

神经网络在梯度功能材料制备中的应用*

徐雪艳¹⁾ 穆志纯¹⁾ 汪朝霞²⁾ 郭丽斌²⁾

1) 北京科技大学自动化信息工程学院, 北京 100083 2) 北京科技大学材料科学与工程系

摘要 针对梯度功能材料(FGM)制备过程的复杂性,提出了利用神经网络信息处理机制进行制备材料的特性预估.实例分析表明,这一方法是有效的.同时,针对BP学习算法速度较慢,易陷入局部极小的缺点,改用函数型连接网络来提高学习速度.试验表明学习速度提高显著.

关键词 神经网络/梯度功能材料, BP算法, 函数型连接网络

中图分类号 TP18, TF125.3

Application of Neural Network to the Process of Functionally Gradient Materials Fabrication

Xu Xueyan¹⁾ Mu Zhichun¹⁾ Wang Zhaoxia²⁾ Guo Libin²⁾

1) Automation and Information Engineering College, USTB, Beijing 100083, PRC

2) Department of Material Science Engineering

ABSTRACT Taking account of complexities of the Functionally Gradient Materials (FGM) fabrication process, a neural network based expert system which estimates the properties of the material is presented. The experimental results show that this method is effective. To improve the learning speed of the system and reduce the possibility of local minimum, a functional-linked net is introduced. The application indicates that both learning speed and accuracy of the estimation are satisfactory.

KEY WORDS neural networks/functionally gradient materials, BP algorithm, functional-linked net

FGM基本思想是:根据具体要求,选择使用两种具有不同性质的材料,使其合成材料的要素(组成、结构等)沿厚度方向由一侧向另一侧呈连续变化,从而使材料性质和功能呈梯度变化.其制备过程综合了计算机辅助材料设计和先进的材料复合技术^[1].

FGM的设计是一个非常复杂的过程,即使很有经验的材料专家在多数情况下也不可避免地难以解决设计精度低、研制周期长、效率低等问题.因而人们将目光转向了专家系统方法^[2].由于传统专家系统知识表达及推理机制的局限性,使其缺乏自学习能力,不能适应FGM这一全新的材料设计过程.神经网络的迅速发展为我们解决这个问题开辟了一条新途径.

1 基于神经网络的 FGM 特性预估 (BP 算法)

1.1 用神经网络预估 FGM 特性的可解性

神经网络是一种模仿人类神经系统的数学模型, 由多个非常简单的处理单元(神经元)大规模互连而成, 当这众多神经元连接成一个网络并动态运行时, 则构成一个非线性动力学系统, 这样的系统可以用来对梯度功能材料的特性进行估计. 根据本问题的性质及特点可以把问题描述为:

设 $X_i \in R^n$ ($i=1, \dots, n$) 对应于影响 FGM 特性的各个因素; $Y_j \in R^m$ ($j=1, \dots, m$) 对应于 FGM 的各种特性. 那么本预估问题就是求解 $F: R^n \rightarrow R^m$; $Y=F(x)$ 的映射问题. 相应理论已证明^[4], 对于上述问题可由基于误差反向传播算法的前馈网络以任意精度的均方误差来接近.

因此, 对于 FGM 特性预估的问题, 如果输入的选择能够包括所有影响 FGM 特性的因素, 那么网络总可以通过对训练样本的自适应学习来获得一定的预估能力.

1.2 FGM 特性预估神经网络的结构及算法

根据自蔓燃法合成 FGM 的工艺特点和目前具备的实验检测条件, 对实验数据进行了分析选择, 剔除不合理数据和影响 FGM 性能不大的因素, 从而确定了将原材料配比(如 Ti、B、Cu 的含量比)、粒度、素坯密度、实验温度和反应压力等作为输入特征矢量, 将主要的 FGM 特性, 如成品致密度、成品粒度作为网络的输出. 采用当前应用最广泛的前馈网络, 得到如图 1 所示的网络结构.

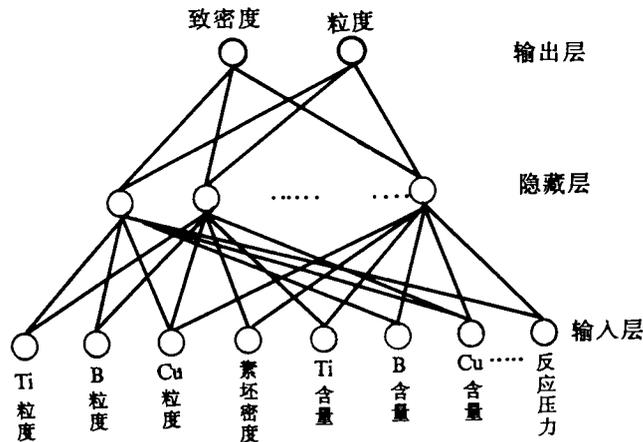


图 1 FGM 特性预估神经网络结构
Fig.1 Structure of neural network for the FGM property estimation

