

文章编号: 1000-324X(2003)03-0561-08

矿渣微晶玻璃材料设计神经网络模型

文岐业¹, 张培新^{2,3}, 张怀武¹

(1. 电子科技大学微电子与固体电子学院, 成都 610054; 2. 深圳大学师范学院化学与生物学系, 深圳 518060; 3. 广西大学化学化工学院, 南宁 530004)

摘 要: 研究了人工神经网络在矿渣微晶玻璃材料设计中的应用. 采用基于变尺度法的新学习算法建立了三层前馈型神经网络, 发现当网络结构为 $M-2M-1$, 取一定范围内的学习误差时, 网络具有很好的学习效果. 研究证明, 建立的人工神经网络模型学习速度快, 收敛稳定, 强壮性好, 能根据较少的实验样本有效抽取矿渣微晶玻璃组成、工艺和性能之间的内在规律, 是进行微晶玻璃材料设计的有力工具.

关 键 词: 人工神经网络; 矿渣微晶玻璃; 材料设计

中图分类号: TP 399; TQ 171 文献标识码: A

1 引言

矿渣微晶玻璃是以冶金渣、尾矿等工业废渣及天然矿物为原料制得的一种微晶材料, 具有硬度高、抗折强度大、耐酸耐碱性好等优良的物理化学性能^[1]. 广泛应用于建筑、化工采矿、冶金、电工等许多领域. 已成为国内外社会可持续发展和推动清洁生产的优先开发项目. 但是, 矿渣微晶玻璃材料组分、结构和性能之间的关系还不明确, 材料设计还停留在“炒菜法”的低水平上, 给矿渣微晶玻璃的研发和应用带来了很大的困难.

人工神经网络(ANN)是一种模拟人类大脑工作的数学结构, 具有并行式分布式处理信息的功能, 被认为反映了人类创造性思维的本质^[2,3]. 人工神经网络理论被广泛地应用于数据分析、函数逼近、传感器和控制领域, 并在专家系统和材料设计领域也有一定的应用^[4~6]. 本研究结果表明, 人工神经网络可以成功地应用到矿渣微晶玻璃材料设计中. 本研究建立了矿渣微晶玻璃神经网络模型, 并证明是矿渣微晶玻璃知识获取和性能预测的有效方法.

2 人工神经网络原理

2.1 人工神经网络的结构^[7~9]

人工神经网络是由许多相互连接的神经元(如图1)组成的. 神经元的输入是其他神经元的输出与相应权重(ω_i)的积. 权反映了连接的强度. 通常将这些赋权的输入值简单相加, 如式(1)所示, 得到的和由一个传递函数(f)进一步处理, 产生该神经元的输出 y , 见式(2).

收稿日期: 2002-03-18, 收到修改稿日期: 2002-04-15

基金项目: 广东省自然科学基金(021289); 广西科学基金(桂科青 0135020)

作者简介: 文岐业(1976-), 男, 博士研究生. 通讯联系人: 张培新. E-mail: pxzhang88@hotmail.com

传递函数通常选择逻辑函数, 如式 (3) 所示的 sigmoid 函数.

$$I = \sum_{i=1}^n w_i x_i \quad (1)$$

$$y = f(I) \quad (2)$$

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (3)$$

利用这样的神经元可以构成不同拓扑结构的人工神经网络, 其中最典型和用得最广泛的是前馈式网络模型, 如图 2 所示, 它由一个输入层, 一个输出层和一个或多个隐含层组成, 相邻两层的各个单元之间一一连接. 本文神经网络建模采用的就是这种模型.

