

主成分分析结合 BP 神经网络在橡胶材料磨耗性能预测中的应用

项可璐, 罗金莲, 谢 鹏, 吴友平*

(北京化工大学 北京市新型高分子材料制备与加工重点实验室, 北京 100029)

摘要:采用基于灵敏度分析的 BP 神经网络模型, 将丁苯橡胶(SBR)复合材料的 8 种力学性能数据经过主成分分析(PCA)降维后作为神经网络的输入向量, 耐磨性能数据作为输出向量, 对 SBR 复合材料的耐磨性能进行预测, 并计算各输入向量的灵敏度矩阵, 从而分析输入量对耐磨性能的影响程度。结果表明: 通过 PCA 降维处理, 可以消除神经网络输入向量之间的共线性, 简化网络, 提高网络的预测性能; 预测误差在允许范围内, 说明 BP 网络适用于橡胶材料的耐磨性能预测; 灵敏度分析显示定伸应力、拉断伸长率和拉断永久变形对 SBR 橡胶复合材料的耐磨性能影响最大。

关键词:丁苯橡胶; 神经网络; 主成分分析; 耐磨性能; 灵敏度分析

中图分类号: TQ333. 1; TQ330. 7⁺3 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-890X(2014)02-0069-05

橡胶是轮胎生产的主要原材料, 轮胎的使用寿命受其各项性能的影响, 其中耐磨性能是重要影响因素^[1]。胎面耐磨性能取决于许多因素和条件, 例如橡胶材料的力学性能、聚合物分子的结构和化学稳定性^[2], 聚合物与填料之间的相互作用及与路面接触区胎冠处的温度^[3-4]等, 并且热化学和机械化学等作用使这一问题更加复杂。橡胶材料的力学性能是影响其磨耗性能的重要因素之一, 在橡胶磨耗性能的分析过程中, 研究其力学性能与磨耗性能之间的关系是一项迫切的任务。一般情况下, 耐磨性能的数据主要依靠试验获得, 需要大量的时间和人力。通过建立有效的数学模型来预测橡胶的耐磨性能可以降低试验成本, 国内一些单位利用数学推导和计算机程序对磨耗性能进行了研究^[5-6]。但是, 目前对力学性能与磨耗间关系模型的研究很少。

人工神经网络(ANN)作为一种有效的建模方法, 具有良好的学习能力及以任意精度模拟非线性函数的优点^[7-11]。本研究采用基于灵敏度分析的 BP 网络(Back Propagation Network, 反向

传播网络)模型, 将丁苯橡胶(SBR)复合材料的 8 种力学性能数据经过主成分分析(PCA)降维后作为 ANN 的输入向量, 耐磨性能数据作为输出向量, 对 SBR 复合材料的耐磨性能进行预测, 并计算灵敏度矩阵, 从而分析输入向量对耐磨性能的影响程度。

1 主成分分析原理

主成分分析是将原先众多具有一定相关关系的变量(如 p 个)重新组合成少数相互无关的新的变量的一种统计方法^[12-15]。

传统的 BP 网络是利用梯度下降法进行反复迭代完成整个学习过程的。当输入向量和输出向量的关系比较复杂时, 网络的学习速度和精度会明显下降。鉴于此, 提出利用主成分分析将原输入向量降维后, 得到互不相关的主成分作为 BP 网络的输入矩阵, 从而在训练样本并未减少的基础上消除神经网络输入向量之间的共线性^[16], 并且简化网络, 提高网络的预测性能。

2 BP 神经网络预测 SBR 复合材料的耐磨性

2.1 原始数据及其相关性分析

试验所测得的原始数据如表 1 所示, $x_1 \sim x_8$ 分别为 SBR 复合材料的力学性能[x_1 : 邵尔 A 型

基金项目:新世纪优秀人才支持计划项目(NCET-10-0202)
作者简介:项可璐(1987—), 女, 浙江宁波人, 北京化工大学硕士研究生, 现在英国石油公司工作, 主要从事橡胶增强理论与技术和橡胶性能模拟研究。
* 通信联系人

