

神经网络在聚苯乙烯乳胶球制备中的应用

张辉^{1,2}, 赵晓峰², 唐清², 李文超¹

(1. 北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083; 2. 中国科学院过程工程研究所, 北京 100080)

摘要: 利用神经网络很强的非线性映射功能, 关联了聚苯乙烯乳胶球制备工艺参数与球尺寸相对标准偏差之间的关系, 预报相对标准偏差效果较好。

关键词: 神经网络; 聚苯乙烯乳胶球; 制备; 应用

中图分类号: O157.5; O631.5 文献标识码: A 文章编号: 1009-606X(2002)06-0544-03

1 前言

聚苯乙烯胶乳液因其球形颗粒的均匀性而受关注^[1]。近几年来, 用这种均匀的单分散聚苯乙烯乳胶球成功地组装了光子晶体^[2], 因此制备窄粒径分布的聚苯乙烯球就成为组装光子晶体的关键技术问题之一。

本工作将神经网络方法^[3-5]应用于聚苯乙烯乳胶球的制备研究, 关联了聚苯乙烯乳胶球制备工艺参数与球尺寸相对标准偏差之间的关系, 并对新工艺参数下制备的聚苯乙烯乳胶球的尺寸相对标准偏差进行了定量预报, 预报值与实验值吻合较好。

2 实验

2.1 聚苯乙烯乳胶球的制备

试剂: 苯乙烯单体(C₈H₈, 分析纯, 北京福星化工厂); 乳化剂 OP, Triton X-100(C₃₄H₆₂O₁₁, 聚乙二醇辛基苯基醚, 化学纯, 苏州工业园区正兴化工研究院); 引发剂过硫酸铵[(NH₄)₂S₂O₈, 分析纯, 北京化学试剂三厂]; 溶剂为蒸馏水。

实验过程: 将乳化剂、单体分别加入到盛有 250 ml 蒸馏水的三口瓶中, 然后将三口瓶置于水浴锅中进行混合搅拌, 30 min 后加入引发剂, 待反应开始后保温 6 h。不同实验条件下的实验结果示于表 1。

2.2 聚苯乙烯乳胶球的尺寸及形貌检测

2.2.1 电镜样品制备与观测

将覆盖有 Formvar 膜的铜网放置在滤纸上, 用滴管或针管取样, 滴于铜网上, 然后在 HITACHI H-8100 TEM 电子显微镜进行乳胶球的尺寸及形貌检测。

2.2.2 聚苯乙烯乳胶球的尺寸观测与计算

每个样品用 TEM 拍下具有代表性区域的照片, 每张照片至少包含 50 个颗粒, 随机取一张照片, 以其中的任意 50 个颗粒为统计标准进行计算。则可得到平均粒径(R), 即 $R=d/\beta$ 。其中 $d=\sum_i d_i/50$; d_i 为第 i 个球的直径; β 为电镜的放大倍数。其相对标准偏差(也叫变异系数)为

$$\sigma = \sqrt{\sum_i (d_i - d)^2 / 49} / d.$$

收稿日期: 2002-04-22, 修回日期: 2002-06-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(编号: 59974026)

作者简介: 张辉(1967-), 女, 吉林省松原市人, 博士研究生, 材料学专业, E-mail: zhanghui14305@sohu.com.