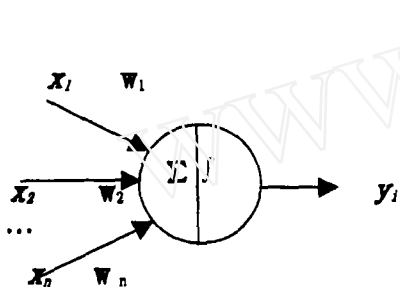


图 1 人工神经元模型

Fig. 1 Artificial neural network neuron

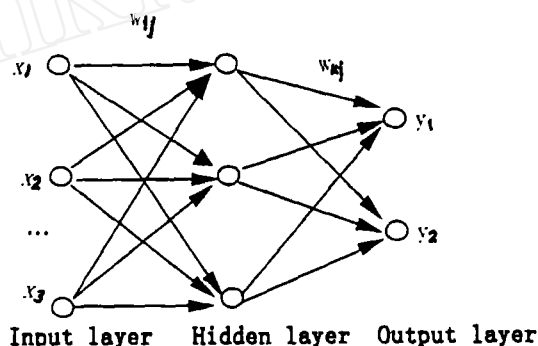


图 2 三层前馈网络

Fig. 2 3 layers feedforward neural network

2.2 前馈神经网络及其学习算法

前馈神经网络由于具有理论上能逼近任意非线性连续映射的能力, 因而非常适合非线性系统建模及构成自适应系统. 神经网络从经验中学习知识的过程就是网络的训练过程, 前馈神经网络的训练步骤如下:

- (1) 向网络提供训练样本集, 即输入—输出对.
- (2) 指定网络训练参数, 如学习误差、隐层节点数等. 调整网络联接权值, 使网络输出值不断接近期望输出值, 直到满足指定的允许误差.
- (3) 训练完成后, 提供测试样本对网络进行测试, 如果测试结果符合预期的要求则终止, 否则转 (2) 改变网络参数进行新一轮训练.

神经网络算法决定如何调整网络权值. 用来训练神经网络的算法有很多, 包括模拟退火, δ 学习算法, BP 学习算法, 竞争学习算法和自组织映射学习算法等. 其中 BP 算法用得最为广泛. 本研究采用文献 [10] 介绍的一种基于变尺度方法的新学习算法. 该算法提出一种“整体误差修正”方案, 将变尺度法成功地引入前馈网络的学习中来.

3 人工神经网络模型的建立

(1) 网络结构及初始权值的确定

采用常用的三层 BP 网络. 输入节点数 M 取训练样本中输入向量的维数. 隐层数由用户根据实际情况确定, 默认值为 $2M+1$. 输出节点数取 1, 这是为了减少网络结构的复杂性,

提高训练速度.

在网络训练开始时, 需要向系统提供处于 $[-0.5, 0.5]$ 区间的初始权值. Visual Basic 中随机数的产生来自随机函数 RND(). 该函数产生 $[0, 1]$ 区间的随机小数. 一般取权值

$$W(i) = \text{Rnd}() - 0.5 \quad (4)$$

但是 Rnd() 函数在不同情况下产生的随机序列不一定相同, 这样每次训练的初始权值就可能不相同. 训练后得到的权值矩阵和预测结果也随之不同, 不便于对影响网络的各种因素进行对比分析, 也影响预测结果的可重复性. 为此, 我们引入了另一个随机序列数

$$x_{n+1} = 1 - 2x_n^2 \quad (5)$$

取 $x_0 = 0.6$, 当 $x_n \in [-0.2, 0.2]$ 时赋值给 $W(i)$, 得到的初始权值处在 $[-0.2, 0.2]$ 区间. 这样每次产生的初始权值都是相同的, 克服了选用 Rnd() 函数获取随机数的不足.

(2) 原始数据的标准化

矿渣微晶玻璃神经网络选用 Sigmoid 函数作为网络神经元的传递函数. 根据 S 函数的特征, 为了保证网络神经元的非线性作用, 对收集的原始数据要进行标准化. 在模块中提供了两种常用的标准化方法: 归一化法和统计法. 设样本数据为 $x_p (p=1, 2, \dots, P)$, 定义 $x_{\max} = \max\{x_p\}$, $x_{\min} = \min\{x_p\}$, 平均值 $\bar{x} = \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P x_p$, 标准差 $\sigma = \sqrt{\frac{1}{P-1} \sum_{p=1}^P (x_p - \bar{x})^2}$

归一化方法是由公式:

$$x_p = \frac{x_p - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \quad (6)$$

将样本数据转换成 $[0, 1]$ 区间的数据.

