

УДК 686.1.03

**ПРОБЛЕМИ СТВОРЕННЯ
ЕЛЕКТРОННОЇ ІНФОРМАЦІЙНОЇ БАЗИ ДАНИХ
ЗАГАЛЬНОГО ТА ПОЛІГРАФІЧНОГО МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА**

© А. К. Дорош, д.х.н., професор, О. О. Гуцол,
НТУУ «КПІ», Київ, Україна

Рассмотрена проблема создания электронной информационной базы общего и полиграфического материаловедения с целью использования её для организации контроля и управления качеством современных компьютеризованных (в том числе и издательско-полиграфических) производств. В основу решения этой проблемы положено использование программного продукта компьютерной математики Mathcad 2000, с помощью которого решаются задачи интерполяции, экстраполяции (прогнозирования) и регрессионного анализа при обработке функциональных зависимостей физических, физико-химических и др. свойств технологически важных (функциональных) материалов, в частности — растворителей, среди которых особое место занимает вода как универсальный растворитель для изготовления вододисперсионных красок. Указаны возможные результаты от создания и использования государственной электронной информационной базы материаловедения.

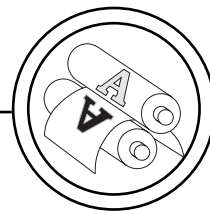
The problem of database engineering of the general and polygraphic materiology is considered with the purpose of its use for the organization of the control and quality management in modern computerised (including publishers and polygraphy) industries. The solution of this problem is using software package of computer mathematics Mathcad 2000, which help solve problems of interpolation, extrapolation (forecasting) and regression analysis, that is necessary at processing functional dependences of physical, physicochemical, etc. characteristics of technologically important materials, in particular, solvents with water occupying a special place as universal solvent for producing water-emulsion paints. Possible effects of using the database of materiology are indicated.

Постановка проблеми

В області усіх сучасних як традиційних, так і автоматизованих технологій поліграфічних виробництв давно назріла необхідність створення державної електронної інформаційної бази матеріалознавства, і в першу чергу галузевого призначення. Це особливо стосується інформації стосовно ма-

теріалів, які використовуються у технологічних процесах поліграфії, яка, як відомо, є найбільш матеріалоємною галуззю народного господарства. У зв'язку з цим виникає першочергове завдання — систематизувати накопичені числові результати наукових досліджень та розробок, отриманих дослідним шляхом для різнома-

ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ



нітних властивостей матеріалів технологічного призначення. Для реалізації такої задачі редакціям науково-технічних журналів, книжковим видавництвам, керівникам науково-дослідних установ, наукових підрозділів вищих навчальних закладів та інститутів НАН України необхідно докорінно змінити вимоги до матеріалів, які подаються до публікації або захисту на здобуття наукових ступенів, а саме: отримані експериментальні результати науково-дослідних робіт повинні подаватися в електронному вигляді для занесення їх у відповідний електронний інформаційний банк даних. Вони повинні бути доступними для подальшого використання у комп'ютерних мережних системах і технологіях, інших дослідженнях у науково-дослідницьких закладах та підприємствах України. Використовуючи існуючі програмні продукти комп'ютерної математики для обробки накопичених експериментальних даних, можна отримати велику кількість додаткової інформації за вимогою користувача, створити високоякісну електронну інформаційну базу поліграфічного матеріалознавства. При організаційному вирішенні цих задач стане можливим створення різноманітних продуктивних автоматизованих систем керування як окремими технологічними процесами, так і поліграфічним виробництвом в цілому у реальному масштабі часу.

Тому не дивно, що на сучасному етапі науково-технічного та промислового розвитку суспільства першочергового значення набуває його інформаційне забезпечення. Відомо, що інформація є продуктом взаємодії накопичених дослідних даних і відповідних їм методів

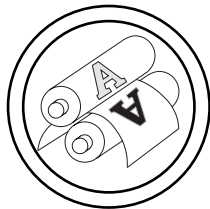
обробки, які можуть забезпечити їх подальшу обробку відповідними аналітичними та існуючими комп'ютерними програмними засобами.

Аналіз попередніх досліджень

Намагання розробити наукові основи розв'язку задач інтерполяції, екстраполяції (прогнозування) та регресійного аналізу для обробки експериментально отриманих функціональних залежностей фізичних, фізико-хімічних, технологічних і інших властивостей функціонально важливих поліграфічних матеріалів проводилися давно, але лише з настанням ери комп'ютерної математики вони досягли значних успіхів. Серед таких робіт слід відмітити ряд найбільш практично важливих довідникових видань та монографій [1—15], та інші, у яких містяться числові масиви результатів дослідження різноманітних властивостей матеріалів та наведені аналітичні залежності для їх опису, після обробки яких можна створювати основу електронної інформаційної бази матеріалознавства. На жаль, багато із існуючих довідникових видань (у їх числі [16—20]) містять практично лише ілюстраційно-графічні та текстово-описові матеріали, комп'ютерна обробка яких або зовсім неможлива, або не дозволяє забезпечити необхідну прецизійність інтерпольованих даних для використання їх у системах контролю і управління технологічними процесами сучасних комп'ютеризованих видавничо-поліграфічних виробництв.

Мета роботи

Метою дослідження у даній роботі було визначення можливостей створення електронної інформа-



ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ

ційної бази поліграфічного матеріалознавства шляхом розв'язку задач інтерполяції, екстраполяції (прогнозування) та регресійного аналізу засобами комп'ютерної математики системи Mathcad [2—4] для обробки експериментально установлених функціональних залежностей фізичних, фізико-хімічних, та інших властивостей технологічно важливих матеріалів поліграфічних виробництв, зокрема розчинників, серед яких особливе місце займає вода як універсальний розчинник для виготовлення різноманітних водоемульсійних фарб.

Результати дослідження

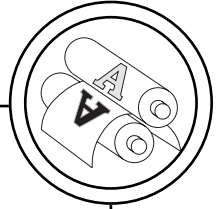
У даній статті на прикладі даних для реологічних властивостей багатократно дистильованої води (як універсального розчинника великої кількості технологічно важливих речовин, у тому числі і водно-емульсійних фарб) нами показано, як і якого роду додаткову інформацію можна одержати з результатів обробки існуючих числових масивів прецизійних довідкових даних [5, 7, 10].