表 1 中不同实验条件下的聚苯乙烯小球的 TEM 形貌示于图 1。

表 1 人工神经网络学习过程
Table 1 Learning results by ANN

No.	Kind	ϕ_{styrene} ($\times 10^2$)	$[(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8]$ (mol/L)	$\phi_{\text{Triton X-100}}$ ($\times 10^2$)	T (K)	σ_{exp} (%)	σ_{cal} (%)	$D^{1)}$	Error ²⁾ (%)
1	1	6.89	0.00755	0.10	346	3.10	3.09	-0.01	-0.2
2	2	3.55	0.0156	0.18	348	16.98	16.82	-0.16	-1.0
3	2	3.57	0.0156	0.11	348	6.96	6.69	-0.27	-3.9
4	2	3.57	0.0156	0.14	348	9.89	10.33	0.44	4.5
5	1	3.56	0.0156	0.356	348	3.41	3.52	0.11	3.2
6	1	3.55	0.0156	0.53	348	2.22	2.28	0.06	2.5
7	1	3.57	0.0156	0.18	343	4.01	4.07	0.06	1.5
8	2	3.57	0.0156	0.18	358	16.18	16.86	0.68	4.1
9	2	3.57	0.0156	0.18	353	14.71	15.20	0.49	3.4
10	2	3.57	0.0156	0.18	363	21.40	21.07	-0.33	-1.5
11	2	3.57	0.0313	0.18	353	15.56	15.59	0.03	0.2
12	2	3.57	0.0235	0.18	353	14.11	14.12	0.01	0.1
13	2	2.17	0.0159	0.18	353	23.92	24.83	0.91	3.9
14	2	2.87	0.0157	0.18	353	24.78	23.60	-1.18	-4.8
15	2	4.25	0.0155	0.18	353	12.87	12.12	-0.75	-6.0
16	2	5.25	0.0154	0.18	353	12.30	12.42	0.12	1.0
17	2	6.88	0.0155	0.17	353	11.27	11.71	0.44	3.9

Note: 1) $D = \sigma_{\text{cal}} - \sigma_{\text{exp}}$; 2) Error = D / σ_{exp} .

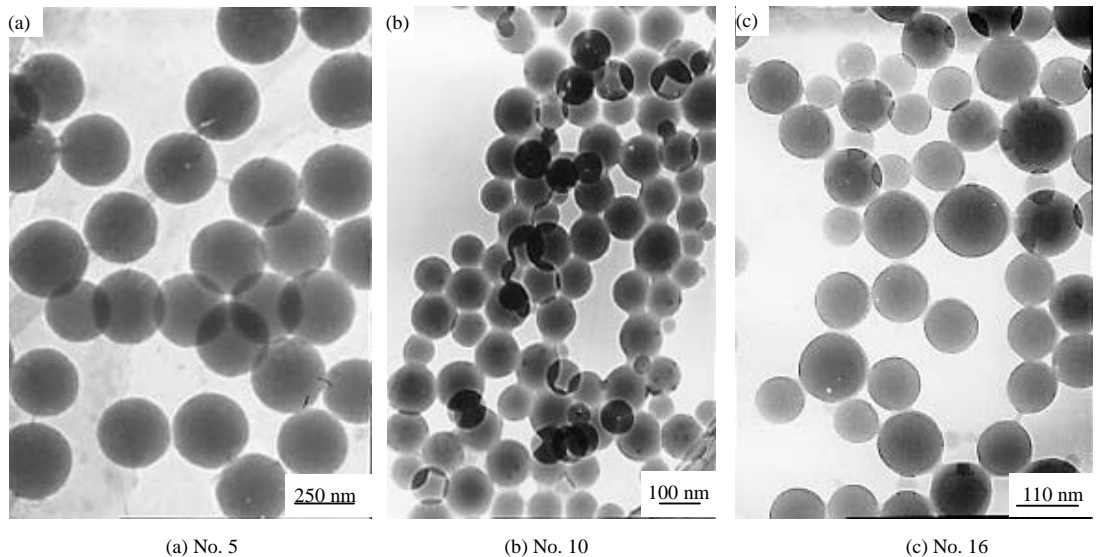


图 1 不同实验条件下的聚苯乙烯球 TEM 形貌

Fig.1 TEM images of polystyrene spheres prepared under different conditions

3 人工神经网络的训练与预报

3.1 人工神经网络训练

选择反应体系中苯乙烯的体积分数 ϕ_{styrene} 、过硫酸铵的浓度 $[(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8]$ 、Triton X-100 的体积分数 $\phi_{\text{Triton X-100}}$ 以及水浴温度 T 作为人工神经网络的输入，用聚苯乙烯小球的尺寸相对标准偏差 σ 作为人工神经网络的输出，实验结果的判别标准为：聚苯乙烯小球的尺寸相对标准偏差 $< 5\%$ 为 1

