

· 研究简报 ·

利用模式识别技术评价镍系顺丁橡胶质量

高洪琢 张延寿 许禄

(中国科学院长春应用化学研究所, 长春)

关键词 模式识别、质量评价、顺式1,4-聚丁二烯、松弛时间

在合成橡胶生产中, 橡胶质量的评定通常是抽取样品在炼胶机上进行配炼操作, 观察其包辊与吃药情况, 及测定硫化胶的物理性能参数来确定质量级别的。鉴于各人实践经验与操作技术不同, 结果常受人为因素影响。近几年, 有人提出用测定橡胶物性参数来估计质量的方法^[1], 已用于实践, 取得了一定的效果。但是这种处理较粗糙, 甚至某些样品会出现各种参数互相矛盾、难于定级的现象, 更谈不上计算分级。因此, 怎样较正确地科学地进行橡胶质量评价是值得研究的课题。

模式识别技术是一门新兴科学, 属于人工智能范畴。它研究用计算机部份地代替人的识别能力, 是解决多因素问题的有效工具。橡胶物性指标有多个, 不同程度地与质量有关, 到底哪些是关键指标, 能否运用计算机通过物性指标计算进行质量分级, 是本文用模式识别技术要解决的问题。

采用北京石化总公司胜利化工厂镍系顺丁橡胶生产过程中部份抽样数据为样本, 共57个。以其物性指标: 1. 生胶松弛速率 n ; 2. 松弛时间 $\tau(\text{sec})$; 3. 屈服强度 $\sigma_y(\text{kg/cm}^2)$; 4. 定伸强度 $\sigma_{300}(\text{kg/cm}^2)$; 5. 屈服强度与定伸强度之比 σ_{300}/σ_y ; 6. 门尼粘度 ML ; 7. $\Delta\Sigma ML$; 8. 硫化胶的定伸强度 $\sigma_{BS}(\text{kg/cm}^2)$; 9. 抗张强度 $\sigma_{35}(\text{kg/cm}^2)$; 10. 伸长率 $\epsilon(\%)$ 为样本特征, 共十个。整理成数据表(表1)。其中“等级”一项, 是操作人员根据观察炼胶行为而评定的质量级别。在模式识别中, 分级被称为分类。在下面的研究中, 我们把每个样本看作为10维特征空间中的一点, 表示为

$$X_k = (x_{k1}, x_{k2}, \dots, x_{km})^T \quad k = 1, 2, \dots, n$$

表1 数据表格式

特征 样本	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	等级*
1	0.67	5.00	0.77	0.46	0.60	35.00	11.00	197.0	107.0	467.0	1
2	0.59	5.50	0.78	0.48	0.62	38.30	30.50	204.0	96.0	501.0	1
⋮	⋮	⋮									⋮
57	0.30	21.50	1.06	0.88	0.83	39.20	59.40	188.0	109.0	449.0	3

* 等级1: 优, 等级2: 良, 等级3: 中

* 1987年1月6日收到。

其中 k 表示样本号, n 表示样本总数, m 表示特征总数, T 表示矩阵的转置。

1. 逐步判别法^[2]

利用模式识别技术的逐步判别法, 根据各特征对分类的贡献大小, 选取关键特征; 同时得到各特征的加权因子。这是基于 Bayes 准则的判别分析方法。由计算结果可知, 影响质量级别的主要指标是生胶的松弛速率、松弛时间、门尼粘度与硫化胶的伸长率 4 个特征, 它们的加权因子分别是 0.384, 0.823, 1.000, 0.319。因此, 可以把每个橡胶样本看作为 4 维特征空间中的一。这就是特征选择的过程。

表 2 判别系数

g	q_g	C_{0g}	C_{1g}	C_{2g}	C_{3g}	C_{10g}
1	-1.1527	-350.49	500.80	5.2016	0.9884	0.7354
2	-0.9520	-324.64	463.56	5.2157	1.3770	0.6810
3	-1.2098	-344.29	474.01	5.8895	1.5823	0.6719

