

材料设计中的 BP 神经网络技术*

徐建林 王智平

(甘肃工业大学甘肃省有色金属新材料省部共建国家重点实验室,兰州 730050)

文 摘 论述了 BP 神经网络在材料设计中的应用技术、现状和发展趋势。根据材料设计的要求,建立用于材料设计的模型,并对模型建立与参数选择进行了分析,为 BP 网络用于材料设计提供了依据,为材料性能的设计与优化提供了有效途径。

关键词 BP 神经网络,材料设计,计算机应用

BP Neural Network in Materials Design

Xu Jianlin Wang Zhiping

(State Key Lab of Gansu New No-ferrous Metal Materials, Gansu University of Technology, Lanzhou 730050)

Abstract The applications techniques of BP neural network, its present situation and development trend in materials design are presented. According to requirement of materials design, an BP neural network model is set up for materials design, and its model structure and parameters are introduced in detail. The BP neural network techniques can provide a efficient method for design and optimization of material properties.

Key words BP neural network, Material design, Computer

前言

人工神经网络是一门高度综合的交叉学科,它是模拟生物大脑的结构和功能而建立起来的人工智能模式识别方法,由大量神经元广泛互连而成的复杂网络系统,神经元之间的相互作用通过连接权值来体现。虽然单个神经元的结构和功能极其简单和有限,而大量神经元构成的网络系统其行为却是丰富多彩的,它建立起的数学模型更能精确地逼近输入与输出之间的映射,消除了回归法处理非线性问题时的缺点,同时也对尚未了解规律的事物本质进行了复杂的非线性拟合,无需人们预先给定公式的形式,而是以实验数据为基础,经过有限次迭代计算而获得一个反映实验数据内在规律的数学模型,因此它特别适合研究复杂非线性问题,将神经网络引

入到材料设计中有极大的潜力^[1,2]。它还具有联想记忆的能力和很强的容错性,以及自学习、自适应的能力。

在人工神经网络中,学习是通过调整来实现的。系统按一定的策略和方式修正权值的规则称为学习算法,采用不同的网络拓扑结构,不同的转移函数和学习算法,可以得到各种不同类型的人工神经网络。目前,在实际中应用最广泛、性能比较稳定的是基于误差反向传播的多层前馈网络,即 BP 网络。

1 问题分析

材料设计涉及材料的组分、工艺、性能之间的关系,但这些内在的规律往往不甚清楚,难于建立起精确的数学模型。人工神经网络具有很强的自学习能

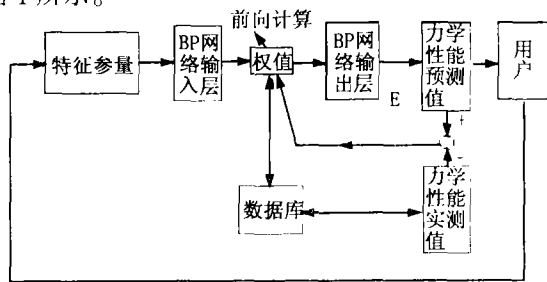
收稿日期:2002-09-05

* 甘肃工业大学科技发展基金项目

徐建林,1970 出生,博士研究生,主要从事材料科学与计算机应用研究工作

力,能够从已有的试验数据中获取有关材料的组分、工艺和性能之间的规律,因此特别适用于材料设计,为材料的研究提供了一条有效的新途径。它不需要预先知道输入(材料的成分、工艺)和输出(性能要求)间存在的某种内在联系,便可以进行训练学习,并达到预测的目的,这是材料设计中其它方法难以比拟的。

若设计目标(如机械性能等)可用 $Y = [Y_1, Y_2, \dots, Y_m]^T (Y \in R^m)$ 表示,其相关因素(如化学成分、显微组织等)用 $X = [X_1, X_2, \dots, X_n]^T (X \in R^n)$ 表示,目的就是要找出一个从 R^n 到 R^m 的映射关系,使得 $Y = F(X)$ 。由于该映射为非线性映射,各相关因素对设计目标的影响大小不同,故可用 BP 网络解决该问题。BP 网络的可靠性、应用性已在广泛使用中得到证实, BP 网络的材料性能预测模型如图 1 所示。



反向传播算法
图 1 系统原理图

Fig. 1 System configuration

相关因素与 BP 网络的输入层对应,它可以是材料的成分、各种工艺条件等;隐含层的神经元是模拟人工神经网络计算过程建立起来的,它可将各种材料的化学成分和工艺参数等数据抽象到较高层次的概念上,使神经网络具有非线性分类的能力;BP 网络通过前向计算可得到输出层的输出数据,该数据则与设计目标相对应;BP 网络的权值以数据文件的方式存储,其数值根据 BP 网络的实际输出与期望输出的误差值利用反向传播学习算法来修正。

在进行神经网络材料设计时,特征量的选取非常重要。特征量应是与设计目标有一定关系的相关参数,但这些特征量有很多,在选择时有所取舍,其原因有五种:

(1)在实际生产中,特征量对设计目标的影响大小不同,应当选择对设计目标影响显著的特征量;

