

人工神经网络预测纯金属的表面张力^{*}

桂玮珍¹⁾ 谢允安²⁾ 乔芝郁²⁾

1) 北京科技大学信息工程学院, 北京 100083

2) 北京科技大学应用科学学院

摘要 建立了以纯金属原子半径、熔点、沸点和原子化焓预测表面张力的人工神经网络模型。训练后的神经网络能较好的拟合实验数据,对 40 种金属的表面张力进行回想和预测结果与实验值的偏差在可接受范围内,表明人工神经网络在纯金属表面张力预测方面有一定的前景。

关键词 表面张力, 人工神经网络, 反传学习

中图分类号 TP399, O647.1

表面(界)面张力的测量难度大,影响测定结果精度的因素复杂,因而,已有的纯金属的表面张力数据不全,不同测定结果相差极大^[1]。在液体表面张力计算这一领域已发展了统计热力学理论^[2],但这一理论存在表面原子能级或势函数难以确定的困难,实用价值不大。

理论上已证明^[3],任何函数都可以用人工神经网络以任意精度逼近,并且它不需要预先给出模型,而只需要 1 组已知条件和结果组成的学习样本,即可通过自学习获得条件与结果之间的规律。人工神经网络已用于热力学性质的预测,但将人工神经网络用于表面张力的预测尚未见报道。

本文利用反传学习(BP)网络将纯金属的原子半径、熔点、沸点、原子化焓与纯金属熔点时的表面张力相关联,进行了人工神经网络预测。

1 反传学习网简介

反传学习网采用多层结构,其拓扑结构如图 1 所示^[4,5]。它包括输入层、输出层和若干隐含层。网络可以有多个输入和多个输出,每 1 层中包括若干处理单元(人工神经元),每个单元可以有多个输入,但只有 1 个输出,如图 2 所示。它是 1 种输入只沿着连线单方向前进的网络——前向网络。它的输入信息矢量经过隐层变换成输出矢量,由网络的权值和节点函数共同作用实现从输入空间到输出空间的正向映射。

根据反传学习网络理论,每一个神经元进行

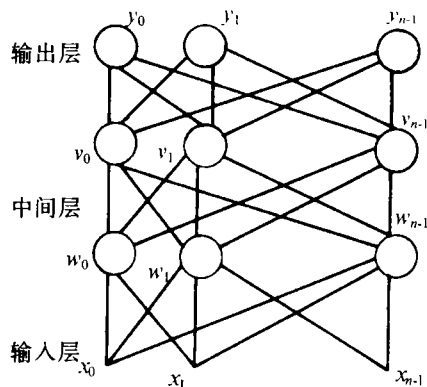


图1 反传学习网络拓扑结构示意图

以下的数学运算:

$$s_i = \sum_{j=1}^n w_{ij} x_j - \theta_i \quad (1)$$

$$y_i = f(u_i) = f(s_i) \quad (2)$$

其中, w_{ij} 为连接权重, x_j 为来自上一层神经元的输入; s_i 可以看成是作用在神经元 I 的有效刺激, θ_i 为阈值; y_i 为神经元的输出; $f(u_i)$ 为传递函数. 选用的传递函数为 Sigmoid 函数:

$$f(u_i) = \frac{1}{1 - e^{-u_i}} = \frac{1}{1 + e^{-(\sum w_{ij} x_j - \theta_i)}} \quad (3)$$

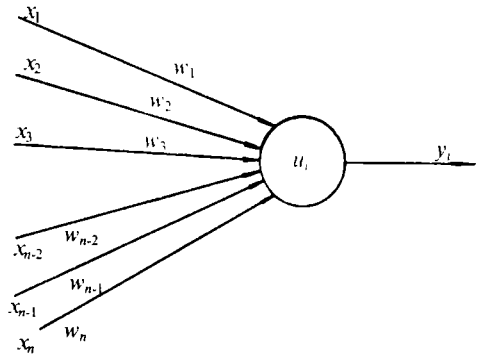


图2 人工神经元示意图

反传学习网络的学习过程是将样本训练数据加到网络输入端, 同时将期望的输出值与网络输出值进行比较而计算出相应的误差, 以此误差信号控制连接权重的调整. 经多次反复后得出收敛后的权重, 从而完成知识获取过程. 这一结果即可用于推理预测.