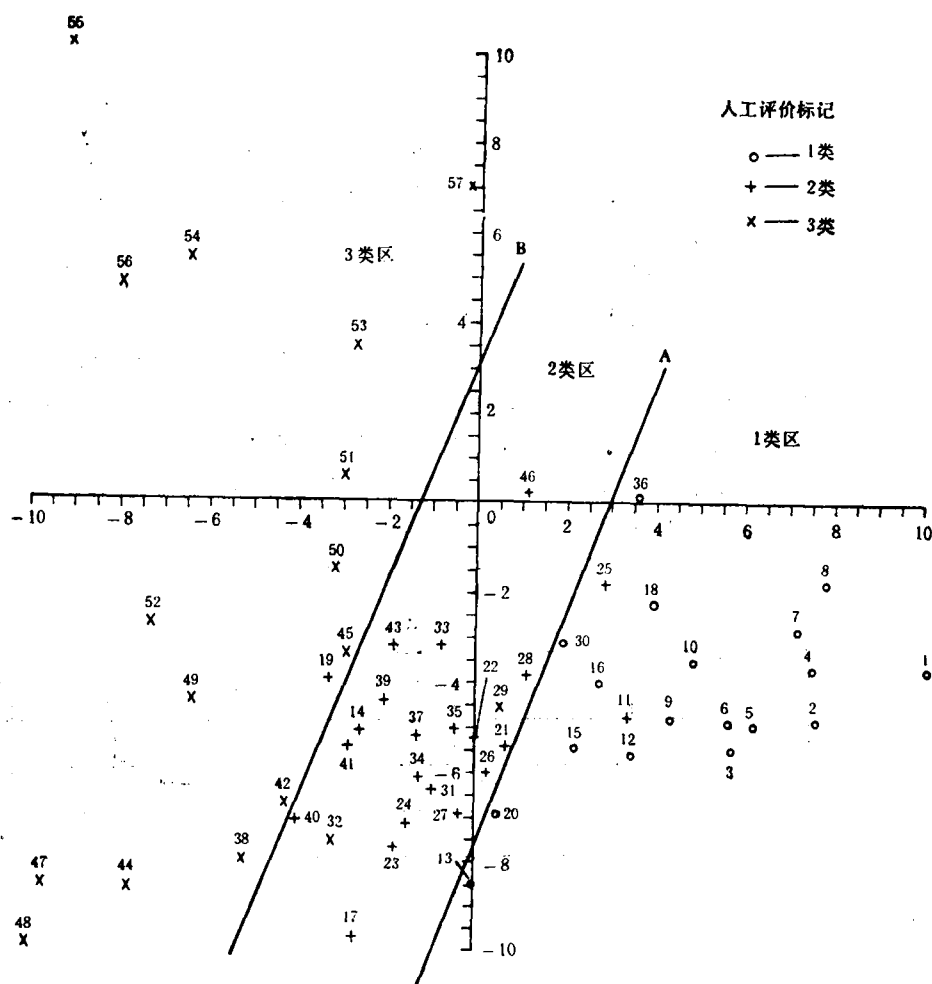


图 1 锦系顺丁橡胶的非线性映照图

在逐步判别过程中, 计算机根据“等级”与 4 个主要特征之间的关系, 得到判别系数, 如表 2 所示, 从而建立判别函数。这实际上是计算机“学习”的过程, 吸取人的判别经验, 总结出判别规律, 即判别函数。利用此函数可计算未知样本的归属, 实现质量分级。

2. 非线性映照法 (NLM)^[2-4]

对于 4 维空间中点分布情况, 人是无法想像的, 将其转换成 2 维空间后, 就会一目了然。非线性映照法实现了这一变换。实施 NLM 之前, 如果样本的特征数较多, 必须进行主要特征选择。这里是用逐步判别法实现的, 当然也可用其它方法。然后经标准化与加权处理, 进行主成份分析与优化, 实现了样本的数据结构显示, 如图 1 所示。

