

AI Graf Compounder在橡胶配方开发模拟中的应用研究

章羽 编译

(全国橡塑机械信息中心, 北京 100143)

人工智能 (AI) 融入橡胶胶料开发, 标志着材料科学实现了具有变革性意义的一步。本文深入探讨了运用AIGraf Compounder软件对橡胶配方进行模拟与优化的方式。该系统借助前馈神经网络, 能够依据成分组成精准预测材料性能, 进而减少了对大量物理测试的依赖, 有效加快了开发周期。此方法着重强调了高质量、结构化数据集的关键作用, 特别是那些源于实验设计 (DoE) 并结合其他实验策略以实现精准模拟的数据集。多个案例研究充分展示了该软件在包括三元乙丙橡胶 (EPDM) 和天然橡胶 (NR) 配方等各类胶料中的有效性, 证实了其预测能力与实验数据的高度吻合。通过有针对性的验证和统计分析, 成功克服了数据不一致、测量误差以及非结构化数据集局限性等诸多挑战。最终, 人工智能与结构化实验设计的有机融合, 让橡胶胶料开发过程中的决策变得更加高效、更依赖数据, 为整个行业的创新发展和性能优化奠定了基础。

1 人工智能在橡胶开发中的应用

近年来, 人工智能 (AI) 的快速发展已经彻底改变了众多行业。AI已经在图像和语音处理方面带来了深刻变革。然而, 高计算能力和智能算法的结合也为其他领域开辟了新的可能性, 如材料的研究与开发。

橡胶行业面临的挑战与其他材料科学学科所遇到的相似: 开发成本高、测试周期长, 以及需要精确地将材料定制以满足特定要求。采用人工智能 (AI) 进行模拟处理是一种有前景的解决方案。正如汽车行业使用数值模拟来预测机械应力、金属和塑料部件寿命试验中的裂纹扩展, 甚至在化学等其他领域用于模拟反应机理一样, AI也可以显著推动橡胶的开发。

2 以模拟作为材料开发的基础

橡胶材料开发的一个核心方面是配方及其性能的模拟。每次模拟都需要精确的数据, 并依赖于输入参数与所得材料响应之间明确的关系。在人工智能 (AI) 驱动的环境中, 不仅可以预测橡胶配方及其性能, 还可以分析其预期的物理和化学依赖性和相关性。

这种由AI驱动的方法的核心是基于前馈AI软件的神经网络。这种结构能够捕捉配方成分与其性质之间的复杂关系。根据具体应用, 未来还可能利用递归网络或更深入的机器学习系统。在此情况下, 采用前馈网络, 并通过调整目标标准对其进行优化, 以提供越来越精确的预测。

一旦准则的适应度函数识别出最优解或所定义材料属性冲突目标之间的最佳平衡, 系统就会生成具体的配方建议。这些建议基于现有数据, 并允许进行进一步的分析和优化。

3 橡胶行业的数据驱动模型

数据驱动建模在橡胶行业中发挥着越来越重要的作用。与金融行业类似, 在金融行业中, 算法会根据任何客户的历史数据做出信贷决策, 而在材料科学领域, AI也可以创建一个客观的决策系统。这减少了实验工作量, 并使开发周期更加高效。

这种方法的一个主要优点是能够同时考虑多个目标变量。人类一次只能分析有限数量的因素, 而神经网络则可以对所有相关参数进行全面评估。这使得预测结果更加精确可靠, 更接近专家的想法。然而, 结果的质量在很大程度上取决于基础数据库。一个结构良好、规模足够大的数据集对于得出有意义的模拟结果至关重要。

3.1 测试AI软件

在开发新的聚合物配方时，通常通过验证实验来测试AI软件。从数据库中移除选定的数据集，AI软件必须能够根据剩余的数据集计算出缺失的值。为了进行此测试，以属于被移除数据集的物理属性为目标。此测试的成功、通过或失败取决于AI对材料配方及其成分和物理属性值的重建准确度。

另一种测试策略是直接分析配方的成分值。结果表明，虽然该方法基本有效，但如前所述，由于数据库中成分值数据的同质性和（在某种程度上）均匀分布，该方法存在局限性。这些测试对于评估AI在模拟中的性能以及及早发现潜在弱点至关重要。可以通过增加数据来填补数据空白来解决这一问题。

