

神经网络在橡胶配方设计中的应用

曾海泉¹, 罗跃纲², 连永祥¹

(1. 沈阳化工学院 辽宁 沈阳 110021; 2. 沈阳工业大学, 辽宁 沈阳 110023)

摘要: 在实验数据的基础上, 利用人工神经网络建立了表示 NR 胶料配方成分与硫化胶物理性能对应关系的数学模型, 并用该数学模型对不同配方硫化胶的物理性能进行了预测, 预测结果与实验数值相符。利用这种方法还可定量分析相同硫化胶物理性能条件下各配方成分间的相互作用。

关键词: 橡胶; 人工神经网络; 配方设计

中图分类号: TQ330. 6⁺1 **文献标识码:** B **文章编号:** 1000-890X(2002)02-0073-04

橡胶配方是决定橡胶制品性能的关键因素, 由于材料配方与制品性能之间存在很复杂的非线性关系, 多数情况下无法建立完整精确的理论模型, 只能借助于回归方法得到经验公式。

传统的回归方法存在以下局限性:

- (1)使用不同的回归方法可获得不同的经验公式, 导致经验公式的繁多和不一致;
- (2)当配方项目及性能指标项目较多时, 采用回归公式无法完全再现实验数据;
- (3)当实验进一步完善, 实验数据增多的时候, 其他人员再进行回归时, 如果无法找到原来的回归方法、程序和实验数据, 原来的回归公式将不能被利用, 造成一定的浪费。

随着计算机的发展而出现的人工神经网络是人工智能方法, 它不像回归方法那样, 需预先给定基本函数, 而是以实验数据为基础, 经过有限次的迭代计算而获得的一个反映实验数据内在联系的数学模型, 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, 特别适用于研究像材料配方与制品性能之间关系的复杂非线性系统特性^[1, 2]。因此, 人们开始将人工神经网络应用于橡胶配方设计^[3]。

本工作利用人工神经网络进行硫化胶物理性能与其主要配方成分之间定量关系的研究, 以工

厂提供的 50 组实验数据作为训练样本, 应用当前使用最广的误差反向传播算法 BP 网络, 建立反映实验数据内在规律的数学模型, 并用该数学模型预测检测样本的物理性能, 同时, 将物理性能及硫黄用量作为输入, 其它成分作为输出, 得到在硫化胶物理性能一定的条件下硫黄与其它成分的用

1 人工神经网络模型

人工神经网络的模型很多, 误差反向传播算法 BP 网络是目前应用最广泛的网络模型之一, 它是一种前馈式多层神经网络模型, 网络结构如图 1 所示^[1, 2]。

人工神经网络模型是由输入层、输出层及若干隐层组成的, 每一个节点层都包括一定数量的神经元节点, 而且同一节点层的各节点之间互不连接。

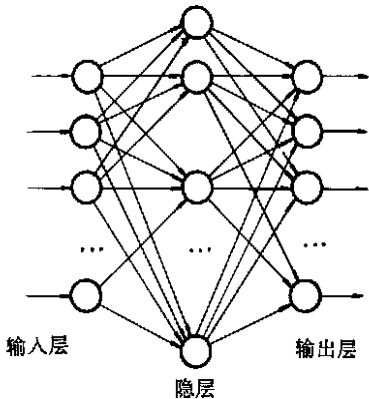


图 1 人工神经网络模型

作者简介: 曾海泉(1965-) 男, 江西会昌县人, 沈阳化工学院副教授, 东北大学在读博士, 主要从事橡胶加工工艺、设备、橡胶工程利用的研究。

用 I_1 至 I_m 表示输入, O_1 至 O_n 表示输出, 中间隐层上的神经元输出为 Y_j :

$$Y_j = f(\text{net}_j), \text{net}_j = \sum_{i=1}^{m+1} V_{ji} I_i \quad (1)$$

$j = 1, 2, \dots, L$

输出层的输出值可表示为 O_k :

$$O_k = f(\text{net}_k), \text{net}_k = \sum_{j=1}^{L+1} W_{jk} Y_j \quad (2)$$

$k = 1, 2, \dots, n$

式中 net_j ——隐层第 j 个神经元的输入;
 net_k ——输出层第 k 个神经元的输入;
 V_{ji} ——输入层与隐层之间的权值;
 W_{jk} ——隐层与输出层之间的权值。

