

环境适应性设计与分析

# 双基球扁药工艺优化仿真研究

王冬磊<sup>1</sup>, 张智禹<sup>2</sup>, 尹爱军<sup>2</sup>

(1. 中国工程物理研究院 化工材料研究所, 成都 621900;  
2. 重庆大学 机械工程学院, 机械传动国家重点实验室, 重庆 400044)

**摘要:** **目的** 优化双基球扁药成球工艺参数, 解决由于目前双基球扁药理论研究不充分、控制模型不明确、生产工艺参数调控依靠人工经验所导致的药品成球后直径、弧厚偏差大的问题。**方法** 利用 BP 神经网络在处理复杂非线性映射问题上的强大的能力, 对成球关键工艺参数与成球质量指标进行建模, 并应用成球工艺过程仿真数据对其进行训练, 将训练得到的 BP 神经网络模型用于优化成球工艺参数。同时利用仿真数据进行检验模型的可靠性。**结果** 训练后 BP 神经网络均方误差为 0.001, 成球直径误差率为 1.27%, 成球弧厚误差率为 2.08%, 成球质量参数误差均很小, 可以满足工艺要求。**结论** 该 BP 神经网络模型具有较高精度, 适用于含能材料工艺优化, 提出的成球工艺优化方法能有效降低成球试制成本, 缩短生产周期。

**关键词:** 双基球扁药; 工艺优化; BP 神经网络; 成球质量

**DOI:** 10.7643/issn.1672-9242.2018.07.007

**中图分类号:** TJ104; V232.4 **文献标识码:** A

**文章编号:** 1672-9242(2018)07-0029-04

## Simulation on Process Optimization of Double-based Oblate Spherical Powder

WANG Dong-lei<sup>1</sup>, ZHANG Zhi-yu<sup>2</sup>, YIN Ai-jun<sup>2</sup>

(1. Institute of Chemical Materials, China Academy of Engineering Physics, Chengdu 621900, China;  
2. State Key Laboratory of Mechanical Transmissions, College of Mechanical Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

**ABSTRACT:** Objective To optimize pelletization process parameters of double-based oblate spherical powder, and solve the problems of large deviation in diameter and web size of double-based oblate spherical powder after pelletization process caused by insufficient theoretical research, unclear control model and regulation of production process parameters depended on the artificial experience. Methods The ability of BP (back propagation) neural network in handling complex nonlinear mapping problems was applied to build model between pelletization process parameters and pelletization quality index, and train the model with pelletization process simulation data. The BP neural network model obtained in training was used to optimize the process parameters. At the same time, the simulation data was used to test the reliability of the model. Results After training, the mean square error of the BP neural network was 0.001, the error rate of the pelletization diameter was 1.27% with 2.08% for web size. The errors of the quality parameters were small. The technological requirements were met. Conclusion The BP neural network model has high precision and is suitable for the optimization of the energetic material process. The proposed palletization process optimization method can effectively reduce the trial cost of the palletization and shorten the production cycle

**KEY WORDS:** double-based oblate spherical powder; process optimization; BP neural network; pelletization quality

收稿日期: 2018-05-09; 修订日期: 2018-06-02

基金项目: 国防预研基金项目(9140A17050115JW20001); 重庆市人工智能技术创新重大主题专项重点项目(cstc2017rgzn-zdyfx0007)

作者简介: 王冬磊(1977—), 男, 黑龙江人, 副研究员, 主要研究方向为数据库与知识工程。

通讯作者: 尹爱军(1978—), 男, 湖南人, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为设备故障预测与健康管理和大数据与人工智能。

