arXiv:2601.05396v1 [stat.ME] 8 Jan 2026

用于降低注塑成型翘曲的实验参数不确定性分析

Yezhuo Li*[1]、Fan Zhang†[2]、Dhanashree Shinde[3,4], Qiong Zhang‡[1]、Sai Pradeep[3],Srikanth Pilla[3,4,5,6], 和 Gang Li[7]

[1]克莱姆森大学数学与统计科学学院[2]博伊西州立大学数学系[3]特拉华大学复合材料中心

[4]特拉华大学材料科学与工程系[5]特拉华大学机械工程系

[6]特拉华大学化学与生物分子工程系

[7]克莱姆森大学机械工程系

*本研究的部分内容基于 Yezhuo Li 在克莱姆森大学的博士论文。

†前两位作者对本研究贡献相同。

‡通讯作者：qiongz@clemson.edu

摘要

注塑成型是一项关键的制造工艺，但由于复杂的热力学相互作用，控制翘曲仍然是一项重大挑战。基于仿真的优化被广泛用于应对这一问题，但传统方法通常忽视模型参数中的不确定性。本文提出了一种数据驱动框架，用于最小化翘曲并量化最优工艺设定的不确定性。我们采用多项式回归模型作为盒状零件注塑成型仿真的代理模型。通过采用贝叶斯框架，我们估计回归系数的后验分布。该方法能够生成最优决策的分布，而非单一的点估计，从而提供解的鲁棒性度量。此外，我们开发了一种基于蒙特卡洛的边界分析方法。该方法为响应面的零水平集构建置信带，有助于直观呈现翘曲在凸轮廓与凹轮廓之间转变的区域。我们应用这一框架优化四个关键工艺参数：模具温度、注射速度、保压压力和保压时间。结果表明，我们的方法能够找到稳定的工艺设定，并清晰标示参数空间中的缺陷边界。

关键词：响应面方法；决策不确定性估计；置信带；贝叶斯线性回归。

1. 引言

塑料注塑成型（IM）是一种应用广泛的制造工艺，因其成本效益高、设计灵活且生产速度快而备受采用（Zhao 等，2022；Farahani 等，2022；Pradeep 等，2024）。该工艺常用于汽车行业、电子行业和消费品领域的热塑性塑料部件生产（Lavaggi 等，2022；Zarei 等，2022）。注塑成型工艺通常包含三个关键的热机械阶段：充填、保压和冷却。由于热塑性塑料具有黏弹性，

这些阶段中的温度和压力变化可能会产生内部残余应力，进而降低零件质量并导致各种缺陷。

在这些缺陷中，翘曲是由不均匀收缩引起的一种主要尺寸变形。这种不均匀性通常源于温度梯度不均、保压阶段压力过大，或冷却过程中聚合物链的应力松弛程度不同（Mohan 等人，2017；Wang 等人，2018；Farahani 等人，2022）。为减轻翘曲，许多研究致力于优化能够控制残余应力分布并减少翘曲的关键工艺条件（Kuo 和 Xu，2022）。实际实验可能耗时且成本高昂。因此，基于仿真的研究在指导实际实验设计方面发挥着关键作用，因为它们能够以相对较低的成本和风险，系统地探索参数空间。然而，翘曲敏感性往往取决于零件几何形状、浇口配置和局部厚度变化。因此，仍有必要针对具体案例开展研究，以制定适用于不同实际产品设计的指导方针。

本文研究了一个改编自 Gim 等人（2024）的盒形几何结构，该结构可作为外壳类部件的代表性模型，常用于消费品和汽车应用。我们采用商业注塑成型仿真软件 Moldex3D，对四个重要工艺参数下的翘曲行为进行建模：模具温度、注射速度、保压压力和保压时间。图 1 左侧面板展示了盒形几何结构的详细零件设计，其尺寸为宽 100 mm $\times$ 75 mm（长）$\times$ 45 mm（深）。该零件设计采用中央主流道浇口，并包含两种不同的壁厚配置。较短的两侧对向侧壁厚度均为 2 mm，分别称为水平向左和水平向右。一侧边缘设有从 3.5 mm 过渡至 2 mm 的阶梯过渡，以引入局部几何变化。较长的侧壁称为垂直向上和垂直向下，其厚度减至 1.25 mm。

如图 1 右侧面板所示，翘曲是指表面位移

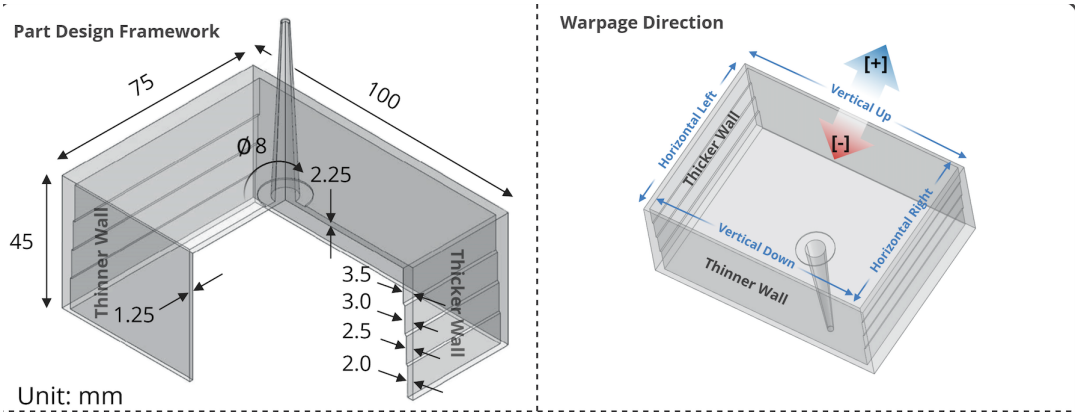


图 1：左：测试几何体的 CAD 模型，突出显示尺寸细节，包括 1.25 mm 和 2 mm 的非对称壁厚。右：翘曲方向命名法和符号约定根据表面位移分为正（凸）或负（凹）。

沿四面墙的正向（凸面）或负向（凹面）方向发生的位移。理想情况下，四面墙的位移指标都应接近于零。科学问题在于找到能够降低整体翘曲的参数设置。因此，我们的目标函数是最小化四面墙位移指标平方和

$$(displacement\ on\ horizontal\ left)^2 + (displacement\ on\ vertical\ down)^2 + (displacement\ on\ horizontal\ right)^2 + (displacement\ on\ vertical\ up)^2 \quad (1)$$