宇航材料工艺 2003 年 第 2 期

(2)特征量的检测在材料成型过程中应易于实现;

(3)即使个别特征参量在实际中没有检测到,并不影响网络对信息的处理功能——类似于人的脑细胞中既使有个别神经元损坏并不影响人类的思维、判断;

(4)一些难于检测的工艺参数可以不考虑在网络的输入信号中,原因是对于生产同一牌号,采用同样的原材料及配比方案和生产或实验条件相似时,这些工艺参数对设计目标的影响则恒定;

(5)系统在不同场合应用时,只要采集现场数据对网络进行训练,则系统就可用于该生产现场。

2 BP 网络参数的确定

2.1 BP 算法简介

目前广泛应用的人工神经网络为多层前馈神经网络,简称 BP 网络,结构见图 2。BP 的学习算法可描述如下:

(1)给全部权值和阈值赋予较小的随机值;
(2)从学习样本中取出一个输入样本,计算出神经元的输出值;
(3)给出期望的输出值,计算所有层的局部误差;

(4)用迭代公式修改各层的权值和阈值;
(5)取下一个样本,重复(2)、(3)、(4),若样本已完,进入(6);

(6)计算总的误差,若总的误差 E 小于给定误差 ϵ 或训练次数大于指定次数,则停止;若 $E > \epsilon$,则返回(2)重新修改权值,直到满足条件为止。

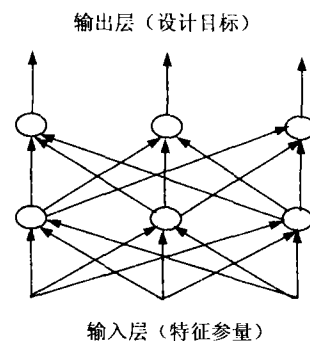


图 2 BP 网络结构图

Fig. 2 Structure of BP network

2.2 模型结构确定

2.2.1 输入与输出层的设计

BP网络的输入、输出层单元数完全根据使用者的需求来设计。根据材料设计的目标要求不同,输出层单元数不同,而输入层单元数则根据输出目标的有关特征参量的个数来确定。

2.2.2 隐层数与单元数的选择

1989年 Robert Hecht-Nielsen 证明了对于在任何闭区间内的一个连续函数都可以用一个隐层的 BP 网络来逼近,因而一个三层的 BP 网络可以完成任意的 n 维到 m 维的映射,故一般模型采用单隐层。隐层单元数的选择是一个非常复杂的问题,隐层单元数的选择往往靠经验确定。常用的经验公式^[3]为:

$$n_1 = \sqrt{n + m + a}$$

式中 n_1 为隐单元数, n 为输入单元数, m 为输出单元数, a 为 1~10 之间的常数。

2.2.3 其他参数的确定

(1)样本数的确定。一般来说,取得数据越多,学习和训练的结果便越能正确反映输入输出关系。但是选择太多的样本就会加大收集、分析数据的难度,同时使网络训练误差加大。样本数选取的经验公式^[3]为:

$$K < \sum_{i=0}^n C_i^2$$

经计算可确定样本数,其中 2/3 为训练样本,1/3 为测试样本。

(2)学习步长的选定。如果学习步长选得足够小,就可使网络的总误差函数达到最小值^[4],但是太小的学习步长将使得网络的学习速度非常慢;若学习步长较大,则权值更新较大,有可能加快收敛速度,但若步长选得过大,则可能造成算法的不稳定,通常学习步长选在 0.1 以下^[5],但必须大于 0。一般初始步长选为 0.1,而在实际运行时调整,既若误差函数 $\nabla E < 0$,则步长乘 2,若误差函数 $\nabla E > 0$,则步长乘 0.5。

(3)动量因子的选定。为了加速收敛速度以及防止震荡,系统采用改进算法,即采用加动量项的反向传播学习算法,其动量因子典型值取 0.9^[6]。此外,初始权值和阈值都被赋以较小的随机数。

3 应用与发展

3.1 应用

— 24 —

基于神经网络的材料设计也取得了一定的成功。如沈阳工业大学的刘贵立等人在实验数据的基础上,用人工神经网络建立高 Co-Ni 二次硬化钢的力学性能预测模型,根据网络的预计结果讨论了微量元素 Nb、Ti 对钢的力学性能的影响,结果证明网络的预测同实验结果基本一致^[6]。在此基础上,他们又将材料的力学性能作为网络的输入量,材料的化学成分及热处理温度作为网络的输出,来建立反映实验数据内在规律的数学模型^[7]。M. Li 等人也利用人工神经网络建立了 Ti-5Al-2Sn-2Zr-4Cr-4Mo 合金成型工艺参数与力学性能模型,以变形温度、应变率和应变为输入参数,许用应力为输出参数,采用单隐层模型。输出层激活函数为线性函数,隐层为 Sigmoid 函数。模型经 32 500 次训练后稳定,其效果是相当好的,这表明用神经网络来处理非线性关系是十分有效的^[8]。上海交通大学的陈宏星等人将神经网络引入复合材料板刚度的识别,他们利用正交各向异性板的动态特性(固有频率)来识别刚度,同时给出了事例用来验证此方法的有效性^[9]。人工神经网络也用于 SiC 增韧 Si₃N₄ 陶瓷基复合材料的研制,以 Y₂O₃、La₂O₃ 和 Al₂O₃ 的含量为输入的参数,收缩率、相对密度和强度为输出的参数,网络经 3 727 次训练后收敛,预测准确率为 93%^[10]。K. K. Taylor 等人预测了 34 种聚合物的介电常数和 20 种聚合物的电导率,采用 31-5-1 模型来实现,也取得了较好的结果^[11]。可见,人工神经网络在材料设计方面具有广阔的应用前景,为材料设计提供了新的手段。

