

自组织人工神经网络在氟化物非晶态形成的判别条件中的应用

蔡煜东 许伟杰 陈念貽
(中国科学院上海冶金研究所, 上海 200050)

本文运用 T.Kohonen 自组织人工神经网络, 利用化学键参数法, 研究了三元系氟化物非晶态形成的判别条件, 建立了相应的算法判别智能软件。识别成功率较高。结果表明, 该方法性能良好, 可望成为研究化合物非晶态形成条件的有效的辅助手段。

关键词: 氟化物 非晶态形成条件 人工神经网络 T.Kohonen 自组织模型

一. 人工神经网络—T.Kohonen 自组织模型

人工神经网络(ANN)是八十年代中期迅速兴起的一门非线性科学, 它力图模拟人脑的一些基本特性, 如自适应性、自组织性、容错性等, 已在模式识别、数据处理及自动化控制等领域得到了初步的应用, 取得了相当好的效果^[1]。

1984 年, T.Kohonen 提出了著名的自组织特征映射人工神经网络, 它是一个简单的双层网络 (见图 1), 每个输入节点与所有输出节点通过权 w 相联系, 实现对输入信号的非线性降维映射。映射中保持拓扑不变性, 即把拓扑意义下相似的输入映射到相近的输出节点上。Kohonen 网络目前被广泛应用于模式识别, 联想存储, 组合优化和机器人控制等问题中^[2,3]。

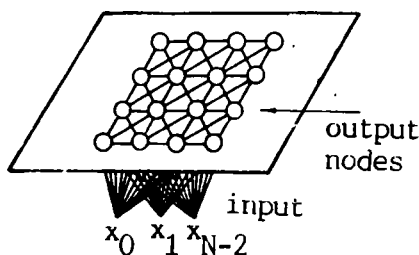


图 1 T.Kohonen 的自组织网络结构

Fig.1 Structure of T.Kohonen self-organization neural network

自组织网络在能被用来进行正确分类之前需要经过一个网络学习过程, 这是一种无教师指导的学习, 网络权根据输入的训练样本进行自适应, 自组织, 逐渐收放到样本空间内需划分的子集中心。经过多次训练后, 网络具有了对学习样本的记忆、联想的能力。

网络学习算法如下:

设样本特征数 (输入节点) 为 N , 训练样本数 (输出节点) 为 K 。

Step1: 随机给定网络初始权

$$0 < w_{ij} < 1, i=0,1,\dots,N-1; j=0,1,\dots,K-1$$

Step2: 输入一个新样本

$$x = [x_0, x_1, \dots, x_{N-1}]^T$$

计算 x 到所有输出节点的“距离”

$$dj(t) = \sum_{i=0}^{N-1} (x_i - w_{ij}(t))^2, j=0,1,\dots,K-1$$

Step3: 选择与 x 距离最近的节点 j^*

$$dj^*(t) = \min_{0 \leq j \leq K-1} \{dj(t)\}$$

Step4: 调整网络权

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha(t)(x_i - w_{ij}(t)), \quad j \in NEj^*(t)$$

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t), \quad j \notin NEj^*(t)$$

其中 $i=0,1,\dots,N-1; 0 < \alpha(t) < 1$, 增益函数, 随时间递减; $NEj^*(t)$, 节点 j^* 的邻域, 随时间递减。

Step5: 转 Step2.

max

当所有样本输入一遍后, 满足 $0 < i < N-1 \quad \{|w_{ij}(t+1) - w_{ij}(t)|\} < \varepsilon$

$$0 < j < K-1$$

或达到预先取定的迭代次数后, 学习结束。否则进入下一轮学习, 关于算法的收敛性证明可参阅[3]。

二. T.Kohonen 网络应用于三元系氟化物非晶态形成的判别

研究表明^[4]: 对于三元系氟化物, 三元系中的各阳离子半径 R_i 与 F 的半径 R_F 之比 R_i/R_F , 以及各个阳离子的电负性 X_i 与 F 的电负性 X_F 之比 X_i/X_F 是决定其形成非晶态的重要因素。

首先将样本分为两类: 第一类, 形成非晶态; 第二类, 不形成非晶态。随机选取 28 个样本作为神经网络的训练集, 以其特征变量($R_1/R_F, R_2/R_F, R_3/R_F, X_1/X_F, X_2/X_F, X_3/X_F$)作为神经网络的输入, 输出矩阵构成 7×4 点阵。训练集的收放度达 10^{-5} 。经过学习, 神经网络能完全正确地划分这些样本, 建立了化学键参数与非晶态之间的复杂对应关系。见表 1 和图 2。

②	①	②	②	①	①	①
21	22	23	24	25	26	27
②	①	①	②	①	①	①
14	15	16	17	18	19	20
①	①	②	②	①	①	①
7	8	9	10	11	12	13
①	②	②	①	①	②	②
0	1	2	3	4	5	6