，关于工艺参数——模具温度、注射速度、保压压力和保压时间。此外，相关的科学目标是确定参数空间中的边界，这些边界可区分每种壁厚对应的正（凸）位移区域和负（凹）位移区域。

注塑成型工艺的仿真没有闭式表达式。因此，我们无法直接评估目标函数（1）的最优参数设置。本文从数据驱动视角解决这两个科学问题。给定一组通过运行仿真收集的输入和输出数据，我们拟合多项式回归模型，分别近似四面墙的位移指标。通过

将贝叶斯框架应用于多项式回归模型，我们对最优决策进行不确定性分析。此外，基于贝叶斯多项式模型，我们提出了边界分析与可视化框架，以解决第二个科学问题。我们的方法与将多项式近似模型应用于实验数据的思路基本一致；这一框架源自响应面法（RSM）的经典文献（Myers 和 Montgomery，1996）。响应面法已广泛应用于各类工程学科，利用实验数据构建预测模型并优化系统。例如，制造工程采用响应面法来建模切削速度等工艺参数如何影响表面粗糙度等质量响应，从而帮助确定最优操作窗口（Noordin 等，2004）。同样，在化学工程中，响应面法用于对反应温度和催化剂浓度等工艺条件进行数值优化，以提高最终产品产率（Hamze 等，2015）。近期，Li 等（2025）针对制造业中的固化工艺，在高斯过程代理模型下提出了最优决策的贝叶斯不确定性估计。然而，这些现有方法无法直接解决我们的两个科学目标。

本文其余部分安排如下。第2节介绍采用多项式回归模型估计决策不确定性的所提方法。第3节通过边界分析，估计由参数不确定性引起的决策不确定性。第4节将所提方法应用于 IM 仿真实验；第5节总结全文。

2. 使用多项式代理模型估计决策不确定性

考虑一个复合优化问题

$$\boldsymbol{x}^* \in \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{x}\in\mathcal{X}} G(\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})), \tag{2}$$

其中，$\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_d)^\top \in \mathcal{X} \in \mathbb{R}^d$ 是 d 维决策变量，

$$\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}) = (y_1(\boldsymbol{x}), \ldots, y_m(\boldsymbol{x}))^\top$$

是仿真输出向量，其分量是输入 $\boldsymbol{x}$的黑箱函数；$G(\cdot)$是具有已知闭式表达式的函数。对于注塑成型工艺中的翘曲减小应用，$\boldsymbol{x}$ 是一个四维向量，包含实验参数：模具温度、注射速度、保压压力和保压时间；$\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})$是一个四维向量，包含图 1 中四面墙的位移指标；目标函数 $G(\cdot)$是各位移的平方和

$$G(\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})) = \sum_{l=1}^{m} y_l^2(\boldsymbol{x}) \tag{3}$$

如式 (1) 所示。

我们的目标是基于有限的仿真运行预算评估最优决策，并对最优决策进行不确定性估计。我们分别使用多项式回归模型来替代各个仿真输出。设 $\mathcal{D} = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n\}$ 为输入点的集合，$\boldsymbol{y}_l = (y_l(\boldsymbol{x}_1) \ldots, y_l(\boldsymbol{x}_n))^\top$ 为一个向量，用于收集 $l = 1, \ldots, m$ 对应的第 l 个仿真输出。多项式模型可表示为

$$\boldsymbol{y}_l = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\beta}_l + \boldsymbol{\epsilon}_l, \quad \text{for} \quad l = 1, \ldots, m \tag{4}$$

其中， $\boldsymbol{P}$ 是由 $\mathcal{D}$ 的多项式函数构造的 $n \times p$ 设计矩阵：

$$\boldsymbol{P} = \left[\boldsymbol{p}^\top(\boldsymbol{x}_1), \boldsymbol{p}^\top(\boldsymbol{x}_2), \cdots, \boldsymbol{p}^\top(\boldsymbol{x}_n)\right]^\top$$

其中， $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x})$表示关于 $\boldsymbol{x}$ 的 p维多项式函数（包括截距项）。线性系数 $\boldsymbol{\beta}_l$ 是一个大小为 p 的向量， $\boldsymbol{\epsilon}_l = (\epsilon_{l1}, \cdots, \epsilon_{ln})^\top$ 是误差向量，其各项独立同分布，服从均值为零、方差为 σ_l^2的正态分布。也可以考虑不同输出之间 $\boldsymbol{\epsilon}_l$ 的相关性，例如对于 $l = 1, \ldots\ldots, m$。对于本文研究的注塑成型应用，在剔除线性模型所解释的影响后，数据并未提供有力证据支持更复杂的相关结构。因此，我们针对每个输出分别拟合多项式回归模型，不对不同方向之间的误差相关性进行建模。在多项式回归模型的假设下，系数向量 $\boldsymbol{\beta}_l$ 的普通最小二乘估计量（OLS）为$\hat{}\boldsymbol{\beta}_l = \left(\boldsymbol{P}^\top \boldsymbol{P}\right)^{-1} \boldsymbol{P}^\top \boldsymbol{y}_l$，其中 $l = 1, \ldots\ldots, m$。式（2）中最优决策的估计值为

$$\hat{\boldsymbol{x}}^* \in \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}} G\left[\boldsymbol{p}^\top(\boldsymbol{x})\hat{\boldsymbol{\beta}}_1, \ldots, \boldsymbol{p}^\top(\boldsymbol{x})\hat{\boldsymbol{\beta}}_m\right]. \tag{5}$$

鉴于式（3）中注塑成型应用的 $G()$ 形式，目标函数是关于 $\boldsymbol{x}$的多项式函数。因此，式（5）中的代理优化问题简化了式（2）中的原始问题。