2 人工神经网络输入因子选取与数据处理

影响表面张力的因素复杂, 文献 [6] 讨论了熔点、摩尔体积、汽化热、电子密度、全势垒等因素对表面张力的影响.

为对纯金属表面张力进行人工神经网络的预测, 输入因子的选取主要考虑以下几个因素:

- (1) 输入输出量必须是金属元素本身特有性质, 该性质的值只与元素类别有关.
- (2) 输入值必须是易于测量的物理量, 对所有金属元素都有实验测量值.
- (3) 同一种量对于不同元素应具有相同意义.
- (4) 输入到输出应为单值映射.

由于纯金属的熔点、沸点、原子半径、原子化焓是元素的特有性质, 这 4 种性质组合能唯一确定 1 种元素, 即不可能出现 2 种或多种元素具有相同熔点、沸点、原子半径、原子化焓, 而且这些性质都只取决于元素本身的性质 (一定状态下). 另外, 几乎所有元素的这种性质都被实验精确测定, 数据可靠. 因此, 我们选定纯金属熔点温度的表面张力为目标预测量, 以各纯金属的熔点、沸点、原子半径、原子化焓等纯金属元素的特征量作为输入, 建立 4 层反传学习网络, 运用精选的数据进行神经网络训练.

表面张力在不同的温度具有不同的值, 不是一个完全由元素本身性质决定的量. 一种使这类性质变为元素特有性质的方法是在规定状态变量值时测定物质的某一性质, 从而使其变为由元素本身性质确定的特征量. 据此, 将熔点温度时液相的表面张力作为目标预测量.

文献中表面张力的测量温度各不相同, 应根据表面张力的温度系数精确测定值将表面张力换算到金属熔点温度值. 文献 [6] 对纯金属的表面张力实验测量数据进行了评估并将所有数据转换成熔点时的数据, 并对实验数据的误差进行了系统评估和统计计算. 本文学习样本的期望输出值采用该文献的评估值. 金属的熔点、沸点、原子半径、原子化焓数据来自标准数

据手册^[7], 表面张力数据取自文献 [6].

3 人工神经网络计算结果与讨论

采用 4 层反传学习网 (其中 1 个输入层、2 个隐层、1 个输出层), 对学习样本进行处理. 其中输入层有 4 个结点; 第 1 隐层 5 个结点; 第 2 隐层 3 个结点; 输出层有 1 个结点 (表面张力). 经过 20 万次学习后, 对学习样本进行回想. 表面张力 σ 的回想结果与实验值比较如图 3 所示.

由图 3 可以看出, 人工神经网络的回想结果与理想直线相当接近 (表面张力实验值的误差可高达 80 mN/m). 这说明经过学习后的人工神经网络已获得了表面张力与纯金属的原子半径、熔点、沸点、原子化焓之间的联系的知识; 然后利用这一网络对 40 种纯金属的表面张力进行了预测, 并与实验值进行比较, 如图 4 所示. 由图可以看出, 人工神经网络的预测结果与实验值相近. 特别是对于原子序数较小的元素 (Be 除外), 预测值与实验值相当一致.

