虚拟目标法在多指标橡胶配方试验中的应用

姚钟尧, 刘运春, 梁士慧

(华南理工大学 高分子系 广东 广州 510640)

摘要: 介绍在多响应问题中用于多目标同步优化的一种方法即虚拟目标法, 并以 SBR 多指标配方试验为例, 依据通过均匀设计法和回归分析法建立的回归方程, 应用虚拟目标法和网格法预测和优选出各项性能达到标的值的配方和综合性能最优的配方。

关键词: 橡胶配方; 多响应问题; 多指标分析; 虚拟目标法; 均匀设计; 回归分析

中图分类号: O224; TQ330.1⁺2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-890X(2001)08-0453-05

橡胶配方试验是多因素和多目标试验(多响应问题), 因此, 现代橡胶配方的设计和试验必须借助试验设计(数据采集)、回归分析(建模)、多目标优化等方法, 因而, 也必然要借助计算机和计算机技术。前文^[1-4]对由中国科学家创立的均匀设计法已有详尽介绍, 本文以 SBR 配方试验为例, 介绍多目标同步优化的一种方法即虚拟目标法的应用。

1 橡胶胶料 7 项性能回归方程及其背景^{3, 4]}

经过配方设计、试验及试验数据的回归分析, 获得橡胶胶料的密度和硬度等 7 项物理性能回归方程, 这是进行多目标优化的基础和依据。以下仅简要地叙述与这些方程式有关的背景, 详细内容见文献[3]和[4]。

胶粉、白炭黑、炭黑和棕色树脂粉(简称棕粉)4 种填料的用量(单位: 份)分别用 X_1 , X_2 , X_3 和 X_4 表示。 $X_1 \sim X_4$ 的变化范围: X_1 (胶粉) 8~20; X_2 (白炭黑) 4~16; X_3 (炭黑) 4~12; X_4 (棕色树脂粉) 8~16。

试验目的在于寻找轻而硬的 SBR 胶料配方, 主观希望是: Y_1 (密度) $\leq 1.15 \text{ Mg} \cdot \text{m}^{-3}$; Y_2 (邵尔 A 型硬度) = 85~90 度; Y_3 (屈挠龟裂寿命) $\geq 50\ 000$ 次; Y_4 (阿克隆磨耗量) $<$

0.115 cm^3 ; Y_5 (撕裂强度) $\geq 50 \text{ kN} \cdot \text{m}^{-1}$; Y_6 (扯断伸长率) $\geq 300\%$; Y_7 (拉伸强度) $\geq 12 \text{ MPa}$ 。此为各响应(性能)的标的值或称预定目标, 是按主观愿望初定的, 首先要保证胶料轻而硬, Y_1 和 Y_2 指标不可改变, 其次考虑耐屈挠、耐磨耗, 最后兼顾其它性能。

用混合水平均匀设计表 $U_{10}(10^2 \times 5^2)$ 安排了 10 次基本试验, 然后又做了 6 次验证试验和扩大试验。每次试验测定胶料的密度、硬度等 7 项物理性能, 16 次试验的试验变量及其性能测试结果(16 个数据点)见表 1。采用不同的回归模型对这 16 次试验数据进行回归分析, 最后选定的密度、硬度等 7 项性能-组分关系的回归方程为:

密度方程式:

$$Y_1 = 1.0799 + 2.7671 \times 10^{-3} X_2 + 1.625 \times 10^{-3} X_4 + 2.042 \times 10^{-4} X_3^2 \quad (\sigma = 0.002) \quad (1)$$

硬度方程式:

$$Y_2 = 78.10 + 0.552 X_2 + 1.260 \times 10^{-2} X_3^2 - 3.591 \times 10^{-2} X_2 X_3 + 4.204 \times 10^{-2} X_3 X_4 \quad (\sigma = 0.4) \quad (2)$$

耐屈挠性方程式:

$$Y_3 = 11.0877 - 1.6160 X_1 + 0.0798 X_1^2 \quad (\sigma = 1.267) \quad (3)$$

耐磨性方程式:

$$Y_4 = 0.1871 - 4.517 \times 10^{-4} X_2 X_3$$

作者简介: 姚钟尧(1945-)男, 广东潮阳人, 华南理工大学副教授, 工学硕士, 从事橡胶应用科技、试验设计应用和计算机应用方面的教学和研究工作。

$$(\sigma=0.0212) \quad (4)$$

撕裂强度方程式:

$$Y_5=23.570+6.922 \times 10^{-3} X_2^2+1.601 \times 10^{-2} X_1 X_3$$

$$(\sigma=0.946) \quad (5)$$

扯断伸长率方程式:

$$Y_6=93.87+0.267 X_4^2+0.564 X_1 X_2$$

$$(\sigma=28) \quad (6)$$

拉伸强度方程式:

$$Y_7=7.744+1.126 \times 10^{-2} X_1 X_4+3.420 \times 10^{-2} X_2 X_3$$

$$(\sigma=1.380) \quad (7)$$

式(1)~(7)中, σ 为标准剩余离差, 是回归方程预测精确度的标志, 单位与相应的 Y 相同。7项性能方程经过显著性检验, Y_4 和 Y_5 两方程是显著的(显著性水平 $\alpha=0.05$), 其它方程很显著($\alpha=0.01$), 因此可以应用它们进行配方优选和预测。

2 虚拟目标法是一种多目标同步优化方法^[5]

橡胶配方试验是典型的多响应(多目标)问题。在多响应问题中, 试验者关心的是: ①在试验范围内能不能找到满足预定目标的配方? ②如果能够找到, 达到预定目标的配方变量如何

配置? ③不管能否达到, 试验范围内最优的综合性能和变量如何配置? 传统的试验方法无法回答这些问题, 而现代配方设计可以解答这些问题。

诸响应方程式(1)~(7)是进行多目标优化的基础, 却难以解答上述问题。分析这些方程式可知, 多项性能之间对配方组分的要求是相互矛盾的, 如密度和硬度、密度和磨耗。此外, Y_3, Y_5, Y_6 和 Y_7 是愈大愈好型响应, Y_1 和 Y_4 是愈小愈好型响应, 而 Y_2 是额定为好型响应。因此, 解决这些问题必须借助多目标优化方法。

多目标优化方法有多种, 但对于橡胶配方试验, 较为适合和方便使用的方法并不多, 主要有虚拟目标法和多属性决策法(简称 MADA)等。MADA 已多次在橡胶期刊中出现^[6~8]。最初, MADA 是作为均匀设计分析数据的方法^[6]。MADA 不宜用于均匀设计的数据分析^[2], 但可用于多目标优化。

虚拟目标法^[5] 假定要考虑的指标有 $f_1(X), f_2(X), \dots, f_k(X)$, 且各项指标均要求愈大愈好, $X=\{X_1, X_2, \dots, X_p\}$, $X_j (j=1, 2, \dots, p)$ 为要考察的因素, 且 $a_j \leq X_j \leq b_j$, $[a_j, b_j]$ 为因素 X_j 的变化范围。设所选方案必须

表1 16次配方试验数据

试验编号	变 量				性 能						
	X_1	X_2	X_3	X_4	Y_1	Y_2	Y_3	Y_4	Y_5	Y_6	Y_7
1	8	8	6	12	1.128	85	2.46	0.153	25.34	140	9.15
2	9	12	10	16	1.160	88	3.26	0.134	26.96	230	14.14
3	10	15	4	10	1.145	86	3.30	0.175	25.25	178	10.09
4	11	4	8	16	1.129	85	3.64	0.154	24.82	190	10.78
5	12	10	12	10	1.152	86	1.46	0.157	24.75	221	14.54
6	13	13	4	14	1.141	86	5.93	0.171	25.60	275	13.08
7	14	16	8	8	1.146	86	4.55	0.099	27.56	203	12.09
8	15	6	12	14	1.149	88	5.43	0.121	28.47	156	9.80
9	16	11	6	8	1.134	84	3.82	0.142	26.19	260	13.74
10	17	14	10	12	1.158	87	6.64	0.134	27.74	257	14.25
11	16	4	8	15	1.128	85	4.24	0.217	25.16	199	11.11
12	16	8	10	15	1.149	87	5.23	0.154	25.50	235	14.42
13	17	8	9	16	1.145	87	7.73	0.163	25.76	248	14.12
14	17	12	10	16	1.162	89	7.51	0.146	26.73	251	14.67
15	18	6	11	16	1.148	88	6.41	0.139	27.55	225	13.39
16	20	10	7	15	1.137	86	11.64	0.157	27.39	281	12.95

达到的预定目标为 $f_i^0 (i=1, 2, \dots, k)$ 。因此, 虚拟目标为:

$$F^e = (f_1^e, f_2^e, \dots, f_k^e) \quad (8)$$

式中 $f_i^e = f_i^0 + D_i, D_i > 0, i=1, 2, \dots, k$ 。其中 f_i^e 为单个指标的虚拟目标, D_i 为微增量。 D_i 的取值由试验者决断确定。记

$$A_i(X) = \begin{cases} \frac{f_i(X)}{f_i^e} & f_i(X) < f_i^e \\ 1 & f_i(X) \geq f_i^e \end{cases} \quad (9)$$

