

文章编号:1006-2874(2003)04-0036-03

## 材料科学与工程中应用 ANN 的前景

李竟先 鄢程 吴基球

(华南理工大学材料科学与工程学院,广州:510641)

**摘要** 介绍了 ANN 的基本概念和内涵及其主要用途,如在材料学科中的数据处理,尤其是陶瓷材料设计和材料检测中的应用前景。指出在现有研究的水平上,采用 ANN 解决材料科学与工程实际问题时的优点和局限性。

**关键词** 人工神经网络,数据处理,陶瓷材料设计和检测

**中图分类号**:TQ174 **文献标识码**:B

### 1 前言

人脑神经系统是复杂性和非线性的结合体,是迄今自然界所造就的最完美的信息处理系统,其高超智能使目前计算机望尘莫及。因此对非线性科学的研究也是人们认识复杂系统的关键。从而探讨大脑加工、存储和搜索信息的机理,弄清脑的功能和认识过程的微结构,寻求新的计算方法,便促成了人工神经网络(Artificial Neural Networks,简称 ANN)学科的产生。随着计算机技术的不断发展,在材料科学领域内的工艺过程控制、数值模拟、材料自动设计均取得了可喜的进展<sup>[1]</sup>。但是由于材料尤其是陶瓷材料研究中影响因素多、作用复杂,找到精确规律的可能性比较小,于是在材料科学工程中引入了 ANN,并且力图用其解决材料科学与工程中的实际问题。

### 2 ANN 概述

ANN 用物理可实现系统来模仿人脑神经系统的结构和功能,是一门新兴的前沿交叉学科,其概念以 T. Kohonen. Pr 的论述最具代表性:ANN 就是由简单的处理单元组成的并行互连网络,它的组织能够模拟生物神经系统对真实世界物体所作出的交互反应。由于人类大脑的功能结构的复杂性和智能表现的多样化,实现并行计算的方案自然就有很多种。如 BP 神经网络、概率统计模型、反向传播学习算法模型、自适应共振模型等。其中多层节点模型与 BP 网络是目前应用最广泛的 ANN 模型和算法<sup>[2]</sup>。

ANN 能模拟人脑的并行信息处理方式,具有以下功能:快速、准确的信息处理能力;惊人的自学习功能;自适应、自组织能力;独特的存储信息的能力。ANN 以其独特的结构和处理信息的方法,在许多实际应用领域中能够解决一些传统计算机极难求解、甚至无法求解的问题。ANN 主要应用于解决下述几类问题:模式信息处理和模式识别、最优化问题、信息的智能化处理、复杂控制、信号处理、数学逼近映射、感知觉模拟、概率密度函数估计、化学谱图分析、联想记忆及数据恢复等。然而,ANN 是发展中的学科,尚有诸多不足之处,存在以下理论的局限性:(1)受限于脑科学的已有研究成果。由于生理试验的困难,目前对于人脑思维与记忆机制、神经网络的运行、神经细胞的内部处理机制的认识尚很肤浅。(2)尚未建立起完整成熟的理论体系。目前已提出的众多 ANN 模型,不足以构成一个完整的体系。(3)与技术的接口不成熟。传统计算技术对数字计算、逻辑运算是不可替代的,已积累了非常丰富的软件资源以及解决了许多领域的应用。ANN 技术不能全面替代它们,而只能在某些方面与之互补,从而需要解决与传统技术的接口以获得自身的发展,并通过渗透性策略拓宽自身的应用。(4)应用和实现限制。ANN 不适宜于作高精度计算和类似顺序计数的工作,ANN 的发展还要克服在时间域顺序处理方面的困难,实现尚受限于当时硬件技术水平。