而统计法是由公式:

$$x_p = \frac{x_p - \bar{x}}{\sigma} \quad (7)$$

将样本数据转换成 0 附近或正或负的数据.

网络输出值也要归一化到 $[0, 1]$ 区间后再采用如下公式将其约束在 $[0.25, 0.75]$ 之间

$$(t_p + 0.5)/2 \Rightarrow t_p \quad (8)$$

这是因为由于 Sigmoid 函数的特性, 它在 0 和 1 附近时接近饱和, 收敛很慢, 而在 0.5 附近变化较剧烈, 有利于快速收敛.

(3) 学习误差和最大迭代次数

学习误差是一个很小的正数 ε , 当每个样本的网络输出和教师值之差满足以下关系式

$$|t_i^{Pl} - y_i^{Pl}| < \varepsilon \quad (9)$$

时则停止学习, 否则重新调整权值直到满足上式为止.

有时网络长时间不能收敛或者不收敛, 这时需要给定一个迭代次数上限, 当迭代次数达到这个上限时即结束训练. 这个值的选择根据具体的情况确定.

4 神经网络模块在矿渣微晶玻璃材料设计中的应用

4.1 样本集 1^[11] 的训练

采用高炉矿渣、光学用硅砂、氢氧化铝、碳酸钙和氧化镁为原料. 添加 Na_2O 或 K_2O 的碳酸盐为玻璃熔剂, 晶核剂采用 ZnS (闪锌矿). 制备 $\text{CaO-MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ 系微晶玻璃. 测试其热膨胀系数等性能. 得到一批数据如表 1 所示.

用前 11 组数据作为网络的训练样本, 后三组作为检验样本. 按三种方式进行训练:

- (1) 选择样本中的主要成分为输入参数, 输入节点数 5.
 - (2) 除了选择样本中的主要成分外, 把少量成分之和也作为一个输入参数, 输入节点 6.
 - (3) 将主要成分和少量成分都作为输入参数, 输入节点数 10.
- 采用统计标准化方法, 训练精度取 $\varepsilon = 0.001$, 最大迭代次数 500, 得到的结果列于表 2.

表 1 玻璃配料组成及性能指标
Table 1 Composition and property index of glass

Serial number	Major composition					Minor composition					Thermo-expansion
	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	Na ₂ O	MgO	Mn ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	TiO ₂	ZnO	S	
1	74.03	2.51	12.51	5.97	2.75	0.14	0.75	0.21	1.61	0.95	62.1
2	74.02	5.02	10.01	5.97	1.49	0.26	1.04	0.41	1.61	1.08	58.3
3	69.02	5.02	10.01	5.50	1.49	0.26	1.04	0.41	1.61	1.08	58.8
4	64.23	5.14	19.83	5.44	1.47	0.26	1.12	0.40	1.93	1.24	77.8
5	64.23	15.09	9.86	5.44	1.47	0.26	1.12	0.40	1.93	1.24	60.9
6	59.23	5.14	24.81	5.44	1.47	0.26	1.12	0.40	1.93	1.24	80.2
7	54.23	5.14	29.86	4.97	1.47	0.26	1.12	0.40	1.93	1.24	82.8
8	49.43	20.21	19.71	4.97	2.93	0.51	1.70	0.80	1.93	1.50	71.9
9	44.23	5.14	39.82	4.50	1.47	0.26	1.12	0.40	0.13	1.24	105.3
10	44.43	25.25	19.71	4.50	2.93	0.51	1.70	0.80	0.13	1.50	71.6
11	39.43	20.21	29.68	4.50	2.93	0.51	1.70	0.80	1.93	1.50	76.2
12	69.02	5.02	14.99	5.50	1.49	0.26	1.04	0.41	1.61	1.08	67.6
13	64.23	10.12	14.84	5.44	1.47	0.26	1.12	0.40	1.93	1.24	66.1
14	54.43	15.25	19.71	4.97	2.93	0.51	1.70	0.80	1.93	1.50	75.1

分析表 2, 我们可以得出一些简单的结论:

(1) 网络快速、可靠、有效: 以上所有训练过程的训练时间均不超过两分钟即可收敛, 迭代次数不超过 100 次, 尚没有碰到网络不收敛的情况. 用第二和第三种方法预测的结果是令人满意的, 网络具有很好的可靠性和准确性.