图 2 分类结果

Fig.2 Results of classification

note: ①—kind 27—position of node

表 1 三元系氟化物数据集
Table 1 Data of Trinal Fluoride

R_1/R	R_2/R	R_3/R	X_1/X	X_2/X	X_3/X	position of node	kind
0.588235	0.727941	0.992647	0.384615	0.358947	0.230769	19	1
0.588235	0.845588	0.992647	0.384615	0.307692	0.230769	27	1
0.588235	0.727941	0.845588	0.384615	0.358947	0.307692	25	1
0.683823	0.727941	0.992647	0.307692	0.358974	0.230769	26	1
0.367647	0.683823	0.727941	0.384615	0.307692	0.25641	22	1
0.367647	0.683823	0.992647	0.384615	0.307692	0.230769	13	1
0.470588	0.588235	0.933823	0.461538	0.358974	0.410256	15	1
0.544117	0.639705	0.992647	0.410256	0.307692	0.223076	12	1
0.441176	0.727941	0.992647	0.243589	0.358974	0.230769	4	1
0.683823	0.727941	0.992647	0.307692	0.358974	0.230769	18	1
0.595588	0.683823	0.992647	0.333333	0.307692	0.230769	11	1
0.544117	0.713235	0.992647	0.410256	0.435897	0.230769	20	1
0.441176	0.698529	0.727941	0.243589	0.230769	0.358974	16	1
0.441176	0.727941	0.977941	0.243589	0.358974	0.205128	3	1
0.588235	0.992647	0.992647	0.384615	0.230769	0.230769	0	1
0.588235	0.830882	0.830882	0.384615	0.25641	0.25641	8	1
0.588235	0.727941	0.992647	0.384615	0.25641	0.230769	7	1
0.441176	0.698529	1.088235	0.243589	0.230769	0.205128	5	2
0.477941	0.698529	0.977941	0.307692	0.230769	0.205128	2	2
0.441176	0.477941	0.698529	0.243589	0.307692	0.230769	24	2
0.441176	0.477941	0.727941	0.243589	0.307692	0.25641	23	2
0.367647	0.477941	0.698529	0.384615	0.307692	0.230769	17	2
0.477941	0.698529	0.727941	0.307692	0.230769	0.25641	9	2
0.698529	0.977941	1.088235	0.230769	0.205128	0.205128	1	2
0.367647	0.441176	0.977941	0.384615	0.243589	0.205128	6	2
0.147058	0.698529	0.977941	0.51282	0.230769	0.205128	14	2
0.30147	0.698529	0.977941	0.487179	0.230769	0.205128	21	2
0.367647	0.441176	0.698529	0.384615	0.243589	0.230769	10	2

为了进一步考验所建立的模型，将未参加训练的 4 个样本作为“未知”样本，由已掌握了知识信息的神经网络对其进行判别，根据其最近输出节点（对应内积最大值点，即最大相似点）的类别决定其类别。由表 2 可见，判别结果与实际情况完全一致。

表 2 三元系氟化物训练数据
Table 2 Training Data of Trinal Fluoride

R_1/R	R_2/R	R_3/R	X_1/X	X_2/X	X_3/X	position of node	predicting kind	actual kind
0.588235	0.830882	0.992647	0.384615	0.25641	0.230769	0	1	1
0.367647	0.727941	0.992647	0.384615	0.358974	0.230769	20	1	1
0.367647	0.441176	1.242647	0.384615	0.243589	0.192307	6	2	2
0.441176	0.727941	0.992647	0.243589	0.25641	0.230769	5	2	2

结 果 与 讨 论

本文运用 T.Kohonen 自组织人工神经网络探讨氟化物非晶态形成条件，取得了令人满意的结果。此外，神经网络方法同一般多因子判别法相比，有如下优点：

一、容错能力强

神经网络模型中，知识信息分布存储于各个单元中，个别输入信号误差变大不会引起识别错误，即用一个不完整或模糊的信息，神经网络可联想出存贮在记忆中的某个完整、清晰

的图像来。因此不失一般性, 本研究中将每个未知样本的第 5 个输入信号 (X_5) 各增加 0.001 作为“构造样本”进行识别, 它们与原来样本的识别结果比较见表 3。

表 3 个别输入信号误差变大对网络性能的影响

Table 3 Influence of the Increasing Error to Performance of Network

closest position of node	predicting kind	closest position of node	predicting kind
0	1	0	1
20	1	20	1
6	2	6	2
5	2	5	2

二. 判别速度快

训练好的神经网络在进行模式识别时仅需作少量的加法和乘法, 因此判别速度快。

有鉴于此, 随着人工神经网络理论的进一步发展, 可望开辟化合物非晶态形成条件判别的新途径。

参 考 文 献

- [1] R., Hecht-Nielsen, "Theory of the Backpropagation Neural Network", Int. J. Conf. on Neural Network, Washington D. C., June, 1989.
- [2] Lippmann, R. P., *IEEE ASSP*, 4, 22(1987).
- [3] 尹红风、戴汝为, 模式识别与人工智能, 3 (1), 1(1990).
- [4] 骆梅青、程兆年等, 模式识别—化学键参数在氧化物非晶态形成的判别条件的应用, 第三届全国计算机化学学术报告会论文集, pp.102—103.
- [5] Frank, I. E., Kowalski, B. R., *Anal. Chem.*, 54, 232(1982).

AN APPLICATION OF T.KOHONEN SELF ORGANIZATION ARTIFICIAL NEURAL NETWORK TO THE ESTIMATION OF THE FORMATION CONDITION FOR AMORPHOUS PHASE OF TRINAL FLUORIDE

Cai Yudong Xu Weijie Chen Nianyi

(Shanghai Institute of Metallurgy, Chinese Academy of Science, Shanghai 200050)

In this paper, T.Kohonen self-organization artificial neural Network was applied to the estimation of the formation condition for amorphous phase of trinal fluoride by using the parameters method of chemical bonds, and the intelligent software for estimation was established. The successful rate is high. The results showed that the performance of the neural network was good, and therefore it might be referred as an effective assistant technique for formation condition for amorphous phase of compounds.

Keywords: fluoride condition for amorphous formation artificial neural network
T. Kohonen self-organization model