

防老剂并用量的计算机优化试验设计

程宝家 范汝良
(上海交通大学化学化工学院 200240)
杜爱华 纪奎江
(青岛化工学院橡胶工程学院 266042)

摘要 在统计试验设计基础上,通过计算机辅助建模与优化技术,得到了防老剂用量对胶料性能影响的回归方程,并获得了最优配方。试验结果表明,数据处理组合(GMDH)是适于橡胶均匀试验设计的一种非线性建模方法,所获得的回归方程精度高,可用于配方的性能预测与优选。

关键词 配方设计,计算机辅助设计,统计试验设计,GMDH,回归模型,防老剂

橡胶制品在贮存和使用过程中,在氧、臭氧、酸、碱及水等化学物质作用下,或在热、紫外线、放射线和机械力等物理因素、生物因素的作用下,会发生老化现象,导致其物性降低甚至丧失。为改善橡胶制品的耐老化性能,在橡胶配方中采用不同类型防老剂的并用体系^[1],是一种行之有效的方法,可获得事半功倍的效果。为获得防老剂用量与制品寿命及其它几项物性的关系,本工作以统计试验设计方法为基础,采用计算机辅助建模技术,得到了防老剂用量与硫化胶性能之间的非线性回归方程,并利用多属性决策方法得到了最优配方。

1 防老剂并用体系的试验设计

本工作采用 NR/BR(并用比 70/30)体系,鉴于硫化胶老化机理的多样性以及防老剂的溶解度较小,选取防老剂 4010 用量(x_1)、防老剂 BLE 用量(x_2)和防老剂 MB 用量(x_3)(并用体系)为试验因子,其变化范围以经验值 1.0 份为中心,均取为 0.5~1.7 份。为避免喷霜现象,3 种防老剂的总用量以不超过 3 份为宜。考察的胶料物理性能有:拉伸强度变化率 y_1 (%),300%定伸应力变化率 y_2 (%),扯断伸长率变化率 y_3 (%)和拉伸疲劳寿命 y_4 ($\times 10^5$ 次)。

为了以尽可能少的试验次数获得尽可能多的信息,试验点在试验空间的分布要合理,且应具有一定的统计特征,以便于试验结果的分析。为此,基于全面试验和均匀试验设计^[2]的基本

思想,针对本工作的具体特点,采用了如下试验方案设计方法:

将每个因子分别分成 6 个水平:0.5, 0.7, 1.0, 1.2, 1.5 和 1.7。为简化问题,采用高、中、低 3 个水平:

- 高—1.7, 1.5;
- 中—1.2, 1.0;
- 低—0.7, 0.5。

如上所述,3 种防老剂的总用量不宜超过 3 份,故不可能有两个因子的用量同时取高水平或一个取高水平、一个取低水平,也不可能 3 个因子同时取中水平(3 个因子均取 1.0 份的组合是试验中心点),则剩余的所有可能组合有(高,低,低),(中,中,低),(中,低,低),(低,低,低)。均匀试验设计的一个特点是:每个因子的每个水平仅做一次试验。因此,对每个组合采用均匀设计法,得到如下试验方案:

1.7	0.5	0.7	}	(高, 低, 低)
0.5	1.7	0.5		
0.7	0.7	1.7		
0.5	1.0	1.2	}	(中, 中, 低)
1.0	0.5	1.0		
1.2	1.2	0.5		
1.2	0.5	0.7	}	(中, 低, 低)
0.5	1.2	0.5		
0.7	0.7	1.2		
0.5	0.5	0.5	—(低, 低, 低)	

为检验试验的有效性,在中心点(1.0, 1.0, 1.0)实施两次重复试验,则试验总数为 12。随机化后的试验实施方案及试验结果见表 1。

作者简介 程宝家,男,26 岁。上海交通大学博士研究生。已发表论文 5 篇。

表 1 配方实施方案和试验结果

试验编号	防 老 剂 用 量			硫 化 胶 性 能 *			
	x_1	x_2	x_3	y_1	y_2	y_3	y_4
1	1.7	0.5	0.7	-19.42	-39.81	-26.56	5.944
2	0.5	1.0	1.2	-20.82	-42.08	-25.64	4.770
3	1.2	0.5	0.7	-22.78	—	-37.50	4.996
4	1.0	0.5	1.0	-22.34	-55.65	-36.25	6.351 0
5	0.5	1.2	0.5	-15.69	-46.05	-25.71	1.516 5
6	1.0	1.0	1.0	-20.17	-41.45	-31.62	4.570 5
7	0.7	0.7	1.7	-19.76	-55.4	-31.67	2.277 5
8	1.2	1.2	0.5	-16.15	-40.9	-29.30	4.390 5
9	0.7	0.7	1.2	-21.93	-39.38	-31.10	4.843 5
10	0.5	1.7	0.5	-15.39	-54.93	-32.24	3.523 5
11	0.5	0.5	0.5	-26.88	—	-32.13	2.929 5
12	1.0	1.0	1.0	-21.39	-43.89	-32.94	4.905 0