(2) 当输入参数为 M 时, 取中间层节点数为 $2M+1$ 一般是可行的, 如表 2 中的 3、9、14, 误差平方和均小于 0.1. 在这个数附近作适当探索有可能得到更好的网络结构, 如表中的 7 和 8.

(3) 训练后的网络能反映该玻璃系统组成、操作工艺和产品性能的内在关系. 晶核剂在矿渣微晶玻璃中的作用有以下特点: 1) 含量少, 但可以通过影响玻璃的成核晶化而强烈影响玻璃的性质. 2) 在矿渣微晶玻璃的研制中, 晶体成核和生长对晶核剂是有选择的, 不同的晶核剂对不同的晶相形成起主要作用, 从而对性能的影响是不同的.

第一种方式的样本处理略去了晶核剂, 训练后得到的网络其预测效果比较差, 相对误差和大多在 0.2 以上, 第二种方式是把组成中的少量组分作为一个量, 由于晶核剂影响的选择性, 笼统地把所有的少量组分都作为晶核剂显然歪曲了该系统组成和性能之间的关系. 我们可以看到, 网络的预测结果随网络结构的不同而有很大的差异. 效果好的其误差平方

和可以达到 0.021, 而差的仅为 0.248, 标准差为 0.08499. 这说明训练样本还没有稳定地反映矿渣微晶玻璃组成和性能之间的关系, 对不同网络训练后预测结果很不稳定. 第三种方式既考虑了晶核剂对性能的影响, 又考虑到了这种影响的选择性. 网络的预测效果比第一种方式要好得多, 同时比第二种方式也要好而且更稳定, 无论如何改变网络结构, 相对误差和均在 0.1 左右, 标准差为 0.01752.

表 2 神经网络模型的训练及预测结果

Table 2 Training Result of ANN model

Serial number	Topology of network	67.6	66.1	75.1	Sum of relative error	Statistics
		Prediction value				
1	5-9-1	71.02	56.43	77.91	0.234	Average value:
2	5-10-1	72.93	59.13	81.58	0.272	0.2426
3*	5-11-1	69.40	55.16	71.76	0.085	Standard
4	5-12-1	75.23	56.68	86.28	0.404	deviation:
5	5-13-1	74.92	69.32	70.26	0.221	0.114
6	6-10-1	66.58	67.31	58.97	0.248	Average value:
7	6-11-1	67.89	65.61	74.4	0.021	0.1242
8	6-12-1	70.21	66.18	73.81	0.057	Standard
9*	6-13-1	69.13	67.47	71.04	0.097	deviation:
10	6-14-1	73.25	65.58	72.32	0.128	0.08499
11	6-15-1	66.57	67.94	63.80	0.194	
12	10-19-1	63.87	65.65	71.24	0.113	Average value:
13	10-20-1	63.67	65.27	69.94	0.139	0.1127
14*	10-21-1	64.08	65.87	72.40	0.0915	Standard
15	10-22-1	63.28	65.94	72.27	0.104	deviation:
16	10-23-1	63.59	65.08	71.97	0.116	0.01752

这表明, 网络能够很好地抽取训练样本中包含的信息, 只要提供正确的、合适的、足够的训练样本, 神经网络就可以有效获取矿渣微晶玻璃组成与性能之间的知识并给出很好的预测结果.

4.2 样本集 2^[12] 的训练

该文献涉及一种材料, 此种材料既有天然大理石的外观, 又有玻璃的化学稳定性和其他优良性能. 然而已知的玻璃成分具有比较高的熔化温度, 塑性加工即模制成型所需要的最低温度比较接近液相温度, 所以在连续模制成型过程中难以避免析晶, 在热处理过程中延缓再结晶. 该文献设计了一些玻璃配方来探索玻璃组成对熔化温度、模制温度等工艺参数的影响, 样本集见表 3.