双基球扁药是一种具有高能量、高燃速、薄弧厚、燃烧性能好的球扁形发射药<sup>[1]</sup>。由于其成球过程涉及溶解、成球、预蒸、蒸溶等多个工序的工艺参数控制，而加工过程内在机理复杂，国内外在机理分析尚处于探索阶段，研究的理论基础薄弱，尚未形成成熟的成球工艺控制技术，导致成球直径、弧厚偏差大的问题<sup>[2-4]</sup>。大量研究表明，成球过程各工序温度及工序时长对成球质量影响尤为重要<sup>[5-7]</sup>，这些参数与成球质量之间有着复杂的相互关系，且成球过程是一个复杂的非线性过程。已有文献资料显示，对于成球工艺参数与成球质量间关系的研究还不够深入，以致无法从工艺机理角度给出合适工艺参数指导生产。

近年来，神经网络研究不断深入已使其成为人工智能领域的前沿技术，而BP神经网络由于其突出的非线性映射及自学习自适应能力在非线性的建模、函数逼近、模式分类等方面广泛应用<sup>[8]</sup>。Tsai和Luo<sup>[9]</sup>运用BP神经网络在注塑工艺参数优化方面作了深入研究。刘荷花<sup>[10]</sup>采用BP神经网络优化了激光焊接工艺参数，达到了高精度、高质量的设计目标。BP神经网络的不断发展也为成球过程工艺优化提供了新的思路与方法。文中利用BP神经网络的非线性拟合能力，运用根据北化集团双基球扁药生产成球工艺过程产生的工艺仿真数据建立了工艺参数与成球质量参数间的关系，形成了神经网络算法模型。为今后双基球扁药生产提供优化的工艺参数，进而提高双基球扁药成球质量。

## 1 双基球扁药成球工艺原理

内溶法成球的工艺流程为：加料混合—升温—溶解—成球—预蒸溶剂—脱水—驱残溶剂—保温—冷却等9个工序<sup>[7]</sup>。整个过程在同一个成球器中顺序进行。

1) 加料混合：将硝化棉、吸收药、中定剂、溶剂等原材料加入水中、搅拌。

2) 升温：混合一定时间后，将成球器中的夹层升温，达到溶解温度。

3) 溶解：升温后，保持温度一定时间，以进一步溶解原材料，最终原材料被溶解为具有一定黏度的高分子溶液。

4) 成球：在成球器的搅拌作用下，高分子溶液以液滴的形式被分散到水中，这些液滴不与水相容，在液滴表面张力作用下，表面积有尽量缩小的趋势，以减小其表面能，最终小液滴成为球形。同时在成球器中加入固定配比的明胶，使其保持稳定且分散成颗粒状。

5) 预蒸溶剂：升温将球中的溶剂蒸发一部分，以增大球的表观黏度，防止球变形。预蒸溶剂阶段蒸出溶剂总量的70%左右。

6) 脱水：脱水阶段是控制药粒密度的重要操作，由于球中有一定的水分，含有水分的球在驱除溶剂

后收缩不良、松质多孔。为了脱水，在水中加入一定量的可溶性盐类，利用介质水中盐产生的渗透压作用，使球中的水分不断渗透到介质中。脱水截断温度要高，渗透压要大，这样有利于提高脱水速度，但在脱水阶段要防止溶剂过早蒸发，造成药面过早的收缩硬化，导致球内水分不能完全渗透出来，因此脱水阶段的温度低于恒沸点。

7) 驱残溶剂：脱水结束后，开始升温，在高温的作用下，溶剂从球表面蒸发穿越水介质排出。此过程中为防止粘结，蒸溶的速度不宜过快。

8) 保温：恒温一段时间，以尽可能蒸发出残余溶剂。经过恒温过程后，球中绝大部分溶剂被驱除，球粒逐渐硬化定型，形成密度较大、形状规则的球扁药。

9) 冷却：保温一段时间后，降低成球器温度，出料洗涤，进行后续工序。

由上述成球工艺流程可以看出，成球工艺复杂且持续时间长。同时由于成球理论研究欠缺、控制模型不明确导致目前生产工艺参数调控主要依靠人工经验决定。文中为解决此问题，利用成球工艺过程仿真数据，结合BP(Back Propagation)神经网络强大的非线性拟合能力建立由每个工序持续时长及工序结束时温度值组成的共18个工艺参数与成球质量参数间的关系模型，对成球工艺进行优化。

