11. *Плюта В. Л., Нестеренко А. М., Бобырь С. В.* Экономно легированные износостойкие сплавы: проблемы и перспективы // Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії. – 2008. – № 17. – С. 231-239.
12. *Турищев В.* Автоматизация ОГМет: переход от метода «проб и ошибок» к современному производству! // Литейщик России. – 2010. – № 6. – С. 7-9.
13. *Акимов О. В., Марченко А. П., Алехин В. И.* Научные основы проектирования литых деталей блок-картеров ДВС// Металлообработка. Оборудование и инструмент для профессионалов. – 2009. – № 1. – С. 54-57.

Поступила 18.03.2013

УДК 621.74.08

В. Б. Бубликов, А. А. Ясинский, Р. В. Лютый*, Д. В. Кеуш*
Физико-технологический институт металлов и сплавов НАН Украины, Киев
*Национальный технический университет Украины «КПИ», Киев

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ РЕГРЕССИОННОГО АНАЛИЗА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ЛИТЕЙНОГО ПРОИЗВОДСТВА

Представлены методы нахождения коэффициентов для построения нелинейных, степенных и экспоненциальных уравнений регрессии по экспериментальным данным. При построении уравнений использован широко известный метод наименьших квадратов, который применяется для построения линейных зависимостей. Полученные зависимости могут значительно упростить построение графических зависимостей. Приведены примеры использования уравнений при исследовании свойств высокопрочных чугунов и стержневых смесей.

Ключевые слова: *методы регрессионного анализа, процессы литейного производства, уравнения регрессии, линейные зависимости.*

Представлено методи знаходження коефіцієнтів для побудови нелінійних, степіневих і експоненціальних рівнянь регресії за експериментальними даними. При виведенні формул використано широко відомий метод найменших квадратів, який застосовується для побудови лінійних залежностей. Отримані рівняння можуть значно спростити побудову графічних залежностей. Наведені приклади використання рівнянь при дослідженні властивостей високоміцних чавунів і стрижневих сумішей.

Ключові слова: *методи регресивного аналізу, процеси ливарного виробництва, рівняння регресії, лінійні залежності.*

The paper presents methods for finding the coefficients to construct nonlinear, of exponential and exponential regression equations from experimental data. In deriving formulas is used widely known method of least squares, which had previously been used for the construction of a linear dependences. Obtained dependences can greatly simplify the construction of graphical mathematical models. Examples of the use formulas in the investigation of the properties of ductile iron and core mixtures were adduced.

Keywords: *methods of regression analysis, foundry processes researching, regressions equation, a linear dependences.*

Проведение экспериментальных исследований в различных областях литейного производства связано с необходимостью обработки больших массивов данных для их более наглядного представления. Научная работа условно делится на две части: поисковую (качественную) и экспериментальную (количественную). В первой необходимо установить общие закономерности явлений, происходящих в исследуемой системе, а во второй – оптимальные численные значения параметров, а также характер их изменения в зависимости от условий проведения экспериментов.

Для обработки данных традиционно используют корреляционный и регрессионный анализы [1]. Кроме этого, необходимо произвести соответствующую математическую обработку данных, причем, как правило, применяют распределение Стьюдента для установления значений доверительных интервалов.

При обработке результатов исследований особое внимание рекомендуется уделить устранению грубых и предупреждению систематических ошибок, достаточному числу повторений исследований, проверке воспроизводимости результатов, а также верной интерпретации графического изображения зависимостей и наиболее показательному представлению зависимостей в виде $y = f\,(x)$ [2]. Большинство из указанных задач решается с помощью методов математической статистики и обработки результатов [3], в то время как верный выбор характера зависимости в основном зависит от самого исследователя.

Если для построения линейных и квадратичных функций успешно применяют метод наименьших квадратов, то для нахождения экспоненциальных и других зависимостей четких рекомендаций нет. На практике пользование логарифмическими, степенными и экспоненциальными уравнениями затруднено, поскольку для этого необходим инженерный калькулятор, а это не всегда реализуемо в условиях производства. Поэтому для практических целей более простой будет функция вида $y = a + b\,/\,x$, монотонно возрастающая или монотонно убывающая в зависимости от знака коэффициента b. В основных программах не заложены уравнения регрессии такого вида.

Учитывая необходимость наиболее адекватного представления графических зависимостей в литейном производстве, в работе поставлены следующие задачи:

– установление общей методики и алгоритма поиска уравнений нелинейных зависимостей и их коэффициентов;

– анализ литературных данных, поиск теоретического и экспериментального решений по построению зависимости вида $y = a + b\,/\,x$;

– разработка математического аппарата и экспериментальное решение по построению экспоненциальной зависимости вида $y = a \cdot e^{bx}$;

– разработка математического аппарата и экспериментальное решение по построению степенной зависимости вида $y = a \cdot x^b$.

