

DOI: 10.13801/j.cnki.fhclxb.20170320.005

基于改进粒子群算法的径向基人工神经网络 淀粉基发泡复合材料性能预测

李孟山^{*1}, 吴维¹, 陈炳生¹, 管立新¹, 武燕²

(1. 赣南师范大学 物理与电子信息学院, 赣州 341000; 2. 赣南师范大学 数学与计算机科学学院, 赣州 341000)

摘要: 以乙烯-醋酸乙烯酯(EVA)和淀粉质量比、甘油质量分数和 NaHCO₃ 质量分数为输入, 以拉伸强度和回弹率为输出, 建立基于种群熵多样性评估和收敛、发散策略的粒子群改进算法的径向基人工神经网络(RBF ANN)的淀粉基发泡复合材料性能预测模型。结果表明, 该模型的预测效果较好, 预测均方差和相关系数分别为 0.0160 和 0.9890。预测发现, 淀粉基发泡复合材料的拉伸强度随甘油含量的增加而缓慢降低, 随 NaHCO₃ 含量的增加先减少后增加; 回弹率随甘油含量的增加而递增, 随 NaHCO₃ 含量的增加而先增加后减少。

关键词: 性能预测; 发泡材料; 神经网络; 粒子群; 混合智能

中图分类号: TB324; TB322; TB330.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-3851(2017)12-2882-08

Prediction of properties of starch matrix foam composites by radial basis function artificial neural network based on improved particle swarm optimization

LI Mengshan^{*1}, WU Wei¹, CHEN Bingsheng¹, GUAN Lixin¹, WU Yan²

1. College of Physics and Electronic Information, Gannan Normal University, Ganzhou 341000, China;
2. College of Mathematics and Computer Science, Gannan Normal University, Ganzhou 341000, China)

Abstract: A prediction model of starch matrix foam composites by radial basis function artificial neural network (RBF ANN) based on chaotic self-adaptive particle swarm optimization algorithm with population entropy diversity and convergence divergence strategy was established. The input variables of this model included ethylene-vinyl acetate (EVA)/starch mass ratio, glycerin content and NaHCO₃ content, and the output variables were tensile strength and rebound rate. The results show that the proposed model has a good performance. The root mean square error of prediction and correlation coefficient are 0.0160 and 0.9890, respectively. The prediction results show that the tensile strength of starch matrix foam composites reduces slowly with the increase of glycerin content, and it reduces firstly and then increases with the increase of NaHCO₃ content. The rebound rate increases with the increase of glycerin content, and it increases firstly and then decreases with the increase of NaHCO₃ content in the starch matrix composites.

Keywords: property prediction; foam composites; artificial neural network; particle swarm optimization; hybrid intelligent

淀粉基发泡材料是一种重要的天然生物降解材料, 其片材或膜材为各种材料加工提供制品, 也可作为各类包装材料提供原料, 在包装、建材、运输、汽车、鞋材等领域都具有广泛的应用前景, 越来越受人们的重视^[1]。用淀粉和乙烯-醋酸乙烯酯为原材料制成的发泡材料具有诸多优良特性, 如降解性好、密度小、弹性好、隔热性能好等, 有利于缓解“白色污染”, 倍受工业和学术界的青睐^[2-4]。为改善材料的力学性能、微观结构及降解性能, 常在淀粉中加入一些交联剂和增塑剂, 再经混合成型后得到综合性能较好的淀粉基发泡材料^[5-6]。为探索这种新型材料, 在实际的工业生产中, 往往

收稿日期: 2017-01-10; 录用日期: 2017-02-27; 网络出版时间: 2017-03-20 17:05
网络出版地址: <http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.1801.TB.20170320.1705.010.html>
基金项目: 国家自然科学基金 (51663001; 51463015)
通讯作者: 李孟山, 博士, 讲师, 研究方向为计算模拟方法与应用等 E-mail: jcimsl@163.com
引用格式: 李孟山, 吴维, 陈炳生, 等. 基于改进粒子群算法的径向基人工神经网络淀粉基发泡复合材料性能预测[J]. 复合材料学报, 2017, 34(12): 2882-2889.
LI Mengshan, WU Wei, CHEN Bingsheng, et al. Prediction of properties of starch matrix foam composites by radial basis function artificial neural network based on improved particle swarm optimization[J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 2017, 34(12): 2882-2889 (in Chinese).

需要对材料的组分含量进行大量的实验, 测试材料的各种性能, 从而寻求出各组分及其含量的最优组合。然而, 材料获取和样品测试等实验都耗时费力且十分繁琐, 另外, 经济开销大^[7-8]。若在理论上建立数学模型, 分析材料的各组分及其含量对制品性能的影响, 可大大减少实验工作量, 同时在理论上也可作为实验提供参考, 同时, 在淀粉基乙烯-醋酸乙烯酯发泡材料中, 分析各交联剂和增塑剂等组分含量对制品性能的影响, 可为加工此类材料提供重要的理论依据^[9]。

