

doi:10.3969/j.issn.1001-3539.2023.02.024

人工神经网络在材料开发中的应用研究进展

于志省, 李应成, 王宇遥, 沈志刚, 白瑜, 苏智青, 王洪学

[中石化(上海)石油化工研究院有限公司合成材料研究所, 上海 201208]

摘要:介绍了人工神经网络(ANN)的发展历程、模型特性与分类,以及反向传播(BP)神经网络模型及其改进算法,重点论述了ANN在聚合反应过程和质量控制、成型加工工艺设计与条件优化、材料使用与服役性能预测方面的应用进展,以及在辅助性能表征与分析等方面的应用研究状况,并指出了ANN在未来新材料开发中应用的发展方向 and 亟待解决的问题。

关键词:人工神经网络;反向传播网络;质量控制;性能预测;优化设计;新材料开发

中图分类号: TQ327.8 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3539(2023)02-0158-07

Research Progress on Application of Artificial Neural Network in Material Development

Yu Zhixing, Li Yingcheng, Wang Yuyao, Shen Zhigang, Bai Yu, Su Zhiqing, Wang Hongxue

(R&D Division for Synthetic Polymers, Sinopec Shanghai Research Institute of Petrochemical Technology Co., Ltd., Shanghai 201208, China)

Abstract : The development history, model characteristics and classification of artificial neural network (ANN) were introduced. The back propagation (BP) neural network model and the improved algorithms were discussed. The application progress of ANN in the polymerization reaction process and the quality control of polymer, the design of molding process and the optimization of conditions, as well as the use of material and the prediction of service performances were emphatically reviewed. Besides, the application research status of ANN in auxiliary performance characterization and analysis were described. Finally, the development direction and urgent problems of ANN application in the future development of new materials were pointed out.

Keywords : artificial neural network ; back propagation network ; quality control ; prediction of performances ; optimization of design ; development of new materials

人工神经网络(ANN),简称神经网络,它是在现代神经科学研究成果的基础上,对生物神经系统的结构和功能进行数学抽象、简化和模仿而逐步发展起来的一种新型信息处理和计算系统^[1],是根植于神经科学、数学、统计学、计算机科学、物理学和工程学等学科的一门技术。它无须任何先验公式,即可从已有数据中自动归纳规则,获取数据之间的内在规律,并通过训练模拟预测出最优化数据结果。

由于ANN具有自学习、自组织、自适应能力以及高容错、高度非线性描述能力等优点,现已广泛应用于计算机、医学、化学、化工、材料、环境、农业、气象、经济、交通、通讯、机器人、自动化、军事、航空航天等领域^[2]。目前,ANN已成为材料科学和传统工程材料开发与应用中一种最为成熟、有效的机器学习算法,它不仅可以预测材料的热学、物理、力学、摩擦、电学等性能,还能够为研究开发与应用节省时间和成

本^[3]。其中,在材料领域,ANN已被广泛地应用于材料的组成、结构、工艺、性能及表征等方面,极大地促进了高分子学科的发展^[4-5]。

笔者在对ANN技术介绍的基础上,讨论了常用的反向传播(BP)神经网络及其算法改进,重点综述了ANN技术在聚合与质量控制、加工工艺条件优化、使用性能预测以及辅助表征与分析等方面的研究应用现状,并对其未来的发展趋势进行了展望。

1 ANN简介

人体大脑的神经元结构,包括细胞体和突起两部分,如图1所示。细胞体具有细胞代谢和联络、整合与传输信息的作用。突起有树突和轴突两种:前者接受其他神经元轴突传来的信息并传递给细胞体,后者接受外来刺激,再由细胞体传出。ANN就是一种模拟人脑结构及其功能对信息进行处

基金项目: 中国石油化工股份有限公司项目(218024-9, 421074-1)

通信作者: 李应成,教授,博士生导师,主要从事合成材料、表面活性剂及应用研究

收稿日期: 2022-11-01

引用格式: 于志省,李应成,王宇遥,等.人工神经网络在材料开发中的应用研究进展[J].工程塑料应用,2023,51(2):158-164.

Yu Zhixing, Li Yingcheng, Wang Yuyao, et al. Research progress on application of artificial neural network in material development[J]. Engineering Plastics Application, 2023, 51(2): 158-164.

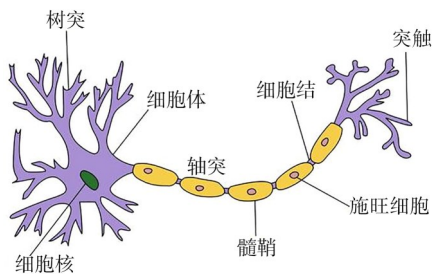


图1 人体大脑神经元结构

理的复杂系统,其特点为:具有并行结构和较强的大规模并行处理机制;分布式结构使其具有与人脑一样的容错性和联想能力;具有自学习、自组织、自适应、容错性、鲁棒性等特点,用于解决知识获取、函数逼近、模式识别、信号处理、联想记忆、并行推理及聚类分析等问题。从其发展进程来看,ANN大致分为5个发展阶段(见表1)^[6-7]。其中,Rosenblatt定义了第一个真正意义上的ANN模型—感知器,即在M-P模