表 1 橡胶材料的磨耗性能与力学性能数据

样 本	y	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8
1	0.18	62	2.1	11.5	5.5	18.1	417	38	12
2	0.21	62	2.1	10.7	5.1	17.5	427	42	12
3	0.25	63	2.3	10.9	4.7	17.0	420	42	12
4	0.29	64	2.6	11.2	4.3	16.7	405	40	12
5	0.31	64	2.4	10.1	4.2	15.7	414	42	12
6	0.39	64	2.5	9.9	4.0	16.4	435	44	12
7	0.13	67	1.5	7.6	5.1	24.3	698	54	20
8	0.13	63	1.4	8.3	5.9	25.3	680	57	20
9	0.09	68	2.5	13.2	5.3	24.9	536	56	20
10	0.09	70	1.7	8.9	5.2	22.0	628	42	20
11	0.10	71	2.5	12.3	4.9	21.5	475	41	20
12	0.17	69	2.3	10.6	4.6	17.2	470	47	12
13	0.13	71	1.9	9.5	5.0	21.0	555	61	12
14	0.16	70	2.5	12.1	4.8	20.1	421	49	12
15	0.19	70	2.4	12.9	5.4	19.4	398	45	12
16	0.34	60	1.4	5.9	4.2	16.6	557	42	16
17	0.44	62	1.3	6.4	4.9	16.7	561	44	20
18	0.36	62	1.4	6.6	4.7	17.9	559	44	16
19	0.18	60	1.8	12.0	6.7	18.8	405	37	8
20	0.20	60	1.9	12.7	6.7	20.1	357	34	12
21	0.23	60	1.9	12.9	6.8	19.4	397	34	16
22	0.26	62	2.1	12.6	6.0	16.0	336	33	12
23	0.35	62	1.5	9.2	6.1	16.9	475	32	20
24	0.27	66	2.2	11.1	5.0	17.5	386	42	16
25	0.33	66	2.0	11.2	5.6	17.7	383	39	16
26	0.32	66	1.7	9.9	5.8	19.2	436	44	16
27	0.12	61	2.1	13.0	6.2	16.1	354	43	8
28	0.16	60	2.7	14.7	5.4	17.1	344	43	12
29	0.19	61	2.4	12.1	5.0	18.7	427	45	16
30	0.21	63	2.7	12.5	4.6	9.2	436	49	16

硬度,度; x_2 :100%定伸应力,MPa; x_3 :300%定伸应力,MPa; x_4 :定伸应力比(300%定伸应力/100%定伸应力); x_5 :拉伸强度,MPa; x_6 :拉断伸长率,%; x_7 :撕裂强度,kN·m⁻¹; x_8 :拉断永久变形,%],y为阿克隆磨耗量,cm³。

表2所示为各因变量之间的相关系数,正值表示变量之间具有正相关性,负值表示负相关性;相关系数绝对值越大,表示变量之间的相关性越高,反之则越小。相关系数绝对值大于0.5说明它们之间存在较显著的关系,自变量之间存在信息重叠。

2.2 建立主成分方程并进行计算

用SPSS18.0软件对 $x_1\sim x_8$ 进行主成分分析时,首先要进行KMO和Bartlett检验^[17-18]。

对表1中原始数据进行KMO和Bartlett检验所得的KMO值为0.542,大于主成分分析所

表 2 相关系数矩阵

项 目	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8
x_1	1.000							
x_2	0.219	1.000						
x_3	-0.007	0.763	1.000					
x_4	-0.322	-0.307	0.372	1.000				
x_5	0.446	-0.164	-0.033	0.202	1.000			
x_6	0.303	-0.591	-0.741	-0.234	0.638	1.000		
x_7	0.511	0.040	-0.208	-0.370	0.609	0.600	1.000	
x_8	0.234	-0.403	-0.443	-0.076	0.540	0.678	0.223	1.000