注：*按 GB/T 528—92 测试。

2 数学建模

由于试验次数较少,采用传统的最小二乘法无法得到高精度的非线性回归模型。为此,采用数据处理组合(GMDH)方法^[3,4],得到了配方各项物性与防老剂用量之间的回归模型:

(1)拉伸强度变化率 y_1

$$y_1 = -1.941\ 96 - 0.582\ 34\ z_1 + 1.240\ 792\ z_3 - 0.286\ 82\ z_1 z_3 + 0.117\ 57\ z_1^2 + 0.155\ 575\ z_3^2$$
$$z_1 = -40.668\ 4 + 10.066\ 83\ x_1 + 28.787\ 87\ x_2 - 11.951\ 1\ x_1 x_2 + 0.856\ 848\ x_1^2 - 6.285\ 03\ x_2^2$$
$$z_3 = -45.173\ 2 + 38.043\ 66\ x_2 + 21.782\ 86\ x_3 - 26.397\ 6\ x_2 x_3 - 7.907\ 34\ x_2^2 - 1.066\ 54\ x_3^2$$

(2)300%定伸应力变化率 y_2

$$y_2 = (1\ 319\ 700 + 38\ 275.8\ z_1 + 22\ 077.85\ z_2 - 1\ 205.98\ z_1 z_2 + 1\ 056.1\ z_1^2 + 872.460\ 7\ z_2^2)^{1/3}$$
$$z_1 = -12.970\ 8 - 93.364\ 6\ x_1 + 12.951\ 35\ x_2 + 31.139\ 99\ x_1 x_2 + 35.682\ 26\ x_1^2 - 18.433\ 5\ x_2^2$$
$$z_2 = -92.486 + 35.366\ 29\ x_1 + 89.540\ 03\ x_3 - 55.689\ 9\ x_1 x_3 + 2.794\ 672\ x_1^2 - 25.662\ 5\ x_3^2$$

(3)扯断伸长率变化率 y_3

$$y_3 = -3.530\ 57 + 4.424\ 343\ z_1 - 3.654\ 12\ z_2 + 0.261\ 121\ z_1 z_2 -$$

$$0.007\ 03\ z_1^2 - 0.187\ 3\ z_2^2$$
$$z_1 = -26.970\ 1 - 47.992\ 5\ x_1 + 35.121\ 89\ x_2 + 2.263\ 017\ x_1 x_2 + 23.054\ 56\ x_1^2 - 16.81\ x_2^2$$
$$z_2 = -30.905\ 7 - 17.633\ 4\ x_1 + 24.827\ 63\ x_3 - 21.702\ 7\ x_1 x_3 + 15.404\ 84\ x_1^2 - 4.371\ 36\ x_3^2$$

(4)拉伸疲劳寿命 y_4

$$y_4 = -2.331\ 68 + 1.435\ 92\ z_2 + 0.673\ 783\ z_3 - 1.879\ 07\ z_2 z_3 + 0.864\ 023\ z_2^2 + 0.931\ 307\ z_3^2$$
$$z_2 = -3.957\ 03 + 2.747\ 396\ x_1 + 13.917\ 84\ x_3 - 2.295\ 91\ x_1 x_3 + 0.323\ 652\ x_1^2 - 5.653\ 61\ x_3^2$$
$$z_3 = -1.853\ 17 - 4.067\ 88\ x_2 + 17.911\ 6\ x_3 - 2.203\ 8\ x_2 x_3 + 2.478\ 474\ x_2^2 - 7.535\ 63\ x_3^2$$

