

计算机辅助试验研究系统及试验设计

姚钟尧 林惠音

(华南理工大学高分子系, 广州 510641)

摘要 计算机辅助试验研究(Computer Aided Research, 简称 CAR)系统是大型试验设计和分析应用软件包, 由正交试验法和回归分析法两大部分组成, 具有功能比较完善、数据处理灵活和使用方便等特点。正交试验法部分有试验安排、直观分析和(或)方差分析功能。回归分析法部分包括线性回归分析、二次回归分析和逐步回归分析, 有回归试验安排、回归方程的获取及显著性检验、性能预测、绘制性能曲线或等高线图和优选配方等功能。CAR 系统完全适合辅助橡胶、塑料和胶粘剂等的配方设计和试验。

关键词 计算机辅助试验研究, 试验设计, 正交试验法, 回归分析法

试制一种产品、改革一项工艺一般都要经过大量的试验, 而试验的目的就是要了解各种因素对指标的影响。在试验中合理地利用过去的经验, 科学地安排试验, 缩短摸索过程, 提高工作效率, 有很重要的意义。试验设计理论和方法就是解决这些实际问题的数理统计法的一个分支, 在工农业生产和科学研究等方面得到广泛的应用。

试验设计主要包括两方面的内容: ①试验安排(简称设计); ②对试验结果进行分析(简称分析)。正交试验法和回归分析法是广泛应用的试验设计方法, 尤其是正交试验法对多因素试验十分有效。然而直至现在, 在很多理工科非数学专业的本科教育中未开设专门的数理统计或试验设计课; 此外, 正交试验法和回归分析法, 特别是多元回归分析法和多元逐步回归分析法的计算量太大和计算步骤太多, 从而制约了正交试验法和回归分析法更广泛的应用。

我们把常用的试验设计方法和计算机技术结合起来, 开发了计算机辅助试验研究(Computer Aided Research, 简称 CAR)系

统, 使试验设计更易为人们利用, 成为科技工作者进行新产品开发、生产质量控制和科学研究的有力工具。

1 CAR 系统的内容、结构和试验设计功能

CAR 系统是一个大型的试验设计和分析应用软件包, 由正交试验法和回归分析法两大部分组成, 具有试验设计、配方(配合)开发、试验拟合模型等用途, 可辅助橡胶、树脂、塑料、胶粘剂、油漆和油墨的新配合和新配色设计, 是化工、冶金、建材、医药医学和生物等领域进行多因素试验定性和定量分析的有效工具。

图 1 简要地说明了 CAR 系统的内容、结构、层次和试验设计功能。顺便指出, CAR 系统包含的正交试验法、回归分析法和回归的正交试验设计法, 都是直接最优化(试验最优化)方法, 并未涉及到有关理论。

2 CAR 系统的正交试验法部分

正交试验法是安排和分析多因子试验的数学方法。由于正交表具有正交性、均衡分散和整齐可比的特点, 因此可利用正交表较少地、有重点地安排有代表性的试验, 而通过对这些试验结果(数据)的分析, 能够确定以下内容: ①对指标影响显著的因子和对指标

作者简介 姚钟尧, 男, 1945 年出生。硕士。副教授。从事教学和科研工作。在《橡胶工业》等刊物上发表论文和译文 40 多篇, 编有《化学化工科技文献检索》, 合译有《塑料聚合物科学与工艺学》(上、下册)。