在理论模型研究中, 针对交联剂和增塑剂等组分含量对淀粉发泡材料制品的性能影响的文献鲜有报道。目前, 曾广胜等^[10-11]建立了基于反向信息传播人工神经网络(BP ANN)的生物发泡材料性能预测模型, 其研究结果表明, 神经网络模型的预测性能较好, 预测值与实验值比较接近。但由于 BP ANN 本身也存在一些不足, 如局部搜索速度慢和易陷入局部极值等收敛问题, 且模型极依赖其训练算法, 导致应用受到限制^[12-13]。为此, 本文将在此研究基础上, 探讨一种理论预测模型, 尝试在径向基人工神经网络(RBF ANN)理论上建模, 但 RBF ANN 也存在诸多缺点, 如性能与网络权值的训练效果直接关联, 即其训练的好坏对模型性能起决定性作用^[14]。研究同时发现, 对 RBF ANN 训练的本质可看作是一种对模型各参数的最优化过程。因此, 研究者们试图将各种最优化智能算法用于模型训练来提高 RBF ANN 的训练效果, 如遗传算法(Genetic Algorithm, GA)^[15]、模拟退火算法(Simulated Annealing, SA)^[16]、粒子群算法(Particle Swarm Optimization, PSO)^[17-19]、布谷鸟搜索算法(Cuckoo Search, CS)^[20-21]等, 都取得了较满意的效果。为此, 本文探讨将 PSO 算法用于 RBF ANN 模型训练的同时, 改善标准 PSO 算法的一些不足, 提高模型训练效果, 提出结合种群熵多样性评估、收敛与发散策略和权重因子自适应调整策略的改进 PSO 算法, 得到一种基于改进粒子群算法的径向基人工神经网络模型, 并将模型用于乙烯-醋酸乙烯酯(EVA)和淀粉质量比、甘油质量分数和 NaHCO₃ 质量分数对制品的拉伸强度和回弹率影响的实验, 探讨预测模型的性能。

1 理论与方法

1.1 RBF ANN 模型

RBF ANN 是应用最广的前向型神经网络模型

之一, 能够逼近任意的非线性函数, 有良好的泛化能力, 成功应用于各领域的建模^[22]。一般有输入层、隐层和输出层三层网络结构, 激活函数本文采用高斯函数, 定义为

$$g_i(x_k) = \exp\left[-\frac{\|x_k - c_i\|^2}{\sigma_i^2}\right]$$

其中: $x_k(1 \leq k \leq n)$ 为第 k 个输入向量; $c_i(1 \leq i \leq n)$ 为基函数中心; σ_i 为扩展常数; n 为样本个数; c 为隐层结点个数; 网络输出为

$$O(x_k) = \sum_{i=1}^c w_i g_i(x_k)$$

其中, w_i 为第 i 个隐结点的连接权值。

RBF ANN 的训练过程的本质是对基函数中心、扩展常数和连接权值的最优化过程, 即优化 c_i 、 σ_i 、 w_i 三组参数。为此, 本文首先对标准 PSO 算法进行改进, 引入混沌自适应权重调整策略、种群熵多样性评估和收敛与发散策略, 提出一种改进的 PSO 算法, 然后将改进 PSO 算法用于对 RBF ANN 的三组参数进行优化, 得到最优化的参数组合, 以提高预测性能。

1.2 PSO 改进算法

1.2.1 标准 PSO 算法

PSO 算法是由学者 Eberhart 和 Kennedy^[23]提出的一种群体演化算法。标准 PSO 算法通过如下公式更新粒子的速度和位置^[24]:

$$\begin{aligned} v_{i,d}^{k+1} &= \omega v_{i,d}^k + c_1(p_{i,d}^k - x_{i,d}^k) + c_2(p_{g,d}^k - x_{i,d}^k) \\ x_{i,d}^{k+1} &= x_{i,d}^k + v_{i,d}^{k+1} \end{aligned}$$

其中: $i=1, \dots, m$; ω 称为惯性权重因子; c_1 和 c_2 为学习因子, $x_{i,d}^k$ 和 $x_{i,d}^k$ 分别为粒子 i 在第 k 次迭代中第 d 维的速度和位置; $p_{i,d}^k$ 为粒子 i 在第 d 维的个体极值的位置, $p_{g,d}^k$ 为群体在第 d 维的全局极值的位置。可知, 粒子的速度由惯性权重因子 ω 、认知因子 c_1 和探索因子 c_2 三个因素决定。

1.2.2 混沌自适应策略

PSO 算法的惯性权重系数较大有利于全局搜索, 较小有利于局部探索; 适当调整认知因子和探索因子, 可以权衡粒子的全局和局部搜索步伐, 有利于提高收敛速度和精度。本文将 Lorenz 混沌方程和自适应调整策略分别应用于 PSO 算法的学习因子和惯性权重的调整, 其中惯性权重因子 ω 调整公式为

$$\omega = \omega_{\max} - P(\text{gbest})(k)/P(\text{lbest})_{\text{ave}} - (\omega_{\max} - \omega_{\min})k/k_{\max}$$

其中: $\omega_{\max}$ 和 $\omega_{\min}$ 分别表示惯性权重的最大和最小

值; $P(\text{gbest})(k)$ 表示第 k 次迭代的全局最优; $P(\text{lbest})_{\text{ave}}$ 表示所有粒子局部最优的平均值; k_{max} 表示最大迭代次数; k 为当前迭代次数。

学习因子 c_1 和 c_2 通过如下 Lorenz 方程产生:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = -a(x-y) \\ \frac{dy}{dt} = rx-y-xz \\ \frac{dz}{dt} = xy-bz \end{cases}$$

式中: 参数 a 、 b 和 r 为正值控制参量, 分别取值为 10、8/3、28 时, 学习因子(c_1 和 c_2)显混沌状态, 即定义为

$$\begin{cases} c_1 = x(t) \\ c_2 = y(t) \end{cases}$$

由于混沌变量具有随机性、遍历性和规律性, 使算法能增加群体的多样性, 同时改善早熟收敛问题。

1.2.3 种群熵多样性评估策略

熵(Entropy)是用来描述体系的状态量, 反映系统的不确定或混乱程度。熵值的大小直接反映体系状态的混乱程度。熵值越大, 体系状态越混乱; 反之, 状态越不混乱, 即越有序。借助于信息论中熵的定义, 在 PSO 算法中, 定义种群熵来描述种群的多样性。