型的基础上对输入、输出神经元进行简单连接,实现了对输入的线性分类。随后,经过几十年的发展,至今已形成了几十种ANN模型^[2]。

根据神经元之间的互连方式(拓扑结构),ANN可分为四类^[7-8]:①前馈型ANN,即神经元分层排列,按照层次先后顺序连接,后一层的神经元接受前一层输入信号并将输出信号输出给下一层的每一个神经元,如感知器、线型联想器、Hopfield网络、径向基函数网络等;②层内互连前馈型ANN,其结构中同层神经元之间存在互连关系,通过同层神经元之间相互作用,实现层内神经元活动的控制;③反馈型ANN,其结构中最后一层的神经元会将输出信号反馈到最前一层的神经元中,可用于动态时间序列过程,如BP神经网络、Kohonen自组织网络、Boltzmann网络等;④互连型ANN,其任意两个神经元之间都可以建立单向的或双向的连接关系。表2列举了几种主要的ANN模型、结构及其典型的应用领域^[9-10]。

表1 ANN发展历程及典型模型

阶段	年代与人物	发展模型	特性
孕育期	1943年 W McCulloch, W Pitts	M-P形式化模型	新理论新模型的提出,拉开研究序幕,奠定学习算法的基础
	1948年 John Von Neumann	自动机网络结构	
	1949年 D O Hebb	Hebb学习规则	
诞生期	1957年 Frank Rosenblatt	感知器(Perceptron)模型	在自动控制、模式识别中取得显著成效
	1960年 Bernard Widrow, Marcian Hoff	自适应线性元件(Adaline)模型	
挫折期	1969年 M Minsky, Papert	《感知器》数学证明	感知器受到质疑,研究停滞或处于低潮
	1970年代	适应谐振理论、自组织映射、认知机	
重生期	1974年 Paul Werbos	BP反向传播模型	方向传播算法再次激发研究兴趣
	1982年 J J Hopfield	Hopfield离散模型	
	1984年 J J Hopfield	Hopfield连续模型	
	1986年 D E Rumelhart, McClelland	PDP并行分布处理理论、BP算法	
成熟期	1987年至今	最小二乘法、投影算法应用 机率网络、退火网络	“预训练+精调”方式解决难以训练难题

表2 典型ANN特性及其应用领域

类型	拓扑结构	有无监督学习	优点	缺点	应用领域
BP网络	前馈	有	较强的非线性映射和联想记忆能力	收敛速度慢	模式识别,自适应控制,信号处理
RBF 径向基	前馈	有	分类能力,收敛速度快,强映射功能	推理过程和依据解释困难,算法需完善	模式识别,时序分析,图像处理,错误检测
Hopfield网络	反馈	有	计算能力强大	记忆容量有限,计算代价高,需对称连接	自联想或异联想存储器,优化计算
SVM支持向量机	前馈	有	避免过拟合,非线性映射,计算效率高	大规模训练难度大	数据分类,文本归类,模拟预测
SOM自组织映射	前馈	无	自组织、可视化性能好	结构固定,顺序依赖	语音识别,聚类分析,联想记忆,图像处理

BP神经网络是一种正向求解、反向传播误差并达到修改层次之间连接权值的多层前馈网络模型,包括前馈输入训练模式、计算反向传播的相关误差、权重调整等三个阶段。因其算法实现了多层网络学习的设想,使其具有广泛的适应性和有效性,从而大大扩展了使用范围,成为目前应用最广泛的神经网络。

从结构上来看,BP网络包含输入层、输出层以及处于输入、输出层之间的中间层(隐含层)(见图2)。任意两个神经元

之间都可以建立连接关系,这种关系既可以是单向的,也可以是双向的。每个输入神经元都有一个决定其与下一个神经元互联强度大小的权重因子。实际应用中,隐含层包含单个层或多个层,每一层都有不同数量的神经元。隐含层与外界不连接,但其状态会影响输入、输出之间的关系。改变隐含层的权系数,将改变整个多层神经网络的性能。隐含层单元数太少,网络可能无法训练或容错性差;隐含层单元数太多,又使得学习时间过长,误差也可能达不到最佳。

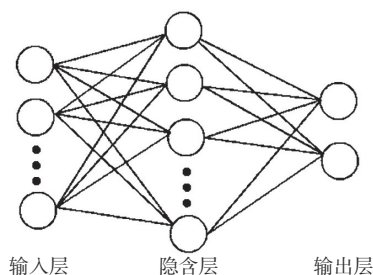


图2 BP型神经网络结构

BP算法还存在一定的缺陷^[7,11]:“黑箱”效应,即无法对模型或训练结果作出直观的解释;训练速度慢且易陷入局部极小值,无法得到最优性能;学习时间过长,信息记录过多,导致学习过度,误差反而大幅增加;缺乏确定的网络结构选择标准和理论指导;学习能力与预测能力关系较为复杂,随着学习能力提高预测能力反而下降,出现“过拟合”现象;对样本依赖性强,需选择代表性数据来反映样本整体规律,才能建立起正确的映射关系和高精度的模型。对此,为了避免局部最小和提高收敛速度,许多学者提出了多种高效的改进方法^[12],如加动量算法、可变学习速率的梯度下降算法、牛顿法等。另外,为了得到全局最优解,研究者还结合其它领域较为成熟的优化算法和参数估计理论,提出各种基于新理论的改进算法,如遗传算法、模拟退火等^[13]。