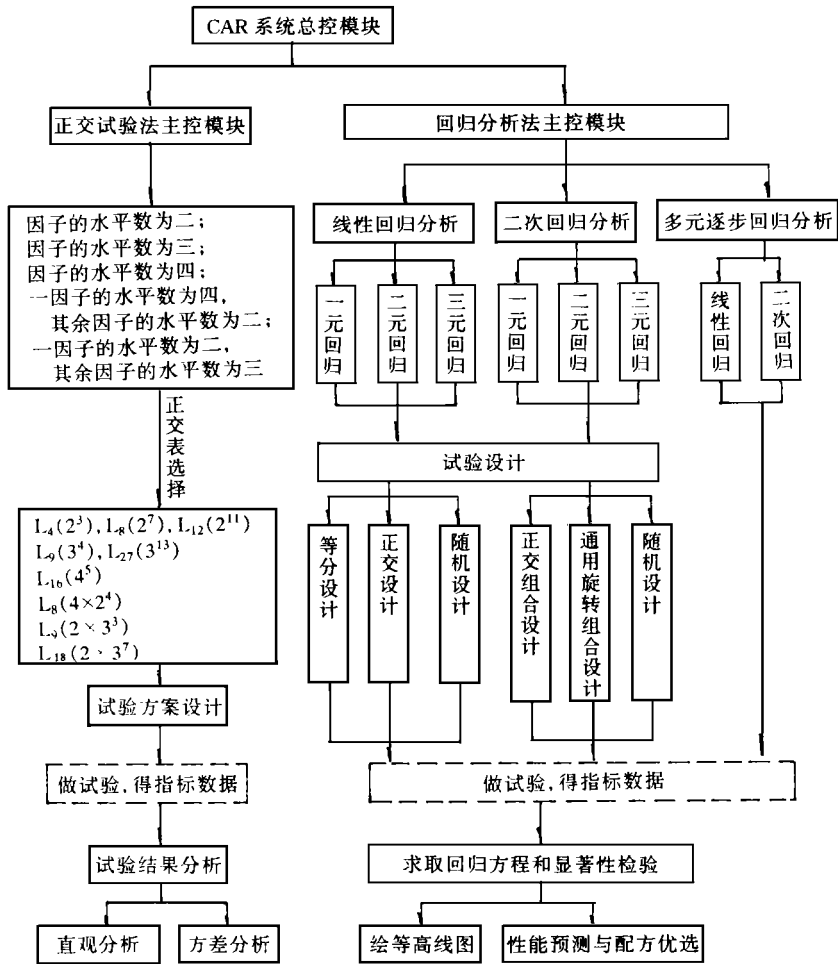


图1 CAR系统的内容、结构和试验设计功能示意图

无关紧要的因子;②对指标最为有利的水平搭配;③在最优水平组合下指标大致的变化范围;④进一步试验的方向。

正交试验法具有试验次数少、试验点代表性好的特点,既能用直观分析法又能用方差分析法对结果进行分析,得出因子的显著性和最佳水平组合。

CAR系统正交试验法部分包括常用的9个正交表为:①二水平表: $L_4(2^3)$, $L_8(2^7)$, $L_{12}(2^{11})$;②三水平表: $L_9(3^4)$, $L_{27}(3^{13})$;③四水平表: $L_{16}(4^5)$;④混合水平表: $L_8(4 \times 2^4)$, $L_9(2 \times 3^3)$, $L_{18}(2 \times 3^7)$ 。这些表具有正交试验安排、结果分析的直观分析法和方差分析

法等功能。

正交试验安排模块能根据用户进行试验的因子数、因子的水平数和因子间的交互作用,为用户推荐出既能满足要求,试验次数又最少的正交表,并且根据系统提供的表头设计,进行一系列的人机对话,完成因子安排,保证不会发生混杂现象。最后,可根据用户的要求打印输出若干份试验设计结果,包括正交表和试验方案等。

结果分析包括直观分析法和方差分析法。直观分析法模块能对用户的试验结果进行一系列的分析计算,检验出各因子及交互作用对性能影响的大小,确定最佳水平组合

和最佳水平组合预测值。方差分析模块是根据用户选定的显著性水平, 对各因子及其交互作用进行显著性检验, 从而确定最佳水平组合和最佳水平组合预测值。

分析结果可按用户的要求打印输出若干份。直观分析法的打印结果包括正交计算表、各因子与交互作用显著性排列和最佳水平组合与最佳水平组合预测值。方差分析法的打印结果包括正交计算表、方差分析表和最佳水平组合与最佳水平组合预测值。

3 CAR 系统的回归分析法部分

一般说来, 正交试验法只能定性地分析相关变量之间的关系, 要建立变量之间的定量关系(也就是常说的配经验公式问题), 就要应用回归分析法。回归分析法是研究相关关系的一种有力数学工具, 它是建立在对客观事物进行大量试验和观察的基础上, 用来寻找隐藏在那些看似不确定的现象中的统计规律性的一种数理统计方法。

在回归分析中, 一般要解决以下一些问题: ①从一组数据出发, 确定变量之间是否存在相关关系, 如果存在, 就需要确定它们之间的定量关系表达式(回归方程式), 并对它的可信程度作统计检验; ②从共同影响着某一变量的诸多变量中, 判别哪些变量的影响是显著的, 哪些是不显著的; ③利用所找到的回归方程式对变量进行预测和控制。回归分析所用的基本方法是最小二乘法。