A_i 是某一方案 X_j 对应的指标 $f_i(X)$ 接近标的值或 f_i^e 的程度。当 $A_i(X)=1$ 时, 表示这一方案的某项指标完全达到该项指标的标的值或 f_i^e 。令

$$U(X) = \sqrt{\sum_{i=1}^k [1 - A_i(X)]^2} \quad (10)$$

$U(X)$ 是衡量试验结果优劣的新准则, 即把多指标问题化为单指标问题。求原问题的满意解也就转化为求 $U(X)$ 的最小值。 $U(X)$ 又称期望函数, 当 $U(X)=0$ 时, 意味着 $A_i(X)=1$, 表示这一方案的所有指标都达到虚拟目标或标的值, 这是理想状态, 这时的方案 X_j 不仅是综合性能最优方案, 而且是试验者寻求的绝对最优方案。

所谓虚拟目标, 是指这个目标可能是达不到的, 但我们可以通过求 $U(X)$ 的最小值, 找出距离虚拟目标最接近的方案。故称使 $U(X)$ 取小值的解为第一次选好解, 设相应的各指标值为 $f_i^U (i=1, 2, \dots, k)$ 。如果试验者对其中某些指标值不满意, 例如 $f_{i1}^U, f_{i2}^U, \dots, f_{ih}^U$, 则重新虚拟目标:

$$F^{e'} = (f_{1s}^{e'}, f_{2s}^{e'}, \dots, f_{ks}^{e'}) \quad (11)$$

式中 $f_{is}^{e'} = f_{is}^e + \delta_s = f_{is}^0 + D_{is} + \delta_s, \delta_s > 0, s=1, 2, \dots, h; f_i^e = f_i^0 + D_i, i=1, 2, \dots, k, i \neq is$ 。其中 $f_{is}^{e'}$ 为单个指标的虚拟目标, f_{is}^0 为标的值, D_{is} 和 δ_s 为微增量。用 $f_{is}^{e'}$ 代替式(9)的 f_i^e , 并按式(10)继续做试验, 直到求得试验者认为满意的结果为止。因为这种方法具有对话式, 我们又称为对话式虚拟目标法。

上述是针对指标愈大愈好的情况讨论, 若遇到指标愈小愈好的情况, 只要虚拟目标 $f_i^e =$

$f_i^0 - D_i (D_i > 0)$, 并令

$$A_i(X) = \begin{cases} \frac{f_i(X)}{f_i^e} & f_i(X) > f_i^e \\ 1 & f_i(X) \leq f_i^e \end{cases} \quad (12)$$

其余处理与指标愈大愈好的情况类似。

文献[5]没有叙述额定为好型响应的处理, 这里遵循原著的思路补充如下。

对于要求指标等于定值 M_i 时, 令 $f_i^0 = M_i, f_i^e = f_i^0 - D_i$, 则

$$A_i(X) = \begin{cases} \frac{f_i(X)}{f_i^e} & f_i(X) \neq M_i \\ 1 & f_i(X) = M_i \end{cases} \quad (13)$$

如果要求指标落在保留区间 $[L_i, R_i]$, 可处理为

$$A_i(X) = \begin{cases} \frac{f_i(X)}{L_i} & f_i(X) < L_i \\ \frac{f_i(X)}{R_i} & f_i(X) > R_i \\ 1 & L_i \leq f_i(X) \leq M_i \end{cases} \quad (14)$$

其余处理与指标愈大愈好情况类似。

3 优化结果

将试验区域划成网格, 依据式(1)~(7)在网格点计算 7 项响应各自的性能值, 并由此求得它们在试验范围内独立的最小值和最大值的近似值(即网格法), 结果见表 2。

由表 2 可知, 即使只考虑 Y_5 这单一指标而不顾及其它指标的约束, 在试验范围也不可能达到标的值 $50 \text{ kN} \cdot \text{m}^{-1}$ 。因此, 在应用虚拟目标法寻找综合性能最优配方时, 将 Y_5 的标的值改为 $30 \text{ kN} \cdot \text{m}^{-1}$ (最大值)。有了各项响应独立的最小值和最大值, 观察式(1)~(7), 可

表 2 各项响应独立的最小值和最大值

项 目	最小值	最大值
Y_1	1.107	180
Y_2	81.3	89.9
Y_3	2.908	10.688
Y_4	0.1004	0.1799
Y_5	24.19	29.18
Y_6	129	342
Y_7	9.095	18.333

