Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт цветных металлов и материаловедения
Кафедра «Фундаментального естественнонаучного образования»

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
__________ Н.И. Косарев
подпись
«____» ________ 20 ____ г.

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Разработка математических моделей и алгоритмов исследования процесса термической обработки сталей

09.04.03 Прикладная информатика
09.04.03.04 «Прикладная информатика в металлургии»

Научный руководитель ___________ доцент, канд. физ-мат наук В.В.Осипов
подпись, дата

Выпускник ___________ А.Э.Реводько
подпись, дата

Рецензент ___________ менеджер проектов, офис технологического и продуктового развития ОАО «Красцветмет» О.Н. Вязовой
подпись, дата

Красноярск 2020

РЕФЕРАТ

Металлургия представляет собой сферу производства, которая выступает индустриальной основой машиностроения и, в целом, обеспечивает конкурентоспособность России. Повышение качества металлопродукции является актуальной задачей научно-технической и производственной отрасли, которые ставят перед собой задачу получения металлов из руд и других металлов, модификацией химического состава, структуры и свойств существующих металлических сплавов. Одним из процессов, направленных на изменение структуры стали при нагревании и последующем охлаждении с определенной скоростью является процесс термической обработки. Процесс термообработки представляет собой сложную технологическую систему, которая характеризуется целенаправленностью, многохарактерностью, многофункциональностью. Такие особенности технологического процесса термообработки не позволяют осуществить его точные описания и делают актуальным необходимость его исследования с использованием методов математического моделирования.

Целью магистерской диссертации является разработка математических моделей и алгоритмов, позволяющих идентифицировать процесс термической обработки металлопродукции, удовлетворяющей требованиям адекватности, простоты, удобства в использовании потребителем.

В результате выполнения магистерской диссертации, разработаны математические модели в виде алгоритмических уравнений и структурных схем, разработки которых базируется на использовании специальных программных продуктов.

По теме магистерской диссертации опубликованы статьи :

— «Задачи разработки статистической модели термообработки металлопродукции». Интеграция науки, общества, производства и промышленности: сборник статей Международной научно-практической конференции (17 мая 2019 г, г. Тюмень). В 3 ч. Ч. 2 / - Уфа OMEGA SCIENCE, 2019. – 280с;

— «Процедурно-технологическая схема разработки модели технологического процесса термообработки металлопродукции». Современная наука и молодые ученые: сборник статей Международной научно-практической конференции. – Пенза: МЦНС «Наука и Просвещение». – 2020. – 254 с.

ТЕРМООБРАБОТКА, АЛГОРИТМ, ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ПРОЦЕСС МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность диссертационного проекта обусловлена значимостью проблемы повышения качества и надежности функционирования технологических процессов металлургического производства, являющегося индустриальной основой конкурентоспособности машиностроения.

Степень разработанности проблемы.
Технологические процессы металлургического производства, в том числе и процессы термообработки, представляют собой сложные технологические системы, которые характеризуются целенаправленностью, многофакторностью, сложностью функционирования.

Особенности технологического процесса в металлургической сфере, его сложность и многофункциональность не позволяют осуществить его точное описание и поэтому естественно осуществить их исследование с использованием методов математического моделирования.

Математическая модель технологического процесса металлургической сферы производства позволяет исследовать реальный технологический процесс , проводя контролируемые эксперименты, которые невозможно выполнить реально.

При построении математической модели для обеспечения ее адекватности необходимо представлять описание металлургического процесса с учетом свойственных ему особенностей и ограничений с обоснованным выборов параметров, характеризующих поведение реального технологического процесса.

Математическое описание технологического процесса может быть представлено в детерминированной и статистической моделях.

Построение детерминированной модели опирается на фундаментальные теоретические законы при описании технологического процесса.

Статистическое описание технологического процесса использует экспериментальные данные, полученные на реальном производстве, и характеризует зависимость между входными и выходными параметрами процесса. Такое описание может быть представлено в виде таблицы, характеризующей технологический процесс по потоку информации.

Использование математических моделей позволяет исследовать взаимодействие и взаимозависимость между разными факторами, характеризующими технологический процесс, использовать информацию для принятия оптимального решения, достигать оперативности в управлении технологическим процессом.

Применение математико-статистических методов позволяет изучить закономерности технологических процессов, с учетом присущих им элементов случайности. Создание математических моделей дает возможность решения таких актуальных в производстве проблем как прогнозирование качества продукции, оптимизации параметров технологического процесса и оперативное управление процессом.

На машиностроительных заводах подвергают термической обработке поковки, кольца, листы и другие заготовки для уменьшения твердости и уменьшение обрабатываемости резанием, применяют закалку, старение, отпуск разнообразных деталей машин для повышения их прочности, твердости, ударной вязкости,сопротивления, усталости и износу и отжигают изделие для уменьшения остаточных напряжений.

Технологический процесс термической обработки следует отнести к категории сложных процессов, так как он характеризуется большим числом взаимосвязанных факторов, наличием неконтролируемых и случайных возмущений. В то же время точность выдержки режимов процесса должны быть достаточно высокой. Это объясняется жесткими требованиями к качеству металлопродукции.

Определение режима термической обработки, обеспечивающего необходимый уровень основных механических характеристик стали ,представляет определенную трудность и требуют всякий раз проведения экспериментальных исследований вне производства.

В этих условиях без применения математических методов управления процессом термообработки основано на интуиции металловеда и связано с многочисленным экспериментированием в условиях реального производства, однако полученное таким способом управляющее воздействие на процесс не всегда является оптимальным.

Анализ степени разработанности проблемы математического моделирования технологических процессов показал, что исследователи рассматривают разные особенности и технологические процессы. Теоретические основы математического моделирования технологических процессов и применение моделей для решения актуальных практических задач представлены в исследованиях Айвазян С. А. [1], Бусленко Н. П. [2], Горбань А. Н.[3], Колмогоров А.Н.[4], Круглов В. В. [5], Налимов В.В.[6], Петров Б. Н.[7], Самарский А. А.[8], Советов Б. Я.[9], Эйкхофф П. И. [10] и др.

Моделирование процесса термообработки методом конечных элементов и их программных комплексов ANSYS, MSC, MAPC, DEFORM-3D, ThermoSim, SYSWELD исследуют ученные Белорусского Государственного университета информатики и радиоэлектроники.[11]. Ученые Уральского Федерального университета моделируют зависимостей теплофизических свойств на основе таблиц экспериментальных данных. Математическое моделирование режима термической обработки низколегированных сталей представлены в исследованиях И. П. Горбунова [12,13], компьютерное моделирование процессов термической обработки сталей рассмотрено в работах Кундас С. П. [14].

Оптимизация процессов термообработки заготовок из жаропрочных никелевых сплавов обсуждается в исследованиях Светушкова Н. Н., Овсепян С. В. [15].

Несмотря на достаточную разработку исследуемой проблемы специфика процесса термообработки конкретных металлопродуктов с целью улучшения их свойств остается актуальной проблемой. С целью определения типа (вида) математической модели адекватно представляющей исследуемый процесс.

Целью магистерской диссертации является разработка математической модели процесса термической обработки металлопродукции с использованием современных информационных технологий и определение ее возможностей для оптимизации параметров технологического процесса и прогнозирования качества продукции.

Задачи исследования:

- охарактеризовать технологический процесс термообработки металлопродукции с выделением наиболее информативных показателей для разработки математической модели;
- провести анализ степени разработанности проблемы математического моделирования технологического процесса термообработки;
- разработать математическую модель процесса термической обработки металлопродукции;
- определить возможность использования разработанной модели технологического процесса для прогнозирования качества продукции.

Глава 1 Теоретические основания разработки математических моделей и алгоритмов исследования термической обработки сталей

1.1 Технологический процесс как объект моделирования

Приступая к рассмотрению технологического процесса как объекта моделирования, обозначим базовые теоретические положения, определяющие принципы моделирования, а так же этапы построения математической модели.

Объектом моделирования является технологический процесс термической обработки стали. Это процесс представляет собой процесс изменения структуры стали при нагревании и последующем охлаждении с определенной скоростью.

Термическая обработка приводит к существенным изменениям свойств стали. Химический состав металла не меняется.

Будем представлять объект исследования в виде «черного ящика» в соответствии с рисунком 1.

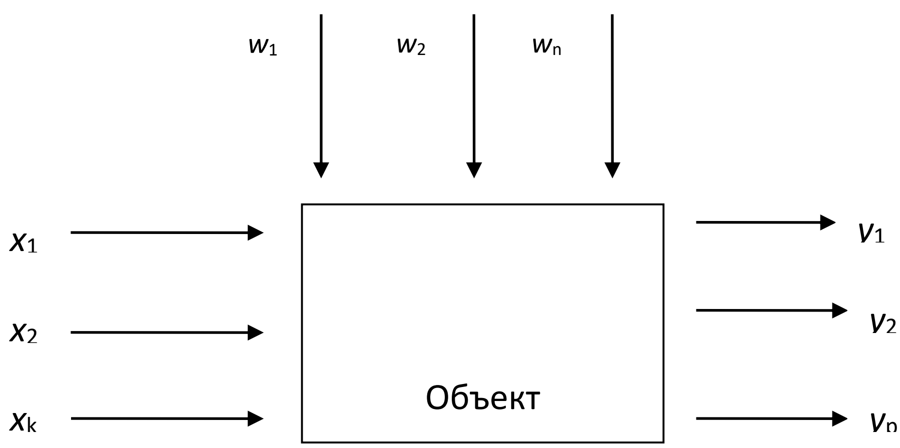


Рисунок 1 – Информационная модель процесса

Здесь x_1, x_2, …., x_kявляются числовыми характеристиками входных факторов (в частном случае механическими характеристиками стали до процесса термообработки). Возмущающие воздействия как характеристики технологического процесса термообработки обозначены w_1, w_2, …, w_n (в частном случае химический состав сплава, температуру закалки и старения, а так же продолжительности старения). Численные характеристики целей исследования будем называть целевой функцией (критериями оптимизации) и обозначать y_1, y_2, …, y_p.

Аналитическая зависимость между этими параметрами в случае конкретных возмущающих воздействий представляется в виде зависимости математического ожидания y от значений x и называется регрессионной моделью.

Отметим требования, предъявляемые к параметрам описывающим объект исследования.

Параметр, обозначенный y_1, y_2, …, y_p , называемый параметром оптимизации целевой функцией или критерии оптимизации представляет собой реакцию (отклик) объекта на воздействие факторов, которые определяют его специфику.

Параметр оптимизации должен быть задан количественно с указанием области его определения, как множества значений, которые он может принимать. Другим требованием к параметру оптимизации является требование однозначности его определения в статистическом смысле: определенному набору значений факторов соответствует одно значение параметра оптимизации y. Способность параметра оптимизации всесторонне характеризовать технологический процесс определяют требованием его универсальности. Исследователи отмечают, что требованиям универсальности обладают т.н. обобщенные параметры оптимизации, представляющие собой функции от нескольких отдельных параметров.

Рассмотрим требования, предъявляемые к факторам. Факторы, к которым относятся входные факторы x_1, x_2,…,x_k, а так же факторы – возмущающие воздействия w_1, w_2,…, w_nмогут быть количественными и качественными. Измеряемые факторы являются количественными. Качественные факторы — это оборудование, технологические способы, приборы и т. п.

Систематизирую сказанное выше представим алгоритм компьютерного моделирования, этапы которого описаны выше.

Основными требованиями к факторам являются: управляемость; точность в измерении; однозначность; независимость; совместимость (в случаях совокупности факторов).

Универсальным методом описания и исследования реально существующих объектов и процессов является моделирование. Математическое моделирование, в том числе с исследованием информационных технологий является необходимым в тех случаях, когда натуральный эксперимент является технически и экономически невозможным.

Математическое моделирование ставит своей целью приближенные описания явлений или объектов на языке математики, с использованием знаковых систем. Построенные математические модели идентифицируют объекты, что позволяет исследовать технологические процессы и предсказывает (экстраполировать) значения определенных параметров, управлять ими.

Разрабатываемые математические модели, как и любые другие, представляют реально существующий объект с некоторой точностью.

Математические модели могут быть представлены в разных формах: аналитическая, алгоритмическая, графическая, компьютерная.

Практика разработки математических моделей позволяет сформировать принципы и подходы к построению математических моделей, как общее требование к их построению.

Рассмотрим эти принципы:

- принцип адекватности. Этот принцип предполагает соответствие построенной модели целям исследования оригинала, в соответствии с уровнем его сложности;
- принцип соответствия моделям поставленной задачи. Модель не может быть универсальной, она строится для исследования определенного класса задач, а чаще всего, для конкретной задачи исследования конкретной системы. Разработка универсальной модели наталкивается на усложнение математической модели, которое практически становится непригодной к практическому использованию;
- принцип упрощения при сохранении существенных свойств исследуемого оригинала. Понятно, что модель не может нести в своем описании все свойства оригинала. Модель дает упрощение описания рассматриваемой системы – в этом смысл исследования. Для адекватного описания моделируемого объекта модель должна быть содержать существенные свойства объекта, игнорируя, опуская менее существенные, посредством абстрагирования от второстепенных деталей;
- принцип соответствия точности результатов моделирования и сложности модели. Названный принцип определяет необходимость целесообразного возрастания сложности модели ограниченное возможностью практического решения по модели, приближающейся по сложности к реальной системе. На практике поиск модели начинается с достаточно простой модели, которая запускает итерационный процесс, критерием остановки которого является получение заданной точности в процессе усложнения модели;
- баланс погрешностей различных видов. В частности необходимо обеспечить целесообразное согласование между систематической погрешностью моделирования, показывающей отклонение модели от оригинала и погрешности, содержащейся в представлении исходной информации. Также проблема возникает при согласовании допускаемого различия между систематической и случайной погрешности, возникающей при толковании средних результатов;
- принцип информационной достаточности. Естественно, что моделирование невозможно, если нет информации об оригинале или ее недостаточно. Уровень сложности модели определяет требования к объему информации для моделирования и ее достаточности;
- принцип множественности моделей. Один и тот же объект допускает ручные способы моделей, в которых отражаются разные стороны моделируемого объекта и используется ручной набор исходных признаков;
- принцип агрегирования. Данный принцип основывается на системном подходе и рассматривает любую сложную систему, в том числе, и

технологический процесс с выделением в ней отдельных компонентов-подсистем, выстраивает между ними иерархию соподчиненности. При этом отдельные подсистемы для математического представления могут использовать разные программные продукты и математические модели;

- принцип системности. Названный принцип выражается в непротиворечивости критериев исследования процесса в системных исследованиях; количественная выраженность моделируемых параметров синхронно установленная в определенные моменты времени; смысл введенных параметров на всем рассматриваемом пространстве остается неизменным в ходе всего процесса исследования.

В практике построения математических моделей выделяются разные подходы в этом процессе: непосредственный анализ функционирования систем для постановки задач моделирования; проведение эксперимента ограниченного объема на самой системе для получения количественных характеристик моделируемых параметров; изучение аналогов с целью их использования для решения задач моделирования системы; анализ исходных данных для определения значимых параметров моделирования.

Проведенный анализ исходных данных позволяет приступить к построению модели. Формулируется гипотеза о структуре системы с последующей апробацией и интерпретацией полученных результатов.

При разработке моделей исследователь вынужден решать задачу согласования полноты описания оригинала для построения модели и стремлением получить требуемые результаты возможно более простыми средствами. Процесс разработки модели начинается с предельно простых моделей, которые позволяют понять исследуемую систему. Постепенные усложнения модели позволяют определить влияние различных факторов на результаты моделирования, исключить некоторые факторы из рассмотрения и выстроить иерархию моделей, различающихся уровнем отражаемых характеристик моделируемой системы.

Проектирование математической модели является процессом разработки, исследования модели и использования модельной информации для оптимизации оригинала, предсказания его поведения в заданном интервале изменения параметров, входящих в модель.

Этапы построения математической модели.

Процесс разработки математической модели состоит в том, что реально существующая система (оригинал) упрощается с выделением значимых параметров для моделирования, схематизируется и описывается с исследованием математического аппарата. При этом выделяются этапы:

- *Содержательное описание* моделируемого объекта опирается на системный подход к исследованию объекта, который представляется в системном единстве его составляющих, для которых представлены связи и взаимозависимости и возможные состояния с их качественными и количественными характеристиками. Этот этап, дающий возможность содержательно представить моделируемый объект называется концептуальной моделью. Также качественное описание системы выступает основой для последующей формализации, позволяет разработать модель, пригодную для использования;

- *Формализация.* Содержательное описание моделируемого объекта при математическом моделировании предполагает выявление существенных для исследования признаков, характеристик исследуемой системы. Это позволяет разделить все множество характеристик системы на существенные, несущественные, управляемые, неуправляемые. Такое представление раскрывает природу исследуемой системы (процесса), в том числе для управляемых параметров. Этап формализации предполагает формирование целевой функции модели, связанной с выделенными показателями и характеристиками системы при моделировании.

При оценке эффективности решений по показателям исхода операций целесообразно перейти от множества показателей к одному обобщенному показателю, произвести сверку показателей. В этом случае критерий эффективности и целевая функции формируются на свертке показателей.

- *Проверка адекватности модели.* Проверка адекватности модели может осуществляться в два этапа. Первый, предварительный этап проверки модели осуществляется с привлечением профессионалов не принимающих участие в разработке модели, которые проводят ее экспертную оценку на предмет выявления недоработок, слабых сторон. Часто такая оценка бывает полезна и позволяет выявить грубые недочеты, допущенные разработчиками. Следующий этап сотавляет верификацию модели, т.е. проверку на практике в процессе ее реализации. Результаты проверки фактически отвечают на вопрос об адекватности модели и определяет возможность ее практического использования. В случает, если адекватность не подтверждается, модель подвергается корректировке. В случает построении регрессионной модели процесс ее разработки является итерационным до достижения адекватности.