Для построения линейных и нелинейных (квадратичных) зависимостей применяют метод наименьших квадратов, в основу которого заложена минимальная сумма квадратов отклонения между экспериментальными значениями функции и ее значениями по математической модели [1, 3].

Построение других зависимостей предлагаем производить по такому же общему алгоритму, поскольку он может обеспечить минимальное отклонение между теоретическими и экспериментальными значениями. Однако обработка степенных и экспоненциальных уравнений в таком случае затруднительна, что и является, скорее всего, причиной отсутствия описанных методик.

В самом простом случае (линейная аппроксимация) значение функции в точке x_i будет равно

$$y^*_i = a \cdot x_i + b, \qquad (1)$$

где a и b – безразмерные коэффициенты.

Для нахождения значений a и b проводят обработку полученной функции. В случае линейной зависимости уравнения для коэффициентов следующие:

$$a = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum_{i-1}^{n} y_i}{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \right)^2};$$

$$b = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \cdot \sum_{i-1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum_{i-1}^{n} x_i \cdot y_i}{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \right)^2}. \quad (2)$$

Самым простым с точки зрения математической обработки и наиболее исследованным в литературе из поставленных в задачах исследования уравнений является $y = a + b / x$. Произведем поиск коэффициентов для функции такого вида, задавшись условием минимального квадратичного отклонения экспериментальных и теоретических значений, согласно рекомендациям [4]. В таком случае

$$(y_i - a - \frac{b}{x_i})^2 = \min. \quad (3)$$

Для определения оптимальных значений констант a и b необходимо найти нули частных производных полученной функции по этим параметрам, после чего в результате несложных арифметических преобразований получаем систему уравнений, из которой можно рассчитать значения a и b

$$b\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{x_i} + n \cdot a = \sum_{i=1}^{n} y_i;$$

$$a\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{x_i} + b\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{x_i^2} = \sum_{i=1}^{n} \frac{y_i}{x_i}. \quad (4)$$

Данную систему уравнений применяют в настоящей работе для построения графической зависимости по экспериментальным данным при исследовании физико-механических свойств стержневой смеси, которая относится к смесям из неорганических связующих фосфатного типа, но отличается от прочих смесей тем, что связующее образуется в ней при нагреве в результате взаимодействия ортофосфорной кислоты и кварцевого наполнителя [5].

В результате измерения прочности смеси на основе представленной новой связующей системы (ортофосфорная кислота + пылевидный кварц), которая твердеет в интервале температур 250-320 °С, получены следующие данные в зависимости от содержания пылевидного кварца в смеси (табл. 1). Наполнителем смесей был днепровский кварцевый песок марки $2K_5O_2O_3$ (ГОСТ 2138-91), содержание H_3PO_4 в каждой из смесей одинаковое – 3 %. Наиболее адекватной математической зависимостью для описания этого эксперимента является $y = a + b / x$.

Рассчитаем все члены уравнений (4), необходимые для нахождения значений коэффициентов (расчет представлен в табл. 1).

Подставляем значения в систему уравнений (4)

$$2{,}7 \cdot b + 4 \cdot a = 7{,}9;$$
$$2{,}7 \cdot a + 4{,}21 \cdot b = 8{,}09.$$

Таблица 1. Результаты экспериментов и расчет параметров системы уравнений

Номер опыта, i	Содержание пылевидного кварца, % x_i	Прочность смеси на сжатие, МПа y_i	$1/x_i$	$1/x_i^2$	y_i / x_i
1	0,5	3,5	2	4	7
2	2,5	1,7	0,4	0,16	0,68
3	5	1,4	0,2	0,04	0,28
4	10	1,3	0,1	0,01	0,13
$\sum$	18	7,9	2,7	4,21	8,09

Из полученных уравнений легко найти значения коэффициентов и записать функциональную зависимость в виде

$$y = 1{,}19 + \frac{1{,}16}{x}.$$

Расхождение между экспериментальными и теоретическими данными минимальное и, безусловно, не выйдет за пределы доверительных интервалов (рис. 1).

Более сложной задачей является нахождение коэффициентов для нелинейных функций степенного характера. В случае выбора регрессионного уравнения вида $y = a \cdot x^b$ также можно взять за основу принцип наименьших квадратов, однако необходимо привести функцию в надлежащий подобной обработке вид.