计算是在 CROMEMCO CS-2 计算机上用 FORTRAN 语言进行的。

3. 逐步判别法分类结果

表 3 是 Bayes 逐步判别法与人工评价的对照表。表中同时给出逐步判别法得到的后验概率。由表可以看到有 9 点与人工评价不一致, 符合率为 84%。

表 3 逐步判别法的分类结果

序号	人工评价	逐步判别	后验概率	序号	人工评价	逐步判别	后验概率
1	1	1	1.000	30	1	1	0.729
2	1	1	1.000	31	2	2	0.891
3	1	1	0.998	32	3	2	0.788
4	1	1	0.996	33	2	2	0.899
5	1	1	0.982	34	2	2	0.910
6	1	1	0.994	35	2	2	0.944
7	1	1	0.999	36	1	1	0.707
8	1	1	0.996	37	2	2	0.932
9	1	1	0.952	38	3	3	0.601
10	1	1	0.967	39	2	2	0.775
11	2	1	0.912	40	2	2	0.715
12	1	1	0.990	41	2	2	0.782
13	1	2	0.629	42	3	2	0.621
14	2	1	0.692	43	2	3	0.550
15	1	1	0.743	44	3	3	0.852
16	1	1	0.734	45	3	2	0.600
17	2	2	0.922	46	2	2	0.882
18	1	1	0.869	47	3	3	0.948
19	2	2	0.519	48	3	3	0.947
20	1	2	0.901	49	3	3	0.901
21	2	2	0.679	50	3	3	0.511
22	2	2	0.902	51	3	3	0.667
23	2	2	0.890	52	3	3	0.950
24	2	2	0.921	53	3	3	0.903
25	2	2	0.831	54	3	3	0.998
26	2	2	0.968	55	3	3	1.000
27	2	2	0.974	56	3	3	0.999
28	2	2	0.888	57	3	3	0.846
29	3	2	0.770				

这种方法,一旦判别函数求得之后,可用样本物性数据判别分类,从而实现分级计算。

4. 非线性映照法分类结果

图 1 是 57 个顺丁橡胶样本的非线性映照图(图中 3 类符号标注是人工评价的等级)。它是在误差函数 $E = 0.0087$ 情况下得到的。 $E \leq 0.05$ 是满意值,所以可以认为它非常好地反映了 4 维特征空间的样本分布情况。在图上,参考人工评价结果进行聚类分析,画出两条判别线 A 与 B。它们将样本分为三个区: 1 类区在右侧, 3 类区在左侧, 2 类区在中间。由此可以看到一个规律: 在图上由右向左,是质量由好变坏的趋势。由样本的具体参数可知,样本在图上的具体位置,定量地反映了质量情况。由图可以看到,只有 5 点与人工评价不一致,符合率达到 91%。

综上所述: (1) NLM 法采用逐步判别法中的特征选择结果,得到了与人工评价基本一致的结果,证明这种特征选择法是正确的,即用少量物性指标就可以实施质量评价。这于实际生产是很有意义的。(2) 选用一批较准确的人工评价样品,输入计算机进行“学习”之后,可以计算机代替人工对未知样本进行评价。逐步判别法计算较简单,且特征选择部份很有用; NLM 法较直观,但计算较复杂。两种方法可单独使用,也可同时使用,结果对照,效果较好。(3) 本文虽然涉及的是镍系顺丁橡胶,但对其它各种有多因素关系的产品,同样也能用此技术加以判别。使用模式识别法评价产品质量,如果将得到的信息实时反馈,构成闭环控制,可为现代化大生产创造条件,所以具有深远意义。

参 考 文 献

- [1] 燕山石化总公司胜利化工厂实验室,中国科学院长春应用化学研究所六室,合成橡胶工业,1974,6,481,
- [2] 中国科学院计算中心概率统计组,概率统计计算,科学出版社,北京,1983.
- [3] Kowalski, B. R. and Bender, C. F., J. A. C. S., 1972,94, 5632.
- [4] 江乃雄,李庆芝,分子科学学报,1981,1,115.

PATTERN RECOGNITION TECHNIQUE FOR EVALUATION OF THE QUALITY OF CIS-1, 4-POLY BUTADIENE RAW RUBBER PREPARED WITH NICKEL CATALYST

GAO Hongzhuo, ZHANG Yanshou and XU Lu

(Changchun Institute of Applied Chemistry, Changchun)

ABSTRACT

The relationship between the parameters of physical properties of cis-1,4-poly butadiene raw rubber and artificial evaluation was established using pattern recognition technique. The important parameters controlling the quality of raw rubber were obtained. Furthermore, the mathematical formula instead of artificial evaluation to calculate the quality gradation with parameters of physical properties was developed.

Key words Pattern Recognition, Evaluation of The Quality, Cis-1,4-poly Butadiene, Relaxation Time