表 3 微晶玻璃组成与熔化温度、模制温度的关系

Table 3 Relationship of melting temperature, modeling temperature and glass's composition

Serial num.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
SiO ₂	59.1	58.4	61.6	61.7	59.7	63.9	60.6	56.6	59.0	60.7	59.0
Al ₂ O ₃	6.8	8.9	7.1	7.1	6.9	5.3	7.0	6.5	6.8	6.8	6.8
CaO	19.1	21.8	20.0	20.0	19.3	19.5	19.6	18.3	19.1	20.8	19.1
K ₂ O	1.6	1.8	1.7	1.3	1.6	1.8	1.7	1.6	1.5	-	-
Na ₂ O	1.7	1.8	1.8	1.8	1.7	1.8	3.5	1.7	1.7	-	-
B ₂ O ₃	0.6	2.2	-	0.6	0.9	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6
ZnO	6.8	5.1	7.8	7.1	9.9	7.1	7.0	6.5	6.8	6.8	6.8
BaO	4.3	-	-	-	-	-	-	8.2	4.4	4.3	7.7
Melting temperature	1440	1395	1430	1435	1440	1495	1425	1425	1440	1450	1480
Modeling temperature	1290	1270	1290	1295	1275	1330	1270	1265	1290	1295	1270

对表 3 中的数据分析, 初步确定一些网络参数

①总样本数只有 11 个, 为了网络能够获取尽量多的信息, 确定每次取一个检验样本, 剩余的样本都作为训练样本, 这样每次训练样本数是 10; ②输入节点 (输入参数) 有 8 个, 按前面的经验取中间节点 17 个, 形成 8-17-1 的拓扑结构; ③各个样本中对应参数的输入值相差比较近, 如 SiO₂ 含量平均值为 60.03, 标准差为 1.96. 为了使标准化后的数据比较分散, 采用统计标准化方法对输入值进行标准化. 输出值仍采用归一化方法转换到区间 [0.25, 0.75] 之间; 设最大迭代次数为 500.

分别选择样本 3 和样本 5 为检验样本时的训练结果列于表 4 和表 5 中.

表 4 选择样本 3 为检验样本时的训练及预测结果

Table 4 Drilling and predicting result of sample 3 as the test sample

Study error	Melting temperature		Modeling temperature	
	Prediction value/°C	Total drilling error	Prediction value/°C	Total drilling error
0.0005	1438.7	0.00156	1295.57	0.00142
0.0004	1440.96	0.00149	1295.45	0.00096
0.0003	1432.02	0.00079	1292.14	0.00023
0.0002	1432.08	0.00058	1292.14	0.00023
0.0001	1432.08	0.00014	1292.14	0.00023
0.00005	1431.80	0.00005	1290.98	0.00006
0.00001	1431.96	0.00001	1291.10	0.00002

表 5 选择样本 5 为检验样本时的训练及预测结果

Table 5 Drilling and predicting result of sample 5 as test sample

Study error	Melting temperature		Modeling temperature	
	Prediction value/°C	Total drilling error	Prediction value/°C	Total drilling error
0.0005	1408.07	0.00175	1264.11	0.00101
0.0004	1458.57	0.00112	1271.84	0.0005
0.0003	1469.34	0.00051	1271.84	0.0005
0.0002	1469.34	0.00051	1271.84	0.0005
0.0001	1488.32	0.00016	1271.54	0.00006

训练过程中, 收敛次数均不超过 100 次, 训练时间不超过 120s. 训练过程快速稳定没有不收敛的情况. 分析以上结果可以得到以下结论

①网络具有很强的学习能力. 在样本数很少及样本中的某些参数缺失的情况下, 网络预测结果具有很高的准确性, 相对误差最小的达到 0.00126.