### 3 ANN 在陶瓷材料科学与工程中的应用

收稿日期:2002-06-26  
作者简介:李竟先,女,教授

### 3.1 在数据处理中的应用

计算机的发展促进了材料科学的进步,但是由于材料科学特别是陶瓷材料科学中影响因素多、作用复杂,要找到精确规律的可能性较小,目前仍然主要还是依赖于试验。而大量的实验数据中存在着很多目前尚无法解释的规律,过去常使用回归经验公式的方法来解决此类问题。然而,回归方法在很多情况下无法满足要求。而基于 ANN 通用算法的材料科学实验数据处理方法是一种较好的方法。回归公式存在着下列几个方面的局限性:不同的回归方法对应不同的经验公式,导致经验公式的繁多和不一致性;当变量多、作用复杂时,回归经验公式的建立比较困难;无法完全再现实验数据和处理离散的数据等。ANN 将若干活动规律相同的神经元,按照一定的连接方法组成复杂的结构。它可以模拟人脑的记忆和联想功能,不需要了解过程的输入与输出参量之间的变化规律,可以对给定的样本数据进行学习,以一组权重的形式形成一种网络的稳定状态,这种状态与人脑对数据的记忆和规律的总结相似。这一组权重连同神经网络的结构可以被称为“机器知识”,利用这种“机器知识”,可以根据输入参数预测输出参数的数值。在陶瓷材料科学领域中,影响材料性能的因素多、作用复杂,许多科技工作者将其看作“黑箱”。而 ANN 的结构与“黑箱”结构有很大的相似性,通过对已知样本数据的学习获得的网络连接权重作为“黑箱”中的“机器知识”。人们没有必要来关心这些权重的具体数值,因为这是机器模拟人脑活动学习后得到的一种状态,只要在需要进行计算时,回忆记忆状态,可以根据输入参数,获得输出参数。由于组成神经网络的每一个神经元的结构和活动规律是相同的,可以将神经网络作为通用的方法来对实验数据学习,不需要象回归那样必须给定基本函数。通过对样本数据的学习,神经网络除了可以记忆数据,还可以对实验规律进行复杂的非线性拟合,拟合函数与权重有关。此外,神经网络对于离散数据的处理有很强的能力<sup>[3]</sup>。

但是,由于 ANN 中神经元的数据和连接的复杂程度远远不能达到人脑的规模,记忆的容量有限,并且神经网络算法目前尚未成熟,学习速度不高,在普遍流行的个人计算机平台上难以实现大规模的并行计算,无法对大范围的数据进行普遍规律的学习。所以,目前 ANN 的使用仍然具有一定的局限性,只能对小范围内数据进行记忆和学习,如具有时间序列的对象等<sup>[4]</sup>。但是一旦通过了学习之后,利用获得的权重进行神经计算的速度非常快,这也决定了神经网络可以用于实验规律和学习。

### 3.2 在材料设计中的应用

在材料设计中,特别是当材料的性能、组分和性能之间无明确的规律时,ANN 以其强大的自适应和自学习能力为材料设计提供了一种适用的科学的方法。它不需要预先知道输入

如陶瓷原料的成分、工艺和输出如产品的性能之间存在的某种内在的必然联系,便可以训练学习,并达到预测的目的。这是材料设计其他方法难以比拟的。ANN 是具有模拟人脑生物过程的系统,目前在材料设计方面的应用已取得了一定的进展。目前使用最广的是 BP(backpropagation)算法,是一种不含反馈的误差反向传播<sup>[5]</sup>。无需预先给定公式的形式,而是以试验数据为基础,经过有限次迭代计算而获得的一个反映试验数据内在规律的数学模型,因此它特别适合于研究复杂非线性系统的特性。张国英<sup>[6]</sup>等人在实验的基础上,首次提出将材料的力学性能及部分合金成分(Nb, Ti, Co)作为网络的输入量,材料的其它合金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,利用各种优化方法来实现材料的优化设计。曾梅光<sup>[7]</sup>等人在实验数据的基础上,利用 ANN 建立高 Co - Ni 二次硬化钢的力学性能与合金成分及热处理温度对应关系的模型。提出将五个材料力学性能指标及部分合金成分作为网络的输入,其它合金成分和热处理温度作为网络的输出,根据要求的力学性能设计材料的合金成分含量及热处理条件,获得了满意的结果,为高性能材料设计提供了一定的理论辅助手段。

在陶瓷工业中,为了降低消耗、减少实验次数、提高效率,人们的目光转向了理论辅助的材料设计和预测。然而无论应用哪种方法,如遗传算法、模拟退火算法,都需要计算机进行多次迭代运算,计算量很大,并且容易陷入局部极值区域,往往得不到最优解,只能获得一个次优解。对于高性能陶瓷材料来说,其力学性能指标较多,要获得综合性能指标优良的材料,使用优化算法非常复杂。前例所述是将材料的力学性能及部分材料合金成分作为网络的输入,材料的其他合金成分及热处理温度作为网络的输出,来建立反映试验数据内在规律的数学模型,根据对材料的力学性能要求,直接确定优化解,为材料的设计提供了有效的手段,具有重大的应用前景。