2 ANN在高分子材料领域的应用

为了满足工程应用对材料一项或多项性能指标的要求,往往通过选择合适的结构组成、比例以及适宜的制造工艺来设计和生产聚合物及其复合材料。结构组成、工艺优化、性能关联规律,三者有机结合,缺一不可^[14]。材料设计与应用很大程度上依赖于性能,性能研究又受内部结构、生产工艺等复杂因素影响,是对材料进行评估并用于特殊工程应用的关键环节。运用传统的数学建模方法来研究处理结构、工艺与性能之间的关系,往往使得模型本身存在较大的局限性,难以满足工程技术需求^[15]。这是由于传统的数学模型无法有效地处理非线性、高噪声、数据样本分布不均匀等复杂数据样本导致的。

近二十年来,ANN以其建模的高效性、准确性和从已知数据中获取知识等优势,引发材料研究者的广泛关注和运用。通过网络训练,学习隐藏在输入层(配方、组成、工艺条件等)与输出层(材料性能)之间的关系,建立输入/输出数据之间的非线性关系,适用于最优配方的搜索;同时,区分研究过程中的规律和噪音,采用补充试验结果对网络进一步训练,获得更好的学习效果;利用矩阵运算等方法,无须大的结构改变,适用于处理多输入、多输出即多因子、多水平、多性能的问题。

2.1 高分子聚合与加工工艺设计

聚合过程是一个动态变化、复杂的非线性反应过程,对此研究人员很难设计出一个精确的过程模型和控制方案。ANN模型不仅有助于聚合反应器设计,而且还有助于其他

难以适时修正的参数的预测,如反向建模、产品质量、聚合复合体系以及过程优化等^[16]。

Noor等^[17]详细地综述了不同类型的ANN模型在乙酸乙烯酯连续聚合体系、气相乙烯聚合体系、连续管式反应器中苯乙烯自由基聚合体系、甲基丙烯酸甲酯自由基聚合体系等的反应过程控制,以及苯乙烯聚合物的分子量、分子量分布、平均分子链尺度、引发体系调控等方面的应用进展。

张辉等^[18]选择苯乙烯单体的体积分数、过硫酸铵引发剂的浓度、聚乙二醇辛基苯基醚乳化剂的体积分数、水浴温度作为ANN输入值,以聚苯乙烯小球的尺寸相对标准偏差(σ)作为输出值,研究了聚合反应工艺参数与小球 σ 之间的关联规律,并对新工艺参数下小球的 σ 进行了预测。实验结果判别标准为: $\sigma < 5\%$ 为1类点, $\sigma > 5\%$ 为2类点。将原始样本集归一化处理,采用3层BP网络,以sigmoid函数为隐含层传递函数,用梯度法训练网络调整连接权 W_{ij} ,以训练误差0.1为收敛标志,训练10 000次,并运用训练好的ANN进行预测,偏差低于2.5%,预测值与实验值相吻合。

王伟等^[19]以光引发自由基聚合方法合成星型聚丙烯酰胺,采用 $L_9(4^3)$ 正交试验结果作为ANN训练样本,采用MATLAB软件中的BP网络设计方法进行学习训练,并对不同引发剂浓度、单体浓度、反应时间和光强条件下的反应转化率、特性黏数进行预测。实验结果表明星型聚丙烯酰胺最佳合成工艺条件为:二苯甲酮浓度0.50 mmol/L、丙烯酰胺质量浓度28%、反应时间120 min、光强10.25 mW/cm²,反应转化率实验值达98.8%、产物特性黏数实验值为13.28 dL/g。滕鑫等^[10]采用同样方法,建立了异氰酸酯含量、加工温度、试用期、后固化温度、比重等配方技术参数与聚氨酯拉伸强度之间的非线性关系规律,预测误差小于4.6%,具有较好的指导作用。

Agnol等^[20]将ANN与曲面响应模型相结合,预测了二异氰酸酯与不同摩尔质量的聚碳酸酯二醇(PU500, PU1000, PU2000)聚合时的量热行为,所创建的三维曲面响应图可有效预测聚合反应动力学以及聚合过程中的热焓和反应程度。其结果表明:二醇分子量高时,聚合放热峰趋于更高的温度;二醇分子量低时,易形成分子内氢键,发生缔合现象,进而降低反应活化能。