网络的学习算法选用基于前馈网络的标准学习算法—BP 算法 (Back Propagation algorithm). 学习偏差 E 定义为:

$$E = \frac{1}{2n} \sum_{k=1}^n \sum_{i=1}^m (T_{ik} - O_{ik})^2$$

其中, m 为输出节点个数; n 为学习样本数; T_{ik} 为网络各输出单元的期望输出, 即实验

所测得的材料特性值; O_{ik} 为网络相应的实际输出, 它是与此节点相连的所有节点的输出加权和的激励, 即

$$O_{ik} = f(\sum_j W_{ij} O_{jk})$$

其中, W_{ij} 为相应的权值. 而 $f(x)$ 为每一个节点都存在的一个激励函数, 取为非线性的 sigmoid 函数, 即:

$$f(x) = 1/(1+e^{-x})$$

通过 $\Delta W_{ij}^{(n+1)} = \eta(\partial E/\partial W_{ij}) + \alpha\Delta W_{ij}^{(n)}$ (η 为学习率, α 为惯性量), 来调节权值, 使偏差 E 不断减小, 从而使网络具有一定的输入、输出联想推理能力. 计算机上的模拟试验证明, 采用 BP 网络对材料特性的预估能力较强, 能够达到较高的预估精度.

1.3 基于 BP 网络的 FGM 特性预估的实施

在运用 BP 算法实现 FGM 特性预估的过程中还需要解决以下几个问题:

(1) 由于各输入变量的量纲不一致, 样本数值相对集中, 造成学习时间长, 收敛精度低, 故需将输入数据作归一化预处理.

(2) 网络结构的确定. 实际问题的具体要求决定了网络的输入输出节点, 但隐藏层和隐节点数的选择没有统一的标准, 需要通过反复试验来确定. 表 1 反映了在对成品致密度进行预估时不同的结构对学习效果的影响, 可见选 1 个隐藏层, 7 个隐节点时, 学习效果最好, 预估精度最高.

(3) 学习率 η 和惯性量 α 的选择. η 增大, 可加快学习速度, 但可能引起振荡效应, 使算法不易收敛; α 的引入可以抑制振荡, 但不可避免地会延长学习时间. 至于 η 和 α 的具体配合值尚没有统一的理论, 需要反复试验来选择. 对本实际问题, $\eta=0.6, \alpha=0.9$ 时为最佳.

(4) 再学习机制的建立. 当经过训练的网络对一新样本的识别产生较大误差时, 网络需将该样本作为学习样本重新学习, 以提高系统对不断变化着的客观世界的自适应能力.

(5) 用检验集中的样本对已训练好的神经网络进行测试, 通过分析预估误差, 来对预估的效果进行评价, 见表 2. 由结果可以看到, 此网络经过初步学习, 已掌握了 FGM 影响 FGM 特性的一定规律, 具有较强的预估推理能力.

表 1 不同隐层和隐节点对网络学习及预估效果的影响 ($\eta=0.6, \alpha=0.9$)

Table 1 Effect of different numbers of hidden layers and units on the learning and estimation of the net

试验次数	隐层数	隐节点数	学习误差(归一化后)			耗时(100步) /min	预估误差
			1 000 步	2 000 步	3 000 步		
1	1	1	0.016 009	-	-	11	振荡不可分
2	1	3	0.000 182	0.000 037	0.000 011	16	1.61
3	1	7	0.000 362	0.000 149	0.000 062	28	0.70
4	1	30	0.000 158	0.000 073	0.000 024	110	1.90
5	2	2, 4	0.000 245	0.000 182	0.000 161	22	1.66
6	2	6, 6	0.000 352	0.000 139	0.000 054	49	1.53

2 函数型连接 (FL) 模型

BP 模型具有良好的非线性逼近能力,是很有效的学习算法,隐层及隐节点的引入增加了优化问题的可调参数,从而提高了网络解决问题的能力,但这也造成其固有的缺陷:学习速度慢,中间隐层数和隐节点数的选择无从掌握、而且易于陷入能量局部极小点。

FL 模型^[3]借鉴了传统模式分析的思想,通过将原输入变量进行非线性扩展作为单层前馈网络的输入,从而将低维模式变换到高维模式,使得原来在低维空间中非线性不可解问题有可能在高维空间中得到解决。通常,在一般的网络中,每一层对于相应的空间的划分是线性的,对每个节点 i 计算的是其输入的加权和 $\sum W_{ij} X_j$,因此只有多层网络才能实现非线性划分。而在函数型连接的一层网络中,其划分是非线性的,这是因为 FL 网络的每一局部描述中不仅考虑了输入变量的加权和,还考虑了这些变量乘积等高阶项的函数。函数型连接采用的途径是:从数学上去寻找简单而通用的方法,且使基于数学概念的模型适合于并行计算,当一个节点 k 被激活时,可同时激活多个不同的附加函数 $f_1(o_k), f_2(o_k), \dots, f_n(o_k)$ 。