- *Корректировка модели.* Как сказано выше, в случае подтверждения неадекватности модели, осуществляется ее корректировка.

Направлениями корректировки модели, которая оказалась неадекватной являются:

- уточнение исходных данных;
- проверка целесообразности ограничений, накладываемых на управляемые параметры;
- анализ управляемых параметров и их связей с другими характеристиками систем.

Корректировка модели в случае ее неадекватности приводит к построению новой модели, для которой встает этот же вопрос – проверка на адекватность.

- *Оптимизация модели.* При разработке модели сложной системы необходимо разрешать противоречие между необходимостью обеспечить простоту модели и заданное требование ее адекватности. Уровень простоты модели связан с количеством значимых характеристик (параметров), входящих в систему. Другой аспект оптимизации модели связан с временными и финансовыми затратами на разработку модели и проведение исследований на ней. Оптимизация модели, в том числе и ее модернизация осуществляется либо с привлечением экспертов, либо на основе математических методов на рисунке 2.

Рисунок 2 – Алгоритм компьютерного математического моделирования

Для данного исследования ценно мнение А.А. Ильиной [21], представившее процедурно-технологический алгоритм проектирования математической модели технологического процесса, который включает деятельность исследователя по определению вида системы моделирования, объекта, цели, а также требований к модели и форме ее описания, ориентированной на определенный характер реализации в соответствии с поставленной целью. Для выделения вида системы моделирования в соответствии с технологическим процессом термообработки металлопродукции нами рассмотрены разные системы, в связи с процессами которые адекватно в них изображаются.

К таким системам относятся системы:

- физическая;
- химическая;
- техническая;

- технологическая;
- биологическая;
- экологическая;
- экономическая;
- социальная и др.

1.2 Проблема разработки регрессионной модели

Приступая к разработке математической модели, дадим теоретическое обоснование процедуры и технологии ее разработки, ориентированной на повышение его качества. Определим отдельные составляющие процедуры разработки математической модели, в частности, обоснуем выбор типа модели для исследования технологического процесса термической обработки стали:

- определим цель разработки модели;
- выделим требования к форме ее представления, вида ее описания;
- обозначим способ реализации адекватной модели для достижения определенной цели [16-19].

В [20] отмечены важные характеристики процесса термообработки, определяющие сложность разрабатываемой модели и выражающейся в таких характеристиках как многофакторность, что показывает невозможность использования точных математических методов его исследования. Современный уровень развития информационных технологий определяет целесообразность использования математического моделирования для идентификации технологического процесса термической обработки стали с использованием современных информационных технологий и специальных пакетов программ.

Учитывая предмет нашего следования естественно определить технологическую систему моделирования.

Следующий вопрос, возникающий перед разработчиком, заключается в том, что будет моделироваться, каков объект моделирования, что будет представлять собой модель. Отвечая на эти вопросы, в исследовании однозначно выбран объект моделирования – процесс термообработки. Именно этот процесс будет идентифицировать разрабатываемая математическая модель.

Важным аспектом в разработке модели является определение целевого назначения модели. В [21] показано, какие разные цели могут стоять перед разработчиками модели. К таким целям модно отнести цели описания, познания, обучения; другой блок целей включает идентификацию, анализы, синтез; третий блок целей ориентирован на задачи управления и включает цели планирования, прогнозирования, управления.

Решаемая в диссертации задача моделирования, объектом которой является процесс термической обработки стали, позволяет определить целевое назначения математической модели, состоящее в идентификации прогнозировании поведения объекта и выделение закономерностей процесса.

Разрабатываемая математическая модель должна в достаточной мере отражать моделируемый объект, т.е. быть адекватной оригиналу и позволять исследовать его свойства.

Естественным способом проверки модели на адекватность реальному процессу является осуществление сравнений оценки функции отклика по модели и оценки ее же в реально существующем технологическом процессе [22].

Для осуществления этого сравнения могут использоваться, в том числе, и сравнение максимальных отклонений максимальной величины функции отклика по моделям и в реальной функционирующей системе. Кроме математического доказательства адекватности разработанной модели могут использоваться такие её характеристики как:

— простота и понятность пользователю;

— динамичность, проявляющаяся в возможности изменений в связи с новыми требованиями;

— функционально достаточной для решения поставленных задач.

В рамках магистерской диссертации в нашей модели важными требованиями являются:

— целостность, позволяющая вынести в рассмотрение значимые параметры системы и связи между ними, обеспечивающие в системном единстве ее функционирование;

— отражение информационных свойств и реализуемость в информационной среде;

— экономическую целесообразность, когда затраты временных, трудовых, материальных и др. видов ресурсов на построение модели находятся в допустимых пределах.

Если разработчики модели четко определили цели моделирования и требования к модели, то может быть определена и форма представления модели.

В рамках данного исследования процесса термической обработки металлоконструкций среди разных форм представления модели (мысленная, знаковая, материальная) с учетом того, что знаковая форма включает в себя логические, математические, логико-математические конструкции, разные схемо-знаковые модели, считаем целесообразной формой представления модели выбрать математическую, а с учетом ее способа представления в виде регрессионной многофакторной модели определить вид описания разрабатываемой модели в форме алгебраических уравнений и структурных схем, визуализирующих ее особенности. Как уже отмечалось выше, характер реализации модели естественно будет машинный (цифровой) с использованием современных информационных технологий и специальных программных продуктов.

Таким образом, резюмируя сказанное выше, относительно процедурно-технологической схемы исследования технологического процесса термической обработки металлопродукции заключаем, что разрабатываемая модель является технологической, моделирующей отмеченный технологический процесс с целью его идентификации и прогнозирования, удовлетворяющая требованиям адекватности, простоты, удобства в использовании потребителем, экономически эффективной и допускающая изменения, представляемая в виде алгебраических уравнений и структурных схем, разработки которой базируется на использовании специальных программных продуктов.

Управляемость фактора обозначает возможность поддержки постоянного значения в ходе технологического процесса.

Точность как требование к фактору определяет диапазон изменения факторов.

Однозначность фактора позволяет управлять им и показывает его независимость от других факторов. Требование независимости фактора определяет возможность установления уровня фактора все зависимости от уровней других факторов.

Совместимость фактора с другими означает возможность их комбинаций.

Термическая обработка является важным процессом производства металлоконструкций разного функционального назначения. В технологическом процессе термообработка может использоваться как отдельный процесс получения необходимых свойств металлопродукции или быть начальным процессом для других технологических процессов, например, для дальнейшей обработки давлением или резанием.

Проблема повышения прочности и надежности металлоконструкций является актуальной проблемой в сфере металловедения. Одним из способов улучшения механических свойств (пластичности, ударной вязкости и др.) конструкционных сталей является отработка различных технологических схем термической обработки путем изготовления опытных образцов и проведения дорогостоящих экспериментов.

Современный подход к решению задачи повышения уровня механических свойств основаны на построении и использовании математической модели.

Математическая модель исследуемого процесса представляет собой уравнение, представляющее связь параметра оптимизации с факторами:

$$y = f(x_1,\ x_2, \dots , x_k)$$

Здесь yназывается функцией отклика.

В случае двух факторов x1, x2 функция отклика может быть представлена поверхностью отклика на рисунке 3.

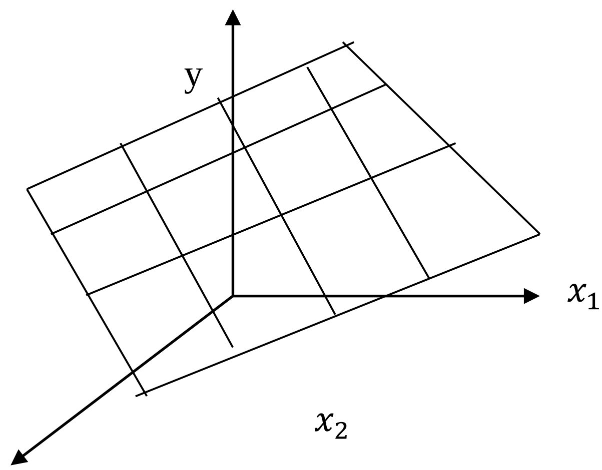


Рисунок 3 – Поверхность отклика $y=f(x_1,x_2)$

Чаще всего вм качестве моделей технологического процесса термообработки используются полиномы разных степеней:

- первой степени:$y = b_0 +\sum_1^k b_i x_i$;

- второй степени: $y = b_0 +\sum_1^k b_i x_i+\sum_1^k b_{ij} x_i\, x_j+\sum_1^k b_{ii} x_i^2$;

-третьей степени: $y=b_0+\sum_1^k b_i x_i+\sum_1^k b_{ij} x_i\, x_j+\sum_1^k b_{iij} x_i^2\, x_j +$
$+\sum_1^k b_{ijj}\, x_i x_j^2+\sum_1^k b_{iii}\, x_i^3$

здесь y — значение функции отклика, а

$в_i$ — линейные коэффициенты регрессии,

$в_{ij}$ — коэффициенты взаимодействия факторов x_i и y_j.

С точки зрения математики задача заключается в поиске коэффициентов регрессивных моделей.

1.3 Адекватность и значимость модели

Уточним этапы регрессионного анализа для исследования технологического процесса:

— определение зависимых и независимых переменных;

— сбор статистических данных для каждой из переменных, включенных в регрессионную модель;

— формулировка гипотезы о форме связи (линейная, нелинейная регрессия);

— расчет численных значений параметров уравнения регрессии и определение функции регрессии;

— оценка точности регрессионного анализа;

— интерпретация полученных результатов.

Корреляционный анализ экспериментальных данных.

В задачу статистического анализа входит определение величины корреляционной связи и установление её типа.

Для этого вычисляется коэффициент корреляции r, который находится в интервале [0; ±1]. Используется формула для определения коэффициента корреляции.

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2 \sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2}}, \tag{1}$$

где x, $\overline{x}$ – значение признака и его среднее арифметическое значение;
y, $\overline{y}$ – значение признака и среднее арифметическое другого зависимого признака

$$\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i;\ \overline{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i. \tag{2}$$

По значению найденного коэффициента корреляции определяют характер корреляционной связи. Численное значение коэффициента корреляции характеризует близость к линейной зависимости между исследуемыми величинами x и y.

Предполагается, что функция оклика не имеет бесконечных разрывов, и, следовательно, её можно представить в виде разложения в ряд Тейлора:

$$y = f(x_1, x_2, ..., x_k) = b_0 + \sum_{j=1}^{k} b_j x_j + \sum_{i,j=1}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^{k} b_{jj} x_j^2 + ... \tag{3}$$

где, b_0, b_j, b_{ij}, b_{jj} - постоянные коэффициенты подлежащие определению, k– число наиболее существенных входных величин.

Пространство, в котором строится поверхность отклика, называется факторным пространством. Требования (предпосылки) к применению методов регрессионного анализа:

— независимость результатов наблюдений y_1, y_2, …, y_N в точках факторного пространства;

— обеспечение однородности выборочных дисперсий D_{yi} (i = 1,2, …, N);

— обеспечение некоррелируемости входных величин;

— обеспечение независимости соседних измерений входной величины по каждой j;

— точность наблюдений входной переменной выше точности наблюдений y.

При построении математической модели по результатам пассивного эксперимента необходимо определить число коэффициентов в разложении функции отклика в ряд Тейлора, что осмысленно связано с требованием к объему выборки. Целесообразно выбрать такой полином, который содержит как можно меньше коэффициентов, он может удовлетворять требованиям простоты и адекватности, под которой понимается способность модели предсказывать результаты эксперимента с заданной точностью. Как правило, на начальном этапе построения математической модели выбирают полином первой степени. Если такая модель оказывается неадекватной, то степень полинома увеличивается до достижения требуемой точности.

Важное значение в ходе построения регрессионной модели имеет проверка выполнимости второй предпосылки регрессионного анализа об однородности выборочных дисперсий.

Представим метод проверки однородности дисперсий выборок x_1, x_2, …, x_mи y_1, y_2, …, y_n с использованием критерия Стьюдента. Процедура состоит в следующем:

- Вычислить выборочные средние арифметические в каждой выборке
-

$$\bar{x} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i;\ \bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i. \tag{4}$$

- Вычислить выборочные дисперсии

$$S_x^2 = \frac{1}{m-1}\sum_{i=1}^{m}(x_i - \bar{x})^2;\ S_y^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2. \tag{5}$$

- Вычисляем статистику Стьюдента t

$$t = \frac{\bar{x} - \bar{y}}{\sqrt{(m-1)S_x^2 + (n-1)S_y^2}}\sqrt{\frac{mn(m+n-2)}{m+n}} \tag{6}$$

По заданному уровню значимости α и числу степеней свободы (m+n–2) из таблицы распределения Стьюдента находим критическое значение $t_{кр}$.

Принимаем решение.

Если $|t| > t_{кр}$, то гипотезу однородности отклоняют, если же $|t| \le t_{кр}$, то гипотезу однородности принимают.

Применение критерия Стъюдента для выполнения второй предпосылки регрессионного анализа об однородности выборочных дисперсий является обоснованным, если обеспечивается независимость и одинаковая распределенность результатов наблюдений, входящих в выборку.

Для проверки *адекватности* уравнения регрессии достаточно оценить *отклонение* предсказанного по модели значения отклика от результата эксперимента в соответствующей точки факторного пространства.

Возможны следующие случаи:

- Построенная модель на основе *F*-критерия Фишера в целом адекватна и все коэффициенты регрессии значимы. Такая модель может быть использована для принятия решений и для осуществления прогноза;
- По *F*-критерию Фишера модель адекватна, но *часть* коэффициентов не значима. Такая модель может быть использована для принятия некоторых решений, но не для осуществления прогноза;
- Если все коэффициенты регрессии не значимы, даже при адекватности модели по *F*-критерию Фишера, её использовать нельзя ни для принятия решений, ни для прогноза;

Для оценки значимости уравнения регрессии используется *F*-критерий Фишера. *Под незначимостью* уравнения регрессии понимается одновременное равенство нулю (с высокой долей вероятности) всех коэффициентов регрессии в генеральной совокупности.

Фактическое значение *F*-критерия определяется как соотношение факторной и остаточной сумм квадратов, рассчитанных по уравнению регрессии с учетом степеней свободы:

$$F = \frac{SS_{факт}}{m} : \frac{SS_t}{n-m-1} = \frac{SS_{факт}}{SS_t} \cdot \frac{(n-m-1)}{m}, \qquad (6)$$

где $SS_{факт} = \sum(\hat{y} - \bar{y})^2$ – факторная сумма квадратов;

$SS_t = \sum(y - \hat{y})^2$ – остаточная сумма квадратов.

По таблице значений критерия Фишера для выбранного уровня значимости α, числа степеней свободы m и $(n-m-1)$ определяется теоретическое значение *F*-критерия.

Нулевая гипотеза об одновременном равенстве нулю всех коэффициентов регрессии в генеральной совокупности отвергается, если $F > F_T(\alpha, m, (n-m-1))$, где $F_T(\alpha, m, (n-m-1))$ – теоретическое значение критерия Фишера; n – численность выборки; m– число параметров.

Отметим, что если модель незначима, то незначимы и показатели корреляции, рассчитанные по ней, т.к. при $b_1, b_2, ..., b_n = 0$, $\hat{y} = b_0$, и линия регрессии параллельна оси абсцисс.

В регрессионной модели точные характеристики связи можно получить, если исследование опирается на всю совокупность фактов и событий, предполагающих сплошное наблюдение генеральной совокупности. Но это практически не возможно обеспечить. Отсюда следует, что построенная математическая модель представляет собой лишь оценку реальных соотношений взаимосвязанных признаков в генеральной генеральной совокупности и отражает лишь общую закономерность для выборки, которая подвержена воздействию случайностей. Отсюда вытекает проблема статистической оценки достоверности и существенности (значимости) построенной модели. Под достоверностью в математической статистике понимается вероятность того, что значения проверяемого показателя связи не равно нулю и не включает в себя величины противоположных знаков.

Другой способ оценки *адекватности* регрессионной модели предполагает вычисление выборочного коэффициента детерминации R^2

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i^T - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}, \text{ где } \bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}; \qquad R^2 \in [0;1] \tag{7}$$

Если $R^2 \approx 1$ – модель хорошего качества, $R^2 \approx 0$ – модель плохого качества.

При $R^2 \geq 75$, модель позволяет делать прогноз значений в пределах исходного диапазона данных.

Коэффициент множественной детерминации R^2 показывает насколько предсказание по модели лучше, чем предсказание по среднему значению отклика $\bar{y}$. R^2 показывает разброс значений отклика, описываемой регрессией $(1 \geq R^2 \geq 0)$. Чем ближе R^2 к единице, тем лучше модель описывает экспериментальные данные.

Разрабатывая регрессионную модель исследователь должен осознавать её достоинства и недостатки.

К достоинствам регрессионной модели относятся, во-первых, наглядность и интерпретируемость результатов для линейной модели. В то же время технологический процесс, отличающийся многофакторностью, вряд ли может быть описан моделью линейной регрессии.

К недостаткам регрессионной модели относят невысокую точность прогноза, субъективный характер выбора вида регрессивной модели.

Здесь следует отметить разные, противоречивые требования для выбора окончательного уравнения регрессии:

– для обеспечения надежности прогнозирования по регрессионной модели, в неё необходимо включить как можно большее количество независимых переменных;

– при большом числе переменных затраты, связанные с получением информации и её последующем контроли становятся велики.

Устранение противоречий в этих требованиях достигается компромиссом между этими требованиями, который достигается привлечением экспертов, позволяющих с использованием «здравого» смысла определить необходимое количество независимых переменных в регрессионной модели.