在贝叶斯框架下进行线性回归，可以估计式 (5) 给出的最优决策的不确定性。我们为 $\boldsymbol{\beta}_l$ 指定一个非信息先验，使得 $p(\boldsymbol{\beta}_l) \propto 1$，并为 σ_l^2 指定一个独立的杰弗里斯先验，即 $p(\sigma_l^2) \propto \sigma_l^{-2}$。给定 σ_l^2 时， $\boldsymbol{\beta}_l$ 的后验分布服从多元分布

$$\boldsymbol{\beta}_l \mid \boldsymbol{y}_l, \sigma_l^2 \sim \mathcal{MVN}\left(\hat{\boldsymbol{\beta}}_l, \sigma_l^2 (\boldsymbol{P}^\top \boldsymbol{P})^{-1}\right), \tag{6}$$

其中 σ_l^2 的后验分布为 $\sigma_l^2 \mid \boldsymbol{y}_l \sim$ 逆伽马分布 $\left(\frac{n}{2}, \frac{1}{2}\|\boldsymbol{y}_l - \boldsymbol{P}\hat{\boldsymbol{\beta}}_l\|^2\right)$，并且

$$\hat{\sigma}_l^2 = \frac{\|\boldsymbol{y}_l - \boldsymbol{P}\hat{\boldsymbol{\beta}}_l\|^2}{n-p} \tag{7}$$

是 σ_l^2 的最大后验估计量（Pishro-Nik，2014）。 $\boldsymbol{\beta}_l$ 的后验不确定性会导致式（2）中最优决策的不确定性。我们可以通过数值方法评估这种不确定性。将最大后验估计量代入式（6），记 $\boldsymbol{\beta}_l^{(i)}$ 为 l =1、……、m 和 $i = 1$、……、R，它们是来自多元正态分布的 $\boldsymbol{\beta}_l$ 实现值。对于 $i = 1$、……、R，我们得到

$$\boldsymbol{x}^{(i)} \in \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{x}\in\mathcal{X}} G\left[\boldsymbol{p}^\top(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\beta}_1^{(i)}, \ldots, \boldsymbol{p}^\top(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\beta}_m^{(i)}\right]. \tag{8}$$

集合 $\{\boldsymbol{x}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{x}^{(R)}\}$ 给出了最优决策的分布，因此可用于评估模型假设下由数据导致的决策不确定性。

示例 1。 我们通过一个简化的制造业示例来阐释这一思路。该示例考虑了 Li 等（2025）研究的热固性树脂基纤维增强复合材料层合板的固化过程。优化问题旨在固定固化周期的所有其他参数，同时调整第一阶段的终止温度，以尽量减小残余应力引起的变形。我们将变形 $y(x)$ 建模为温度 $x \in [T_1, T_2]$ 的二阶多项式：

$$y(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \epsilon, \tag{9}$$

通过将线性模型拟合到 Li 等（2025）的仿真数据，我们基于二次函数的多个实现值，得到了最优决策 x^* 的不确定性集合；这些函数的系数取自后验分布。所得的 x^* 不确定性集合如图 2 所示。利用该集合，我们估计最优

温度的概率密度，并构建了如图3所示的 95%置信区间。从实践角度来看，这些结果表明，将固化温度保持在 133 至 135 之间，有助于最大限度地减少固化工艺中的变形。

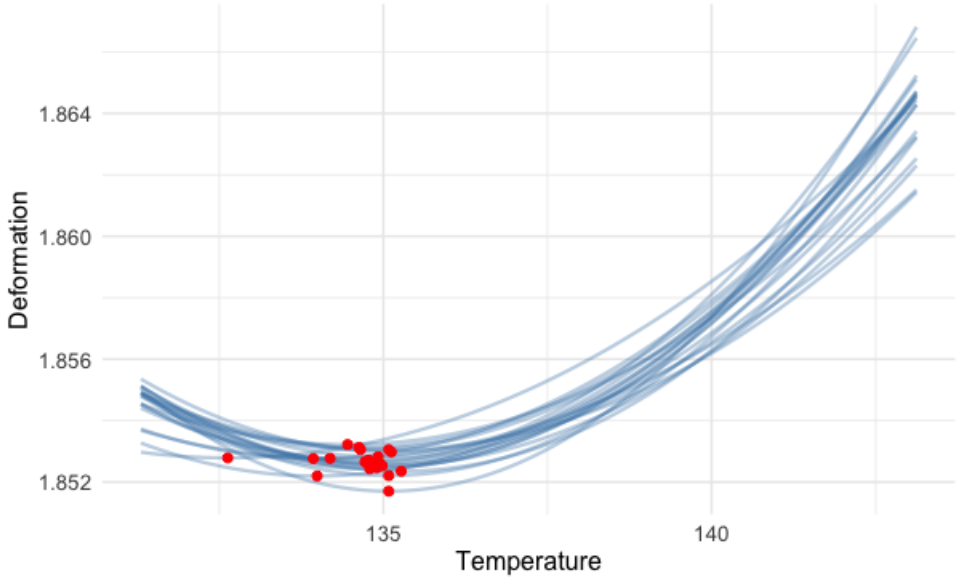


图 2：式（9）中多项式模型的二次函数（蓝线）多种实现值及其对应的最优决策（红点）。

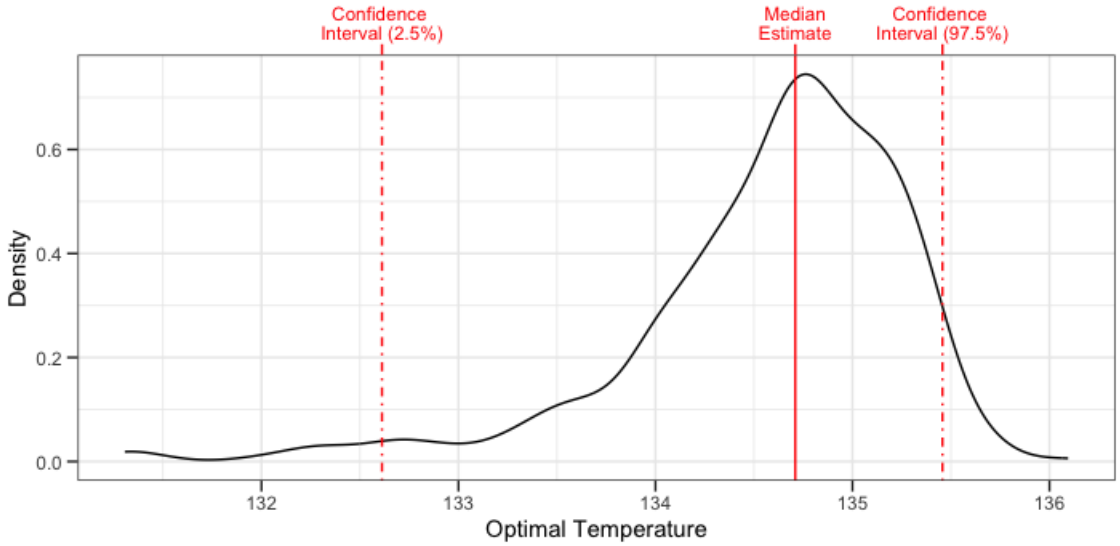


图3：不确　定性集合（8）在多项式模型（9　　).

