

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ТЕХНОЛОГІЙ ТА ДИЗАЙНУ
ФАКУЛЬТЕТ МЕХАТРОНИКИ ТА КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ
КАФЕДРА КОМП'ЮТЕРНИХ НАУК

Дипломна магістерська робота

на тему

*Програмне забезпечення для оптимізації технологічних параметрів
формування мікрофібрилярних структур*

Виконала: студентка групи МГІТ 1-20
спеціальності 122 Комп'ютерні науки
Ванесса КРАСНОВИД

Керівник *доц. Вікторія РЕЗАНОВА*

Рецензент *проф. Сергій КРАСНИТСЬКИЙ*

Київ 2021

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ТЕХНОЛОГІЙ ТА ДИЗАЙНУ

ФАКУЛЬТЕТ МЕХАТРОНИКИ ТА КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ
КАФЕДРА КОМП'ЮТЕРНИХ НАУК

Спеціальність **122 Комп'ютерні науки**

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри КНТ
_____ проф. Володимир ЩЕРБАНЬ
“ _____ ” _____ 2021 року

ЗАВДАННЯ

НА ДИПЛОМНУ МАГІСТЕРСЬКУ РОБОТУ СТУДЕНТУ

Красновид Ванессі Костянтинівні

- 1. Тема роботи** *Програмне забезпечення для оптимізації технологічних параметрів формування мікрофібрилярних структур, науковий керівник роботи Резанова В. Г., к.т.н., доцент,*
затверджені наказом вищого навчального закладу від “04” жовтня 2021 року № 286
- 2. Строк подання студентом роботи** 14.12.2021р.
- 3. Вихідні дані до роботи** Розробка кафедри комп'ютерних наук. *Програмне забезпечення для оптимізації технологічних параметрів формування мікрофібрилярних структур*
- 4. Зміст дипломної роботи** (перелік питань, які потрібно розробити) : РОЗДІЛ 1 (математичне забезпечення); РОЗДІЛ 2 (алгоритмічне забезпечення); РОЗДІЛ 3 (програмне забезпечення).
- 5. Перелік графічного матеріалу:** презентація на __ слайдах.

6. Консультанти розділів дипломної магістерської роботи

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Розділ 1	<i>Вікторія РЕЗАНОВА. доц. каф КНТ</i>		
Розділ 2	<i>Вікторія РЕЗАНОВА доц. каф КНТ</i>		
Розділ 3	<i>Вікторія РЕЗАНОВА. доц. каф КНТ</i>		

7. Дата видачі завдання 10.2021 р.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів дипломної магістерської роботи	Терміни виконання етапів	Примітка про виконання
1	Вступ	09.10.2021	
2	Розділ 1 Математичне забезпечення	12.10.2021	
3	Розділ 2 алгоритмічне забезпечення	20.10.2021	
4	Розділ 3 програмне забезпечення	10.11.2021	
5	Висновки	10.11.2021	
6	Оформлення дипломної магістерської роботи (чистовий варіант)	15.11.2021	
7	Здача дипломної магістерської роботи на кафедру для рецензування (за 14 днів до захисту)	20.11.2021	
8	Перевірка дипломної магістерської роботи на наявність ознак плагіату (за 10 днів до захисту)	01.12.2021	
9	Подання дипломної магістерської роботи у відділ магістратури для перевірки виконання додатку до індивідуального навчального плану (за 10 днів до захисту)	02.12.2021	
10	Подання дипломної магістерської роботи на затвердження завідувачу кафедри (з 7 днів до захисту)	05.12.2021	

Студент _____ Ванесса КРАСНОВИД

Науковий керівник роботи _____ Вікторія РЕЗАНОВА

Керівник відділу магістратури _____ Олена Григоревська

АНОТАЦІЯ

Красновид В. К. Програмне забезпечення для оптимізації технологічних параметрів формування мікрофібрилярних структур – Рукопис.

Дипломна магістерська робота за спеціальністю 122 - «Компю’терні науки».
– Київський національний університет технологій та дизайну, Київ, 2021 рік.

Дипломна робота присвячена розробці програмного забезпечення, яке оптимізує технологічні параметри при формуванні мікрофібрилярних структур. Під час виконання роботи було розроблено план експерименту та виконана оптимізація параметрів. Для досягнення результату було створено та побудовано математичну модель залежності критеріїв оптимізації від вхідних факторів задачі, проведено оптимізацію факторів. Дипломна робота демонструє пошук найкращого, оптимального в деякому розумінні рішення, що дозволить раціоналізувати роботу дослідника.

***Ключові слова:** Програмне забезпечення, експеримент, оптимізація, технологічні параметри, мікрофібрилярні структури, волокноутворення, алгоритм.*

Аннотация

Красновид В. К. Программное обеспечение для оптимизации технологических параметров формирования микрофибриллярных структур – Рукопись.

Дипломная магистерская работа по специальности 122 – «Компьютерные науки». – Киевский национальный университет технологий и дизайна, Киев, 2021 год.

Дипломная работа посвящена разработке программного обеспечения, оптимизирующего технологические параметры при формировании микрофибриллярных структур. В ходе работы был разработан план эксперимента и оптимизация параметров. Для достижения результата была создана математическая модель зависимости критериев оптимизации от входящих факторов задачи, проведена оптимизация факторов. Дипломная работа демонстрирует поиск наилучшего, оптимального в некотором смысле решения, позволяющего рационализировать работу исследователя.

***Ключевые слова:** Программное обеспечение, эксперимент, оптимизация, технологические параметры, микрофибриллярные структуры, волокнообразование, алгоритм.*

SUMMARY

Krasnovyd V. K. Software for optimization of technological parameters of formation of microfibrillar structures - Manuscript.

Master's thesis in specialty 122 - "Computer Science". - Kyiv National University of Technology and Design, Kyiv, 2021.

This thesis is devoted to the development of software that optimizes technological parameters in the formation of microfibrillar structures. During the work the experiment plan was developed and the parameters were optimized. To achieve the result, a mathematical model of the dependence of optimization criteria on the input factors of the problem was created, the factors were optimized. This thesis demonstrates the search for the best, optimal in some sense, a solution that will streamline the work of the researcher.

Keywords: *Software, experiment, optimization, technological parameters, microfibrillar structures, fiber formation, algorithm.*

ВСТУП

Мета і завдання. Вирішення задачі оптимізації технологічних параметрів формування мікрофібрилярних структур. Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити такі завдання: відповідно до теорії експериментального планування розробити план даної предметної області. Побудувати математичну модель. Створити оптимізацію та спеціальне програмне забезпечення.

Об'єкт і предмет дослідження. Об'єктом дослідження є процес утворення мікрофібрилярних структур. Його реалізують у відповідних умовах під час протікання розплавів полімерних сумішей. В його основі лежать такі мікрореологічні процеси, як деформація крапель дисперсної фазової складової та об'єднання струменів рідини в напрямку потоку.

Предметом дослідження є оптимізація параметрів отримані при плануванні експерименту для цього процесу та його математичне моделювання.

РОЗДІЛ 1 МАТЕМАТИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ

1.1 Вступні положення

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 мало енергоємних технологій є важливим завданням для науки. Для оцінки рівня науково-технічного прогресу в країні одним із важливих критеріїв є ступінь використання полімерних матеріалів. Взагалі в багатьох сферах життєдіяльності масово використовуються полімерні композиційні матеріали, але в останні роки різко виріс попит на них та стало більше галузей застосування від побутових товарів (тканин, трикотажу, текстилю, упаковки, біомедичних продуктів) до високотехнологічної продукції (військової та аерокосмічної техніки). Це обумовлено тим, що композити з двома або більше окремими складовими, що структурно доповнюють один одного, мають унікальні характеристики, які відсутні в кожному окремому компоненті. Властивості композитів значною мірою визначаються природою полімерів та модифікуючих добавок (пластифікатори, компатибілізатори, наповнювачі або їх поєднання). 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 та олігомерів. Причиною цього є те, що шляхи модифікації практично невичерпні через велику кількість уже існуючих полімерів та олігомерів, а також способів і методів впливу на них.

Формування мікрОВОЛОКОН одного полімеру в середовищі іншого (матричного) - це принципово новий процес, в якому кількість філаментів та їх діаметр не залежать від числа отворів у філь'єрі, як у класичних методах. Волокноутворення визначається хімічною природою, реологічними

властивостями і співвідношенням компонентів суміші, а також наявністю модифікуючих добавок (компатибілізатори, нанопаповнювачі).

Після екстракції із композиційного екструдату матричного полімеру відповідним розчинником компонент дисперсної фази залишається у вигляді пучка. (комплексної нитки) з мікрОВОЛОКОН.

Формування волокон у в'язкій полімерній матриці забезпечує їм незвичайну структуру поверхні. Вони не гладенькі, як традиційні синтетичні волокна, а об'ємні: поверхня кожного мікрОВОЛОКНА вкрита нанофібрилами. Останні є результатом утворення міжфазного перехідного шару, в якому знаходиться певна частка полімеру дисперсної фази, що кристалізується у вигляді нанофібрил на основному волокні в процесі охолодження струменя розплаву суміші.

Описана структура забезпечує мікрОВОЛОКНАМ м'якість, приємний гриф, високі гігієнічні властивості. Основні закономірності щодо реалізації волокнуутворення в розплавах сумішей полімерів встановлені при дослідженні композицій, в яких як матричний компонент був застосований спирторозчинний співполіамід (СПА).

Розрізняють фізичні, хімічні та фізико-хімічні методи модифікації. До останніх належить використання сумішей полімерів, які давно викликали науковий та практичний інтерес. Найефективнішим, простим та доступним методом їх модифікації є – змішування полімерів. При змішуванні полімерів 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 мікрометра) - ультратонких синтетичних волокон або мікрОВОЛОКОН. Мова іде про абсолютно новий процес волокнуутворення одного полімеру суміші під дією реологічних сил в середовищі іншого (матричного), коли кількість філаментів нитки не визначається кількістю отворів у фільтрі. На відміну від загальноприйнятих методів формування хімічних волокон комплексна нитка з десятків і сотень тисяч мікро волокон, цей процес 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. Названо це явище явищем специфічного волокноутворення .

Особливість полягає в тому, що волокноутворення відбувається не після виходу розплаву з формуючого отвору (як за традиційними технологіями), а ще у вхідній зоні формуючого отвору (фільтери). Необхідно враховувати, що волокноутворення протікає у в'язкій полімерній матриці, а не у низькомолекулярних чи газових середовищах, як за сучасними технологіями.

У наш час дослідження явища специфічного волокноутворення має великий науковий інтерес з точки зору створення загальної теорії процесів переробки сумішей полімерів, визначення ролі входових 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.

Проте 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. 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 та підлягає подальшому дослідженню.

1.2 Теоретичні засади формування мікрофібрилярних структур

Особливості структуроутворення в розплавах сумішей полімерів.

Використання розплавів сумішей полімерів є провідною світовою тенденцією в галузі хімії і технології полімерів, що також дає можливість не

тільки поєднувати властивості двох полімерів в одному виробі, але й забезпечує отримання унікальних ефектів. Унікальним ефектом, є явище специфічного волокнуутворення, яке дозволяє виробництво ультратонких синтетичних волокон з унікальними властивостями. Сутність даного явища полягає в тому, що в обладнанні для переробки полімерів, завжди є місце, де розплав тече з широкого резервуару у вузький.

Розплав суміші двох полімерів - це краплі одного компоненту - дисперсна фаза в масі дисперсійного середовища. Під дією розтягуючих напруг краплі полімеру дисперсної фази перетворюється у рідинні струмені, які поєднуються в подовжньому напрямку з формуванням безперервних струменів. Деформування та потоншення утворених струменів (майбутніх мікрволокон) триває, доки напруга розтягу не досягне максимального значення. З наближенням до входу в канал формуючого отвору (філь'єри) розтягуючі напруги релаксують, що супроводжується збільшенням діаметра утворених струменів та порушенням їх паралельності. З розвитком та становленням зсувної течії в каналі струмені знову витягуються та паралелізуються. В каналі філь'єри розплав суміші має вигляд рідинних струменів волокнуутворюючого полімеру в масі матричного полімеру.

Коли з формуючого отвору виходить ультратонке волокно відбуваються процеси затвердіння, кристалізації та утворення композиційного екструдату, в якому полімер-матриця налічує десятки або сотні тисяч ультратонких волокон діаметром від кількох мікрометрів до десятих часток мікрометра. На мікрофотографіях подовжнього зрізу композиційного екструдату та електронних мікрофотографіях крихкого злому екструдату суміші достатньо чітко видно десятки тисяч мікрволокон одного полімеру в масі іншого. Ультратонкі волокна можна виділити з композиційного екструдату шляхом екстракції (розчинення) полімеру-матриці розчинником, інертним до волокнуутворюючого полімеру. Специфічність цього типу волокнуутворення полягає в тому, що акти волокнуутворення відбуваються не після виходу розплаву полімеру із формуючого отвору, як в традиційних технологіях, а ще у вхідній зоні філь'єри.

Волокноутворення відбувається у в'язкій полімерній матриці, а не у низькомолекулярних рідинних чи газових середовищах.

Особливістю є те, що комплексна нитка з десятків і сотень тисяч мікрОВОЛОКОН може бути одержана при формуванні через один отвір. Саме тому, немає необхідності у виготовленні філь'єр з великою кількістю отворів, які забиваються різними домішками, призводячи до нестабільності процесу формування.

Ультратонкі синтетичні волокна формуються при переробці розплавів сумішей полімерів, при цьому вони виділяються виключною м'якістю, приємним грифом, вовно- та бавовноподібністю без спеціальних прийомів текстурування та надання звитості. З особливостей структури волокна завжди випливають особливості властивостей. За допомогою електронної мікроскопії підтверджена унікальна структура ультратонкого волокна: поверхня кожного по всій поверхні вкрита дуже тонкими фібрилами, що відходять від основного волокна. Таким чином, утворюється досить розвинена поверхня. Волокна не гладенькі, як звичайні синтетичні волокна, а об'ємні, мають добре зчеплення між собою, високі сорбційні, тепло- та звукоізолюючі властивості. Ця структура поверхні зумовлена явищами на межі поділу фаз, а саме формуванням міжфазового перехідного шару (знаходженням у ньому певної частки полімеру дисперсної фази, який кристалізується у вигляді фібрил на основному волокні в процесі охолодження струменя розплаву суміші). Унікальністю цих волокон є те, що їх немає в природі і вони можуть бути отримані лише за спеціальними технологіями, але при цьому вони дуже схожі на натуральні .

Компатибілізація - це найефективніший метод регулювання процесів структуроутворення в сумішах полімерів.

Розглянемо явище компатибілізації в розплавах сумішей поліпропілен / співполіамід. Як вже говорилось, що для реалізації явища специфічного волокноутворення, полімери мають бути термодинамічно несумісні, тому необхідно покращити сумісність полімерів, тобто їх компатибілізацію. Несумісні компатибілізовані суміші полімерів називаються полімерними сплавами, а сама

компатибілізація розглядається як явище модифікації міжфазової поверхні і морфології суміші полімерів.

Співполіамід (СПА) та поліпропілен (ПП) відрізняються за хімічною будовою. Достатньо актуальним завданням є покращення сумісності для цієї пари полімерів. В наведених дослідженнях обрано метод введення в бінарну суміш полімерів спеціальних добавок - компатибілізаторів, здатних вступати в специфічні взаємодії з одним чи обома полімерами. Для суміші ПП/СПА вперше досліджені і рекомендовані такі ефективні компатибілізатора як олеат натрію, співполімер етилену з вінілацетатом (СЕВА), силоксанові рідини марок ПЕС-5, ПМС-100, ПМС-200, поліетиленгліколь. Перераховані вище речовини можуть вступати в специфічні взаємодії з макромолекулами СПА, що сприяє спорідненості до ПП. Саме таким чином, на межі поділу фаз забезпечується зв'язок між макромолекулами ПП і СПА через компатибілізатор, що покращує волокнуутворення ПП в матриці СПА. Так, при використанні сумішей ПП/СПА складу 20/80, 30/70 і ПЕС-5 як компатибілізатора, майже вдвічі збільшується кількість безперервних волокон, вдвічі зменшується діаметр мікрОВОЛОКОН, значно зростає однорідність волокнуутворення. Особливо слід зазначити на збільшенні вмісту волокнуутворюючого компонента в суміші до 50 мас. %, що забезпечує збільшення виходу мікрОВОЛОКОН та спрощення процесів екстракції матричного полімеру і регенерації СПА і розчинника. Встановлені закономірності стали інновацією технології виробництва нових прецизійних фільтрів на основі ультратонких поліпропіленових волокон.

1.3.1 Планування експерименту

Планування експерименту, як і кожний розділ науки, має свою термінологію.

Для зручності розуміння розглянемо найзагальніші терміни.

Експеримент – цілеспрямований вплив на об'єкт дослідження з метою одержання достовірної інформації.

Більшість наукових досліджень пов'язані з експериментом. Він проводиться на виробництві, в лабораторіях, на дослідних полях та ділянках, у клініках тощо.

Експеримент може бути фізичним, психологічним чи модельним. Він може безпосередньо проводитися на об'єкті чи його моделі. Модель зазвичай відрізняється від об'єкту масштабом, інколи ж природою. Головна вимога до моделі – досить точний опис об'єкт.

Останнім часом поряд з фізичними моделями все більшого поширення одержують абстрактні математичні моделі. До речі, планування експерименту безпосередньо пов'язане з розробкою та дослідженням математичної моделі об'єкта дослідження.

Планування експерименту – це процедура вибору числа і умов проведення дослідів, необхідних і достатніх для вирішення поставленої задачі з необхідною точністю.

Загальна схема проведення експерименту виглядає так. З випадковими помилками вимірюється деякі вихідні змінні системи, що вивчаються, залежать від невідомих значень параметрів і відомих значень змінних-факторів, а також з можливих взаємодій. Основна мета планування експерименту – досягнення максимальної точності вимірювань за мінімальної кількості вироблених дослідів та збереження статистичної достовірності результатів.