输入层节点的作用函数为线性函数; 隐层与输出层之间的作用函数采用 Sigmoid 非线性函数表示:

$$f(x) = (1 - e^{-x}) / (1 + e^{-x}) \quad (3)$$

$f(x)$ 决定了神经网络模型的学习计算能力, 也决定了性能预测模型的构造方法与性能的优劣。训练一个神经网络就是通过调整权值以实现复杂非线性对象的建模和估计, 训练网络的指标函数取为 E :

$$E = 1 / (2p) \sum_{k=1}^n \sum_{q=1}^p (D_{qk} - O_{qk})^2 \quad (4)$$

式中 D_{qk} ——第 q 个学习样本的第 k 个分量, 通常称之为导师信号;

O_{qk} ——相应网络的实际输出值;

p ——训练样本数。

第 $t+1$ 次迭代的权值修正为:

$$W_{jk}(t+1) = W_{jk}(t) + \eta \hat{q} Y_j + \alpha [W_{jk}(t) - W_{jk}(t-1)] \quad (5)$$

$$V_{ji}(t+1) = V_{ji}(t) + \eta \hat{q} I_i + \alpha [V_{ji}(t) - V_{ji}(t-1)] \quad (6)$$

式中 η ——学习率;

α ——动量项系数;

$\hat{q}, \hat{q}$ ——学习信号。

学习信号的表达式为:

$$\hat{q} = (D_k - O_k) f'(\text{net}_k) \quad (7)$$

$$\hat{q} = \sum_{k=1}^n W_{jk} \hat{q} f'(\text{net}_j) \quad (8)$$

2 利用 BP 网络预测硫化胶性能

2.1 实验数据及配方

训练样本实验数据由某工厂提供。胶料配方为: NR 100; 硫黄 变量; 促进剂 M 变量; 炭黑 变量; 氧化锌 5; 硬脂酸 2; 防老剂 A

1. 5。硫化条件为 $145^\circ\text{C} \times 15 \text{ min}$ 。

硫化胶拉伸强度、300%定伸应力和扯断伸长率的测试均执行相应国家标准。

2.2 人工神经网络的构成及模型建立

在本项工作中, 取 $m=3$, $n=3$, 网络结构为 $3 \times 8 \times 3$, 即中间隐层为 8 个单元; 输入层为 3 个单元, 分别为硫黄、促进剂 M 及炭黑用量; 输出层 3 个单元, 分别是硫化胶的拉伸强度、300%定伸应力及扯断伸长率。

首先用学习样本训练网络, 为保证收敛, 对样本数据进行归一化处理, 使所有数据在 $[0, 1]$ 之间的网络空间变化。在训练网络过程中, 学习率为 0.7, 动量项系数为 0.5, 经过 1 810 次训练(系统学习误差为 0.000 1), 训练过程如图 2 所示。部分训练及检测样本见表 1。实验数据与网络输出的对比见表 2。