## 2 BP神经网络

BP神经网络是一种前向型网络，采用误差反向传播算法进行训练<sup>[11]</sup>。它是目前应用最为广泛的一种神经网络模型，不需人工参与即可自动学习输入与输出之间的映射关系。其在解决非线性问题和复杂系统时具有其他算法模型无法比拟的优势，因此在学术研究和工程领域中广泛应用<sup>[12]</sup>。

### 2.1 BP神经网络的基本原理

BP神经网络结构如图2所示，由一个输入层、一个输出层和若干隐含层组成。在各层内部，神经元没有连接，层与层之间的神经元通过权值相互连接。

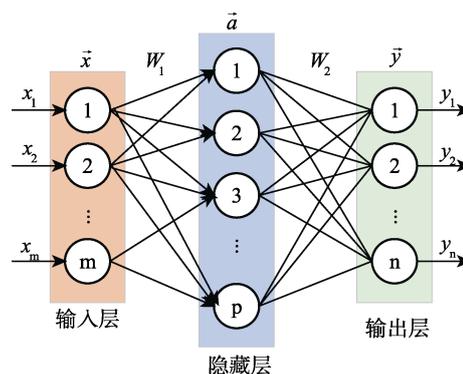


图2 BP神经网络结构

给予输入层一组学习样本，其通过隐藏层神经元最终传播给输出层，输出层的值作为 BP 神经网络的输出。在误差反向传播过程中，由网络实际输出与期望输出之间误差的负梯度方向，从输出层向隐藏层再到输入层，逐层修正连接权值。前向传播与误差反向传播过程交替进行直至网络收敛。

图 2 中， $\bar{x}=[x_1, x_2, \dots, x_m]$  为输入层的输入向量，其由  $m$  个参数构成，表示输入层节点数为  $m$ 。 $\bar{a}=[a_1, a_2, \dots, a_p]$  为隐藏层的输出向量，隐藏层节点数为  $p$ 。 $\bar{y}=[y_1, y_2, \dots, y_n]$  表示输出层的输出向量，其节点数为  $n$ 。 $W_1$  与  $W_2$  分别表示输入层到隐含层和隐藏层到输出层的权值矩阵， $b_1$  与  $b_2$  表示隐藏层与输出层的阈值向量。因此隐藏层与输出层的值分别为：

$$\bar{a}=f_1(W_1 \cdot \bar{x}+b_1) \quad (1)$$

$$\bar{y}=f_2(W_2 \cdot \bar{a}+b_2) \quad (2)$$

式中： $f_1(x)$  与  $f_2(x)$  分别为隐藏层与输出层的激活函数。通常隐藏层的激活函数为 Sigmoid 函数，即  $f_1(x)=1/(1+e^{-x})$ ；输出层的激活函数为 Purelin 函数，即  $f_2(x)=x$ 。

### 2.2 BP 神经网络的设计

根据 Kolmogorov 定理<sup>[13]</sup>可知，任意函数均可由一个 3 层 BP 神经网络逼近，因此文中采用 3 层 BP 网络结构。将成球阶段各工序持续时长及工序结束时的温度值共 18 个参数作为输入层参数，输出层参数由成球直径、弧厚 2 个参数组成。隐藏层节点数  $p$  由经验公式 (3) 确定：

$$p=\sqrt{m+n}+c \quad (3)$$

式中： $p$  为隐含层节点数； $m, n$  为输入层、输出层节点数； $c$  为 0 到 10 之间的整数。经过尝试最终取隐藏层节点数为 9。

网络隐藏层激活函数选择 Relu 函数，输出层激活函数为 Purelin 函数。同时选择均方误差 (MSE) 作为 BP 神经网络性能评价指标，其计算公式为：

$$MSE=\frac{1}{q} \sum_{i=1}^q\left(y_i-o_i\right)^2 \quad (4)$$

式中： $q$  为样本个数； $y_i$  为网络输出样本值； $o_i$  为实际样本值。

BP 神经网络参数见表 1。

表 1 BP 神经网络参数

参数名称	参数值
BP 神经网络结构	18-9-2
隐藏层激活函数	Relu
输出层激活函数	Purelin
学习率 ( $Lr$ )	0.01
迭代次数	30000

