

应用均匀网格法优选橡胶配方

王 伟

(青岛第二橡胶厂 266041)

高 齐 圣

(青岛化工学院 266042)

摘要 将均匀设计和传统网格法相结合,提出一种新的配方优选方法——均匀网格法。借助均匀设计表,在均匀网格法的基础上选择优化计算点,用工作过程模拟计算程序计算选定点的胶料物理性能值,再经过可行性筛选后进行橡胶配方优选。IR配方设计实例表明,应用该优化方法可得到满意的配方。

关键词 橡胶配方,性能,均匀网格法

橡胶配方的合理与否,对橡胶制品的质量有决定性的影响。如何通过安排最少量的试验方案,来建立配方组分与物理性能之间的回归关系,进而应用优化设计理论寻找最优配方用于实际生产过程中,已构成了现代橡胶配方设计的主要内容。目前,橡胶配方中通常采用的试验设计方案是回归设计,包括回归正交设计、旋转正交设计和通用旋转设计,最近又提出了均匀设计。试验数据的回归分析一般都是采用最小二乘法。有关配方建模的技术已比较成熟,唯有配方优选法还有待进一步讨论。由于橡胶配方优化问题是一个多目标、非线性规划问题,求解方法至今尚未完全解决,不能完全照搬到橡胶配方问题中,因此在实际配方设计中,网格法是常用的优化方法。

运用网格法求最优配方的基本思想是:将每个变量因子分成若干水平(水平的多少可通过给定一个步长来确定),把各变量因子的不同水平组合起来,代入回归方程,计算各物理性能值,满足全部约束条件的因子水平组合即为较优的配方。采用网格法寻找的最优配方与给定的步长有关,若步长过大,会出

现“漏网”,难以得到好的配方;而步长过小,则搜索点太多,计算量太大,以致难以计算。为此,我们借助均匀设计表,在均匀网格基础上选择优化计算点,然后用工作过程模拟计算程序计算选定点的胶料物理性能值,最后经过可行性筛选后进行优选,直至满足某种精度为止。本文是在前文^[1]基础上新做的工作。

1 均匀网格优化法原理

1.1 均匀网格选取

按照实际因素数、水平数确定合适的均匀表 $U_n(t^s)$, U 表示均匀表, n 表示试验次数, t 表示水平数, s 表示最多可安排的因素数,这里 $n = t, s = t - 1$ 。三因素九水平的均匀表 $U_9(9^3)$ 见表 1。

1.2 均匀网格优化法计算步骤

(1) 设第 t 轮均匀设计表中 n 个配方的配合剂用量向量为 X_1, X_2, \dots, X_n [这里 $X_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip})$], 代入相应性能的回归方程,得到的相应性能指标值为 Y_1, Y_2, \dots, Y_n [这里 $Y_i = (y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{ik})$], p 和 k 分别为配合剂种数和性能项数;

(2) 将向量 Y_1, Y_2, \dots, Y_n 按多属性决策法(MADM)由优到劣排序,在 n 个方案中

表 1 $U_9(9^3)$

试验配方	配合因素		
	x_1	x_2	x_3
1	1	4	7
2	2	8	5
3	3	3	3
4	4	7	1
5	5	2	8
6	6	6	6
7	7	1	4
8	8	5	2
9	9	9	9

保留前 m 个比较好的点(可事先给定一个阈值 I^* , 排序值大于 I^* 的予以保留, 否则剔除);

(3) 进行终止准则检验, 如检验通过则停止调优, 否则对变量进行区间收缩, 根据收缩后得到的新优化变量的上、下限按 $U_n(t')$ 重新设计实际用量表, 再进行下一轮调优。

1.2.1 终止准则

若在第 t 轮调优时, 满足

$$\frac{\|X_1 - X_m\|}{\|X_m\|} \leq \epsilon_1 \quad (\| \cdot \| \text{ 为向量范数})$$

$$\text{且 } \frac{|I_1 - I_m|}{|I_m|} < \epsilon_2 \quad (I_1 \text{ 和 } I_m \text{ 为 MADM 排序值})$$

则终止调优并输出 X_1, X_2, \dots, X_m 中任何一个作为最优配方。其中 ϵ_1 和 ϵ_2 为事先给定的精度。

1.2.2 区间收缩

第 t 轮时, 每种配合剂用量范围的下限为: $a_{t,j} = \min_{1 \leq i \leq n} \{x_{ij}\}$; 上限为: $b_{t,j} = \max_{1 \leq i \leq n} \{x_{ij}\}$ 。式中 $j = 1, 2, \dots, p$, 表示配合剂种类。

则第 $t+1$ 轮时, 每种配合剂用量范围的下限为: $a_{(t+1),j} = \min_{1 \leq i \leq m} \{x_{ij}\}$; 上限为: $b_{(t+1),j} = \max_{1 \leq i \leq m} \{x_{ij}\}$ 。

显然, $[a_{(t+1),j}, b_{(t+1),j}] \subseteq [a_{t,j}, b_{t,j}]$

2 配方优化实例

以 IR 配方为例, 主要考虑的配合剂的

用量为: 半补强炭黑用量 (x_1)、硫黄用量 (x_2) 和促进剂 TMTD 用量 (x_3)。考虑的胶料性能为拉伸强度 y_1 (MPa)、扯断伸长率 y_2 (%), 撕裂强度 y_3 ($\text{kN} \cdot \text{m}^{-1}$), 120 °C 门尼焦烧 y_4 (min)、300% 定伸应力 y_5 (MPa)、扯断永久变形 y_6 (%) 和 168 °C 时的 t_{90} y_7 (min)。