要求的0.5;Bartlett检验中渐近的 χ^2 值为249.517,相应的显著性概率小于0.001,为高度显著,也符合主成分分析要求。因此原始数据可以用于进行主成分分析。

计算各成分的贡献率,如表3所示。从表3可以看出,前3个主成分的累积贡献率已经达到84.654%,且从第4个主成分开始,每个主成分的贡献率都较小。

表 3 各成分特征值及贡献率

成 分	特征值	贡献率/%	累积贡献率/%
1	3.446	43.079	43.079
2	1.942	24.275	67.354
3	1.384	17.299	84.654
4	0.608	7.599	92.253
5	0.456	5.695	97.948
6	0.124	1.552	99.500
7	0.035	0.436	99.937
8	0.005	0.063	100.000

因此,提取前3个主成分,其相关系数矩阵的特征值分别为 $\lambda_1=3.446,\lambda_2=1.942,\lambda_3=1.384$,其成分得分系数矩阵如表4所示。

表 4 前 3 个主成分的得分系数矩阵

项 目	成 分		
	1	2	3
硬度	0.128	0.357	0.019
100%定伸应力	-0.156	0.408	-0.051
300%定伸应力	-0.204	0.251	0.358
定伸应力比	-0.074	-0.217	0.610
拉伸强度	0.199	0.149	0.451
拉断伸长率	0.281	-0.054	-0.022
撕裂强度	0.191	0.285	-0.011
拉断永久变形	0.217	-0.072	0.121

从表4可以看出,每个成分得分系数相差并不大,很难挑选出影响主成分的主要变量。因此,

按照方差最大正交旋转法对主成分进行旋转,使旋转后所得的每个特征向量中的元素平方值向 0 或 1 两极分化,方便挑选变量。旋转后的成分得分系数矩阵如表 5 所示。显而易见,第一主成分包含 100%定伸应力、300%定伸应力、拉断伸长率和拉断永久变形这 4 个原变量的信息,第二主成分包含硬度、拉伸强度和撕裂强度这 3 个原变量的信息,第三主成分包含原变量定伸应力比的信息。

表 5 旋转后的成分得分系数矩阵

项 目	成 分		
	1	2	3
硬度	0.130	0.764	-0.274
100%定伸应力	0.909	0.152	-0.272
300%定伸应力	0.910	0.035	0.382
定伸应力比	0.034	-0.161	0.964
拉伸强度	-0.232	0.859	0.390
拉断伸长率	-0.793	0.556	-0.118
撕裂强度	-0.128	0.799	-0.292
拉断永久变形	-0.622	0.454	0.108

对于表 4 中的每一列值分别除以 $\sqrt{\lambda_1}$ 、 $\sqrt{\lambda_2}$ 和 $\sqrt{\lambda_3}$,可得到每一个特征根对应的单位向量,即前 3 个主成分与各原始变量之间的系数,进而可以写出前 3 个主成分表达式:

$$F_1=0.238x_1-0.290x_2-0.378x_3-0.138x_4+0.370x_5+0.523x_6+0.355x_7+0.402x_8$$

$$F_2=0.497x_1+0.568x_2+0.350x_3-0.302x_4+0.207x_5-0.075x_6+0.397x_7-0.101x_8$$

$$F_3=0.022x_1-0.060x_2+0.422x_3+0.717x_4+0.531x_5-0.026x_6-0.013x_7+0.143x_8$$

根据主成分 F_1 、 F_2 和 F_3 的表达式可计算出 30 组样品 3 个主成分的值,如表 6 所示。

3 BP 神经网络模型及预测结果

分别将原始数据与经过主成分分析后的主成分得分值作为输入向量,磨耗数据作为输出向量,建立 BP 神经网络,对数据进行训练和预测。网络结构如图 1 所示。

样本分为训练样本和测试样本,根据数据选择原则^[19],预测数据必须与训练数据相近,因此选择第 3,12 和 17 号数据用作测试样本,其余数据用作训练样本。训练函数采用 LM 算法,该算