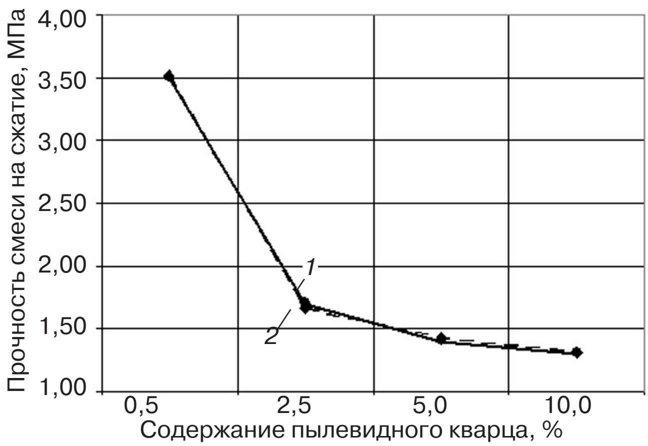

Рис. 1. Теоретический и экспериментальный графики зависимости прочности стержневой смеси на основе фосфата кремния от состава: *1* – экспериментальные данные; *2* – теоретические данные

Данную функцию предлагаем представить в виде

$$\ln y_i^* = \ln a + b \cdot \ln x_i . \qquad (5)$$

Учитывая основное условие (1), можно предположить, что в данном случае оно приобретает вид

$$\sum_{i=1}^{n} (\ln y_i - \ln y_i^*)^2 = \min,$$

или же

$$\sum_{i=1}^{n}(\ln y_i - \ln a - b \cdot \ln x_i)^2 = \min. \qquad (6)$$

Для нахождения минимума такой функции необходимо взять частные производные по параметрам a и b и приравнять их к нулю. Для упрощения решения системы принимаем, что $\ln a = c$.

Далее, после несложных преобразований, получим систему уравнений для нахождения коэффициентов

$$\begin{aligned} & b \cdot \sum_{i=1}^{n} \ln x_i + n \cdot c = \sum_{i=1}^{n} \ln y_i\,; \\ & b \cdot \sum_{i=1}^{n} \ln^2 x_i + c\sum_{i=1}^{n} \ln x_i = \sum_{i=1}^{n} \ln x_i \cdot \ln y_i\,. \end{aligned} \qquad (7)$$

Рассмотрим пример использования указанной задачи для построения уравнения регрессии по экспериментальным данным. В результате исследования влияния толщины стенки чугунной отливки в виде пластины (с холодильником) на скорость охлаждения получили ряд данных, результаты которых, а также все необходимые параметры для построения системы уравнений (7), указаны в табл. 2. Фактором (x) является толщина отливки (мм), откликом (y) – скорость охлаждения (°С/с).

Таблица 2. Результаты экспериментов и расчет параметров системы уравнений

Номер опыта, i	Толщина отливки, мм x_i	Скорость охлаждения, °С/с y_i	$\ln x_i$	$\ln^2 x_i$	$\ln y_i$	$\ln x_i \ln y_i$
1	5	8,3	1,6	2,56	2,2	3,52
2	10	4,8	2,3	5,29	1,6	3,68
3	15	2,3	2,7	7,29	0,8	2,16
4	20	1,53	3,0	9,0	0,4	1,20
$\sum$	50	16,9	9,6	24,1	5,0	10,56

Подставляем значения в систему уравнений (7)

$$\begin{aligned} & 9{,}6 \cdot b + 4 \cdot c = 5{,}0; \\ & 24{,}1 \cdot b + 9{,}6 \cdot c = 10{,}56. \end{aligned}$$

Решив систему, получаем $b = -1{,}36$; $c = 4{,}51$. Таким образом, с учетом того, что $\ln a = c$, $a = 90{,}9$. Функциональная зависимость принимает вид

$$y = 90{,}9 \cdot x^{-1{,}36}\ .$$

Расхождение между экспериментальными и теоретическими значениями небольшое (рис. 2) и не превышает пределов доверительных интервалов.

Построение регрессионного уравнения для экспоненциальной функции проводим следующим образом. Первым этапом является линеаризация функции $y = a \cdot e^{bx}$

$$\ln y_i = \ln a + \ln e^{bx_i} = \ln a + b \cdot x_i. \qquad (8)$$

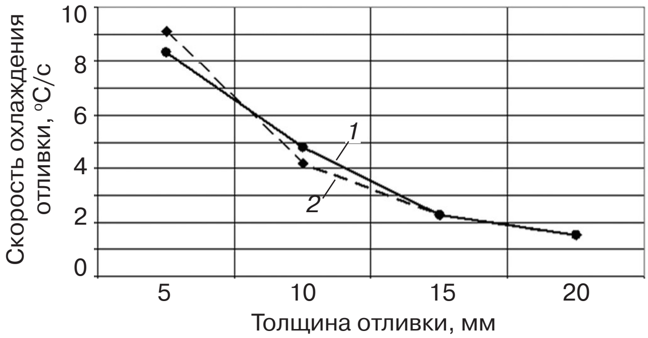

Рис. 2. Теоретический и экспериментальный графики зависимости скорости охлаждения чугунной отливки в виде пластины с холодильником от толщины стенки: *1* – экспериментальные данные; *2* – теоретические данные

Для упрощения решения системы принимаем, что $\ln a = c$.