4 模拟与数据分析机会

橡胶行业面临的一个主要挑战是材料性能测量的准确性。测量结果往往容易出错，而这些误差即使不是很少见，也并不总是呈正态分布。因此，仅对历史数据库进行简单的统计分析不仅不足以获得可靠的见解，而且根本不可能做到。

例如，对于包含33个配方的小型数据库的分析，可以使用不同类型的图表（如条形图或三维散点图）进行可视化，以说明成分分布和成分属性影响。这些方法提供了对哪些计算可以有效执行的初步评估。事实上，如果因素分布不均，则解决方案的范围会受到限制。

此外，相关图可用于分析特定材料属性之间的关系，以便对数据有初步了解。例如，硬度和模量之间存在物理相关性，因为这两个参数都与材料的刚度有关。这种相关性可用于评估数据质量，并确保模型假设是合理的。

5 模拟的实用程序

要进行AI驱动的模拟，首先必须将数据导入系统。这可以通过电子表格导入或直接数据库集成来完成。随后，可以对所有数据集进行集体分析，或者排除特定数据集以模拟特定场景。一个有效的策略是故意设定相互矛盾的标准，以观察模型如何响应。随后，可以将模拟结果与专业知识进行交叉验证，并通

过进一步的实验进行确认。

5.1 示例1：相关性能图

文献数据库用于分析配方成分与材料性能之间的关系。如预期，由于不同配方中各种成分的影响，硬度与模量之间的相关性相对较弱。频率分布图显示，并非所有解决方案都是可行的，这取决于数据库的同质性（图1）。

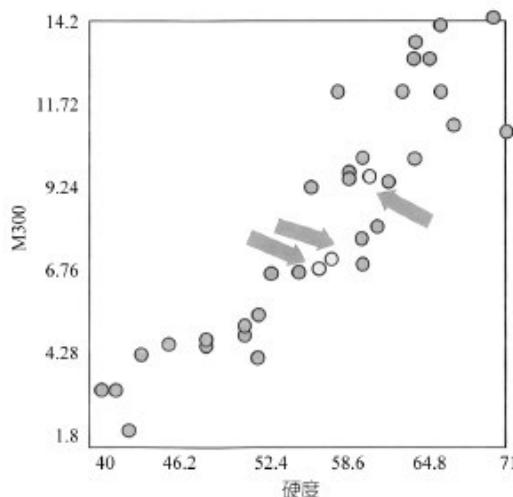


图1 两种胶料被排除；箭头标出预测结果与剩余数据在相关图中的位置

在首次计算中，炭黑CBN550的目标用量设定为40份，且未添加增塑剂。然而，采用此组成的配方最初被否决。计算结果与被否决的配方及其相应的性能数据高度吻合，无需对标准（重量/权衡）进行任何修改。

在第二次计算中，虽然排除了一个不同的公式，但其成分和相应的数值被用作标准。所有标准的权重均设定为40。结果表明，炭黑N330的数量并未完全达到目标。然而，通过增加权重，第二次计算成功达到了目标。当将这种胶料纳入硬度—模量图时，观察到数据点非常接近（图1：第一次计算，右上；第二次计算）。这个例子表明，只要有足够的数据来支持解决方案，使用基于成分的预测而非基于属性的预测可以得出可靠的结果。

5.2 示例2：DoE（设计实验）模拟与验证实验

本例在利用成分而非性质的概念上进行拓展，探讨了采用设计实验（DoE）方法预测一系列胶料的可行性。利用例1中的数据创建了一个部分因子设计实验

计划，随后通过实验进行了验证。进一步的分析允许对预测胶料和实验制备的胶料进行比较，从而通过设计实验程序进行统计评估。这种方法通过将实验结果与数据库记录进行比较，有助于评估数据的准确性。

本研究的结果有助于开发符合DoE（设计实验）方案的预测胶料。该实验使用了与示例1相同的数据库。选择了部分因子设计，涉及以下因素：

- (1) CBN330: 30-70 份；
- (2) CBN550: 0-20 份；
- (3) 环烷油: 5-45 份。

随后在泰国曼谷玛希隆大学对这些胶料进行混炼、硫化及测试。胶料配方的计算采用人工智能软件 ATGraf Compounder完成。最终使用DesignExpert软件对两个实验设计数据集进行分析比较。结果（图2和图3）表明差异主要受聚合物分子量变化影响，部分原因在于混炼工艺差异——这些差异在历史数据库条目中尚未明确。图4和图5中曲线的斜率相似，所有平面中点排列顺序一致。为量化结果间的吻合度，实验与模拟的平均数据见表1。