3. 带不确定性的边界分析

上一节介绍的方法可用于对使总体变形最小的参数设置进行不确定性分析。本节针对每个结果，研究参数空间中区分正位移区域与负位移区域的边界，并构建边界的置信带，以进行不确定性量化。

我们的目标是针对每个方向，在整个参数空间中找到凹位移与凸位移的边界；也就是说，对于 $l = 1, \ldots, m$，我们感兴趣的是确定边界

$$\partial \mathcal{X}_l = \{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X} \mid y_l(\boldsymbol{x}) = 0\}$$

其中 ∂ 表示集合的边界。我们还旨在标记 $\mathcal{X}$ 中的区域，使其具有

$$\mathcal{X}_l^+ = \{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X} \mid y_l(\boldsymbol{x}) \geq 0\} \quad \text{and} \quad \mathcal{X}_l^- = \{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X} \mid y_l(\boldsymbol{x}) \leq 0\}.$$

边界也可能不存在于参数空间 $\mathcal{X}$中，而 $\mathcal{X}$ 是 $\mathcal{X}_l^+$或 $\mathcal{X}_l^-$的子集。我们利用式（4）中的多项式代理模型 $\hat{}$ 进行边界分析。根据拟合模型系数 $\boldsymbol{\beta}_l$，我们可以得到估计边界

$$\widehat{\partial \mathcal{X}}_l = \{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X} \mid \boldsymbol{p}^\top(\boldsymbol{x})\hat{\boldsymbol{\beta}}_l = 0\},$$

据此可以得到估计的正区域和负区域。

为量化边界的不确定性，我们将误差容限为 $\varepsilon > 0$ 的 $\partial \mathcal{X}_l$ 的 $100 \times (1-\alpha)\%$ 置信带定义为

$$\mathcal{C}_l(\alpha, \varepsilon) = \left\{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X} : \mathbb{P}\left(\left|\boldsymbol{p}^\top(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\beta}_l\right| < \varepsilon \middle| \boldsymbol{y}_l\right) \geq 1 - \alpha\right\}$$

给定式 (6) 中 $\boldsymbol{\beta}_l$ 的后验分布。对于多项式曲面，这种反演通常

会得到更复杂、难以用解析方式描述的区域。为此，我们采用蒙特卡罗方法。这种基于模拟的方法可以通过从回归系数的后验分布中抽样，直接近似边界不确定性。因此，我们使用来自 $\boldsymbol{\beta}_l$ 后验分布的实现值 $\boldsymbol{\beta}_l^{(i)}$ ’来近似。令

$$y_l^{(i)}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{p}^\top(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\beta}_l^{(i)},$$

我们可以通过实现值 $y_l^{(i)}$ **(**$\boldsymbol{x}$**)** 定义边界

$$\partial\mathcal{X}_l^{(i)} = \{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X} \mid y_l^{(i)}(\boldsymbol{x}) = 0\}$$

对于 $i = 1, \ldots R$，如式 **(8)** 所示。我们近似计算置信带

$$\hat{\mathcal{C}}_l(\alpha, \varepsilon) = \left\{ \boldsymbol{x} \in \mathcal{X} : \left| \frac{y_l^{(i)}(\boldsymbol{x})}{\sigma_l^y(\boldsymbol{x})} \right| \leq \varepsilon \text{ for at least } (1-\alpha)\text{of samples } i \right\},$$

其中

$$\sigma_l^y(\boldsymbol{x}) = \sqrt{\hat{\sigma}_l^2 \boldsymbol{p}^\top(\boldsymbol{x})(\boldsymbol{P}^\top\boldsymbol{P})^{-1}\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x})}.$$

我们使用缩放项 $1/\sigma_l^y$ **(**$\boldsymbol{x}$**)** 对预测不确定性进行标准化。在回归模型中，预测误差并非处处相同，通常取决于 $\boldsymbol{x}$ 的位置。将响应值除以其标准差后，我们便可将其转换为标准化尺度。参数 ε 充当阈值，用标准差单位控制置信带的宽度。较大的 ε 会形成更宽的置信带，从而涵盖更多不确定性。

值得注意的是，所提出的方法不同于解析的同时置信带，例如 Scheff´e 方法（Bohrer，1967）。这些方法用于量化响应 y**(**$\boldsymbol{x}$**)** 的不确定性，而我们的目标是刻画输入空间 $\boldsymbol{x}$ 中边界的不确定性。

示例说明 例2。 我们通过一个输出为一维、输入为二维 $\boldsymbol{x} = (x_1,\ x_2)^\top$ 的合成示例来说明边界分析方法:

$$y(\boldsymbol{x}) = -82.17 - 2.01x_1 - 1.61x_2 + 2.4x_1^2 + 3.76x_2^2 - 1.2x_1x_2 + \epsilon,$$

其中 $x_1,\ x_2 \in [-10, 10]$ 误差项 ϵ 服从均值为零、方差为 σ^2 的正态分布。方差 σ^2 取自伽马分布，其形状参数为 $\alpha = 2$ ，率参数为 $\beta = 1$。我们采用拉丁超立方设计（Loh，1996），进行 500 次运行以生成输入，并获得相应的输出。我们按照第2节所示，使用二阶多项式回归模型拟合数据。基于拟合模型，我们生成 $R = 500$ 个 $y^{(i)}(\boldsymbol{x})$ 实现值，并针对不同的容差值 ε 构建 95% 置信带。