另外,ANN在聚合物加工处理及工艺优化方面也得到广泛的应用,从而指导材料配方组成设计、加工制造及工程应用。

许鹏^[7]通过对前期数据处理中的拟合误差、梯度效应、尺寸误差,以及成型过程中激光扫描设备定位精度、加热系统温度控制性能等,对选择性激光烧结成型精度的影响进行了分析;采用正交试验设计方法与BP网络结合,建立了选择性激光烧结工艺参数与精度之间的非线性模型,平均预测误差在4.5%,体现出较好的泛化能力;同时,还采用均匀设计初始化的粒子群算法对支持向量回归参数进行了寻优,最终建立的模型平均误差为3.9%,实现对工艺参数的智能化选

择,为选择性激光烧结智能化和推广提供了借鉴。

时慧焯^[13]提出了基于最大化期望提高加点准则、基于最大化期望评价函数加点准则以及基于ANN代理模型和加权形式的期望提高加点准则的三种ANN序列优化设计方法,以模具温度、熔体温度、注射时间、保压时间、保压压力和冷却时间等工艺参数为设计变量,对聚碳酸酯及其合金等注塑制品的翘曲变形进行了目标优化设计。上述优化设计方法不仅可以描述设计变量与质量指标之间的函数关系,节约数值模拟分析时间,还能调整局部和全局搜索,提高代理模型精度以及优化结果的精度,同时还能加快收敛速度,对全局最优解的逼近程度高,最终可以有效降低注塑制品的翘曲变形。

Oliaci等^[21]采用聚乳酸、聚乳酸/热塑性聚氨酯和聚乳酸/热塑性淀粉为基材,开发绿色生物可降解的聚合物制品,通过材料分析、注塑模拟、控制参数设计等,来评估制品翘曲和体积收缩问题。采用正交试验设计、方差分析(ANOVA)考察了冷却温度、保压时间、保压压力、模具温度和熔体温度等工艺参数与制品翘曲、体积收缩关系,并通过ANN方法进行信号识别和优化,最终确定最优化的加工工艺条件。结果表明ANN对收缩或翘曲最小化的最优水平选择与ANOVA最优水平选择结果相吻合。其中,熔融温度、冷却温度和保压时间对收缩和翘曲影响显著;与聚乳酸、聚乳酸/热塑性淀粉相比,聚乳酸/热塑性聚氨酯表现出优异的抗翘曲和收缩缺陷的能力。

刘锋等^[22]选取模具温度、熔体温度、注塑时间、保压时间、保压压力为设计变量,通过集成有限元模拟、Taguchi正交试验、BP神经网络以及粒子群优化算法等对薄壁塑件翘曲变形量进行优化,在优化后的工艺参数下实现翘曲变形量比优化前减少37%,并应用Moldflow对优化工艺参数可靠性进行了模拟验证,验证值和优化结果高度吻合,仅相差0.015 mm,表明所采用的优化方法能显著减少注塑工艺参数调控过程对操作人员的经验依赖,具有较高的工程应用价值。

周浩文等^[23]运用计算机CAE技术和Moldflow软件,对机型、环境进行模拟仿真,并模拟试验原材料和设定的工艺参数,采用信噪比分析法和正交试验法对试验数据进行综合分析,结合ANN和MATLAB平台,建立网络模型,实现对注塑工艺的预测;利用细化分析法,对模拟数据进行数学统计和分析,获取翘曲变形和体积收缩的最优工艺参数。

郑生荣等^[24]通过建立模具温度、熔体温度、注射时间为三参数输入、注射压力为单值输出的两层BP网络,经过足够样本训练后,所预测的压力值与CAE模拟结果具有良好的吻合性。

总的来看,神经网络模型在超薄塑料制品流程长度预测^[25]、注塑塑料件质量控制^[26-27]、减少翘曲变形和缩痕缺陷^[28-29]、快速成型工艺优化^[30]等方面得到了广泛的应用,有效地提升了塑料件的使用性能。

2.2 高分子材料使用与服役性能预测

高分子及其复合材料结构设计自由度大、影响因素多,运用回归模型、多元回归模型、支持向量机等统计建模方法在预测此类材料的物理、力学和摩擦学行为时,往往存在预测精度低的问题,难以研究其结构性能关系,也无法满足工程技术需求。前馈型、反馈型ANN及其与有限元模型、自适应模糊推理系统、遗传算法等形成的复合模型已被大量运用于精确预测高分子材料、纳米复合材料以及单维、多维纤维增强复合材料的各种性能,如静态行为、拉伸蠕变行为、疲劳寿命、摩擦学性能、动态机械行为、冲击过程、振动控制、层离机理、裂纹、损伤探测以及生命周期评估等^[3,14,20,31-36]。

冲击响应行为是纤维增强高分子材料的一个重要技术参数。影响材料对冲击响应的主要因素包括纤维与基体的类型、纤维层的序列和厚度以及冲击摆锤的质量、形状和速度等。Mousavi等^[37]采用有限元模型、正交试验方法与ANN方法结合,研究了碳纤维增强聚合物层合板对高速冲击响应下的杂化效应。采用玻璃纤维层和芳纶纤维层部分替换层压板中的碳层,可以显著地改变层合板的破坏模式,增加冲击能量吸收,降低摆锤剩余速度;当在层压板背面引入4层高强度、高应变的芳纶纤维层替代碳纤维层时,层压板吸收能量最高可提高67%。Chandrashekhara等^[38]则基于高阶剪切变形原理,通过建立有限元模型来计算层压片材在低速冲击试验中的应变模式和接触力,通过实验方法获得冲击诱导应变模式后,即可使用BP网络直接在线预测出材料的接触力。