Основні етапи планування експерименту:

1. Встановлення мети експерименту – постановка цілей та завдань проведення експерименту;
2. Уточнення умов проведення експерименту - вибір обладнання, термінів робіт, способу проведення експерименту тощо;
3. Вибір вхідних та вихідних параметрів – вибір залежної вимірюваної змінної, визначення випадкових та детермінованих незалежних змінних;
4. Встановлення необхідної точності результатів вимірювань – вибір компромісу між мінімальним числом випробувань та статистичною достовірністю одержуваних результатів;
5. Складання плану та проведення експерименту – кількість і порядок випробувань, завдання сукупності значень змінних-факторів, що задаються, та їх взаємодій в експерименті;

6. Статистична обробка результатів експерименту - застосування методів математичної статистики для обробки результатів, побудова математичної моделі експерименту;

7. Формулювання висновків

Особливості планування експерименту:

- прагнення до мінімізації загального числа дослідів;
- одночасне варіювання всіма змінними, що визначають процес, за спеціальними правилами – алгоритмам;
- вибір чіткої стратегії, що дозволяє ухвалювати обґрунтовані рішення після кожної серії експериментів

Техніка планування: на кожному кроці ставиться невелика серія дослідів, в кожному з яких варіюються за певними правилами всі фактори. Математична обробка результатів експерименту дозволяє виробити умови проведення такої серії дослідів, направлених до досягнення оптимуму.

Задачі, для вирішення яких може використовуватися планування експерименту, надзвичайно різноманітні. До них відносяться: пошук оптимальних умов, побудова інтерполяційних формул, вибір істотних факторів, оцінка та уточнення констант теоретичних моделей, вибір найбільш прийнятних з деякої множини гіпотез про механізм явищ, дослідження діаграм склад – властивість тощо.

1.3.2 Повний факторний експеримент

Повний факторний експеримент (ПФЕ) - експеримент, що реалізує всі можливі комбінації рівнів факторів або незалежних змінних, що не повторюються, причому кожен фактор примусово варіюється на заздалегідь обраній кількості рівнів. Отже, маємо справу з активним експериментом, тобто з активним втручанням експериментатора у досліджуваний процес. Такий експеримент виконується відповідно до заздалегідь підготовленого плану.

Припустимо, що вивчається вплив ряду факторів Z_i ($i = 1, \dots, k$) на деяку величину y . Для цього проводяться експерименти за певним планом, який

дозволяє реалізувати всі можливі комбінації чинників. Причому кожен фактор розглядається лише на двох фіксованих рівнях (верхньому і нижньому). число

$$2^k,$$

всіх експериментів (дослідів) в цьому випадку дорівнюватиме $n =$

де k - кількість досліджуваних факторів. Постановка дослідів за таким

$$2^k$$

планом називається повним факторним експериментом типу

При повному факторному експерименті отримане рівняння регресії набуває вигляду полінома першого ступеня:

$$y(x_i, \dots, x_i) = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i \cdot x_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^k b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \dots + \sum_{\substack{i,j,\dots,n=1 \\ i \neq j \neq \dots \neq n}}^k b_{ijn} \cdot x_i \cdot x_j \cdot \dots \cdot x_n$$

де b_0 - вільний член; b_i - лінійні ефекти; b_{ij} - ефекти парної взаємодії; b_{ii} - квадратичні ефекти; b_{ijn} - ефекти потрійної взаємодії.

При плануванні за схемою повного факторного експерименту (ПФЕ) реалізуються всі можливі комбінації факторів на всіх обраних для дослідження рівнях. Кількість дослідів N при ПФЕ визначається за формулою:

$$N = n^k$$

де n - кількість рівнів; k - число факторів.

Таким чином, для дворівневого повнофакторного експерименту необхідно

$$2^k$$

провести дослідів. Рівні факторів являють собою межі досліджуваної

області за обраним параметром (мінімальне і максимальне значення фактора). Знаючи максимальне z_i^{\max} і мінімальне z_i^{\min} значення технологічного параметра (фактора) можна визначити координати центру плану, так званий основний рівень z_i^0 , а також інтервал (крок) варіювання Δz_i :

$$z_i^0 = \frac{z_i^{\max} + z_i^{\min}}{2}$$

$$\Delta z_i = \frac{z_i^{\max} - z_i^{\min}}{2}$$

Необхідно відзначити, що при виборі верхнього і нижнього рівнів факторів необхідно враховувати обмеження, пов'язані з властивостями об'єкта дослідження:

Принципові обмеження (наприклад, якщо досліджуваний фактор «Температура», то її нижню межу не може бути нижче абсолютного нуля).

Обмеження, пов'язані з конкретними умовами проведення процесу (Наприклад, верхній рівень температури не можна підняти вище температури плавлення матеріалу, з якого зроблений реактор).

Обмеження, пов'язані з умовами деградації процесу або деструкцією досліджуваного матеріалу (параметри процесу після його повного завершення; властивості рідини після її випаровування, властивості композиції після її руйнування).

Обмеження, пов'язані з фазовими переходами речовини, або складових його компонентів (при досягненні речовиною температури плавлення; за умов абляції або сублімації добавок; або плавлення добавок).

Обмеження, пов'язані з умовами дотримання техніки безпеки при вивченні даного процесу.

Обмеження, пов'язані зі зміною екологічної ситуації (використання речовин понад гранично допустимої концентрації; проведення експериментів, які спричинили за собою погіршення екологічної ситуації).

Обмеження, пов'язані з техніко-економічними міркуваннями. (Дефіцитність окремих елементів, вартість сировини, і т.д.).

На вибір інтервалу варіювання так само накладаються обмеження: він не може бути менше помилки, з якою експериментатор фіксує рівень фактора, і не може бути настільки великим, що верхній і нижній рівень виявилися за межами області визначення.

Від систем координат z_1, \dots, z_k необхідно перейти до нової безрозмірною системі координат x_1, \dots, x_k за допомогою лінійного перетворення:

$$x_i = \frac{z_i - z_i^0}{\Delta z_i}$$

де $i = 1, 2, 3, \dots, k$.

У безрозмірній системі координат верхній рівень - +1, нижній рівень - -1, координати центру дорівнюють нулю і збігаються з початком координат.

Таблиця 1.1

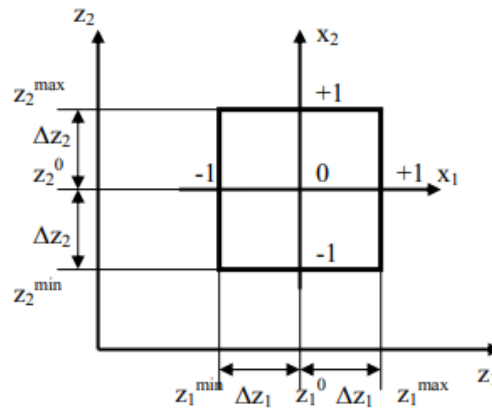
Матриця планування

Номер дослідження	x_1	x_2	Літерні позначення рядків	y
1	-1	-1	a	y_1
2	+1	-1	b	y_2
3	-1	+1	c	y_3
4	+1	+1	ab	y_4

Кожен стовпець у матриці планування називають вектор-стовпцем, а кожен рядок - вектор-рядком. Таким чином, табл. 1 містить два вектор-стовпця незалежних змінних x_1, x_2 і один вектор-стовпець параметра оптимізації y .

Те, що записано в цій таблиці в алгебраїчній формі, можна зобразити геометрично.

Знайдемо в області визначення факторів точку, що відповідає основному рівню, і проведемо через неї нові осі координат, паралельні до осей натуральних значень факторів. Далі, виберемо масштаби по нових осях так, щоб інтервал варіювання для кожного фактора дорівнював одиниці. Тоді умови проведення дослідів відповідатимуть вершинам квадрата, центром якого є основний рівень, а кожна сторона паралельна до однієї з осей координат і дорівнює двом інтервалам (рис. 1).



2

Рис. 1.1 Повний факторний експеримент

Номери вершин квадрата відповідають номерам дослідів у матриці планування. Площа, обмежена квадратом, називається областю експерименту. Іноді зручніше вважати областю експерименту площу, обмежену колом, що описує квадрат. У завданнях інтерполяції область експерименту є область передбачуваних значень.

Запис матриці планування, особливо багатьох чинників, громіздка. Для її скорочення зручно запровадити умовні літерні позначення рядків.

Це здійснюють наступним чином. Порядковий номер фактора ставиться у відповідність малої літери латинського алфавіту: x_1 - а, x_2 -b, ... і т. д. Якщо тепер для рядка матриці планування вписати латинські літери тільки для факторів, що знаходяться на верхніх рівнях, умови досвіду будуть задані однозначно. Досвід із усіма факторами на нижніх рівнях умовимося позначати (1).

2³

Матриця планування разом із прийнятими літерними позначеннями наведена нижче:

Таблиця 1.2

Матриця планування

Номер дослідження	x_1	x_2	x_3	Літерні позначення рядків	у
1	-1	-1	+1	а	y_1
2	-1	+1	-1	б	y_2

3	+1	-1	-1	c	y_3
4	+1	+1	+1	abc	y_4
5	-1	-1	-1	(1)	y_5
6	-1	+1	+1	bc	y_6
7	+1	-1	+1	ac	y_7
8	+1	+1	-1	ab	y_8

 2^3

Таким чином, ми побудували повний факторний експеримент 2^3 . Він має вісім дослідів і включає всі можливі комбінації рівнів трьох факторів.

 2^3

Геометричною інтерпретацією повного факторного експерименту 2^3 є куб, координати вершин якого задають умови дослідів.

Якщо помістити центр куба в точку основного рівня факторів, а масштаби по осях вибрати так, щоб інтервал варіювання дорівнював одиниці, то вийде куб, зображений на мал.1.2. Куб задає область експерименту, а центр куба є центром.

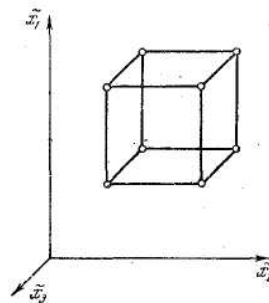


Рис. 1.2 Геометрична інтерпретація повного факторного експерименту

Фігура $k > 3$, що задає область експерименту в багатовимірному просторі є деяким аналогом куба. Будемо називати цю фігуру гіперкубом.

Таблиця 1.3

Повний факторний експеримент для трьох факторів

Номер дослідження	Фактори в натуральному масштабі			Фактори у безрозмірній системі координат			Вихідний параметр
	z_1	z_2	z_3	x_1	x_2	x_3	
1	z_1^{min}	z_2^{min}	z_3^{min}	-1	-1	-1	y_1
2	z_1^{max}	z_2^{min}	z_3^{min}	+1	-1	-1	y_2
3	z_1^{min}	z_2^{max}	z_3^{min}	-1	+1	-1	y_3
4	z_1^{max}	z_2^{max}	z_3^{min}	+1	+1	-1	y_4

5	z_1^{min}	z_2^{min}	z_3^{max}	-1	-1	+1	y_5
6	z_1^{max}	z_2^{min}	z_3^{max}	+1	-1	+1	y_6
7	z_1^{min}	z_2^{max}	z_3^{max}	-1	+1	+1	y_7
8	z_1^{max}	z_2^{max}	z_3^{max}	+1	+1	+1	y_8

Матриця планування повного факторного експерименту для трьох факторів представлена в таблиці 1. У цьому випадку число можливих комбінацій із трьох факторів на двох рівнях дорівнює $N=n^k = 2^3 = 8$.

Математична модель для повного факторного експерименту

Математична модель – це наближений опис довільного класу явищ зовнішнього світу, поданий за допомогою математичної символіки. Математичне моделювання виступає як метод пізнання зовнішнього світу, а також прогнозування і управління. Аналіз математичних моделей дозволяє проникнути в сутність досліджуваних явищ.

Математичне моделювання проходить такі етапи:

- постановка задачі, тобто прийняття рішення про необхідність моделювання і його мету. На цьому етапі слід чітко визначити і сформулювати мету досліджень. З мети досліджень випливатиме сукупність властивостей об'єкта моделювання, які підлягатимуть відбиттю у моделі;

- побудова математичної моделі;

- дослідження системи на моделі, прогнозування й управління оригіналом за результатами цих досліджень.

Планування експерименту і побудова математичної моделі у разі повного факторного експерименту включає декілька етапів роботи :

- вибір локальної області і меж визначення чинників, що задаються технічними, економічними і іншими міркуваннями;

- завдання нульового рівня в багатовимірному факторному просторі;

- вибір інтервалів варіювання чинників;

- проведення експерименту;

- побудова математичної моделі, що виражає залежність вихідного чинника від вхідних чинників.

Локальна область проведення експерименту вибирається з двох міркувань. По-перше, основний рівень, що є центральною точкою в багатовимірному факторному просторі, повинен знаходитися як можна ближче до оптимуму. По-друге, відхилення від центральної точки мають бути досить малими, щоб функція відгуку в цьому інтервалі була близька до лінійної. По-третє, відхилення від центральної точки мають бути досить великими, щоб зміну функції відгуку в межах інтервалу перевищувала помилку виміру. Для кожного чинника визначаються два рівні, на яких він варіюється в експерименті. На координатній осі рівні зображаються двома точками, симетричними відносно основного рівня. Один з рівнів - верхній, інший - нижній. Інтервалом варіювання чинників називається деяке число (своє для кожного чинника), збільшення якого до основного рівня дає верхній, а віднімання - нижній рівень.

Для спрощення запису умов експерименту і обробки експериментальних даних масштаби по осях задають так, щоб верхній рівень відповідав +1, нижній - 1, основний - нулю. На вибір інтервалів варіювання накладаються обмеження знизу (він не може бути нижче за помилку фіксації рівня чинника) і зверху (верхній або нижній рівні не повинні виходити за область визначення). У завданнях оптимізації вибирають підобласть, яка давала б можливість реалізувати крокову процедуру руху до оптимуму. У завданнях інтерполяції інтервал варіювання охоплює усю описувану область. При визначенні інтервалу варіювання використовується інформація про точність, з якою фіксуються значення чинників, про кривизну поверхні відгуку і про діапазон зміни параметра оптимізації.

Метод найменших квадратів - один із методів регресійного аналізу для оцінки невідомих величин за результатами вимірювань, що містять випадкові помилки.

Метод найменших квадратів застосовується також для наближеного представлення заданої функції іншими (простішими) функціями і часто виявляється корисним при обробці спостережень.

Коли шукана величина може бути виміряна безпосередньо, як, наприклад, довжина відрізка або кут, то для збільшення точності вимірювання проводиться багато разів, і за остаточний результат беруть арифметичне середнє з усіх окремих вимірювань. Це правило арифметичної середини ґрунтується на міркуваннях теорії ймовірностей; легко показати, що сума квадратів ухилень окремих вимірювань від арифметичної середини буде меншою, ніж сума квадратів ухилень окремих вимірювань від будь-якої іншої величини. Саме правило арифметичної середини є, отже, найпростішим випадком методу найменших квадратів.

1.4 Методи багатопараметричної оптимізації

Оптимізація, в широкому розумінні слова, знаходить застосування в науці, техніці та в будь-якій іншій галузі людської діяльності. Математика дає зручні способи опису різноманітних явищ реального світу і цим виконує у сенсі функцію мови. Часто в математичній моделі потрібно знайти екстремальне значення функції на деякій множині, тобто вирішити задачу оптимізації.

Оптимізація (від латів. *optimum* - найкращий) - це процес знаходження екстремуму деякої кількісної величини (параметра) проєктованого об'єкта, що у вигляді функції (функціоналу). Якщо ця функція характеризує позитивну властивість об'єкта, то шукається максимальне її значення, якщо негативне - мінімальне.

Оптимізація – це цілеспрямована діяльність, що полягає у отриманні найкращих результатів за наявності безлічі альтернативних за певних умов. Оптимізаційною називається завдання визначення найкращих структури чи значень параметрів об'єктів. Насправді виявляється, що у більшості випадків поняття «найкращий» то, можливо виражено кількісними критеріями – мінімум витрат, мінімум часу, максимум прибутку тощо. Тому можлива постановка математичних задач пошуку оптимального (*optimum* – найкращий) результату, оскільки важливих відмінностей у знайденні найменшого чи

найбільшого значення немає. Завдання знайти оптимального рішення називаються задачами оптимізації. Для того, щоб використовувати результати та обчислювальні процедури теорії оптимізації на практиці, необхідно, насамперед, сформулювати розглянуте завдання на математичною мовою, тобто. побудувати математичну модель об'єкта оптимізації. Математична модель – це більш-менш повний математичний опис досліджуваного процесу чи явища.

Для застосування теорії оптимізації до вирішення конкретних задач потрібно виконати певну послідовність дій, яка називається постановкою задачі оптимізації. Вона включає такі етапи:

1) встановлення меж підлягає оптимізації системи. Система – якась ізольована частина зовнішнього світу. Кордони системи задають межі, що відокремлюють її від зовнішнього світу. При цьому передбачається, що зв'язки із зовнішнім світом зафіксовані. Початковий вибір кордонів системи може виявитися занадто жорстким. Для отримання адекватного рішення необхідно включити до системи додаткові підсистеми, але це веде до збільшення розмірності завдання. Слід прагнути представлення системи в вид ізольованих підсистем, які можна розглядати незалежно від інших;

2) вибір кількісного критерію, що дозволяє виявити найкращий варіант, що називається характеристичним критерієм. Критерії можуть бути, залежно від конкретного завдання, економічного чи технологічного характеру

(Мінімальна вартість, максимальний прибуток і т.д.). Незалежно від того, який критерій прийнятий як характеристичний, він повинен набувати максимального (або мінімального) значення для найкращого варіанту;

3) визначення внутрішньо системних змінних, через які виражаються характеристичний критерій. Потрібно вибрати ті змінні, які мають найбільше впливом геть характеристичний критерій;

4) побудова моделі, яка описує взаємозв'язок внутрішньосистемні змінні. Модель системи описує взаємозв'язок між змінними та відображає ступінь впливу цих змінних характеристичний критерій. Модель включає основні рівняння матеріальних, виробничих та інших балансів; рівняння, що описують економічні

процеси у системі; нерівності, що визначають області допустимих значень змінних.

Оптимізаційне завдання включає:

- 1) безліч незалежних змінних;
- 2) модель, що відбиває взаємозв'язок змінних.

Математична постановка задач оптимізації

Загалом математичне завдання оптимізації можна сформулювати так: мінімізувати (максимізувати) цільову функцію з урахуванням обмежень на керовані змінні.

Під мінімізацією (максимізацією) функції n змінних $f(x) = (x_1, \dots, x_n)$ на заданому множині U_n –мірного векторного простору E_n розуміється визначення хоча б однією з точок мінімуму (максимуму) цієї функції на множині U , а також, якщо це необхідно, та мінімального (максимального) на множині U значення $f(x)$. При записі математичних завдань оптимізації у загальному вигляді зазвичай використовується така символіка:

$$f(x) \rightarrow \min(\max),$$

$$x \in U$$

де $f(x)$ – цільова функція;

U – допустима множина, задана обмеженнями на керовані змінні.

