

# BP神经网络在橡胶配方设计中的应用进展

贺存哲<sup>1,2</sup>, 杨海波<sup>2,3</sup>, 王振华<sup>4</sup>, 卢咏来<sup>1,2,3\*</sup>, 张立群<sup>1,2,3</sup>

(1. 北京化工大学 北京市新型高分子材料制备和加工重点实验室, 北京 100029; 2. 北京化工大学 有机-无机复合材料国家重点实验室, 北京 100029; 3. 北京化工大学 教育部碳纤维和功能高分子材料重点实验室/先进弹性体材料研究中心, 北京 100029; 4. 中国化工橡胶总公司, 北京 100080)

**摘要:**对 BP神经网络的概念、原理、模型建立、存在的问题及其在橡胶配方设计中的应用进行综述。BP神经网络由输入层、隐层和输出层三部分组成, 具有极强的非线性处理、自组织调整、自适应学习及容错抗噪能力, 特别适用于研究材料配方与制品性能之间关系的复杂非线性系统特性, 在橡胶配方设计中得到广泛应用。

**关键词:**人工神经网络; BP神经网络; 橡胶配方设计

**中图分类号:** TQ330.6<sup>+1</sup> **文献标志码:** B **文章编号:** 1000-890X(2013)04-0251-05

随着橡胶制品在各领域应用的拓展, 橡胶配方设计变得越来越重要。人们进行橡胶配方设计主要有 3 个目的: 提高制品的性能; 改善加工工艺; 降低生产成本。传统的橡胶配方设计方法有全因素设计、正交试验设计<sup>[1-3]</sup>、均匀设计<sup>[4-6]</sup>等, 而这些配方设计试验数据的处理方法无外乎方差分析和回归分析<sup>[7]</sup>。由于材料的配方和性能之间存在非常复杂的非线性关系, 回归分析只适合于单目标优化数据处理的模型, 对于不同的性能, 需要建立不同的模型, 因此将其应用于配方设计有一定的局限性。

近年来, 发展日趋成熟的人工神经网络技术, 尤其是 BP神经网络凭借其结构简单、收敛速度快、预测精度高等优势越来越多地应用到橡胶配方设计试验中。

## 1 人工神经网络概念

人工神经网络也简称为神经网络或连接模型, 它是一种模仿动物神经网络行为特征、进行分布式并行信息处理的算法数学模型。这种网络依靠非常复杂的系统, 通过调整内部大量节点之间

相互连接的关系, 从而达到处理信息的目的。人工神经网络具有以下特征<sup>[8-9]</sup>: ①并行处理方式; ②分布式结构; ③非线性特性; ④学习功能; ⑤自组织性; ⑥容错功能。

人工神经网络一直在发展中, 包括新发现的和对已有网络的修正, 其种类一直在增加。据统计<sup>[10]</sup>, 目前已有超过 50 种各不相同的神经网络。有些问题需要多个神经网络共同解决, 而有些问题可能需要某一种特定的神经网络单独处理; 一些网络更倾向解决感知类问题, 而有些可能更适合数据建模和函数逼近。目前用得最多的神经网络主要有: Hopfield 网络、自适应共振理论网络、自组织映射特征神经网络、误差反向传播神经网络、递归神经网络、逆向传播网络、径向基函数网络<sup>[11-14]</sup>, 其中由 P. J. Werbos<sup>[15]</sup>在 1974 年提出的误差反向传播网络又称为 BP神经网络, 因为其结构简单、工作状态稳定、易于硬件实现等优点成为目前应用最为广泛的神经网络。

## 2 BP神经网络的基本原理

从结构上来讲, BP神经网络是一个多层网络, 由输入层、隐层和输出层三部分组成, 输入层和输出层各含有一些神经元, 其中在输入层对神经元输入信息(如组分配比), 在输出层得到输入信息的输出响应(如拉伸强度)。隐层则由具有独特处理单元的神经元组成。输入层和隐层可能还