图 4 展示了二次代理模型在标准化容差 $\varepsilon = 1.5$，2。0，2。5 和 3。0 时的四组基于蒙特卡洛的置信带。每个ˆ子图中，蓝色虚线等高线表示近似置信带 $\mathcal{C}(\alpha,\ \varepsilon)$。$\widehat{\ }$紫色实线表示近似边界 $\partial\mathcal{X}$，绿色实线表示真实边界 $\partial\mathcal{X}$，灰色曲线则描绘了随机选取的十个后验样本 $\partial\mathcal{X}_{(i)}$ 。图 4 展示了置信带如何随不同的 ε 值而变化。随着 ε 增大，置信带覆盖的面积也随之增大。较小的 ε 会形成较窄的置信带和较紧密的边界；较大的 ε 则会形成较宽的置信带和较松散的边界。用户需要根据自身需求调整 ε 。

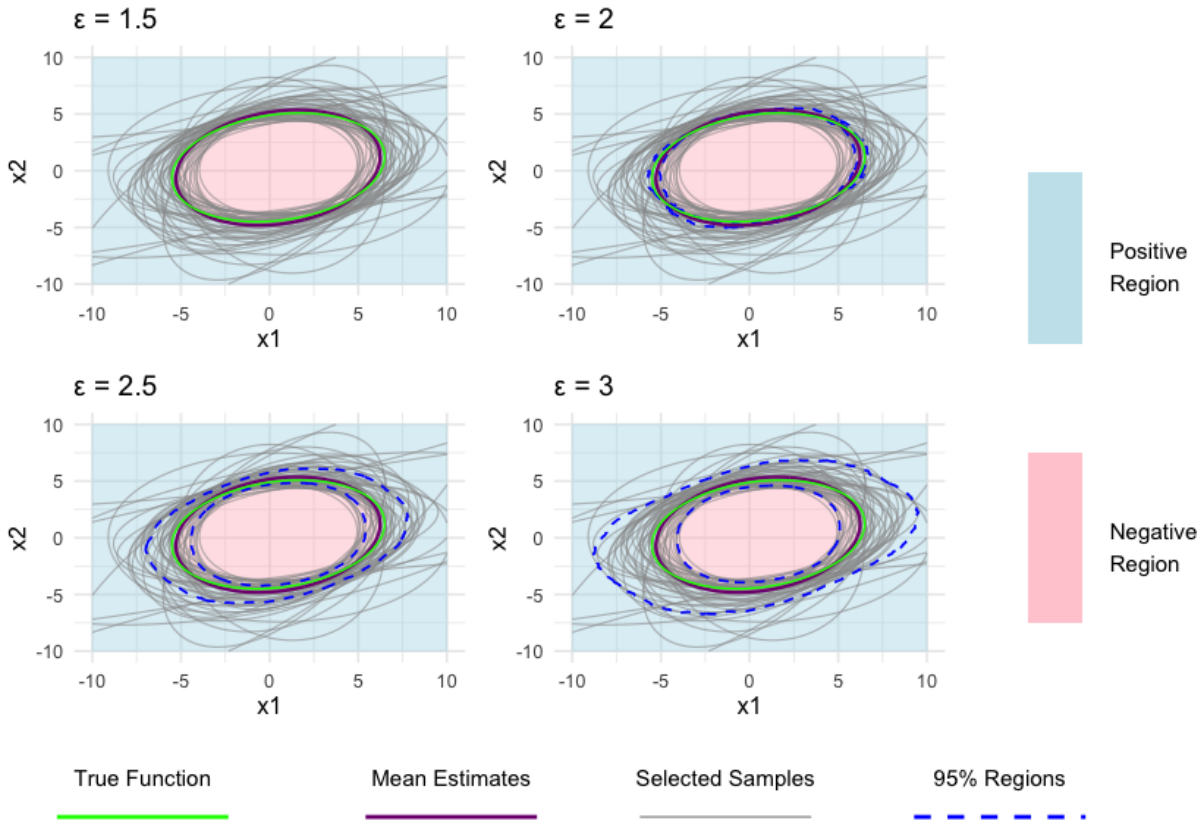


图4：例2中二次代理模型在四种标准化容差下的基于蒙特卡洛的置信带组图。每个子图显示了近似满足 $\mathbb{P}\left(|y(x_1,\ x_2)/\sigma_y(x_1,\ x_2)| < \varepsilon\right) \geq 0.95$ 的95%边界（蓝色虚线等高线），其中 ε 分别等于1.5、2.0、2.5和3.0个标准差。紫色实线曲线表示后验均值零水平集，绿色实线曲线表示原始真实函数的零水平集，灰色曲线表示十个随机后验样本零水平集。

4. 注塑成型应用

我们将所提出的不确定性分析方法应用于图 1 所示的注塑成型仿真。在商业注塑成型软件 Moldex3D 中，使用四个输入参数的 57 种不同组合，共进行了 57 次仿真运行。采用 Moldex3D 中带有翘曲模块的瞬态冷却分析，以捕捉由此产生的变形行为。对四个指定壁面分区（水平方向向左、水平方向向右、垂直向上和垂直向下）的翘曲进行了定量