不同的函数连接产生不同的效果,常用的两种模型为:函数扩展型和外积型。而在函数扩展模型中, $f_i(x)$ 也有多种选择,可以是 x, x^2, x^3 或某种表达空间中的正交基函数。针对 FGM 特性预估的具体问题,经过多次试验发现,由于其学习任务本身的困难相当大,以致于单一的使用外积型或函数展开型在扩展维数不够大的情况下均达不到理想的学习效果。因此混合使用外积型和函数展开型来增强表达,具体采用 20 维的三角函数扩展:

$$\sin \pi x_1, \cos \pi x_1, \sin \pi x_2, \cos \pi x_2, \dots, \sin \pi x_5, \cos \pi x_5, \\ \sin 2\pi x_1, \cos 2\pi x_1, \dots, \sin 2\pi x_5, \cos 2\pi x_5$$

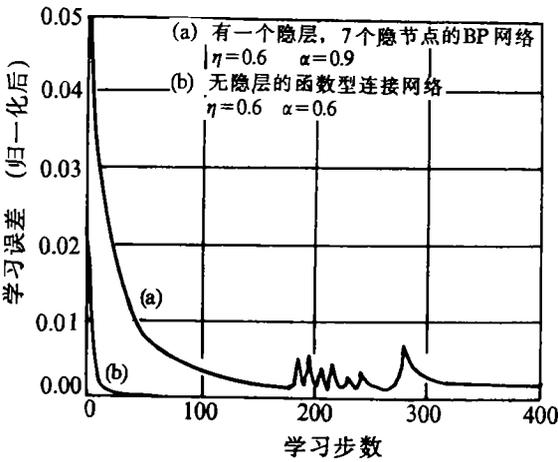


图 2 BP 网络与 FL 网络学习速度和精度比较

Fig.2 Comparison of learning speed and learning accuracy of BP Net and FL Net

表 2 网络预估精度比较

Fig.2 Comparison of the estimation accuracy between

样 本	网络预测值		目标值
	BP 网络	函数型网络	
	1	79.0	
2	70.83	72.06	71.33
3	63.95	65.17	64.4
4	80.93	82.33	79.1
5	63.74	64.02	63.7
6	63.74	63.97	63.7

和 20 维的外积型扩展:

$$x_1 \cdot x_2, x_1 \cdot x_3, \dots, x_1 \cdot x_5, x_2 \cdot x_3, \dots, x_2 \cdot x_5, x_3 \cdot x_4, x_3 \cdot x_5, x_4 \cdot x_5,$$

$$x_1 \cdot x_2 \cdot x_3, x_1 \cdot x_2 \cdot x_4, x_1 \cdot x_2 \cdot x_5, \dots, x_3 \cdot x_4 \cdot x_5$$

取得了满意的效果。FL 网络同样采用误差反向传播的学习算法,但由于网络的简化(去除隐层),克服了学习过程收敛速度慢的问题,但易陷入局部极小点的问题。同时由于合适的非线性扩展使单层网络仍保持良好的非线性逼近能力。其收敛速度和收敛精度均高于 BP 网络,如图 2 所示。表 2 反映了 BP 网络的 FL 网络的预估精度。根据表 2 中的实验结果,可以得到 BP 网络的预估误差为 0.58,而 FL 网络的预估误差为 1.20。

4 结论

- (1) BP 网络和 FL 网络对 FGM 制备的特性具有较强的预估能力。
- (2) 预处理是必要且有效的,经过归一化预处理后的学习效果有了很大的改善。
- (3) 网络结构及参数的选择对学习效果有很大的影响。
- (4) 学习样本集的选择要适当,学习样本过多或过少均不能获得好的预估效果。
- (5) 与 BP 网络相比,FL 网络具有更快的收敛速度。经计算,达到相同学习精度,FL 网络的学习时间仅为 BP 网络的 1/3。

参 考 文 献

- 1 傅正义等. 梯度功能材料的研究. 复合材料学报, 1992, 9(1): 23 ~ 29
- 2 Hirano Tobru, Terabi Junichi, Yamada Tomohiko. On the Design of Functionally Gradient Materials. In: Proceedings of the First International Symposium on FGM. Tokyo: Functionally Gradient Materials Forum, 1990: 5 ~ 10
- 3 包约翰. 自适应模式识别与神经网络. 北京: 科学出版社, 1992. 192 ~ 215
- 4 焦李成. 神经网络系统理论. 西安: 西安电子科技大学出版社, 1990