**基金项目:** 教育部长江学者创新团队国家重点基础研究发展规划(973)项目(2011CB932603)

**作者简介:** 贺存哲(1988—), 男, 山东济宁人, 北京化工大学在读硕士研究生, 主要从事橡胶配方设计的研究。

\* 通信联系人

会存在一些附加节点,称为偏差神经元。

神经网络层与层之间大多采用全互连方式,同一层中各神经元之间不发生连接。当给定网络的一个输入向量时,该向量由输入单元传入隐层单元,经隐层单元逐层处理后传到输出层单元,由输出层单元处理后产生一个输出向量。这是一个逐层状态更新的过程,称为前向传播。如果输出向量与期望输出之间有误差,那么就转入误差后向传播,将误差值逐层沿连接通路传送并修正连接权值。每个神经元都与其连接的神经元有紧密联系,并且它们之间的影响程度取决于训练过程中校正的连接权值大小。BP神经网络计算过程的关键步骤<sup>[16]</sup>如下。

- (1)向输入层神经元输入数据  $x_i$ 。
- (2)隐层通过下述公式计算输出值。

$$y_i = \sum w_{ij} x_i + \theta_j \quad (1)$$

$$H_j = \frac{1}{1 + \exp(-\alpha y_i)} \quad (2)$$

式中,  $w_{ij}$  为  $i, j$  之间的连接权值;  $\theta_j$  为  $j$  神经元的偏差或阈值,可以看作数据的非零补偿;  $H_j$  为  $j$  神经元的输出;  $\alpha$  为传递神经元运算非线性的参数。

(3)用与式(1)和(2)类似的方程在输出神经元  $k$  计算输出值  $o_k$ 。

(4)用输出值  $o_k$  和目的输出  $t_k$  对输出层所有权值计算校正因子(误差)  $\delta_k$ 。

$$\delta_k = (t_k - o_k) o_k (1 - o_k) \quad (3)$$

(5)通过下述公式在输出层更新权值。

$$w_{jk}^{\text{new}} = w_{jk}^{\text{old}} + \Delta w_{jk}(p) \quad (4)$$

$$\Delta w_{jk}(p) = \eta \delta_k H_j + \mu \Delta w_{jk}(p-1) \quad (5)$$

式中,  $\Delta w_{jk}$  为隐层神经元与输出层神经元间权值的修正;  $p$  和  $p-1$  分别为当前以及之前的修正周期;  $\eta$  为学习速率,经验参数;  $\mu$  为动量参数。

(6)计算隐层修正因子  $\delta_j$ 。

$$\delta_j = H_j (1 - H_j) \sum \delta_k w_{jk} \quad (6)$$

(7)利用下述公式更新隐层权值  $w_{ij}$ 。

$$w_{ij}^{\text{new}} = w_{ij}^{\text{old}} + \Delta w_{ij}(p) \quad (7)$$

$$\Delta w_{ij}(p) = \eta \delta_j H_i + \mu \Delta w_{ij}(p-1) \quad (8)$$

(8)回到第(1)步,然后用一个新的输入样本重复该计算过程。

对于给定的一个训练集,用每一个个体样本训练网络,重复前向传播和误差后向传播过程。直到该网络对训练集中的每个输入向量的实际输出值和期望输出值的误差都小于设定值为止。

### 3 BP神经网络模型的建立

1989年,Robert从数学上证明了任意一个闭区间上的连续函数都可以用一个3层的BP神经网络来逼近<sup>[17]</sup>,即一个3层的BP神经网络可以实现任意精度的由  $n$  维到  $m$  维的非线性映射。下面以3层BP神经网络结构(见图1)为例来介绍模型的建立过程。

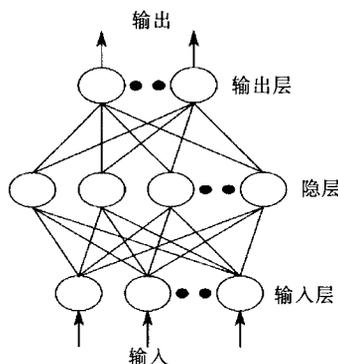


图1 3层BP神经网络结构

(1)确定所设计胶料配方的因子数和考察的性能指标数目,即确定输入层和输出层神经元的数目,例如研究硫黄、促进剂和炭黑的用量与天然橡胶(NR)胶料100%定伸应力、拉伸强度和硬度的关系,那么确定输入、输出层的神经元数目都是3;选取隐层神经元数目(一般3层BP神经网络中隐层神经元的数目  $N_2$  与输入层神经元数目  $N_1$  有一个近似关系<sup>[18]</sup>:  $N_2 = 2N_1 + 1$ ,通常  $N_2 = 5 \sim 10$ );利用正交设计、均匀设计或其他方法来安排试验方案,然后进行试验并获得试验数据。