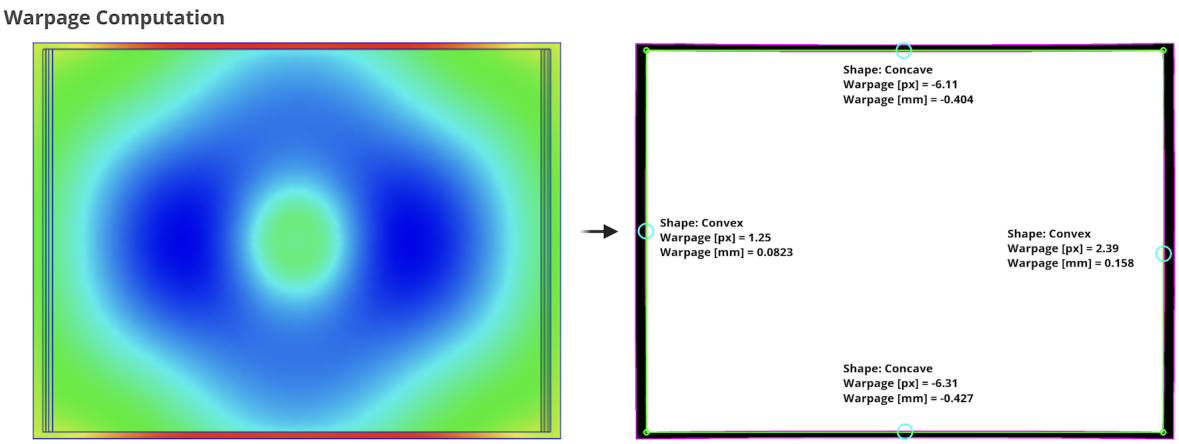


图5：对 Moldex3D 生成的后处理二维翘曲等高线图像进行分析，将像素转换为变形单位，即毫米。

采用计算机视觉技术进行评估，如图5所示。所有输入变量和输出变量的范围汇总于表1。

表1：注塑成型仿真的输入参数和输出参数汇总

参数	**范围**	**Unit**
输入参数		
模具温度	30–50	°C
注射速度	22.5–67.5	mm/s
保压压力	400–600	MPa
保压时间	1.0–4.5	s
输出响应		
水平向左	$[-1.134,\ 1.632]$	mm
水平向右	$[-1.087,\ 1.661]$	mm
垂直向上	$[-0.971,\ 0.426]$	mm
垂直向下	$[-1.046,\ 0.415]$	mm

按照第2节中引入的符号表示，四维输入向量记为

$$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^\top,$$

相应的四维输出向量记为

$$\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}) = \big(y_1(\boldsymbol{x}),\ y_2(\boldsymbol{x}),\ y_3(\boldsymbol{x}),\ y_4(\boldsymbol{x})\big)^\top. \tag{10}$$

本研究的目标有两个方面。首先，我们旨在确定能使四个壁面方向上的总体变形最小化的最优参数设置：

$$\boldsymbol{x}^{*} \in \arg\min_{\boldsymbol{x}\in\mathcal{X}} \sum_{l=1}^{4} y_l^2(\boldsymbol{x}),$$

并量化与该最优解相关的不确定性。其次，对于每个方向 $l = 1$，2，3，4，我们旨在确定输入空间中区分正位移和负位移的边界，定义如下

$$\partial\mathcal{X}_l = \{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X} \mid y_l(\boldsymbol{x}) = 0\},$$

并围绕该边界构建置信带，以表征相关的不确定性。

按照第2节的方法，我们针对四个响应变量分别拟合了二阶多项式回归模型。表2列出了各模型的决定系数（R^2）。结果表明，拟合模型能够为仿真输出提供准确、可靠的代理模型。基于这些模型，式（5）中的最优决策为 $\hat{\boldsymbol{x}}^{*} = (43.256,\ 49.297,\ 437.282,\ 4.500)^{\top}$，分别对应模具温度、注射速度、保压压力和保压时间。由此得到的最小位移平方和为 0.00034 mm^2。如第2节和第3节所示，后续的决策不确定性估计和边界分析同样基于这些模型。

表2： R^2 各输出的二阶多项式回归模型 t

水平向左（y_1）	水平向右（y_2）	垂直向上（y_3）	垂直向下（y_4）
0.93	0.94	0.90	0.93

决策不确定性估计 按照第2节所述的决策不确定性估计流程，我们生成了拟合模型的1,000个实现值，并获得了

使用L-BFGS-B优化算法（Byrd等人，1995年）得到的相应最优解分布，从而形成最优决策分布的蒙特卡洛样本。图6展示了基于蒙特卡洛抽样得到的各输入维度中最优解的边际分布。实红线表示最优解的中位数，虚线表示第25和第75百分位数，反映中位数周围的变异性。通过分析这些分布，我们可以量化与各输入变量相关的不确定性，并评估在不同实现值下所推荐的最优参数设置的稳健性。

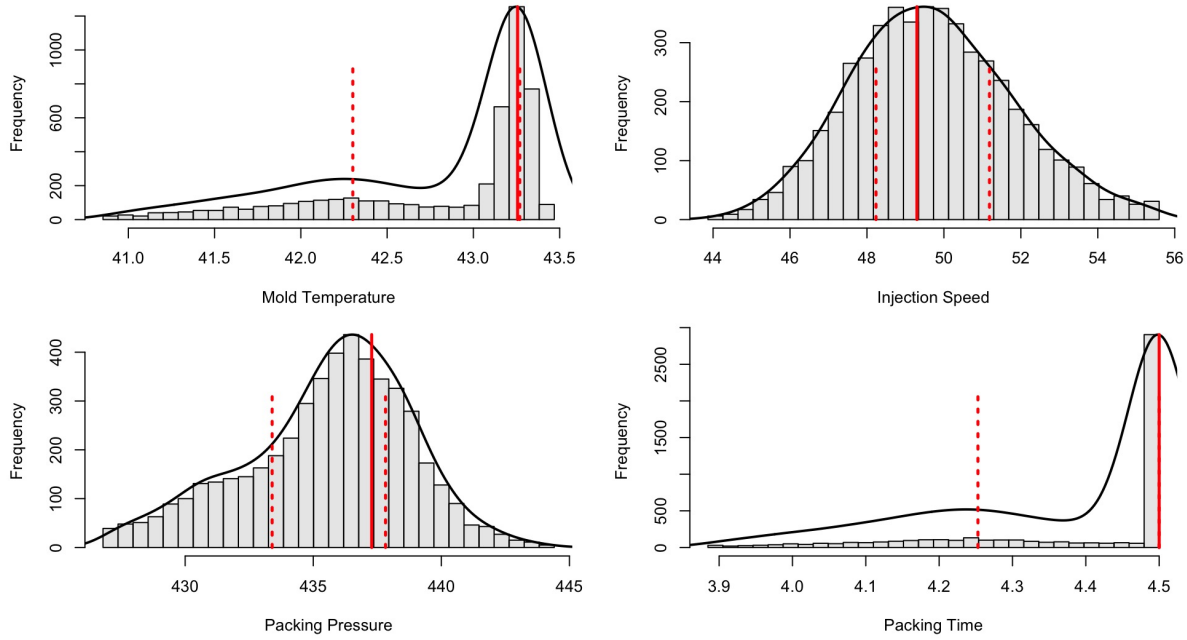


图6：根据决策不确定性估计程序得出的四个输入变量的边际分布。红色实线表示最优解的中位数，虚线表示第25和第75百分位数。

为了直观展示目标函数的行为，我们考察总翘曲量的响应面。图7展示了式（10）中位移平方和随注射速度和保压压力变化的等高线图。在该图中，模具温度和保压时间固定为图6中的最优中位数值。颜色渐变表示翘曲程度，较深的区域代表数值较低。图中显示，