定义 1: 种群熵。设种群规模为 N , 在第 t 代中有 Q 个互不相交的子群 $\{s'_1, s'_2, \dots, s'_Q\}$, 各子群中的粒子个数记为 $\{|s'_1|, |s'_2|, \dots, |s'_Q|\}$, 则第 t 代种群熵定义为

$$E_t = -k \sum_{i=1}^Q p'_i \log_2(p'_i)$$

其中, $p'_i = \frac{|s'_i|}{N}$

在 PSO 算法中, 种群熵反映了种群粒子的分布情况。种群熵值越大则粒子越混乱无序, 粒子在空间中分配得越均匀, 种群多样性越好; 反之, 种群熵越小则种群越不混乱, 表明种群的粒子可能收敛于某个或某几个极值点附近区域, 此时种群的多样性较差。

本文采用上述种群熵对种群多样性进行评估, 分别设置一个上限阈值 E_{high} 和一个下限阈值 E_{low} 。若种群熵介于 E_{low} 和 E_{high} 之间, 则表示种群平衡状态; 若种群熵 $> E_{\text{high}}$, 则表明种群全局搜索极度占优, 种群为探索状态; 若种群熵 $< E_{\text{low}}$, 则表明种群已在局部搜索, 种群为开发状态。

1.2.4 收敛发散策略

对惯性权重和学习因子对算法收敛取值条件的研究表明, 当惯性权重 < 1 且两学习因子和 < 3 时, 粒子始终是收敛的; 当惯性权重为 0.65 且两学习因子和为 0.1 时, 粒子快速收敛; 当惯性权重 > 1 时, 粒子始终是发散的, 且值越大, 发散越快。为此, 本文将收敛和发散策略分别定义为

$$\omega = 0.65 \left| \sin \left(\frac{1}{E_t} \right) \right|$$

$$\varphi = 0.1 \left| \sin \left(\frac{1}{E_t} \right) \right|$$

$$\omega = 1 + \lambda \varphi \frac{1}{E_t}$$

其中: ω 为惯性权重; E_t 为种群熵; $\varphi = c_1 + c_2$; λ 为正值发散系数, 本文取值为 2。

在种群熵评估多样性的引导下, 结合收敛发散和混沌自适应策略, 得到一种简称为 CSAPSO-EDCD 的改进算法。CSAPSO-EDCD 算法在种群熵大于设置的最大阈值 E_{high} 进入探索状态时, 使用收敛策略使粒子向群中心运动; 同时, 在种群熵小于设置的最小阈值 E_{low} 进入开发状态时, 使用发散策略使粒子远离群中心做发散运动; 若种群熵介于 E_{low} 和 E_{high} 之间, 则维持种群现有的搜索策略。CSAPSO-EDCD 算法流程图如图 1 所示。

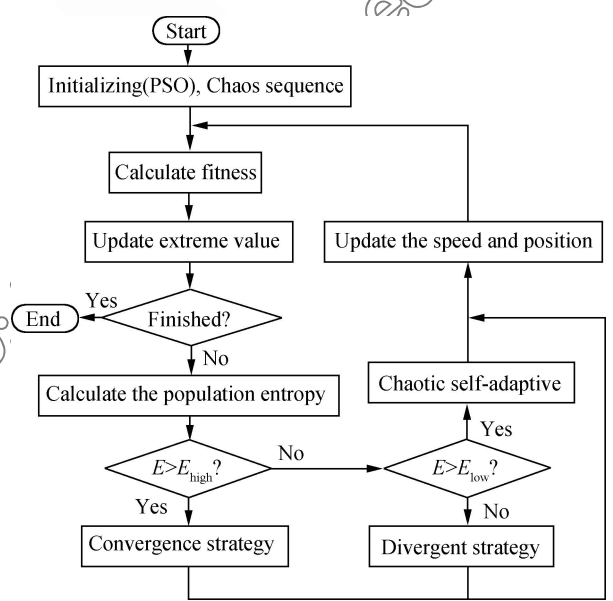


图 1 CSAPSO-EDCD 算法流程示意图
Fig. 1 Flow chart of CSAPSO-EDCD

1.3 CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型与评估

将上述 CSAPSO-EDCD 算法中的粒子结构定义为

particle(i) = [W_{h,o}, B_{h,o}, C_{basis-fun}]

其中, W_{h,o} 和 B_{h,o} (1 ≤ h ≤ c, ≤ o ≤ p) 分别为隐层结点与输出结点的权值矩阵和偏差矩阵; C_{basis-fun} 为基函数中心; p 为输出结点个数。

通过 CSAPSO-EDCD 算法的优化, 得到基于 CSAPSO-EDCD 算法的 RBF ANN 模型, 简称 CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型, 再将模型进行预测实验。

为评估模型的性能, 本文采用相对误差 A、预测均方差 M 和相关系数 R² 三个模型评价指标, 分别定义为

$$A = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|\bar{y}_i - y_i|}{y_i}$$
$$M = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2}$$
$$R^2 = \frac{\left[\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_{ave}) (\bar{y}_i - \bar{y}_{ave}) \right]^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_{ave})^2 \sum_{i=1}^N (\bar{y}_i - \bar{y}_{ave})^2}$$

式中: N 为数据样本数; $\bar{y}_i$ 和 $\bar{y}_{ave}$ 分别为预测值和预测平均值; y_i 和 y_{ave} 分别为实验和实验平均值。