张兴华等^[39]利用高密度聚乙烯、线性低密度聚乙烯以及两者共混物和乙烯-乙酸乙烯酯共聚物的密度、熔体流动速率、共混比例、乙酸乙烯酯含量作为输入值,拉伸强度、弯曲强度、缺口冲击强度作为输出值,经过10 000次以上BP模型训练、收敛,得到网络训练数据,并利用已知数据对网络进行检验。结果证明所建立的网络具有快速、容错、自适应等特点,既可以处理数据多、齐全的体系,也可以训练数据少或缺失的系统,预测准确率高,应用效果良好。

史以俊等^[40]利用MATLAB软件中的ANN工具箱,选用材料组成、测试条件作为输入变量,以摩擦系数、磨损量为输出量,输出层与隐含层间采用tan-sigmoid传递函数,隐含层与输出层间采用purelin传递函数,误差指标为0.000 1,最大迭代步数10 000,建立网络模型。同时,对比了批梯度下降算法、动量批梯度下降算法、自适应修改学习率算法、有弹回的神经网络算法、共轭梯度算法以及高斯-牛顿算法等6种算法的优劣;并以平均误差最小的共轭梯度算法对ANN模型进行训练,预测出在200 N、0.692 m/s测试条件下,当聚四氟乙烯、碳纤维、二氧化硅质量比为79:15:6时,复合材料的耐磨性能最佳,实验误差为7%。

薛继斌^[41]采用最优的贝叶斯正则化训练函数,对比了单隐含层和多隐含层ANN在材料摩擦性能预测中的功效,采用反馈Elman、前馈BP、径向基函数(RBF)3种网络预测了材

料的升温摩擦系数和降温摩擦系数。实验发现,多隐含层 ANN 可以优化单隐含层 ANN 预测性能的准确性;反馈 Elman 网络预测精度最高,优于其它两种网络。

Jiang 等^[42]以短纤维增强尼龙 46 材料实验值和温度、法向力、滑移速度等测试条件为输入样本,采用 ANN 方法预测了材料的磨损性能(比磨损率、摩擦系数)和物理力学性能(压缩强度、压缩弹性模量、拉伸强度、弯曲强度),分别建立了不同材料组成(玻璃纤维、碳纤维、聚四氟乙烯、石墨)和测试条件下的磨损、力学性能的三维曲面图,并对比了 Powell-Beale 共轭梯度算法、自适应学习速率算法、比例共轭梯度算法、Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) 半牛顿法、Levenberg-Marquardt 算法以及贝叶斯正则化算法的训练水平和预测能力,其中, Powell-Beale 共轭梯度算法的平均相对误差最低、决定系数高,具有最优的网络近似能力。

另外,颗粒增强高分子材料因其高的比强度、耐化学性、介电性和力学性能而被广泛应用于工程、机械、航空等领域。填料尺寸和形状是决定此类增强材料整体性能的关键参数。Sharma 等^[43-44]在 3 种不同冲击加载速率下,研究了纯环氧树脂、二氧化硅填充环氧树脂(体系 I)以及不同长径比(球形、片状和棒状)的填料填充环氧树脂(体系 II)的动态断裂韧性,采用前馈型多层感知器预测不同体系材料的断裂韧性,采用梯度下降函数进行突触权重优化,模型准确率达 91%。研究发现,影响体系 I 应力强度因子的因素(输入层参数)依次为:时间、加载速率、剪切波速、纵向波速、填料体积分数;影响体系 II 应力强度因子的因素依次为:时间、填料长径比、动态模量、填料体积分数。由此可见,加载速率与填料长径比是影响材料在冲击载荷条件下断裂行为的两个重要因素。

再者,抗老化性能直接影响着高分子材料的使用性能和寿命,对其的研究具有重要意义。谢红梅等^[45]针对塑料老化过程,利用 ANN 方法建立自然老化力学性能时间序列的预测模型,很好地解决老化试验中数据少、统计规律不明显的问题,大大缩短试验时间,节约试验费用,满足工程实际对塑料老化性能预测精度要求。杨伏生等^[46]基于 Visual FoxPro 面向对象开发环境,建立了塑料光降解性能与控制因素的 BP 网络模型,收敛速度快,预测误差范围为 0.001~0.005,可用于精确预测塑料材料的光降解性能。