Выводы по главе 1

Рассмотрение теоретических оснований разработки математических моделей и алгоритмов исследования процесса термической обработки сталей позволяет отметить определенные результаты и сделать следующие выводы.

Процесс термической обработки стали, направленный на изменениеструктуры стали при нагревании и последующем охлаждением с определенной скоростью, представляет собой сложную технологическую систему, которая характеризуется целенаправленностью, многофакторностью, многофункциональностью. Такие особенности технологического процесса термообработки не позволяют представить его точное описание и делают актуальным необходимость его исследования с использованием методов математического моделирования. Управление процессом термообработки, основанное на интуиции металловеда не всегда является оптимальным.

Объект исследования (процесс термической обработки) в силу технологических и экономических соображений не допускает преднамеренного варьирования входных переменных. Поэтому для металлургического моделирования используются результаты, полученные в условиях пассивного эксперимента в режиме нормального функционирования технологического процесса.

Целью магистерской диссертации является разработка математических моделей, позволяющих идентифицировать процесс термической обработки металлопродукции, удовлетворяющих требованиям адекватности, простоты, удобства в использовании потребителем.

Актуальность диссертационного проекта обусловлена значимостью проблемы повышения качества и надежности функционирования технологических процессов металлургического производства, являющегося индустриальной основой конкурентоспособности машиностроения.

Достижение поставленной цели определило задачи исследования:

- охарактеризовать технологический процесс термической обработки металлопродукции с выделением наиболее информативных показателей для разработки математической модели;
- разработать математическую модель исследуемого процесса с учетом его особенностей и степени разработанности проблемы математического моделирования технологического процесса термообработки;
- определить целесообразные программные продукты для построения математической модели с использованием информационных технологий;
- определить возможности практического использования математической модели.

Решение первой задачи исследования позволило представить объект исследования в виде «чёрного ящика» с выделением числовых характеристик входных факторов (в частном случае механические характеристики стали до процесса термообработки); возмущающих воздействий как характеристик технологического процессе термообработки (в частном случае – химический состав сплава, температура закалки и старения, продолжительность старения). Определенычисленные характеристики целей исследования – целевая функция (критерии оптимизации).

Решение второй задачи исследования состоит в теоретическом обосновании модели технологического процесса. При анализе разных форм, представления моделей, способов описания, характера реализации в диссертации обосновано: Модель технологического процесса термической обработки металлопродукции является математической моделью в форме регрессионной многофакторной, представляемой в форме алгебраических уравнений и структурных схем визуализирующих её особенности.

Характер реализации – цифровой с использованием современных информационных технологий и специальных программных средств.

Этапы регрессионного анализа для построения модели технологического процесса включают рад задач, в том числе и формулировку гипотезы о форме связи (линейная, нелинейная).

Модель строится в предположении, что функция отклика не имеет бесконечных разрывов и представлена в виде ряда Тейлора:

$$y = f(x_1, x_2, ..., x_k) = b_0 + \sum_{j=1}^{k} b_j x_j + \sum_{i,j=1}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^{k} b_{jj} x_j^2 + ... \qquad (8)$$

Гипотеза о форме связи строиться на «здравом смысле». Естественно, что нужно выбрать такой полином, который, с одной стороны, содержал бы как можно меньше коэффициентов, а, с другой, построенная модель должна быть не только простой, но и адекватной. Другими словами, разработка регрессионной модели технологического процесса термической обработки металлопродукции представляет собой интеграционный процесс её построения, ориентированный на удовлетворение требования адекватности и простоты.

Математическая модель строится в предположении того, что функция отклика не имеет бесконечных разрывов и может быть представлена в виде разложения в ряд Тейлора:

$$y = f(x_1, x_2, ..., x_k) = b_0 + \sum_{j=1}^{k} b_j x_j + \sum_{i,j=1}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^{k} b_{jj} x_j^2 + ..., \qquad (9)$$

где b_0, b_j, b_{ij}, b_{jj} – постоянные коэффициенты подлежащие определению,

k – число наиболее существенных входных величин.

К использованию методов регрессионного анализа предъявляются требования (предпосылки):

- независимость результатов наблюдений y_1, y_2, …, y_N в точках факторного пространства;
- обеспечение однородности выборочных дисперсий D_{yi} (i = 1,2, …, N);
- обеспечение некоррелируемости входных величин;
- обеспечение независимости соседних измерений входной величины по каждой j;
- точность наблюдений входной переменной выше точности наблюдений y.

Глава 2 Моделирование процесса термической обработки стали ЭП 678

2.1. Уточнение объекта исследования и постановка задачи

Моделирование технологического процесса термической обработки стали ЭП 678 направлено на идентификацию этого процесса посредством разработки регрессионной модели, позволяющей выявлять закономерности изменения свойств стали в процессе термической обработки.

При построении регрессионной многофакторной модели в форме алгебраических уравнений предполагается, что функция отклика не имеет бесконечных разрывов и представима в виде ряда Тейлора. При этом форма связи между функцией отклика y_i и входными факторами x_1, x_2,… x_n выбирается с позиций «здравого смысла», позволяющего найти компромисс между количеством искомых коэффициентов модели, простотой и адекватностью модели технологического процесса термической обработки стали ЭП 678 представляет собой интерационный процесс ее построения, ориентированный на удовлетворение требований адекватности и простоты.

При построении модели использовались данные, полученные в ходе планирования эксперимента (четыре фактора, один отклик).

Таблица 1 – Матрица планирования эксперимента приведена ниже.

	x_1 Содержание титана в сплаве	x_2 Температура закалки	x_3 Темпиратура старения	x_4 Продолжительность старения	y_1 Предел прочности	y_2 Предел текучести	y_3 Относительное удлинение	y_4 Ударная вязкость
1	0,65	942	548	3,64	147	139	14,5	15,8
2	0,98	958	530	3,4	187	185	15,5	13,3
3	0,6	940	550	3,65	142	134	14	16,1
4	0,65	942	547	3,63	147	141	15	15,6
5	0,75	948	536	3,58	167	162	15	14,2
6	0,76	949	535	3,57	170	164	15	14
7	0,69	945	544	3,61	155	151	15	15

Окончание таблицы 1

8	0,95	957	530	3,47	184	180	15,5	13,7
9	0,9	955	531	3,5	182	178	15,3	13,9
10	0,76	950	535	3,56	170	164	15	14
11	0,89	954	531	3,51	182	173	15,5	14
12	0,79	950	534	3,55	174	168	15,5	14,1
13	0,71	946	540	3,6	159	152	14,5	14,8
14	0,96	957	530	3,54	186	181	15,5	13,5
15	0,79	950	533	3,65	174	168	15	14,1
16	0,6	941	549	3,37	142	136	14	16,1
17	1	959	530	3,6	192	187	15,5	12,9
18	0,71	946	540	3,61	159	153	14,5	14,8
19	0,7	945	544	3,62	155	152	15,5	15
20	0,65	943	546	3,51	147	142	15	15,4
21	0,88	953	531	3,59	182	173	15,5	14
22	0,74	947	538	3,48	165	156	15,5	14,4
23	0,95	956	530	3,49	184	180	15,3	13,7
24	0,92	955	530	3,52	184	178	15,3	13,9
25	0,81	951	532	3,57	177	170	15	14
26	0,75	948	537	3,51	167	162	15,5	14,2
27	0,97	957	531	3,42	186	182	15,5	13,5
28	0,79	951	533	3,53	174	168	15	14,1
29	0,62	941	550	3,65	142	138	14,5	16

В ходе построения регрессионной модели осуществляется проверка однородности выборочных дисперсий как выполнение второй предпосылки регрессионного анализа.

$$S_x^2 = \frac{1}{m-1}\sum_{i=1}^{m}(x_i - \bar{x})^2; \; S_y^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2. \tag{10}$$

Используется критерий Стъюдента, статистика Стъюдента t

$$t = \frac{\bar{x} - \bar{y}}{\sqrt{(m-1)S_x^2 + (n-1)S_y^2}}\sqrt{\frac{mn(m+n-2)}{m+n}} \tag{11}$$

Если $|t| > t_{кр}$, то гипотезу однородности отклоняют, $|t| \le t_{кр}$, то гипотезу однородности принимают.

Проверка адекватности уравнения регрессии осуществляется посредством оценки отклонения предсказанного по модели значения отклика от результата эксперимента в соответствующей точке факторного пространства. Используется F-критерий Фишера

$$F = \frac{SS_{факт}}{m} : \frac{SS_t}{n-m-1} = \frac{SS_{факт}}{SS_t} \cdot \frac{(n-m-1)}{m}, \tag{12}$$

где $SS_{факт} = \sum(\hat{y} - \bar{y})^2$ – факторная сумма квадратов;

$SS_t = \sum(y - \hat{y})^2$ – остаточная сумма квадратов.

Нулевая гипотеза об одновременном равенстве нулю всех коэффициентов регрессии отвергается, если $F > F_T(\alpha, m, (n-m-1))$, где $F_T(\alpha, m, (n-m-1))$ – теоретическое значение критерия Фишера; n – численность выборки; m– число параметров.

Проверка адекватности по оценке выборочного коэффициента детерминации R^2

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i^T - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}, \text{ где } \bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}; \qquad R^2 \in [0;1] \tag{13}$$

Если $R^2 \approx 1$ – модель хорошего качества, $R^2 \approx 0$ – модель плохого качества, при $R^2 \ge 75$ – модель позволяет делать прогноз значений в пределах исходного диапазона данных.

2.2 Разработка регрессионной модели процесса термической термической обработки стали ЭП678

Уточним теоретические основания исследовательской деятельности .Разработка модели технологического процесса термической обработки стали ЭП678 будем осуществлять используя ОЦКП–ортогональный центральный композиционный план [17].

Эмпирическая модель второго порядка, содержащая первые и вторые степени переменных и их парные взаимодействия, имеет вид:

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^{n} b_i X_i + \sum_{i=1}^{n} b_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^{n} b_{ij} X_i X_j, \tag{14}$$

где для ОЦКП:

$$b_0 = \frac{\sum_{u=1}^{N} y_u}{N} - q\sum_{i=1}^{n} b_{ii};\ b_i = \frac{\sum_{u=1}^{N} X_{iu} Y_u}{2^n + 2\alpha^2},\quad i = 1,2,...,n;\ b_{ij} = \frac{\sum_{u=1}^{N} X_{iu} X_{ju} Y_u}{2^n},\ i \neq j,\ \ j = 1,2,...,n;$$

$$b_{ii} = \frac{\sum_{u=1}^{N} X'_{iu} Y_u}{(1-q)^2 2^n + 2(\alpha^2 - q)^2 + (2n-1)q^2},\quad i = 1,2,...,n,$$

где $\alpha = \sqrt{\dfrac{N \cdot q - 2^n}{2}}$ – звездное плечо; $q = \sqrt{\dfrac{2^n}{N}}$ – параметр смещения; для РЦКП

$$b_0 = \frac{A}{N}\left[2 \cdot \lambda_1^2 \cdot (n+2) \cdot (0\tilde{y}) - 2 \cdot \lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \sum_{u=1}^{n} (uu\tilde{y})\right] b_i = \frac{\lambda_2}{N} \cdot (i\tilde{y}),\quad i = 1,2,...,n;$$

$$b_{ij} = \frac{\lambda_2^2}{N \cdot \lambda_1} \cdot (ij\tilde{y}),\quad i \neq j;$$

$$b_{ii} = \frac{A}{N}\left[\lambda_2^2 \cdot ((n+2) \cdot \lambda_1 - n) \cdot (ii\tilde{y}) + \lambda_2^2 \cdot (1-\lambda_1) \cdot \sum_{u=1}^{n} (uu\tilde{y}) - 2 \cdot \lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot (0\tilde{y})\right],$$

где $\lambda_1 = \dfrac{2^n \cdot N}{(2^n + 2\alpha^2)^2}$; $\lambda_1 = \dfrac{N}{2^n + 2\alpha^2}$; $A = \dfrac{1}{2\lambda_1 \cdot \left[(n+2) \cdot \lambda_1 - n\right]}$;

$$\alpha = 2^{\frac{n}{4}};(0\tilde{y}) = \sum_{u=1}^{N} (\tilde{y}_u);(i\tilde{y}) = \sum_{u=1}^{N} (x_{iu}\tilde{y}_u);$$

$$(ii\tilde{y}) = \sum_{u=1}^{N} ((x_{iu})^2 \tilde{y}_u);(ij\tilde{y}) = \sum_{u=1}^{N} (x_{iu} \cdot x_{ju} \cdot \tilde{y}_u).$$

В ЦКП входят: ядро – план ПФЭ или ДФЭ с $N_0 = 2^n$ или $N_0 = 2^{n-p}$ точками плана, n_0 – центральных точек плана и по две «звездные» точки для каждого фактора (на рисунке 4):

$x_i = \pm\alpha, x_j = 0, i = 1,..., n, j = 1,..., n, i \neq j,$

где α – плечо «звездных» точек.

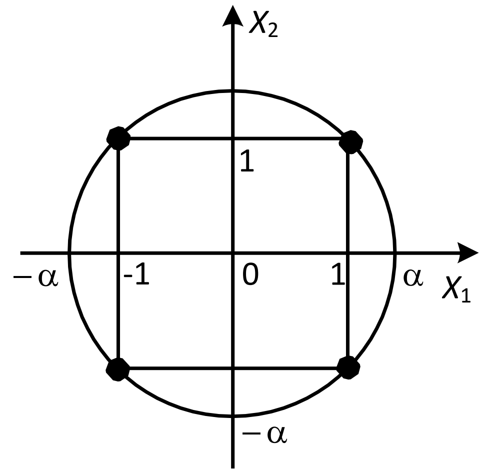


Рисунок 4 - ЦКП

Общее количество точек в ЦКП составляет:

$N = 2^n + 2 \cdot n + n_0,$

где n_0=1 для ОЦКП, n_0 >1 для РЦКП.

Для РЦКП находят среднее наблюдений «ядра» плана 2^n:

$$a_0 = \frac{1}{2^n}\sum_{j=1}^{2^n}\tilde{y}_j$$

Потом рассчитывают среднее наблюдение в центре плана:

$$\tilde{y}_0 = \frac{1}{n_0}\sum_{j=1}^{n_0}\tilde{y}_j.$$

Дисперсию воспроизводимости для РЦКП, полученную по результатам параллельных опытов в центре плана (при числе повторных опытов m) рассчитывают по формуле:

$$S_{воc}^2 = \frac{1}{f}\left(\sum_{j=1}^{2^{n-p}+2n}\sum_{i=1}^{m}(\tilde{y}_{ji} - \tilde{y}_j)^2 + \sum_{j=1}^{n_0}\sum_{i=1}^{m}(\tilde{y}_{ji} - \tilde{y}_0)^2\right), \quad (15)$$

где $f = n_0 - 1$ – число степеней свободы $S_{воc}^2$

При уровне значимости $1-P = \alpha = 0{,}05$ и числе степеней свободы f из таблицы Стьюдента находят $t_{\text{кр}}$.

Потом проверяют значимость коэффициентов при квадратичных членах, подставляя найденные значения в:

$$\left|\tilde{y}_0 - a_0\right| > t_{кр} \cdot S_{вос} \cdot \sqrt{\frac{n_0 + mN}{n_0 N}}. \qquad (16)$$

Если неравенство верное, то эффекты при квадратичных членах значимы, и, следовательно, в модель следует включают квадраты факторов.

В случае равноточности измерений после расчета значений коэффициентов уравнения регрессии проверяют их значимость по описанной ранее методике (см. лаб. работу №1), рассчитав до- верительный интервал Δ для коэффициентов уравнения регрессии по формуле:

$$\Delta = t_{кр} \cdot S\{b\},$$

где $S\{b\}$ для четырех типов коэффициентов рассчитывается по формулам:

для ОЦКП

$$S^2\{b_i\} = \frac{S^2_{вос}}{m(2^n + 2\alpha^2)},\ S^2\{b_{ij}\} = \frac{S^2_{вос}}{m \cdot 2^n},\ S^2\{b_{ii}\} = \frac{S^2_{вос}}{m(2^n(1-q)^2 + 2(\alpha^2 - q)^2 + q(2n-1)},$$

$$S^2\{b_0'\} = \frac{S^2_{вос}}{n(2^n + 2n + 1)},\ S^2\{b_0\} = S^2\{b_0'\} + q^2 \cdot \sum_{i=1}^{n} S^2\{b_{ii}\},$$

для РЦКП

$$S^2\{b_i\} = \frac{\lambda_2}{N} S^2_{вос},\ S^2\{b_{ij}\} = \frac{\lambda_2^2}{N \cdot \lambda_1} S^2_{вос},\ S^2\{b_{ii}\} = \frac{A}{N}((n+1)\cdot\lambda_1 - (n-1)) \cdot \lambda_2^2 \cdot S^2_{вос},$$

$$S^2\{b_0\} = 2\frac{A}{N} \cdot \lambda_1^2 \cdot (n+2) \cdot S^2_{вос},$$

Дисперсия адекватности рассчитывается по формуле:

для ОЦКП $S^2_{ад} = \dfrac{m}{N-d} \sum\limits_{i=1}^{N} (\bar{y}_i - y_{\text{рас}i})^2,$

где d – количество значимых b-коэффициентов; $y_{\text{рас}i}$ – расчетное

значение отклика; $\bar{y}_i$ – среднее измеренное значение отклика в каждой точке факторного пространства;
для РЦКП

$$S^2_{ад} = \frac{m \cdot \left(n_0 \cdot (\tilde{y}_0 - \hat{y}_0)^2 + \sum_{j=1}^{2^n+2n} (\tilde{y}_j - \hat{y}_j)^2 \right)}{f_1}, \tag{17}$$

где $\hat{y}_0$ – расчетное значение отклика в центре плана; $\hat{y}_j$ – j-расчетное значение отклика; $\tilde{y}_j$ – среднее значение отклика в j-точке плана; $f_1 = N - k - n_0$ – число степеней свободы дисперсии адекватности, где $k = \frac{(n+2)\cdot(n+1)}{2} - 1$.

