сумішевих задач часто необхідно дослідити лише  $(q-1)$ -вимірну симплексну підобласть повної  $(q-1)$ -вимірної області [5]. Підобласть може бути задана обмеженнями на область зміни всіх компонентів, наприклад,  $x_i \geq q_i$  ( $i = 1, 2, \dots, q$ ). В цьому випадку безпосереднє застосування описаних вище методів є неможливе, оскільки порушується умова  $0 \leq x_i \leq 1$ . Тому попередньо роблять трансформацію підобласті шляхом переходу до нової системи координат  $(z_1, z_2, \dots, z_q)$ . При цьому в  $z$  – координатах виконуються такі умови:

$$0 \leq z_i \leq 1, i=1, 2, \dots, q; z_1^{(u)} + z_2^{(u)} + \dots + z_q^{(u)} = 1, \quad (3)$$

де  $u$  – будь-яка точка підобласті.

Трансформуюча залежність між координатними системами  $(x_1, x_2, \dots, x_q)$  і  $(z_1, z_2, \dots, z_q)$ , що забезпечує, задається матричним рівнянням  $X = AZ$ , в розгорнутому вигляді:

$$\begin{pmatrix} x_1^{(u)} \\ x_2^{(u)} \\ \dots \\ x_q^{(u)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & \dots & x_1^{(q)} \\ x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & \dots & x_2^{(q)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_q^{(1)} & x_q^{(2)} & \dots & x_q^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1^{(u)} \\ z_2^{(u)} \\ \dots \\ z_q^{(u)} \end{pmatrix} \quad (4)$$

Тут елементи матриці  $A$  – координати вершин симплекса;  $x_i^{(u)}$  і  $z_i^{(u)}$  – вихідні і нові координати  $u$ -ої трансформованої точки.

Відносно нових змінних  $z$  можуть бути побудовані всі плани, що використовувались для повного симплекса. Однак, реалізація експерименту в таких умовних планах неможлива. Для проведення експерименту необхідно представлення експериментальних складів в  $x$ -координатах. Таким чином отримуємо робочий план експерименту.

Розроблене програмне забезпечення [6–12] реалізує всі описані кроки для трикомпонентної суміші. При цьому симплекс буде являти собою правильний трикутник на площині (рис. 1). На вершинах трикутника кожний  $x_i = 1$ , інші значення визначаються за лініями рівня.

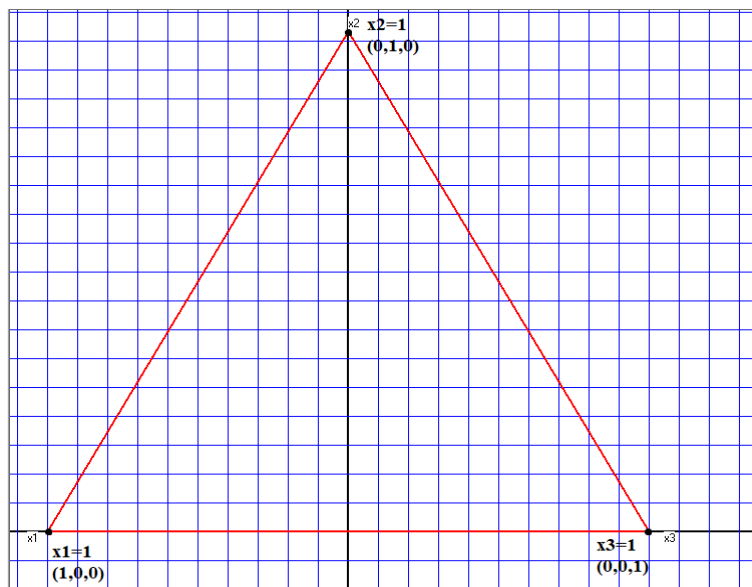


Рис. 1. Програмне зображення симплекса

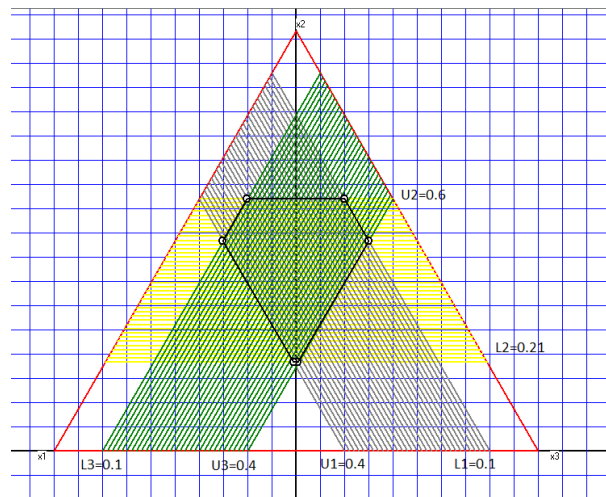
Часто на практиці трапляються ситуації, коли деякі компоненти суміші  $x_i$  не можуть варіюватись в межах від 0 до 1. Натомість деякі або всі пропорції компонентів обмежуються нижньою або верхньою межею. Ці обмеження можуть бути записані як

$$0 \leq Lb_i \leq x_i \leq Ub_i \leq 1, \quad 1 \leq i \leq q \quad (5)$$

де  $Lb_i$  – нижня межа;