表 6 提取的 3 个主成分的值

样 本	y/cm ³	F ₁	F ₂	F ₃
1	0.18	251.91	20.562	-10.03
2	0.21	258.51	20.912	-8.782 2
3 ¹⁾	0.25	255.01	22.338	-8.500 7
4	0.29	246.44	23.51	-8.601 2
5	0.31	251.83	22.79	-7.292 1
6	0.39	263.88	22.227	-6.856
7	0.13	412.49	6.755 2	-5.161 9
8	0.13	403.37	7.632 8	-6.905 6
9	0.09	326.76	23.052	-12.142
10	0.09	371.22	9.116 3	-6.582 1
11	0.10	289.29	22.145	-11.52
12 ¹⁾	0.17	284.24	23.172	-7.186 7
13	0.13	336.2	23.627	-6.696 6
14	0.16	260.23	29.587	-10.758
15	0.19	246.25	29.715	-11.808
16	0.34	329.31	7.648 9	-2.814 2
17 ¹⁾	0.44	333.97	8.658 3	-4.073 3
18	0.36	331.76	9.728 1	-4.123 6
19	0.18	242.91	19.951	-11.211
20	0.20	218.75	22.757	-14.044
21	0.23	241.01	19.341	-13.353
22	0.26	206.57	24.504	-11.912
23	0.35	283.77	11.369	-8.595 3
24	0.27	239.38	25.707	-10.607
25	0.33	237.05	24.841	-11.304
26	0.32	267.32	22.125	-10.279
27	0.12	217.28	26.842	-11.098
28	0.16	213.13	28.122	-12.544
29	0.19	260.89	22.261	-10.428
30	0.21	267.45	24.658	-10.318

注:1)第 3,12 和 17 号数据用作 BP 网络的测试样本,其余数据用于网络训练。

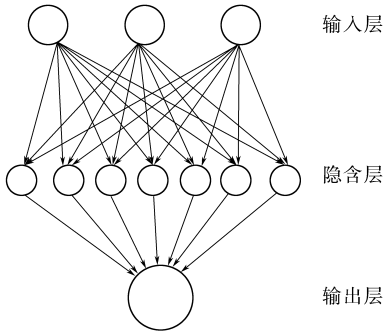


图 1 BP 神经网络结构模型

法具有收敛速度快、避免陷入局部极值的优点。输入层的传递函数采用 S 型对数函数,输出层的传递函数采用 S 型正切函数。表 7 所示为网络训练参数。隐含层神经元个数的确定并没有统一的

表7 网络训练参数

项 目	原始数据	主成分数据
训练次数	10 000	10 000
训练目标误差	0.000 1	0.000 1
隐含层神经元个数	15/25/30	7/10/15

标准,通常采用试差法确定^[20]。先设定一个较小的隐含层神经元数,然后不断增加,直到满足误差的需求,使训练误差达到最小值。因此在本试验中,通过改变隐含层神经元个数,建立不同的网络进行训练和测试,研究隐含层个数对网络性能的影响。

利用BP网络训练预测结果显示,网络经过75次迭代就能达到预设目标误差,且网络的预测误差较小。当用原始数据作为输入向量、网络隐含层神经元数量为25时,网络预测值与实验值之间的相对误差最小,网络性能最好;用主成分数据作为输入向量时,网络隐含层神经元数量为10的网络的性能最好。这说明隐含层的个数直接影响网络预测的精度,在具体设计时,需要通过建立不同神经元个数的网络进行性能对比,进而选用最优网络。