Нахождение минимума функции и значений констант также осуществляем аналогичным методом частных производных по параметрам b и c. В результате чего получаем

$$\begin{aligned} &n \cdot c + b \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} \ln y_i ; \\ &c \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i + b \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot \ln y_i . \end{aligned} \tag{9}$$

Полученную систему применяют для построения уравнения регрессии и графической зависимости по результатам исследования влияния толщины на скорость охлаждения для усовершенствованных клиновидных проб из высокопрочного чугуна. Результаты экспериментов, а также все параметры, необходимые для построения системы уравнений (9), указаны в табл. 3.

Таблица 3. Результаты экспериментов и расчет параметров системы уравнений

Номер опыта, i	Толщина отливки, мм x_i	Скорость охлаждения, °С/с y_i	x_i^2	$\ln y_i$	$x_i \ln y_i$
1	8	0,75	64	-0,29	-2,32
2	12	0,46	144	-0,78	-9,36
3	16	0,32	256	-1,14	-18,24
4	20	0,23	400	-1,47	-29,40
5	25	0,17	625	-1,77	-44,25
6	30	0,12	900	-2,12	-63,60
7	45	0,04	2025	-3,22	-144,9
$\sum$	156	2,09	4414	-10,79	-312,07

Подставляем значения в систему уравнений (9)

$$\begin{aligned} &7 \cdot c + 156 \cdot b = -10{,}79 ; \\ &156 \cdot c + 4414 \cdot b = -312{,}07. \end{aligned}$$

Решив систему, получаем $b = -0{,}077$; $c = 0{,}18$. Поскольку $\ln a = c$, то $a = 1{,}2$. Функциональная зависимость принимает вид

$$y = 1{,}2 \cdot e^{-0{,}077 \cdot x}.$$

Расхождение между экспериментальными и теоретическими значениями небольшое (рис. 3) и также не превышает пределы доверительных интервалов.

Рис. 3. Теоретический и экспериментальный графики зависимости скорости охлаждения чугунной отливки в виде клиновидной пробы от толщины: *1* – экспериментальные данные; *2* – теоретические данные

Выводы

▪ Теоретически и экспериментально показано, что для проведения актуальных исследований при обработке экспериментальных данных в литейном производстве наиболее адекватными уравнениями регрессии являются экспоненциальные и степенные функции с дробным показателем.

▪ Для нахождения коэффициентов регрессии в указанных функциях использован метод наименьших квадратов с определенными допущениями, которые носят сугубо математический характер и не влияют на точность получаемого результата.

▪ Разработаны и проверены на практике методики построения типичных нелинейных уравнений регрессии, наиболее часто применяемые исследователями.

▪ Выведены и предложены системы уравнений для быстрого нахождения коэффициентов регрессии в сложных нелинейных функциях.

▪ Показано, что в результате обработки данных расхождение между экспериментальными и теоретическими значениями минимально, поэтому полученные зависимости могут быть использованы для построения математических моделей.

Список литературы

1. *Бурдун Г. Д., Марков Б. Н.* Основы метрологии. – М.: Изд-тво стандартов, 1995. – 335 с.
2. *Репях С. И., Соценко О. В., Жегур А. А.* О типичных ошибках при обработке экспериментальных данных // Литье Украины. – 2011. – № 11. – С.18-30.
3. *Рябчій В. А., Рябчій В. В.* Теорія похибок вимірювань: Навч. посібник. – Дніпропетровськ: НГУ, 2006. – 166 с.
4. *Иванова В. М., Калинина В. Н., Нешумова Л. А., Решетникова И. О.* Математическая статистика. – М.: Высш. шк., 1975. – 398 с.
5. *Лютый Р. В., Кочешков А. С., Кеуш Д. В.* Формовочные и стержневые смеси с фосфатными связующими и комбинированным наполнителем, отверждаемые при нагреве // Вестник ДГМА. – 2011. – №1 (22). – С. 203-206.

Поступила 28.02.2013