### 2.3 BP 神经网络训练

根据北化集团生产双基球扁药的成球工艺过程，产生 50 条工艺仿真数据，将其中 40 条用于模型训练，剩余 10 条数据用于检测所建立的 BP 神经网络的泛化能力。训练结果如图 3 所示，当训练次数达到 2000 次以上时，训练均方误差已为 0.007，而且训练次数越大，训练均方误差越小；当训练次数达到 7000 次以上时，输出误差稳定在 0.001 附近。

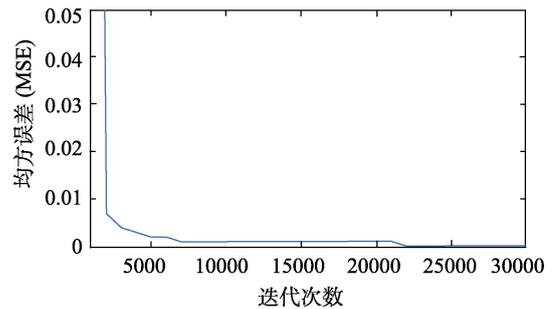


图 3 BP 神经网络迭代次数与均方误差的关系

### 3 成球工艺参数优化

第 2 节得到了训练好的 BP 神经网络，为验证训练好的 BP 神经网络是否学习到工艺参数与成球质量的内在关系，将余下的 10 条数据中工艺参数作为输入，比较 BP 神经网络的输出值与仿真值。图 4 给出了成球直径的 BP 神经网络输出值与仿真值的比较，可以看出，成球直径对应的 BP 神经网络输出值曲线与仿真值曲线基本重合。图 5 给出了成球弧厚的 BP 神经网络输出值与仿真值的比较，可以看出，成球弧

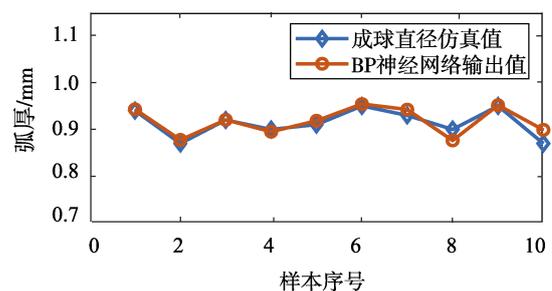


图 4 成球直径仿真值与网络输出值比较

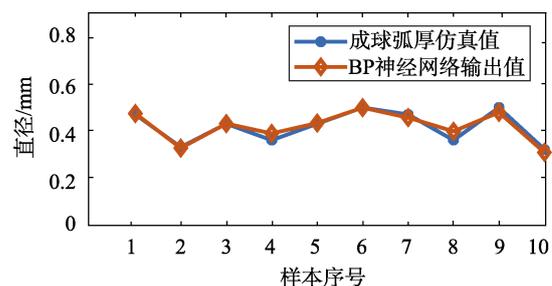


图 5 成球弧厚仿真值与网络输出值比较

厚对应的BP神经网络输出值曲线与仿真值曲线也基本重合。说明它已基本掌握了成球工艺仿真数据的内在关系。

表2列举了前5条成球质量数据的预测误差率。成球直径的平均误差率为1.27%，成球弧厚的平均误差率为2.08%，表明训练后的BP神经网络可以用于工艺优化。通过尝试不同工艺参数，用此模型输出成球质量参数与生产要求质量参数对比，从而得到符合要求的生产工艺参数。因此，可以认为将此工艺参数作为实际生产中的工艺控制参数时，可得到理想的成球质量。