На основі багатолітнього досвіду проведення і обробки результатів наукових досліджень ми переконалися, що однією з кращих систем комп'ютерної математики, яка дозволяє створити ефективну електронну інформаційну базу матеріалознавства для багатьох технологій видавничо-поліграфічних виробництв та забезпечує високоякісну обробку результатів науково-технічних досліджень і має зручний інтерфейс користувача, є універсальна математична система Mathcad [2—4]. Сучасна комп'ютерна математична система Mathcad 2000 містить потужні за-

соби реалізації числових методів розрахунків і математичного моделювання у поєднанні з можливістю виконання багатьох операцій символічної математики та доповнюючими засобами візуалізації обчислень, що забезпечує: представлення висхідних даних і результатів обчислень у звичному математичному вигляді, можливість повноколірної графіки, включаючи анімаційну графіку і відтворення відеофрагментів зі звуковим супроводом. Вона забезпечує також можливість обертати (маніпулятором «миша») тривимірні графіки в реальному масштабі часу, зафарбовувати поверхні і будувати в 3D-просторі відразу декілька поверхонь і фігур для просторового відображення досліджуваних властивостей певного класу речовин.

Відомо, що комп'ютерна аналітична обробка експериментальних даних супроводжується вирішенням низки різноманітних задач. При цьому експериментальні дані задаються, як правило, числовими рядами значень величин: незалежної x_k і залежної y_k , кожна з яких (у загальному випадку крім визначеної регулярної (детермінованої) складової) може містити і випадкові складові різного походження, обумовлені як статистичною природою досліджуваних процесів, так і впливом зовнішніх факторів у процесі вимірювання і перетворення даних (шуми, перешкоди, помилки вимірів, тощо). Ці похибки можуть бути набагато більшими теоретично розрахованої похибки за складними теоретичними формулами, які, можливо, і достатньо прецизійно описують досліджувані об'єкти, але при цьому громіздкі і мало придатні до практичного використання. У таких випадках виникає зада-

ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ



ча апроксимації — представлення складних функцій $f(x)$ простими і зручними для практичного використання функціями $g(x)$ так, щоб відхилення $f(x)$ від $g(x)$ в області її задання було найменшим за прийнятим критерієм наближення. При цьому функція $g(x)$ є функцією апроксимації досліджуваної залежності певної фізичної величини.

Точки x_k , у яких визначені дискретні значення y_k , називаються вузловими. Якщо необхідно одержати значення функції у проміжках між вузлами або з іншим кроком дискретності, вирішується задача інтерполяції, а за межами множини вузлових точок — задача екстраполяції, або прогнозування.

Задачею ж регресійного аналізу є підбір математичних формул, які найкраще описують отримані експериментальні дані. Передбачається, що зареєстроване в кожній точці x_k значення y_k відображає дійсне значення $Y(x_k)$ з випадковою похибкою s_k , яка розподілена, як правило, за нормальним (експоненціальним) законом. По сукупності значень y_k необхідно підібрати таку функцію $f(x_k, a_0, a_1, \dots, a_n)$, яка відображала б залежність $Y(x^k)$ з мінімальною похибкою. Як правило, при регресійному аналізі похибка наближення обчислюється методом найменших квадратів (МНК). Види регресії іменують за типом апроксимуючих функцій:

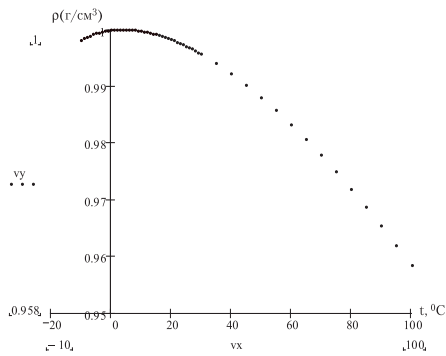


Рис. 1. Залежність густини води від температури згідно даних роботи [10] в інтервалі температур $[-10^{\circ}\text{C}..+100^{\circ}\text{C}]$

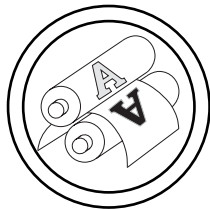
поліноміальна, експоненціальна, логарифмічна і т.п.

Можливості системи Mathcad 2000 при вирішенні таких задач продемонструємо на прикладі обробки табличних даних для таких технологічно важливих фізичних характеристик води як густина та в'язкість у залежності від температури та тиску.

Як видно із рис. 1, залежність густини води ρ (у г/см³) від температури $t^{\circ}\text{C}$ у діапазоні $[-10^{\circ}$ до $+100^{\circ}\text{C}]$ у відповідності з довідковими даними [7] представляється так, що у інтервалі $[-10^{\circ}$ до $30^{\circ}]$ її значення подаються з кроком 1° , а у діапазоні від 30° до 100° з кроком 5°C .

Для дослідження поведінки цієї кривої можна взяти деяку частину діапазону її зміни, наприклад, від 8° до 29°C , і використати убудовані функції регресії, а саме:

$$\begin{aligned}
 &Vg := \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} vx := \text{submatrix}(tc1, 20, 39, 0, 0) \\ vy := \text{submatrix}(\rho v, 20, 39, 0, 0) \end{array} \quad Vg6 := \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 &V4 := \text{expfit}(vx, vy, Vg) \quad xg := 8..29 \quad V5 := \text{logfit}(vx, vy, Vg) \quad V6 := \text{pwrfit}(vx, vy, Vg6) \\
 &V4 = \begin{pmatrix} -4.828 \times 10^{-12} \\ 0.307 \\ 0.999 \end{pmatrix} \quad V5 = \begin{pmatrix} -0.298 \\ 1.462 \times 10^3 \\ 3.171 \end{pmatrix} \quad V6 = \begin{pmatrix} -4.319 \times 10^{-6} \\ 2.048 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 &F4(xg) := V4_0 \cdot \left[\left(e^{V4_1 xg} \right) \right] + V4_2 \quad F5(xg) := V5_0 \cdot \ln(xg + V5_1) + V5_2 \quad F6(xg) := V6_0 \cdot xg^{V6_1} + V6_2
 \end{aligned}$$



ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ

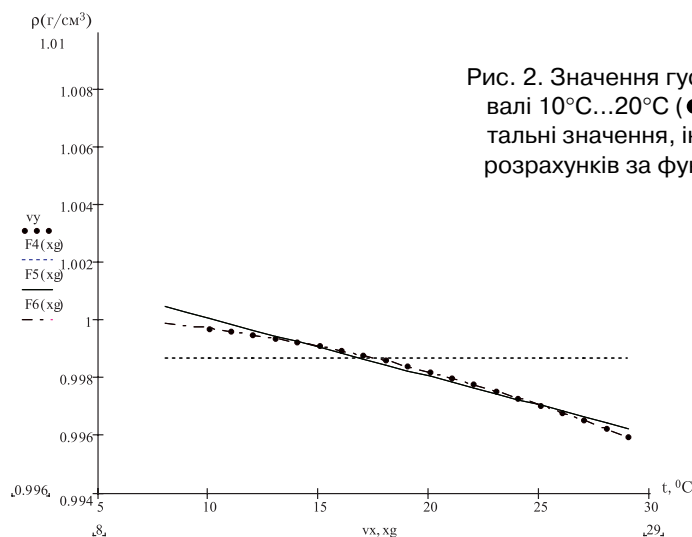


Рис. 2. Значення густини води в інтервалі 10°C...20°C (● — експериментальні значення, інші — результати розрахунків за функціями регресії)

Вектори v_x і v_y є частинами масивів вихідних даних, а вектори V_4 , V_5 і V_6 повертаються функціями $\text{expfit}(v_x, v_y, V_g)$, $\text{logfit}(v_x, v_y, V_g)$ і $\text{pwrfit}(v_x, v_y, V_g)$ відповідно і містять коефіцієнти апроксимуючих виразів, описаних функціями: $F_4(xg)$, $F_5(xg)$ і $F_6(xg)$; V_g і V_{g6} — початкові наближення цих векторів; xg — діапазон зміни аргументу.

Видно, що з типових формул апроксимації кращу функцію регресії дає $F_6(xg)$ і за виглядом кривої можна припустити, що і на інших інтервалах її можна апроксимувати квадратичною кривою (параболою). Якщо врахувати і деяку апри-

орну інформацію (при температурі $t=3,98^\circ\text{C}$ вода має максимальну густину), передбачувана функція може набути вигляду

$$F(x) = u_0(x-3,98)^2 + u_1.$$

Це можна перевірити засобами системи Mathcad, використовуючи нелінійну регресію загального вигляду — функцію $\text{genfit}(v_x, v_y, V_f, F)$. При звертанні до цієї функції необхідно визначити вектор початкових наближень V_f , і після застосування одержати вектор R параметрів функції F , що дає мінімальну середньоквадратичну похибку наближення, тобто:

$$v_x := \text{submatrix}(t_{\text{cel}}, 0, 20, 0, 0)$$

$$v_y := \text{submatrix}(\rho_v, 0, 20, 0, 0)$$

$$F(x, u) := \begin{bmatrix} u_0 \cdot (x - 3.98)^2 + u_1 \\ (x - 3.98)^2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$V_f := \begin{pmatrix} -0.00005 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$R := \text{genfit}(v_x, v_y, V_f, F)$$

$$R = \begin{pmatrix} -9.342 \times 10^{-6} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$r(x) := F(x, R)_0$$

$$x := -10, -9.9.. 30$$

ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ

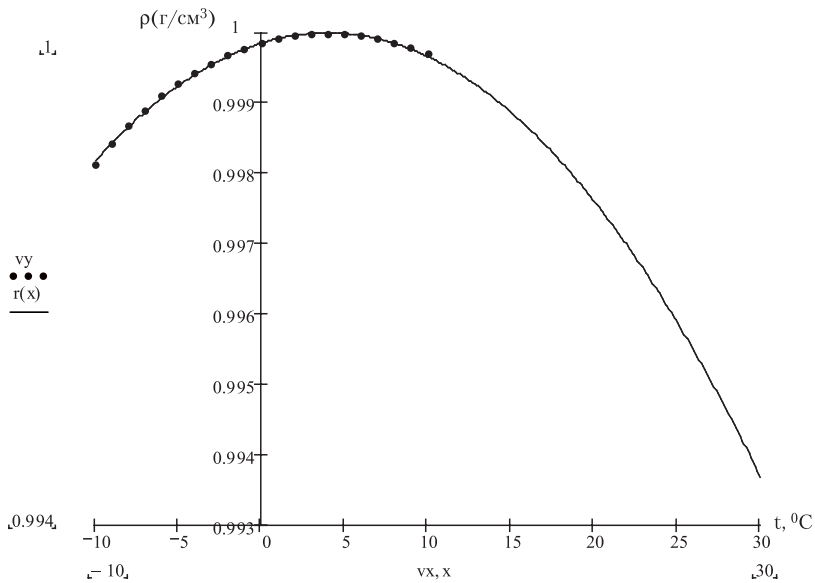
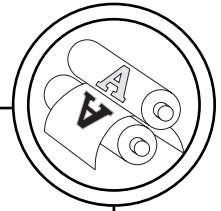


Рис. 3. Залежність густини води від температури (● — експериментальні значення в інтервалі -10°C..+10°C, --- — результати розрахунків за функцією $F(x) = u_0(x-3,98)^2+u_1$)

При цьому середньоквад- ратичне відхилення і коефі-цієнт кореляції мають такі значення:

$$\text{stderr}(\vec{r}(vx), vy) = 2.359 \times 10^{-5} \quad \text{corr}(\vec{r}(vx), vy) = 0.999151$$

На наступних температур-них інтервалах застосування тієї ж функції F(x) дає такий результат:

$$vx := \text{submatrix}(tcel, 21, 40, 0, 0)$$

$$vy := \text{submatrix}(\rho v, 21, 40, 0, 0)$$

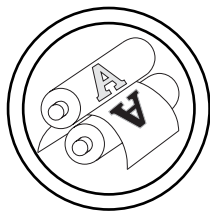
$$F(x, u) := \begin{bmatrix} u_0 \cdot (x - 3.98)^2 + u_1 \\ (x - 3.98)^2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad Vf := \begin{pmatrix} -0.00005 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$R := \text{genfit}(vx, vy, Vf, F)$$

$$R = \begin{pmatrix} -6.314 \times 10^{-6} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$r(x) := F(x, R)_0$$