Методи оптимізації широко застосовуються для розв'язання задач теорії оптимальних процесів, оптимального регулювання, вироблення керувальних збурень на об'єкти. Без розробки та застосування методів оптимізації неможливе керування ректифікаційними колонами в спиртовій промисловості, установками крекінгу нафти, конверторами при виробництві сталі та ін. До транспортних задач та задачі комівояжера зводяться багато задач економічної кібернетики (мережне планування, управління запасами, перевезеннями та ін.), керування організацією виробництва (розподіл завдань, обробка деталей, конвеєрне виробництво) та задачі оптимального програмування. Окрема група задач теорії оптимізації - це задачі оптимального проектування. Наприклад, задачі проектування

радіоелектронних засобів з заданими обмеженнями на рівень шуму та смугу пропускання чи показниками надійності в умовах старіння.

На практиці часто виникає випадок, коли замість однієї цільової функції $f(x)$

$$f_r$$

задано кілька цільових функцій $f_i(x), \dots$ (x). Таке завдання

багатокритеріальної оптимізації має кілька постановок. В одній з них потрібно оптимізувати один із критеріїв, припустимо $f_1(x)$, причому останню критеріїв утримують у заданих межах: . У цьому випадку фактично йдеться про звичайну багатокритеріальну оптимізацію. Щодо нерівностей, які обмежують інші критерії, то їх можна розглядати як додаткові обмеження на допустиму область M .



В процесі побудови оптимізаційної задачі (ОЗ) необхідно інженерові чи науковцеві вирішити такі завдання:

- 1) Вибір та визначення критерію оптимізації;
- 2) Визначити проектні параметри;
- 3) Побудувати цільову функцію (модель залежності між КО та проектними параметрами);
- 4) Визначити обмеження;
- 5) Вибір методу розв'язання оптимізаційної задачі.

Цілі, багатокритеріальної задачі, можуть знаходитися одна з одною в наступних відносинах: 1. Цілі взаємно нейтральні. В такій ситуації система може стосовно окремих цілей характеризуватися і розглядатися незалежно.

2. Цілі кооперуються. Тут, як правило, систему вдається розглянути стосовно однієї мети, а інші досягаються одночасно.

3. Цілі конкурують. В цьому випадку одну з цілей можна досягти лише за рахунок іншої.

Якщо цілі частково нейтральні, частково кооперовані і частково конкурують між собою, то завдання формулюється таким чином, що потрібно брати до уваги тільки конкуруючі цілі. Розгляд нейтральних або кооперативних цілей не представляє особливих труднощів, так що проблеми, орієнтовані на множину цілей, перш за все повинні бути розглянуті в частині конкуруючих цілей, якщо всі вони разом не можуть бути виражені одновимірним параметром. Найбільш загальною математичною моделлю прийняття оптимального рішення є завдання багатопараметричної оптимізації.

В загальному випадку задачами багатокритеріальної оптимізації прийнято вважати такі задачі, де існує декілька критеріїв оптимізації. Одне з можливих визначень наведено наступне: Багатокритеріальна оптимізація або програмування (англ. Multiobjective optimization) — це процес одночасної оптимізації двох або більше конфліктуючих цільових функцій в заданій області визначення.

Задача багатокритеріальної оптимізації зустрічаються в багатьох галузях науки та техніки. Постановка багатокритеріальної оптимізації вже оперує з

такими елементами, як цільові функції, а не критерії. В загальному випадку задачу багатокритеріальної оптимізації можна сформулювати наступним чином [8,9]. Знайти такі значення проектних параметрів, для яких забезпечуються екстремальні значення цільових функцій:

$$\min(\max) f_i(x), (i=1,n), j=1,m,$$

при виконанні наступної системи обмежень

$$g_k(X) \leq a_k, (k=1,l),$$

$$h_m(X) = \beta_m, (m=1,j),$$

$$b_1 \leq x_j \leq b_m.$$

де вектор розв'язків $x=(x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1n})^T$ належать до не порожньої області визначення D .

Отже задача багатокритеріальної оптимізації полягає у пошуку вектора цільових змінних, який задовольняє накладеним обмеженням та оптимізує векторну функцію, елементи якої відповідають цільовим функціям. Ці функції утворюють математичне описання критерію задовільності та, зазвичай, взаємно конфліктують. Звідси, «оптимізувати» означає знайти такий розв'язок, за якого значення цільових функцій були б прийнятними для постановника задачі

1.5 Опис середовища розробки ПЗ

Borland Delphi - це об'єктно-орієнтоване середовище візуального програмування (RAD - Rapid Application Development). Delphi призначено для прискореної розробки високопродуктивних 32-бітних програм, які можуть працювати в середовищі Windows або Linux. При цьому Delphi дозволяє звести до мінімуму об'єм програмного коду, який вводиться вручну. В склад Delphi входять засоби, необхідні для розробки, тестування та встановлення програм, включаючи велику за обсягом бібліотеку компонентів (VCL - Visual Components Library), засоби візуального проектування, шаблони програм і форм. Середовище проектування Delphi є відкритою системою і дозволяє використовувати як компоненти VCL, так і компоненти від сторонніх розробників, або власні компоненти. Також, сильною стороною Delphi є можливість використання функцій WinAPI. В системі Delphi

використовується спеціалізована версія мови програмування Паскаль, що постійно вдосконалюється; вона називається Delphi (в шостій і більш ранішніх варіантах системи Delphi вона називалась Object Pascal - "Об'єктний Паскаль"). Ця версія включає набір розширень, орієнтованих тільки на застосування в рамках середовища Delphi і призначених для прискореного створення програм.

Середовище Delphi являє собою інтегровану оболонку розробника, в яку входить набір спеціалізованих програм, які відповідають за різні етапи створення готової програми. Основні вікна системи Delphi наступні: інспектор об'єктів, провідник, проектувальник форм, вікно редактора. Вихідний текст програми готується в середовищі Delphi за допомогою вбудованого редактора вихідних текстів. Цей редактор спеціалізований. Він відрізняється гнучкими можливостями кольорового виділення різних елементів тексту програми (ключових слів, назв, операцій, чисел і рядків) і надає можливість швидкого вводу конструкцій, які часто зустрічаються. Елементи мови та способи структуризації програми

Елементами мови є набори компонентів, які дозволяють створювати додатки за найрізноманітнішими тематиками. Компоненти володіють наборами властивостей, що характеризують їх особливості. Крім властивостей, компоненти містять методи - програмний код, який обробляє значення властивостей та події - повідомлення, які компонент приймає від програми.

Всі програми в Delphi 7 будуються по наступному принципу: в їхній головній частині з розширенням. DPR зберігається тільки виклик декількох команд, які відкривають головне вікно, а також виконують завершальні дії. Решта всього програмного коду міститься в файлах, що зберігають опис додаткових модулів, які підключаються. Кожен модуль має строго задану структуру, яка зазвичай автоматично генерується системою Delphi 7 при його створенні. Модуль складається з чотирьох частин: інтерфейсної частини, частини реалізації (обов'язкова), частини ініціалізації і частини завершення (необов'язкова). Спочатку вказують заголовок модуля - ключове слово Unit, за ним довільну назву модуля (вона повинна співпадати з іменем файлу, в якому модуль зберігається) і кладуть крапку з комою: **Unit** Testunit; Інтерфейсна частина описує інформацію,

яка доступна з інших частин програми, з інших модулів і головної частини. Частина реалізації описує інформацію, яка недоступна з інших модулів. Подібне розділення модуля на частини дозволяє створювати і розповсюджувати модулі у відкомпільованому вигляді (розширення. DCU), додаючи до них тільки опис інтерфейсної частини. При цьому внести зміни в такий модуль неможливо, вихідний код, який реалізує описані в інтерфейсній частині можливості, недоступний. Такий підхід дозволяє повторно використовувати раніше написані для інших програм і вже відкоректовані модулі та розмежовує доступ до модуля декількох програмістів, а також дозволяє розбивати програму на набір логічно незалежних модулів. Інтерфейсна частина завжди йде першою і починається з ключового слова **interface**, а частина реалізації з - **implementation**.

Частини ініціалізації і завершення необов'язкові. Вказані в них дії виконуються, відповідно, на самому початку та в самому кінці роботи програми і тільки один раз. Частина ініціалізації починається з ключового слова **initialization**, частина завершення - з ключового слова **finalization**. В кінці модуля завжди ставиться слово **end** і крапка.

Базовими елементами мови являються: коментарі, змінні, константи, оператори, типи даних тощо.

Висновки до розділу 1

Зробивши детальний аналіз перспективи та стану інформаційних і нанотехнологічних галузей можемо зробити висновок, що наукові дослідження мають важливе значення у економічно розвинених країнах. Їх результати змінюють світові тенденції розвитку в напрямку значного розширення можливостей широкого кола галузей економіки: транспорту, фармакології, фармацевтики, хімії, будівництва, енергетики, авіації та космонавтики, оборони, авіації.

Реалізація формування мікрофібрилярних структур являє великий науковий і практичний інтерес, оскільки дає можливість отримувати мікрволокна з унікальними властивостями. Коефіцієнти, обчислені за результатами повного

факторного експерименту, вказують на силу впливу чинників. Математична модель може бути використана для оптимізації параметрів процесу та для прогнозування його поведінки у майбутньому. Завдяки математичній моделі знаходяться такі цільові змінні, які задовольняються накладеним обмеженням та оптимізуються векторною функцією. Оптимізувати означає знайти такий розв'язок, за якого значення цільових функцій були б прийнятними для постановника задачі.

Без розробки та застосування методів оптимізації неможливе керування ректифікаційними колонами в спиртовій промисловості, установками крекінгу нафти, конверторами при виробництві сталі та інше.

Розділ 2

Алгоритмічне забезпечення

2.1 Побудова плану експерименту для трикомпонентної суміші полімерів

Алгоритм побудови плану ПФЕ:

- 1) уводимо кількість факторів, значення центрів плану та інтервал варіювання;
- 2) будуємо матрицю кодованих змінних;
- 3) переводимо матрицю кодованих змінних у натуральну;
- 4) перевіряємо матрицю кодованих змінних на правильність побудови за умовами симетричності, нормування, ортогональності, рототабельності;
- 5) здійснюємо роздрукування результатів.

Перед побудовою планів експерименту копіювання необхідно задаватися значеннями фактора у центрі плану й інтервалом варіювання факторів, який визначається можливостями проведення експерименту з урахуванням технічних і технологічних обмежень.

Матриця планування кодованих змінних повинна мати такі властивості, які дозволяють вважати, що планування проводилося оптимально, тобто точність передбачених значень відгуку (Y) буде однаковою у будь-якому напрямку факторного простору. Ці вимоги формулюються як умови симетричності матриці, нормування, ортогональності, рототабельності.

Таблиця 2.1

Матриця

Номер дослідження	x_1	x_2	x_3	x_0	y
1	-1	-1	+1	+1	y_1
2	-1	+1	-1	+1	y_2
3	+1	-1	-1	+1	y_3
4	+1	+1	+1	+1	y_4
5	-1	-1	-1	+1	y_5

6	-1	+1	+1	+1	y_6
7	+1	-1	+1	+1	y_7
8	+1	+1	-1	+1	y_8

Наведена в таблиці 1.4 матриця має такі властивості:

1. Умова симетричності – матриця повинна бути симетричною відносно центра плану. Сума кодованих значень за всіма факторами та експериментами, повинна дорівнювати 0.

$$\sum_{i=1}^N X_{ij} = 0, (i=1..N, j=1..K)$$

2. Умова нормування – сума квадратів кодованих значень матриці повинна дорівнювати N.

$$\sum_{i=1}^N X_{ij}^2 = N$$

3. Умова ортогональності – сума почленного добутку будь-яких двох стовбців матриці планування повинна дорівнювати 0.

$$\sum_{i=1}^N X_{ij} \cdot X_{im} = 0, (j=1..K, m=1..K, j \neq m).$$

Ця властивість різко зменшує труднощі, пов'язані з розрахунком коефіцієнтів рівняння регресії, тому що матриця коефіцієнтів нормальних рівнянь (ХТ Х) стає діагональною і її діагональні елементи дорівнюють кількості дослідів у матриці планування N.

4. Умова рототабельності – умова для побудови лінійних рівнянь за результатами проведення повного факторного експерименту. Ця умова передбачає рівність і мінімальність дисперсій відгуків, які передбачаються, за всіма точками факторного простору.

У разі повного факторного експерименту функція відгуку для параметра y залежно від k кодованих факторів шукається у вигляді відрізка - ряду

Тейлора

$$a_2 X_2 + b + a_k$$

$$y = a_0 + a_1 X_1 +$$

Наша мета - знайти за результатами дослідів, поставлених у всіх точках повного факторного експерименту, значення невідомих коефіцієнтів в математичній моделі. Випишемо для цього випадку матриці X, Y та B

$$Y_{N \times k} = \begin{pmatrix} x_{01} & x_{11} & \dots & x_{k1} \\ x_{02} & x_{12} & \dots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{0N} & x_{1N} & \dots & x_{kN} \end{pmatrix}, Y_{N \times 1} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}, ,$$

Вихідна система лінійних рівнянь $Y = XB$;

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{01} & x_{11} & \dots & x_{k1} \\ x_{02} & x_{12} & \dots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{0N} & x_{1N} & \dots & x_{kN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix}$$

Після перетворень отримаємо

$$B = (X^T X)^{-1} X^T Y;$$

$$\begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix} = \left(\begin{pmatrix} x_{01} & x_{02} & \dots & x_{0N} \\ x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{k1} & x_{k2} & \dots & x_{kN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{01} & x_{11} & \dots & x_{k1} \\ x_{02} & x_{12} & \dots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{0N} & x_{1N} & \dots & x_{kN} \end{pmatrix} \right)^{-1} \begin{pmatrix} x_{01} & x_{02} & \dots & x_{0N} \\ x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{k1} & x_{k2} & \dots & x_{kN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}.$$

Скалярні твори зручно представляти як сум, тобто. матрицю системи нормальних рівнянь можна записати як

$$X^T X = \begin{pmatrix} \sum x_0^2 & \sum x_0 x_1 & \sum x_0 x_2 & \dots & \sum x_0 x_k \\ \sum x_0 x_1 & \sum x_1^2 & \sum x_1 x_2 & \dots & \sum x_1 x_k \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum x_0 x_k & \sum x_1 x_k & \sum x_2 x_k & \dots & \sum x_k^2 \end{pmatrix}, X^T Y = \begin{pmatrix} \sum y x_0 \\ \sum y x_1 \\ \dots \\ \sum y x_k \end{pmatrix}$$

Щоб отримати відповідь, тобто. вектор, залишається звернути матрицю $X^T X$ і помножити зворотну матрицю на $X^T Y$.

Після розрахунку коефіцієнтів регресії переходять до статистичного аналізу

отриманого математичного опису, який складається з трьох етапів:

- 1) оцінка дисперсії відтворюваності (оцінка помилки досліду);
- 2) оцінка значущості коефіцієнту у рівнянні регресії;
- 3) оцінка адекватності математичного опису.

Дисперсія випадкової величини – характеристика розсіювання випадкової величини навколо її математичного очікування – S_0^2 .

Дисперсійна оцінка – сума квадратів відхилень, поділена на кількість ступенів свободи:

$$S^2 = \frac{\sum (y_i - y_j)^2}{f},$$

де f – кількість ступенів свободи – поняття, яке враховує, що у статистичних ситуаціях необхідно приймати до уваги зв'язки, що обмежують свободу зміни випадкової величини.

Дисперсія відгуку – помилка досліду, або дисперсія відтворюваності S_0^2 , S_b^2 – дисперсія, що характеризує відтворюваність експерименту, розраховується, як середнє арифметичне вибірових дисперсій за результатами паралельних дослідів у випадку, якщо ці дисперсії однорідні.

Залишкова дисперсія (S_3^2) й дисперсія адекватності ($S_{\hat{a}\hat{a}}^2$) – характеризують розсіювання дослідних даних щодо розрахованих за рівнянням регресії.

Рівняння регресії – математична модель, яка отримана шляхом математичної статистичної обробки.

Рівень значущості α (q) – поняття, що виражає вірогідність, якою можна знехтувати у даній області дослідження.

$$\alpha = 1 - p, p = 0,95, \alpha = 0,05,$$

p – вірогідність, з якою можна довіряти експериментальним значенням.

Довірчий інтервал Δb_j – інтервал зміни випадкової величини, у якому значення випадкової величини p може вважатися вірогідним.

Розрахунок помилки досліду оцінюється за паралельними дослідями. Випадок, коли заздалегідь відома S_0^2 , найменш вірогідний. Перед розрахунком

помилки досліду необхідно переконатися, що розсіювання результатів експерименту у кожній точці факторного простору не перевищує деякої величини, тобто слід переконатися, що дисперсія однорідна.

З цією метою розраховують за кожним дослідом порядкові дисперсії та перевіряють їх на однорідність.

$$S_{ui}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_{im} - y_i)^2}{M - 1}.$$

Серед порядкових дисперсій обираємо максимальну $S_{u \max}^2$.

G_p – розрахункове значення критерію Кохрена.

$$G_p = \frac{S_{u \max}^2}{\sum_{i=1}^N S_{ui}^2}.$$

За літературними джерелами визначаємо табличне значення критерію Кохрена – за рівнем значущості $\alpha=0,05$, і двома ступенями свободи $f_1=M-1$ і $f_2=N$. Якщо розрахункове значення менше від табличного, то дисперсія однорідна, якщо більше чи дорівнює табличному, то дисперсія неоднорідна.

На практиці приймають такі рішення: збільшити кількість паралельних дослідів M , або змінити метод контролю та його точність вимірювання (Y).

Часто експериментаторам відома дуже добра відтворюваність за рядками матриці планування, тому для оцінки відтворюваності експерименту достатньо провести ряд паралельних дослідів в одній з точок факторного простору (часто це центр плану). Кількість паралельних дослідів у центрі плану не менше 3. Далі розраховують дисперсію відтворюваності.

$$S_b^2 = \frac{\sum_{i=1}^M (y_{bi} - \bar{y}_b)^2}{M_0 - 1}, \quad \bar{y}_b = \frac{\sum_{i=1}^{M_0} y_{bi}}{M_0},$$

де M_0 – кількість паралельних дослідів.

Перевірка коефіцієнтів рівняння регресії на значущість. Очевидно, що один фактор більше впливає на змінну стану, за інший. Для оцінки цього впливу

проводять перевірку значущості кожного коефіцієнту рівняння регресії. Перевірку можна проводити двома способами:

- 1) за критерієм Стьюдента (t-відношення);
- 2) за довірчим інтервалом (Δb_j).

