

人工神经网络模型在非 ABO_3 型希土 复氧化物电阻率特性分析中的应用

蔡煜东 甘骏人 姚林声 刘洪霖 陈念貽

(中国科学院上海冶金研究所, 上海 200050)

目前, 人工神经网络在模式识别及其他领域的应用引起了普遍的关注。本文叙述“反向传播”神经网络模型, 算法和在非 ABO_3 型希土复氧化物电阻率分析中的应用, 实验结果表明, 神经网络的判别正确率为 100%, 因此, 该方法可望成为化合物分析, 材料设计的辅助手段。

关键词: 神经网络 模式识别 化合物分析 材料设计

人工神经网络—反向传播模型及算法

“反向传播”(B-P)模型是美国 MIT 的 PDP 小组在 1985 年提出的一种神经网络。它是一种多层感知器结构, 除输入层和输出层外, 还可含有隐蔽层, 含有 1 个隐蔽层的 B-P 模型如图 1 所示。

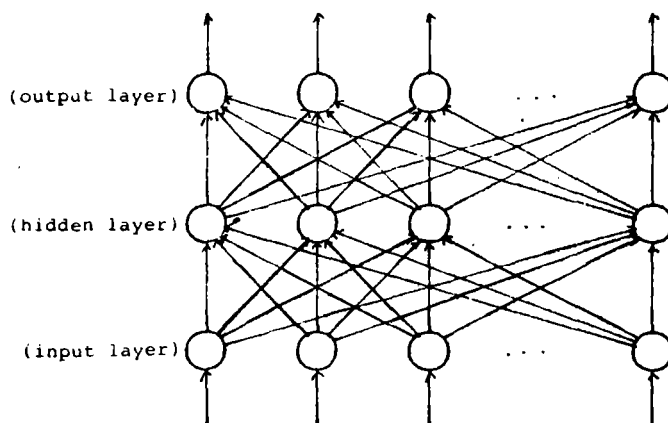


图1 反向传播网络

Fig.1 Back-propagation neural network

各层神经元按下式计算:

$$y = f\left(\sum_{i=1}^n w_{ij} * x_i - \theta\right)$$

其中, w_{ij} 是神经元间的连接强度

x_i 是神经元接受的信息

θ 是神经元的阈值

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

B-P 网络的自学习过程是个反复迭代的过程, 首先给网络一组初始权值, 然后输入一个样本, 并计算输出, 通过实验输出和期望输出之间的差值用一定的方法来修改网络的权, 以达到减小这个差值的目的。反复执行这个过程直至这个差值小于预先确定的值为止。对足够的样本进行这样的“学习”后, 网络所持的那组权值便是经过自适应学习得到的正确的内部表示。

设 $T(p,j)$ 、 $O(p,j)$ 分别是第 p 个样本的期望输出与实际输出, 则 B-P 网络学习算法为:

$$\Delta pW(j,i) = \eta * D(p,j) * O(p,i)$$

Case 1: $O(p,j)$ 为输出节点的输出时

$$D(p,j) = T(p,j) - O(p,j)$$

Case 2: $O(p,j)$ 为隐蔽层节点的输出时

$$D(p,j) = F'(NET(p,j)) * (T(p,j) - O(p,j))$$

$$F' = F * (1 - F), \quad F = 1 / (1 + \exp(1 - x))$$

此处, $W(j,i)$ 是某层的第 i 个节点与上一层的第 j 个节点间连线的权, $O(p,j)$ 是第 j 个节点的输出, $NET(p,j) = \sum W(j,i) * O(p,i)$ 是第 j 个节点收到的信息总和, $D(p,j)$ 是第 j 个节点的输出误差, $\eta > 0$ 是增益。