$$x := -10, -9.9.. 30$$



ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ

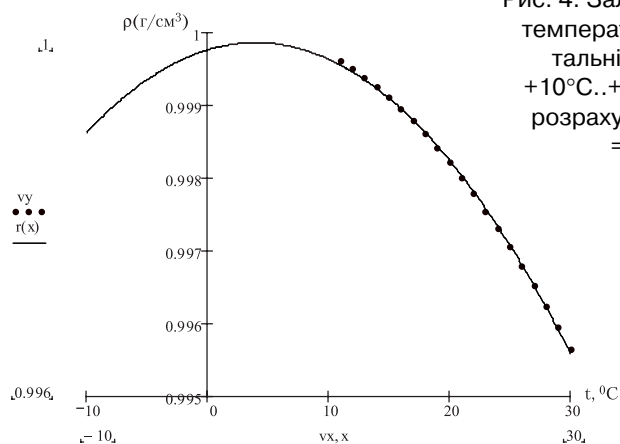


Рис. 4. Залежність густини води від температури (● — експериментальні значення в інтервалі +10°C..+30°C, --- — результати розрахунків за функцією $F(x) = u_0(x-3,98)^2+u_1$)

$$\begin{aligned}
 vx &:= \text{submatrix}(tcel, 41, 54, 0, 0) \\
 vy &:= \text{submatrix}(\rho v, 41, 54, 0, 0) \\
 F(x, u) &:= \begin{bmatrix} u_0 \cdot (x - 3.98)^2 + u_1 \\ (x - 3.98)^2 \\ 1 \end{bmatrix} \\
 Vf &:= \begin{pmatrix} -0.00005 \\ 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$R := \text{genfit}(vx, vy, Vf, F) \quad R = \begin{pmatrix} -4.312 \times 10^{-6} \\ 0.997 \end{pmatrix}$$

$$r(x) := F(x, R)_0 \quad x := -10, -9.9.. 100$$

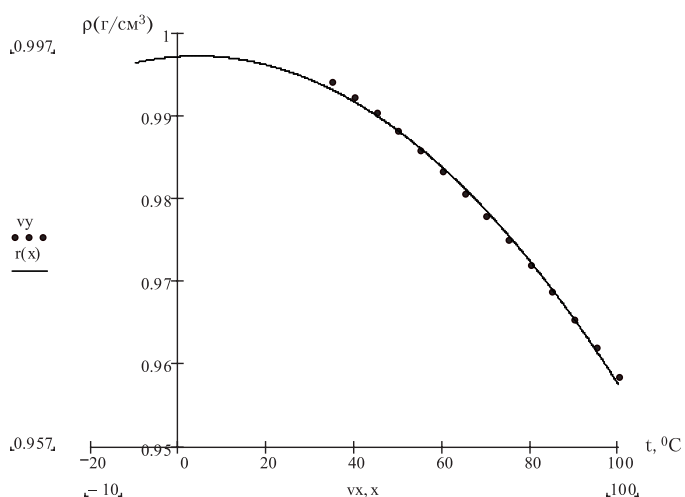
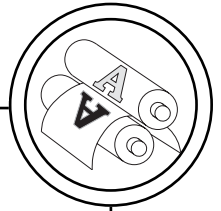


Рис. 5. Залежність густини води від температури (● — експериментальні значення в інтервалі +30°C..+100°C, --- — результати розрахунків за функцією $F(x) = u_0(x-3,98)^2+u_1$)

ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ



Якщо провести таке дослідження локальними частинами, наприклад, для кожних $n=5$ точок, можна відмітити, що при підвищенні температури коефіцієнт u_0 збільшується, густина води починає поводити себе так, як парабола з незміщеною вершиною, і в той же час

зменшується коефіцієнт u_1 (у температурному діапазоні $>50^\circ\text{C}$), начебто максимальна густина води має значення, що менше 1. Якщо розраховані для кожного діапазону коефіцієнти u_0 і u_1 звести у масиви (U_0 і U_1 відповідно), можна спостерігати динаміку їх зміни:

```

i := 0..11
n := 5
U(i) := { k ← i · n
          vx ← submatrix(tcel, k, k + n, 0, 0)
          vy ← submatrix(pv, k, k + n, 0, 0)
          genfit (vx, vy, Vf, F)
        }
U := UT
U0 := U(0)      U1 := U(1)
    
```

$$U_0 = \begin{matrix} & 0 \\ 0 & -1.003 \cdot 10^{-5} \\ 1 & -8.8 \cdot 10^{-6} \\ 2 & -8.086 \cdot 10^{-6} \\ 3 & -7.43 \cdot 10^{-6} \\ 4 & -7.027 \cdot 10^{-6} \\ 5 & -6.652 \cdot 10^{-6} \\ 6 & -6.277 \cdot 10^{-6} \\ 7 & -5.951 \cdot 10^{-6} \\ 8 & -5.154 \cdot 10^{-6} \\ 9 & -4.373 \cdot 10^{-6} \\ 10 & -3.807 \cdot 10^{-6} \\ 11 & -3.32 \cdot 10^{-6} \end{matrix}$$

$$U_1 = \begin{matrix} & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \\ 5 & 1 \\ 6 & 1 \\ 7 & 1 \\ 8 & 0.999 \\ 9 & 0.997 \\ 10 & 0.994 \\ 11 & 0.988 \end{matrix}$$

Для перевірки припущення про параболу з незміщеною вершиною можна визначити нову

функцію і на графіку побачити її відповідність табличним даним:

```

v1x := submatrix(tcel, 10, 40, 0, 0)
v1y := submatrix(pv, 10, 40, 0, 0)
R1 := genfit (v1x, v1y, Vf, F1)
r1(x1) := F1(x1, R1)0
x1 := -10, -9.9..30
    
```

$$F1(x, u) = \begin{pmatrix} u_0 \cdot x^2 + u_1 \\ x^2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad Vf = \begin{pmatrix} -0.5 \\ 1 \end{pmatrix}$$

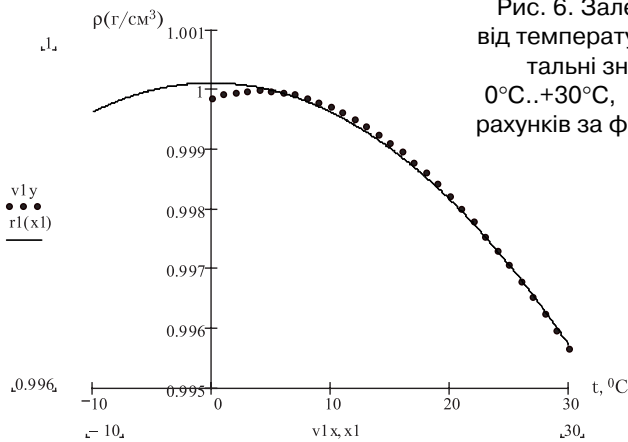
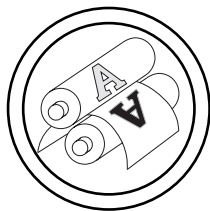
$$R1 = \begin{pmatrix} -4.878 \times 10^{-6} \\ 1 \end{pmatrix}$$