表1 实验与模拟DoE的数据对比

响应名称	单位	平均实验值	平均模拟值
重力	g/ccm	1.11	1.11
门尼	MU	32.71	38.42
门尼t5	min	8.97	26.30
硬度	Durometer A	54.88	54.72
M300	MPa	8.27	7.75
拉伸强度	MPa	21.24	22.45
断裂伸长率	%	547.13	585.28
压缩永久变形， 70 °C, 24 h	%	50.79	32.37

仅门尼焦烧时间的数值显著超出预期测量误差范围。然而，其余所有数值均处于可接受的测量误差范围内。

总体而言，除焦烧时间外，模拟结果与实验结果高度一致，微小差异可归因于混炼工艺和聚合物性能的差异。此外，这些结果凸显了将实验设计技术与人工智能驱动的数据库分析及实验室实践相结合的优势。

5.3 填料对丁腈橡胶衬套动态硬化性的影响

本研究考察了除炭黑影响外，二氧化硅对弹性体衬套动态硬化性的作用。为评估硅胶在胶料动态行为中的作用，选取三个浓度的N550炭黑，在保持增塑剂不变的前提下逐步增加硅胶含量。由于数据具有对称性，得以计算出符合预期方案的配方体系；但增塑剂含量需接受微小波动。

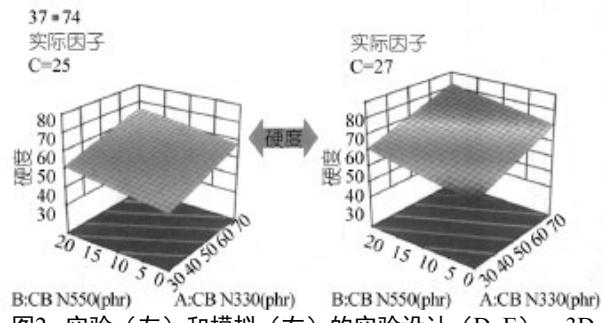


图2 实验（左）和模拟（右）的实验设计（DoE）：3D图中显示的CB330和CB550的硬度依赖性
结果表明，炭黑对M100和静态模量(Cstat)具有显

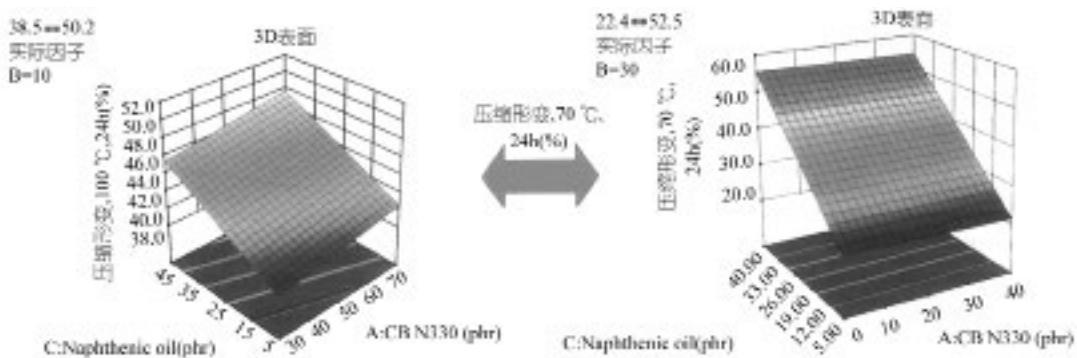


图3 实验（左）和模拟（右）设计实验（DoE）：3D图显示了压缩形变对CB33和油依赖性的结果

著影响（图4）。所得曲线看似几乎完全一致，但在CB N550、27份水平下呈现出某些不均匀且异常的行

为，这促使我们进一步调查实验设计(DoE)中的异常值和误差。

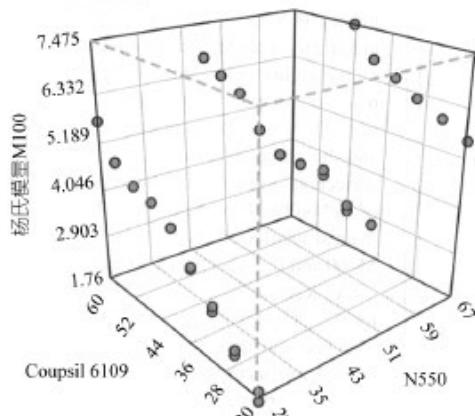


图4 模量为100的CB N550与二氧化硅复合材料

通过拟合回归曲线进行了修正，但仅限于计算所用数据集。拟合数据替换原始值后重新计算曲线。值得注意的是，这些修正主要影响炭黑含量的中低水平，而高水平未受影响——因为缺乏高M100值和Cstat值胶料的数据（图5）。