经过主成分分析后的数据在BP网络训练预测中的误差更小。神经网络的输入向量过多、网络过于复杂时,学习能力就会下降,甚至无法进行有效的学习;基于主成分分析的神经网络在不改变样本数据结构的基础上,消除了网络输入因子间的相关性,减少输入向量,简化网络结构,从而提高了网络的学习效率。

4 BP网络输入参数的敏感性分析

被称为“黑匣子”的人工神经网络的主要缺点^[21-22]是结构比较复杂,并且其结构一般没有物理意义,使人无法知道哪些输入参数对输出影响较大。

在橡胶复合材料磨耗性能预测过程中,为了确定材料力学性能对磨耗性能影响程度的大小,需观察各输入变量对输出的作用。本研究采用基于输出变量对输入变量的偏导的敏感分析方法,对上面得到的网络进行敏感分析,得到影响较大的主成分,从而可以推导出对橡胶复合材料磨耗性能影响较大的因素。

选取F矩阵在均值(278.27,20.188,-9.1843)附近(-100,100)区域分别计算F₁,F₂和F₃的灵敏度。结果显示,F₁对输出的影响程度比F₃和F₂大得多,且F₂的灵敏度比F₃大得多,均值附近各输入参数的灵敏度大小排序为:F₁>F₂>F₃,而且两两之间的差距较大,因此可以认为F₁对输出即阿克隆磨耗量影响较大。相对而言,F₂和F₃对输出的影响非常小。

从表5可知,第一主成分包含100%定伸应力、300%定伸应力、拉断伸长率和拉断永久变形这4个原变量的信息,说明定伸应力、拉断伸长率和拉断永久变形对SBR复合材料的耐磨性能影响最为显著。在阿克隆磨耗试验中,橡胶分子受到定负荷应力作用,产生形变,受到破坏。这种形变使橡胶分子发生疲劳断裂,最终从橡胶表面脱落。当材料的定伸应力较大时,变形小,内部受破坏较弱,表现出耐磨性能较好。当橡胶材料具有较大的拉断伸长率时,可以增大局部分子抵抗裂纹破坏的能力,保证在摩擦过程结束后橡胶分子链能回复到原来状态,因此材料所表现出的耐磨性能更好。

5 结论

通过对橡胶材料的磨耗性能和力学性能试验数据的模拟分析,将主成分分析与BP神经网络结合建模,用于磨耗性能预测,得到如下结论。

(1)主成分分析对数据可以进行有效的降维,不损失数据原有的信息,并且可以减少神经网络的输入向量,同时消除输入向量之间的相关性,有效提高网络的学习效率。

(2)建立的BP网络预测精度高,适用于橡胶材料磨耗性能的预测。利用敏感性分析研究影响SBR复合材料耐磨性能的显著因素,结果与试验机理相符,为耐磨性能的研究提供了新方法。

参考文献:

[1] 三桥健八. 橡胶摩擦、磨耗试验方法的发展动向[J]. 蔡佩亮,译. 橡胶译丛,1996(4):230-236.
[2] 毕莲英. 汽车轮胎的刚性对胎面磨耗的影响[J]. 世界橡胶工业,2007,34(8):37-39.
[3] Thavamani P, Bhowmick A K. Abrasion of Vulcanizates of NR and SBR at High Temperatures[J]. Plastics, Rubber and