配合剂用量(份)范围为: $20 \leq x_1 \leq 40$; $0.8 \leq x_2 \leq 2.0$; $0.8 \leq x_3 \leq 2.2$ 。

通过安排二次回归正交设计, 应用最小二乘法, 胶料各项性能与配合剂组分之间的回归方程为:

$$y_1 = 17.5 + 0.374x_1 - 3.66x_2 - 5.58x_3 +$$

$$0.067 \quad 64x_1x_2 + 0.031 \quad 64x_1x_3 -$$

$$0.087 \quad 86x_2x_3 - 0.010 \quad 36x_1^2 +$$

$$0.45x_2^2 + 1.35x_3^2$$

$$y_2 = 607 + 17.1x_1 - 59.4x_2 - 11.2x_3 -$$

$$0.276 \quad 6x_1x_2 + 0.184 \quad 6x_1x_3 -$$

$$35.58x_2x_3 - 0.307 \quad 1x_1^2 +$$

$$29.92x_2^2 - 1.46x_3^2$$

$$y_3 = 55.4 + 1.91x_1 - 11.1x_2 - 20.6x_3 +$$

$$0.368 \quad 9x_1x_2 + 0.369 \quad 2x_1x_3 -$$

$$3.514 \quad 4x_2x_3 - 0.051 \quad 7x_1^2 +$$

$$0.92x_2^2 + 1.69x_3^2$$

$$y_4 = 30.2 - 1.13x_1 + 2.58x_2 + 34.1x_3 +$$

$$0.155 \quad 3x_1x_2 + 0.077 \quad 3x_1x_3 +$$

$$0.434 \quad 9x_2x_3 + 0.013 \quad 2x_1^2 -$$

$$4.49x_2^2 - 9.46x_3^2$$

$$y_5 = 41.2 - 1.28x_1 + 21.0x_2 - 11.0x_3 -$$

$$0.338 \quad 2x_1x_2 + 0.348 \quad 2x_1x_3 +$$

$$6.589 \quad 5x_2x_3 + 0.021 \quad 5x_1^2 -$$

$$6.52x_2^2 - 0.71x_3^2$$

$$y_6 = 27.0 + 0.43x_1 - 0.42x_2 - 10.7x_3 +$$

$$0.030 \quad 7x_1x_2 - 0.132x_1x_3 +$$

$$1.317 \quad 9x_2x_3 + 0.000 \quad 7x_1^2 +$$

$$0.19x_2^2 + 5.24x_3^2$$

$$y_7 = 20.7 - 0.09x_1 + 3.32x_2 - 14.3x_3 + 0.0384x_1x_2 + 0.0725x_1x_3 - 0.110x_2x_3 - 0.0011x_1^2 - 0.65x_2^2 + 3.10x_3^2$$

选择 $U_9(9^3)$ 表进行均匀网格法优化, 阈值 $I^* = 0.99$, 三轮即得到最优配方:

第一轮: 变量区间 $20 \leq x_1 \leq 40$; $0.8 \leq x_2 \leq 2.0$; $0.8 \leq x_3 \leq 2.2$ 。

利用 MADM 法从 $U_9(9^3)$ 的 9 个方案中选出 4 个比较好的配方 ($m=4$):

$X_1 = (32, 1.55, 1.675)$; $X_2 = (22, 1.85, 1.5)$; $X_3 = (37, 1.4, 0.975)$; $X_4 = (25, 1.1, 1.15)$ 。

第二轮: 变量区间 $22 \leq x_1 \leq 37$; $1.1 \leq x_2 \leq 1.85$; $0.975 \leq x_3 \leq 1.675$ 。

利用 MADM 法从 $U_9(9^3)$ 的 9 个方案中选出 3 个比较好的配方 ($m=3$):

$X_1 = (29.5, 1.48, 1.33)$; $X_2 = (31.38, 1.57, 1.41)$; $X_3 = (27.63, 1.38, 1.24)$ 。

第三轮: 变量区间 $27.63 \leq x_1 \leq$

31.38 ; $1.38 \leq x_2 \leq 1.57$; $1.24 \leq x_3 \leq 1.41$ 。

利用 MADM 法从 $U_9(9^3)$ 的 9 个方案中选出 3 个比较好的配方 ($m=3$):

$X_1 = (29.51, 1.47, 1.33)$; $X_2 = (29.04, 1.45, 1.3)$; $X_3 = (29.97, 1.5, 1.35)$ 。

取第三轮中排序值最高的配方 $X_1 = (29.51, 1.47, 1.33)$, 即 $x_1 = 29.51$, $x_2 = 1.47$, $x_3 = 1.33$, 此为最优配方, 其相应的胶料物理性能预测值为:

$$y_1 = 14.08$$

$$y_2 = 729.81$$

$$y_3 = 51.63$$

$$y_4 = 41.68$$

$$y_5 = 34.71$$

$$y_6 = 33.86$$

$$y_7 = 11.32$$

参考文献

- 1 高齐圣, 隋树林, 孟宪德, 等. 均匀设计在橡胶配方研究中的应用. 橡胶工业, 1996, 43(10): 583~585

收稿日期 1997-05-28

Application of Uniform Network Method to Rubber Recipe Optimization

Wang Wei

(Qingdao Rubber Factory No.2 266041)

Gao Qisheng

(Qingdao Institute of Chemical Technology 266042)

Abstract On the basis of combination of uniform design and conventional network method, the uniform network method for rubber recipe optimization was proposed. By means of the uniform design table, the optimized calculation points were chosen based on the uniform network method and the physical property values of compound at the chosen points were calculated with a working process simulating procedure. Then an optimized rubber recipe was obtained after feasible screening. The example of IIR recipe design showed that a satisfactory recipe could be obtained by the said method.

Keywords rubber recipe, property, uniform network method