2 模型建立

实验数据库来源于相关文献报道的淀粉发泡材料实验(实验详情请参考文献[10])。模型采用 3 层结构, 分别为输入层、隐藏层和输出层, 模型结构如图 2 所示。

模型的输入层表明模型研究对象的影响因素, 本文由 EVA 和淀粉质量比、甘油质量分数和 NaHCO₃ 质量分数组成, 即输入层有 3 个结点; 输出层为模型研究目标的性能因素, 由发泡材料的拉伸强度和回弹率组成, 即输出层有 2 个结点; 确定

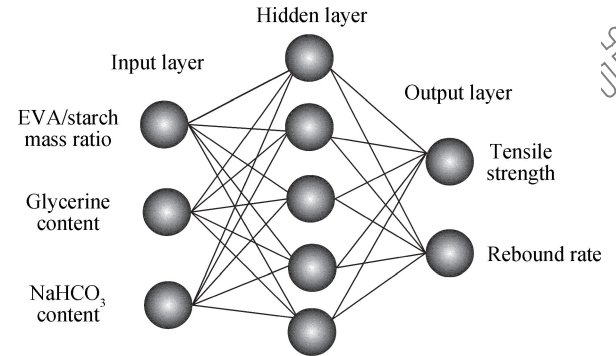


图 2 淀粉基发泡复合材料 CSAPSO-EDCD RBF ANN 预测模型

Fig. 2 CSAPSO-EDCD RBF ANN of starch matrix foam composites

隐藏层的结点个数一般有公式法和试探法两种, 本文采用两种方法的组合, 即先通过公式法 (2 × sqrt(m × n) + 1, m 和 n 分别为输入层和输出层结点个数) 预计隐层结点个数, 然后再通过试探法确定最优的结点个数。由于本文模型包含 3 个输入和 2 个输出结点, 通过上述公式预计, 得出隐层结点为 5。然后, 假设隐层结点个数分别从 2 到 9 进行试探, 图 3 为预测误差随隐层结点个数的变化关系。

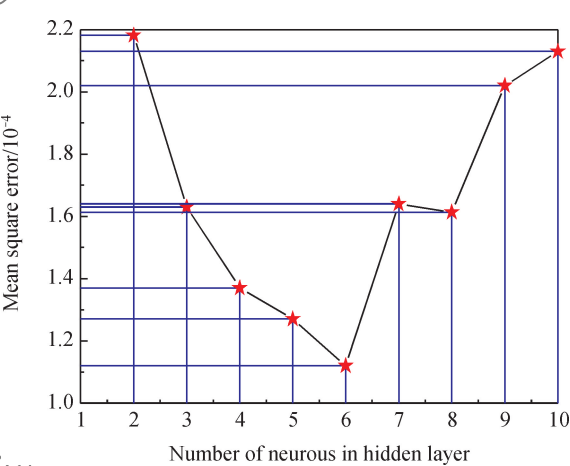


图 3 淀粉基发泡复合材料 CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型中隐藏层结点个数优化对比

Fig. 3 Results of topology studies of CSAPSO-EDCD RBF ANN for starch matrix foam composites

可知, 随着隐藏层结点个数的增加, 均方误差 (Mean Square Error, MSE) 先减小后增加, 当隐层结点个数为 6 时, 误差最小, 模型结构最优, 即模型结构为 3-6-2。

3 结果与讨论

3.1 模型的预测结果

本文建立了 3 层结构为 3-6-2 的 CSAPSO-EDCD RBF ANN 预测模型, 包含代表 EVA 和淀粉质量比、甘油质量分数和 NaHCO₃ 质量分数的 3 个输入结点、6 个隐层结点和分别表示拉伸强度和回弹率的 2 个输出结点。将建立的模型对拉伸强度和回弹率进行训练和测试。图 4 为训练过程中淀粉基发泡复合材料的拉伸强度和回弹率的实验值与 CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型预测值对比。可以看出, 无论是拉伸强度还是回弹率, CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型的预测值都与实验值比较接近, 吻合度较好; 从菱形与直线的垂直距离可知, 模型预测误差较小, 预测精度较高。图 5 为测试过程中淀粉基发泡复合材料的拉伸强度和回弹率的实验值

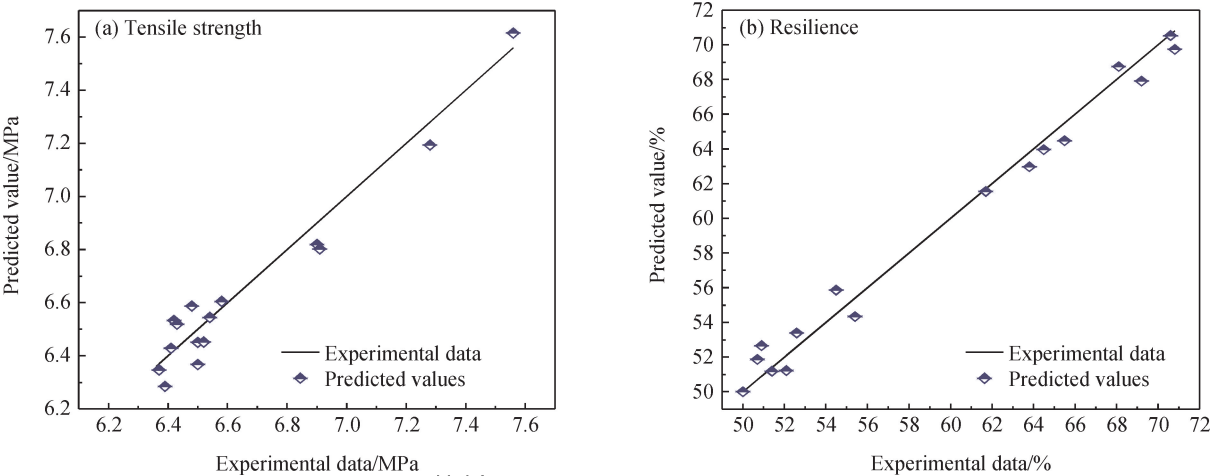


图 4 训练过程中淀粉基发泡复合材料的拉伸强度和回弹率实验值与 CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型预测值
Fig. 4 Comparison of tensile strength and rebound rate between experimental and CSAPSO-EDCD RBF ANN predicted values in the training set for starch matrix composite