Спочатку в обох випадках проводимо розрахунок дисперсій коефіцієнтів:

$$S_{bj}^2 = \frac{S_b^2}{N} \quad - \quad \text{якщо немає паралельних дослідів за рядками матриці}$$

планування, або

$$S_{bj}^2 = \frac{S_0^2}{MN},$$

де N – кількість рядків матриці;

M – кількість паралельних дослідів.

Дисперсії всіх коефіцієнтів рівні й залежать тільки від помилки дослідів і кількості дослідів.

Робимо перевірку значущості коефіцієнтів:

- 1) за критерієм Стьюдента:

- розрахункове значення за кожним коефіцієнтом

$$t_{pj} = \frac{|b_j|}{S_{bj}}, \quad S_{bj} = \sqrt{S_{bj}^2};$$

- визначаємо табличне значення критерію Стьюдента t_t за умов $\alpha=0,05$, $\alpha=1-p$, p – вірогідність протікання процесу,

$f, f=N(M-1)$ – якщо є паралельні дослідів по рядках матриці планування,

$f=N-1$, якщо немає паралельних дослідів.

Розраховане значення f , α виводимо на екран із запитом табличного значення критерію Стьюдента;

- порівнюємо розрахункове значення t_{pj} з табличним t_t .

Якщо $t_{pj} \geq t_t$ - j-тий коефіцієнт значущий.

Якщо $t_{pj} < t_t$ - j-тий коефіцієнт не значущий.

- 2) за довірчим інтервалом:

- визначаємо дисперсію коефіцієнтів S_{bj} , $S_{bj} = \sqrt{S_{bj}^2}$;
- визначаємо табличне значення критерію Стьюдента Δb_j , $\Delta b_j = \pm t_t \cdot S_{bj}$;
- порівнюємо значення (за модулем) коефіцієнта і довірчого інтервалу.

Якщо $|b_j| \geq |\Delta b_j|$, коефіцієнт значущий; якщо $|b_j| < |\Delta b_j|$, коефіцієнт не значущий.

І в першому, і в другому випадку потрібно розрахувати кількість значущих коефіцієнтів і запам'ятати (L). b_0 на значущість не перевіряємо.

На практиці зазвичай приймають таке рішення: для незначущих факторів розширюють інтервал варіювання і повторюють експеримент. Якщо при цьому коефіцієнти незначущі, то збільшують кількість паралельних дослідів. Якщо коефіцієнт виявився незначущим і після цього, то викидають його з матриці планування, або уводять замість нього новий фактор і знов повністю повторюють експеримент, доки всі коефіцієнти не виявляться значущими.

Часто експериментаторам відома дуже добра відтворюваність за рядками матриці планування, тому для оцінки відтворюваності експерименту достатньо провести ряд паралельних дослідів в одній з точок факторного простору (часто це центр плану). Кількість паралельних дослідів у центрі плану не менше 3. Далі розраховують дисперсію відтворюваності.

$$S_b^2 = \frac{\sum_{i=1}^M (y_{bi} - \bar{y}_b)^2}{M_0 - 1}, \quad \bar{y}_b = \frac{\sum_{i=1}^{M_0} y_{bi}}{M_0},$$

де M_0 – кількість паралельних дослідів.

Перевірка коефіцієнтів рівняння регресії на значущість. Очевидно, що один фактор більше впливає на змінну стану, за інший. Для оцінки цього впливу проводять перевірку значущості кожного коефіцієнту рівняння регресії. Перевірку можна проводити двома способами:

- 1) за критерієм Стьюдента (t-відношення);
- 2) за довірчим інтервалом (Δb_j).

Спочатку в обох випадках проводимо розрахунок дисперсій коефіцієнтів:

$S_{bj}^2 = \frac{S_b^2}{N}$ – якщо немає паралельних дослідів за рядками матриці

планування, або

$$S_{bj}^2 = \frac{S_0^2}{MN},$$

де N – кількість рядків матриці;

M – кількість паралельних дослідів.

Дисперсії всіх коефіцієнтів рівні й залежать тільки від помилки дослідів і кількості дослідів.

Робимо перевірку значущості коефіцієнтів:

1) за критерієм Стьюдента:

- розрахункове значення за кожним коефіцієнтом

$$t_{pj} = \frac{|b_j|}{S_{bj}}, \quad S_{bj} = \sqrt{S_{bj}^2};$$

- визначаємо табличне значення критерію Стьюдента t_t за умов $\alpha=0,05$, $\alpha=1-p$, p – вірогідність протікання процесу,

$f, f=N(M-1)$ – якщо є паралельні дослідів по рядках матриці планування,

$f=N-1$, якщо немає паралельних дослідів.

Розраховане значення f , α виводимо на екран із запитом табличного значення критерію Стьюдента;

- порівнюємо розрахункове значення t_{pj} з табличним t_t .

Якщо $t_{pj} \geq t_t$ - j -тий коефіцієнт значущий.

Якщо $t_{pj} < t_t$ - j -тий коефіцієнт не значущий.

2) за довірчим інтервалом:

- визначаємо дисперсію коефіцієнтів S_{bj} , $S_{bj} = \sqrt{S_{bj}^2}$;

- визначаємо табличне значення критерію Стьюдента Δb_j , $\Delta b_j = \pm t_t \cdot S_{bj}$;

- порівнюємо значення (за модулем) коефіцієнта і довірчого інтервалу.

Якщо $|b_j| \geq |\Delta b_j|$, коефіцієнт значущий; якщо $|b_j| < |\Delta b_j|$, коефіцієнт не значущий.

І в першому, і в другому випадку потрібно розрахувати кількість значущих коефіцієнтів і запам'ятати (L). b_0 на значущість не перевіряємо.

На практиці зазвичай приймають таке рішення: для незначущих факторів розширюють інтервал варіювання і повторюють експеримент. Якщо при цьому коефіцієнти незначущі, то збільшують кількість паралельних дослідів. Якщо коефіцієнт виявився незначущим і після цього, то викидають його з матриці планування, або уводять замість нього новий фактор і знов повністю повторюють експеримент, доки всі коефіцієнти не виявляться значущими.

Обробка експериментальних даних

Перетворимо модель до вигляду узагальненої лінійної залежності:

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

z_{13}

z_{123}

$$\text{де } z_{12} = x_1 x_2; \quad z_{13} = x_1 x_3; \quad z_{23} = x_2 x_3; \quad z_{123} = x_1 x_2 x_3 .$$

Значення коефіцієнтів рівняння регресії будемо шукати за методом найменших квадратів (МНК) в матричному вигляді

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

де n - кількість точок плану, p - кількість факторів;

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix}$$

- вектор-стовпчик значень залежної змінної (параметра оптимізації), що спостерігаються у певних точках плану;

$$B = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \dots \\ b_k \end{pmatrix}$$

- вектор-стовпчик невідомих коефіцієнтів.

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

Матриця моментів $X^T X$ має вигляд

$$(X^T X) = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^8 x_{0i}^2 & \sum_{i=1}^8 x_{0i}x_{1i} & \sum_{i=1}^8 x_{0i}x_{2i} & \sum_{i=1}^8 x_{0i}x_{3i} \\ \sum_{i=1}^8 x_{1i}x_{0i} & \sum_{i=1}^8 x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^8 x_{1i}x_{2i} & \sum_{i=1}^8 x_{1i}x_{3i} \\ \sum_{i=1}^8 x_{2i}x_{0i} & \sum_{i=1}^8 x_{2i}x_{1i} & \sum_{i=1}^8 x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^8 x_{2i}x_{3i} \\ \sum_{i=1}^8 x_{3i}x_{0i} & \sum_{i=1}^8 x_{3i}x_{1i} & \sum_{i=1}^8 x_{3i}x_{2i} & \sum_{i=1}^8 x_{3i}^2 \end{pmatrix}$$

З огляду на властивості одержимо

$$[(X^T X)]^{-1} = \begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}$$

Матриця, зворотна матриці моментів $(X^T X)^{-1}$, дорівнює

$$(X^T X)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{pmatrix}$$

Таким чином,

$$(X^T Y) = \begin{bmatrix} N \\ \sum_{i=1}^8 x_{0i}y_i \\ N \\ \sum_{i=1}^8 x_{1i}y_i \\ N \\ \sum_{i=1}^8 x_{2i}y_i \\ N \\ \sum_{i=1}^8 x_{3i}y_i \end{bmatrix} \cdot B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 1/8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/8 \end{pmatrix} \cdot \begin{bmatrix} N \\ \sum_{i=1}^8 x_{0i}y_i \\ N \\ \sum_{i=1}^8 x_{1i}y_i \\ N \\ \sum_{i=1}^8 x_{2i}y_i \\ N \\ \sum_{i=1}^8 x_{3i}y_i \end{bmatrix}$$

2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	35
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	30
4	+1	+1	+1	-1	+1	+1	+1	-1	45
5	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	50
6	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	58
7	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	40
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	54

Ефекти взаємодії визначаються аналогічно лінійним ефектам і дорівнюють $b_{12}=+1,00$, $b_{13}=+ -0,75$, $b_{23}=+ -9,50$, $b_{123}=+ +0,50$.

Якщо поставити додатково паралельні досліди, можна визначити $s_{\text{відтв}}$, перевірити значущість коефіцієнтів регресії і за наявності степенів вольності -- адекватність рівняння.

У зв'язку з тим що коваріаційна матриця $(X^T X)^{-1}$ для спланованого експерименту - матриця діагональна, коефіцієнти рівняння регресії некорельовані між собою. Значущість коефіцієнтів рівняння регресії можна перевіряти для кожного коефіцієнта окремо за критерієм Стюдента. Виключення з рівняння регресії незначущого коефіцієнта не позначиться на інших коефіцієнтах. При цьому вибіркові коефіцієнти b_j виявляються так званими незмішаними оцінками для відповідних генеральних коефіцієнтів

$$b_j \rightarrow \beta_j$$

тобто величини коефіцієнтів рівняння регресії характеризують внесення кожного фактора у величину y . Діагональні елементи коваріаційної матриці рівні між собою, тому всі коефіцієнти рівнянь визначаються за формулою:

$$s_{b_j} = \frac{s_{\text{відтв}}}{\sqrt{N}}$$

Наприклад, у центрі плану поставлені додатково три паралельних досліди й отримані такі значення y :

$$y_1^0 = 46,3; y_2^0 = 46,9; y_3^0 = 47,1$$

$$\bar{y}^0 = \frac{\sum_{u=1}^3 y_u^0}{3} = 46,8$$

$$s_{\text{сидме}}^2 = \frac{\sum_{u=1}^3 (y_u^0 - \bar{y}^0)^2}{2} = 0,17; s_{\text{сидме}} = 0,42$$

$$s_{b_j} = \frac{0,42}{\sqrt{8}} = 0,15$$

Оцінимо значущість коефіцієнтів за критерієм Стьюдента:

$$t_j = \frac{|b_j|}{s_{b_j}}$$

Таблиця 2.3

Результати визначення за критерієм Стьюдента

t_0	t_1	t_2	t_3	t_{12}	t_{13}	t_{23}	t_{123}
283,64	42,46	3,40	59,44	6,79	5,10	64,54	3,40

Табличне значення критерію Стьюдента для рівня значущості $p=0,05$ і числа степенів вольності $f=2$ $t_p(f)=4,3$. Таким чином, коефіцієнти b_2 і b_{123} незначні і їх потрібно виключити з рівняння. Статистична незначущість оцінки b_j коефіцієнта регресії може бути обумовлена такими причинами:

1) даний j -й фактор не має функціонального зв'язку з відкликом y , тобто $j=0$;

$$\beta_1 = \frac{dy}{dz_i} = 0$$

2) рівень Z_i базового режиму Z_0 знаходиться в точці частого екстремуму функції відклику за фактором Z_i і тоді ;

3) інтервал варіювання Z_i взятий невеликим;

4) унаслідок впливу некерованих і неконтрольованих факторів виявляється велика помилка відтворюваності експерименту.

Ортогональне планування дозволяє визначати довірчі границі незалежно для кожного з коефіцієнтів регресії. Тому, якщо яка-небудь з оцінок коефіцієнтів виявиться незначущою, то її можна відкинути без перерахування всіх інших. Після цього математичну модель об'єкта складають у вигляді рівняння зв'язку відклику у і факторів Z_i , що включає тільки значущі оцінки коефіцієнтів. Після виключення незначущих коефіцієнтів рівняння регресії має вигляд

Перевірку адекватності отриманого рівняння проводять за критерієм Фішера:

$$F = \frac{s_{\text{зал}}^2}{s_{\text{відтв}}^2}$$

$$s_{\text{зал}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^8 (y_i - \hat{y}_i)^2}{N-1} = \frac{4,00}{2,00} = 2,00; \quad s_{\text{відтв}}^2 = 0,42$$

$$F = \frac{2,00}{0,42} = 4,80.$$

1 - кількість значущих коефіцієнтів у рівнянні регресії, дорівнює 6. Табличне f_2

значення критерію Фішера для $p=0,05$, $f_1 = 6$; $f_2 = 2$ $F_{1-p}(f_1, f_2) = 19,3$,

$F < F_{1-p}(f_1, f_2)$). Отже, отримане рівняння регресії адекватно описує експеримент.

2.2 Оптимізаційні алгоритми

Серед об'єктів, що оптимізуються, виділимо об'єкти, для яких існує математичний опис. В цьому випадку залежність показника якості від параметрів, що оптимізуються, відома. Для таких об'єктів є достатній об'єм апріорної інформації. Існує також великий клас об'єктів, для яких немає ніякого математичного опису.

На підставі критерію оптимальності об'єкту, при обліку обмежень, що накладаються на цільову функцію, застосовується той або інший метод оптимізації. Об'єкти оптимізації можна класифікувати по ряду ознак. До таких ознак відносяться:

- число параметрів об'єкту, що оптимізуються;
- число екстремумів;
- об'єм апріорної інформації про об'єкт;
- спосіб математичного опису об'єкту.

По числу змінюваних параметрів розрізняють одно- і багатопараметричні об'єкти. Залежно від кількості екстремумів, об'єкти поділяють на однокстремальні і багатокстремальні, причому в останньому випадку оптимізаційне завдання зводиться до відшукування глобального екстремуму, тобто мінімального мінімуму і максимального максимуму. Завдання пошуку екстремуму функції означає знаходження її максимуму або мінімуму в деякій області її аргументів. Пошук екстремуму функції включає завдання знаходження локального і глобального екстремуму. Глобальним екстремумом називають найбільший максимум або найменший максимум функції.

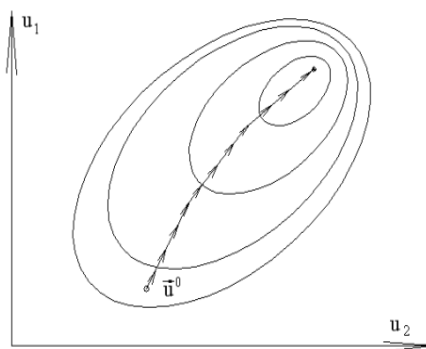


Рис. 2.1 Пошук екстремуму градієнтним методом

Алгоритм

1. Задаються початкове наближення і точність розрахунку \vec{x}^0 , ϵ
2. Розраховують $\vec{x}^{[j+1]} = \vec{x}^{[j]} - \lambda^{[j]} \nabla F(\vec{x}^{[j]})$,
Де $\lambda^{[j]} = \operatorname{argmin}_{\lambda} F(\vec{x}^{[j]} - \lambda^{[j]} \nabla F(\vec{x}^{[j]}))$

3. Перевіряють умова зупину:

- Якщо $|\vec{x}^{[j+1]} - \vec{x}^{[j]}| > \epsilon$, То $j = j + 1$ і перехід до кроку 2.
- Інакше $\vec{x} = \vec{x}^{[j+1]}$ і зупинка.

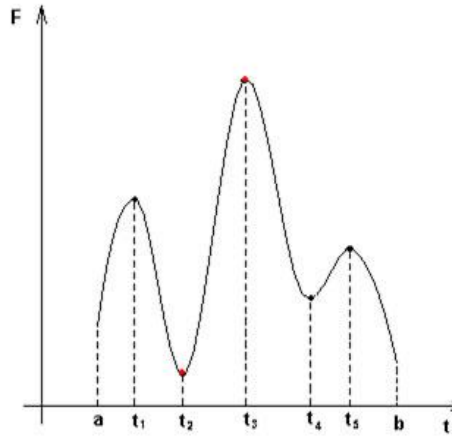


Рис. 2.2 Глобальний екстремум

Функція $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, визначена в точках n , - мірного простору $\bar{x} = \bar{a}$, має в цій точці локальний максимум (мінімум), якщо $\exists \delta > 0 \forall x \in D \ 0 < \|\bar{x} - \bar{a}\| < \delta \ f(\bar{x}) - f(\bar{a}) < 0$. Якщо в кожному з цих випадків виконується нестрога нерівність (\leq ; \geq), то говорять про нестрогий максимум (мінімумі).

Для функцій декількох змінних справедлива формула Тейлора :

$$\begin{aligned} \Delta f &= f(x_1, x_2, \dots, x_n) - f(a_1, a_2, \dots, a_n) = df + \frac{d^2 f}{2!} + \frac{d^3 f}{3!} + \dots = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \Big|_{\bar{x}} = \\ &= \bar{a} \Delta x_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\bar{x}} = \bar{a} \Delta x_i \Delta x_j + (\|\bar{x} - \bar{a}\|^2) \end{aligned}$$

яка справедлива в околиці деякої точки $\bar{x} = \bar{a}$.

Існує теорема , яка говорить про необхідну умову існування екстремуму: для того, щоб $f(\bar{x})$ мала екстремум в точці $\bar{x} = \bar{a}$ необхідно, щоб в цій точці $df(\bar{a}) = 0$,

тобто щоб

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial f}{\partial x_1} \right|_{x=\bar{a}} = 0 \\ \dots\dots\dots \\ \left. \frac{\partial f}{\partial x_n} \right|_{x=\bar{a}} = 0 \end{cases} \quad (1.1)$$

Достатня умова існування екстремуму визначається наступною теоремою.

Нехай в точці $\bar{x} = \bar{a}$ виконана необхідна умова (1.1). Якщо квадратична форма

$$d^2 f = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\bar{x} = \bar{a}} \Delta x_i \Delta x_j$$

є негативно визначеною формою, то в цій точці $f(\bar{x})$ має максимум (якщо позитивно визначена, то мінімум). Інакше, коли $d^2 f$ є невизначеною квадратичною формою, в точці $\bar{x} = \bar{a}$ немає ні максимуму, ні мінімуму.