ANN 在材料学科中的应用还包括:陶瓷工业中的配方设计与控制,物料特性控制、成形、施釉、干燥以及烧成过程与参数的控制等,从而达到控制和提高产品质量的目的<sup>[8-9]</sup>。

此方法的突出缺点是:没有能力来解释自己的推理过程和推理依据,不能向用户提出必要的询问;神经网络把一切问题的特征都数字化,把一切的推理都变成数字推理,容易导致丢失必要信息。

### 3.3 神经网络在材料检测中的应用

复合材料在力学行为、破损、失效方面比金属材料复杂得多。例如在冲击的情况下复合材料外表可能很正常,但内部损伤可能很大。对存在缺陷尚无有效手段进行检查的情况下,对材料的无损检测就更困难,从而限制了复合材料的使用范围。而基于 ANN 的智能复合材料就是在处理器控制下埋入光纤传感器阵列和形状记忆合金丝构成的。形状记忆合金

丝作为致动元件改变复合材料的机械性能,在智能复合材料中所用的处理器必须处理光纤传感器的输出信号并产生相应的控制信号激励记忆合金丝,而传感器和激励可以分布在很大的范围内,可由几十个或上千个分散单元组成,但必须经过大量的计算和花费一定的时间。ANN 能提供一个完整的并行计算机构,可以实时对多输入多输出进行处理,并通过训练来学习正确的逻辑,在训练结束后,能对没有训练的输入信号作出正确的判断。陶云刚<sup>[10]</sup>等人采用 Kohonen 自组织神经网络来实现智能复合材料的处理器,由光纤传感器输入信号,神经网络的输出信号是形状记忆合金丝的控制信号,实现智能复合材料的损伤评估。其他的方法如近年来迅速发展起来的小波分析是进行信号处理的有力工具,局部化和多尺度更是其精华所在。由于良好的时频局部化特性,小波变换可以准确地时域和频域对高频、短时成分进行“切片式”的定位、定量分析,在不同频带上观察信号的演变特征。可以借助快速二进小波变换,提取出信号各阶二进小波变换的频谱特征,然后利用小波神经网络良好的学习和记忆功能,对复合材料中出现的无损、断丝、脱层等损伤类型进行自诊断<sup>[11]</sup>。人们还可以利用神经网络检测刀具磨损<sup>[12]</sup>、检测识别缺陷<sup>[13]</sup>等。

在检测方面的应用前景还包括陶瓷机械和窑炉故障检测、产品质量检测等;在分选方面则主要是通过颜色、尺寸等的鉴别将产品分类,从而达到控制和提高产品质量的目的<sup>[9]</sup>。

### 3.4 在分析、预测材料性能中的应用

当传统的“试错”方法不足以满足现代科学技术对材料制备的新挑战时,人们的目光转向理论辅助的材料设计和预测,先进的理论计算方法和超级计算机的结合,使得材料的性能预测和分析优化成为可能。运用 ANN 分析和预测材料的性能已经取得了一定的进步<sup>[14]</sup>。李水乡<sup>[15]</sup>采用人工神经网络 BP 算法,将编织工艺参数作为人工神经网络的输入,将弹性模量及强度性能作为输出,建立了编织工艺参数与力学性能的 ANN 关系模型。这种关系模型对于三维编织复合材料的实验、生产和应用、工艺参数的选取以及理论模型的研究都有重要的参考价值。通过对比显示,其实际实验结果与 ANN 预测结果的模拟效果令人满意。刘马宝等人<sup>[16]</sup>以 LY12CZ 为例,在试验数据的基础上,利用人工神经网络首次建立了预测经超塑变形后的材料的室温性能指标,并且充分反映超塑变形工艺参数对其室温机械性能变化的影响规律。

ANN 在材料学科中的应用还包括陶瓷工业中的配方控制、物料特性控制、成形、施釉、干燥以及烧成过程与参数的控制等;在检测方面的应用还包括机械和窑炉故障检测、产品质量检测等;在分选方面则主要是通过颜色、尺寸等的鉴别将产品分类等。

## 4 展 望

随着新型计算机和神经元芯片的研制,人们迎来了发展人工神经网络的良好机遇。随着对人脑的认识的不断深入,人工神经网络模型在人们生活中应用将会更广,将会从实验室和专门应用逐步地渗入到实际生活和各类工作系统中去,与人们的生活贴得更紧。而材料将是人工神经网络所直接面对的对象,那么理所当然,神经网络在材料学科中的应用将发挥更大的作用。