正交试验法和回归分析法过去曾是相互独立的数学分支, 长期以来古典的回归分析法只是被动地处理已有的试验数据, 而对如何恰当而正确地安排试验却没有进行考虑。这样不仅会盲目地增加试验次数, 而且得到的试验数据还往往不能提供充分的信息。由于实践的需要和数学工作者的研究, 50 年代以来已把正交试验法和回归分析法结合起来, 发展成回归的正交设计法。

回归的正交设计法一方面利用正交表的

正交性、均衡搭配和综合可比的原则, 可以有计划、合理地在正交表上安排少的试验次数; 另一方面可以通过试验数据, 利用回归分析中最小二乘法原理, 使变量之间建立起经验公式, 并把两者的优点有机结合起来。

CAR 系统的回归分析法部分采用回归分析试验设计的理论和方法(包括回归的正交设计方法), 设置了试验安排模块, 一般有随机设计、等分设计、正交设计和旋转设计等方法供用户选定。

CAR 系统的回归分析法部分有: ①线性回归分析法, 包括一元、二元和三元线性回归分析; ②二次回归分析法, 包括一元、二元和三元二次回归分析; ③逐步回归分析法, 包括多元线性和多元二次回归方程的获取及显著性检验。①和②两部分具有试验安排、回归方程的获取及显著性检验、绘制性能曲线图或等高线图、性能预测和配方优选等功能。这两部分的试验安排在线性回归分析中采用等分设计、正交设计和随机设计 3 种方法, 在二次回归分析中采用正交组合设计、通用旋转组合设计和随机设计 3 种方法。

回归分析法部分的功能是:

(1) 回归分析试验安排。回归分析的试验安排一般有随机设计、等分设计、正交设计和旋转设计等方法。为在性能预测和优选配方过程中排除误差的干扰, 以较少的试验建立精度较高的回归方程, 在线性回归中推荐采用等分设计和正交设计方法; 在二次回归中推荐采用正交组合设计和通用旋转组合设计方法。运行这些模块, 出现菜单时, 用户键入选择, 计算机就按用户选定的设计方法通过人机对话为用户进行试验设计, 并打印出试验方案。

(2) 回归方程的获取及显著性检验。通过对试验结果进行最小二乘法处理得出回归方程, 并由用户指定显著性水平, 对此方程进行显著性检验、拟合性检验和回归系数的显著性检验等, 确定方程和回归系数的显著性。

(3)性能预测。经显著性检验显著的回归方程才能用于预测性能指标值。只要选择了这些功能模块,用户输入感兴趣的变量范围值(超出试验范围的数值,只能作为参考),就能计算出性能指标预测值,并打印出来。它的可靠程度取决于方程显著性检验的显著性水平。

(4)绘制性能曲线图和等高线图。利用经显著性检验显著的回归方程,这些模块能根据用户给定的性能指标值,计算出等于给定性能指标值的点,并绘制出性能曲线图或等高线图(等高线图也可以在AUTOCAD下显示、编辑、绘制和存储)。

(5)配方优选。根据用户的要求,这些模块能优选出符合全部指定性能指标的配方。在此基础上,用户还可根据性能的重要程度,把性能分为关键性能1和关键性能2等,CAR系统则按重要程度的顺序优选出最优配方。

4 CAR系统的特点

综上所述,CAR系统具有下列特点:

(1)CAR系统包含的试验设计理论和方法正确无误,结果可靠。数学方法,特别是涉及数学方法的计算机软件,它们所采用的数学原理、方法的正确性是最重要的。CAR系统的正交试验法和回归分析法两部分的试验设计功能模块都是依据有关专著^[1~3]所述的原理、方法编制的,并且用相关的实例验证。

(2)CAR系统具有的内容和功能(包括试验设计功能和其它功能)比较完善。

(3)CAR系统具有多种灵活的数据管理方式。在CAR系统运行过程中,会生成各种数据(文件)。其中最重要的是:①正交试验方案或回归分析试验方案数据;②根据试验方案做试验所得出的指标数据;③正交试验法或回归分析法的分析结果数据;④回归分析法部分生成的可在AUTOCAD下形成性能曲线图或等高线图等图形的命令组文件

(后缀为SCR)。前3种数据(文件)是CAR系统运行所不可缺少的,其正确性决定了试验设计、分析结果和预测与控制的正谬,且它们之间又有一定的联系。例如,有了试验方案和试验指标数据(文件),CAR系统运行才能得到分析结果数据(文件);在回归分析法部分,分析结果数据(文件)是经显著性检验的回归方程,是继后绘制性能曲线图或等高线图(生成后缀为SCR的命令组文件)、性能预测和配方优选的依据。因此,CAR系统十分重视对这些数据(文件)的管理,使用户应用方便。例如,设立这些数据文件的存储、检查、修改、调用和传递功能;它们的命名由CAR系统自动统一处理,操作方便、不易混乱;试验方案和试验指标数据的输入既可用键盘逐一键入,也可以用数据文件编辑。