另一方面,定量结构性能关系模型在预测新材料的行为特性以及研究结构如何影响材料宏观性能时发挥着重要作用。基于 192 种聚苯乙烯、聚丙烯酸酯和聚甲基丙烯酸酯及其衍生物的单体化学结构, Yu 等^[47]建立了刚性结构(R^{OM})、链运动(n)、分子平均极化率(α)、净电荷(q^-)与玻璃化转变温度(T_g)之间的定量结构性能关系,通过逐步多元线性回归方法和 BP 网络构建模型,所预测的 T_g 与实验值高度吻合。然而,在构建结构模型时,往往存在人工提取特征和处理简化分子线性输入规范码(SMILES 码)相对困难等问题。对此,杨宁等^[48]提出了一种端到端的图神经网络方法,即将 SMILES 码表示为图形,顶点代表原子,边代表化学键,通过构建分子图

神经网络得到分子的向量表示,再通过构建分子向量、环境、条件等信息全连接神经网络回归模型,以预测树脂材料的耐高温性能(热失重 5% 时的温度);相比于支持向量机、贝叶斯矩阵分解模型等传统机器学习模型,该模型预测准确率提高一倍以上。Miccio 等^[49]以 300 余种聚苯乙烯类和聚丙烯酸酯类聚合物及其 T_g 为训练样本,将每个单体的结构转换为一个 SMILES 字符串,再通过 SMILES 字符字典和编码将其转换为二元图像,其中列(nd)表示字典中的 SMILES 字符数,行($npos_{max}$)表示数据集最长字符串中的位置数, mx 代表数据集中聚合物的数量。在此基础上设计、训练出一种全回旋互联 ANN 来预测聚合物的 T_g , 预测平均相对误差低至 6%。该模型有望扩展到预测未知聚合物的极化率等其它性质,从而加速人们对高分子科学中复杂结构性能关系的科学认知。

2.3 辅助性能表征与分析

随着光谱学及计算机技术的发展,(近)红外光谱在高分子材料、医药、大气中有害物质等分析中的应用日趋广泛。无论从组成结构含量测定到关键成分的非破坏表征,还是从生产过程各阶段在线监控到原材料与产品的快速鉴定等,(近)红外光谱无不显示出了巨大的应用潜力。然而,(近)红外光谱谱带宽,光谱重叠严重,多属非线性干扰,无法直接分辨,解析繁杂,严重制约该技术的广泛应用。因此,往往需要借助各种化学计量学算法进行光谱解析,实现对组成含量、浓度的定量分析^[50]。

利用近红外光谱技术对工业和生活垃圾中的塑料材料进行快速检测、分离和回收利用,在实现经济效益的同时,可以有效实施可持续发展理念、解决环境污染问题。滕傲雪等^[51]提出了一种基于 BP 神经网络的汽车前保险杠塑料识别方法,该方法以汽车前保险杠塑料的近红外光谱数据为基础,通过标准差来分析数据在不同波段的差异程度,据此分为高、中、低差异度 3 类,使用主成分分析法对 3 类波段中的数据分别进行降维处理并构成三维数据,使其能够在三维空间内进行区分,提高鲁棒性,并利用该三维数据训练 BP 神经网络,实现了汽车前保险杠塑料的快速识别,其正确率达到了 93.75%,为现场物证的检验提供一种全新、快速的方法。然后光谱法却难以有效鉴别、区分深色或者表面受到重度污染或破坏的材料。因而,亟需一种经济、高效、快速、自动化的方法来实现分离作业。

激光辅助技术是通过 CO₂ 激光器产生的加热激光脉冲对不同材料的红外热图像进行观测,而不受材料颜色或性质的影响。如激光诱导击穿光谱仪已被成功用于快速识别、分离聚合物材料以及痕量金属元素添加剂等^[52]。该光谱法是采用 240~820 nm 范围宽带频谱来探测识别单次激光发射后的原子元素和分子带,得到碳、氢、氧、氮、卤素及镁、钙、钛等 13 种元素的光谱线,将光谱线对应波长作为 ANN 输入层参数,将所探测的 8 种聚合物作为输出层,经过训练学习,可实现对聚丙烯、聚碳酸酯和聚氯乙烯的识别准确率达 100%,对聚四氟乙烯、聚酰胺 66 的识别准确率为 99%,对聚乙烯、聚

甲基丙烯酸甲酯的识别准确率为94%。另外,Rabiej等^[53]基于免疫算法和广角X射线衍射技术,通过未知聚合物的衍射曲线、晶面峰位置等信息,将其与数据库中的参考物进行比较,采用原始程序将曲线特征依次编码为信号链,后进行ANN网络存储、训练,再经过未知聚合物的激活信号与数据库中的总激活信号进行比对,选取具有最大相似度的衍射特征曲线,最终确认未知聚合物类型。此外,ANN方法还被用来辅助分析和表征高分子材料的流变行为、生物医用高分子纳米粒子的尺寸控制等^[54-55],不仅丰富了ANN技术的应用领域和范围,还快速推动了高分子材料在工程、医药等领域的广泛应用与实践。

3 结语

(1) ANN技术适合于模拟复杂的高分子材料与工程领域问题,已在高分子聚合与质量控制、加工工艺条件优化、使用性能预测以及辅助性能表征与分析等方面取得了广泛应用,展现出广阔的应用前景,对推动高分子学科理论的发展与实践的进步具有重要意义。随着计算机技术的不断进步和人们对ANN的不断认识,ANN正向模拟人类认知的道路上前行,将在实际应用中得到更好地发展。