Порядок обработки данных при ОЦКП (РЦКП) в пакете STATISTICA: создать матрицу планирования эксперимента (четыре фактора, один отклик) > **Statistics** > **Experimental Design (DOE)** > **Central composite, non-factorial, surface desiqns** (Центральные композиционные планы, поверхность отклика) представлены на рисунке 5.

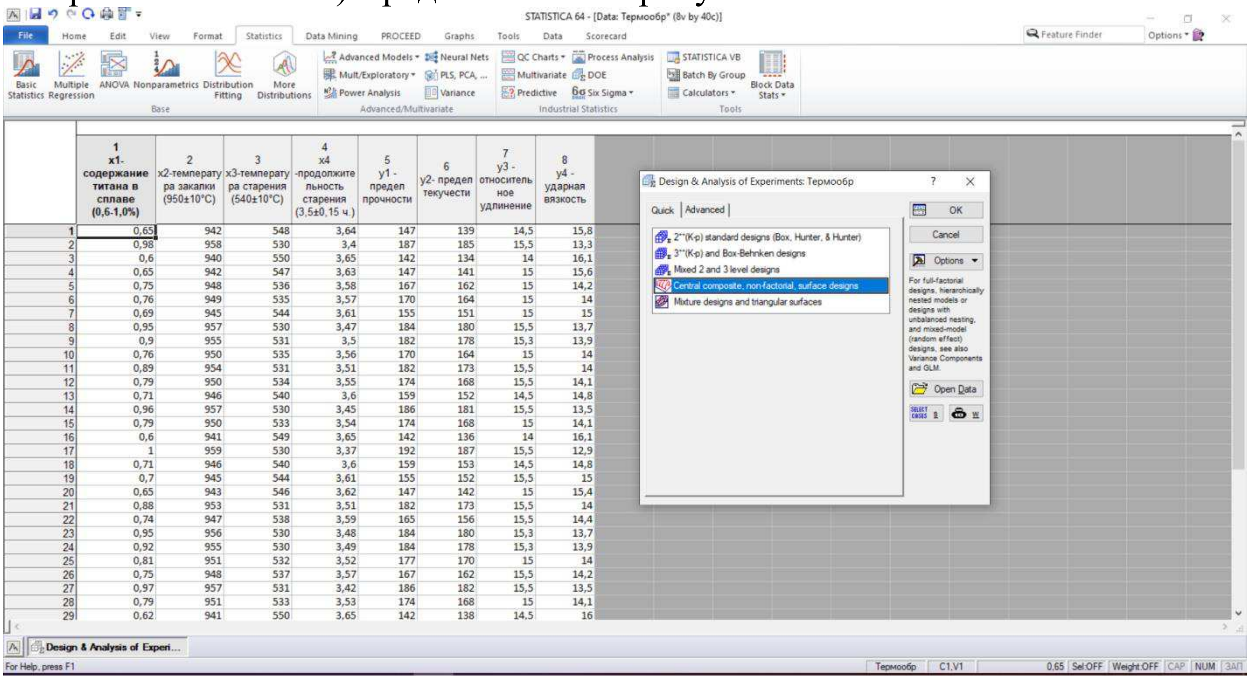


Рисунок 5 – обработка данных при ОЦКП в пакете STATISTICA

> **Ok** > **Design & Analysis of Central Composite** > **Analyze design**> **Variables** > выбрать факторы и отклик

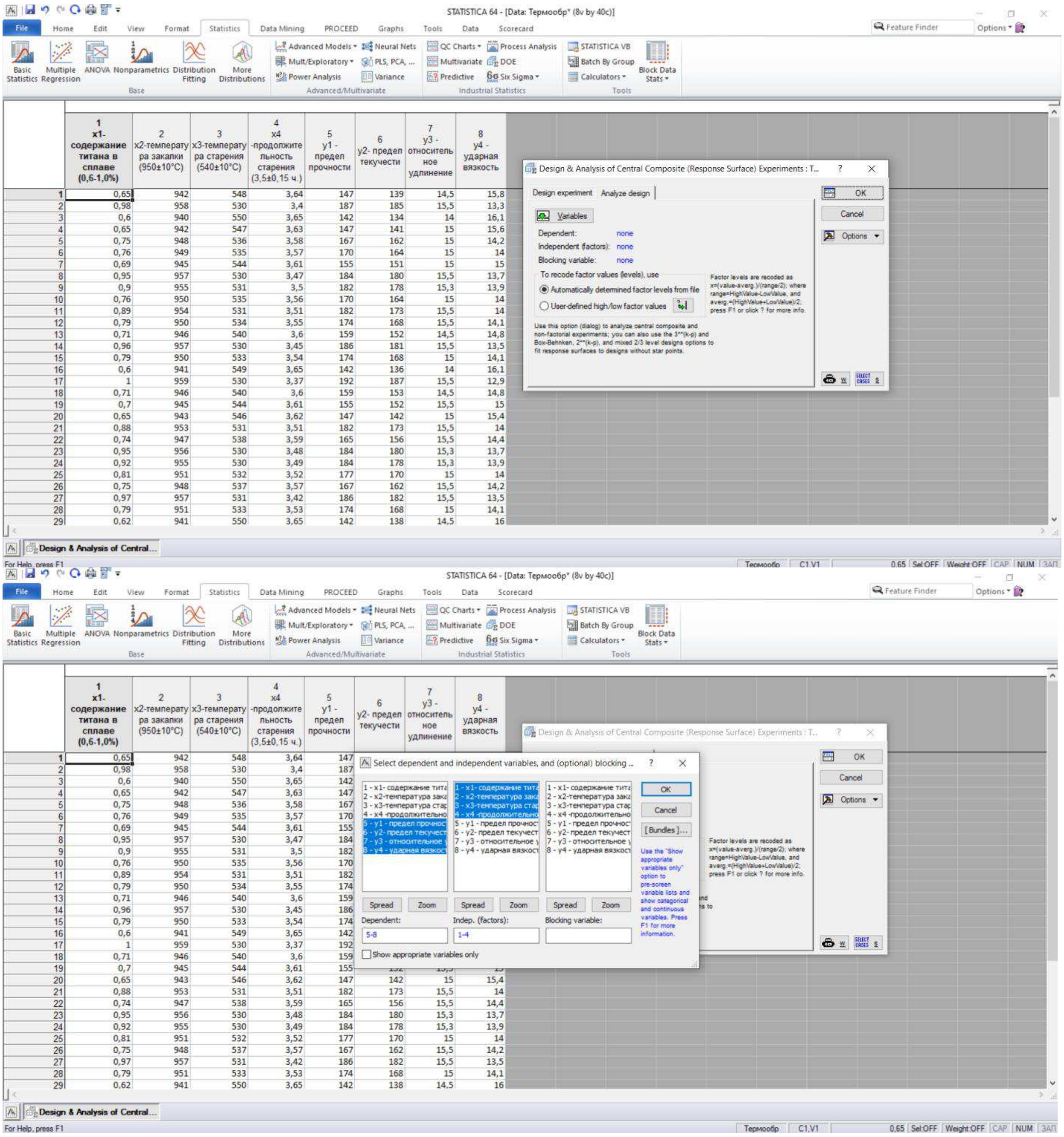


Рисунок 6 – обработка данных в пакете STATISTICA

> Ok > Ok > Analysis of a Central Composite (Response Surface) Experiments: Термообр > Model > Include in model.

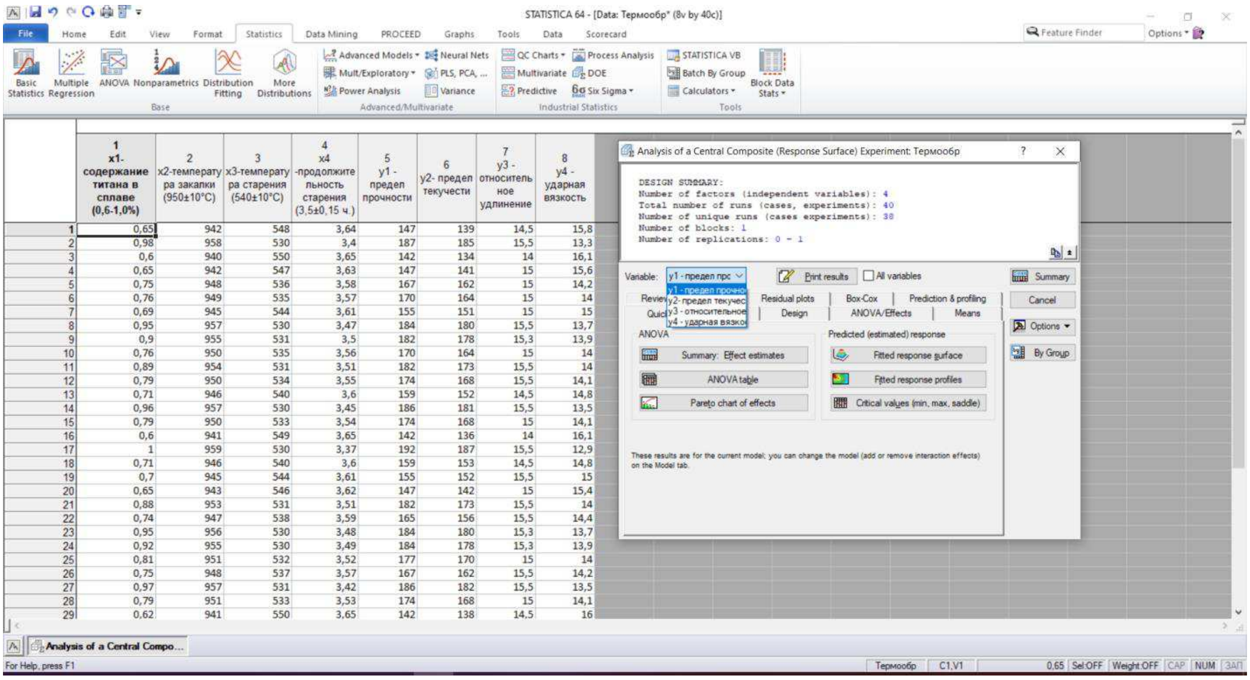


Рисунок 7 – обработка данных в пакете STATISTICA

В поле **Include in model** определяется вид уравнения регрессии. Модель может содержать:

– линейные оценки коэффициентов уравнения регрессии (**Linear main effects only**);

– линейные и квадратичные оценки коэффициентов уравнения регрессии (**Lin./quad. main effects**);

– линейные оценки коэффициентов уравнения регрессии и оценки коэффициентов, отражающие взаимное влияние двух факторов (**Linear main eff.+2-ways**);

– линейные, квадратичные оценки коэффициентов уравнения регрессии и оценки коэффициентов, отражающие взаимное влияние двух факторов (**Lin/quad main eff.+2-ways**).

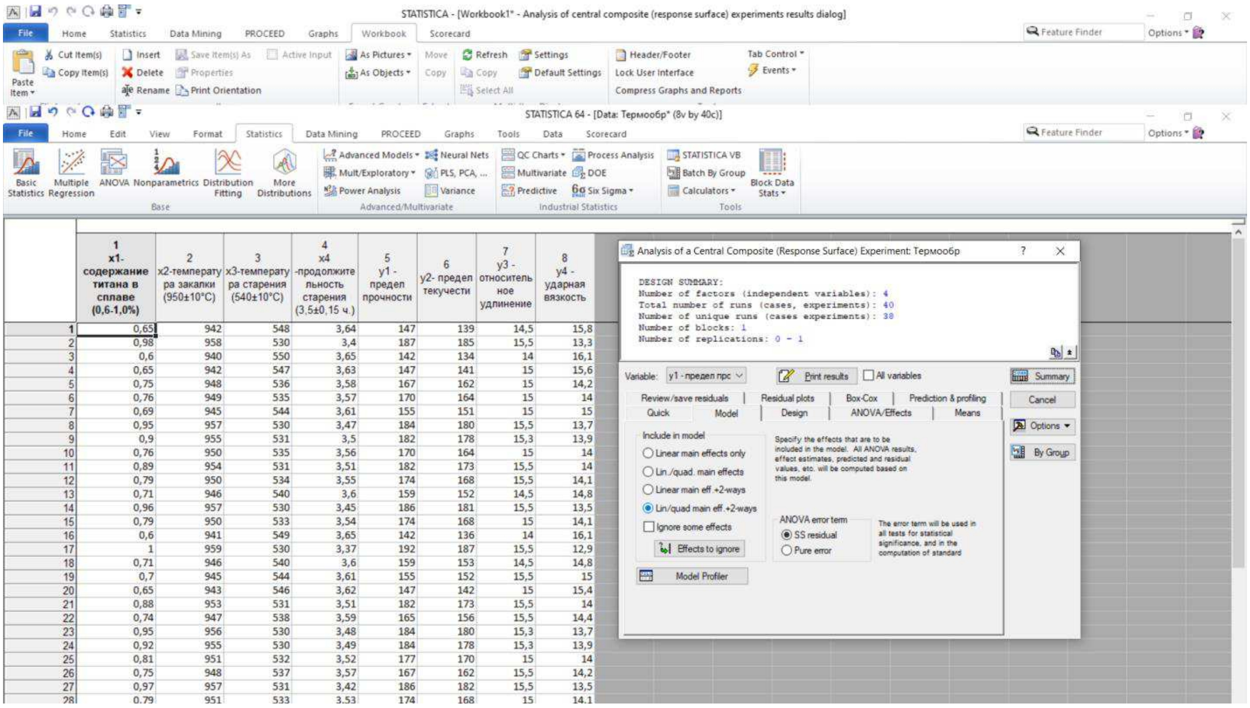


Рисунок 8 – обработка данных в пакете STATISTICA

В поле Include in model выбираем Lin/quad main eff.+2- ways > ANOVA error term > Pure error > ANOVA/Effects > Confidence interval > 95,0 > Alpha (highlighting) > 0,05 > Summary: Effect estimates > Regression coefficients > ANOVA table.

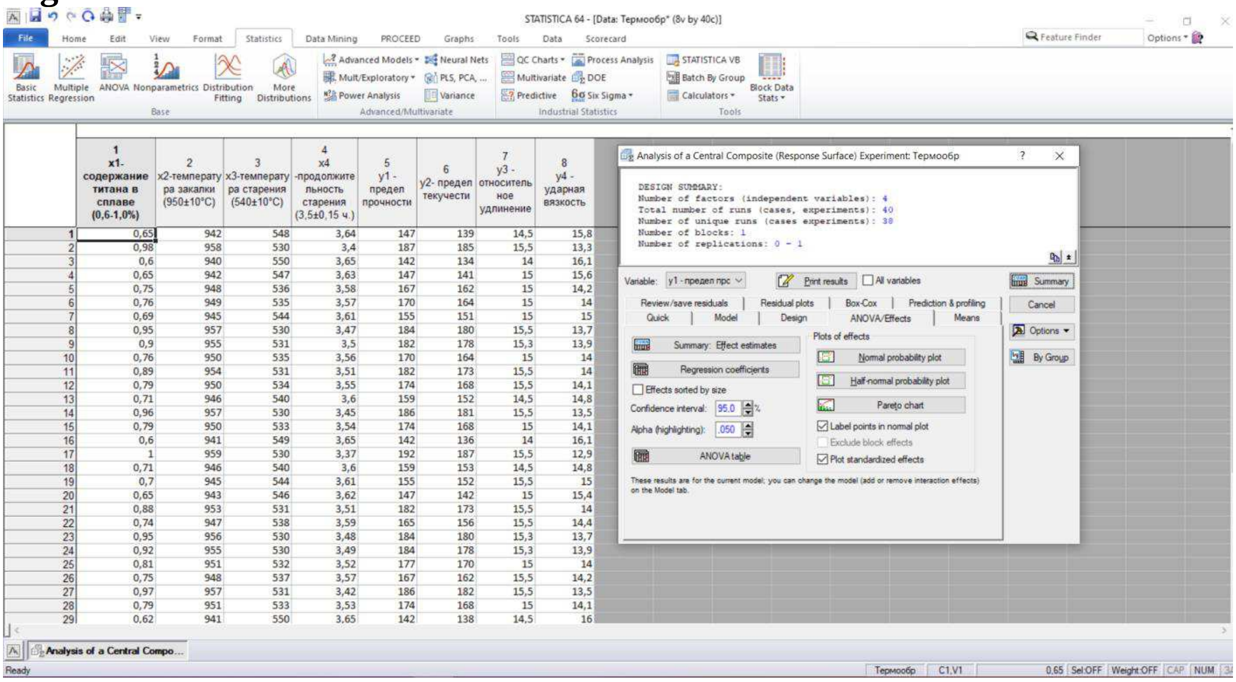
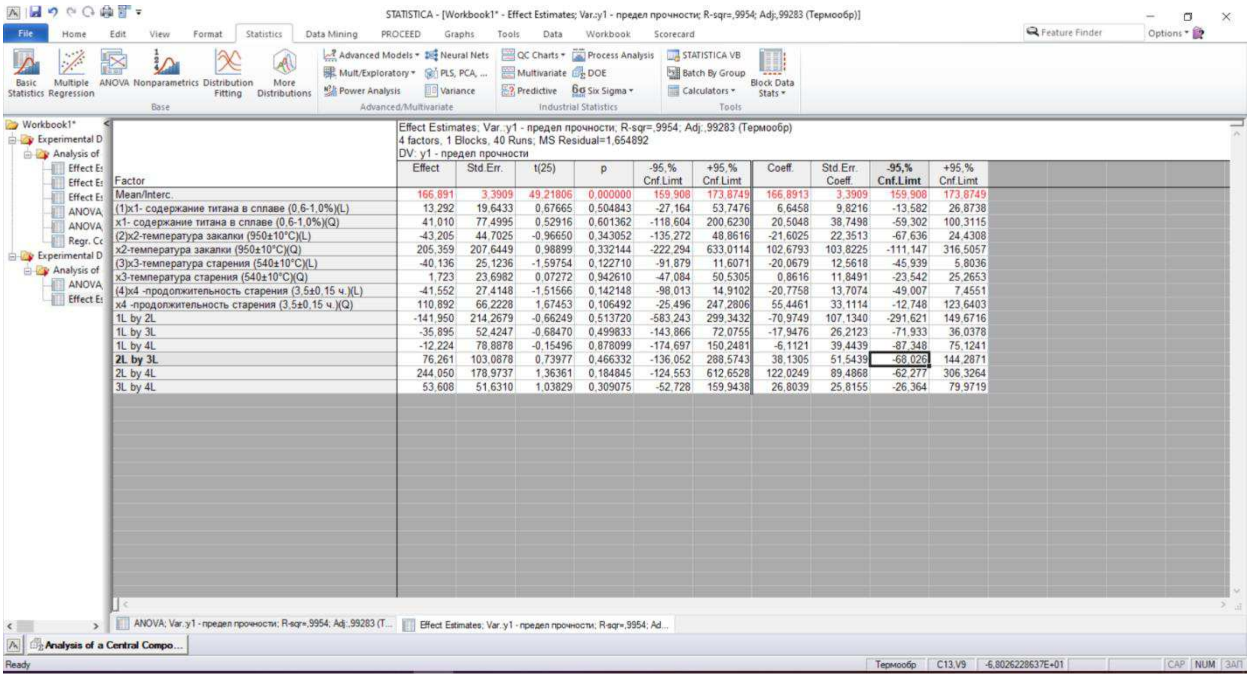


Рисунок 9 – обработка данных в пакете STATISTICA

Результаты представлены на рисунках.