非 ABO_3 型希土复氧化物电阻率特性的神经网络识别

在对决定希土复氧化物电阻率 ρ 的元素化学键参数进行深入分析⁽¹⁻²⁾的基础上, 我们发

表 1 24 个学习样本

Table 1 Twenty-Four Learning Samples

compound	R(Ra+3)	E(6s,Ra)	Nf(Ra+3)	Nd(Ra+3)	R(M+3)	E(4s,M)	Nd(M+3)	resistance	result of NN	kind
La ₂ CuO ₄	1.032	0.3577	0	1	0.73	0.5091	10	0.14	0.015697	1
Pr ₂ CuO ₄	0.99	0.3417	3	0	0.73	0.5091	10	12.0	0.047635	1
Nd ₂ NiO ₄	0.983	0.3455	4	0	0.6	0.5831	8	49.0	0.258503	2
Yb ₂ Fe ₂ O ₁₂	0.868	0.3794	14	0	0.78	0.5451	6	1.21E+7	0.564995	3
Eu ₂ VO ₄	0.947	0.3565	7	0	0.64	0.4819	3	3800.0	0.544743	3
Tm ₂ Ti ₂ O ₇	0.88	0.3759	13	0	0.67	0.4578	2	1.9E+12	0.866678	4
Nd ₂ CuO ₄	0.983	0.3455	4	0	0.73	0.5091	10	400.0	0.241985	2
Eu ₂ CuO ₄	0.947	0.3565	7	0	0.73	0.5091	10	120.0	0.259526	2
Gd ₂ Ti ₂ O ₇	0.938	0.3878	7	0	0.67	0.4578	2	2.0E+12	0.859095	4
Y ₂ Ti ₂ O ₇	0.9	0.4069	0	1	0.67	0.4578	2	3.0E+12	0.848231	4
Nd ₂ Ti ₂ O ₇	0.983	0.3455	4	0	0.67	0.4578	2	3.2E+12	0.838225	4
Pr ₂ Ni ₂ O ₄	0.99	0.3417	3	0	0.6	0.5831	8	15.0	0.027248	1
Tm ₂ V ₂ O ₇	0.88	0.3759	13	0	0.64	0.4819	3	920.0	0.560918	3
Gd ₂ CuO ₄	0.938	0.3878	7	0	0.73	0.5091	10	18000.0	0.541849	3
Yb ₂ Ti ₂ O ₇	0.868	0.3794	14	0	0.67	0.4578	2	6.2E+12	0.838675	4
La ₂ Ti ₂ O ₇	1.032	0.3577	0	1	0.67	0.4578	2	1.0E+13	0.862601	4
La ₃ Fe ₂ O ₁₂	1.032	0.3577	0	1	0.78	0.5451	6	87400.0	0.551694	3
SmVO ₄	0.958	0.353	6	0	0.64	0.4819	3	9.0E+5	0.546823	3
Pr ₂ Ti ₂ O ₇	0.99	0.3417	3	0	0.67	0.4578	2	2.3E+11	0.863580	4
Eu ₂ Ti ₂ O ₇	0.947	0.3565	7	0	0.67	0.4578	2	3.2E+12	0.840504	4
Lu ₂ Ti ₂ O ₇	0.861	0.416	14	0	0.67	0.4578	2	5.3E+12	0.858584	4
Nd ₂ Fe ₂ O ₁₂	0.983	0.3455	4	0	0.78	0.5451	6	6.99E+6	0.546813	3
Y ₃ Fe ₂ O ₁₂	0.9	0.4069	0	1	0.78	0.5451	6	2.9E+7	0.549106	3
Tb ₂ Ti ₂ O ₇	0.923	0.3633	9	0	0.67	0.4578	2	9.3E+10	0.858364	4

现, 希土复氧化物中各金属元素的离子半径、轨道能级、最外层电子数是决定电阻率 ρ 大小的重要因素。

为了根据元素化学键参数预报 ρ 的范围, 为进一步的材料设计提供准确的参考信息, 我们利用神经网络反向传播模型, 研究了元素参数与 ρ 的关系。

共收集了 33 个样本, 作为研究对象。根据电阻率 ρ 的大小将化合物分为四类: 第 1 类: $\rho < 20$; 第 2 类: $20 < \rho < 500$; 第 3 类: $500 < \rho < 3 \times 10^7$; 第 4 类: $3 \times 10^7 < \rho < 1 \times 10^{13}$ 。

在神经网络模型中, 随机选取 24 个样本作为神经网络的学习教材, 以各金属元素的离子半径、轨道能级、最外层电子数 (注: 本文所选数据全部为量子化学计算数据) 等元素特征作为输入。将四类样本的输出特征依次应为 0.03 (第 1 类); 0.25 (第 2 类); 0.55 (第 3 类); 0.85 (第 4 类), 神经网络的隐蔽层为 14 个神经元。训练完毕后, 收敛误差为 0.001。