(2) ANN方法在高分子领域应用与探索仍处于一个基础阶段,在拓展材料应用品类和提高预测质量方面仍需进一步深入研究。同时,在研究过程中发现理论算法方面还不够完善,在实际应用中还存在一些问题,如网络隐节点数的选择、传递函数的选择与优化以及网络的过拟合等。

(3) ANN模型所能达到的精度还无法预知,给精确实现多维非线性映射带来一定难度,亟待更多学者进行更深入的研究。将ANN技术与传统材料研究方法有机结合,相互验证,相互补充,从而探究材料制备过程中的机理及微观本质。近年来,遗传算法、模糊系统、进化机制等方法与神经网络结合形成人工智能,将有助于ANN技术及其应用不断地趋向于成熟和完善。

参考文献

- [1] 阳范文,等.计算机与应用化学,2001,18(2):131-134.
Yang Fanwen, et al. Computers and Applied Chemistry, 2001, 18(2):131-134.
- [2] Abiodun O I, et al. Heliyon, 2018, 4(11). DOI: 10.1016/j.heliyon.2018.e00938.
- [3] Khan S M, et al. Advanced Composite Materials, 2019, 28(4): 409-423.
- [4] 康靓,等.材料导报,2020,34(11):21 172-21 179.
Kang Jing, et al. Materials Reports, 2020, 34(11):21 172-21 179.
- [5] 关瑜,等.塑料助剂,2014(6):20-24.
Guan Yu, et al. Plastics Additives, 2014(6):20-24.
- [6] 程平.ANN法预测聚丙烯酸酯乳液和水性涂料性能的研究[D].长春:吉林大学,2004.
Cheng Ping. Study of prediction of properties of polyacrylate emulsion and waterborne coating by using ANN[D]. Changchun: Jilin University, 2004.
- [7] 许鹏.基于数据挖掘技术的选择性激光烧结收缩研究[D].武汉:华中科技大学,2013.
Xu Peng. Study on the shrinkage during selective laser sintering based on the data mining[D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2013.
- [8] 易洪雷,等.纺织高校基础科学学报,1999,12(2):158-161.
Yi Honglei, et al. Basic Sciences Journal of Textile Universities, 1999, 12(2):158-161.
- [9] 席宁.当代化工研究,2017(3):41-42.
Xi Ning. Modern Chemical Research, 2017(3):41-42.
- [10] 李进峰.石油化工设计,2020,37(2):53-58.
Li Jinfeng. Petrochemical Design, 2020, 37(2):53-58.
- [11] 项可璐.人工神经网络在橡胶复合材料耐磨性能和疲劳寿命预测中的应用[D].北京:北京化工大学,2013.
Xiang Kelu. The application of artificial neural networks in the prediction of abrasion and fatigue property of rubber composites material[D]. Beijing: Beijing University of Chemical Technology, 2013.
- [12] 滕鑫,等.实验科学与技术,2015,13(1):38-43.
Teng Xin, et al. Experiment Science and Technology, 2015, 13(1): 38-43.
- [13] 时慧焯.基于人工神经网络的注塑成型翘曲优化方法[D].大连:大连理工大学,2012.
Shi Huizhuo. Warpage optimization methods based on artificial neural network in injection molding[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2012.
- [14] Zhang Z, et al. Composites Science and Technology, 2003, 63(14): 2 029-2 044.
- [15] 徐文峰,等.材料导报,2006,20:238-257.
Xu Wenfeng, et al. Materials Reports, 2006, 20:238-257.
- [16] Fernandes F A N, et al. Brazilian Journal of Chemical Engineering, 2005, 22(3):401-418.
- [17] Noor R A M, et al. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 2010, 88:1 065-1 084.
- [18] 张辉,等.过程工程学报,2002,2(6):544-546.
Zhang Hui, et al. The Chinese Journal of Process Engineering, 2002, 2(6):544-546.
- [19] 王伟,等.化学工程与装备,2011(4):17-20.
Wang Wei, et al. Chemical Engineering & Equipment, 2011(4): 17-20.
- [20] Agnol L D, et al. Polymer Engineering and Science, 2021, 61: 1 810-1 818.
- [21] Oliaei E, et al. Journal of Materials Science & Technology, 2016, 32(8):710-720.
- [22] 刘锋,等.工程塑料应用,2021,49(2):74-79.
Liu Feng, et al. Engineering Plastics Application, 2001, 49(2): 74-79.
- [23] 周浩文.基于人工神经网络的注塑成型模拟及工艺参数优化的研究[D].广州:广东工业大学,2013.