3.2 发展趋势

(1)材料设计的神经网络专家系统。神经网络专家系统是在神经网络的基础上来实现知识获取的自动化以及自适应推理等能力。这样可使隐藏在神经网络中的内在规律演绎化,便于设计的推理、分析研究。

(2)材料设计的模糊神经网络系统。模糊逻辑可处理不确定性、非线性和其它不适应问题,比较适合表达那些模糊或定性的知识,其推理方式比较类似于人的思维模式,但它缺乏自学习和自适应能力。而神经网络不适于表达基于规则的知识,也不能对一些难以量化的输入参数进行计算,因此将两者结合起来构建模糊神经网络系统。在材料设计中会

宇航材料工艺 2003 年 第 2 期

涉及到很多工艺参数,如结构的合理性、变形要求的严格与否等,这些模糊参数经模糊化作为神经网络的输入矢量;此外,神经网络算法中的步长和其它参数也可用模糊的方法来定义。

(3)基于遗传算法的材料设计神经网络系统。神经网络的结构主要靠经验和试凑的方法来确定,而连接权值通过一定的学习算法来得到,尤其BP算法容易陷入局部极值点。由于遗传算法可用于优化计算,因而也可用于神经网络的设计,它可以避免局部极值问题,还可以提高网络的收敛速度,因此该方法也具有很大的潜力。

参考文献

- 1 Air Force Research Laboratory. Neural network accelerate materials design. *Advanced Materials & Processes*, 2000; 157(1): 45
- 2 Anonymous. High-speed materials design. *Science*, 1997; 277(7): 474 ~ 475
- 3 张立明. 人工神经网络模型及其应用. 上海: 复旦大学出版社, 1993: 32 ~ 46
- 4 Cichocki A, Unbehauen R. *Neural networks for optimization and signal processing*. England: John Wiley & Sons Ltd., 1993: 163 ~ 191
- 5 何振亚. 神经智能. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1997: 108 ~ 110
- 6 刘贵立, 张国英, 曾梅光. 用人工神经网络模型研究微量元素对钢力学性能的影响. *钢铁研究*. 2000; (1): 48 ~ 50
- 7 张国英, 刘贵立, 曾梅光. 人工神经网络在材料设计中的应用. *材料科学与工艺*. 1999; 7(3): 93 ~ 96
- 8 Li M, Liu X, Wu S et al. Approach to constitutive relationships of a Ti-5Al-2Sn-2Zr-4Cr-4Mo alloy by artificial neural networks. *Materials Science and Technology*, 1998; 14(2): 136 ~ 138
- 9 陈宏星, 陈小琳, 石银明. 运用神经网络识别复合材料板刚度. *复合材料学报*, 2000; 17(1): 108 ~ 110
- 10 吕允文, 李恒德. 新材料开发与材料设计. *材料导报*, 1993; (3): 1 ~ 4
- 11 Taylor K K, Darsey J A. Prediction of the electronic properties of polymers using artificial neural networks. *Polymer Preprints*, 2000; 41(1): 331 ~ 332

(编辑 任涛)

(上接第 21 页)

- 4 Dadras P et al. Solid-state diffusion bonding of carbon-carbon composites with borides and carbides. *J. Am. Ceram. Soc.*, 1993; 76(5): 1 274 ~ 1 280
- 5 Dadras P et al. Joining of carbon-carbon composites by graphite formation. *J. Am. Ceram. Soc.*, 1994; 77(6): 1 419 ~ 1 424
- 6 Dadras P et al. Joining of carbon-carbon composites using boron and titanium disilicide interlayers. *J. Am. Ceram. Soc.*, 1997; 80(1): 125 ~ 132
- 7 Milena Salvo et al. Joining of carbon-carbon composites for thermonuclear fusion applications. *J. Am. Ceram. Soc.*, 1997; 80(1): 206 ~ 212
- 8 Isola C et al. Joining of surface modified carbon-carbon composites using a barium-aluminum-boro-silicate glass. *J. Euro. Ceram. Soc.*, 1998; 18: 1 017 ~ 1 024
- 9 Subramanian S et al. Fabrication, testing and analysis of carbon-carbon/aluminum bonded with high thermal conductivity. *A-IAA-98-1996*: 2 423 ~ 2 433
- 10 Gotoh Y et al. Development and material testing of OF-Cu/DS-Cu/OF-Cu triplex tube and trial fabrication of a vertical target mock-up for ITER divertor. *J. Nucl. Mater.*, 1998; (258 ~ 263): 271 ~ 274

(编辑 李洪泉)