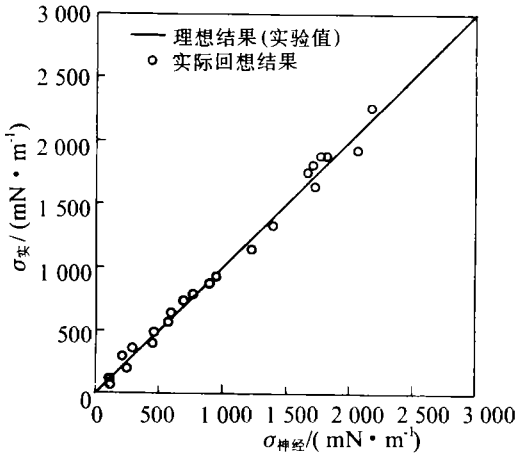


图3 人工神经网络回想结果与实验数据比较

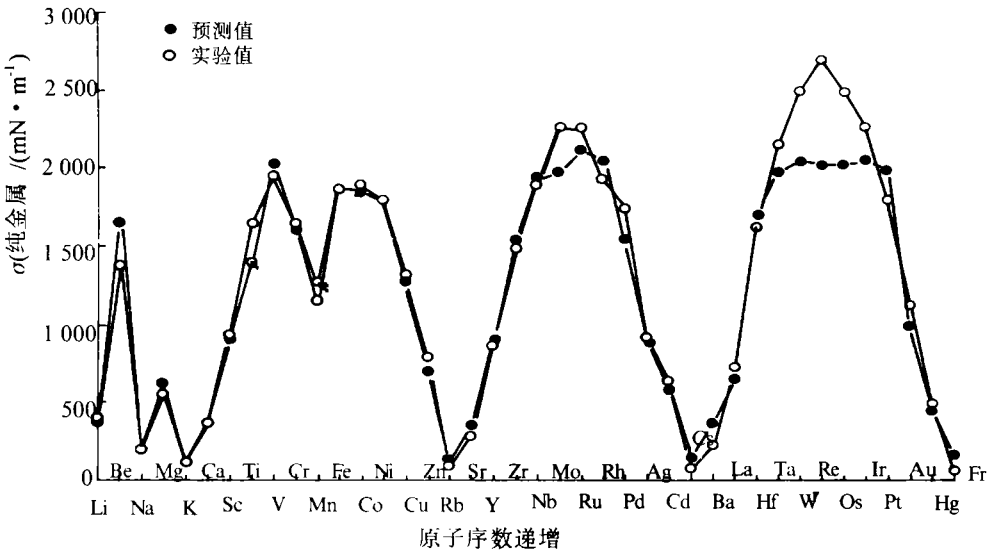


图4 人工神经网络回想值与实验值的比较^[7,8]

对于原子序数大的金属元素, 预测值与实验测定值相差较大. 这种误差可能有 2 种原因: 一是因为实验测定值的误差较大; 二是由于这些元素的准确测定数据较少, 在人工神经网络学习样本中采用的数据少, 而导致人工神经网络对这部分元素的知识不完备. 尽管如此, 预测结果表现出的规律与实验测定值是相一致的. 另外考虑到表面张力实验测定结果本身的离散性, 许多预测结果都在表面张力实验测定值的误差范围内.

4 结论

通过人工神经网络技术将纯金属表面张力表征为与纯金属的熔点、沸点、原子化焓、原子半径相关联,建立了由这些易测物理性质预测纯金属熔点时的表面张力的人工神经网络.人工神经网络的预测结果与实验值相当吻合,特别是对于原子序数低的金属元素,预测值与实验值几乎一致.

致谢:作者衷心感谢何鸣鸿博士的有益讨论.

参 考 文 献

- 1 Adamson A W著.表面的物理化学.第三版,顾惕人译.北京:科学出版社,1984
- 2 Hill T L. Statistical Mechanics. New York: McGraw-Hill, 1956
- 3 吕允文, 夏宗宁, 赖树纲, 等. 材料导报, 1994, 83(6): 16
- 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, 1992
- 5 王东生, 曹磊. 混沌、分形及其应用. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1995
- 6 Keene B J. International Materials Reviews, 1993, 38(4): 157
- 7 孙鸿儒, 王道隆. 稀有金属手册(上册). 北京: 冶金工业出版社, 1992
- 8 黄佩丽, 田荷珍. 基础元素化学. 北京: 北京师范大学出版社, 1991

Estimating Surface Tension of Pure Metals by Neural Network

Gui Weizhen¹⁾ Xie Yun'an²⁾ Qiao Zhiyu²⁾

1) Information Engineering School, UST Beijing, Beijing 100083 China 2) Applied Science School UST Beijing

ABSTRACT An artificial neural network was established to forecast the surface tension of pure metal from the experimental data of atomic radius, melting point, boiling point and atomization enthalpies. The trained network can represent the relationship between the input factors and output factor (surface tension). The associated and forecast data for more than 40 pure metals are acceptable considering the deviation of the experimental data for surface tension, which shows a good prospect of artificial neural network in the prediction of surface tension of pure metals.

KEY WORDS surface tension, artificial neural network, back propagation learning