- Zhou Haowen. Optimization of the injection molding simulation and process parameters based on artificial neural network[D]. Guangzhou: Guangdong University of Technology, 2013.
- [24] 郑生荣,等.塑料工业,2003,31(10):26-33.
Zheng Shengrong, et al. China Plastics Industry, 2003, 31(10): 26-33.
- [25] 赖鹏.工程塑料应用,2011,39(2):39-42.
Lai Peng. Engineering Plastics Application, 2011, 39(2):39-42.
- [26] 王祺,等.工程塑料应用,2010,38(3):32-35.
Wang Qi, et al. Engineering Plastics Application, 2010, 38(3): 32-35.
- [27] 季宁,等.工程塑料应用,2020,48(4):62-68.
Ji Ning, et al. Engineering Plastics Application, 2020, 48(4): 62-68.
- [28] 廖生温,等.工程塑料应用,2021,49(3):65-70.
Liao Shengwen, et al. Engineering Plastics Application, 2021, 49 (3):65-70.
- [29] 项丽萍,等.工程塑料应用,2021,49(5):92-96.
Xiang Liping, et al. Engineering Plastics Application, 2021, 49(5): 92-96.
- [30] 原红玲,等.工程塑料应用,2007,35(8):33-35.
Yuan Hongling, et al. Engineering Plastics Application, 2007, 35 (8):33-35.
- [31] Adesina O T, et al. Cogent Engineering, 2020, 7(1). DOI:10.1080/ 23311916.2020.1720894.
- [32] Ghatarband H F M, et al. Computational Materials Science, 2012, 58:31-37.
- [33] Fu Hua, et al. Prediction on tribology behavior of PEEK compos- ites using back propagation artificial neural networks[C]//2009 WASE International Conference on Information Engineering. New York: IEEE, 2009:275-277.
- [34] Xu L, et al. Journal of Materials Processing Technology, 2007, 189 (1-3):374-378.
- [35] Al-Haik M S, et al. International Journal of Plasticity, 2006, 22(7): 1 367-1 292.
- [36] Altabay W A, et al. Scientia Iranica, Transactions B: Mechanical Engineering, 2020, 27(4):1 995-2 008.
- [37] Mousavi M V, et al. Aerospace Science and Technology, 2019, 94. DOI:10.1016/j.ast.2019.105393.
- [38] Chandrashekhara K, et al. Composites Part B: Engineering, 1998, 29(4):363-370.
- [39] 张兴华,等.塑料,2002,31(2):16-20.
Zhang Xinghua, et al. Plastics, 2002, 31(2):16-20.
- [40] 史以俊,等.合肥工业大学学报(自然科学版),2010,33(9):1 308- 1 310.
Shi Yijun, et al. Journal of Hefei University of Technology (Natural Science), 2010, 33(9):1 308-1 310.
- [41] 薛继斌.基于人工神经网络的摩擦材料性能预测研究[D].北京: 北京化工大学, 2015.
Xue Jibin. Evaluation and prediction on the tribological perfor- mance of brake friction materials based on three artificial neural networks[D]. Beijing: Beijing University of Chemical Technol- ogy, 2007.
- [42] Jiang Zhenyu, et al. Composites Science and Technology, 2007, 67 (2):168-176.
- [43] Sharma A, et al. Engineering Fracture Mechanics, 2020, 239. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2020.107328.
- [44] Sharma A, et al. Engineering Fracture Mechanics, 2020, 228. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2020.106907.
- [45] 谢红梅,等.工程塑料应用,2001,29(12):31-33.
Xie Hongmei, et al. Engineering Plastics Application, 2001, 29 (12):31-33.
- [46] 杨伏生,等.应用人工神经网络预测降解塑料性能[C]//2002年 材料科学与工程新进展论文集.北京:中国材料研究学会,2002: 1 818-1 821.
Yang Fusheng, et al. Application of artificial neural network to predict the properties of degradable plastics[C]//2002 Proceedings of New Progress in Materials Science and Engineering. Beijing: Chinese Materials Research Society, 2002:1 818-1 821.
- [47] Yu Xinliang, et al. Journal of Theoretical and Computational Chemistry, 2008, 7(5):953-963.
- [48] 杨宁,等.功能高分子学报,2021,34(6):554-561.
Yang Ning, et al. Journal of Functional Polymers, 2021, 34(6): 554-561.
- [49] Miccio L A, et al. Polymer, 2020, 193. DOI: 10.1016/j. polymer.2020.122341.
- [50] 刘丙萍,等.光谱学与光谱分析,2006,26(1):51-53.
Liu Bingping, et al. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2006, 26 (1):51-53.
- [51] 滕傲雪,等.工程塑料应用,2018,46(6):111-115.
Teng Aoxue, et al. Engineering Plastics Application, 2018, 46(6): 111-115.
- [52] Boueri M, et al. Applied Spectroscopy, 2011, 65(3):307-314.
- [53] Rabiej M, et al. Computational Materials Science, 2021, 186. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.110042.
- [54] 王洪波,等.塑料工业,2006,34(S1):195-196,200.
Wang Hongbo, et al. China Plastics Industry, 2006, 34(S1): 195- 196, 200.
- [55] Youshia J, et al. European Journal of Pharmaceutics and Biophar- maceutics, 2017, 119:333-342.