Рис. 6. Залежність густини води від температури (● — експериментальні значення в інтервалі $0^\circ\text{C}..+30^\circ\text{C}$, --- — результати розрахунків за функцією $F(x) = u_0x^2 + u_1$)



ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ

$$\text{stderr}(\vec{r}(v_x, v_y)) = 4.84 \times 10^{-4}$$

$$\text{corr}(\vec{r}(v_x, v_y)) = 0.999194$$

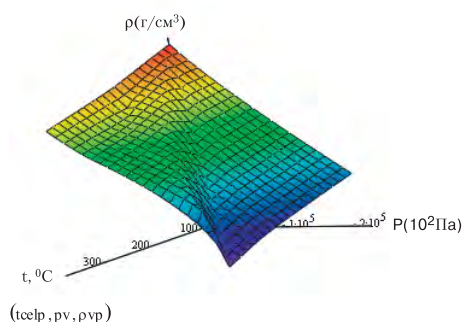


Рис. 7. Залежність густини води від температури та тиску пружного пару в інтервалі +100°C..+374°C

При температурах вище 100°C густина води залежить і від тиску ($\rho_{vp} = f(t_{celp}, p_v)$, де t_{celp} — значення температур у діапазоні від 100°C до 374°C, p_v — відповідні значення тиску пружного пару), у результаті чого графічне відображення цієї залежності має вигляд поверхні, представленої на рис. 7.

Та ж залежність у вигляді контурного графіка, тобто з зображен-

ням ліній однакового рівня, має вигляд, поданий на рис. 8.

Використовуючи спеціальні ефекти тривимірних графіків, можна інтерполювати поверхню по заданому числу ліній по рядках і по стовбцях. Дана поверхня після збільшення кількості точок по рядках і стовбцях у три рази буде виглядати так, як показано на рис. 9.

Різного роду інтерполяцію можна робити або використовуючи ряд убудованих функцій Mathcad, або програмуючи вибраний алгоритм інтерполяції. Для кусочно-лінійної інтерполяції можна використовувати убудовану функцію $\text{interp}(VX, VY, x)$, де VX і VY — вектори вузлових точок, при цьому повертається значення функції, що відповідає її лінійній апроксимації по заданих аргументах x . При великому кроці по аргументу лінійна інтерполяція дає досить грубий результат, а більш точні наближення можна одержати, використовуючи

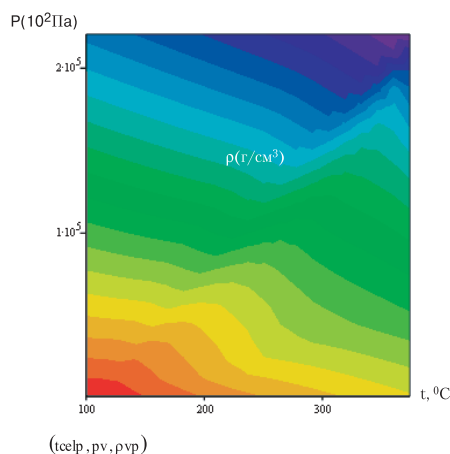


Рис. 8. Залежність густини води від температури та тиску пружного пару в інтервалі +100°C..+374°C

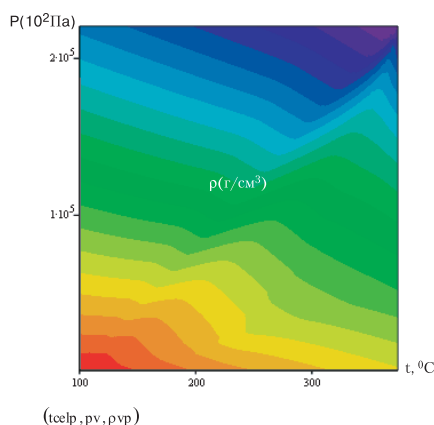
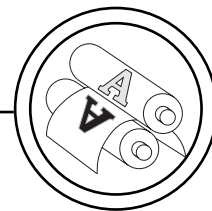


Рис. 9. Залежність густини води від температури та тиску пружного пару в інтервалі +100°C..+374°C після інтерполяції

ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ



сплайнову інтерполяцію. При цьому вихідна функція замінюється відрізками поліномів, що проходять через три суміжні вузлові точки. Сплайнова інтерполяція й екстраполяція здійснюється функціями $\text{cspline}(VX,VY)$, $\text{pspline}(VX,VY)$ і $\text{lspline}(VX,VY)$, кожна з яких повертає вектор других похідних, але продовження їх реалізується відповідно: по кубічному поліному; по параболічній кривій; по лінійній залежності. Після цього отриманий вектор VS других похідних використовується функцією $\text{interp}(VS,VX,VY,x)$, яка повертає значення функції для заданих значень аргументу

x . При необхідності отриманий вектор VS можна проаналізувати, тому що за знаком другої похідної можна визначити інтервали опуклості й увігнутості отриманої функції. До основних недоліків сплайнів можна віднести відсутність єдиного аналітичного виразу для опису моделюємих функцій.

Результати застосування інтерполяційних функцій $\text{cspline}(VX,VY)$ і $\text{pspline}(VX,VY)$ графічно відображаються у такий спосіб (якщо визначити зміну аргументу x з кроком 0.1 на інтервалі від -10° до 100°C), як показано на рис.10.

```
vx := submatrix(tcel,0,54,0,0);
```

```
vy := submatrix(ρv,0,54,0,0);
```

```
Vs1 := csp line (vx, vy)      x := -10, -9.9.. 100
```

```
Vs2 := pspline(vx, vy)
```

```
Fs1(x) := interp (Vs1, vx, vy, x)
```

```
Fs2(x) := interp (Vs2, vx, vy, x)
```

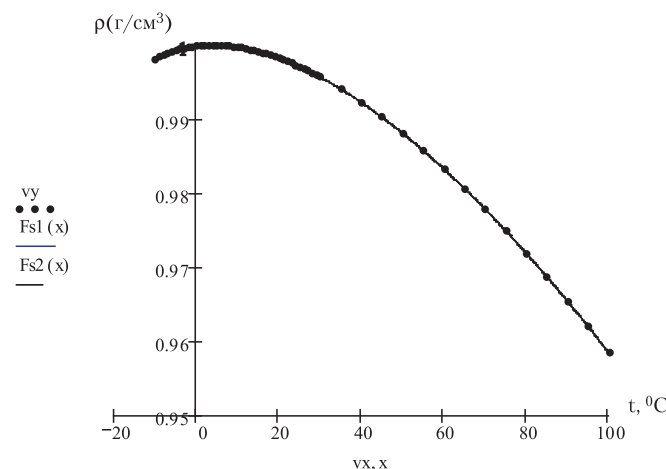
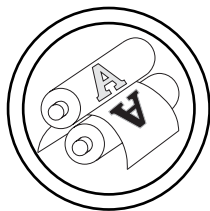