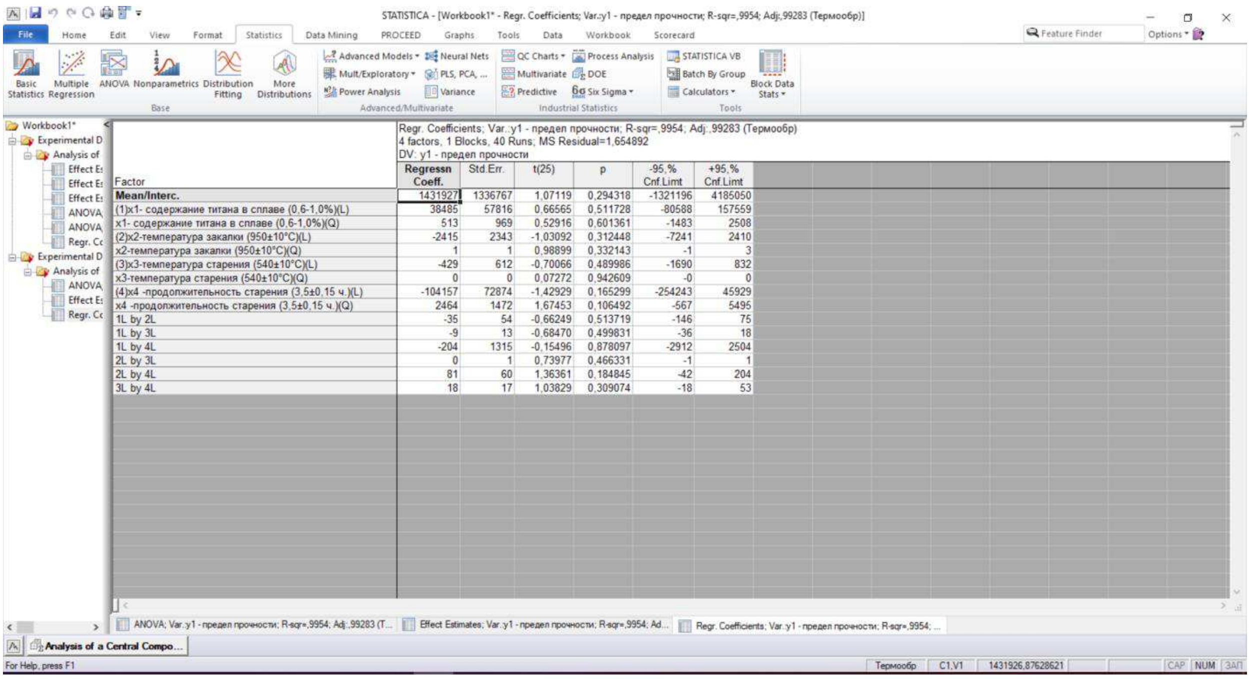


Effect Estimates; Var.:y1 - предел прочности; R-sqr=,9954; Adj:,99283 (Термообр)
4 factors, 1 Blocks, 40 Runs; MS Residual=1,654892
DV: y1 - предел прочности

Factor	Effect	Std.Err.	t(25)	p	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt	Coeff.	Std.Err. Coeff.	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt
Mean/Interc.	166,891	3,3909	49,21806	0,000000	159,908	173,8749	166,8913	3,3909	159,908	173,8749
(1)x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(L)	13,292	19,6433	0,67665	0,504843	-27,164	53,7476	6,6458	9,8216	-13,582	26,8738
x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(Q)	41,010	77,4995	0,52916	0,601362	-118,604	200,6230	20,5048	38,7498	-59,302	100,3115
(2)x2-температура закалки (950±10°C)(L)	-43,205	44,7025	-0,96650	0,343052	-135,272	48,8616	-21,6025	22,3513	-67,636	24,4308
x2-температура закалки (950±10°C)(Q)	205,359	207,6449	0,98899	0,332144	-222,294	633,0114	102,6793	103,8225	-111,147	316,5057
(3)x3-температура старения (540±10°C)(L)	-40,136	25,1236	-1,59754	0,122710	-91,879	11,6071	-20,0679	12,5618	-45,939	5,8036
x3-температура старения (540±10°C)(Q)	1,723	23,6982	0,07272	0,942610	-47,084	50,5305	0,8616	11,8491	-23,542	25,2653
(4)x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(L)	-41,552	27,4148	-1,51566	0,142148	-98,013	14,9102	-20,7758	13,7074	-49,007	7,4551
x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(Q)	110,892	66,2228	1,67453	0,106492	-25,496	247,2806	55,4461	33,1114	-12,748	123,6403
1L by 2L	-141,950	214,2679	-0,66249	0,513720	-583,243	299,3432	-70,9749	107,1340	-291,621	149,6716
1L by 3L	-35,895	52,4247	-0,68470	0,499833	-143,866	72,0755	-17,9476	26,2123	-71,933	36,0378
1L by 4L	-12,224	78,8878	-0,15496	0,878099	-174,697	150,2481	-6,1121	39,4439	-87,348	75,1241
2L by 3L	76,261	103,0878	0,73977	0,466332	-136,052	288,5743	38,1305	51,5439	-68,026	144,2871
2L by 4L	244,050	178,9737	1,36361	0,184845	-124,553	612,6528	122,0249	89,4868	-62,277	306,3264
3L by 4L	53,608	51,6310	1,03829	0,309075	-52,728	159,9438	26,8039	25,8155	-26,364	79,9719

Рисунок 10.1 – Оценки коэффициентов регрессии, базирующиеся на кодированных исходных значениях факторов

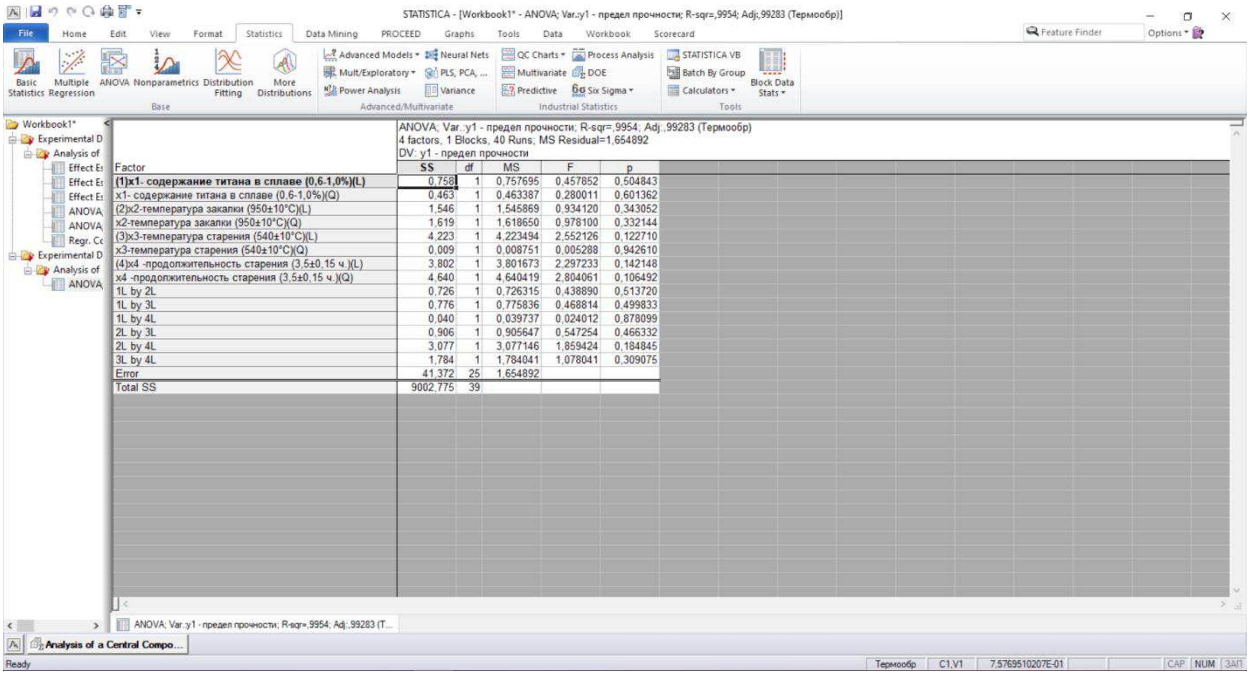
Обозначение (L) говорит о том, что в данной строке приведены оценки, относящиеся к линейной переменной уравнения регрессии. Обозначение (Q) говорит о том, что в данной строке приведены оценки, относящиеся к квадратичной переменной уравнения регрессии. 1L by 2L (1L к 2L) – оценка коэффициента уравнения регрессии, отражающая взаимное влияние двух факторов и т.д.



Regr. Coefficients; Var.:y1 - предел прочности; R-sqr=,9954; Adj:,99283 (Термообр)
4 factors, 1 Blocks, 40 Runs; MS Residual=1,654892
DV: y1 - предел прочности

Factor	Regressn Coeff.	Std.Err.	t(25)	p	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt
Mean/Interc.	1431927	1336767	1,07119	0,294318	-1321196	4185050
(1)x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(L)	38485	57816	0,66565	0,511728	-80588	157559
x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(Q)	513	969	0,52916	0,601361	-1483	2508
(2)x2-температура закалки (950±10°C)(L)	-2415	2343	-1,03092	0,312448	-7241	2410
x2-температура закалки (950±10°C)(Q)	1	1	0,98899	0,332143	-1	3
(3)x3-температура старения (540±10°C)(L)	-429	612	-0,70066	0,489986	-1690	832
x3-температура старения (540±10°C)(Q)	0	0	0,07272	0,942609	-0	0
(4)x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(L)	-104157	72874	-1,42929	0,165299	-254243	45929
x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(Q)	2464	1472	1,67453	0,106492	-567	5495
1L by 2L	-35	54	-0,66249	0,513719	-146	75
1L by 3L	-9	13	-0,68470	0,499831	-36	18
1L by 4L	-204	1315	-0,15496	0,878097	-2912	2504
2L by 3L	0	1	0,73977	0,466331	-1	1
2L by 4L	81	60	1,36361	0,184845	-42	204
3L by 4L	18	17	1,03829	0,309074	-18	53

Рисунок 10.2 – Оценки коэффициентов регрессии, базирующиеся на не кодированных исходных значениях факторов



ANOVA; Var.:y1 - предел прочности; R-sqr=,9954; Adj:,99283 (Термообр)
4 factors, 1 Blocks, 40 Runs; MS Residual=1,654892
DV: y1 - предел прочности

Factor	SS	df	MS	F	p
(1)x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(L)	0,758	1	0,757695	0,457852	0,504843
x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(Q)	0,463	1	0,463387	0,280011	0,601362
(2)x2-температура закалки (950±10°C)(L)	1,546	1	1,545869	0,934120	0,343052
x2-температура закалки (950±10°C)(Q)	1,619	1	1,618650	0,978100	0,332144
(3)x3-температура старения (540±10°C)(L)	4,223	1	4,223494	2,552126	0,122710
x3-температура старения (540±10°C)(Q)	0,009	1	0,008751	0,005288	0,942610
(4)x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(L)	3,802	1	3,801673	2,297233	0,142148
x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(Q)	4,640	1	4,640419	2,804061	0,106492
1L by 2L	0,726	1	0,726315	0,438890	0,513720
1L by 3L	0,776	1	0,775836	0,468814	0,499833
1L by 4L	0,040	1	0,039737	0,024012	0,878099
2L by 3L	0,906	1	0,905647	0,547254	0,466332
2L by 4L	3,077	1	3,077146	1,859424	0,184845
3L by 4L	1,784	1	1,784041	1,078041	0,309075
Error	41,372	25	1,654892		
Total SS	9002,775	39			

Рисунок 10.3– Проверка адекватности модели

Видно, что все факторы значимы, а полученная модель адекватна, так как расчетное значение критерия Фишера $F_{рас}$=2,8 меньше табличного критического значения $F_{кр}$=5,73, взятого для степеней свободы f_1=4, f_2=34.

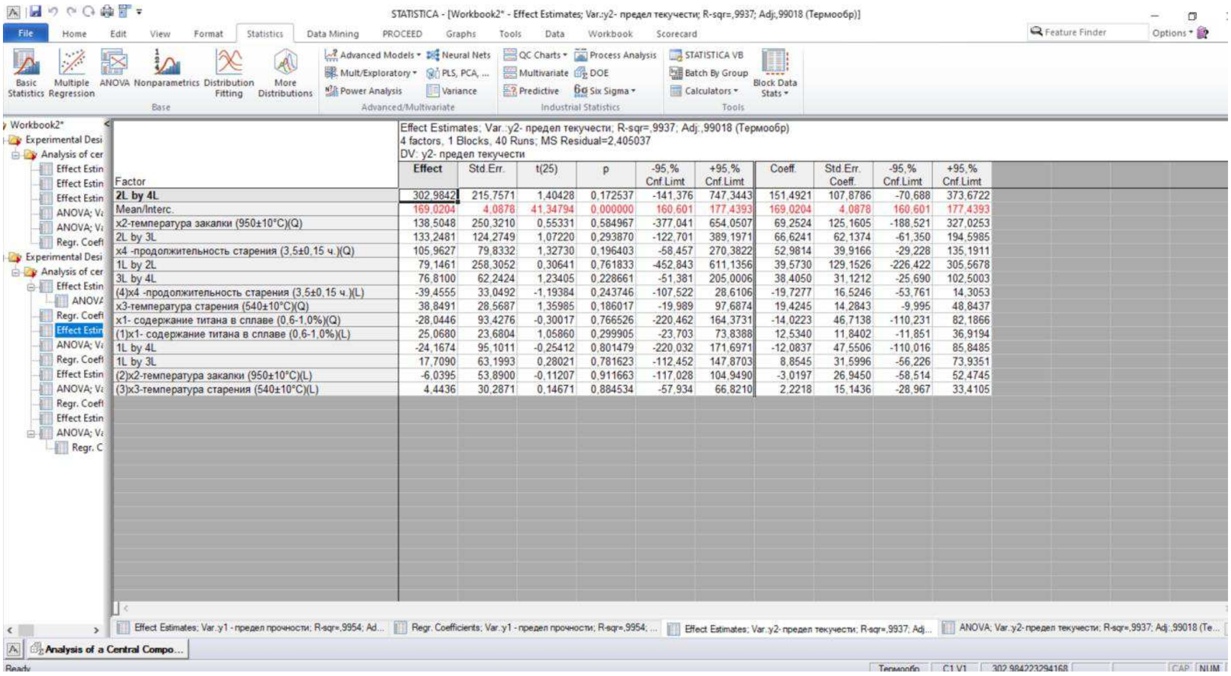
Уравнение регрессии для кодированных значений уровней факторов имеет вид:

$$\hat{y}_1 = 166,891 + 13,292x_1 + 41,010x_1^2 - 43,205x_2 + 205,359x_2^2 - 40,136x_3 +$$
$$+1,723x_3^2 - 41,552x_4 + 110,892x_4^2 - 141,950x_1x_2 - 35,895x_1x_3 - 12,224x_1x_4 +$$
$$+76,261x_2x_3 + 244,050x_2x_4 + 53,608x_3x_4.$$

Уравнение регрессии для не кодированных значений уровней факторов имеет вид:

$$\breve{y}_1 = 1431927 + 38485x_1 + 513x_1^2 - 2415x_2 + 1x_2^2 - 429x_3 +$$
$$+0x_3^2 - 104157x_4 + 2464x_4^2 - 35x_1x_2 - 9x_1x_3 - 204x_1x_4 +$$
$$+0x_2x_3 + 81x_2x_4 + 18x_3x_4.$$

Перейдём к описанию y_2.