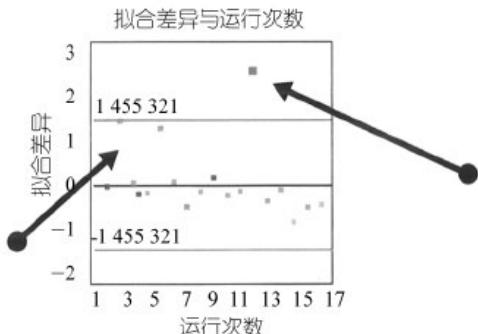


图5 拟合差异 (DFFITS) 与用于模拟的实验运行次数；箭头指示偏差

如上所述，动态硬化系数 (C_{dyn}/C_{sta}) 采用相同方法计算。首次运行使用未经处理的数据，第二次运行则采用修正后的数据。低炭黑含量与高炭黑含量的结果曲线几乎完全一致。然而在中等炭黑用量水平 (CB550, 27 份) 下，当二氧化硅浓度较低时（图6），可观察到明显的斜率变化（箭头标注处）。这表明可能需要进一步分析，甚至完全重复实验设计 (DoE) 以验证该发现。

模拟揭示了人工智能软件对数据质量的强烈依赖性，可通过统计误差分析进一步优化。本研究表明，即使预测数据与实际数据初始表现良好，仍需对每个

实验设计因子进行详细的统计评估。

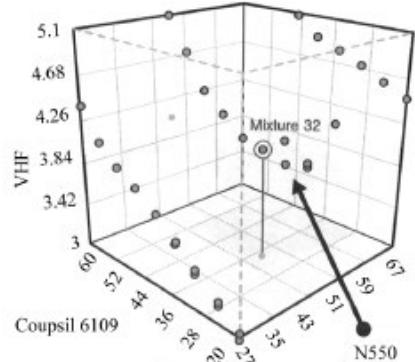


图6 丁腈橡胶胶料动态硬化 (VHF)：3份炭黑N550用量及白炭黑用量逐步减少

图表清晰地突显了填料对粘弹硬化因子 (VHF) 的主导性影响，而几乎所有其他成分的影响都微乎其微，甚至可以忽略不计。

5.4 乙丙橡胶胶料中促进剂组合的模拟研究

本研究探讨了在不同硫浓度下共促进剂的影响。虽然模拟结果与实验数据吻合良好，但必须仔细考虑原始数据集中潜在的误差来源。

本分析所用数据源自包含七个因子的中心复合实验设计。此类大规模实验设计面临的主要挑战在于混炼制备所有胶料所需的巨大时间成本和人力投入。考虑到复杂性，人们会预期偏差更大或误差增加。然而令人惊讶的是，在预测值与实际值的对比图中并未观察到这种趋势。

在模拟中，考虑了两种硫含量水平，同时将加速器ZdiBC以0.5 份的增量逐步增加（图7）。结果显示，数据点围绕一条总体趋势线分布，而不是形成平滑的曲线。在此情况下，可考虑两种可能方案：

(1) 使用实验设计软件优化数据集，使所有数据点拟合到回归函数上。

(2) 重复模拟流程以验证结果 从统计学角度看，第一种方法会引入不确定性，因为它可能扭曲数据的自然变异性。因此建议采用每区块减少因素数量的实验设计方案，并运用折叠技术提升结果可靠性。