最优区域周围存在一个清晰的盆地。这证实目标函数稳定，且所确定的解位于翘曲最小的区域。

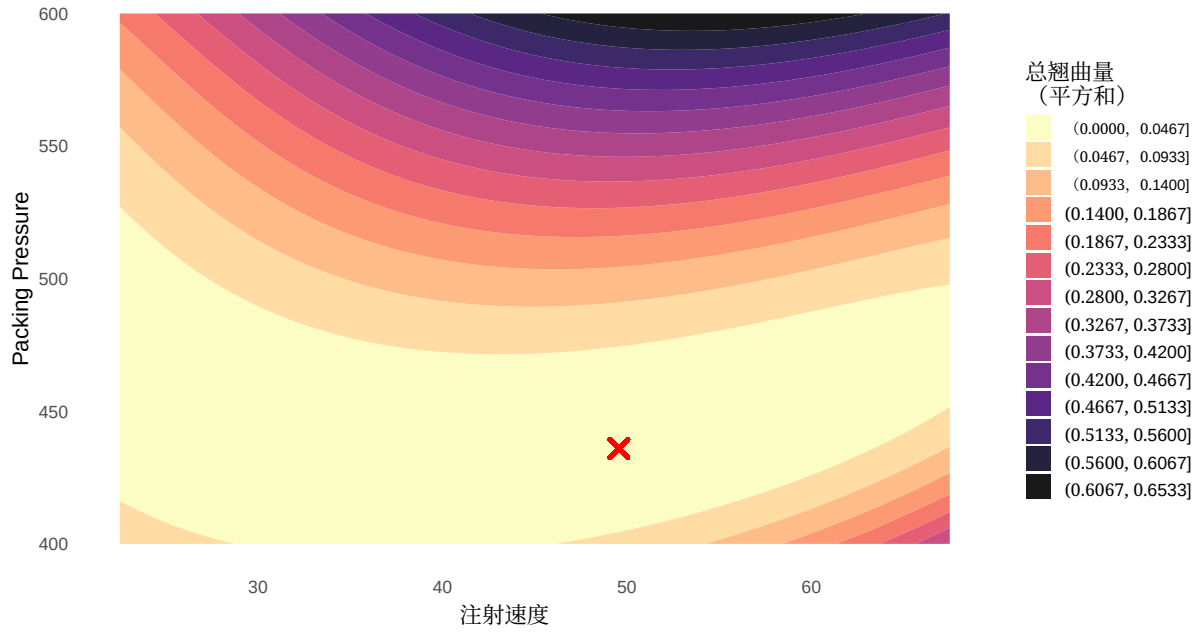


图7：目标函数 (10) 关于注射速度和保压压力的预测等高线图。模具温度和保压时间固定为其中位数最优值。红色叉号表示中位数最优解的位置，该位置与翘曲最小区域（深色谷地）相吻合。

不确定性边界分析 为进一步量化注塑成型代理模型优化中的不确定性，我们将第3节所述的边界分析方法应用于仿真数据。具体而言，我们为翘曲结果的代理模型构建基于蒙特卡洛的置信带，以可视化预测响应不确定性最大的区域。

边界的可视化只能在二维输入空间中进行。因此，在本分析中，我们将四个工艺变量中的两个（即模具温度和保压时间）固定在各自的最优设定值，以此展示结果，如图6所示。通过改变其余两个变量——注射速度和保压压力——来观察边界行为。下文中，我们分别用 x_2 和 x_3 表示注射速度和保压压力。对于四个响应中的每一个，我们使用拟合的二次回归

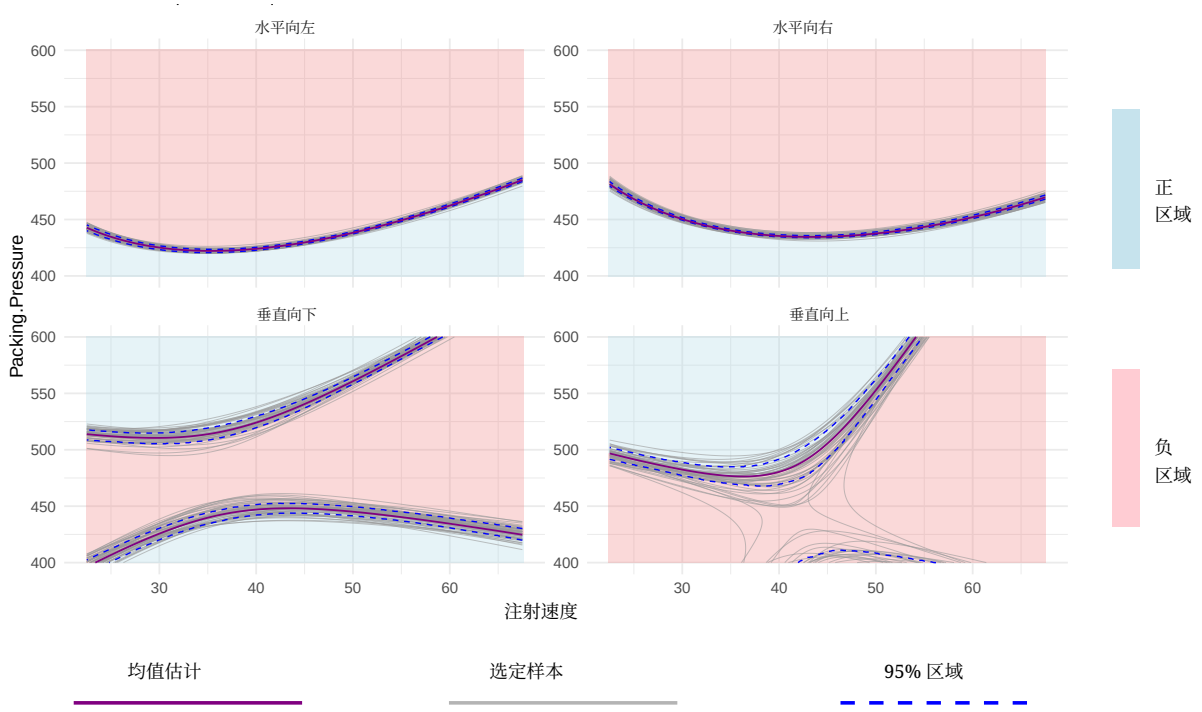


图 8：基于蒙特卡洛方法的注塑成型数据 95% 置信带，采用标准化容差。每条蓝色虚线等高线表示满足 $P\big(|y_k(x_2,x_3)/\sigma_{y_k}(x_2,x_3)| < \varepsilon\big) \geq 0.95, \varepsilon = 2.5$ 的区域。紫色曲线为均值估计零水平集，灰色曲线为来自后验的二十个样本零水平集。