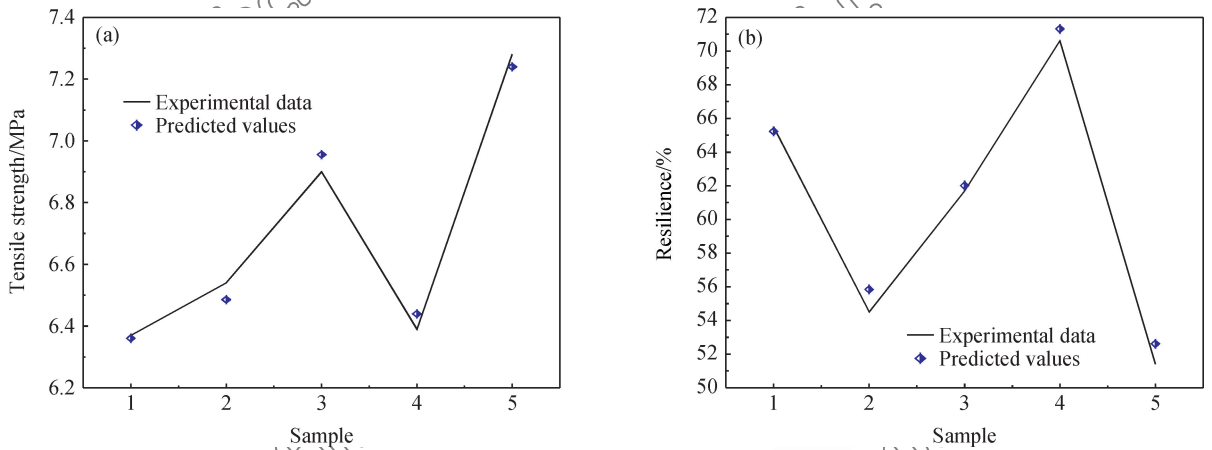


图 5 测试过程中淀粉基发泡复合材料拉伸强度和回弹率实验值与 CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型预测值
Fig. 5 Comparison of tensile strength and rebound rate between experimental and CSAPSO-EDCD RBF ANN predicted values in the test set for starch matrix composite

与模型预测值对比曲线。可知，CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型测试的拉伸强度与回弹率均与实验值较吻合，预测较准确可靠。表 1 给出了测试过程中 CSAPSO-EDCD RBF ANN 预测模型各评估参

数的统计值。可知，在预测精度上， ARD 和 $RMSEP$ 反映了 CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型的高精度；在相关性上，相关系数值都超过 98%，说明预测值与实验值吻合较好。上述结果可证实，模型的综合预测性能卓越，可以使用此模型预测淀粉发泡材料的相关属性。

3.2 与其他模型的对比结果

为综合评价提出预测模型的性能，本文选用几种同类常用模型与其作比较，分别为 BP ANN、RBF ANN 和 PSO RBF ANN。将各模型分别对实验数据库运行 5 次，训练收敛曲线如图 6 所示。

在收敛速度上，PSO RBF ANN 模型在约 100 次迭代时趋于收敛，CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型在约 200 次迭代时也趋于收敛；从收敛精度上

表 1 淀粉基发泡复合材料 CSAPSO-EDCD RBF ANN 预测统计

Table 1 Statistical parameters of CSAPSO-EDCD RBF ANN prediction for starch matrix composite

	A	M	R^2
Tensile strength	0.1134	0.0204	0.9883
Resilience	0.1076	0.0116	0.9897
Average	0.1105	0.0160	0.9890

Notes: A—Average relative deviation; M—Root mean square error of prediction; R^2 —Correlation coefficient.

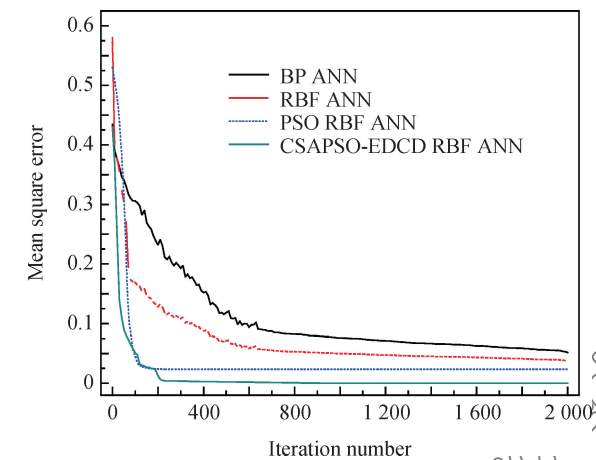


图 6 各淀粉发泡材料预测模型的收敛曲线

Fig. 6 Convergence curves of prediction models of starch foam materials

看, BP ANN、RBF ANN、PSO RBF ANN 和 CSAPSO-EDCD RBF ANN 的收敛精度依次递增。图 7 为各比较模型中淀粉发泡材料预测的拉伸强度和回弹率的对比图。

