

知识介绍

人工神经网络在材料科学与加工中的应用

葛建华 王迎军 郑裕东
(华南理工大学材料学院, 广东 广州 510640)

摘要:综述了人工神经网络在材料科学基础理论研究、材料检测以及其在材料工业中的应用研究。认为随着人工神经网络理论本身及其相关理论、相关技术的不断发展,其在材料科学与加工中的应用定将更加深入和广泛,特别是在材料加工中的应用具有良好的发展前景。

关键词:人工神经网络;材料科学;检测;加工

中图分类号:TQ018

文献标识码:A

文章编号:0253-4320(2003)01-0059-04

Application of artificial neural network in materials science and processing fields

GE Jian-Hua, WANG Ying-Jun, ZHENG Yu-Dong

(Institute of Material Science and Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)

Abstract: The application of artificial neural network in materials science, including basic theory, materials assessing and detecting, and materials industry, is reviewed. It's pointed out that the artificial neural network in materials science and processing areas would be applied more deeply and widely than before, especially in materials processing fields with the increasing development of its theory and the relevant techniques.

Key words: artificial neural network; materials science; processing

神经网络在信息、计算机科学等领域内,指的是向生命学习而构造的人工神经网络,其研究实质是人工神经网络向生物神经网络学习的问题。人工神经网络在各行各业有许多用途,众多研究人员对人工神经网络在材料的基础研究、检测和加工过程中的应用进行探索和研究。

1 在材料科学基础理论研究中的应用

1.1 材料设计和性能预测

在材料科学与工程领域中,影响材料的性能和使用的因素多而复杂。特别是新材料,其组分、工艺、性能和使用之间的关系、内在规律复杂尚不清楚,材料的设计都涉及到这些关系。人工神经网络能从已有的实验数据中自动归纳出规律,并可以利

用经训练后的人工神经网络直接进行推理,适用于对材料结构的设计和性能预测。蔡煜东等^[1]采用人工神经网络 BP 模型对过渡金属元素选取有代表性的 54 个样本,构成模式空间,并选取两类样本:具有氧心结构的三核簇合物及不具有氧心结构的三核簇合物,选取其中 46 个样本作为神经网络的学习教材。经过学习,网络能完全正确地识别这些样本,建立了化合物、金属元素参数与氧心结构(非氧心结构)之间的复杂对应关系。将 8 个未知样本让网络对其进行识别,实际输出和期望输出完全一样,并且具有容错能力强、识别速度快捷的特点。

刘信安等^[2]利用神经网络 BP 算法、变步长学习函数和多线程技术构造了聚丙烯酸酯-环氧树脂互穿聚合物胶粘层保护材料和聚丙烯酸-聚有机硅

收稿日期:2002-10-07

基金项目:广东省“十五”重点科技攻关资助项目(A302020202)

作者简介:葛建华(1974-),女,博士生;王迎军(1954-),女,博士,教授,博导,主要从事生物医学材料的研究,通讯联系人,020-87114645, imwangyj@scut.edu.cn。

氧烷互穿聚合物表面涂层材料的摩岩石刻复合保护材料的合成最佳配比专家系统。结果表明,由此专家系统指导合成的 2 套复合保护材料(一套按最佳预报性能指标合成,另一套按最差预报性能指标合成)在透水气性、吸水率和拉伸强度这 3 个关键技术指标上,预报性能值基本上达到定量化程度。

1.2 氧化物系相图若干特性的预报

氧化物系相图是陶瓷、水泥、炉渣和矿物岩石学研究的基础。其中包含众多的中间化合物,若能预报氧化物相图中的若干特征,则对相图的测量和有关材料的设计大有益处。李明等^[3]对 45 种 MO 和 M_2O_3 间 1:1 配比形成化合物及 21 种不形成 1:1 中间化合物的氧化物系作为人工神经网络的训练集进行训练。结果预报了一批未列入训练集的 1:1 复氧化物,并由一些新发现的化合物证实了预报结果正确,还预报了一批未列入训练集的不形成 1:1 中间化合物的氧化物系,其中也由一些新测量的相图证实了预报结果。

1.3 三元分子混合物密度与黏度的预测

在实际研究和应用中,可以利用有限的的数据,通过构造一定的数学模型来关联这些数据,进而对未知体系作出合理的预测。曹益林等^[4]以二元体系实验数据为基础利用 BP 算法构造混合物组成、温度等与物性关系的模型,用于对 4 个三元混合物的密度和 5 个三元混合物体系的黏度预测,结果证明无论极性体系、非极性体系或弱极性体系,都取得满意结果。