Рішення подібних завдань пошуку максимуму і мінімуму, що відносяться до завдань на відшукування безумовного екстремуму, найчастіше проводиться за допомогою ітераційних градієнтних чисельних методів.

В деяких випадках формулюється завдання визначення екстремуму за наявності деяких умов, що задаються за допомогою рівності типу

$$F_i(\bar{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, k \quad (1.2)$$

чи нерівностей. У цих випадках говорять про завдання на умовний екстремум. Існує теорема (її іноді називають умовою Лагранжа [11]), яка дає необхідну умову існування екстремуму. Нехай є $k < n$ умовний вид (1), при виконанні яких вимагається знайти екстремум для функції $f(\bar{x})$. Представимо функцію Лагранжа у виді

$$L(\bar{x}, \lambda) = f(\bar{x}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j F_j(\bar{x}) \quad (1.3)$$

де $\lambda_1 \dots \lambda_m$ - компоненти вектора λ .

Згідно з теоремою Лагранжа рішення системи рівнянь

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial x_1} \Big|_{x=a} = 0 \\ \dots \\ \frac{\partial L}{\partial x_n} \Big|_{x=a} = 0 \end{cases}$$

спільно з k умовами (1.2) визначає координати точки \bar{x} і m компонент вектора λ , де виконується необхідна умова для існування екстремуму.

Чисельна реалізація безумовного градієнтного методу. Цей метод реалізує ітераційну процедуру руху до мінімуму з довільно вибраної точки початкового наближення у напрямі найбільш сильного зменшення функції, визначеної в околиці поточного значення аргументу функції, що мінімізується. Такий напрям протилежний до напрямку, що задається вектором градієнта $\nabla f(x)$ функції, що мінімізується,

$$\nabla f(x) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right] \quad (2.1)$$

Такий підхід, природно, прискорює процес пошуку оптимуму. Процес пошуку оптимуму в методі градієнта здійснюється в два етапи. На першому знаходяться значення частинних похідних по усіх незалежних змінних, які і визначають напрям градієнта в даній точці. На другому етапі здійснюється крок в напрямі, зворотному напрямку градієнта, тобто у напрямі найшвидшого убуття функції.

При виконанні кроку одночасно змінюються значення усіх незалежних змінних. Кожна з них отримує приріст, пропорційний відповідною складовою градієнта по цій осі. По суті в методі градієнта застосовується інформація про цільову функцію, при виборі осьового напрямку, але спуск проводиться по оптимальному шляху.

Для знаходження оптимального вектора \bar{x} використовують наступну рекурентну формулу:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda^{(k)} \cdot s^{(k)} \quad (2.2)$$

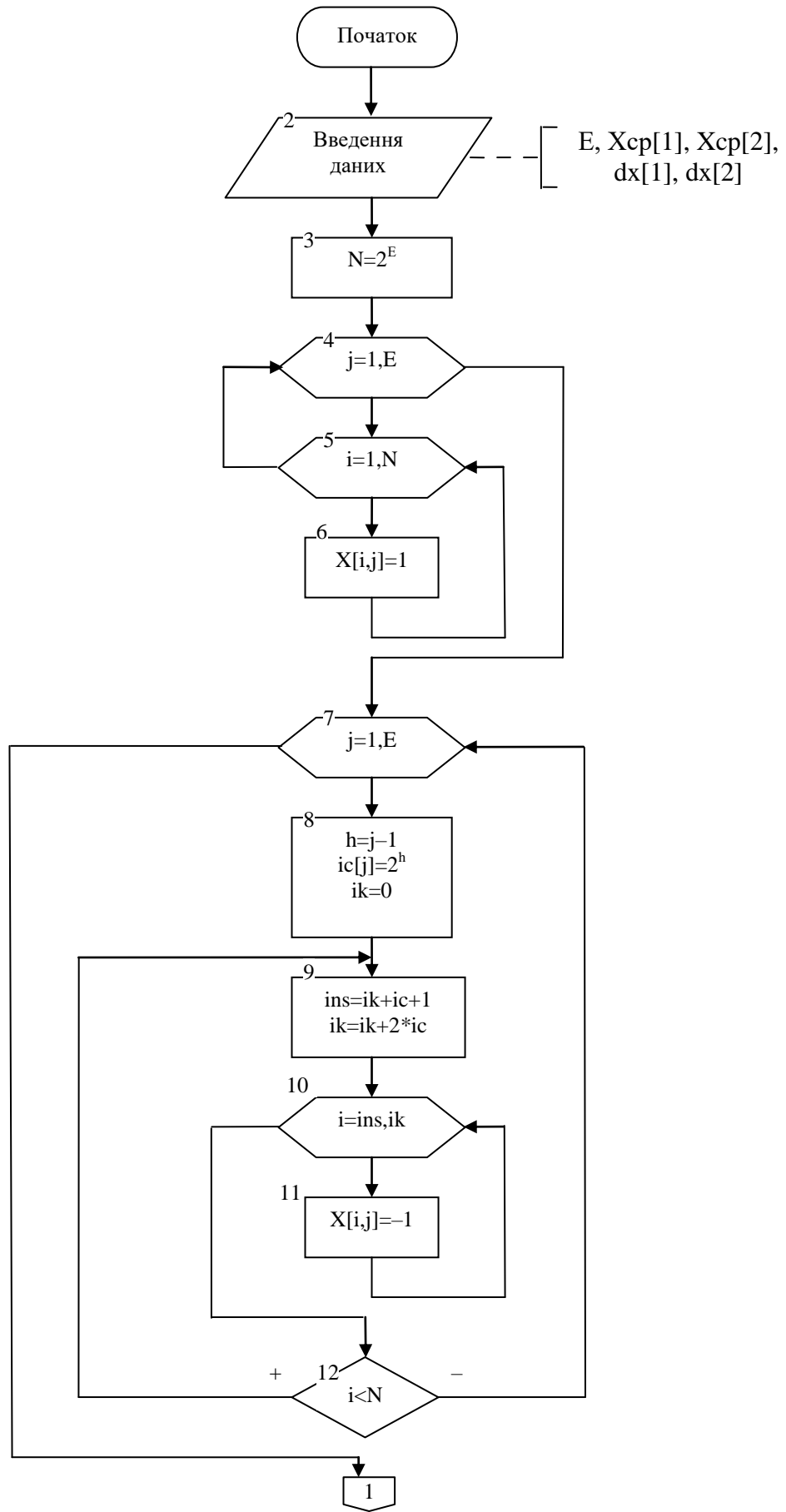
де: k - номер кроку; $s^{(k)}$ - вектор одиничної довжини в напрямі, протилежному до напрямку градієнта $\nabla f(x)$, визначеного в точці $x^{(k)}$ (далі використовуватиметься позначення $\nabla f(x^{(k)})$):

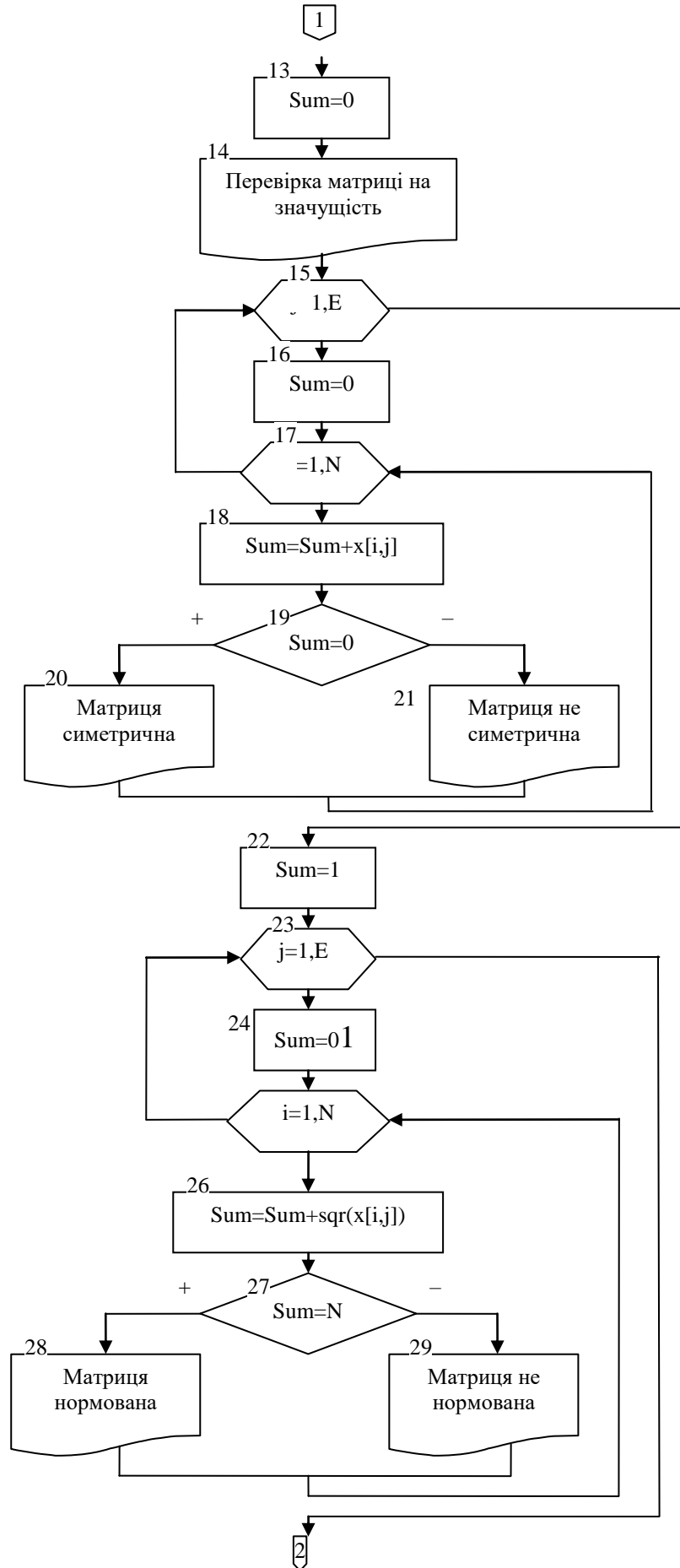
$$s^{(k)} = - \frac{\nabla f(x^{(k)})}{\|\nabla f(x^{(k)})\|} \quad (2.3)$$

$\|\nabla f(x^{(k)})\|$ - норма (наприклад, довжина) вектора градієнта $\nabla f(x^{(k)})$:

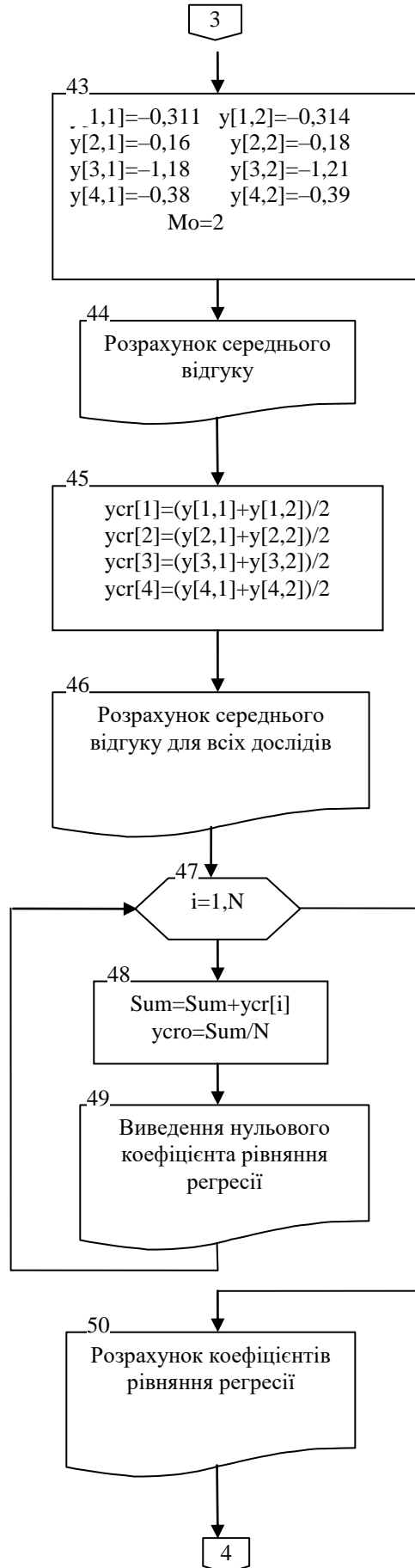
$$\|\nabla f(x^{(k)})\| = \sqrt{\left(\frac{\partial f(x_1^{(k)})}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial f(x_2^{(k)})}{\partial x_2}\right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial f(x_n^{(k)})}{\partial x_n}\right)^2} \quad (2.4)$$

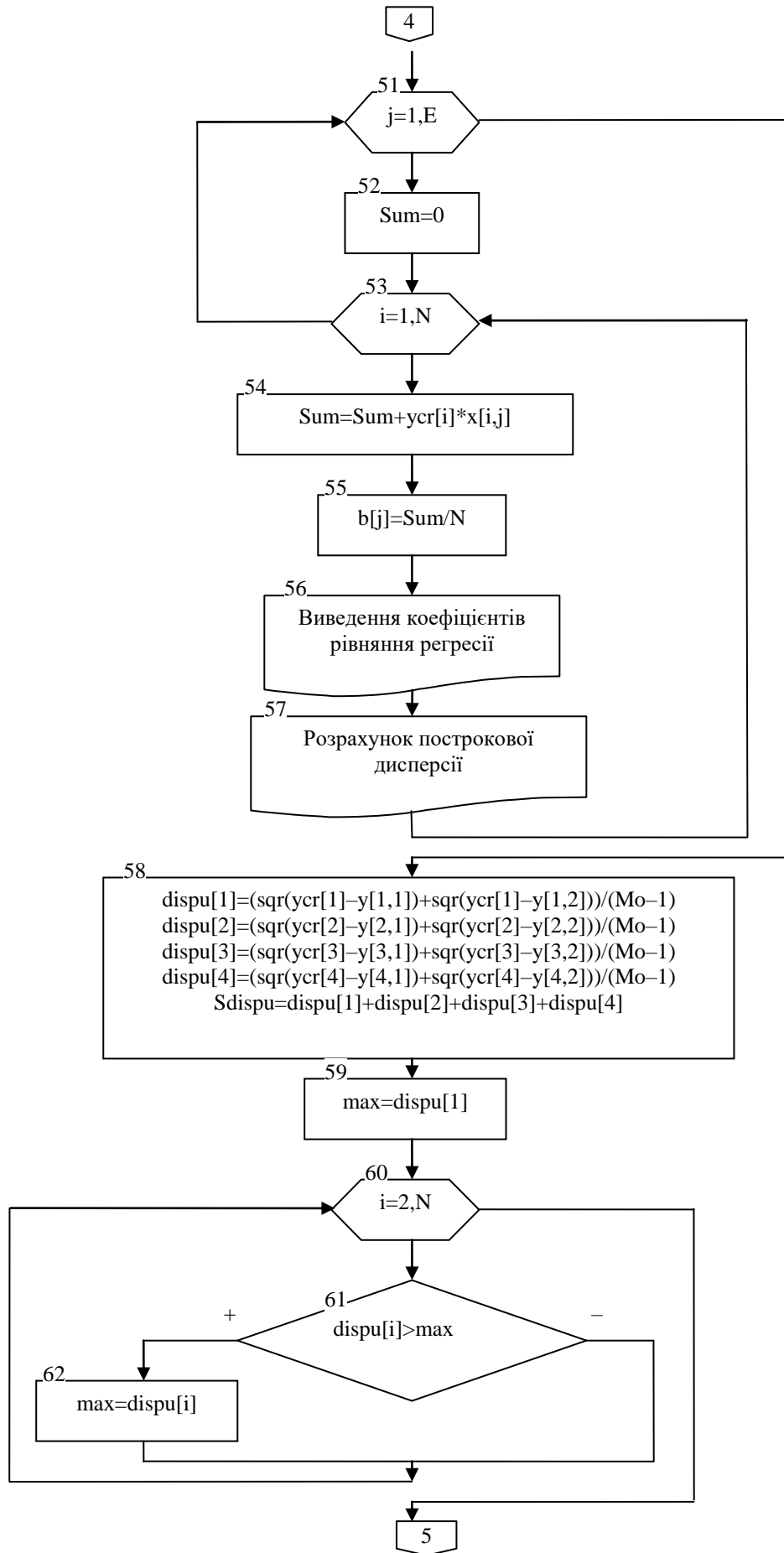
Блок-схема методу повного факторного експерименту