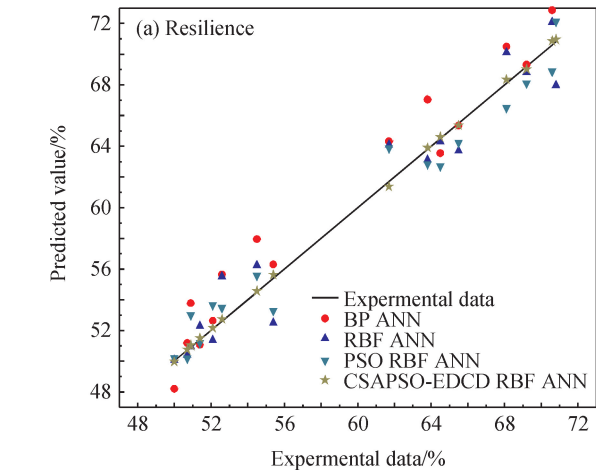


图 7 淀粉基发泡复合材料拉伸强度和回弹率的预测值与实验值

Fig. 7 Experimental and predicted values of tensile strength and rebound rate of starch matrix foam composites

无论是拉伸强度还是回弹率, CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型的预测数据点均在直线附近, 说明模型的预测值与实验值较接近; 从预测数据点与直线的垂直距离看出, BP ANN、RBF ANN、PSO RBF ANN 和 CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型的预测精度也依次递增。表 2 给出了各模型的评估指标统计结果。表明, CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型预测的精度和相关性较好, A 和 M 的平均值均较小, 平方相关系数 R^2 也较高, 综合预测性能占明显优势。

3.3 讨论

根据 CSAPSO-EDCD RBF ANN 模型的预测结果, 图 8 绘制了乙烯-醋酸乙烯酯(EVA)和淀粉质量比分别为 30%、40%、50%和 60%时, 甘油含量和 NaHCO_3 含量对发泡材料拉伸强度的影响曲线。表明, 甘油含量对淀粉发泡材料的拉伸强度随甘油量的增加缓慢降低, 原因在于随甘油量的增加, 材料分子的流动性能增强, 从而导致力学性能

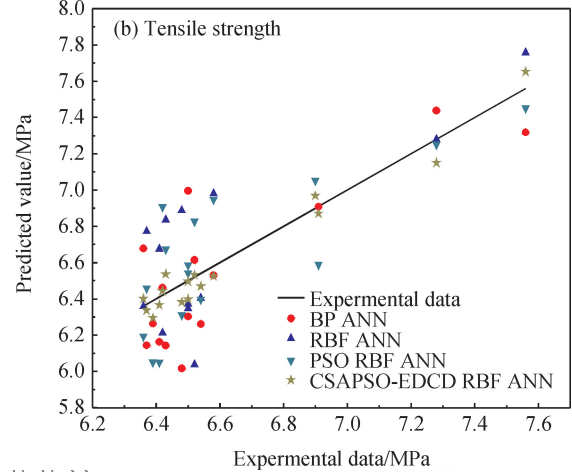


表 2 各淀粉基发泡复合材料预测模型的测试结果统计

Table 2 Statistical comparison results of the prediction models of starch matrix foam composites

		BP ANN	RBF ANN	PSO RBF ANN	CSAPSO-EDCD RBF ANN
A	Tensile strength	0.3012	0.2965	0.2616	0.2017
	Resilience	0.4572	0.3993	0.2718	0.1121
	Average	0.3792	0.3479	0.2667	0.1569
R^2	Tensile strength	0.9267	0.9401	0.9602	0.9866
	Resilience	0.9297	0.9476	0.9621	0.9879
	Average	0.9282	0.9439	0.9612	0.9873
M	Tensile strength	0.0985	0.0778	0.0435	0.0311
	Resilience	0.0976	0.0765	0.0512	0.0201
	Average	0.0981	0.0772	0.0474	0.0256

的下降。

淀粉基发泡复合材料的拉伸强度随 NaHCO_3 含量的增加先减少而后增加，在含量大约为 3% 左右时达到极小。分析其理论原因在于，当 NaHCO_3 含量较少时，随着 NaHCO_3 含量的增加，发泡剂的作用使发泡材料的泡孔数量增加，气泡之间的接触面积反之越来越小，应力也越来越小，导致拉伸强度降低；当 NaHCO_3 含量达到饱和时，过量的气泡使泡孔接触面积变大，导致拉伸强度略呈升高趋势。图 9 为甘油含量和 NaHCO_3 含量对淀粉基发泡复合材料回弹率的影响曲线。表明，淀粉基发泡复合材料的回弹率随甘油含量的增加呈递增趋势。分析其理论原因在于，甘油与淀粉、EVA 的羟基会发生氢键的作用，从而减弱分子之间的作用力，导致分子链变软，弹性性能增加，回弹率越大；反之，若甘油量过多，将导致材料的回弹率过大，影响材料的力学性能。

淀粉基发泡复合材料的回弹率随 NaHCO_3 含量的增加先缓慢增加后缓慢减少。在 NaHCO_3 含量小于 3% 时，回弹率随 NaHCO_3 含量的增加而增加，在大于 3% 时，回弹率随 NaHCO_3 含量的增加而降低。原因在于，当 NaHCO_3 含量较小时，发泡剂产生气泡孔，适量的气泡孔可以增加材料在压力作用下恢复形变，导致回弹率增强；在 NaHCO_3 含量较多时，气泡孔过多，过量的气泡同样会使泡孔接触面积变大，泡孔将不规则排列，在压力作用下，材料形变无法还原，导致回弹率降低。