### 参 考 文 献

- 1 龙 伟等. 人工神经网络发展前景. 机械, 1998. 1
- 2 Z. B. Guo et al. phys. Rev Lett, 1997
- 3 张乐福等. 人工神经网络在材料试验数据处理中的应用. 材料科学与工艺, 1997. 1
- 4 李春好等. 人工神经网络 BP 算法的数据处理方法及应用. 系统工程理论与实践, 1997. 7
- 5 邱冠周等. 人工智能在材料设计中的应用. 中国有色金属学报, 1998. 9
- 6 张国英等. 人工神经网络在材料设计中的应用. 材料科学与工艺, 1999. 9
- 7 曾梅光等. 一种设计高强度韧性钢材的新方法. 宇航工艺材料, 2000. 02
- 8 李月琴, 吴基球. 人工神经网络在陶瓷工业中的应用与展望. 中国陶瓷, 2001. 37(2): 6
- 9 Narendra. K. S et al. Identification and control of dynamical systems using natural network. IEEE. Transactions on natural networks, 1996. 1
- 10 陶云刚等. 基于神经网络的人工智能复合材料损伤评估系统. 航空学报, 1994. 2
- 11 吴耀军等. 基于小波神经网络的复合材料损伤检测. 航空学报, 1997. 2
- 12 朱名铨等. 人工神经网络与刀具测算监测. 航空精密制造技术, 1996. 2
- 13 陈彦华等. 利用人工神经网络实现缺陷类别识别. 应用声学, 1998. 2
- 14 严六明等. 用人工神经网络方法研究烷烃结构与辛烷值、沸点的关系. 计算机与应用化学, 1994. 4
- 15 李水乡等. 编织复合材料的力学性能. 南京航空航天大学学报, 1997. 8
- 16 刘马宝等. 材料超塑变形后室温机械性能的变化和预测. 热加工工艺, 1998. 3

(下转第 43 页)

构,金属被包容件的径向热膨胀将使陶瓷件承受拉应力。改进后的合理结构如图9(b)所示。金属瓷件作为包容件,陶瓷瓷件被包容,在温度变化产生热变形时,瓷件仅受压应力,瓷件安全性高。

### 5.3 瓷件的装配定位

在装配系统中,任一瓷件的位置都是唯一确定的,位置的确定就是定位。实现定位的结构有:(1)定位档肩,实现可滑移装配的轴与毂之间的轴向定位;(2)环状、柱状凸缘,实现径向定位;(3)倒角、锥形体等结构,实现中心自动定位。相应的分别如图10a、b、c所示。

## 6 结束语

陶瓷零件结构设计时,最首要的问题是瓷件应当具有的

功能。在满足功能的基础上,才能谈结构应当满足的其他问题。本文对特种陶瓷零件结构设计的一些基础性的常见问题进行了讨论。实际设计中需要经过反复实验,最终确定出合理的结构。

### 参 考 文 献

- 1 李家驹.陶瓷工艺学.北京:轻工业出版社,2001
- 2 杨文彬.陶瓷零结构设计准则.机械设计,1998(9)
- 3 徐灏主编.机械设计手册(2).北京:机械工业出版社,1991

## ON THE STRUCTURE DESIGNING FOR SPECIALTY CERAMICS PARTS

Gao Yachun Fan Yongmei

(Light Industry Branch, Hebei Institute of Science and Engineering, Tan Shan:063020)

**ABSTRACT** We must consider the desire of its process such as forming, drying, sintering, and manufacturing that ceramics parts.

This paper analyzes the essential principle of designing for specialty ceramics parts on the examples

**KEY WORDS** specialty ceramics, parts, structure designing

Received date: Jan. 12, 2003

About the author: Gao Yachun, man, professor

(上接第38页)

## PROSPECT OF ANN IN MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING

Li Jingxian Yan Cheng Wu Jiqu

(South China University of technology, Guangzhou:510641)

**ABSTRACT** ANN by system of brought about physics imitates structure and function about system of cerebrum nerve, it is new, overlapping subject, and it of forward position. The article detailed basic conception and deep connotation about ANN, and its main use, such as data handle in materials science, especially ANN has good using prospect in ceramic materials design and detection. And it is indicated that advantages and limitations solving actual questions in materials science and engineering using ANN, so far as the present level about researching ANN.

**KEY WORDS** ANN, data handle, ceramic materials design & detection

Received date: June. 26, 2002

About the author: Li Jingxian, woman, professor