为了考验建立的神经网络模型, 首先将 24 个训练样本一一输入。判别结果见表 1, 可见正确率 = 100%。然后, 取未参加训练的 9 个样本, 将其作为“未知”样本, 由神经网络判别其电阻率范围, 按照判别值与期望输出值的接近程度, 决定其归属哪一类, 即第一类化合物判别区间: (0.0, 0.14), 第二类化合物判别区间: (0.14, 0.4), 第三类化合物判别区间: (0.4, 0.7), 第四类化合物判别区间: (0.7, 1)。判别结果见表 2, 可见, 神经网络的预报结果完全正确。

表 2 9 个预测样本

Table 2 Nine Predicting Samples

compound	R(Ra+3)	E(6s,Ra)	Nf(Ra+3)	Nd(Ra+3)	R(M+3)	E(4s,M)	Nd(M+3)	result of NN	kind	resistance
La ₂ NiO ₄	1.032	0.3577	0	1	0.6	0.5831	8	0.020047	1	5
Sm ₂ CuO ₄	0.958	0.353	6	0	0.73	0.5091	10	0.352993	2	92
Yb ₂ V ₂ O ₇	0.868	0.3794	14	0	0.64	0.4819	3	0.555648	3	1300
Lu ₂ V ₂ O ₇	0.861	0.416	14	0	0.64	0.4819	3	0.668109	3	1600
Sm ₃ Fe ₃ O ₁₂	0.958	0.353	6	0	0.78	0.5451	6	0.665765	3	3.8E+6
Er ₂ Ti ₂ O ₇	0.901	0.3565	7	0	0.67	0.4578	2	0.797887	4	7.0E+11
Ho ₂ Ti ₂ O ₇	0.901	0.3697	11	0	0.67	0.4578	2	0.920577	4	8.1E+11
Sm ₂ TiO ₇	0.958	0.353	6	0	0.67	0.4578	2	0.789282	4	1.8E+12
Dy ₂ Ti ₂ O ₇	0.912	0.3666	10	0	0.67	0.4578	2	0.866332	4	3.7E+12

神经网络化学模式识别程序已用 C 语言在 VAX 8350 小型机上实现。上述例子中, 神经网络训练时间 ≈ 800 秒, 识别一个样本的时间数毫秒, 可见神经网络的识别速度是相当快的。

结 论

本文利用人工神经网络的高度的处理多因子、多类和非线性问题的能力, 研究了非 ABO₃ 希土复氧化物各金属元素化学键参数 (微观量) 与化合物电阻率范围 (宏观量) 之间的复杂关系, 建立了由化学键参数预测电阻率大小的神经网络模型, 得到了 100% 的拟合效果与 100% 的预测效果。这表明所选化学键参数与电阻率大小确有较好的相关性, 决定着化合物导电的性质。此外, 运用已建立的网络模型, 根据化合物的化学式, 能够用多维键参数预测它的电阻率范围, 从而为探索、研制有关的新材料提供参考信息。诚然, 由于希土复氧化物本身相当复杂, 影响电阻率大小的因素也是非常多的, 本文仅为初步尝试, 不过, 依据本工作的方法与结果, 有可能成为化合物分析与材料设计的辅助手段。

参 考 文 献

- [1] 刘征先、陈念贻, 金属学报, 17, 652(1981).
[2] 刘征先、俞忘中等, 分子科学与化学研究, 3, 4, 63(1983).
[3] R Hecht-Nielsen, Theory of the Backpropagation Neural Network, Int. J. Conf. on Neural Network, Washington D.C., June 1989.

RECOGNITION OF THE RESISTANCE RATE OF R.E.COMPLEX OXIDES OF NON- ABO_3 TYPE BY NEURAL NETWORK

Cai Yudong Gan Junren Yao Linshen Liu Honglin Chen Nianyi

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica, Shanghai 200050)

At present, neural network has brought wide attention in pattern recognition and other fields. The back-propagation neural network model, algorithm and its application to the predictin of the resistance rate of R.E. complex oxides of non- ABO_3 type were presented in this paper . The experimental results showed that the correct rate of neural network reached 100%. Therefore the neural network method might be referred as an assistant technique for analysis of compound and material design.

Keywords: neural network pattern recognition analysis of compound material design