模型在注射速度和保压压力范围内生成密集网格。在每个网格点，我们从回归系数的后验分布（如第2节所述）中进行抽样，计算预测响应，并用其后验标准差对每个预测值进行标准化。通过重复这一过程进行大量抽样，我们估计每个点上的标准化响应满足 $|y_k(x_2, x_3)/\sigma_{y_k}(x_2, x_3)| < \varepsilon$ 的概率。

图 8 中的边界图显示了经验覆盖概率所在的区域

$$\mathbb{P}\big(|y_k(x_2,x_3)/\sigma_{y_k}(x_2,x_3)| < \varepsilon\big) \geq 0.95.$$

蓝色虚线等高线标示出这一 95% 置信区域。紫色实线表示后验均值零水平集，灰色曲线则表示随机选取的二十个后验样本零水平集，用于说明边界变异性。

5. 结论

本研究提出了一种基于代理模型的优化框架，用于解决注塑成型中的翘曲问题。我们的主要目标是在明确考虑参数不确定性的同时，尽可能减小盒状零件的尺寸变形。我们采用二次多项式回归来近似工艺参数与由此产生的翘曲之间的复杂关系。本研究的核心贡献在于将贝叶斯方法与多项式代理模型相结合，以表征决策不确定性和边界不确定性。我们的框架可对最优决策进行不确定性分析，使工程师能够评估推荐设置的变异性和稳健性。此外，我们还提出了一种运用蒙特卡罗模拟的边界分析技术。该方法成功展示了零翘曲边界的置信带，并清晰地区分了凸位移区域和凹位移区域。针对置信带难以通过解析方法求逆这一数学难题，本文提出的基于模拟的方法提供了一种实用工具，可帮助理解工艺极限。

致谢

本研究获得了美国能源部科学办公室基础能源科学部通过克莱姆森大学资助的能源前沿研究中心“复合材料AIM”项目支持，资助编号为 #DE-SC0023389。

参考文献

Bohrer, R.（1967）。关于改进 Scheffé界。英国皇家统计学会杂志：*B*辑（方法论）*29*（1），110–114。

Byrd, R. H.、P. Lu、J. Nocedal 和 C. Zhu（1995年）。一种用于有界约束优化的有限内存算法。*SIAM*科学计算杂志 *16*(5)，1190–1208。

Farahani, S.、V. Khade、S. Basu 和 S. Pilla（2022）。一种用于注塑成型工艺的数据驱动的预测性维护框架。《制造工艺学报》*80*，887–897。

Gim, J., C.-Y. Lin 和 L.-S. Turng（2024）。基于模内状态中心化可解释人工智能（imc-xai）的注塑成型工艺优化。《制造系统学报》*72*, 196–213。

Hamze, H., M. Akia 和 F. Yazdani（2015）。利用响应面法优化废弃食用油的生物柴油生产。《过程安全与环境保护》*94*, 1–10。

Kuo, C.-C. 和 Y.-X. Xu（2022）。一种同时改善注塑件翘曲和冷却时间的简单方法。《国际先进制造技术杂志》*122*(2), 619–637。

Lavaggi, T., M. Samizadeh, N. NiknafsKermani, M. M. Khalili 和 S. G. Advani（2022）。用于夹层复合材料结构最优高压釜共固化的理论引导机器学习。《聚合物复合材料》*43*(8), 5319–5331。

Li, Y., Q. Zhang, M. Limaye, and G. Li (2025). 最优决策的不确定性估计及其在固化工艺优化中的应用。*arXiv* 预印本 *arXiv:2507.21995*。Loh, W.-L. (1996). 关于拉丁超立方抽样。《统计年鉴》*24*(5), 2058–2080。Mohan, M., M. Ansari, and R. A. Shanks (2017). 工艺参数对注塑塑料部件的强度、收缩和翘曲的影响综述。聚合物与塑料技术及工程 *56*(1), 1–12。

Myers, R. H. and D. C. Montgomery (1996). 响应面法。

Noordin, M.、V. Venkatesh、S. Sharif、S. Elting 和 A. Abdullah（2004）。应用响应面法描述涂层硬质合金刀具车削 AISI 1045钢时的性能。《材料加工技术学报》145(1), 46–58。

Pishro-Nik, H.（2014）。概率、统计学与随机过程导论。Kappa Research, LLC，美国宾夕法尼亚州蓝铃镇。

Pradeep, S. A., A. M. Deshpande, P.-Y. Lavertu, T. Zheng, V. A. Yerra, Y. Shimabukuro, G. Li, and S. Pilla (2024). 通过超临界流体辅助泡沫注塑成型制造的热塑性烯烃泡沫材料—工艺—微观结构关系的新型数字生命周期。《聚合物工程与科学》*64*(6), 2420–2438。

Wang, D., J. Sun, A. Dong, D. Shu, G. Zhu, and B. Sun (2018). 通过响应面法和仿真优化熔模铸造中叶轮的浇注系统。《style id='1'>《国际先进制造技术杂志》98(9), 3105–3114。

Zarei, A., S. Farahani, S. A.Pradeep, J. Driscoll, R. Lukasiewicz, and S. Pilla (2022). 滚子轴承聚合物保持架的设计与制造，以及用于预测滚子推出力的理论模型开发。《科学报告》*12*(1), 1017。

Zhao, N.-y., J.-y. Lian, P.-f. Wang, 和 Z.-b. Xu（2022）。通过优化塑料注塑成型工艺参数减少翘曲和收缩变形的最新进展：综述。《国际先进制造技术杂志》*120*(1), 85–101。