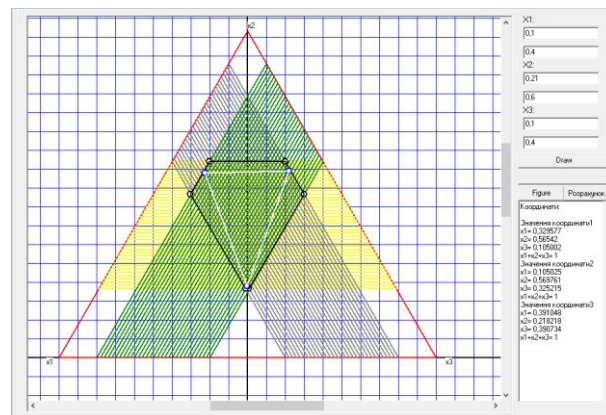
$Ub_i$  – верхня межа  $i$ -го компонента.

В результаті накладання обмежень на всі три компоненти суміші, отримаємо факторний простір у вигляді області неправильної форми (рис. 2).



**Рис. 2. Програмне зображення підобласті за обмеженнями на вміст компонентів суміші**

В побудованій фігурі необхідно виділити підобласть трикутної форми, яка найбільш повно охоплює її. Це користувачу пропонується зробити інтерактивно шляхом обрання точок всередині отриманої фігури. В результаті це буде трансформована підобласть для пошуку розв’язку задачі (рис. 3).



**Рис. 3. Програмне зображення трансформованої підобласті**

Для розробки моделі, яка описує процеси структуроутворення ПП в матриці СПА залежно від складу вхідної суміші, використовуємо, наприклад, поліном неповного третього порядку, оскільки така модель є найбільш прийнятною для розв’язку задач для трикомпонентних систем:

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3 \quad (6)$$

де  $\beta$  – невідомі коефіцієнти.

Матриця плану для побудови такої моделі на повному симплексі має вигляд:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{pmatrix}$$

Після програмного перерахунку за (4) отримаємо робочий план експерименту:

N°	X1	X2	X3
1	0,1050022	0,5654204	0,3295772
2	0,3252147	0,5697605	0,1050247
3	0,3907343	0,2182180	0,3910475
4	0,2151084	0,5675905	0,2173009
5	0,2478683	0,3918192	0,3603124
6	0,3579745	0,3939892	0,2480361
7	0,2736504	0,4511330	0,2752165

Рис. 3. Отримана програмним чином матриця робочого плану експерименту

Провівши експерименти за отриманим планом, зможемо знайти коефіцієнти моделі (6) і використовувати її в подальших наукових дослідженнях.

**Висновки.** Таким чином, дослідивши планування експерименту для сумішей із урахуванням особливостей планування із попередньою трансформацією симплексної підобласті в силу накладених обмежень на вміст компонентів, було розроблено програмне забезпечення для інтерактивного планування експерименту для трикомпонентної суміші та розрахунку робочого плану експерименту.

#### Список використаної літератури

1. Rezanova, N.M., Rezanova, V.G., Plavan, V.P., Viltaniuk, O.O. (2017). 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), No. 2, P. 37–42.
2. Глубіш П. А. Високотехнологічні, конкурентоспроможні і екологічно орієнтовані волокнисті матеріали та вироби з них / П. А. Глубіш, В. М. Ірклєй, Ю. Я. Клейнер, Н. М. Резанова, М. В. Цебрєнко, С. М. Кернер, В. Д. Омельченко, Ю. Т. Турчаненко. – К.: Арістей, 2007. – 263 с.
3. Rezanova, N.M., Plavan, V.P., Rezanova, V.G., Vohaturov, V.M. (2016). Regularities of producing of nano-filled polypropylene microfibers. *Vlákna a Textil*, No. 4, P. 3–8.
4. Резанова В. Г. Програмне забезпечення для математичного моделювання специфічного волокноутворення / В. Г. Резанова // Інформаційні технології в науці, виробництві та підприємстві: збірник наукових праць молодих вчених, аспірантів, магістрів кафедри інформаційних технологій проектування. – К.: Освіта України, 2017.
5. Зедгинидзе И. Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем / И. Г. Зедгинидзе. – М.: Наука, 1976. – 392 с.
6. Мейерс С. Эффективный и современный C++ / С. Мейерс. – М.: Вильямс, 2016. – 304 с.
7. Кетков Ю. Практика программирования: Visual Basic, C++ Builder, Delphi. Самоучитель (+ дискета) / Юлий Кетков, Александр Кетков. – М.: БХВ-Петербург, 2012. – 464 с.
8. Поляков А. Методы и алгоритмы компьютерной графики в примерах на Visual C++ / А. Поляков, В. Брусенцев. – М.: БХВ-Петербург, 2011. – 560 с.
9. Понамарев В. Программирование на C++/C# в Visual Studio .NET 2003 / В. Понамарев. – М.: БХВ-Петербург, 2015. – 917 с.
10. Чукич И. Функциональное программирование на C++/И. Чукич. – ДМК Пресс, 2020. – 360 с.
11. Пикус Ф. Г. Идиомы и паттерны проектирования в современном C++/ Ф. Г. Пикус. – ДМК Пресс, 2020. – 454 с.
12. Васильев А. Н. Программирование на C++ в примерах и задачах / А. Н. Васильев. – Издательство Эксмо, 2020. – 368 с.