Рис. 10. Залежність густини води від температури (● — експериментальні значення в інтервалі $-10^\circ\text{C}..+100^\circ\text{C}$, інші — результати розрахунків за інтерполяційними функціями)

Одержувані значення функцій можна порівняти, наприклад, у точці $t=42.5^\circ\text{C}$:

$$Fs1(42.5) = 0.991$$

$$Fs2(42.5) = 0.991$$

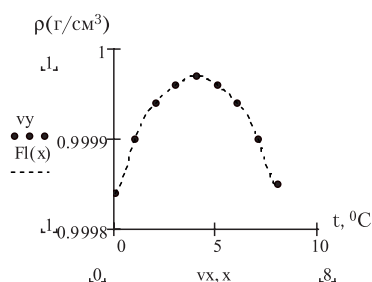


ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ

Для реалізації поліноміальної інтерполяції досить знайти розв'язок системи лінійних рівнянь і визначити значення коефіцієнтів полінома. При інтерполяції по N точках ступінь полінома дорівнюватиме N-1, тому великі масиви даних можна

попередньо інтерполювати локальними частинами.

Згідно Лагранжу інтерполяція полягає у складанні полінома без попереднього визначення його коефіцієнтів і матиме вигляд, показаний на рис. 11.



```

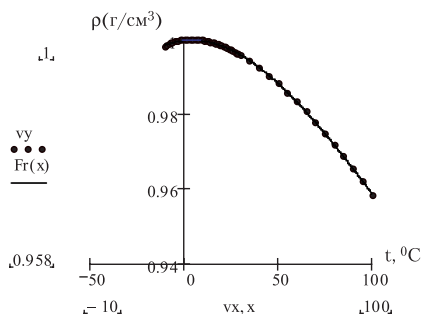
vx := submatrix(tccl, 10, 18, 0, 0)
vy := submatrix(pv, 10, 18, 0, 0)      N := rows(vx)      N = 9
n := N - 1      i := 0..n      j := 0..n      x := 0, 0.2.. 8

Fl(x) := ∑i vyi · ∏j if (i = j, 1,  $\frac{x - vx_j}{vx_i - vx_j}$ )
    
```

Рис. 11. Залежність густини води від температури (● — експериментальні значення в інтервалі 0°C..+8°C, --- — результат розрахунку за інтерполяційним поліномом Лагранжа)

За допомогою убудованої функції regress(VX,VY,n) створюється наближуючий поліном, коефіцієнти якого обчислюються по усій сукупності заданих точок, а степінь його визначається аргументом n. Ре-

зультатом роботи функції є вектор, що містить коефіцієнти многочлена, а результати розрахунку температурної залежності густини води за поліномом третього степеня показано на рис. 12.



```

r := regress (vx, vy, 3)
Fr(x) := interp(r, vx, vy, x)
coeffs := submatrix(r, 3, length(r) - 1, 0, 0)
coeffsT = (1 5.226 × 10-5 -6.721 × 10-6 2.093 × 10-8)
    
```

Рис. 12. Залежність густини води від температури (● — експериментальні значення в інтервалі -10°C..+100°C, --- — результат розрахунку за наближуючим поліномом третього степеня)

Подібний аналіз можна провести над будь-якими таблично представленими даними. Наприклад, опис результатів дослідження теку-

чості (Па⁻¹•с⁻¹) і в'язкості (мПа•с) води в діапазоні температур [0° до 100°]C дає результати, представлені відповідно на рис. 13—15.

ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ

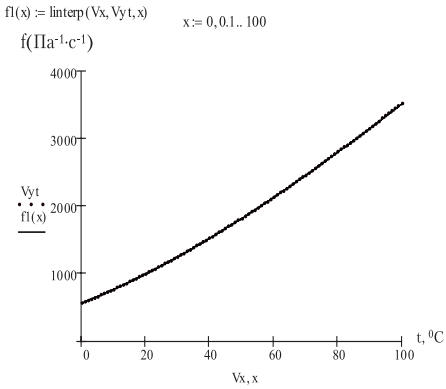
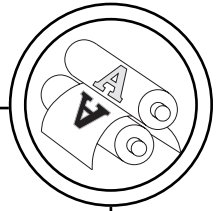


Рис. 13. Залежність текучості води від температури (● — експериментальні значення в інтервалі 0°C..+100°C, --- — результат лінійної інтерполяції)

$$\text{stderr}(\vec{r}(Vx), Vy, t) = 6.569$$

Із рис. 13 видно, що текучість води добре інтерполюється кусочно-лінійною залежністю, при цьому використовується функція $\text{interp}(Vx, Vy, x)$. На рис. 14 показана регресійна крива другого порядку, а

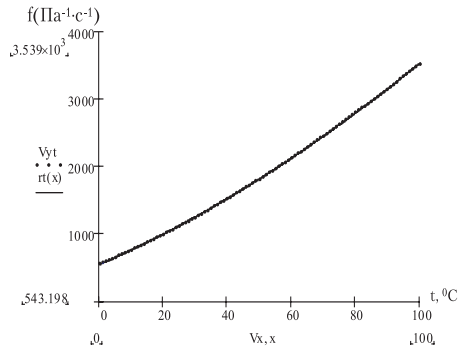


Рис. 14. Залежність текучості води від температури (● — експериментальні значення в інтервалі 0°C..+100°C, --- — результат розрахунку за наближеним поліномом другого степеня)

$$\text{corr}(\vec{r}(Vx), Vy, t) = 1$$

розрахований для неї коефіцієнт кореляції дорівнює 1.