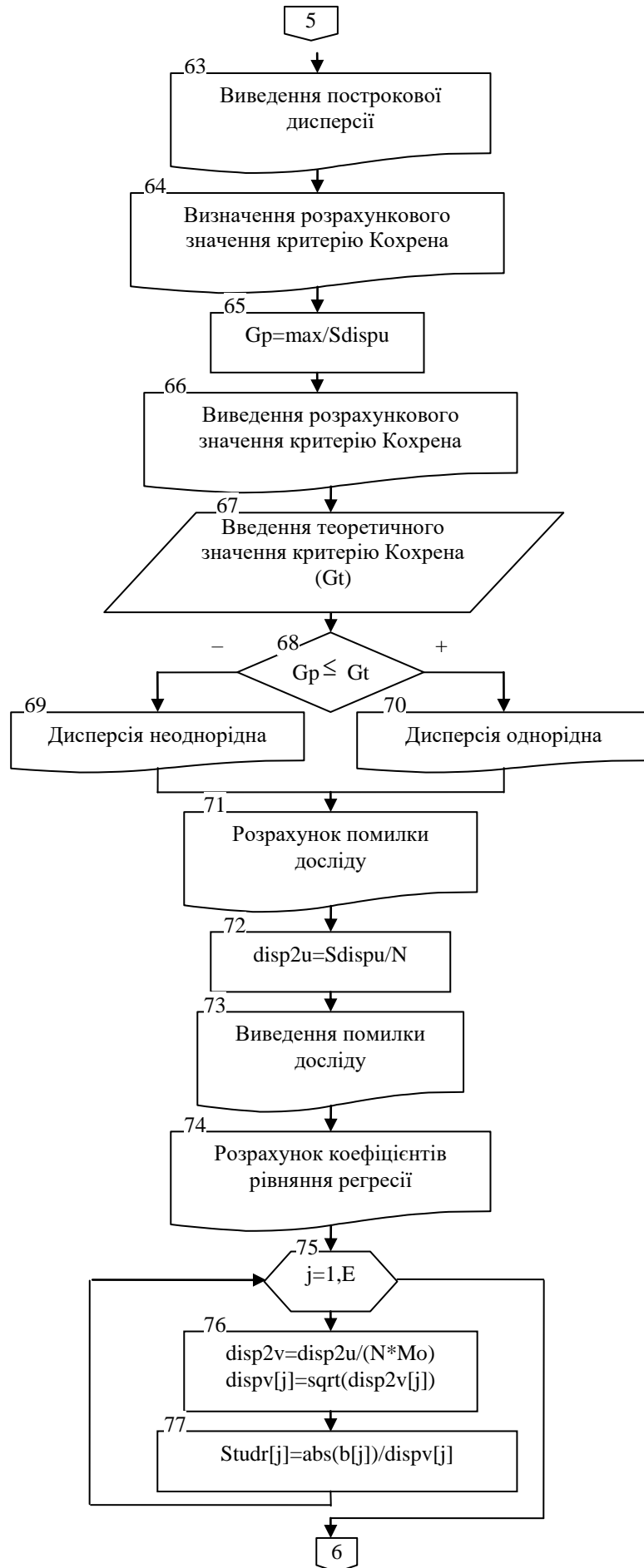


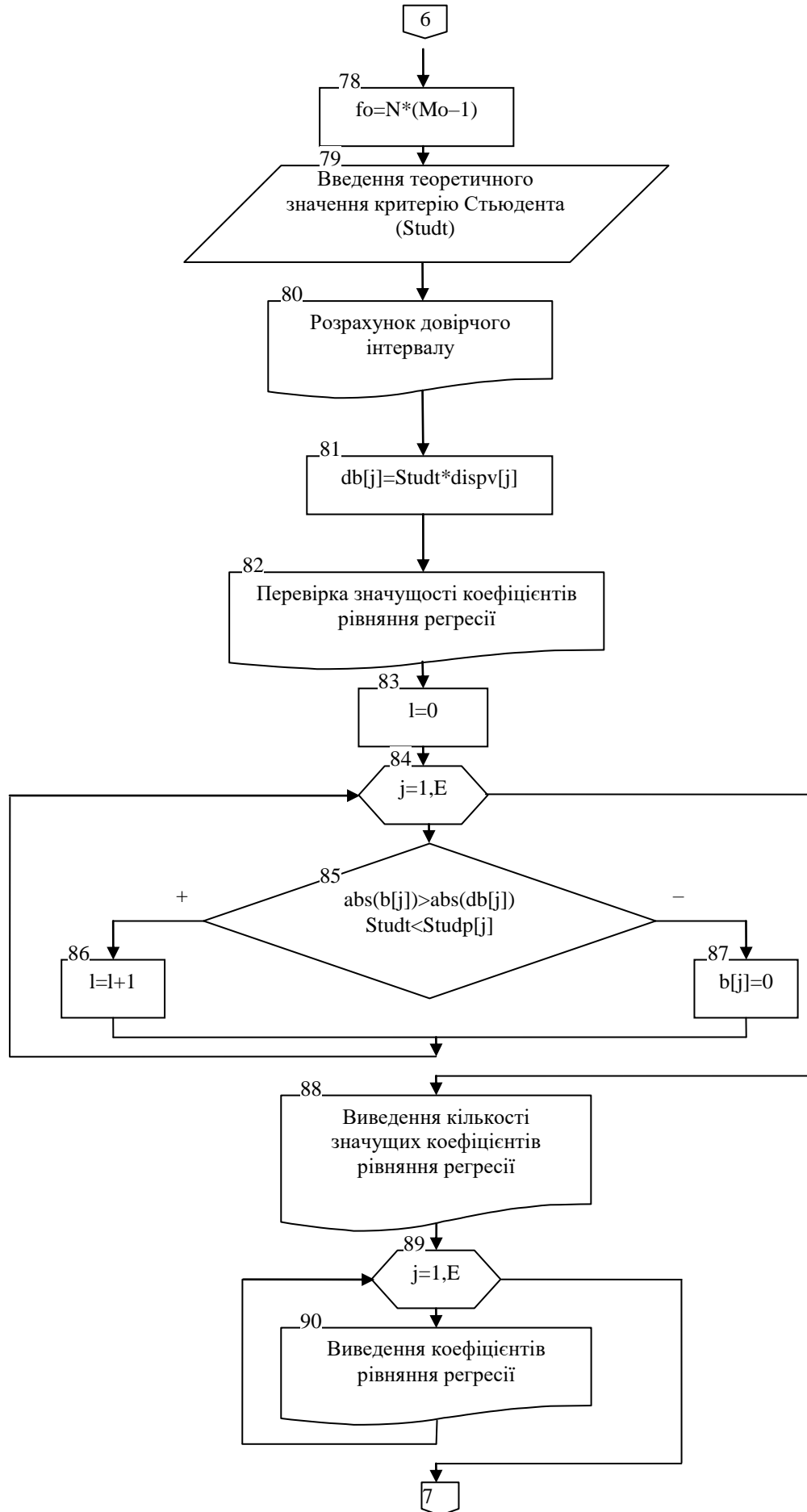


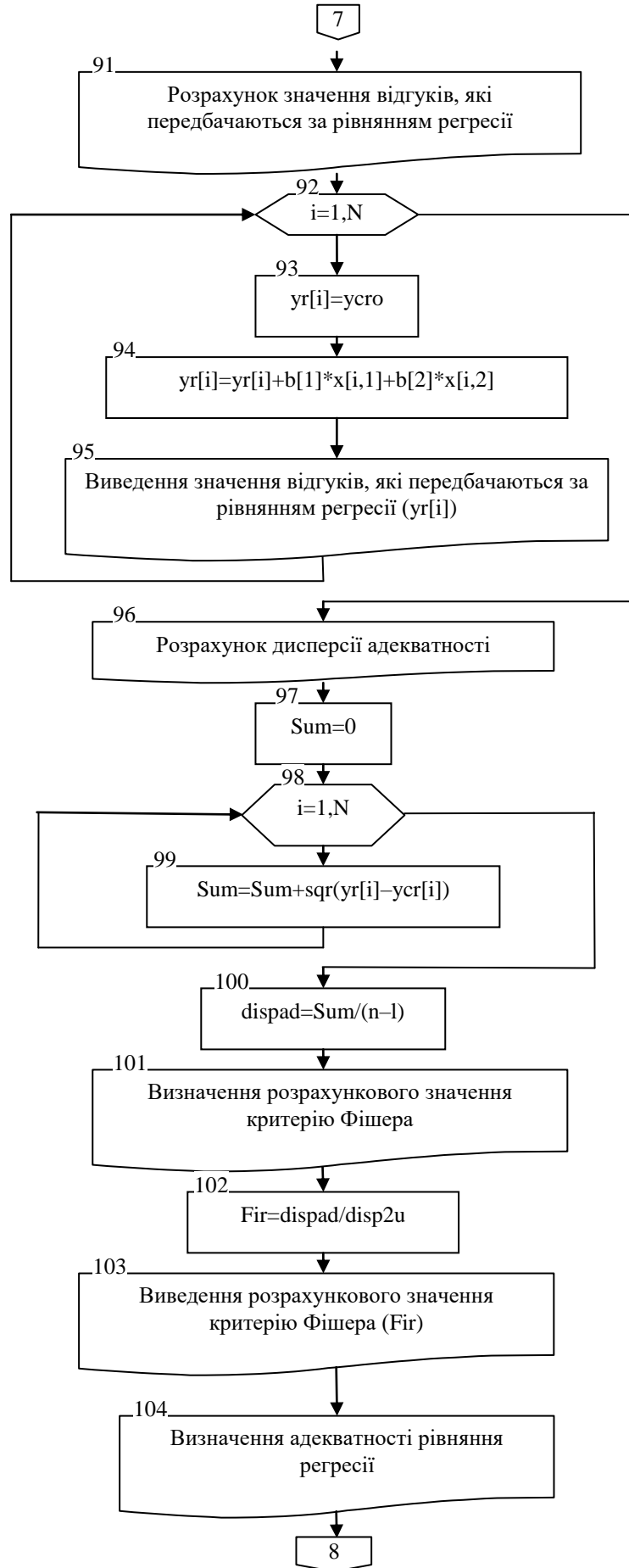


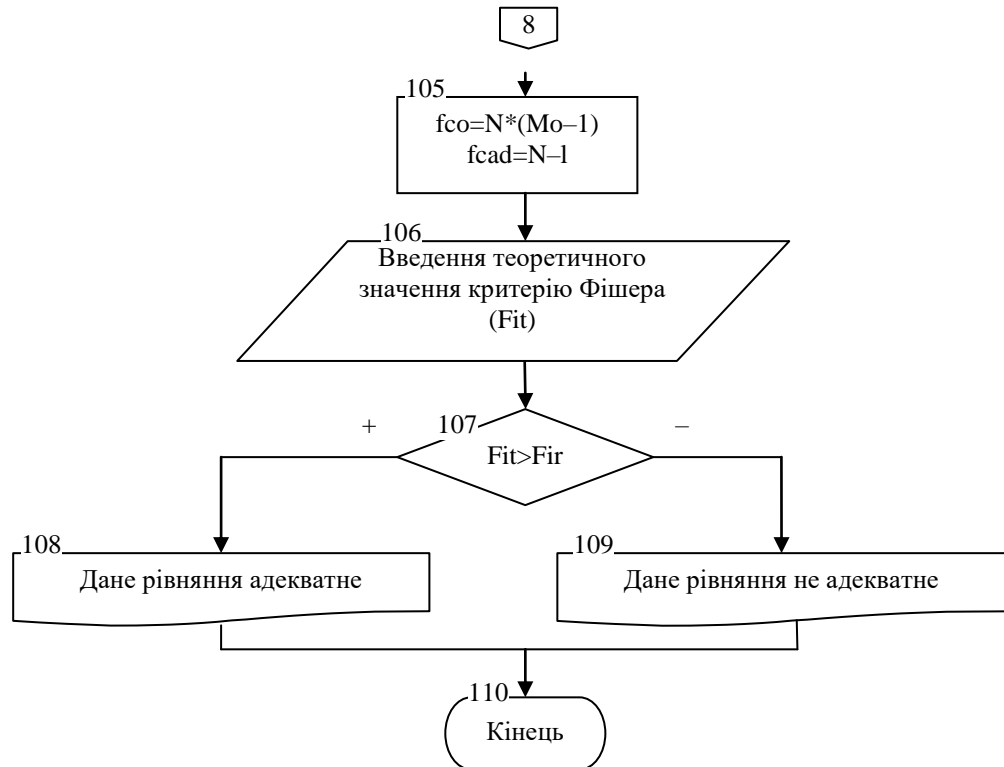












2.3 Висновки до розділу 2

Було побудовано план повного факторного експерименту типу 2^3 . Створили математичну модель у вигляді рівняння регресії. Обробка експериментальних даних здійснюється завдяки методу найменших квадратів. Отримана модель дозволила оптимізувати вхідні параметри, що впливають на результат. Отриманий коефіцієнт визначає вплив першого фактора при наявності другого фактору і навпаки, вплив другого чинника при наявності першого.

Розділ 3

Програмне забезпечення

3.1 Програмні засоби реалізації побудови плану експерименту

Програма написана серед розробки Borland Delphi. Вона є працездатною та змінюваною.

Список використовуваних змінних

expResult: array[1..8, 1..10] of real;

матриця, що зберігає результати експерименту

yAverage: array[1..8] of real;

матриця що зберігає рядкові середні значення експериментальних даних У

yExpResult: array[1..8] of real;

матриця, що зберігає значення експериментальних даних Y. Експеримент побудований за отриманою математичною моделлю.

regCoefficient: array[0..3] of real;

матриця, що зберігає значення коефіцієнтів регресії, отриманих за формулами

tCritery: array[0..3] of real;

матриця, що зберігає значення t-критерію для кожного коефіцієнта рівняння регресії, розрахованих за формулою

dSu: array[1..8] of real;

матриця, що зберігає значення рядкових дисперсій, полікованих за формулою 9.

dSo: real;

помилка експерименту.

dSbi: real;

середньоквадратичне відхилення коефіцієнтів регресії, необхідні знаходження критерію Стьюдента, формули

Sad: real;

дисперсія адекватності математичної моделі.

fP: real;

переменная хранящая значение критерия Фишера. Проверка адекватности математической модели, формула 19.

G: real;

переменная хранящая значение критерия Кохрена. Проверка однородности дисперсий на каждом уровне фактора, формула 10.

gipotesa1D: boolean;

змінна що зберігає значення однорідності дисперсій. Значення True відповідає факту, що дисперсії однорідні, False – зворотне твердження.

regAd: boolean;

змінна що зберігає значення адекватності математичної моделі. Значення True відповідає тому, що математична модель адекватна, False – зворотне твердження.

decisionRegMean: array[0..3] of boolean;

матриця, що зберігає значення значущості коефіцієнтів регресії. Значення True відповідає тому факту, що цей коефіцієнт значущий, False - зворотне твердження.

Список процедур та функцій

function RandomNorm(mF, dF: real): real;

функція повертає величину із заданою дисперсією та мат. очікуванням та нормальним розподілом.

function CalculateX(level: byte): real;

функція, що повертає значення x на заданому рівні експерименту.

procedure MakeExperiment;

процедура здійснює експеримент за заданих умов.

procedure CalculateYAverage;

процедура що обчислює рядкові середні значення Y.

procedure CalculateRegCoefficients;

процедура що обчислює коефіцієнти регресії.

procedure CalculatedSu;

процедура підраховує дисперсію dSu.

procedure Check1D;

процедура перевірки однорідності дисперсій

procedure CalculatedSo;

процедура обчислення помилки експерименту

procedure CalculateRegMean;

процедура, що здійснює перевірку значущості коефіцієнтів регресії.

procedure MakeDecision;

процедура прийняття рішень за результатами перевірки критерію Стьюдента.

функція CalculateL: byte;

функція, що повертає кількість значущих коефіцієнтів регресії, необхідна для перевірки адекватності рівняння регресії за критерієм Фішера.

procedure CalculateYExp;

процедура підрахунку експериментального значення Y. Експеримент проводиться за отриманим рівнянням регресії.

procedure CheckRegAd;

процедура перевірки адекватності рівняння регресії

procedure FillPlaneMatrix;

Процедура виведення даних: план експерименту.

procedure FillExpMatrix;

Процедура виведення даних: результат експерименту

procedure FillYAverage;

процедура виведення даних: строкові середні значення Y.

procedure FillRegCoefficient;

процедура виведення даних: коефіцієнти регресії

procedure FillDSu;

процедура виведення даних: рядкові дисперсії.

procedure FillExpMistake;

процедура виведення: помилка експерименту.

procedure FillRegCoefficientCritery;

процедура виведення даних: важливість коефіцієнтів регресії.

procedure FillYExp;

процедура виведення даних: Y , отриманий за рівнянням регресії.

procedure FillFCritery;

Процедура виведення даних: критерій Фішера.

procedure FillresultTables;

процедура, що об'єднує виведення даних

Відповідно, всі результати роботи програми можна переглянути через закладки.

Наступні малюнки дають повну наочність програми, що забезпечується завдяки графічному інтерфейсу.

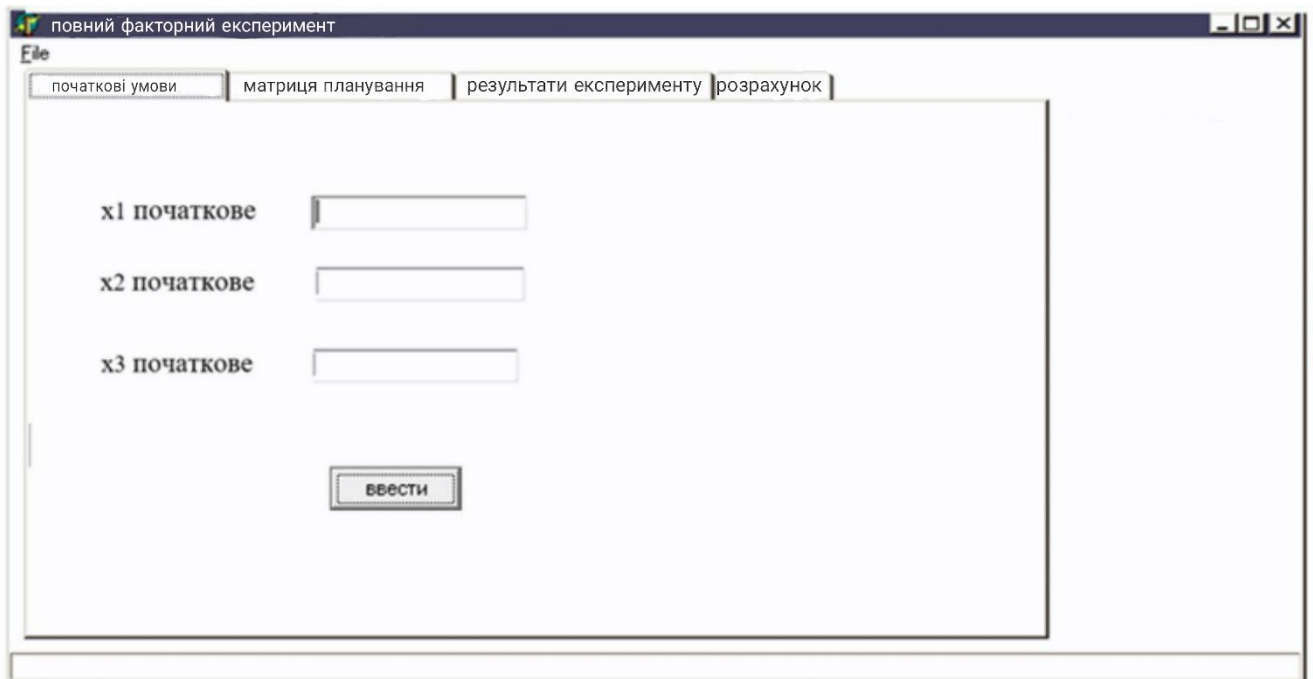


Рис. 3.1 демонстрація програми. Закладка «початкові умови»