(2)对试验所得数据进行归一化处理,即将数据标准化到一个均匀的范围(如  $0 \sim 1$ )内。数据归一化处理有两个重要作用:防止数据之间差距过大;防止隐层节点处于饱和状态而失去学习能力<sup>[19-20]</sup>。当输入数据较大时,上述作用尤其明显。尽管如此,并没有数据归一化的标准流程,比较常用的一个将数据归一化在  $[\lambda_1, \lambda_2]$  范围内的公式<sup>[10,16,21-22]</sup>为

$$x_i = \lambda_1 + (\lambda_2 - \lambda_1) \frac{z_i - z_i^{\min}}{z_i^{\max} - z_i^{\min}} \quad (9)$$

式中,  $x_i$  为输入或输出变量  $z_i$  的归一化数值;  $z_i^{\min}$  和  $z_i^{\max}$  为数据库中的最小值和最大值。理论上可取  $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 1$ , 但是为了避免 Sigmoid 函数饱和而导致学习速率慢或者没有学习速率<sup>[10,16]</sup>, 通常让二者的取值偏离 0 和 1, 可以取  $\lambda_1 = 0.05$  或  $0.1, \lambda_2 = 0.95$  或  $0.9$ 。对于一些数值范围过大的参数, 通常取对数来处理。

(3) 网络训练。将归一化好的数据分成两组, 分别作为训练集和测试集。确定隐层激励函数、学习速率、动量参数、训练误差及迭代次数等参数, 利用训练集数据训练神经网络。

(4) 用测试集对建立的神经网络进行检测, 比较预测值与实际值, 若二者的差距在所要求的偏差范围内, 则说明该神经网络具有可靠的精度, 即所需的神经网络建立完成。

#### 4 BP神经网络存在的问题

在 BP 神经网络的建立和使用过程中, 通常会遇到一些阻碍建立合适神经网络的问题。周政<sup>[23]</sup>和 P. J. Braspenning 等<sup>[24]</sup>简单介绍了 BP 神经网络易产生局部极小、收敛速度慢、学习效率低、隐层节点选取缺乏理论依据以及遗忘旧数据等问题, 并针对这些问题提出了增加动量项、自适应调节学习速率以及引入陡度因子等有效的改进方法。

#### 5 BP神经网络在橡胶配方设计中的应用

BP 神经网络目前应用得非常广泛, 主要用于谱图分析、蛋白质结构预测和药物分子药效预测<sup>[25]</sup>, 在化学反应产物组成的预测<sup>[26]</sup>、化工过程放大设计、实验条件优化设计<sup>[27]</sup>、多元校正、离子浓度监测、化工过程控制等中也有较重要的作用。BP 神经网络具有极强的非线性处理、自组织调整、自适应学习及容错抗噪能力, 特别适用于研究材料配方与制品性能之间关系的复杂非线性系统特性, 因此将人工神经网络应用于橡胶配方设计有特别重要的意义。

曾海泉等<sup>[28]</sup>建立了  $3 \times 8 \times 3$  的 BP 神经网络结构, 其中输入层为硫黄、促进剂 M 和炭黑用量,

隐层为 8, 输出层为硫化胶拉伸强度、300% 定伸应力和拉断伸长率, 对 NR 的配方和性能进行了研究, 预测结果与实测值相符。陈尔凡等<sup>[18]</sup>对 70, 80 和 90 °C 三种温度下三元乙丙橡胶 (EPDM) 的热氧老化行为进行研究, 建立了 EPDM 的热老化时间与其 3 种物性值 (拉伸强度、拉断伸长率和压缩永久变形) 之间的热老化行为规律关系, 并用 BP 网络进行预测, 预测结果误差分别为  $10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}$ 。王芳平等<sup>[29]</sup>用 BP 神经网络建立了橡胶配方中 4 种填料对丁苯橡胶 (SBR) 胶料 7 项性能影响的模型, 通过该模型计算的结果与试验值的偏差较小, 精度较高。刘国柱等<sup>[30]</sup>利用训练好的人工神经网络对异戊橡胶 (IR) 的 9 个配方的性能进行预测, 所得结果与试验值偏差很小。D. S. Giordani 等<sup>[31]</sup>利用神经网络对 NR 的化学改性进行研究, 所得配方胶料的疏水性和力学阻力效果不错。V. Vijayabaska 等<sup>[32]</sup>对丁腈橡胶 (NBR) 建立一个 3 层 BP 神经网络, 输入层为辐射剂量及敏化剂、硫黄、抗氧化剂、促进剂和炭黑的用量, 输出层为 100% 定伸应力、拉伸强度和拉断伸长率, 预测结果随神经网络训练次数的增加而越来越精确, 同时对 SBR 进行类比验证试验, 获得相似的试验结果。