隐约感觉到在试验范围内使各项性能全部达到标的值是困难的。表 3 示出在 3 种情况下应用虚拟目标法的优化结果:①对 7 项响应均应用虚拟目标法得到配方 1;②只对前 4 项响应($Y_1 \sim Y_4$)应用虚拟目标法得到配方 2~11;③只考虑前 2 项响应(Y_1 和 Y_2),根据配方 1 的组分变量值尝试改变变量,从而得到配方 12,然而,表中的 $U(X)$ 值(等于 0.076 145)是由 7 项响应计算得出的。这 3 种情况的差异在于:情况①视 7 项响应同等重要;情况②不考虑 $Y_5 \sim Y_7$ 三项响应,视 $Y_1 \sim Y_4$ 四项响应同等重要;情况③只重点考虑 Y_1 和 Y_2 两项响应,寻找符合标的值的最优配方(不是综合最优配方)。这是一种处理方法,在多响应问题中,另外的方法往往是视响应的相对重要性不同而赋予响应不同的权处理之,即加权处理法^[5]。

$U(X)$ 值是“综合性能优劣”的一个量度,根据响应的重要性不同给予相应的处理, $U(X)$ 最小值不同,优化结果也不同。表 3 中的 $U(X)$ 值,在配方 1 与配方 2~11 之间不可比较;而在配方 1 与 12 之间或在配方 2~11 之间可以比较。在可比较的情况下, $U(X)$ 值愈小,则配方的综合性能愈好;当 $U(X)$ 值相等时,具体的各项性能却不一定相同,如配方 2~11,虽然性能 Y_3 随着 X_1 增大而增大,但是它们的 $U(X)$ 值却相同,这是由于当 Y_3 等于或大于标的值时,无论它比标的值(50 000 次)大

多少, $A_i(X)$ 均为 1 造成的[参见式(9)]。在实际工作中,综合性能最优的配方有时不是试验者满意的配方,如配方 1 的 $U(X)$ 值比配方 12 小得多,综合性能最优,但配方 12 更接近标的值,由此说明,虚拟目标法这类方法只是寻找综合性能最优的配方,试验者可以根据实际情况利用优化方法来达到目的。

在应用虚拟目标法的同时还可同时应用网格法寻找 $U(X)$ 的最小值,如配方 1 和 2 是分别计算了 $25 \times 25 \times 17 \times 17 = 180\ 625$ 个网格点得到的,即将 $X_j(j=1, 2, 3, 4)$ 区间每 0.5 划一个点。网格法是近似法,是笨办法,但易于理解和实施,当试验者找不到合适的优化算法时,它可解决有些问题。

4 结论

在寻找多因素、多指标的 SBR 配方试验中,应用均匀设计法和回归分析法得到性能-组分关系的回归方程。由这些方程可知,撕裂强度和扯断伸长率两项性能,即使它们不受其它性能的制约,单项性能独立的最大值也不可能分别达到 $50\ \text{kN} \cdot \text{m}^{-1}$ 和 300% 。因此可断言:在给定的试验范围内,任一配方的性能不可能全部达到主观标的值。

应用虚拟目标法可得综合性能最优的配方。在虚拟目标法基础上稍加变通得到最接近主观标的值的第 12 号配方: $X_1 = 20, X_2 = 16,$

表 3 预测的“综合最优配方”

预测的配方 编号	变 量				性 能							$U(X)$ 值
	X_1	X_2	X_3	X_4	Y_1	Y_2	Y_3	Y_4	Y_5	Y_6	Y_7	
1	20.0	16	10	10	1.161	86.6	10.69	0.114 8	28.54	301	15.73	0.021 2
2	15.5	16	10	8.5	1.158	86.0	5.21	0.114 8	27.82	253	14.87	0.012 05
3	16.0	16	10	8.5	1.158	86.0	5.66	0.114 8	27.90	257	14.93	0.012 05
4	16.5	16	10	8.5	1.158	86.0	6.15	0.114 8	27.98	262	14.98	0.012 05
5	17.0	16	10	8.5	1.158	86.0	6.68	0.114 8	28.06	267	15.03	0.012 05
6	17.5	16	10	8.5	1.158	86.0	7.25	0.114 8	28.14	271	15.09	0.012 05
7	18.0	16	10	8.5	1.158	86.0	7.85	0.114 8	28.22	276	15.14	0.012 05
8	18.5	16	10	8.5	1.158	86.0	8.50	0.114 8	28.30	280	15.19	0.012 05
9	19.0	16	10	8.5	1.158	86.0	9.19	0.114 8	28.22	285	15.25	0.012 05
10	19.5	16	10	8.5	1.158	86.0	9.92	0.114 8	28.46	289	15.30	0.012 05
11	20.0	16	10	8.5	1.158	86.0	10.69	0.114 8	28.30	280	15.325	0.012 05
12	20.0	16	9	8.0	1.154	85.8	10.69	0.122 1	28.22	292	14.68	0.076 145