表2 质量数据预测误差率

序号	成球直径			成球弧厚		
	仿真值 /mm	预测值 /mm	误差 率/%	仿真值 /mm	预测值 /mm	误差率 /%
1	0.94	0.9429	0.31	0.47	0.4740	0.84
2	0.87	0.8778	0.89	0.33	0.3259	1.26
3	0.92	0.9204	0.04	0.43	0.4307	0.16
4	0.91	0.8950	1.68	0.36	0.3888	7.41
5	0.95	0.9185	3.43	0.43	0.4332	0.74
均值	—	—	1.27	—	—	2.08

## 4 结论

1) 将BP神经网络用于化工方面，解决了在理论不清的情况下如何优化生产工艺的问题，建立了双基球扁药成球工艺参数与成球质量参数之间的复杂关系模型。测试样本预测结果表明，BP神经网络的输出与仿真值之间误差在3%以内，因此可用于优化工艺参数。

2) 运用此模型可省去生产试制，减少试制带来的人力、物力和财力的损耗，提高生产效率，具有较好的应用前景。

3) 在进行实际的双基球扁药生产时，工人只需根据成球尺寸要求，给出成球弧厚，直径的数值，通过该方法即可快速地找出满足要求的工艺参数组合

(各环节工艺温度、时间)用于指导生产，这样既提高了参数设计的效率又大大地减少了对工人的技术要求。

## 参考文献:

- [1] 杨传果, 何俊明. 搅拌法制造81mm迫击炮弹附加药盒装药用双基球扁药[J]. 火炸药, 1990(4): 1-6.
- [2] 杨建兴, 舒安民, 张阔, 等. 叠氮硝酸铵发射药内溶法成球工艺研究[J]. 火炸药学报, 2013, 36(3): 87-90.
- [3] 徐建华, 王泽山. 改性双基球形的制备工艺研究[J]. 火炸药学报, 2001, 24(2): 9-11.
- [4] 李丁, 付小龙, 李吉祯, 等. 浇铸改性双基推进剂硝化棉球形药的制备工艺[J]. 火炸药学报, 2013, 36(6): 78-81.
- [5] 袁伟忠. 大弧厚双基球扁药的制造[D]. 南京: 南京理工大学, 2003.
- [6] 刘小刚, 王克强, 邵重斌, 等. 硝化棉包覆黑索今的新方法[J]. 含能材料, 2003, 11(3): 153-157.
- [7] 李文祥. 径向变密度球扁药制备工艺和燃烧性能研究[D]. 南京: 南京理工大学, 2009.
- [8] TSAI K M, LUO H J. Comparison of Injection Molding Process Windows for Plastic Lens Established by Artificial Neural Network and Response Surface Methodology[J]. International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2015, 77(9-12): 1599-1611.
- [9] 孙帆, 施学勤. 基于MATLAB的BP神经网络设计[J]. 计算机与数字工程, 2007(8): 124-126.
- [10] 刘荷花. 基于BP神经网络的激光焊接工艺参数优化数据库系统[J]. 激光杂志, 2015, 36(4): 182-184.
- [11] BASHEER I A, HAJMEER M. Artificial Neural Networks: Fundamentals, Computing, Design, and Application[J]. Journal of Microbiological Methods, 2000, 43(1): 3-31.
- [12] HUANG G B, ZHU Q Y, SIEW C K. Extreme Learning Machine: Theory and Applications[J]. Neurocomputing, 2006, 70(1): 489-501.
- [13] GUO Z H, WU J, LU H Y, et al. A Case Study on a Hybrid Wind Speed Forecasting Method Using BP Neural Network[J]. Knowledge-Based Systems, 2011, 24(7): 1048-1056.