还有研究人员将神经网络与其他算法或统计试验方法结合起来, 直接对试验结果进行处理和配方优选, 并将训练好的网络结构以适当形式 (如数据库) 保存, 作为专家系统的知识来源<sup>[33]</sup>。彭斯俊等<sup>[34]</sup>和聂军<sup>[35]</sup>将主成分分析法 (PCA) 与 BP 神经网络结合起来研究橡胶的配方与性能之间的关系, 使得 BP 网络收敛速度快, 精度可靠, 为橡胶的配方优选和性能预测提供了更加完善的模型与方法。林孝全等<sup>[36]</sup>将正交试验设计与 BP 神经网络结合建模, 考察硫黄、促进剂 CZ 和 TMTD 用量对 NBR 胶料的硬度、300% 定伸应力和拉断伸长率的影响, 结果表明模型非常可靠, 训练好的网络能够准确地预测硫化胶的相关性能, 且精度很高。栗建民等<sup>[37]</sup>将遗传算法 (GA) 和 BP 神经网络结合, 预测硫黄、促进剂和胶粉用量对胶料 100% 定伸应力、200% 定伸应力和拉伸强度的影响, 结果令人满意。刘莉等<sup>[38]</sup>将均匀试验设计与 BP 神经网络结合, 考察三氧化二铅、氯化石蜡和

氢氧化铝 3 个因素对氯化聚乙烯橡胶阻燃性能的影响,用较少的试验次数建立因素与配方向的关系,具有较好的预测性和实用性。黄庙由等<sup>[39]</sup>将按回归通用旋转组合设计方法设计的试验数据作为 BP 神经网络的样本数据,结果表明训练好的神经网络可准确地预测 EPDM 硫化胶氧指数、拉伸伸长率及拉伸强度等性能。

神经网络也可与序贯试验设计思想相结合,用于配方的试验设计<sup>[40]</sup>。在试验范围内任选(如果由专家确定,则效果更佳)几个初始点进行试验,用于网络的训练,将训练好的网络所得到的最优配方进行试验,如果结果满意,则停止试验;否则将试验结果输入网络进行修正,如此反复进行,即可获得满意结果,试验次数大大少于常规设计方法<sup>[32]</sup>。

## 6 结语

综上所述,神经网络在橡胶配方设计中已经得到广泛的应用,并取得了不错的效果,但是仍有一些问题需要进行更深层次的研究。

首先,尽管神经网络的研究越来越多,但大都属于验证性的,只是利用神经网络方法与其他方法对比,并不能充分显现神经网络不可替代的优越性。其主要原因是用于建立神经网络的实验样本不仅数量有限,而且所涉及的范围也很窄。一些研究机构或企业的科研部门已经积累很多配方及性能数据,充分利用这些数据来建立和训练神经网络,不仅能使神经网络在配方设计中发挥更大的作用,也能更充分地挖掘现有数据的潜在价值。其次,人工神经网络的模型原理及学习算法也有待于进一步研究,例如如何确定神经网络容量,选择隐层节点数、初始权值,避免局部极值,确保神经网络接收新信息时不会遗忘旧信息及更有效地掌握和利用系统宏观表现出来的智能等。另外,目前神经网络技术还停留在利用 Von Neumann 计算机进行模拟仿真的起步阶段,在硬件实现方面还有待于更深入的研究。