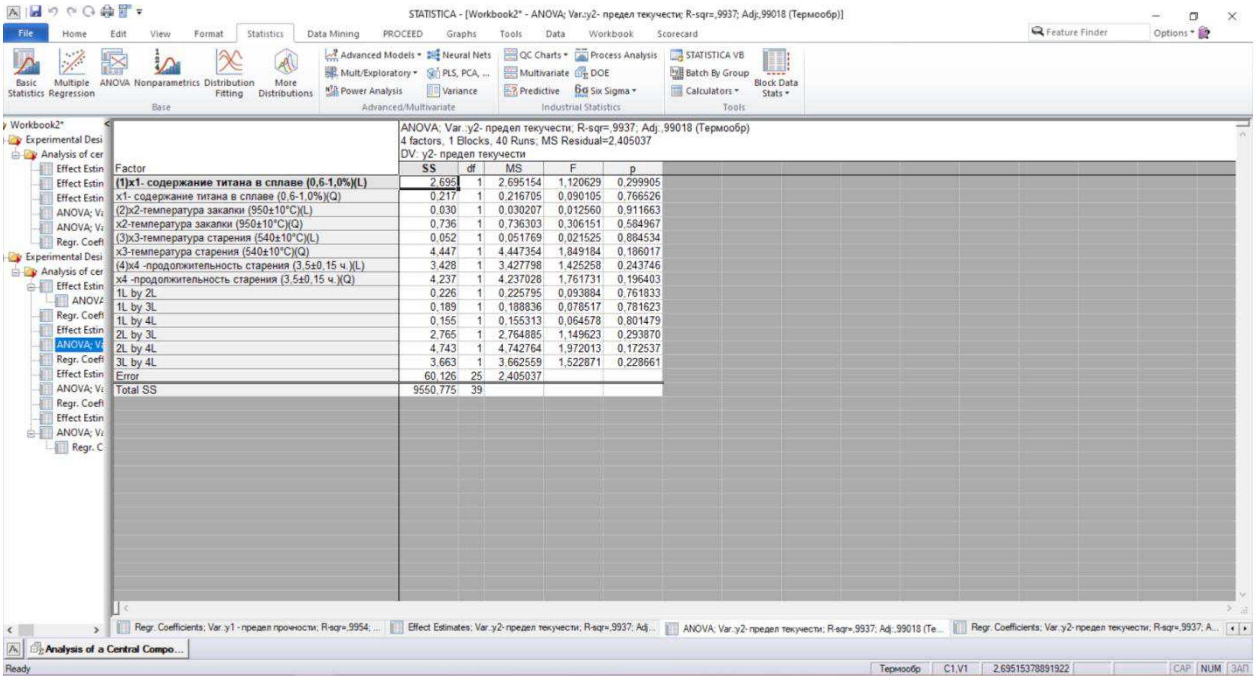


Effect Estimates; Var.:y2- предел текучести; R-sqr=,9937; Adj:,99018 (Термообр)
4 factors, 1 Blocks, 40 Runs; MS Residual=2,405037
DV: y2- предел текучести

Factor	Effect	Std.Err.	t(25)	p	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt	Coeff.	Std.Err. Coeff.	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt
2L by 4L	302,9842	215,7571	1,40428	0,172537	-141,376	747,3443	151,4921	107,8786	-70,688	373,6722
Mean/Interc.	169,0204	4,0878	41,34794	0,000000	160,601	177,4393	169,0204	4,0878	160,601	177,4393
x2-температура закалки (950±10°C)(Q)	138,5048	250,3210	0,55331	0,584967	-377,041	654,0507	69,2524	125,1605	-188,521	327,0253
2L by 3L	133,2481	124,2749	1,07220	0,293870	-122,701	389,1971	66,6241	62,1374	-61,350	194,5985
x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(Q)	105,9627	79,8332	1,32730	0,196403	-58,457	270,3822	52,9814	39,9166	-29,228	135,1911
1L by 2L	79,1461	258,3052	0,30641	0,761833	-452,843	611,1356	39,5730	129,1526	-226,422	305,5678
3L by 4L	76,8100	62,2424	1,23405	0,228661	-51,381	205,0006	38,4050	31,1212	-25,690	102,5003
(4)x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(L)	-39,4555	33,0492	-1,19384	0,243746	-107,522	28,6106	-19,7277	16,5246	-53,761	14,3053
x3-температура старения (540±10°C)(Q)	38,8491	28,5687	1,35985	0,186017	-19,989	97,6874	19,4245	14,2843	-9,995	48,8437
x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(Q)	-28,0446	93,4276	-0,30017	0,766526	-220,462	164,3731	-14,0223	46,7138	-110,231	82,1866
(1)x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(L)	25,0680	23,6804	1,05860	0,299905	-23,703	73,8388	12,5340	11,8402	-11,851	36,9194
1L by 4L	-24,1674	95,1011	-0,25412	0,801479	-220,032	171,6971	-12,0837	47,5506	-110,016	85,8485
1L by 3L	17,7090	63,1993	0,28021	0,781623	-112,452	147,8703	8,8545	31,5996	-56,226	73,9351
(2)x2-температура закалки (950±10°C)(L)	-6,0395	53,8900	-0,11207	0,911663	-117,028	104,9490	-3,0197	26,9450	-58,514	52,4745
(3)x3-температура старения (540±10°C)(L)	4,4436	30,2871	0,14671	0,884534	-57,934	66,8210	2,2218	15,1436	-28,967	33,4105

Рисунок 11.1– Оценки коэффициентов регрессии, базирующиеся на кодированных исходных значениях факторов

$$\widehat{y_2} = 302{,}9842 + 169{,}0204x_1 + 138{,}5048x_1^2 + 133{,}2481x_2 + 105{,}9627x_2^2 + 79{,}1461x_3 + 76{,}8100x_3^2 - 39{,}4555x_4 + 38{,}8491x_4^2 - 28{,}0446x_1x_2 + 25{,}0680x_1x_3 - 24{,}1674x_1x_4 + 17{,}7090x_2x_3 - 6{,}0395x_2x_4 + 4{,}4436x_3x_4$$



ANOVA; Var.:y2- предел текучести; R-sqr=,9937; Adj:,99018 (Термообр)
4 factors, 1 Blocks, 40 Runs; MS Residual=2,405037
DV: y2- предел текучести

Factor	SS	df	MS	F	p
(1)x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(L)	2,695	1	2,695154	1,120629	0,299905
x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(Q)	0,217	1	0,216705	0,090105	0,766526
(2)x2-температура закалки (950±10°C)(L)	0,030	1	0,030207	0,012560	0,911663
x2-температура закалки (950±10°C)(Q)	0,736	1	0,736303	0,306151	0,584967
(3)x3-температура старения (540±10°C)(L)	0,052	1	0,051769	0,021525	0,884534
x3-температура старения (540±10°C)(Q)	4,447	1	4,447354	1,849184	0,186017
(4)x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(L)	3,428	1	3,427798	1,425258	0,243746
x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(Q)	4,237	1	4,237028	1,761731	0,196403
1L by 2L	0,226	1	0,225795	0,093884	0,761833
1L by 3L	0,189	1	0,188836	0,078517	0,781623
1L by 4L	0,155	1	0,155313	0,064578	0,801479
2L by 3L	2,765	1	2,764885	1,149623	0,293870
2L by 4L	4,743	1	4,742764	1,972013	0,172537
3L by 4L	3,663	1	3,662559	1,522871	0,228661
Error	60,126	25	2,405037		
Total SS	9550,775	39			

Рисунок 12.2– Оценки коэффициентов регрессии, базирующиеся на не кодированных исходных значениях факторов

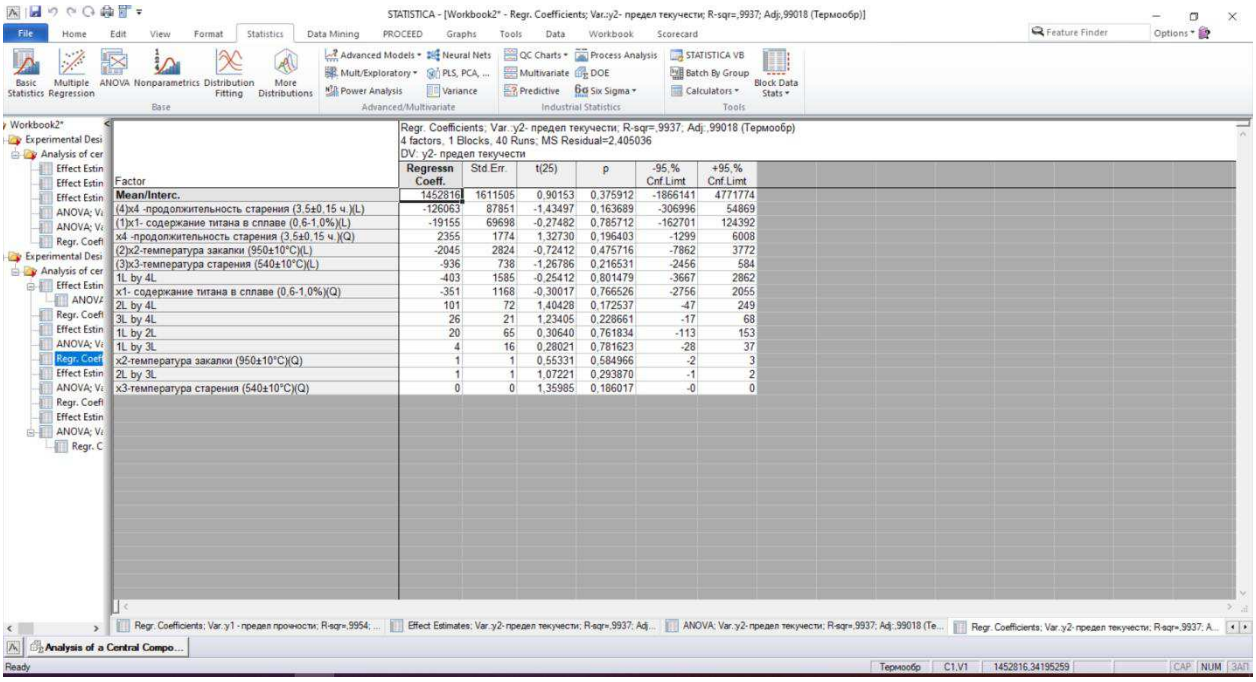


Рисунок 12.3 – Проверка адекватности модели

$$\widetilde{y_2} = 1452816 - 126063x_1 - 19155x_1^2 + 2355x_2 - 2045x_2^2 - 936x_3 - 403x_3^2 - 351x_4 + 101x_4^2 + 26x_1x_2 + 20x_1x_3 + 4x_1x_4 + 1x_2x_3 + 1x_2x_4 + 0x_3x_4$$

Аналогично опишем y_3 и y_4.

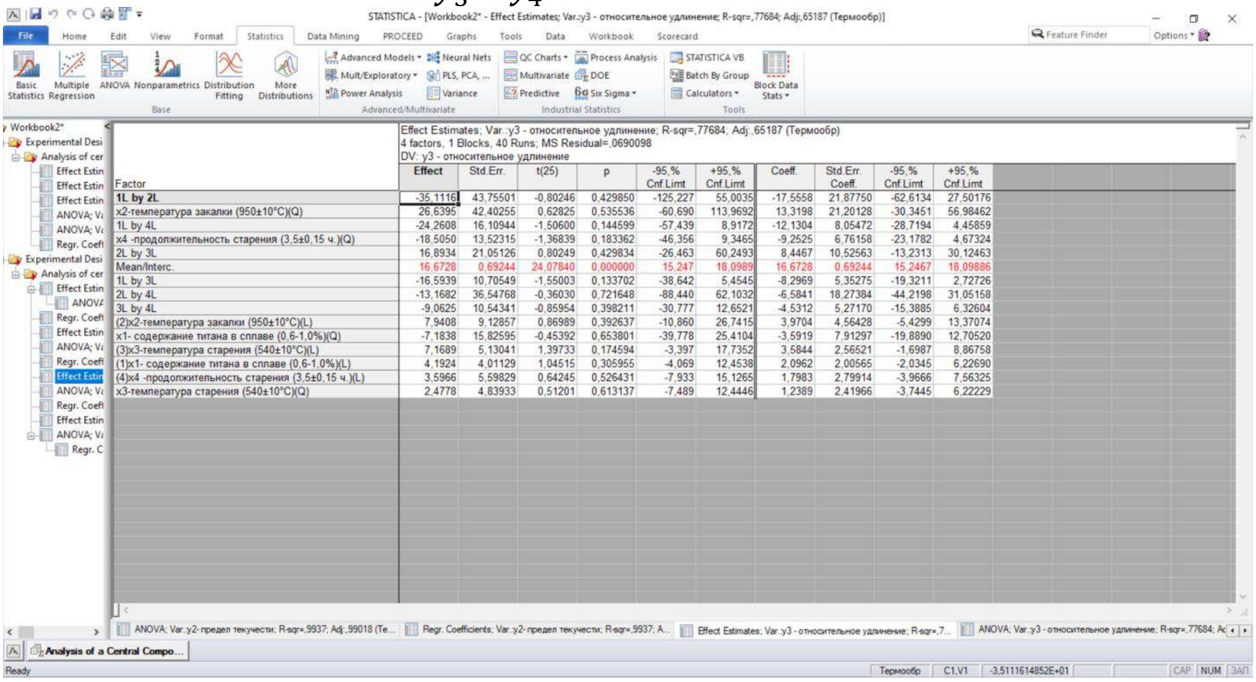
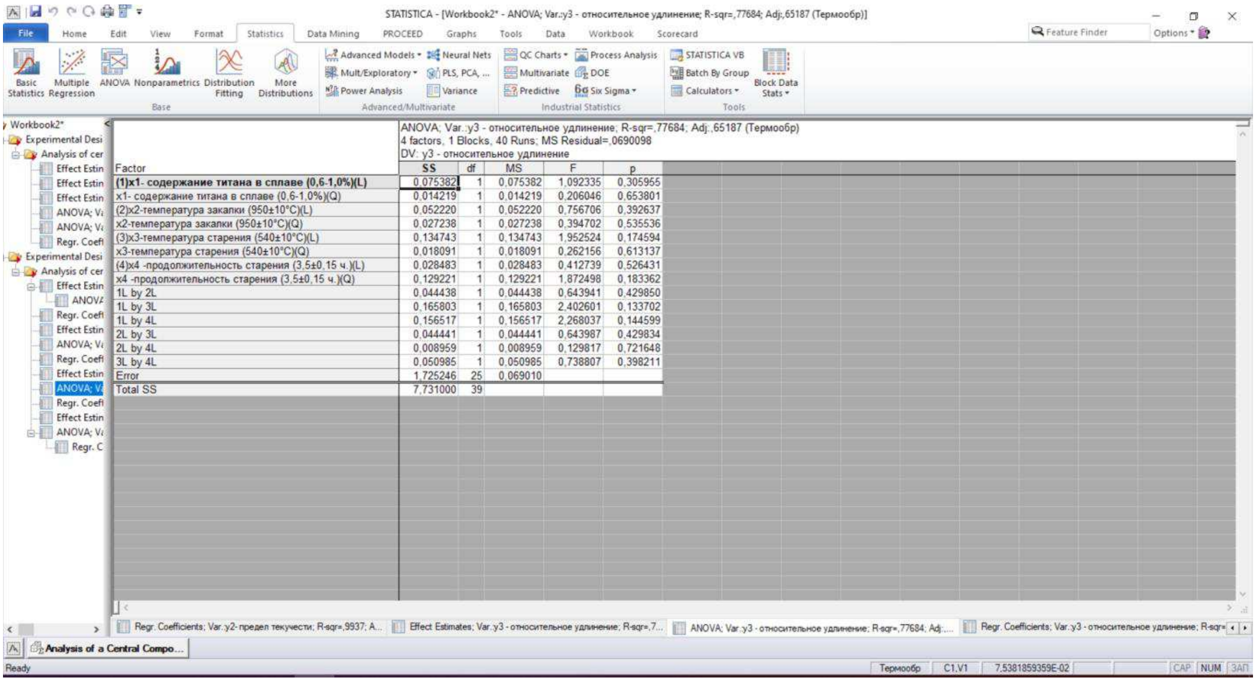


Рисунок 13.1– Оценки коэффициентов регрессии, базирующиеся на кодированных исходных значениях факторов