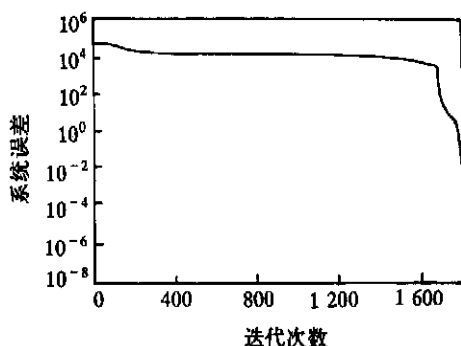


图2 神经网络训练过程

从表 2 可以看出, 网络的预测结果与实验值相差很小(最大误差为 5.4%), 这证明正确的网络输入-输出关系已经建立。

3 利用人工神经网络分析各配方成分之间的关系

硫黄用量对硫化胶的性能有重要的影响, 其它成分能否在某种程度上对其作用进行补偿是值

表 1 部分训练及检测样本

序 号	网络输入变量用量/份			实验值		
	硫黄	促进剂 M	炭黑	拉伸强度/ MPa	300%定伸应力/ MPa	扯断伸长率/ %
1	1. 00	2. 50	50	19. 9	5. 6	580
2	1. 75	1. 50	40	23. 5	6. 1	590
3	2. 00	0. 75	50	21. 3	5. 7	570
4	3. 00	0. 255	40	20. 9	5. 8	600
5	2. 75	1. 00	20	24. 3	4. 2	660
6	2. 25	1. 25	80	18. 0	7. 2	500
7	2. 75	0. 75	0	25. 5	2. 1	750
8	2. 50	1. 25	60	23. 4	6. 2	570

表 2 实验数据与网络输出的对比

序号	网络输入变量用量/份			实验值			网络输出变量		
	硫黄	促进剂 M	炭黑	拉伸强度/ MPa	300%定伸应 力/MPa	扯断伸长 率/ %	拉伸强度/ MPa	300%定伸应 力/MPa	扯断伸长 率/ %
1	1. 50	2. 50	50	21. 6	6. 1	570	20. 445	5. 863	566. 74
2	1. 75	1. 50	40	23. 0	6. 0	585	23. 483	6. 104	589. 87
3	2. 25	0. 45	60	20. 3	5. 8	560	20. 364	5. 594	569. 01
4	2. 00	1. 00	50	22. 1	5. 6	580	22. 107	5. 849	582. 42
5	2. 50	1. 00	20	23. 6	4. 4	660	24. 306	4. 203	662. 05
6	2. 75	1. 25	30	24. 0	5. 2	610	24. 520	5. 500	597. 23

得关注的事情。

在本工作中, 利用前述样本, 以拉伸强度、300%定伸应力、扯断伸长率及硫黄用量作为输入, 以促进剂 M 及炭黑用量作为输出, 建立了另一个网络。当对该网络输入相同的硫化胶物理性能及不同的硫黄用量时, 便可得到在相同硫化胶物理性能条件下硫黄与促进剂 M 及炭黑用量的关系, 如图 3 所示, 其中硫化胶的拉伸强度为 20. 5 MPa, 300%定伸应力为 5. 7 MPa, 扯断伸长率为 590%。

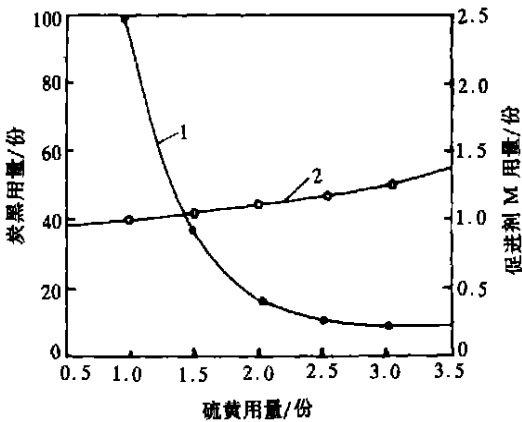


图 3 不同胶料组分的用量关系

1—促进剂 M 的用量; 2—炭黑的用量

从图 3 可以看出, 在一定范围内, 当硫黄的用量减小时, 促进剂 M 的用量增大, 这是由于硫黄及促进剂 M 都有加强硫化从而提高硫化胶物理性能的功能, 减小硫黄用量而导致的物理性能下降, 需要增大促进剂 M 用量补偿。

硫黄用量减小, 炭黑用量也减小, 其主要原因在于, 促进剂 M 用量的增大还不足以补偿由于硫黄用量的减小而导致的物理性能下降, 因此需要减小炭黑的用量, 以补足差额部分。另外, 从实验结果看, 促进剂 M 用量的增大会导致硫化胶扯断伸长率的微量减小, 这正好由炭黑用量的微量减小来补偿。