人工神经网络是一个多学科交叉课题,将各学科理论、方法和技术取长补短、相互融合,必然会使神经网络在各领域(不仅仅是橡胶配方设计方面)都得到更好的发挥。

## 参考文献:

- [1] 张殿荣,辛振祥. 现代橡胶配方设计[M]. 北京:化学工业出版社,2001:349-461.
- [2] 庞浩,廖兵,黄玉惠,等. 聚 1,2-亚丙基碳酸酯/天然橡胶共混弹性体. 1. 配方设计[J]. 高分子材料科学与工程,2002,18(2):71-73.
- [3] 郝同辉,蒋涛,邱丽. 动态硫化 EPDM/PP TPV 的配方设计[J]. 弹性体,2005,15(2):33-36.
- [4] 方开泰. 均匀设计[J]. 战术导弹技术,1994(1):55-65.
- [5] 邹明清,蔡大扬,李永焯,等. 均匀试验设计法在轮胎配方设计中的应用[J]. 轮胎工业,1997,17(6):332-338.
- [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):583-586.
- [7] 陈魁. 试验设计与分析[M]. 北京:清华大学出版社,1996:4-178.
- [8] 倪治中. 人工神经网络[J]. 电子天府,1994(4):3-6.
- [9] 孟祥武. 神经网络研究综述[J]. 电脑学习,1998(1):1-3.
- [10] Basheer I A, Hajmeer M. Artificial Neural Networks: Fundamentals, Computing, Design, and Application[J]. Journal of Microbiological Methods,2000,43(1):3-31.
- [11] 石幸利. 人工神经网络的发展及其应用[J]. 重庆科技学院学报,2006,8(2):99-101,110.
- [12] 朱大奇. 人工神经网络研究现状及其展望[J]. 江南大学学报,2004,3(1):103-110.
- [13] 汤素丽,罗宇锋. 人工神经网络技术的发展与应用[J]. 电脑开发与应用,2009,22(10):59-61.
- [14] 隋英,付春菊,高兴燕. 人工神经网络研究的发展与应用[J]. 大众科技,2010(5):20,34.
- [15] Werbos P J. Beyond Regression: New Tools for Prediction and Analysis in the Behavioral Sciences[D]. New York: Harvard University,1974.
- [16] Guo D, Wang Y L, Nan C W, et al. Application of Artificial Neural Network Technique to the Formulation Design of Dielectric Ceramics[J]. Sensors and Actuators. A: Physical, 2002,102(1-2):93-98.
- [17] Hecht-Nielsen R. Theory of the Back Propagation Neural Network[J]. Proceedings of IJCNN,1989:593-603.
- [18] 陈尔凡,邓雯雯,韩云凤,等. 三元乙丙橡胶的热老化行为及其 BP 神经网络预测[J]. 化工新型材料,2010,38(10):80-82,97.
- [19] Hassoun M H. Fundamentals of Artificial Neural Networks [M]. Cambridge, MA: M. I. T. Press, 1995:174-246.
- [20] Masters T. Practical Neural Network Recipes in C++[M]. Boston, MA: Academic Press, 1994.
- [21] Lee K I, Yim Y S, Chung S W, et al. Application of Artificial Neural Networks to the Analysis of Two-dimensional Fluorescence Spectra in Recombinant Ecoli Fermentation Processes[J]. Journal of Chemical Technology & Biotechnology, 2002,72(1):1-8.