1.4 元素电负性的研究

在电负性标度上,Pauling 和 Mulliken 标度是最常用且数据较为齐全的电负性标度,但标度值不齐全,人工神经网络能从大量的数据中总结出复杂非线性函数关系式的有效方法。刘磊等^[5]设计了 3 层人工神经网络,结果预报了 86 种元素的电负性值,成功地拟合已知的数据,并在此基础上得到了一批空缺值。

1.5 蛋白质结构的测定^[6]

对蛋白质精细结构的分析中,每种氨基酸用 21 位编码表示,而 13 种氨基酸的有序排列可以确定蛋白质次级结构的类型(α 型、 β 型、螺旋型),故通常以 $21 \times 13 = 273$ 位二值矢量作为输入矢量,其输出为分别表示 α 型、 β 型、螺旋型这 3 种次级结构的三维矢量。在采用 BP 网时,N. Qian、L. H. Holley、D. G. Kneller 得到的测试精度分别为 62.7%、63.2% 和 79%。Kneller 在改进了 Qian 的工作后获得了较高

精度,其改进为:加入矩特征;将次级结构改为 α 、 β 、 α/β 、其他等 4 种。

1.6 生物降解速率常数的预测

在有机物化学结构与生物降解性能关系的研究中,在缺少所需的理化参数时,直接利用化学基团作为结构描述符具有特别的优越性。然而化学基团之间存在的复杂相互作用却在一定程度上限制了基因回归模型的应用。人工神经网络因其具有强大的处理非线性问题的能力,提供了一条解决此类问题的有效途径。张爱茜等^[7]采用简单的基团代码作为输入参数,运用人工神经网络对一批含硫芳香族化合物的生物降解速率常数进行拟合与预测,得到比线性回归方法更好的结果。

2 人工神经网络用于材料的检测

2.1 超声无损检测缺陷定征方法

定量化检测是无损检测的发展方向,近年来神经网络理论的发展及其在模式识别领域中的成功应用,为超声无损检测的定量化开辟了新的途径。刘伟军等^[8]以焊缝中裂纹、夹杂及气孔三类缺陷的分类为例,给出了一种以径向基函数神经网络(RBFN)为基础的缺陷特征分类方法。RBFN 网络可利用简单核函数形成的重叠区域产生任意形状的复杂决策域,学习能力强、速度快,是一种性能优越的非线性预测器和分类器。

2.2 进行脆性材料临界断裂的声发射预报

岩石、混凝土类脆性材料在整个断裂过程中都伴有声发射产生,并且在断裂的临界状态下,不同的声发射特征都表现出相应的异常“模式”。纪洪广等^[9]以混凝土为研究对象建立了用于实现材料临界断裂声发射识别的多层前馈反向传播神经网络模型,为神经网络在声发射领域里的应用和材料断裂的声发射诊断技术探索了一条新的途径。

2.3 光纤智能复合材料自诊断系统

现有的各种无损检测方法在研究复合材料结构时不能实现实时监测,而在光纤智能材料与结构中,光纤阵列的选择及阵列输出信号的分析处理是非常重要的。杨建良等^[10]根据模体体积失配效应与微弯原理,提出城墙型式光纤应变传感器阵列,并结合人工神经网络处理阵列输出的传感信号,研制出适用于复合材料结构状态监测与损伤估计用的光纤智能复合材料自诊断系统。

2.4 结构缺损的识别

在工程中正确、快速地识别结构缺损,对保证结

构的安全运行,预防事故的发生都有着重要的意义。张悦华等^[11]用小波分析与人工神经网络相结合的方法,对结构缺损进行了识别。敲击缺损试件后产生的振动信号由传感器获取,经数据采集系统采集、适当处理后进行小波变换,形成人工神经网络的训练样本,并对所建网络进行训练,利用在训练样本中加入随机噪音的方法对网络的识别精度进行了讨论,证明以小波分析为基础的人工神经网络方法是结构缺损识别的一种很有前途的方法。

2.5 材料疲劳的预测

Y. Al-Assaf 等^[12]利用人工神经网络研究了在张力和压力下单向取向的玻璃纤维复合物薄片的疲劳行为。利用前馈网络,建立了输入数据和至疲劳时的循环数之间的模型。虽然仅使用了很少的实验数据进行学习,但结果可与当前使用的其他材料疲劳寿命的预测方法相当。

Pidaparti 等^[13]用人工神经网络的方法研究在不同加载频率下材料的疲劳裂纹发展与加载周期之间的关系。用所得到的实验数据对人工神经网络进行培训,经过培训后的神经网络可以预测具有裂纹的7075 铝合金样品板的加载周期和裂纹发展之间的关系。神经网络可以概括不同加载频率下裂纹发展和加载周期之间的关系,而且此模型可以预言任意负载下材料的裂纹发展行为。