一般而言，较大的实验设计研究需要更深入的统计分析，以避免误解并确保结论准确。

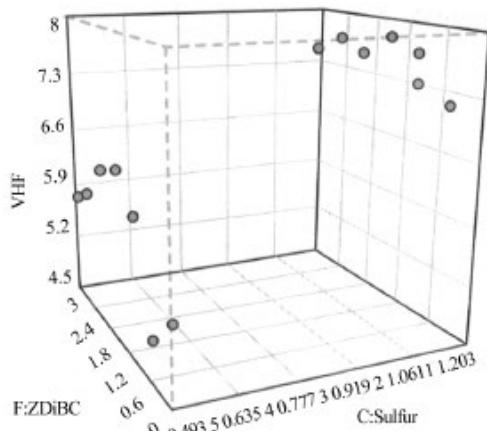


图7 在两种硫含量下, ZDiBC的逐步变化, 但因数据错误导致结果存疑

5.5 基于天然橡胶的胶料: 模拟

本例采用更不规则的数据库, 包含试错实验数据及通过实验设计法生成的微型数据集。所有胶料均以天然橡胶(NR)为基础。原料成分及其数值分布范围足够广泛, 可支持多次模拟。

最常见的NR胶料采用基于硫脲酰胺和所谓“助硫剂”的硫化体系。但本研究中的胶料主要构建单元为二硫代磷酸酯。

为验证模拟方法, 考察了以下条件:

- (1) 硫含量两档: 1.5份与2.2份;
- (2) SDT/S(聚硫二硫代磷酸酯)固定为2.2份;
- (3) MBTS(酚醛硫化剂)分步递增至1.5份。

该设置用于探究SDT/S与MBTS间的协同效应(图8)。

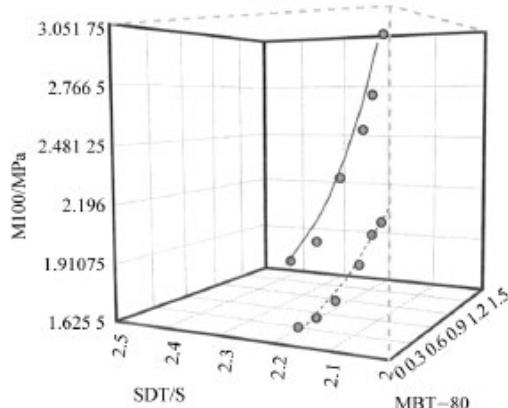


图8 在两种硫含量下, MBTS逐步增加, 但SDT/S保持不变(2.2份), 模量为100

模量100曲线呈现近乎平行的位移, 但在较高MBTS浓度下, 高硫水平的斜率较低硫水平显著陡峭(图9)。断裂伸长率曲线呈现相似趋势: 低硫水平的峰值更平缓, 而较高MBTS浓度下斜率更陡峭。值得注意的是, 这些曲线似乎与模量曲线呈精确反向关系。

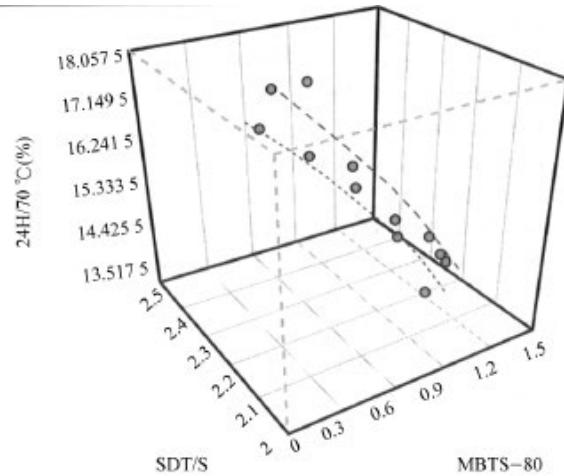


图9 在两种硫含量下, MBTS的压缩变形量逐步增加, 但SDT/S比值保持不变, 为2.2份

无论低硫还是高硫水平, 压缩永久变形曲线均呈现严格平行位移, 且在所有MBTS浓度下斜率完全一致。这些曲线近乎线性。鉴于SDT/S与MBTS构成抗逆转加速体系, 压缩永久变形仅取决于交联密度, 不受胺类分解产物引发的网络破坏影响。由于本模拟中所有其他成分均保持恒定, 压缩永久变形对促进剂组合的依赖性符合预期。

综上所述, 此类模拟可实现交联体系的精细调整, 从而优化复合材料性能。然而, 数据库质量必须足够高才能支持精确计算。本次模拟中, 复合材料中MBTS浓度的增加仅通过SDT/S与硫的组合实现, 这是因为其他模拟方案的数据不足。

6 结论

人工智能在橡胶配方开发中的应用标志着重大进步, 实现了配方优化速度更快、精度更高、效率更优。上述案例突显了人工智能驱动模拟的关键作用及其依赖性:

- (1) 人工智能驱动的模拟可提供精准预测, 但

(下转第18页)