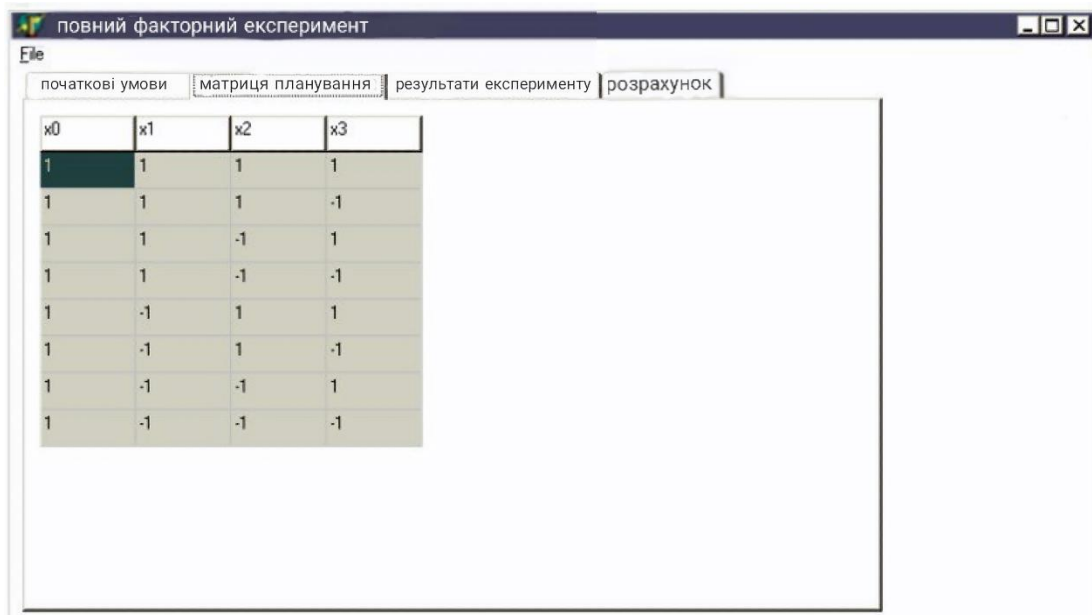


Рис. 3.2 демонстрація матриці планування

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	50,400	50,380	49,849	50,270	50,225	49,970	50,196	50,296	50,162	50,128
2	261,548	261,296	261,555	261,062	261,562	261,412	261,013	261,365	261,104	261,390
3	71,553	71,460	71,540	71,804	71,896	71,789	71,702	71,842	71,472	71,821
4	282,892	283,105	282,640	283,016	282,705	282,575	282,685	282,632	282,671	283,187
5	-165,690	-165,692	-165,921	-165,614	-165,979	-165,606	-166,096	-166,016	-166,093	-166,053
6	45,243	45,468	45,164	45,221	44,989	45,188	44,961	45,444	45,167	45,411
7	-144,055	-144,494	-144,317	-144,564	-144,326	-144,367	-144,610	-144,438	-144,217	-144,005
8	66,749	66,567	66,705	66,720	67,073	67,108	66,615	66,698	66,823	66,647

Рис. 3.3 Результати експерименту

3.3 Демонстрація роботи програми

Програма складається з двох форм. Перша форма показує засоби реалізації побудови плану експерименту. Друга форма показує нам результати оптимізації.

повний факторний експеримент

File

початкові умови | матриця планування | результати експерименту | розрахунок

Y1

Y1

Y1

записати в файл

друк

Рис. 3.4 демонстрація програми. Закладка «Розрахунок»

Висновки до розділу 3

Наведена програма розрахунку, роз'яснює сенс використаних змінних, викладені теоретичні основи стосовно питань, пов'язаних із побудовою матриці плану й операціями, що застосовуються до результатів експерименту.

Висновки

Факторний експеримент першого порядку передбачає таке проведення досліджень, яке дозволяє у деякий оптимальний спосіб отримати інформацію про об'єкт у вигляді поліноміальної лінійної моделі і провести її статистичний аналіз. Зазначена математична модель зазвичай призначена для виконання екстраполяції (у невеликих межах), оптимізації (пошуку локального оптимуму) і може також використовуватися для інтерполяції.

Оптимізація параметрів формування мікрофібрилярних структур являє великий науковий і практичний інтерес, оскільки дає можливість отримувати мікрОВОлокна за коротший час. Розробка цієї програми значно полегшить.

У даній роботі описане виконання повного факторного експерименту, складена математична модель процесу, що отримана за допомогою засобів математико-статистичної обробки експериментальних даних, тобто рівняння регресії й перевірки на адекватність. Установлено, що складене рівняння адекватно описує досліджуваний процес.

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.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Резанова Н.М., Будащ Ю.О., Плаван В.П. Інноваційні технології хімічних волокон. Навчальний посібник. – К.: КНУТД. – 2016. – 240 с.
2. Цебрєнко М. В. Ультратонкі синтетичні волокна - М.: Хімія, 1991. - 214ст.
3. Повний факторний експеримент. -Режим доступу: https://studwood.ru/1966862/matematika_himiya_fizika/povniy_faktorniy_eksperiment.
4. Зедгинидзе И.Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. – М.: Наука, 1976. – 392 с.
5. Єремєєв В.С., Рефатова С.Т. Теорія планування експерименту. – М.: Мелітополь 2011. -200ст.
6. Соколовська І.Ю. Повний факторний експеримент - Новосибірськ: НДАВТ, 2010. - 36 с.
7. Математичні моделі: означення, характеристики, етапи побудови. -Режим доступу: https://vuzlit.ru/839973/matematichni_modeli_oznachennya_harakteristiki_etapi_pobudovi.
8. Арзамасцев С. В., Рецензент Н.Л., Левкіна, Паніна О.О. Моделювання та оптимізація технології полімерних матеріалів. -М.: Саратов, 2009. – 20с.
9. Поняття про оптимізацію хіміко-технологічних процесів та систем. Постановка задачі оптимізації [Електронний ресурс]: стаття. - Режим доступу до статті: http://mm.lti-gti.ru/works_lectures/5.htm.
10. Планування експерименту [Електронний ресурс]: стаття. - Режим доступу до статті: http://opds.sut.ru/old/electronic_manuals/pe/f031.htm.
11. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. – М.: Высшая школа, 1985. – 328 с.

12. Бондарь А. Г., Статюха Г. А., Потяженко И. А. Планирование эксперимента при оптимизации процессов химической технологии. – Киев, Высшая школа, 1980, 264 с.
13. Сидняев Н. Теория планирования эксперимента и анализ статистических данных. – М.: Юрайт, 2012, 400 с.
14. Кветний Р. Н. Комп'ютерне моделювання систем та процесів. Методи обчислень. 2013. -90с. *Ахназарова, С. Л.* Методы оптимизации эксперимента в химической технологии: Учеб. пособие для хим.-технол. спец. вузов / С. Л. Ахназарова, В. В. Кафаров. – М.: Высшая школа, 1985. – 327 с.
15. *Бондарь, А. Г.* Планирование эксперимента при оптимизации процессов химической технологии (алгоритмы и примеры): Учеб. пособие / А. Г. Бондарь, Г. А. Статюха, И. А. Потяженко. – К.: Вища школа, 1980. – 264 с.
16. Резанова В. Г. Перетворення задачі оптимізації при дослідженні чотирикомпонентних сумішей полімерів / К.: Вісник КНУТД. – 2016. – №2 . – С. –40-47.
17. Теслюк В.М. Математичне моделювання в САПР: Ч.1. Конспект лекцій з курсу —Математичне моделювання в САПР|| для студентів базового напрямку —Комп'ютерні науки||. – Львів: Видавництво Національного університету —Львівська політехніка||, 2009. – 64 с.
18. Штойер Р. Многокритериальная оптимизация. Теория, вычисления, и приложения.- М.: Радио и связь,1992.- 504 с
19. В. М. Теслюк, Р.В. Загарюк Методи багатокритеріальної оптимізації конспект лекцій. – Львів., 2012. -64с.
20. Васильев Ф. П. Методы оптимизации – М.: Факториал Пресс, 2002. – 415 с.
21. Лотов А. В., Поспелова И. И. Конспект лекций по теории и методам многокритериальной оптимизации / А. В. Лотов, И. И. Поспелова– М.: ВМиК МГУ, 2006. –130 с.

22. Tomotika S. On the stability of a cylindrical thread of a viscous liquid surrounded by another viscous fluid - Proc. Roy. Soc. : (London), 1935, Vol.A150- P.322-337.
23. Культин Н.Б. Програмування на Delphi-Інтернет – видавництво, 2015.- 232 ст.
24. Алексєєв М. О. Delphi. Основи програмування / М.О. Алексєєв. – Д.: Державний ВНЗ «Національний гірничий університет», 2012. – 272 с. 14:51

ДОДАТКИ

Додаток А
Програма розрахунку

```

program Kurs;
label m;
type mas=array[1..10] of real;
mass=array[1..10,1..10] of real;
var N,i,j,E,h,Mo,ic,ins,ik,l,fco,fcad: integer;
dx,xcp,b,db,yr,ycr,dispv,dispu,Studr,disp2v: mas;
x,xnat,y: mass;
fo,lam,ycro,max,Sum,Sdispu,Disp2u,dispad,Gp,Gt,Fit,Fir,Studt: real;
f1: text;
begin
assign (f1,'Kurs.res');
rewrite(f1);
E:=2;
N:=4;
xcp[1]:=1.2;
xcp[2]:=1.15;
dx[1]:=0.1;
dx[2]:=0.15;

for j:=1 to 2 do
for i:=1 to N do
x[i,j]:=1;
for j:=1 to 2 do begin
h:=j-1;
ic:=trunc(exp((h)*ln(2)));
ik:=0;

```

```
M: ins:=ik+ic+1;
ik:=ik+2*ic;
for i:=ins to ik do
x[i,j]:=-1;
if i<N then goto M;
end;

Sum:=0;
writeln(f1,'proverka matrici na simmetrichnost,normirovky,ortogonalnost:');
writeln (f1);
for j:=1 to 2 do
Sum:=0;
for i:=1 to N do
Sum:=Sum+x[i,j];
if Sum=0 then
writeln (f1,'matrica simmetrichna') else
begin
writeln (f1,'matrica ne simmetrichna');
Exit;
end;
Sum:=0;
for j:=1 to 2 do
Sum:=0;
for i:=1 to N do
Sum:=Sum+(sqr(x[i,j]));
if Sum=N then Writeln (f1,'matrica normirovana')
else
begin
writeln (f1,'matrica ne normirovana');
Exit;
```

```

end;
Sum:=0;
for i:=1 to N do
Sum:=Sum+(x[i,1]*x[i,2]);
If Sum=0
then writeln (f1,'matrica ortogonalna')
else
begin
writeln (f1,'matrica ne ortogonalna');
exit;
end;
writeln(f1);
writeln(f1,' Matrica v codirovannix znacheniiax');
writeln(f1,' x[1] x[2]');
for i:=1 to N do
begin
writeln (f1,' ',x[i,1]:4:0,' ',x[i,2]:4:0);
end;
Mo:=2;
y[1,1]:=-0.311; y[1,2]:=-0.314;
y[2,1]:=-0.16; y[2,2]:=-0.18;
y[3,1]:=-1.18; y[3,2]:=-1.21;
y[4,1]:=-0.38; y[4,2]:=-0.39;
Ycr[1]:=(y[1,1]+y[1,2])/Mo;
Ycr[2]:=(y[2,1]+y[2,2])/Mo;
Ycr[3]:=(y[3,1]+y[3,2])/Mo;
Ycr[4]:=(y[4,1]+y[4,2])/Mo;
for j:=1 to E do begin
for i:=1 to N do
xnat[i,j]:=x[i,j]*dx[j]+xcp[j];

```

```

end;

writeln (f1);
writeln (f1, 'matrica v natyralnix peremennix:');
writeln(f1,' x[1] x[2] ycr ');

for i:=1 to N do begin
writeln (f1,' ',xnat[i,1]:4:2,' ',xnat[i,2]:4:2,' ',ycr[i]:5:3);
end;

Sum:=0;
for i:=1 to N do
Sum:=Sum+Ycr[i];
ycro:=Sum/N;
Writeln(f1);
Writeln(f1, 'srednii otklik po vsem opitam ycro=',ycro:7:3);
for j:=1 to E do begin
Sum:=0;
for i:=1 to N do
Sum:=Sum+(Ycr[i]*x[i,j]);
b[j]:=Sum/N;
writeln(f1,j:1, ' Raschetnoe znachenie koef.yravneniia regressii b= ',b[j]:5:3);
end;

dispu[1]:=(sqr(ycr[1]-y[1,1])+sqr(ycr[1]-y[1,2]))/(Mo-1);
dispu[2]:=(sqr(ycr[2]-y[2,1])+sqr(ycr[2]-y[2,2]))/(Mo-1);
dispu[3]:=(sqr(ycr[3]-y[3,1])+sqr(ycr[3]-y[3,2]))/(Mo-1);
dispu[4]:=(sqr(ycr[4]-y[4,1])+sqr(ycr[4]-y[4,2]))/(Mo-1);
Sdispu:=dispu[1]+dispu[2]+dispu[3]+dispu[4];
max:=dispu[1];
for i:=2 to N do begin

```

```

if dispu[i]>max then
max:=dispu[i];
end;
writeln(f1);
writeln(f1,'Postrochnaia dispersiia');
writeln(f1,'dispu1=',dispu[1]:7:4);
writeln(f1, 'dispu2=',dispu[2]:7:4);
writeln(f1,'dispu3=',dispu[3]:7:4);
writeln(f1,'dispu4=',dispu[4]:7:4);
writeln(f1);
writeln(f1,'Symma postrochnix dispersii Sdispu=', Sdispu:7:3);
Gp:=max/Sdispu;
writeln(f1);
writeln(f1,'Raschetnoe znacheniiia kr.Koxrena Gp=',Gp:6:3);
writeln('Vvedite tablinoe znacheniiia kr.Koxrena');
readln(Gt);
if Gp>Gt then
begin
writeln (f1, 'Dispersiia ne odnorodnaia')
end
else
writeln(f1, 'Dispersiia odnorodnaia');

disp2u:=Sdispu/N;
writeln(f1);
writeln(f1,'Oshibka opita disp2u=',disp2u:6:3);
for j:=1 to E do begin
disp2v[j]:=disp2u/(N*Mo);
dispv[j]:=(sqrt(disp2v[j]));
end;

```

```

for j:=1 to E do begin
  Studr[j]:=(abs(b[j]))/(dispv[j]);
end;
fo:=N*(Mo-1);

writeln('Vvedite tablinoe znachenie kr.Studenta dlia lam=0,05 i fo=',fo:4:2);
read (Studt);

for j:=1 to E do begin
  db[j]:=Studt*dispv[j];
end;

l:=0;
for j:=1 to E do begin
  if (abs(b[j])>abs(db[j])) and (Studt<Studr[j])
  then l:=l+1
  else b[j]:=0
end;
writeln(f1);
writeln(f1,'Rezyltati proverki na znachimost koef.yravneniia regressii:');
writeln(f1, 'Chislo znachimix koef.yravneniia l=',l:2);
for j:=1 to E do
  writeln (f1, j:1,' koeficient yravneniia regressii raven: b=', b[j]:7:3);

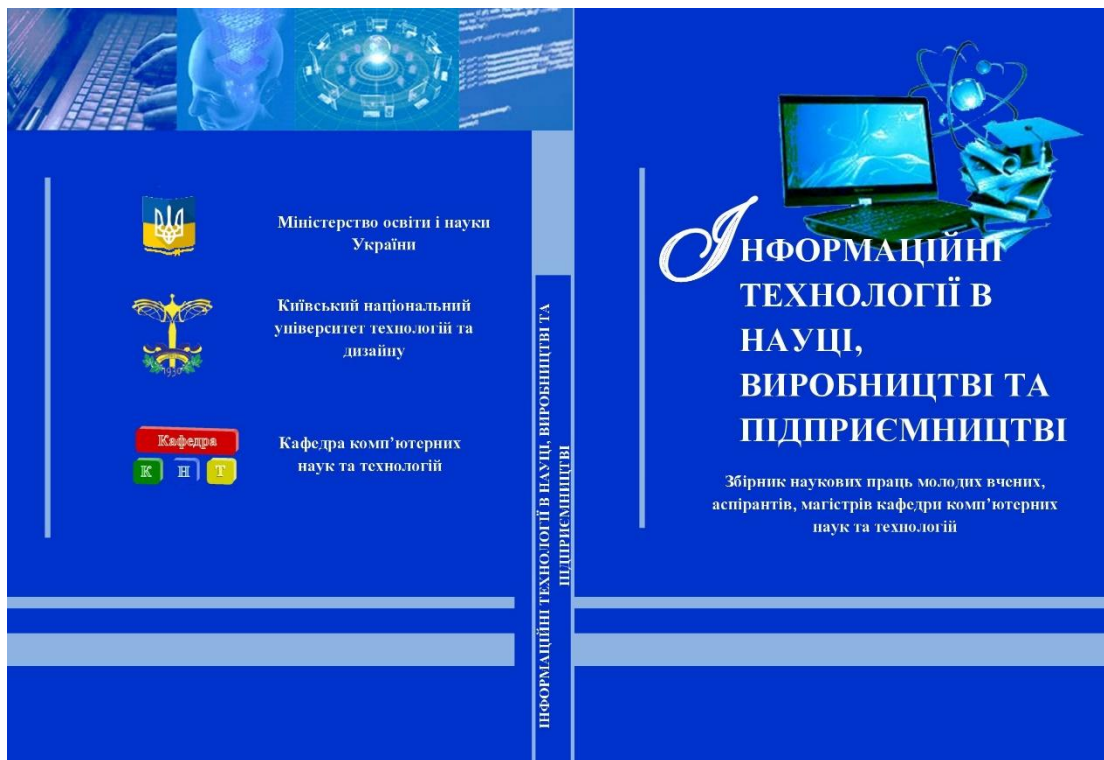
for i:=1 to N do begin
  yr[i]:=ycro;
  yr[i]:=yr[i]+(b[1]*x[i,1])+(b[2]*x[i,2]);
  writeln (f1, 'raschetnoe znachenie otklika ', i:1,' yr=', yr[i]:5:2);
end;

```

```
Sum:=0;
for i:=1 to N do begin
Sum:=Sum+sqr(yr[i]-ycr[i]);
dispad:=sum/(N-1);
end;
writeln(f1,' dispad=',dispad:7:3);
Fir:=dispad/disp2u;
writeln (f1, 'Raschetnoe znacheniiia kr.Fishera Fir=',Fir:5:2);

fco:=N*(Mo-1);
fcad:=N-1;
writeln(f1);
writeln ('Dlia raschitannix znachenii fcad=',fcad:2, ' i fco=', fco:2);
writeln('Vvedite tablichnoe znachenie kr.Fishera:');
read(Fit);
writeln (f1, 'tablichnoe znachenie kr.Fishera Fit=', Fit:5:2);
if Fit>Fir then begin
writeln(f1, 'Dannoe yravnenie adekvatno');
end
else
writeln(f1, 'Dannoe yravnenie ne adekvatno');
close (f1);
end.
```


ДОДАТОК Б



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
 Київський національний університет технологій та дизайну
 Кафедра комп'ютерних наук та технологій

ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В НАУЦІ, ВИРОБНИЦТВІ ТА ПІДПРИЄМНИЦТВІ

Збірник наукових праць молодих вчених, аспірантів, магістрів кафедри
 комп'ютерних наук та технологій

УДК 004.42
ББК 32.973.2
И 74

Рекомендовано кафедрою комп'ютерних наук та технологій Київського національного університету технологій та дизайну для широкого кола викладачів, науковців, аспірантів, магістрів та студентів профільних вищих навчальних закладів, інженерно-технічних працівників в галузі інформаційних технологій проектування (Протокол № 10 від 26 травня 2021 року)

Під загальною науковою редакцією лауреата Державної премії України в галузі науки і техніки, академіка Міжнародної академії комп'ютерних наук і систем, доктора технічних наук, професора Щербаня В.Ю.