В'язкість може бути описана поліномом 4-ого степеня (коефіцієнти поліному приведені у порядку зростання степеня аргументу):

$$\begin{aligned} Vrv &:= \text{regress}(Vx, Vy, v, 4) & \text{coeffs} &:= \text{submatrix}(Vrv, 3, \text{length}(Vrv) - 1, 0, 0) \\ \text{coeffs}^T &= (1.769 \quad -0.054 \quad 9.473 \times 10^{-4} \quad -8.679 \times 10^{-6} \quad 3.125 \times 10^{-8}) \\ rv(x) &:= \text{interp}(Vrv, Vx, Vy, v, x) \end{aligned}$$

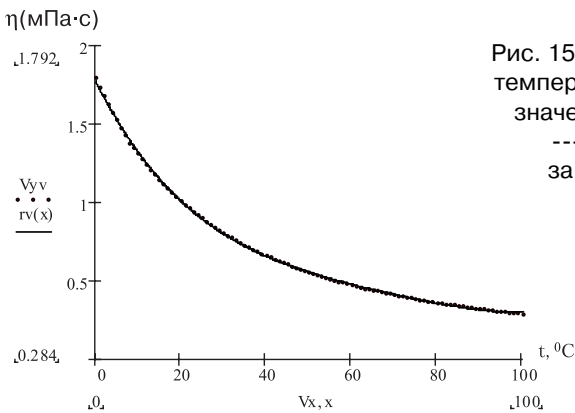
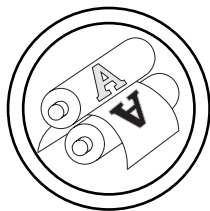


Рис. 15. Залежність в'язкості води від температури (● — експериментальні значення в інтервалі 0°C..+100°C, --- — результат розрахунку за наближеним поліномом четвертого степеня)

$$\text{stderr}(\vec{r}(Vx), Vy, t) = 6.569$$

$$\text{corr}(\vec{r}(Vx), Vy, t) = 1$$



ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ

При спробі визначення аналітичної залежності в'язкості води від тем-

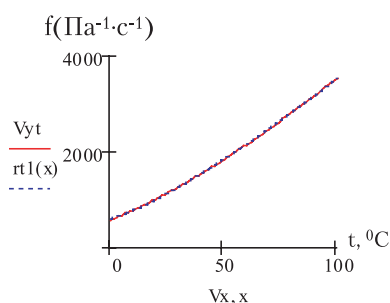
ператури гарний результат дає і звертання до типових функцій регресії:

$$vg1 := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$vt1 := \text{pwrfit}(Vx, Vyt, vg1)$$

$$vt1 = \begin{pmatrix} 9.386 \\ 1.247 \\ 592.451 \end{pmatrix}$$

$$rt1(x) := vt1_0 \cdot x^{vt1_1} + vt1_2$$



$$vg2 := \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$vv2 := \text{expfit}(Vx, Vyv, vg2)$$

$$vv2 = \begin{pmatrix} 1.492 \\ -0.033 \\ 0.253 \end{pmatrix}$$

$$rv2(x) := vv2_0 \cdot e^{vv2_1 \cdot x} + vv2_2$$

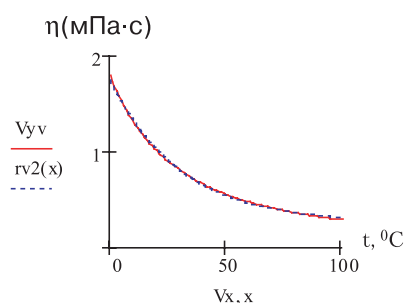


Рис. 16. Залежність: а) текучості та б) в'язкості води від температури (● — експериментальні значення в інтервалі 0°C..+100°C, --- — результат розрахунку за степенною функцією регресії для текучості, за показниковою функцією регресії для в'язкості)

$$\text{stderr}(\overrightarrow{rt1}(Vx), Vyv) = 6.956$$

$$\text{stderr}(\overrightarrow{rv2}(Vx), Vyv) = 0.013$$

$$\text{corr}(\overrightarrow{rt1}(Vx), Vyv) = 1$$

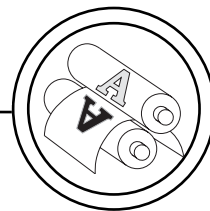
$$\text{corr}(\overrightarrow{rv2}(Vx), Vyv) = 0.999$$

З вищевикладеного видно, що достовірні експериментальні дані дають можливість отримати необхідну інформацію у залежності від потреб користувача: від значення певної фізичної характеристики речовини у довільно заданій точці (що може бути необхідно, наприклад, на робочому місці технолога), до аналітичного опису поведінки цієї характеристики у залежності від різних змінних параметрів (температури T, об'єму V, тиску P, інших зовнішніх умов) або від їх сукуп-

ності, що важливо для науковців, які займаються дослідженням цієї речовини.

Майбутня наявність великої кількості такого роду експериментальних даних та результатів їх обробки буде вимагати чіткої систематизації: по-перше, даних, наприклад, за класом речовин (для поліграфії це папери, розчинники, сикативи, стабілізатори, наповнювачі, пігменти, самі фарби, тонери і т.п.); по-друге — проблем і задач, що мусять і будуть вирішувати ко-

ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ



ристувачі. Можна створювати персоналізовані автоматизовані електронні системи, програмне забезпечення яких та інтерфейс буде враховувати право конкретного користувача на доступ до електронних даних та містити (наприклад, у вигляді меню) перелік тих задач, які потрібно вирішувати саме йому.

Окрім того, видавничо-поліграфічна галузь України на нинішньому етапі свого розвитку потребує все більшу кількість інженерів-матеріалознавців, здатних ефективно впроваджувати новітні матеріали у виробництво, організувати їх високоякісний контроль та відповідну стандартизацію, забезпечувати автоматизоване управління якістю матеріалів та готових виробів із них упродовж всього технологічного процесу виготовлення накладу. Виходячи з цих потреб, на кафедрі репрографії видавничо-поліграфічного інституту НТУУ «КПІ», починаючи з 2005 року, розпочата підготовка фахівців ще з двох нових спеціальностей: 7.0927.05 «Матеріали видавничо-поліграфічних виробництв» та 7.0927.02 «Технології електронних та мультимедійних видань». Загалом на трьох спеціальностях: 7.0927.02, 7.0927.04 та 7.0927.05, закріплених за кафедрою, навчається: на п'яти курсах за денною формою навчання біля 250 осіб, а за заочною — більше 200 осіб. Згідно до навчальних планів на кожній з цих спеціальностей у блоці дисциплін «фахової і практичної підготовки» відводиться на матеріалознавчі дисципліни більше 46 європейських кредитів (із 134), що складає біля 35 % від загального відведеного числа годин на навчання за даним циклом.