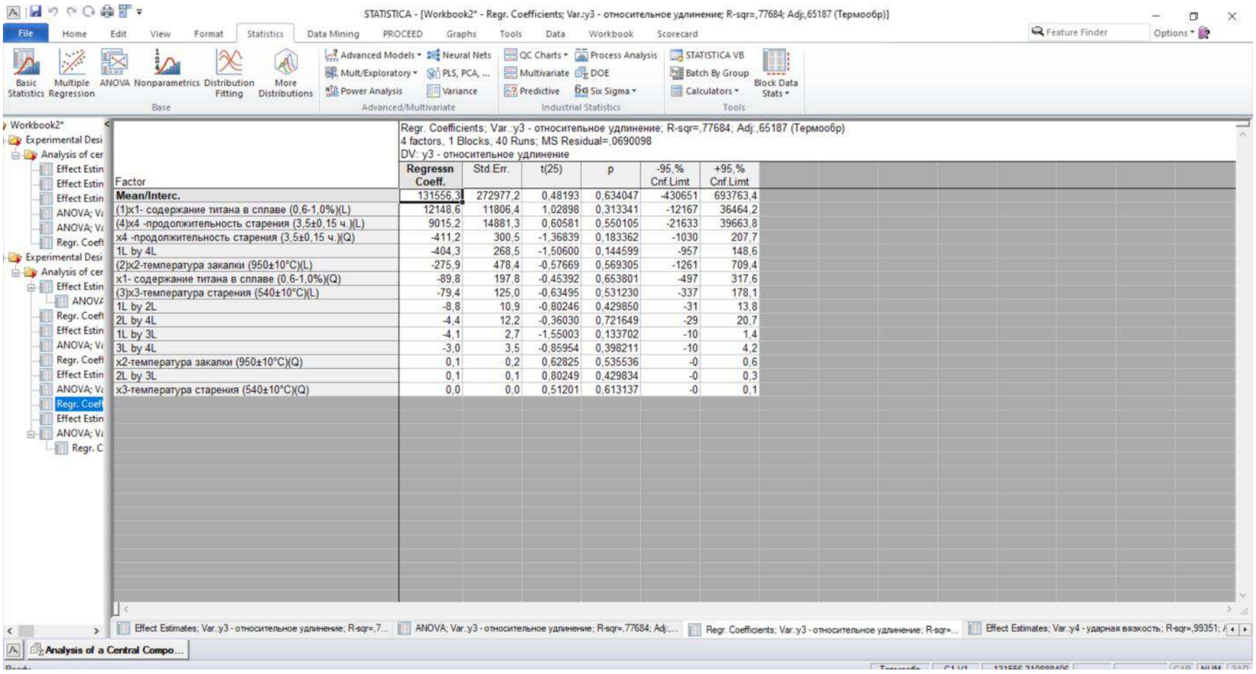
$$\widehat{y_3} = -35{,}1116 + 26{,}6395x_1 - 24{,}2608x_1^2 - 18{,}5050x_2 + 16{,}8934x_2^2 + 16{,}6728x_3 - 16{,}5939x_3^2 - 13{,}1682x_4 - 9{,}0625x_4^2 + 7{,}9408x_1x_2 - 7{,}1838x_1x_3 + 7{,}1689x_1x_4 + 4{,}1924x_2x_3 + 3{,}5966x_2x_4 + 2{,}4778x_3x_4$$



ANOVA; Var.:y3 - относительное удлинение; R-sqr=,77684; Adj:,65187 (Термообр)
4 factors, 1 Blocks, 40 Runs; MS Residual=,0690098
DV: y3 - относительное удлинение

Factor	SS	df	MS	F	p
(1)x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(L)	0,075382	1	0,075382	1,092335	0,305955
x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(Q)	0,014219	1	0,014219	0,206046	0,653801
(2)x2-температура закалки (950±10°C)(L)	0,052220	1	0,052220	0,756706	0,392637
x2-температура закалки (950±10°C)(Q)	0,027238	1	0,027238	0,394702	0,535536
(3)x3-температура старения (540±10°C)(L)	0,134743	1	0,134743	1,952524	0,174594
x3-температура старения (540±10°C)(Q)	0,018091	1	0,018091	0,262156	0,613137
(4)x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(L)	0,028483	1	0,028483	0,412739	0,526431
x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(Q)	0,129221	1	0,129221	1,872498	0,183362
1L by 2L	0,044438	1	0,044438	0,643941	0,429850
1L by 3L	0,165803	1	0,165803	2,402601	0,133702
1L by 4L	0,156517	1	0,156517	2,268037	0,144599
2L by 3L	0,044441	1	0,044441	0,643987	0,429834
2L by 4L	0,008959	1	0,008959	0,129817	0,721648
3L by 4L	0,050985	1	0,050985	0,738807	0,398211
Error	1,725246	25	0,069010		
Total SS	7,731000	39			

Рисунок 13.2 – Оценки коэффициентов регрессии, базирующиеся на не кодированных исходных значениях факторов

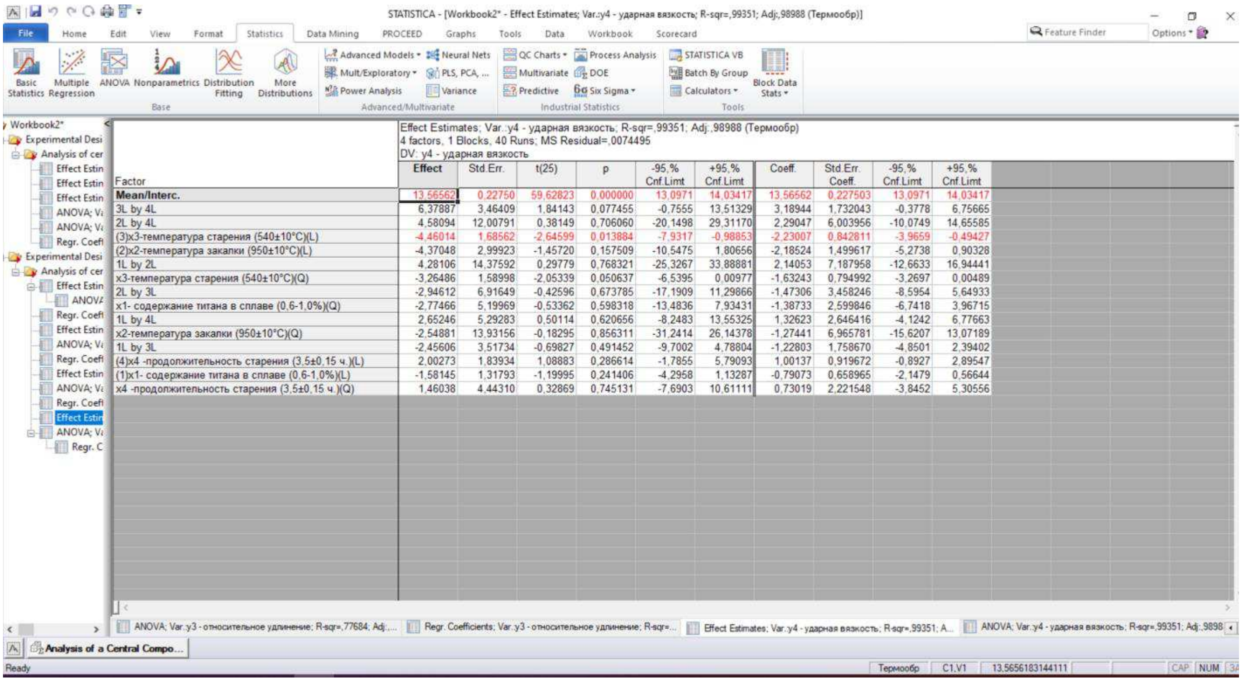


Regr. Coefficients; Var.:y3 - относительное удлинение; R-sqr=,77684; Adj:,65187 (Термообр)
4 factors, 1 Blocks, 40 Runs; MS Residual=,0690098
DV: y3 - относительное удлинение

Factor	Regressn Coeff.	Std.Err.	t(25)	p	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt
Mean/Interc.	131556,3	272977,2	0,48193	0,634047	-430651	693763,4
(1)x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(L)	12148,6	11806,4	1,02898	0,313341	-12167	36464,2
(4)x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(L)	9015,2	14881,3	0,60581	0,550105	-21633	39663,8
x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(Q)	-411,2	300,5	-1,36839	0,183362	-1030	207,7
1L by 4L	-404,3	268,5	-1,50600	0,144599	-957	148,6
(2)x2-температура закалки (950±10°C)(L)	-275,9	478,4	-0,57669	0,569305	-1261	709,4
x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(Q)	-89,8	197,8	-0,45392	0,653801	-497	317,6
(3)x3-температура старения (540±10°C)(L)	-79,4	125,0	-0,63495	0,531230	-337	178,1
1L by 2L	-8,8	10,9	-0,80246	0,429850	-31	13,8
2L by 4L	-4,4	12,2	-0,36030	0,721649	-29	20,7
1L by 3L	-4,1	2,7	-1,55003	0,133702	-10	1,4
3L by 4L	-3,0	3,5	-0,85954	0,398211	-10	4,2
x2-температура закалки (950±10°C)(Q)	0,1	0,2	0,62825	0,535536	-0	0,6
2L by 3L	0,1	0,1	0,80249	0,429834	-0	0,3
x3-температура старения (540±10°C)(Q)	0,0	0,0	0,51201	0,613137	-0	0,1

Рисунок 13.3 – Проверка адекватности модели

$$\widetilde{y_3} = 131556{,}3 + 12148{,}6x_1 + 9015{,}2x_1^2 - 411{,}2x_2 - 404{,}3x_2^2 - 275{,}9x_3 - 89{,}8x_3^2 - 79{,}4x_4 - 8{,}8x_4^2 - 4{,}4x_1x_2 - 4{,}1x_1x_3 - 3{,}0x_1x_4 + 0{,}1x_2x_3 + 0{,}1x_2x_4 + 0{,}0x_3x_4$$

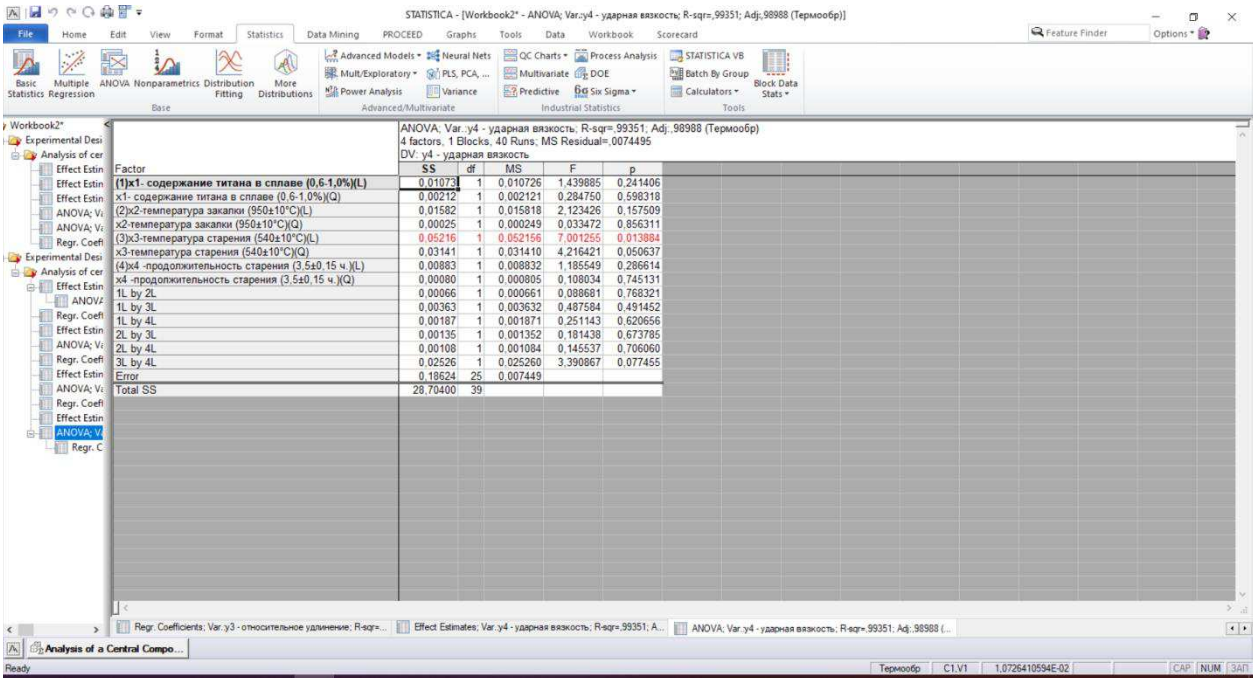


Effect Estimates; Var.:y4 - ударная вязкость; R-sqr=,99351; Adj:,98988 (Термообр)
4 factors, 1 Blocks, 40 Runs; MS Residual=,0074495
DV: y4 - ударная вязкость

Factor	Effect	Std.Err.	t(25)	p	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt	Coeff.	Std.Err. Coeff.	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt
Mean/Interc.	13,56562	0,22750	59,62823	0,000000	13,0971	14,03417	13,56562	0,227503	13,0971	14,03417
3L by 4L	6,37887	3,46409	1,84143	0,077455	-0,7555	13,51329	3,18944	1,732043	-0,3778	6,75665
2L by 4L	4,58094	12,00791	0,38149	0,706060	-20,1498	29,31170	2,29047	6,003956	-10,0749	14,65585
(3)x3-температура старения (540±10°C)(L)	-4,46014	1,68562	-2,64599	0,013884	-7,9317	-0,98853	-2,23007	0,842811	-3,9659	-0,49427
(2)x2-температура закалки (950±10°C)(L)	-4,37048	2,99923	-1,45720	0,157509	-10,5475	1,80656	-2,18524	1,499617	-5,2738	0,90328
1L by 2L	4,28106	14,37592	0,29779	0,768321	-25,3267	33,88881	2,14053	7,187958	-12,6633	16,94441
x3-температура старения (540±10°C)(Q)	-3,26486	1,58998	-2,05339	0,050637	-6,5395	0,00977	-1,63243	0,794992	-3,2697	0,00489
2L by 3L	-2,94612	6,91649	-0,42596	0,673785	-17,1909	11,29866	-1,47306	3,458246	-8,5954	5,64933
x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(Q)	-2,77466	5,19969	-0,53362	0,598318	-13,4836	7,93431	-1,38733	2,599846	-6,7418	3,96715
1L by 4L	2,65246	5,29283	0,50114	0,620656	-8,2483	13,55325	1,32623	2,646416	-4,1242	6,77663
x2-температура закалки (950±10°C)(Q)	-2,54881	13,93156	-0,18295	0,856311	-31,2414	26,14378	-1,27441	6,965781	-15,6207	13,07189
1L by 3L	-2,45606	3,51734	-0,69827	0,491452	-9,7002	4,78804	-1,22803	1,758670	-4,8501	2,39402
(4)x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(L)	2,00273	1,83934	1,08883	0,286614	-1,7855	5,79093	1,00137	0,919672	-0,8927	2,89547
(1)x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(L)	-1,58145	1,31793	-1,19995	0,241406	-4,2958	1,13287	-0,79073	0,658965	-2,1479	0,56644
x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(Q)	1,46038	4,44310	0,32869	0,745131	-7,6903	10,61111	0,73019	2,221548	-3,8452	5,30556

Рисунок 14.1– Оценки коэффициентов регрессии, базирующиеся на кодированных исходных значениях факторов

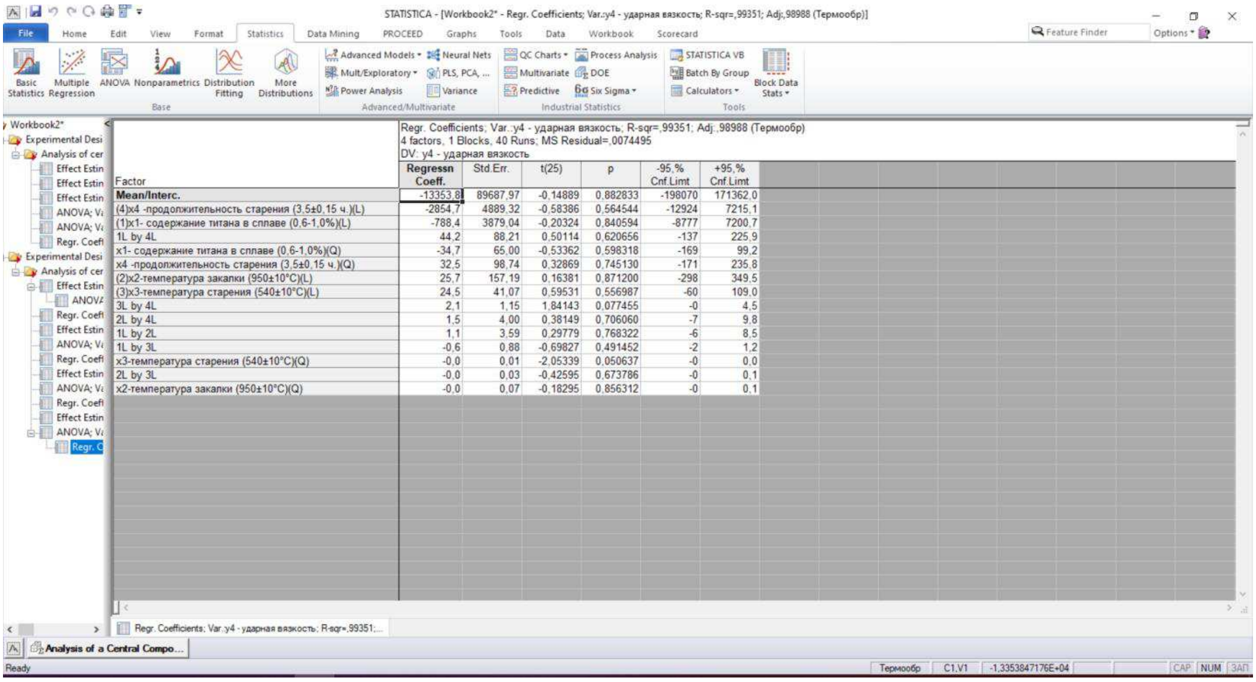
$$\widehat{y_4} = 13,56562 + 6,37887x_1 + 4,58094x_1^2 - 4,46014x_2 - 4,37048x_2^2 + 4,28106x_3 - 3,26486x_3^2 - 2,94612x_4 - 277466x_4^2 + 2,65246x_1x_2 - 2,54881x_1x_3 - 2,45606x_1x_4 + 2,00273x_2x_3 - 1,58145x_2x_4 + 1,46038x_3x_4$$



ANOVA; Var.:y4 - ударная вязкость; R-sqr=,99351; Adj:,98988 (Термообр)
4 factors, 1 Blocks, 40 Runs; MS Residual=,0074495
DV: y4 - ударная вязкость