4 结语

利用人工神经网络技术可准确地预测硫化胶物理性能, 以便根据预测结果安排实验, 从而有效地减少实验次数, 节省了大量人力和物力。同时, 还可建立胶料配方各成分间的当量关系, 为定量分析各成分之间的相互作用开辟了新的途径。

参考文献:

[1] 庄镇泉, 王煦法, 王东生. 神经网络与神经计算机[M]. 北京: 科学出版社, 1994. 9-112

- [2] Eberhart R C, Donbblins R W. Neural Network PC Tools : A Practical Guide[M] . New York: Academic Press. 1990. 3-67.
- [3] 石鲜明, 赵 彤, 吴瑶曼, 等. 神经网络用于玻纤增强酚醛树

脂力学性能的预测[J]. 高分子材料科学与工程, 2000, 16(4): 117-119.

收稿日期: 2001-09-24

Application of neural networks to rubber formulation

ZENG Hai-quan¹, LUO Yue-gang², LIAN Yong-xiang¹

(1. Shenyang Institute of Chemical Technology, Shenyang 110021, China; 2. Shenyang University of Technology, Shenyang 110023, China)

Abstract: Based on experimental data, a mathematical model for the relationship between the physical properties of vulcanizate and the composition of rubber compound was built with artificial neural networks. The model was used to predict the properties of vulcanizates with different formulations, and the results of prediction showed no difference from the experimental data. The model could also be used to quantitatively analyse the interaction among the formula components of the different vulcanizates with the same physical properties.

Keywords: rubber; artificial neural networks; formulation

2001 年全国橡标委通用化学试验 方法分技术委员会标准审查会 在西安召开

中图分类号: TQ330.1 文献标识码: D

2001 年度全国橡标委通用化学试验方法分技术委员会标准审查会于 2001 年 10 月 23 ~ 28 日在陕西省西安市召开, 来自 29 个单位的 34 名代表参加了会议。

本次审查的标准共有 5 个, 经过认真审议和修改全部通过了其送审稿。各标准主要的制修订内容如下。

(1)GB/T 4500

原标准名称为《橡胶中锌含量的测定 原子吸收光谱法》, 将方法的适用范围扩大至生胶与橡胶制品; 可测锌的质量分数达 0.000 5 以上; 系列标准溶液的浓度有所改变。本标准修改采用 ISO 6101-1: 1991。

(2)GB/T 11201

原标准名称为《硫化橡胶中铁金属含量的测定 火焰原子吸收光谱法》, 对前版标准中的标准溶液配制方法、盐酸的浓度及试液的制备方法进

行了修改, 使其与国际标准一致; 铁粉的纯度改为质量分数大于 0.99。本标准修改采用 ISO 6101-5: 1990。

(3)GB/T 9873

原标准名称为《硫化橡胶中铅含量的测定 双硫腙光度法》, 将系列标准溶液的质量浓度改为 0, 0.2, 0.4, 0.6 和 0.8 $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$; 处理试样时, 将两次滤液进行合并。本标准修改采用 DIN 53599 (3)-1978。

(4)GB/T 11202

原标准名称为《橡胶中铁含量的测定 1, 10-菲罗啉光度法》, 增加了有关残渣的除硅方法; 配制标准溶液的试剂由高纯铁粉(质量分数为 0.999 9)改为六水合硫酸亚铁铵(纯度 99.9%)。本标准修改采用 ISO 1657: 1986。

(5)新制定标准

标准名称为《橡胶 酸消化法溶解》, 规定了用硝酸或硝酸和硫酸的混合酸消化胶乳生胶、混炼胶和硫化橡胶的方法, 适用于橡胶和橡胶制品的消化溶解。本标准等同采用 ISO 9028: 1989。

(北京橡胶工业研究设计院 纪 波供稿)