②网络的训练和预测效果都与学习误差 (ε) 有关, 如表 4、5 中所示, 训练总误差 ($e = \sum_l (y_l - t_l)$, l 为各个样本) 随学习误差的减小而减小, 但是网络的预测效果不是随学习误差越小越好. 预测值对学习误差值有一个最佳值, 即存在一个最佳的学习误差值. 若超过这个值, 学习误差对训练效果的改善作用达到饱和, 甚至可能出现过拟合现象, 即训练效果很好, 但预测效果却变差了.

③对检验样本 5 的预测效果略为变差, 特别是对熔化温度的预测结果, 最好的其相对误差也有 0.013, 比以样本 3 为检验样本时的最佳预测大一个数量级, 其原因主要是样本 5 与训练样本存在较大差别 (如 ZnO 的组分, 样本 5 中该组分的含量是最大值), 也反映了由于训练样本不够, 网络尚没有完全学习到组成和工艺参数之间的内在规律, 所以缺乏良好的外推能力.

5 结论

1. 利用基于“整体误差修正”思想的新学习算法, 建立了三层前馈型矿渣微晶玻璃神经网络模型. 确定了适合该网络模型的初始权值获取方法和数据预处理方法. 实验证明该网络模型收敛迅速稳定, 学习能力强, 即使在训练样本数目少, 部分参数缺失的情况下仍然具有很好的学习效果.

2. 探索了不同网络结构、学习误差等参数对网络训练的影响, 结果表明具有 $M-2M-1$ 结构的网络一般可以得到较好的学习效果. 学习误差对网络学习和预测具有一个最佳值.

3. 实例表明矿渣微晶玻璃神经网络可以有效抽取矿渣微晶玻璃组成、工艺和性能之间的内在规律, 能有效地进行数据处理和性能预测, 是矿渣微晶玻璃材料设计有力的辅助手段.

参考文献

- [1] 潘守芹. 新型玻璃. 上海: 同济大学出版社, 1992. 73-74.

- [2] 胡守仁, 余少波, 戴 葵. 神经网络导论. 长沙: 国防科技大学出版社, 1993. 1-7.
- [3] 施 欣. 计算机科学, 1991, (3): 70-74.
- [4] 韦江维, 胡华安, 何华辉. 材料导报, 1996, (5): 5-7.
- [5] 刘信安, 罗彦凤, 王镛先. 计算机与应用化学, 1999, 6 (3): 175-180.
- [6] 文岐业. 矿渣微晶玻璃神经网络专家系统研究, 南宁: 广西大学, 2001. 5.
- [7] 赵林明, 胡浩云. 多层前向人工神经网络, 郑州: 河南水利出版社, 1999. 1-8.
- [8] 李孝安, 张晓绩. 神经网络与神经计算导论. 西安: 西北工业大学出版社, 1994. 34-36.
- [9] Dayhoff J E. *Neural Network Architectures: A Introduce*, Van Nowtrand Reinhold, MA, 1990.
- [10] 张星昌. 控制与决策, 1997, 12 (3): 213-216.
- [11] 国外矿渣微晶玻璃资料汇编 (1). 国家建委建材科学研究所技术情报所, 1973. 133-136.
- [12] 矿渣微晶玻璃的生产与应用 (下). 国家建筑材料工业局蚌埠玻璃工业设计院信息中心, 1994. 71-74.

Applications of Artificial Neural Network in Slag Glass-Ceramic Expert System

WEN Qi-Ye¹, ZHANG Pei-Xin^{2,3}, ZHANG Huai-Wu¹

(1. College of Micro-Electronic and Solid-Electronic, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China; 2. Normal College, Shenzhen University, Shenzhen 518060, China; 3. College of Chemistry and Chemical Engineering, Guangxi University, Nanning 530004, China)

Abstract: Artificial neural network was introduced into slag glass-ceramic material designing. A 3 layers feedforward network was built with a new robust learning algorithm, based on a concept of "entire error modifying". The network has a excellent learning ability when its topology is $M-2M-1$ and an appropriate study error chosen. The research results show that this slag glass-ceramic neural network is robust, quick and stable in training and data predicting, which can disclose the relationship of elemental compositions, structure and material properties of slag glass-ceramic effectively, even if some parameters are absent in samples.

Key words artificial neural network; slag glass-ceramic; material designing