У зв'язку з цим для високоякісної підготовки інженерів-матеріалознавців галузевого призначен-

ня вкрай необхідно створити спеціалізовану високоякісну навчальну електронну документацію, електронні підручники та навчальні посібники, фахові довідники, які, на жаль, поки що, за рідкими виключеннями, практично відсутні.

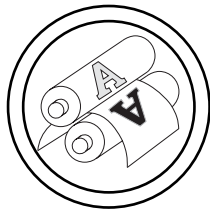
Особливу увагу, на наш погляд, слід приділити підготовці цих фахівців до опанування та користування існуючими банками інформаційних даних з загального та прикладного матеріалознавства та створеної на їх основі електронної інформаційної бази даних, оскільки у майбутньому вони повинні впроваджувати найновітніші технології контролю і управління якістю поліграфічних матеріалів та готової продукції, всього технологічного процесу її виробництва, що діють у реальному масштабі часу.

Найважливіше місце із усієї сукупності існуючих при цьому проблем посідає проблема створення електронної інформаційної бази даних сучасного поліграфічного матеріалознавства і її використання для формування інтелекту інженерів-матеріалознавців та використання її для організації, контролю і управління якістю сучасних комп'ютеризованих видавничо-поліграфічних виробництв.

Створення розвинутої державної централізованої електронної матеріалознавчої бази даних буде мати надзвичайно велике значення для подальшого розвитку національної виробничої сфери, її найновітніших технологій, наукових досліджень, і як наслідок — забезпечить різке підвищення інтелектуального потенціалу і інформатизації суспільства у цілому.

Висновки

У результаті проведеної роботи показано, що:



ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ

1. Програмна система комп'ютерної математики Mathcad дозволяє ефективно розв'язувати складні задачі інтерполяції, екстраполяції та регресійного аналізу при обробці експериментальних масивів даних для встановлення функціональних залежностей властивостей технологічно важливих функціональних матеріалів, та забезпечує можливість створення ефективної швидкодіючої електронної інформаційної бази даних загального та галузевого науково-прикладного, освітнього та виробничого призначення.

2. Створення державної централізованої електронної бази даних загального та галузевого матеріалознавства відіграє велику роль:

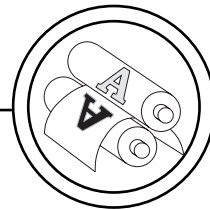
— у процесі підготовки високоякісних фахівців-матеріалознавців; розвитку науково-технічних досліджень галузей та впровадженню новітніх комп'ютеризованих технологій різноманітних виробництв з системами управління якістю продукції, діючими у реальному масштабі часу;

— забезпечить суттєвий зріст інформатизації суспільства та інтелектуального потенціалу нації;

— матиме велику економічну ефективність внаслідок можливості реалізації (збуту) матеріалознавчої інформації (як предмету продажу-купівлі) споживачам у державних та світових комп'ютерних мережних технологіях.

1. Справочник по математике (для научных работников и инженеров). Г. Корн, Т. Корн. — М.: Наука, 1977. — 832 с., ил. 2. В. П. Дьяконов, И. В. Абраменкова. Mathcad в математике, в физике и в Internet. — Нолидж, 2001. — 592 с. 3. В. П. Дьяконов. Mathcad 8—12 для всех. Серия «Библиотека студента». — М.: Солон-пресс, 2005. — 632 с. 4. В. П. Дьяконов. Вейвлеты. От теории к практике. Изд. 2-е, перераб. и доп. — М.: Солон-пресс, 2004. — 400 с. 5. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей: Справочное пособие / Пер. с англ. под ред. Б. И. Соколова. — 3-е изд., перераб. и доп. — Л.: Химия, 1982. — 592 с. 6. Таблицы физических величин. Справочник. Под ред. акад. И. К. Кикоина. — М.: Атомиздат, 1976. — 1008 с. 7. И. Т. Гороновский, Ю. П. Назаренко, Е. Ф. Некряч. Краткий справочник по химии. Под ред. акад. АН УССР А. Т. Пилипенко. — К.: Наукова думка. — 1987. — 831 с. 8. Ю. Ю. Лурье. Справочник по аналитической химии. Изд. 4-е, перераб. и доп. — М.: Химия, 1971. — 456 с. 9. Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. Физико-химические свойства бинарных и многокомпонентных растворов неорганических веществ. Справ. изд. — М.: Химия, 1988. — 416 с. 10. Справочник химика. Изд. 2-е, перераб. и доп. Т.1, ГНТИ хим. л-ры. — Л., М.: 1963. — 1072 с.; Т.3, Изд. 2-е, перераб. и доп. — М., Л.: Химия, 1965. — 1008 с. 11. Справочник по расплавленным солям, Т.1. Перевод с англ. — Изд-во «Химия», 1971. — 168 с.; Т.2. Перевод с англ. — Изд-во «Химия», 1972. — 160 с. 12. Физико-химические свойства электролитных неводных растворов / Ю. А. Карапетян, В. Н. Эйчис. — М.: Химия, 1989. — 256 с. 13. Справочник по растворимости. / Сост. Коган В. Б., Фридман В. М., Кафаров В. В. / Под ред. Кафарова В. В. Т.1. Бинарные системы, кн.1. — М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1961. — 961 с. 14. Диэлектрические свойства чистых жидкостей. / Ахадов Я. Ю. — М.: Изд-во стандартов, 1972. — 412 с. 15. Диэлектрические свойства бинарных растворов. / Ахадов Я. Ю., Справочник. Главная редакция физ.-мат. л-ры изд-ва «Наука», М.: 1977. — 400 с. 16. Т. Эрдеи-Груз. Явления переноса в водных растворах. / Пер. с англ. под ред. Н. С. Лидоренко и Ю. Д. Мазитова. — М.: Мир, 1976. — 597 с. 17. Мельник Б. Д. Инженерный справочник

ТЕХНОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ



по технологии неорганических веществ. Графики и номограммы. Изд. 2-е, перераб. и доп. — М.: Химия, 1975. — 544 с. 18. Березин Б. И. Полиграфические материалы. Словарь-справочник. — М.: Книга, 1978. — 336 с. 19. Орел Н. И., Губачек Э. В., Березин Б. И., Водолазская В. М. Справочник технолога-полиграфиста. Ч.5. Печатные краски. — М.: Книга, 1988. — 223 с. 20. Флексографские краски: комплексный подход. / Пер. с англ. — Киев: Украинская Флексографская Техническая Ассоциация, 2000. — 160 с.

Надійшла до редакції 13.03.06