类点, >5% 为 2 类点. 由于原始样本集的变量量纲和变化幅度不同, 在训练之前对原始样本集进行了归一化处理. 将处理后的实验数据作为训练集, 采用 4-3-1 的三层 BP 网络, 以 sigmoid 函数为隐含层传递函数, 即以线性函数为输出层传递函数, 学习系数 $\alpha=0.60$, $\beta=0.50$; 惯性系数为 0.40; 用梯度法训练网络以调整连接权 W_{ij} , 以训练误差选 0.1 为收敛标志, 训练人工神经网络 10000 次. 用训练好的人工神经网络对各样本的分类值及相对标准偏差进行预报, 结果见表 1. 本实验所使用的 ANN 软件是上海冶金研究所编制的 Masterminer 2.0, 软件在 Pentium III 600、内存为 128 MB 的兼容机上运行, 其典型的 CPU 时间为 1~2 min.

3.2 人工神经网络预报

训练好的人工神经网络可以对设计样本进行定量预报. 表 2 是对预留的 4 组数据预报结果与实验结果的比较, 可以看出预报偏差均 <2.5%, 预报值与实验值吻合得较好.

表 2 设计样本的预报与实验结果比较
Table 2 Prediction and test results of designed samples

No.	Kind	ϕ_{styrene} ($\times 10^2$)	$[(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8]$ (mol/L)	$\phi_{\text{Triton X-100}}$ ($\times 10^2$)	T (K)	σ_{exp} (%)	σ_{cal} (%)	Error (%)
1	1	3.57	0.0078	0.07	346	4.19	4.18	-0.2
2	1	5.26	0.0062	0.035	346	1.96	1.99	1.3
3	2	3.57	0.0391	0.18	353	12.48	12.33	-1.2
4	2	1.46	0.016	0.18	353	19.61	20.04	2.2

4 结 论

利用 4-3-1 的人工神经网络 BP 模型, 在已有的实验数据基础上训练网络, 使用训练好的人工神经网络对设计的实验样本点进行了定量预报, 预报结果与实验值的误差小于 2.5%.

参考文献:

- [1] Ugelstad J, Mørk P C, Kaggerud K H, et al. Swelling of Oligomer-polymer Particles: New Methods of Preparation of Emulsions and Polymer Dispersions [J]. *Adv. Colloid Interface Sci.*, 1980, 13: 101-140.
- [2] Mei Dong-bin, Liu Hong-guang, Cheng Bing-ying, et al. Visible and Near-infrared Silica Colloid Crystals and Photonic Gaps [J]. *Physical Review B*, 1998, 58(1): 35-38.
- [3] 焦季成. 神经网络的应用与实现 [M]. 西安: 西安电子科技大学出版社, 1993. 6.
- [4] 刘国华, 包宏, 李文超. 人工神经网络在材料设计中的应用及其若干共性问题的研究 [J]. *计算机与应用化学*, 2001, 18(4): 388-392.
- [5] 吕允文, 夏宗宁, 赖树纲, 等. 材料设计专家系统与人工神经网络的应用 [J]. *材料导报*, 1994, 8(6): 1-4.

Application of Artificial Neural Network to Polystyrene Spheres Preparation

ZHANG Hui^{1,2}, ZHAO Xiao-feng², TANG Qing², LI Wen-chao¹

(1. School of Mat. Sci. & Eng., University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China;

2. Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract: Artificial neural network method was applied to polystyrene spheres preparation. Relation was established between the preparation factors of polystyrene spheres and the relative standard deviation of prepared sphere diameters. Calculation results were in agreement with experimental ones.

Key words: artificial neural network; polystyrene spheres; preparation; application