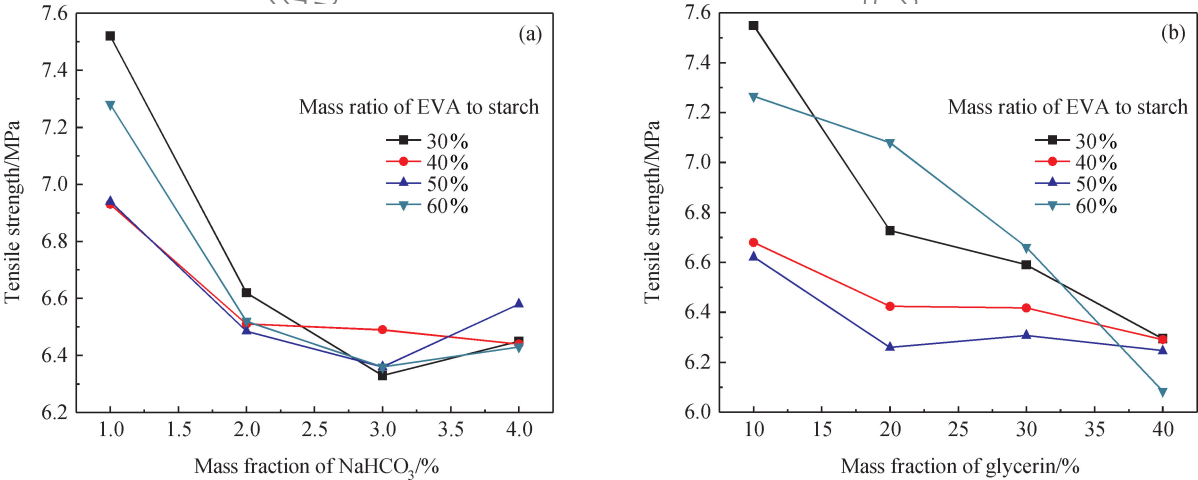


图 8 甘油含量和 NaHCO_3 含量对淀粉基发泡复合材料拉伸强度的影响
Fig. 8 Effects of glycerin and NaHCO_3 content on tensile strength of starch matrix foam composites

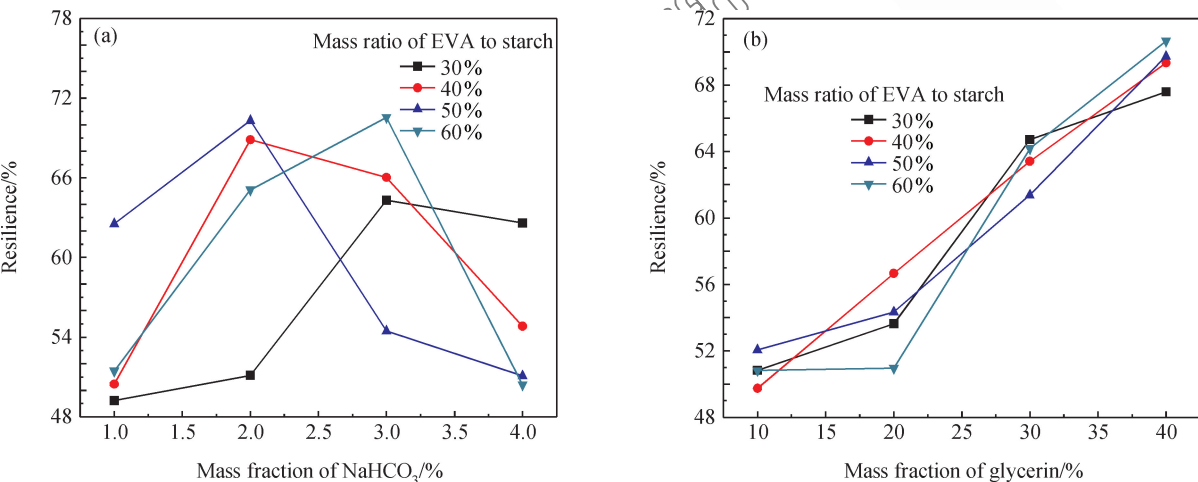


图 9 甘油含量和 NaHCO_3 含量对淀粉基发泡复合材料回弹率的影响
Fig. 9 Effects of glycerin and NaHCO_3 content on rebound rate of starch matrix foam composites

4 结 论

(1) 基于混合智能方法的淀粉基发泡复合材料性能预测模型性能卓越,能较好地预测淀粉发泡材料的拉伸强度和回弹率,预测值与实验值误差较小,相关性较高。

(2) 甘油含量对淀粉基发泡复合材料的拉伸强度随甘油量的增加而缓慢降低;淀粉基发泡复合材料的拉伸强度随 NaHCO_3 含量的增加而先减少后增加,在含量大约为 3% 左右时达到极小;淀粉基发泡复合材料的回弹率随甘油含量的增加而递增,随 NaHCO_3 含量的增加先缓慢增加后缓慢减少。

(3) 提出的淀粉基发泡复合材料性能预测模型,能为淀粉发泡材料加工中的工艺参数选择提供理论依据,同时,为其他材料的属性预测提供新的实现思路。

参考文献:

- [1] ZHAO D H, PENG C W, ZHOU J. Lipase adsorption on different nanomaterials: A multi-scale simulation study[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015, 17 (2): 840-850.
- [2] HARPER K C, VILARDI S C, SIGMAN M S. Prediction of catalyst and substrate performance in the enantioselective propargylation of aliphatic ketones by a multidimensional model of steric effects[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2013, 135(7): 2482-2485.
- [3] 张由芳, 郑玉婴, 周谦, 等. 淀粉/EVA 复合发泡鞋底材料的配方设计及表征[J]. *高分子材料科学与工程*, 2013, 29(2): 116-119, 123.
ZHANG Youfang, ZHENG Yuying, ZHOU Qian, et al. Formula design and characterizations of starch/EVA composite foamed materials[J]. *Polymer Materials Science and Engineering*, 2013, 29(2): 116-119, 123 (in Chinese).
- [4] GE C F, LANSING B, ALD R. Starch foams containing biomass from the second generation cellulosic ethanol production [J]. *Journal of Applied Polymer Science*, 2015, 132 (18): 41940-41946.
- [5] GORSSE S, VIVES S, BELLANGER P, et al. Multi-scale architected thermoelectric materials in the Mg-2(Si, Sn) system[J]. *Materials Letters*, 2016, 166: 140-144.
- [6] FISCHLSCHWEIGER M, ENDERS S. A Theory for solubility of semicrystalline and branched polymers in one solvent [J]. *Macromolecules*, 2014, 47 (21): 7625-7636.
- [7] BARRON L P, MCENEFF G L. Gradient liquid chromatographic retention time prediction for suspect screening applications: A critical assessment of a generalised artificial neural network-based approach across 10 multi-residue reversed-phase analytical methods[J]. *Talanta*, 2016, 147: 261-270.
- [8] ZHOU W, WU S B, DAI Z J, et al. Nonlinear QSAR models with high-dimensional descriptor selection and SVR improve toxicity prediction and evaluation of phenols on photobacterium phosphoreum[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2015, 145: 30-38.
- [9] JALEM R, NAKAYAMA M, KASUGA T. An efficient rule-based screening approach for discovering fast lithium ion conductors using density functional theory and artificial neural networks[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2014, 2 (3): 720-734.
- [10] 曾广胜, 孙刚. 基于 BP 神经网络的生物质发泡材料性能预测模型及应用[J]. *复合材料学报*, 2014, 31(1): 107-111.
- [11] ZENG Guangsheng, SUN Gang. Prediction model and application of biological foaming materials based on BP neural network[J]. *Acta Materiae Compositae Sinica*, 2014, 31(1): 107-111 (in Chinese).
曾广胜, 孙刚. 工艺参数对淀粉/EVA 生物质材料挤出发泡的影响及 BP 神经网络的预测[J]. *复合材料学报*, 2014, 31 (2): 512-517.
- [12] ZENG Guangsheng, SUN Gang. Influence of technological parameters on extrusion foaming of starch/EVA biologic materials and BP neural network forecast[J]. *Acta Materiae Compositae Sinica*, 2014, 31(2): 512-517 (in Chinese).
- [13] HAMADACHE M, BENKORTBI O, HANINI S, et al. A quantitative structure activity relationship for acute oral toxicity of pesticides on rats: Validation, domain of application and prediction[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2016, 303: 28-40.
- [14] ZHANG Y Y, PAN B C. Modeling batch and column phosphate removal by hydrated ferric oxide-based nanocomposite using response surface methodology and artificial neural network [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2014, 249: 111-120.
- [15] WU Y, LIU B X, LI M S, et al. Prediction of CO_2 solubility in polymers by radial basis function artificial neural network based on chaotic self-adaptive particle swarm optimization and fuzzy clustering method [J]. *Chinese Journal of Chemistry*, 2013, 31(12): 1560-1572.
- [16] KOC D I, KOC M L. A genetic programming-based QSPR model for predicting solubility parameters of polymers[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2015, 144: 122-127.
- [17] KHAZAEI A, SARMASTI N, SEYF J Y. Quantitative structure-activity relationship of the curcumin-related compounds using various regression methods[J]. *Journal of Molecular Structure*, 2016, 1108: 168-178.
- [18] LI M S, HUANG X Y, LIU H S, et al. Solubility prediction of supercritical carbon dioxide in 10 polymers using radial basis function artificial neural network based on chaotic self-adaptive particle swarm optimization and B-harmonic means [J]. *Rsc Advances*, 2015, 5(56): 45520-45527.
- [19] WANG Y, HUANG J J, ZHOU W, et al. Incorporating PLS model information into particle swarm optimization for descriptor selection in QSAR/QSPR[J]. *Journal of Chemometrics*, 2015, 29 (12): 627-636.
- [20] 李孟山, 黄兴元, 柳和生, 等. 基于混沌自适应粒子群人工神经网络的气体在聚合物中的溶解模型[J]. *化学学报*, 2013, 71(7): 1053-1058.
LI M S, HUANG X Y, LIU H S, et al. Solubility prediction of gases in polymers based on chaotic self-adaptive particle swarm optimization artificial neural networks[J]. *Acta Chimica Sinica*, 2013, 71(7): 1053-1058 (in Chinese).
- [21] FATEEN S E K, BONILLA-PETRICIOLET A. A note on effective phase stability calculations using a gradient-based cuckoo search algorithm[J]. *Fluid Phase Equilibria*, 2014, 375(6): 360-366.
- [22] FATEEN S E K, BONILLA-PETRICIOLET A. Unconstrained gibbs free energy minimization for phase equilibrium calculations in nonreactive systems, using an improved cuckoo search algorithm[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2014, 53(26): 10826-10834.
- [23] QASEM S N, SHAMSUDDIN S M, HASHIM S Z M, et al. Memetic multiobjective particle swarm optimization-based radial basis function network for classification problems[J]. *Information Sciences*, 2013, 239(4): 165-190.
- [24] KENNEDY J, EBERHART R. Particle swarm optimization [C]//In 1995 IEEE International Conference on Neural Networks Proceedings. Perth: IEEE Australia Council, 1995: 1942-1948.
- [25] ZHANG Z B, JIANG Y Z, ZHANG S H, et al. An adaptive particle swarm optimization algorithm for reservoir operation optimization[J]. *Applied Soft Computing*, 2014, 18 (4): 167-177.