- 2005, 80(9): 1036-1045.
- [22] Al-Haik M S, Hussaini M Y, Garmestani H, et al. Prediction of Nonlinear Viscoelastic Behavior of Polymeric Composites Using an Artificial Neural Network[J]. International Journal of Plasticity, 2006, 22(7): 1367-1392.
- [23] 周政. BP神经网络的发展现状综述[J]. 山西电子技术, 2008(2): 90-92.
- [24] Braspenning P J, Thuijsman F, Weijters A J M M. Lecture Notes in Computer Science[M]. Berlin: Springer, 1995: 37-66.
- [25] 陈锦言, 姚芳莲, 孙经武, 等. 人工神经网络及其在化学领域中的应用[J]. 计算机与应用化学, 1999, 16(2): 111-120.
- [26] Kvasnicka K, Sklenak S, Pospichal J. Application of High Order Neural Network in Chemistry[J]. Theor. Chim. Acta., 1993, 86(3): 257-120.
- [27] 龚晓一, 邓勃, 罗国安. 前向人工神经网络的生成系统[J]. 计算机与应用化学, 1996, 13(4): 299-304.
- [28] 曾海泉, 罗跃刚, 连永祥. 神经网络在橡胶配方设计中的应用[J]. 橡胶工业, 2002, 49(2): 73-76.
- [29] 王芳平, 李炳瑞, 陈建刚, 等. BP神经网络在橡胶试验中的应用[J]. 石化技术与应用, 2004, 22(2): 100-103, 75.
- [30] 刘国柱, 高齐圣, 孟宪德. 应用神经网络预测橡胶配方的性能[J]. 青岛化工学院学报, 1999, 20(2): 171-174.
- [31] Giordani D S, Oliveira P C, Guimaraes A, et al. Correlation of Modified Natural Rubber Properties by Artificial Neural Networks[J]. Polymer Engineering & Science, 2009, 49(3): 499-505.
- [32] Vijayabaskar V, Gupta R. Prediction of Properties of Rubber by Using Artificial Neural Networks[J]. Journal of Applied Polymer Science, 2006, 100(3): 2227-2237.
- [33] 纪奎江, 范汝良, 程宝家. 21世纪的计算机辅助橡胶配方设计[J]. 合成橡胶工业, 1998, 21(6): 321-324.
- [34] 彭斯俊, 杜伟伟, 陈正旭. 基于BP网络的橡胶配方优选问题研究[J]. 武汉理工大学学报(信息与管理工程版), 2005, 27(3): 34-36.
- [35] 聂军. 主成分分析与神经网络在橡胶配方优化中的运用[D]. 青岛: 青岛科技大学, 2005.
- [36] 林孝全, 林胜义. BP神经网络在橡胶配方优化设计中的应用[J]. 世界橡胶工业, 2010, 37(7): 20-22.
- [37] 栗建民, 晁春燕, 辛振祥. BP神经网络模型在橡胶配方优化中的应用[J]. 橡塑技术与装备, 2003, 29(8): 41-46.
- [38] 刘莉, 李少香, 李伟, 等. 基于均匀设计的BP神经网络在橡胶配方研究中的应用[J]. 弹性体, 2008, 18(6): 49-52.
- [39] 黄庙由, 刘先锋, 吴风云. 人工神经网络在EPDM硫化胶性能预测中的应用[J]. 计算机仿真, 2004, 21(4): 117-120.
- [40] 焦李成. 神经网络计算[M]. 西安: 西安电子科技大学出版社, 1995: 65-71.

收稿日期: 2012-10-06

## 辽河石化公司橡胶沥青品质高

中国分类号: TQ333.99; TE626.8+6 文献标志码: D

采用中国石油辽河石化分公司(简称辽河石化公司)生产的橡胶沥青铺设黑龙江省大庆市南三路, 经过5年(五冬五夏)的使用, 没有出现开裂、拥包等现象, 路面平整, 使用状况良好。

目前我国每年废旧轮胎生产量达到1亿多条。随着汽车数量的逐年增加, 废旧轮胎以每年10%以上的速度递增, 由此产生了大量的“黑色污染”。面对废旧汽车轮胎回收与处理这一世界性技术难题, 辽河石化公司研究院迎难而上, 立项研究利用胶粉作为改性剂, 生产橡胶沥青。这种橡胶沥青不但回收利用了废旧轮胎, 达到了环保目的, 而且由于掺进了胶粉, 使得沥青耐高温性能有了进一步改善, 提高了沥青产品质量。同时, 由于胶粉价格低于原油价格, 可为公司创造可观的经济效益。

在课题研究过程中遇到最大的难题就是

胶粉与沥青的混容问题。经过不断摸索研究, 通过改变工艺条件和加添加剂, 最终让胶粉与沥青充分融合, 形成均相, 提高了产品的稳定性。

2012年, 辽河石化公司沥青产量为177.16万吨, 成为国内最大的优质道路沥青生产基地, 所生产的昆仑牌沥青各项性能指标在世界200多种沥青中名列前茅。截至目前, 辽河石化公司的沥青已经成功应用在哈尔滨太平国际机场等18家机场、河南红旗渠配套工程等12个大型水利工程以及沈大高速公路等多条高速公路的建设项目中, 产品在东北市场的覆盖率达到70%, 足迹北到漠河、南至广州、西抵拉萨、东达朝鲜。

利用庞大的营销网络, 该公司将沥青市场拓展到机场、水利、水电、建筑等领域, 成为全国首家沥青累计产销量超过千万吨的生产企业, 年产量占全国沥青总产量的12%。

(摘自《中国化工报》, 2013-02-27)