3 人工神经网络在材料工业中的应用

3.1 油品质量监控

石油炼制过程中由于处理的组分数量极多,各种影响因素互相关联,存在着极强的非线性关系,油品质量模型在生产中起着举足轻重的作用。赵晓光等^[14]从某炼油厂车间1年的生产记录数据中选取93组有代表性的数据作为训练样本,选取进料温度等8个参数作为输入量,以蒸汽压作为输出量,建立了8-4-1网络结构进行训练,用37组没有参加训练的实际操作数据对该网络所建立的模型进行检验,结果表明其能满意的反映稳定塔的操作参数与产品质量之间的关系。

3.2 精馏塔产品质量预测

精馏塔建模是精馏过程计算的基础,但精馏塔实时优化计算存在计算量大及收敛不稳定两大缺点,难于满足指导现场操作对计算结果可靠性的要求。刘立波等^[15]以煤油厂的碳三/碳四分馏塔为研究对象,利用人工神经网络对精馏塔产品质量模型进行建模研究,利用三层节点的人工神经网络和BP

算法,建立精馏塔的产品质量预测模型。从操作数据中筛选80组数据作为训练样本参加训练,训练2万次后,预测模型与训练样本的平均相对误差 $< 2\%$,对没参加训练的30组操作数据进行预测并和现场数据相比较,各个组分的最大相对误差 $< 12\%$,平均相对误差 $< 5\%$ 。

3.3 热固性酚醛树脂的研究

酚醛树脂具有优良的性能,然而由于酚醛树脂反应体系的复杂性,对它的合成反应、固化反应、结构与性能的关系迄今尚缺乏透彻的了解。石鲜明等^[16]建立高分子合成的反应空间-产物空间的定量关系,并以热固性酚醛树脂为例,利用不同类型的催化剂在不同反应条件下合成的树脂作为人工神经网络的训练样本,通过改进的反传算法进行学习,并对所构造的人工神经网络模型的预测结果进行了实验验证,并在此基础上进一步探讨了原料比例对树脂性能的影响。

3.4 烯裂解过程的预测

在乙烯裂解过程模拟与预测模型中,由于处理组分多,各种影响因素相互关联,存在极强的非线性关系。目前对这一过程的机理不乏研究,但生产中复杂的实际问题用传统的数学模型方法很难解决。李振民等^[17]针对过程模拟与预测的复杂性及其神经网络模型的结构特性,提出将遗传算法与神经网络相结合,利用遗传算法对神经网络进行了训练,用于大型乙烯裂解过程模拟,克服了BP神经网络模型容易陷入局部极小的缺点。

3.5 设定注塑参数^[18]

注塑产品的质量主要与聚合物类型、模具设计和注塑参数设定有关,具体到某一注塑过程前两个方面都是固定的,只有注塑参数可以自行调整。注塑参数间互相关联,并与产品几何形状、原材料和注塑机类型等密切相关。参数设定分两个阶段:初始参数的设定、消除缺陷的参数设定,这是一个复杂的“反复试验”过程,将人工智能应用于专家知识和经验,从而使参数设定智能化、简单化,提高生产率,有效地利用资源。其成功的应用具体涉及到模具设计、费用估计、材料选择、质量监控和故障解决等方面。例如,Woll 和 Cooper 利用人工神经网络中的BP网络,以模腔压力样本输入,网络经训练后可以实现实时的注塑件质量监控。

3.6 板材冲压成型的控制^[19]

为了实现实时控制冲压成型的加工精度,首先必须建立简单的数学模型,采取大量的假设条件,使

各种影响因素简化。这种数学模型适用范围窄,所能顾及的影响因素不完全。在实际弯曲的过程中,像回弹量等反映加工精度的量与板胚尺寸、材料性能、模具形状、润滑条件及环境温度等因素之间的关系是非线性的。为了描述这种复杂的非线性关系,需采用神经网络系统。

3.7 建立变形高温合金的本构关系

为了提高航空发动机的性能,国内外广泛采用铁基、镍基和钴基变形高温合金制造各类环形件,它们都是难变形而昂贵的材料。为了缩短环轧工艺的研究和开发周期,以降低生产成本,国内外广泛应用有限元方法对环轧过程进行数值模拟。材料的流动应力与宏观热力参数之间的关系,即本构关系是联系塑性加工过程中材料的动态响应与热力参数的媒介。丰建朋等^[20]应用人工神经网络建立变形高温合金本构关系,结果表明能客观地反映材料在塑性加工过程中的动态行为。