Factor	SS	df	MS	F	p
(1)x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(L)	0,01073	1	0,010726	1,439885	0,241406
x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(Q)	0,00212	1	0,002121	0,284750	0,598318
(2)x2-температура закалки (950±10°C)(L)	0,01582	1	0,015818	2,123426	0,157509
x2-температура закалки (950±10°C)(Q)	0,00025	1	0,000249	0,033472	0,856311
(3)x3-температура старения (540±10°C)(L)	0,05216	1	0,052156	7,001255	0,013884
x3-температура старения (540±10°C)(Q)	0,03141	1	0,031410	4,216421	0,050637
(4)x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(L)	0,00883	1	0,008832	1,185549	0,286614
x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(Q)	0,00080	1	0,000805	0,108034	0,745131
1L by 2L	0,00066	1	0,000661	0,088681	0,768321
1L by 3L	0,00363	1	0,003632	0,487584	0,491452
1L by 4L	0,00187	1	0,001871	0,251143	0,620656
2L by 3L	0,00135	1	0,001352	0,181438	0,673785
2L by 4L	0,00108	1	0,001084	0,145537	0,706060
3L by 4L	0,02526	1	0,025260	3,390867	0,077455
Error	0,18624	25	0,007449		
Total SS	28,70400	39			

Рисунок 14.2– Оценки коэффициентов регрессии, базирующиеся на не кодированных исходных значениях факторов



Regr. Coefficients; Var.:y4 - ударная вязкость; R-sqr=,99351; Adj:,98988 (Термообр)
4 factors, 1 Blocks, 40 Runs; MS Residual=,0074495
DV: y4 - ударная вязкость

Factor	Regressn Coeff.	Std.Err.	t(25)	p	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt
Mean/Interc.	-13353,8	89687,97	-0,14889	0,882833	-198070	171362,0
(4)x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(L)	-2854,7	4889,32	-0,58386	0,564544	-12924	7215,1
(1)x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(L)	-788,4	3879,04	-0,20324	0,840594	-8777	7200,7
1L by 4L	44,2	88,21	0,50114	0,620656	-137	225,9
x1- содержание титана в сплаве (0,6-1,0%)(Q)	-34,7	65,00	-0,53362	0,598318	-169	99,2
x4 -продолжительность старения (3,5±0,15 ч.)(Q)	32,5	98,74	0,32869	0,745130	-171	235,8
(2)x2-температура закалки (950±10°C)(L)	25,7	157,19	0,16381	0,871200	-298	349,5
(3)x3-температура старения (540±10°C)(L)	24,5	41,07	0,59531	0,556987	-60	109,0
3L by 4L	2,1	1,15	1,84143	0,077455	-0	4,5
2L by 4L	1,5	4,00	0,38149	0,706060	-7	9,8
1L by 2L	1,1	3,59	0,29779	0,768322	-6	8,5
1L by 3L	-0,6	0,88	-0,69827	0,491452	-2	1,2
x3-температура старения (540±10°C)(Q)	-0,0	0,01	-2,05339	0,050637	-0	0,0
2L by 3L	-0,0	0,03	-0,42595	0,673786	-0	0,1
x2-температура закалки (950±10°C)(Q)	-0,0	0,07	-0,18295	0,856312	-0	0,1

Рисунок 14.3 – Проверка адекватности модели

$$\breve{y}_4 = -13353{,}8 - 2854{,}7x_1 - 788{,}4x_1^2 + 44{,}2x_2 - 34{,}7x_2^2 + 32{,}5x_3 + 25{,}7x_3^2 + 24{,}5x_4 + 2{,}1x_4^2 + 1{,}5x_1x_2 + 1{,}1x_1x_3 - 0{,}6x_1x_4 - 0{,}0x_2x_3 - 0{,}0x_2x_4 - 0{,}0x_3x_4$$

Таким образом, в ходе исследования при использовании пакета STATISTICA построены эмпирические модели второго порядка, содержащие первые и вторые степени факторов и их взаимодействия для каждой функции отклика.

Y1=$1431927 + 38485x_1 + 513x_1^2 - 2415x_2 + 1x_2^2 - 429x_3 + 0x_3^2 - 104157x_4 + 2464x_4^2 - 35x_1x_2 - 9x_1x_3 - 204x_1x_4 + 0x_2x_3 + 81x_2x_4 + 18x_3x_4$

Y2=$1452816 - 126063x_1 - 19155x_1^2 + 2355x_2 - 2045x_2^2 - 936x_3 - 403x_3^2 - 351x_4 + 101x_4^2 + 26x_1x_2 + 20x_1x_3 + 4x_1x_4 + 1x_2x_3 + 1x_2x_4 + 0x_3x_4$

Y3=$131556{,}3 + 12148{,}6x_1 + 9015{,}2x_1^2 - 411{,}2x_2 - 404{,}3x_2^2 - 275{,}9x_3 - 89{,}8x_3^2 - 79{,}4x_4 - 8{,}8x_4^2 - 4{,}4x_1x_2 - 4{,}1x_1x_3 - 3{,}0x_1x_4 + 0{,}1x_2x_3 + 0{,}1x_2x_4 + 0{,}0x_3x_4$

Y4=$-13353{,}8 - 2854{,}7x_1 - 788{,}4x_1^2 + 44{,}2x_2 - 34{,}7x_2^2 + 32{,}5x_3 + 25{,}7x_3^2 + 24{,}5x_4 + 2{,}1x_4^2 + 1{,}5x_1x_2 + 1{,}1x_1x_3 - 0{,}6x_1x_4 - 0{,}0x_2x_3 - 0{,}0x_2x_4 - 0{,}0x_3x_4$

Подтверждена их адекватность, что позволяет их использовать для выявления закономерностей изменения функций отклика в соответствии с изменением отдельных факторов или их сочетаний.

Выводы по главе 2

Моделирование процесса термической обработки стали ЭП 678 во второй главе исследования базируется на представленных в первой главе теоретических основаниях.

Модель технологического процесса термической обработки стали ЭП 678 является математической моделью в форме регрессионной многофакторной, представляемой в форме алгебраических уравнений.

Характер реализации модели – цифровой с использованием современных информационных технологий и специальных программных средств.

Разработка регрессионной модели процесса термической обработки стали ЭП 678 представляет собой интеграционный процесс ее построения, ориентированный на удовлетворение требований адекватности и простоты.

Разработка модели технологического процесса термической обработки стали ЭП 678 осуществлялась с использованием ортогонального центрального композиционного плана, определяющего модель второго порядка, содержащую первые, вторые степени переменных и их парные взаимодействия.

При расчете коэффициентов уравнения регрессии для эмпирической модели второго порядка использовался пакет STATISTICA в соответствии с алгоритмом:

- создать матрицу планирования эксперимента (четыре фактора, один отклик);
- выбрать факторы и отклик;
- определить вид уравнения регрессии из возможных (линейные оценки коэффициентов уравнения регрессии; линейные и квадратичные оценки коэффициентов; линейные оценки коэффициентов, отражающие взаимное влияние двух факторов; линейные, квадратичные оценки коэффициентов уравнения регрессии, оценки коэффициентов, отражающие взаимные отклики двух факторов).
- получение оценок коэффициентов регрессии;
- проверка адекватности модели;
- проведенное математическое моделирование процесса термической обработки стали ЭП 678 с использованием пакета STATISTICA позволило получить уравнение регрессии. Проверка адекватности модели по критерию Фишера при уровне значимости α=0,05.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Процесс термической обработки стали, направленный на изменение структуры стали при нагревании и последующем охлаждением с определенной скоростью, представляет собой сложную технологическую систему, которая характеризуется целенаправленностью, многофакторностью, многофункциональностью. Такие особенности технологического процесса термообработки не позволяют представить его точное описание и делают актуальным необходимость его исследования с использованием методов математического моделирования. Управление процессом термообработки, основанное на интуиции металловеда не всегда является оптимальным.

Объект исследования (процесс термической обработки) в силу технологических и экономических соображений не допускает преднамеренного варьирования входных переменных. Поэтому для металлургического моделирования используются результаты, полученные в условиях пассивного эксперимента в режиме нормального функционирования технологического процесса.

Решение первой задачи исследования позволило представить объект исследования в виде «чёрного ящика» с выделением числовых характеристик входных факторов (в частном случае механические характеристики стали до процесса термообработки); возмущающих воздействий как характеристик технологического процессе термообработки (в частном случае – химический состав сплава, температура закалки и старения, продолжительность старения). Определены численные характеристики целей исследования – целевая функция (критерии оптимизации).

При анализе разных форм, представления моделей, способов описания, характера реализации в диссертации обосновано: Модель технологического процесса термической обработки металлопродукции является математической моделью в форме регрессионной многофакторной, представляемой в форме алгебраических уравнений и структурных схем визуализирующих её особенности.

Модель строится в предположении, что функция отклика не имеет бесконечных разрывов и представлена в виде ряда Тейлора:

$$y = f(x_1, x_2, ..., x_k) = b_0 + \sum_{j=1}^{k} b_j x_j + \sum_{i,j=1}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^{k} b_{jj} x_j^2 + ...$$

Разработка регрессионной модели процесса термической обработки стали ЭП 678 представляет собой интеграционный процесс ее построения, ориентированный на удовлетворение требований адекватности и простоты.

Разработка модели технологического процесса термической обработки стали ЭП 678 осуществлялась с использованием ортогонального центрального композиционного плана, определяющего модель второго порядка, содержащую первые, вторые степени переменных и их парные взаимодействия.

При расчете коэффициентов уравнения регрессии для эмпирической модели второго порядка использовался пакет STATISTICA в соответствии с алгоритмом:

- создать матрицу планирования эксперимента (четыре фактора, один отклик);
- выбрать факторы и отклик;
- определить вид уравнения регрессии из возможных (линейные оценки коэффициентов уравнения регрессии; линейные и квадратичные оценки коэффициентов; линейные оценки коэффициентов, отражающие взаимное влияние двух факторов; линейные, квадратичные оценки коэффициентов уравнения регрессии, оценки коэффициентов, отражающие взаимные отклики двух факторов).

Проведенное математическое моделирование процесса термической обработки стали ЭП 678 с использованием пакета STATISTICA позволило получить уравнение регрессии. Проверка адекватности модели по критерию Фишера при уровне значимости $\alpha=0,05$.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Прикладная статистика Справочное издание/ С.А. Айвазин, И.С. Енюхов, Л.Д. Мешалкин под ред. С.А. Айвазина. – М: Финансы и статистика 1985. – 487с.

2. Бусленко Н.П. «Моделирование сложных систем»/ Н.П. Бусленко. – 2-е изд., перераб. – М.: Наука, 1978. – 400с.

3. Горбань А.Н., Россиев Д.А. Нейронные сети на персональном компьютере. Наука. Сибирская государственная фирма РАН 1996. – 410с.

4. Колмогоров А. Н. . Теория вероятностей и математическая статистика. — М.: Наука, 1986. — 534 с.

5. Круглов В. В., Борисов В. В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика. М.: Горячая линия — Телеком, 2001. — 382 с.

6. Применение математической статистики при анализе вещества. — М.: Физматгиз, 1960. — 430 с.

7. Б. Н. Петров, В. Ю. Рутковский, “Об инвариантности беспоисковых самонастраивающихся систем с моделью”, Докл. АН СССР, 161:3 (1965), 544–546

8. Самарский А. А., Лазаров Л. Д., Макаров В. Л. Разностные схемы для дифференциальных уравнений с обобщенными решениями. — М. Высшая школа, 1987, 296с.

9. Советов, Б. Я. Моделирование систем: учебник для академического бакалавриата / Б. Я. Советов, С. А. Яковлев. — 7-е изд. — М. : Издательство Юрайт, 2017. — 343 с.

10. Эйкхофф П., Ванечек А., Савараги Е., и др. Современные методы идентификации систем. Перевод с английского. Под редакцией П. Эйкхоффа. - М.: Мир, 1983г.. - 400 с.

11. Моделирование процесса термообработки на основе математических моделей, построенных на исследовании метода конечных элементов и программных комплексов ANSYS, MSC, MAPC, DEFORM-3D, ThermoSim, SYSWELD]. - Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники.

12. Горбунов И.П. Математическое моделирование режима термической обработки низколегированных сталей: в сборнике «Современная металлургия начала нового тысячелетия, часть 1. VI международной научно-практической конференции»/ И. П. Горбунов, Д. И. Горбунов, В. В. Бузик, С. Ю. Рогов, А. А. Кофанов - Липецк: ЛГТУ, 2009, с. 199-203

13. Горбунов И.П. Моделирование технологии процессов термообработки стали в металлургии: в сборнике «Современная металлургия нового тысячелетия II международный научно-практической конференции»/ И. П. Горбунов, И. А. Цыганов, Д. И. Горбунов — Липецк: ЛГТУ, 2016, с. 124-127

14. Кундас С. П. Компьютерное моделирование процессов термической обработки сталей. Минск: Бестпринт, 2005-313 с.

15. Светушков Н. Н., Овсепян С. В. Оптимизация процессов термообработки заготовок из жаропрочных никелевых сплавов. [Электронный ресурс]: ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ АВИАЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ. Режим доступа: www.viam.ru/public

16. Федоткин И.М. Математическое моделирование технологических процессов / И.М. Федоткин. – М.: Ленанд, 2015. – 416с.

17. Рейзлин В.И. Математическое моделирование. Учебное пособие / В.И. Рейзлин. – М.: Юрайт, 2016. – 128с.

18. Павловский Ю.Н. Компьютерное моделирование. Учебное пособие / Ю.Н. Павловский, Н.В. Белотелов, Ю.И. Бродский. – М.: Физматкнига, 2014. – 304с.

19. Горлач Б.А. Математическое моделирование. Построение моделей и численная реализация: Учебное пособие / Б.А. Горлач, В.Т. Шахов. – СПб.: Лань, 2018. – 292с.

20. Револько А. Э., Осипов В. В. Задачи разработки статистической модели термообработки металлопродукции. Сборник статей Международной научно-практической конференции «Интеграция науки, общества, процесса и промышленности» 17 мая 2019г., Тюмень, [с. 118-121]

21. Ильин А. А. Имитационное моделирование экономических процессов. Конспект лекций для студентов специальности 080801 - «прикладная информатика в экономике» Тула, Тульский институт управления и бизнеса, 2007

22. Кодиров Ф. Э., Ахматова С. З. и др. / Для проверки моделей адекватности, чувствительности и сопротивления. Сборник статей Международной научно-практической конференции «Интеграция науки, общества, процесса и промышленности» / 17 мая 2019г., Тюмень, [с. 72-74]

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт цветных металлов и материаловедения
Кафедра «Фундаментального естественнонаучного образования»

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
__________ Н.И. Косарев
подпись
«9» 07 20 20 г.

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Разработка математических моделей и алгоритмов исследования процесса термической обработки сталей

09.04.03 Прикладная информатика
09.04.03.04 «Прикладная информатика в металлургии»

Научный руководитель	__________ подпись, дата	доцент, канд. физ-мат наук	В.В.Осипов
Выпускник	__________ подпись, дата		А.Э.Реводько
Рецензент	__________ подпись, дата	менеджер проектов, офис технологического и продуктового развития ОАО «Красцветмет»	О.Н. Вязовой

Красноярск 2020

Федеральное государственное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский федеральный университет»
Институт цветных металлов и материаловедения
Кафедра фундаментального естественнонаучного образования

Рецензия
на магистерскую диссертацию
Реводько Анастасии Эдуардовны
на тему: Разработка математических моделей и алгоритмов исследования процесса термической обработки сталей,
представленную к защите по направлению 09.04.03 «Прикладная информатика» по программе 09.04.03.04 «Прикладная информатика в металлургии»

1. Общий анализ магистерской диссертации

Тема магистерской диссертации является актуальной в рамках проблемы повышения качества металлопродукции с использованием современных научных подходов.

Диссертант ставит перед собой цель: разработать математические модели, позволяющие идентифицировать процесс термической обработки металлопродукции, удовлетворяющие требованиям адекватности, простоты и удобства в использовании.

Магистерская диссертация состоит из 2-х глав – теоретической «Теоретические обоснования разработки математических моделей и алгоритмов исследования теоретической обработки сталей» и практической «Моделирование процесса термической обработки стали ЭП 678», в которых логично и обосновано приводятся результаты исследования, представляющие собой один из вариантов решения проблемы.

Анастасия Эдуардовна грамотно обосновала актуальность исследования, опираясь на многофакторность термической обработки стали как сложной технологической системы, не позволяющей представить его точное описание и, следовательно, делает актуальным использование методов математического моделирования.

Важной и значимой частью исследования, представленного в магистерской диссертации является рассмотрение теоретической проблемы адекватности и значимости математической модели в сочетании с реальной проверкой выполнимости этих значимых критериев во второй части исследования для разработанных в диссертации моделей. Здесь необходимо отметить, что проверка адекватности и значимости разработанных магистерских моделей осуществляется с помощью двух методов: с использованием F-критерия Фишера и на основе выборочного коэффициента детерминации R^2, что повышает обоснованность и достоверность результатов исследования.

Используя регрессионные модели, диссертант чётко представляет их достоинства и недостатки, признает роль экспертов для снятия противоречия между требованием надежности прогнозирования по регрессионной модели и ограниченным количеством независимых переменных, включаемых в модель.

2. Вопросы и замечания рецензента

Рецензируемая магистерская работа производит хорошее впечатление и не содержит существенных недостатков. Однако, в ходе изучения работы возник вопрос относительно алгоритма компьютерного математического моделирования, в котором отсутствует модуль уточнения модели. Его сознательно исключил диссертант? Хотелось бы получить ответ на этот вопрос в ходе защиты диссертации.

3. Общая оценка магистерской диссертации

Магистерская диссертация выполнена на актуальную тему. Решение поставленных исследовательских задач выполнено в разумной логике: от теоретического осмысления проблемы, выбора методов её решения к практике их использования. Выводы и результаты исследования обоснованы.

В целом, магистерская диссертация удовлетворяет квалификационным требованиям и заслуживает оценки «отлично».

Рецензент Вязовой Олег Николаевич

Место работы рецензента: офис технологического и продуктового развития ОАО «Красцветмет»

Занимаемая должность рецензента: менеджер проектов