Склад редакційної комісії: доктор фізико-математичних наук, професор Красницький С.М., доктор технічних наук, професор Чупринка В.І., кандидат технічних наук, доцент Колиско О.З., кандидат технічних наук, доцент Шрамченко Б.Л., кандидат технічних наук, доцент Астістова Т.І., кандидат технічних наук, доцент Яхно В.М., кандидат технічних наук, доцент Демківська Т.І., кандидат технічних наук, доцент Резанова В.Г., кандидат технічних наук, доцент Шолудько М.І., кандидат технічних наук, доцент Мельник Г.В., кандидат технічних наук, доцент Корогод Г.О.

Рецензенти:

ОПАНАСЕНКО В.М. – Лауреат Державної премії України в галузі науки і техніки, д.т.н., професор, провідний науковий співробітник, Інститут кібернетики НАН України;
ЩУЦЬКА Г. В. – д.т.н., директор Київського фахового коледжу прикладних наук.

И 74 Інформаційні технології в науці, виробництві та підприємстві: Збірник наукових праць молодих вчених, аспірантів, магістрів кафедри комп'ютерних наук та технологій / заг.наук.ред. В.Ю.Щербань – К.:Освіта України, 2021. – 248 с.

ISBN 978-617-7993-97-0

Збірник наукових праць об'єднує розробки викладачів, молодих вчених, аспірантів, магістрів кафедри комп'ютерних наук та технологій Київського національного університету технологій та дизайну в 2021 році. Особлива роль приділяється всьому комплексу інформаційної технології і техніки в структурній перебудові економіки у бік наукоємності. Більш того, інформаційні технології є свого роду перетворювачем всіх інших галузей господарства, як виробничих, так і невиробничих, основним засобом їхньої автоматизації, якісної зміни продукції і, як наслідок, їх переходу частково або цілком у категорію наукоємних.

УДК 004.42
ББК 32.973.2

ISBN 978-617-7993-97-0

©В.Ю.Щербань 2021
©Освіта України, 2021

Шрамченко Б.Л., Воловик Р.В. Автоматизації діяльності відділу кадрів підприємства.....	184
Шевченко К.Л., Скляревський А.О. Принципи побудови систем моніторингу стану здоров'я людини.....	186
Резанова В.Г., Ніка М.П., Нікітченко Я.Ю. Автоматизоване дослідження реологічних властивостей модифікованих полімерів.....	188
Резанова В.Г., Красновид В.К., Можнякова С.В. Автоматизоване планування експерименту щодо впливу технологічних параметрів на формування мікрОВОЛОКОН.....	190
Дроменко В.Б., Кудас М.О. Комп'ютерно-інтегрована система керування лабораторним джерелом живлення.....	192
Голінко В.В. Використання хмарних технологій для автоматизованої обробки геоінформаційних даних.....	194
Корогод Г.О., Верховенко О.С. Автоматизована система ідентифікації студентів.....	196
Варення К.О., Дроменко В.Б. Розроблення структури комплексу технічних засобів комп'ютерно-інтегрованої системи автоматизованого керування дешламатором.....	198
Скідан В.В., Єрмакова М.О. Аналіз виробництва упаковки з картону, як об'єкт комплексної автоматизації.....	200
Скідан В.В., Завацький Г.Е. Аналіз програмних продуктів-аналогів...	202
Rudyk Y.I., Solyonyj S.V. IoT components integration into human life.....	204
Яхно В.М. Математична модель задачі оперативно – диспетчерського керування.....	206
Яхно В.М., Линець О.А. Система для автоматизації та графічного моделювання локальних комп'ютерних мереж.....	208
Яхно В.М., Жук Д.В. Експертна система для визначення рівня забруднення навколишнього середовища.....	209
Яхно В.М., Маков С.О. Розробка експертної системи для аналізу ефективності і підтримки планів оновлення програмних засобів підприємства.....	210
Яхно В.М., Місра М.С. Розробка web-додатку для обслуговування блокчейн транзакцій.....	211
Яхно В.М., Сергеев Д.Д. Експериментальне обґрунтування якості градієнтних методів оптимізації.....	212

Інформаційні технології в науці, виробництві та підприємстві
Київський національний університет технологій та дизайну

Астісова Т. І., Кочук Д.М. Аналіз та характеристика технології «Internet of things»	224
Резанова В. Г., Красновид В. К. Програмне забезпечення для планування експерименту щодо впливу технологічних параметрів на формування мікрофібрилярних структур	227
Резанова В.Г., Ніка М. П. Розробка програмного забезпечення для дослідження реологічних властивостей дисперсійних середовищ	230
Резанова В.Г., Можнякова С.В. Розробка програмного забезпечення для побудови математичної моделі об'єкту проектування	233
Нікітченко Я.Ю., Резанова В.Г. Автоматизоване тестування Веб-застосунку з використанням BDD-технологій	237
Волівач А.П. Специфіка викладання дисципліни «Інформаційні системи та технології»	240
Петко А.К. Комп'ютерна програма для реалізації алгоритму рекурсії при визначенні натягу нитки	243
Макаренко Ю.В. Комп'ютерне визначення натягу ниток при формуванні багат шарових тканин	246

УДК 677.072.6

**АВТОМАТИЗОВАНЕ ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ ЩОДО
ВПЛИВУ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ НА ФОРМУВАННЯ
МІКРОВОЛОКОН**

В.Г. Резанова, к.т.н., доцент,

Київський національний університет технологій та дизайну

В.К. Красновид, магістрант

Київський національний університет технологій та дизайну

С.В. Можнякова, магістрант

Київський національний університет технологій та дизайну

Ключові слова: програмне забезпечення, план експерименту, повний факторний експеримент, суміш полімерів, волокноутворення

Активне впровадження інформаційних технологій у наукові дослідження має важливий пріоритет у найбільш економічно розвинених країнах. Це в результаті змінює світові тенденції розвитку в напрямку значного розширення можливостей широкого кола галузей економіки: фармакології, фармацевтики, хімії, аеронавтики та космонавтики, будівництва, енергетики, оборони, авіації, транспорту тощо.

Композиційні матеріали широко використовуються в багатьох сферах життєдіяльності, проте в останні роки попит на них різко виріс та розширились галузі застосування від побутових товарів (тканин, текстилю, трикотажу, упаковки, біомедичних продуктів) до високотехнологічної продукції (аерокосмічної і військової техніки).

Переробка розплавів сумішей полімерів є одним із перспективних методів одержання волокон з діаметрами від декількох до десятих долей мікрметра. Змішування полімерів та введення спеціальних добавок дозволяє не тільки поєднувати властивості двох компонентів, а й одержувати унікальні ефекти та нові матеріали з характеристиками, які непритаманні вихідним полімерам. Дослідження описаних явищ здійснюється в основному дослідним шляхом, теоретичні методи використовуються суттєво менше. Але використання математичних методів є важливим з точки зору можливості отримання теоретично обґрунтованих практичних результатів, а знання оптимальних умов реалізації процесу дозволить ефективно керувати ним. Таким чином, метою роботи є створення програмного забезпечення для планування експерименту при формування мікрофібрилярних структур, а також подальша оптимізації параметрів процесу.

Побудову математичної моделі для оптимізації вхідних параметрів можна здійснити, застосувавши теорію планування експерименту.

Нехай проводяться деякі експериментальні дослідження. Кожне з різних значень, які приймає змінна X_i в досліді, - це рівні цієї змінної. Експеримент, в якому рівні кожного фактора комбінуються з усіма рівнями інших факторів, - повний факторний експеримент (ПФЕ).

Розглянемо функцію відгуку $\eta = f(X_1, X_2, \dots, X_k)$. Нехай число різних значень, які може приймати змінна X_i ($i=1,2,\dots,k$) у всіх дослідах, дорівнює двом, тобто $S_i=2$. Позначимо їх X_{i1} та X_{i2} . Введемо кодовані змінні: $x_i = \frac{X_i - X_i^0}{S_i}$, $i=1,2,\dots,k$, де $X_i^0 = \frac{X_{i1} + X_{i2}}{2}$ $i=1,2,\dots,k$;
 $S_i = \frac{X_{i2} - X_{i1}}{2}$ $i=1,2,\dots,k$. Очевидно, що кодована змінна x_i ($i=1,2,\dots,k$) в кожному досліді може приймати значення 1 або -1.

Розглянемо випадок ПФЕ 2^3 . В цьому випадку: $\eta = f(x_1, x_2, x_3)$. Всі різні комбінації рівнів змінних x_1, x_2, x_3 представлені в таблиці 1.

Таблиця 1 - ПФЕ 2^3

Матриця незалежних змінних								Варіант дослідження	Спостереження
x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$	$x_1 x_2 x_3$		
1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	(I)	y_1
1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	A	y_2
1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	B	y_3
1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	ab	y_4
1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	C	y_5
1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	ac	y_6
1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	bc	y_7
1	1	1	1	1	1	1	1	abc	y_8

Функцію відгуку шукаємо у вигляді:

$$\eta = \beta_0 + \sum_{1 \leq i \leq 3} \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq 3} \beta_{ij} x_i x_j + \beta_{123} x_1 x_2 x_3 \quad (1)$$

Коефіцієнти (1) знаходяться за методом найменших квадратів. У підсумку за результатами дослідів, поставлених у всіх точках повного факторного експерименту, програмно знаходяться значення невідомих коефіцієнтів в математичній моделі.

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.

Список використаних джерел

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. Stroustrup B. *Programming: Principles and Practice Using C++* (2nd Edition). Addison-Wesley Professional, 2014. – 1312 p.
3. Мейерс С. *Эффективный и современный C++*. М.: Вильямс, 2016.- 304 с.

Література

1. Тестування програмного забезпечення, яке використовується для моніторингу екосистеми. [Електронний ресурс] – Режим доступу : URL : https://uk.wikipedia.org/wiki/Тестування_програмного_забезпечення – Дата доступу : 28.05.2021.
2. Інтернет вещей [Електронний ресурс] – Режим доступу URL: <https://www.sas.com/ /big-data/internet-of-things.html> – Дата доступу: 04.05.2021
3. Amazon Web Services [Електронний ресурс] – Режим доступу URL: https://uk.wikipedia.org/wiki/Amazon_Web_Services – Дата доступу: 01.06.2021

РЕЗАНОВА В. Г., КРАСНОВИД В. К.

ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ ЩОДО ВПЛИВУ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ НА ФОРМУВАННЯ МІКРОФІБРИЛЯРНИХ СТРУКТУР

REZANOVA V. G., KRASNOVYD V. K.

SOFTWARE FOR PLANNING OF EXPERIMENT ON THE INFLUENCE OF TECHNOLOGICAL PARAMETERS ON THE FORMATION OF MICROFIBRILLARY STRUCTURES

Purpose and tasks. Solving the problem of optimization of technological parameters of formation of microfibrillary structures. To achieve this goal, it is necessary to solve the following tasks: in accordance with the theory of experimental planning, develop a plan for this subject area. Creating special software..

Object and subject of research. The object of research is the process of formation of microfibrillar structures. It is implemented under appropriate conditions during the flow of melts of polymer mixtures. It is based on microreological processes, such as the deformation of droplets of the dispersed phase component and the unification of liquid jets in the flow direction.

The subject of the research is planning an experiment for this process and its mathematical modeling.

Вступ

Аналіз стану та перспектив галузі інформаційних технологій свідчить, що активне впровадження їх у наукові дослідження має важливий пріоритет у найбільш економічно розвинених країнах. Це в результаті змінює світові тенденції розвитку в напрямку значного розширення можливостей широкого кола галузей економіки: фармакології, фармацевтики, хімії, аеронавтики та космонавтики, будівництва, енергетики, оборони, авіації, транспорту тощо.

Полімерні композиційні матеріали широко використовуються в багатьох сферах життєдіяльності, проте в останні роки попит на них різко

виріс та розширились галузі застосування від побутових товарів (тканин, текстилю, трикотажу, упаковки, біомедичних продуктів) до високотехнологічної продукції (аерокосмічної і військової техніки). Це обумовлено тим, що композити з двома або більше окремими складовими, що структурно доповнюють один одного, мають унікальні характеристики, які відсутні в кожному окремому компоненті. Властивості композитів значною мірою визначаються природою полімерів та модифікуючих добавок (пластифікатори, компатибілізатори, наповнювачі або їх поєднання).

Постановка завдання

У наш час переробка розплавів сумішей полімерів є одним із перспективних методів одержання волокон з діаметрами від декількох до десятих долей мікрметра. Змішування полімерів та введення спеціальних добавок - компатибілізаторів дозволяє не тільки поєднувати властивості двох компонентів, а й одержувати унікальні ефекти та нові матеріали з характеристиками, які непритаманні вихідним полімерам

Формування мікрволокон переробкою розплаву суміші полімерів – простий ефективний метод одержання комплексних ниток і штапельних волокон з діаметрами від десятих долей до декількох мікрметрів. При цьому властивості мікрволокон та виробів із них значною мірою визначаються характеристиками полімерних композицій, а також технологічними параметрами переробки. Дослідження описаних явищ здійснюється в основному дослідним шляхом, теоретичні методи використовуються суттєво менше. Але використання математичних методів є важливим з точки зору можливості отримання теоретично обґрунтованих практичних результатів, а знання оптимальних умов реалізації процесу дозволить ефективно керувати ним.

Таким чином, метою роботи є створення програмного забезпечення для планування експерименту при формування мікрофібрилярних структур, а також подальша оптимізації параметрів процесу.

Основна частина

Побудову математичної моделі для оптимізації вхідних параметрів можна здійснити, застосувавши теорію планування експерименту.

При плануванні за схемою повного факторного експерименту (ПФЕ) реалізуються всі можливі комбінації факторів на всіх обраних для дослідження рівнях. Кількість дослідів N при ПФЕ визначається за формулою: $N=n^k$, де n - кількість рівнів; k - число факторів.

Умови повного факторного експерименту записують у вигляді таблиці - матриці планування експерименту. Для експерименту, що досліджує об'єкт з трьома вхідними факторами, кожен з яких

змінюється за двома рівнями, матриця планування має такий вигляд (таблиця).

Таблиця

Матриця плану для ПФЕ 2^3

Номер досліджу	x_1	x_2	x_3	Літерні позначення рядків	y
1	-1	--1	+1	C	y_1
2	-1	+1	-1	B	y_2
3	+1	-1	-1	A	y_3
4	+1	+1	+1	Abc	y_4
5	-1	-1	-1	(1)	y_5
6	-1	+1	+1	Bc	y_6
7	+1	-1	+1	Ac	y_7
8	+1	+1	-1	Ab	y_8

Таким чином, для повнофакторного експерименту необхідно провести 2^3 дослідів. Рівні факторів являють собою межі досліджуваної області за обраним параметром (мінімальне і максимальне значення фактора).

Знаючи максимальне z_i^{\max} і мінімальне z_i^{\min} значення технологічного параметра (фактора) можна визначити координати центру плану, так званий основний рівень z_i^0 , а також інтервал (крок) варіювання Δz_i :

$$z_i^0 = \frac{z_i^{\max} + z_i^{\min}}{2} \quad \Delta z_i = \frac{z_i^{\max} - z_i^{\min}}{2}$$

У разі повного факторного експерименту функція відгуку для параметра у залежно від k кодованих факторів шукається у вигляді ряду Тейлора:

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_k x_k$$

У підсумку за результатами дослідів, поставлених у всіх точках повного факторного експерименту, будуть програмно знайдені значення невідомих коефіцієнтів в математичній моделі.

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.

Ключові слова: оптимізація, мікрофібрилярні структури, експеримент, матриця.

Література

1. Резанова В.Г., Резанова Н.М. Програмне забезпечення для дослідження полімерних систем. Монографія. – К.: АртЕк, 2020. – 358 с.
2. Резанова В.Г., Голодов Д.В. Дослідження та розробка програмного забезпечення для побудови математичної моделі формування мікрофібрилярних структур // Інформаційні технології в науці, виробництві та підприємстві. Зб.наук. праць – К.: Освіта України, 2019. – с. 200-203
3. Рефатова С. Теорія планування експерименту [Електронний ресурс] / С. Рефатова, В. Єремєєв // Мелітопольський державний педагогічний університет ім. Богдана Хмельницького. – 2011. – Режим доступу до ресурсу: http://lib.mdpu.org.ua/e-book/teor_plan/Lection1/Lection1.html.
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.

РЕЗАНОВА В.Г., НИКА М. П.

РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ РЕОЛОГІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ДИСПЕРСІЙНИХ СЕРЕДОВИЩ

REZANOVA V.G., NIKA M.P.

DEVELOPMENT OF SOFTWARE FOR RESEARCH OF RHEOLOGICAL PROPERTIES OF DISPERSIONS

The study of mixtures of viscous liquids, in particular melts of polymer mixtures, is relevant in the world. Research is based on knowledge of the basic principles of classical hydrodynamics

Purpose and tasks. The purpose of the work is to create software for processing experimental data on determining the value of effective viscosity of polymer melt, the nature of the flow and graphic representation of the results of the study.

The task is to calculate the parameters of the flow of polymer melts and to present the results in graphical form.

Object and subject of research. The object of the study is polymer composites. Their properties are determined by a number of factors - the characteristics of the polymer matrix,