- Composites Processing and Applications, 1993, 20(4): 239-246.
- [4] Zhang S W, Yang Z C. Energy Theory of Rubber Abrasion by a Line Contact[J]. Tribology International, 1997, 30(12): 839-843.
- [5] 周海滨. 工程轮胎磨耗寿命的预测[J]. 世界橡胶工业, 2004, 31(6): 36-40.
- [6] 王伟, 罗仁, 曾京. 车轮型面磨耗预测模型及仿真分析[J]. 铁道车辆, 2009, 47(9): 1-5.
- [7] Payne A R. The Dynamic Properties of Carbon Black-loaded Natural Rubber Vulcanizates(Part I)[J]. Journal of Applied Polymer Science, 1962, 6(19): 57-63.
- [8] Jancic-Stojanovic B, Ivanovic D, Malenovic A, et al. Artificial Neural Networks in Analysis of Indinavir and Its Degradation Products Retention[J]. Talanta, 2009, 78(1): 107-112.
- [9] 张际先, 宓霞. 神经网络及其在工程中的应用[M]. 北京: 机械工业出版社, 1996: 40-59.
- [10] 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.
- [11] 曹翠微, 蔡体敏. 橡胶老化性能的神经网络研究方法[J]. 固体火箭技术, 2005, 28(2): 142-144.
- [12] He Y, Li X L, Deng X F. Discrimination of Varieties of Tea Using Near Infrared Spectroscopy by Principal Component Analysis and BP Model[J]. Journal of Food Engineering, 2007, 79(8): 1238-1242.
- [13] 于秀林, 任雪松. 多元统计分析[M]. 北京: 中国统计出版社, 2010: 154-166.
- [14] 杨海澜, 蔡艳, 陈庚军, 等. 主成分分析结合神经网络技术在焊接质量控制中的应用[J]. 焊接学报, 2003, 24(4): 55-64.
- [15] Im H J, Song B C, Park Y J, et al. Classification of Materials for Explosives from Prompt Gamma Spectra by Using Principal Component Analysis[J]. Applied Radiation and Isotopes, 2009, 67(7-8): 1458-1462.
- [16] Kadi H E, Al-Assaf Y. Prediction of the Fatigue Life of Unidirectional Glass Fiber/Epoxy Composite Lamina Using Different Neural Network Paradigms[J]. Composite Structure, 2002, 55(12): 239-246.
- [17] 梁循. 数据挖掘算法与应用[M]. 北京: 北京大学出版社, 2006: 193-210.
- [18] 王惠文. 偏最小二乘回归方法及应用[M]. 北京: 国防工业出版社, 1999: 57-73.
- [19] 陈燕. 数据挖掘技术与应用[M]. 北京: 清华大学出版社, 2011: 102-128.
- [20] Zhang S L, Zhang Z X, Pal K, et al. Prediction of Mechanical Properties of Waste Polypropylene/Waste Ground Rubber Tire Powder Blends Using Artificial Neural Networks[J]. Materials and Design, 2010, 31(8): 3624-3629.
- [21] 俞集辉, 韦俊涛, 彭光金, 等. 基于人工神经网络的参数灵敏度分析模型[J]. 计算机应用研究, 2009, 26(6): 2281-2284.
- [22] 赵野军, 吕柏源, 程源. 基于人工神经网络的橡胶螺杆挤出机智能化设计[J]. 特种橡胶制品, 2005, 26(2): 21-23.

收稿日期: 2013-08-04

Application of Principal Component Analysis and BP Artificial Neural Network in Prediction of Abrasion Resistance of Rubber Materials

XIANG Ke-lu, LUO Jin-lian, XIE Peng, WU You-ping

(Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: A back propagation(BP) neural network model based on sensitivity analysis was established to predict abrasion of SBR composites. The data of eight kinds of mechanical properties of SBR composites were dimensionally reduced through principal component analysis(PCA), and the PCA data were utilized as the input vectors while abrasion as the output vector of the BP network. Meanwhile, the sensitivity matrix of the input vector was calculated in order to analyze the influence of mechanical properties on abrasion. The results demonstrated that the co-linearity between the network input vectors could be eliminated by PCA and the network was simplified at the same time. The prediction error was within the allowable range, indicating that the BP network was suitable for SBR abrasion prediction. Sensitivity analysis indicated that the abrasion resistance of SBR was remarkably influenced by modulus, elongation at break and permanent deformation at break.

Key words: SBR; neural network; principal component analysis; abrasion resistance; sensitivity analysis