(4)CAR系统采用模块结构和菜单技术,具有多种灵活的数据管理方式和输入输出的中文提示,使用十分方便。CAR系统是一个试验设计的应用软件包,其基点是解决试验方案设计和试验数据分析的问题,但是,它对于用户,尤其有关数据文件和试验设计方面的操作都给予明确的提示。

(5)因为AUTOCAD绘图软件包是CAR系统的支撑软件之一,因此性能曲线图或等高线图也可在AUTOCAD状态下显示、编辑、绘制和存储。

(6)CAR系统的研究者既有橡塑专业教师,也有高分子材料合成和加工的科技人员,这个软件首先是为教学和科研服务的。实践证明它完全适合辅助橡胶、塑料、胶粘剂等的配方设计和试验,并适用于多因素试验设计和分析^[6,7]。

(7)如果用户有特定要求,可协商在CAR系统中添加新内容。由于篇幅所限,有关CAR系统的应用请见另文^[6,7]。

参考文献

1 北京大学数学力学系数学专业概率统计组. 正交设计

- 一种安排多因素试验的数学方法. 北京: 人民教育出版社, 1976. 1~206
- 2 《正交试验法》编写组. 正交试验法. 北京: 国防工业出版社, 1976. 1~174
- 3 中国科学院数学研究所统计组. 常用数理统计方法. 北京: 科学出版社, 1973. 34~118
- 4 上海师范大学数学系概率统计组. 回归分析及其试验设计. 上海: 上海教育出版社, 1978. 1~93, 141~211
- 5 方开泰, 全 辉, 陈庆云. 实用回归分析. 北京: 科学出版

社, 1988. 20~103, 204~232

- 6 姚钟尧, 林惠音. 计算机辅助试验研究系统的应用. 见: 中国化工学会橡胶专业委员会. 计算机在橡胶工业中的应用研讨会论文集. 杭州: 中国化工学会橡胶专业委员会, 1996. 185
- 7 姚钟尧, 林惠音. 计算机辅助试验研究系统应用示例. 粘接, 1996. 17(6): 23

第九届全国轮胎技术研讨会论文

Computer Aided Research System and Experimental Design

Yao Zhongyao and Lin Huiyin

(South China University of Science and Technology, Guangzhou 510641)

Abstract The Computer Aided Research (CAR) System is a software package for perpendicular experimental design and regression analysis. It features perfect functions, flexible data process and ease of use. The perpendicular experimental design consists of experiment planning, visual analysing and meansquare deviation analysing functions. The regression analysis includes a number of functions, such as linear regression analysis, second regression analysis, progressive regression analysis, regression experiment planning, regression equation acquiring and its remarkability examination, performance prediction, characteristic curve or contour line plotting and formula optimization. CAR system is an aid suitable for the formula design and experiment of rubber, plastics and adhesive.

Keywords computer aided research, experimental design, perpendicular experimental design, regression analysis

《合成材料老化与应用》征订启事

本刊原名为《老化与应用》, 经国家科委批准, 从 1994 年第 3 期起更名为《合成材料老化与应用》。

本刊系由化工部合成材料研究院主办, 向国内外公开发行人。是全国唯一报导合成材料老化与应用的科技刊物。主要报导塑料、橡胶、涂料、合成纤维、粘合剂等合成材料的老化试验和应用成果, 包括防老化配方设计、加速老化试验、寿命估算、老化试验方法标准化、分析测试方法、稳定剂和其它助剂效能评价, 以及合成材料的加工应用、材料改性、复合材料、功能材料开发等内容, 并注意报导新

理论、新技术、新方法、新工艺、新材料、新产品的开发与进展情况。

本刊为季刊, 全年订价为 20 元 (含邮费), 国内统一刊号: CN 44-1402/TQ。订阅办法: (1) 订户可通过银行汇款至: 中国工商银行广州市庙前直街支行 (广州东山庙前直街 15 号) 化工部合成材料研究院财务处, 帐号: 010-0264-0017131, 汇款时必须写清楚汇款人的邮码、地址、单位、姓名; (2) 填写征订单, 然后把发行凭证剪下寄回本刊编辑部。

编辑部地址: 广州市天河区中山大道棠下化工部合成材料研究院内。邮码: 510665

《合成材料老化与应用》编辑部