3.8 水泥生产的生料配料

生料配料是水泥生产过程中的关键环节,传统的误差尝试法进行生料配料计算,这对技巧和经验要求高,计算繁琐,对于由于均化和测量、干扰等因素造成的矿物含量变动更是无能为力。李瑞莲等^[21]通过实验表明利用神经网络建模,能跟踪模型的变化,这就说明了当原料的成分有变化时,所建立的模型仍能反映出对象的变化。

3.9 在金属制造业中的应用

R. G. Song 等^[22]利用人工神经网络来寻找制造铝合金的合适加工技术,结果证明人工神经网络适合于建立热处理技术对 7175 铝合金机械性能影响的模型,同时避免了建立复杂的数学模型。S. Calcaterra 等^[23]将人工神经网络用于铸铁的机械性能的预测,用不同的配方和起始温度以及冷却时间制造铸铁并进行张力测试。将加工参数和机械性能数据对人工神经网络进行“培训”,结果显示当强度的变化范围不超过 100 MPa 时,人工神经网络对材料的最大抗张强度有很好的预测。Malinov 等^[24]利用人工神经网络来预测和分析钛合金的热处理参数和机械性能之间的关系,输入参数是合金的成分、热处理参数和工作温度,输出诸如抗张强度等 9 个重要的机械性能数据,所使用的模型建立在多层前馈神经网络的基础上,并使用国外大量文献中的实验数据对神经网络进行培训,结果显示神经网络模型可以很好的预言不同热处理条件下钛合金的机械性能,同时亦可以用于寻找热处理条件的最优值。

3.10 在核工业中的应用

在核工业中,高温下混凝土的机械性能是非线性的,控制其反应的性质受温度影响,极为复杂,而且其组成物质也对反应有影响。数学模型中很难包含所有影响因素,Mukherjee 等^[25]则用人工神经网络来解决这个问题,采用 BP 算法和前馈的神经网络获得了材料的应力-应变曲线,可以预言高温下混凝土单晶行为。

4 展望

随着神经网络理论本身及其相关理论、相关技术的不断发展,其在材料科学与加工中的应用定将更加深入和广泛。人工神经网络不管是在材料科学基础理论的研究中,还是在材料本身的检测中,都扮演了一个重要的角色,而其在材料加工中的应用更是引人注目,具有良好的发展前景。

参考文献

- [1] 蔡煜东,等.[J].计算机与应用化学,1994,11(1):32-35.
- [2] 刘信安,等.[J].计算机与应用化学,1999,16(3):175-180.
- [3] 李明,等.[J].硅酸盐学报,1993,21(6):534-539.
- [4] 曹益林.[J].计算机与应用化学,1997,14(2):133-138.
- [5] 刘磊,蔡文生,江涌,等.[J].计算机与应用化学,1998,15(1):29-32.
- [6] 胡守仁.神经网络应用技术[M].长沙:国防科技大学出版社,1993.415.
- [7] 张爱茜,等.[J].环境科学,1998,19(1):37-40.
- [8] 刘伟军,等.[J].大连理工大学学报,1998,38(5):548-552.
- [9] 纪洪广,等.[J].声学学报,1996,21(6):935-940.
- [10] 杨建良,等.[J].仪表技术与传感器,1999,19(2):13-25.
- [11] 张悦华,等.[J].吉林工业大学自然科学学报,1999,29(2):65-70.
- [12] Al-Assaf Y, El Kadi H. [J]. Composite Structures, 2001, 53(1):65-71.
- [13] Pidaparti R M V, Palakal M. [J]. International Journal of Fatigue, 1995, 17(3):231.
- [14] 赵晓光,等.[J].石油炼制,1993,24(9):9-14.
- [15] 刘立波,等.[J].计算机与应用化学,1997,14(4):293-295.
- [16] 石鲜明,等.[J].计算机与应用化学,1998,15(5):315-319.
- [17] 李振民,等.[J].化学反应工程与工艺,1998,14(3):329-332.
- [18] 金新名,等.[J].塑料科技,1999,23(6):9-12.
- [19] 赵军,等.[J].塑料工程学报,1999,6(4):10-18.
- [20] 丰建朋,等.[J].中国机械工程,1999,10(1):49-51.
- [21] 李瑞莲,等.[J].新技术新工艺,1999,135(4):7-10.
- [22] Song R G, Zhang Q Z. [J]. Journal of Materials Processing Technology, 2001, 117(1):84-88.
- [23] Calcaterra S, Campana G, Tomesani L. [J]. Journal of Materials Processing Technology, 2000, 104(1/2):74-80.
- [24] Malinov S, Sha W, McKeown J J. [J]. Computational Materials Science, 2001, 21(3):375-394.
- [25] Mukherjee, Abhijit, Nag Biswas, et al. [J]. Nuclear Engineering and Design, 1997, 178(1):1-11. ■