$X_3=9$, $X_4=8$ (即胶粉、白炭黑、炭黑和棕粉分别为 20, 16, 9 和 8 份)。这个配方的预测说明, 除了撕裂强度、扯断伸长率和磨耗量 3 项性能未达到但接近主观标的值之外, 可认为其它性能达到要求, 特别是密度和硬度 2 项完全达到轻而硬的目标。

参考文献:

- [1] 姚钟尧. 均匀设计与回归分析法的关系 [A]. 中国化学工业橡胶专业委员会. '97 全国橡胶技术讨论会论文集 [C]. 北京: 中国化学工业橡胶专业委员会, 1997. 238-243.
- [2] 姚钟尧. 回归分析在均匀设计数据分析中的地位 [J]. 特种橡胶制品, 1998, 16(2): 35-41.

- [3] 姚钟尧, 梁士慧. 均匀设计法在丁苯橡胶配方试验中的应用 [J]. 华南理工大学学报自然科学版, 2001, 29(1): 79-82.
- [4] 姚钟尧, 林惠音, 梁士慧. 回归分析法在橡胶配方试验中的应用 [J]. 橡胶工业, 2001, 48(7): 393-398.
- [5] 金良超. 正交设计与多指标分析 [M]. 北京: 中国铁道出版社, 1988. 68-70, 79-86.
- [6] 高齐圣, 隋树林, 孟宪德. 均匀设计在橡胶配方研究中的应用 [J]. 橡胶工业, 1996, 43(10): 583-585.
- [7] 王伟, 高齐圣. 应用均匀网格法优选橡胶配方 [J]. 橡胶工业, 1997, 44(10): 654-656.
- [8] 高齐圣, 隋树林, 范汝良, 等. 数据处理组合法在橡胶配方设计建模中的应用 [J]. 合成橡胶工业, 1997, 20(3): 169-170.

收稿日期: 2001-03-15

Application of fictitious objective method to multi-target formula experiment

YAO Zhong-yao, LIU Yun-chun, LIANG Shi-hui

(South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)

Abstract: The fictitious objective method was described to optimize synchronously the multi-targets in multi-response problem. Taking the experiment of multi-target SBR-based formula as example, the formula with the expected properties and the optimum comprehensive properties was obtained using the fictitious objective method and the network method based on the regression equation established with uniform design method and the regression analysis.

Keywords: rubber formula; multi-response problem; multi-target analysis; fictitious objective; uniform design; regression analysis

中国橡胶工业协会橡胶助剂专业委员会成立大会暨技术交流会在杭州举行

中图分类号: TQ330.38 文献标识码: D

中国橡胶工业协会橡胶助剂专业委员会成立大会暨技术交流会于 2001 年 6 月 26 日在杭州隆重举行。出席会议的有国家经贸委、中国橡胶工业协会、研究院、大学、助剂生产企业、轮胎及其它橡胶制品生产企业等单位的领导、企业家、专家、工程技术人员共 100 多名。本次会议系橡胶行业的一次盛会。

橡胶助剂专业委员会第一届理事长许春华介绍了新成立的专业委员会当前的工作要点: 一是开展全方位的信息服务。加强信息交流, 创办《橡胶助剂通讯》, 强化综合统计, 年内准备

编制一套助剂企业产品分类的“白皮书”。二是积极开展技术经济咨询和服务。通过产、学、研的结合, 促进科技成果的产业化, 同时成立专家咨询组, 开展咨询活动, 包括专题调研等。三是尽快做好组织健全工作。会上还进行了技术交流, 包括:《橡胶助剂“十五”规划意见》、《橡胶助剂开发的创新思路》、《轮胎配方设计及原材料进展》等, 对沟通助剂生产企业与轮胎等生产企业之间的交流起到了很好的作用。我国橡胶助剂虽然有了长足的进步, 但与国外先进水平相比还是存在差距, 今后生产企业与用户更应密切合作, 走联合开发、创新之路, 尤其是对一些新型助剂和特种功能的新产品。

(北京橡胶工业研究设计院 陈志宏供稿)