用上述模型对硫化胶性能进行计算,所得结果(见表 2)与试验结果十分吻合,表明回归模型的精度较高。

3 配方优选

为使所考察的 4 项性能达到综合最优,采用多属性决策方法进行规划求解^[5]。以拉伸疲劳寿命为目标函数:

$$f(x) = \max(y_4)$$

以防老剂用量及其它 3 项物性为约束条件:

$$0.5 \leq x_i \leq 1.7, \quad i = 1, 2, 3$$
$$y_1 \geq -19.0$$

表 2 回归模型对硫化胶性能预报值

试验 编号	y_1	y_2	y_3	y_4
1	-19.283 3	-39.373 02	-26.155 9	5.932 995
2	-20.175 2	-41.669 81	-25.788 3	4.279 797
3	-23.213 8	—	-36.819 4	4.488 667
4	-21.820 1	-53.264 78	-36.765 8	6.082 753
5	-16.251 7	-47.367 29	-25.828 2	1.730 13
6	-20.443 8	-41.302 3	-32.248 3	4.649 498
7	-20.863 3	-54.643 43	-31.271 1	1.910 107
8	-15.836 7	-39.759 52	-29.727 4	4.521 42
9	-21.005 5	-41.197 55	-31.690 5	5.025 268
10	-14.991 6	-56.467 74	-32.506 8	3.532 736
11	-26.491	—	-31.210 2	2.714 631
12	-20.443 8	-41.320 3	-32.248 3	4.649 498

$y_2 \geqslant 45.0$
 $y_3 \geqslant 27$

经优选得到 3 种防老剂的最佳用量为:

$x_1 = 1.70$
 $x_2 = 0.55$
 $x_3 = 0.53$

与此相应的各项物性的预测值分别为:

$y_1 = -18.854\ 6, y_2 = -44.496\ 8,$
 $y_3 = -27.009\ 9, y_4 = 9.058\ 716$

实测值分别为:

$y_1 = -18.61, y_2 = -44.53,$
 $y_3 = -27.11, y_4 = 8.95$

4 结论

- (1)灵活运用统计试验设计方法,科学地安排试验方案,能够以尽可能少的试验次数获得尽可能多的信息,从而节省人力、物力、财力,并能缩短试验周期;
- (2)GM DH 是适于橡胶配方均匀试验设计的一种有效的、高精度的非线性数学建模方法,所得的回归方程精度高,计算值与试验值吻合性好,可用于硫化胶的性能预测与最优配方的确定;
- (3)合理确定防老剂并用体系的配合用量,能够延长橡胶制品的使用寿命,且有关性能不会下降太大,从而实现多项性能的综合平衡。

参考文献

1 杨清芝.现代橡胶工艺学.北京:中国石化出版社,1997.297

2 方开泰.均匀设计.应用数学学报,1980.3(4):363

3 Ivakhnenko A G. Heuristics self-organization in problem of engineering cybernetics. Automation, 1986. 6(3): 207

4 高齐圣,隋树林,范汝良,等.数据处理组合方法在橡胶配方设计回归建模中的应用.合成橡胶工业,1997.20(3):169

5 薛耀中.工程最优化技术.天津:天津大学出版社,1988.148

收稿日期 1998-12-25

双星鞋上有高科技

双星集团发挥拥有全国制鞋业唯一的国家级技术中心的优势,致力于实施科技战略,使鞋也通过高新技术的应用而具有了多种功能。今年3月下旬,双星的两项最新成果——绝缘特种皮鞋和鞋用避震空调卫生技术项目通过鉴定。

这次通过鉴定的双星绝缘特种皮鞋采用目前世界上最先进的注射工艺设计制作,鞋底材料采用绝缘性能比橡胶更为优良的纯净液体PU,并且添加了LU绝缘助剂,其实验防电击穿的能力为:交流电6 000 V,直流电15 000 V,并且具有轻便、耐磨、防滑、无臭味、弹性佳等特点;帮面材料采用进口一等大油皮,美观高档。

楦型设计宽大舒适,大底具有抗刺穿性。此种绝缘特种皮鞋可广泛适用于特警、巡警、部队以及企业电工从业人员穿着,是绝缘型专业皮鞋设计方面的一个突破,具有良好的市场前景。

鞋用避震空调卫生技术是通过通过对中医学、人体工程学、材料力学等学科的广泛研究后,运用高档超级合成材料以及高弹低密的新型鞋底材料,在鞋底内设置气囊、气道和单向阀门等部件,使采用此技术生产的鞋具有鞋底透气、减震、吸震、按摩等功能,人们在运动的过程中可使鞋内空气换气,使人脚的环境始终处于良好的通风换气清爽状态,有利于增进人体的健康。

(摘自《中国化工报》,1999-04-03)