

材料性能的建模方法

王思昭

(北京工业大学 材料科学与工程学院, 北京 100022)

摘要: 提出一种用非线性函数的线性组合来预测材料性能的建模方法. 在叙述其数学原理后, 给出了确定参数的数学方法, 同时给出5个实例的建模结果. 得到的计算结果与理论符合良好, 在一定程度上可以预测出材料性能. 讨论了多元函数的建模.

关键词: 材料性能; 建模方法; 拟合曲线; 性能预测

中图分类号: TB 115; O 242

文献标识码: A

文章编号: 0254-0037(2002)02-0244-05

材料的各种性能(力学、热学及光学电学的性能)对材料的应用,特别是新材料的应用,起着关键的作用. 近代数学物理科学的发展,已对某些材料的性能作出了良好的计算及进行预测,从而诞生所谓的计算材料科学. 然而不可否认的是,并不是任何材料的性能都可以计算出来的,特别是一些新型的复合材料、纳米材料,等等,它们性能的计算仍是困难的. 因此在材料科学中,经常是通过很多次试验求出所需的性能数据. 这些性能数据可在工程材料手册中找到,然而这产生几个问题:①数据的完全性,即有些数据并未列出,这涉及要作更多的试验. ②试验可能不容易或代价太高. ③所要求的性能从理论原理上预测或计算出来当前是不可能的. 是否能根据有限的试验数据建立一个函数关系? 它能描述试验数据,还能预测可能未做的试验数据? 作者将讨论一个建模的方法,对上述问题作出肯定的回答.

1 单变量函数的近似方法

1.1 基本非线性函数的选取

材料的性能(因变量 y)往往依据它的某些因素(自变量 x),例如金属的应力(stress)与应变(strain)关系. 这里主要考虑因变量依赖于一个自变量的改变而使另一些自变量保持不变的情形.

先观察取自金属手册^[1]中一个灰铁的应力应变关系(如图1).

这个单变量函数图形很类似于所谓的S型函数

$$y = S(ax) = 1 / (1 + e^{-ax}), \quad a \neq 0 \quad (1)$$

与图2相比,纵坐标位置及大小有所摆动. 这种S型函数体现于自变量 x 与因变量 $S(ax)$ 的关系中. 开始 x 变化时, $S(ax)$ 很小;当 x 达到 x_0 时, $S(ax)$ 迅速近似按比例常数 $a > 0$ 而增加;当 x 达到 x_1 时, $S(ax)$ 开始趋于平稳不变. 注意 $a > 0$ 的大小只表现 $S(ax)$ 对 x 变化而改变的陡峭程度;如果 $a < 0$, $S(ax)$ 的曲线形式(如图3). x 增加时,在 x_0 处 $S(ax)$ 按比例常数 $a < 0$ 而减小. 当 x 达到 x_1 时, $S(ax)$ 开始近似平稳不变, $|a| > 0$ 的大小只反应 $S(ax)$ 对 x 变化的陡峭程度. 本文取 $S(ax) = (1 + e^{-ax})^{-1}$ 为原始的非线性函数. 注意图2,在 $x = 0$ 时 $S(0) = 1/2$,而实际图1中 $x = 0$ 时的 $S(0)$ 的位置显然不是 $1/2$. 为克服这一困难,只需对 x 作某个平移即可. 取 $S(ax)$ 形为 $S(ax + b) = [1 + e^{-a(x+b)}]^{-1}$,这使曲线 $S(ax)$ 沿 x 轴平行移动,右移或是左移由 b 的符号与数值所决定,于

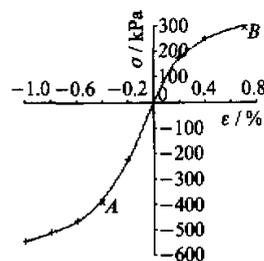


图1 灰铁的应力-应变图

收稿日期: 2001-06-07.

作者简介: 王思昭(1978-),女,本科生.

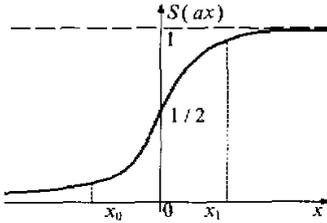


图2 S(ax)函数(a=1)的图形

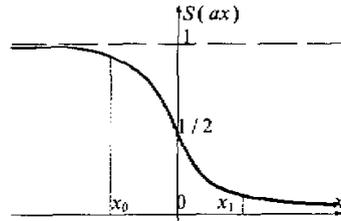


图3 a = -1 < 0时S(ax)的图形

是曲线 $S(ax)$ 与 y 轴的交点就不在 $y = S(0) = 1/2$ 点了. $S(ax)$ 右移时, 曲线与 y 轴交点小于 $1/2$; 左移时, 曲线与 y 轴交点大于 $1/2$. 以上讨论中的曲线 $S(ax + b)$ 的值的最大最小值的差均限制在 0 与 1 之间, 实际研究对象中 x 的值并不受此限制, 因此 $S(ax + b)$ 如乘以常数 $c (c > 0)$ 为 $cS(ax + b)$, 可使 $S(ax + b)$ 放大 c 倍, 而使 $S(ax + b)$ 不受限制在 0 和 1 之间. 如 $c < 0$, 则意味着将 $S(ax + b)$ 放大 $|c|$ 倍后, 再绕 x 轴旋转 π 度后的图形. 如果需要将 $cS(ax + b)$ 图形沿 y 轴平行移动距离 d , 则可取函数为 $cS(ax + b) + d$; d 可为负值.

总结以上讨论, 如果当 x 由 x_1 改变到 x_2 时, 因变量 y_1 改变至 y_2 的改变量 $\Delta y = y_2 - y_1$ 一般为上升 ($\Delta y > 0$), 下降 ($\Delta y < 0$), 或不变 ($\Delta y = 0$) 的 3 种情况. 则函数 $cS(ax + b) + d$ 描述 $x_1 \rightarrow x_2$ 时, 在平面 (x, y) 上任意处, 因变量改变的情况, 函数 $cS(ax + b) + d$ 是材料性能建模所用的基本 S 型非线性函数.

1.2 用基本非线性函数(S型函数)的和近似任意函数

材料的性能显示如图 4. 图 4 并不是典型的 S 型函数图形, 那么怎样用基本 S 型非线性函数 $cS(ax + b) + b$ 去近似图 4 的曲线呢? 因为每个基本 S 型非线性函数都有一个上升或是下降部分, 而图 4 曲线可近似划分成 4 个线段 l_1, l_2, l_3 与 l_4 . 如果每个线段 $l_i (i = 1, 2, 3, 4)$ 用一个基本 S 型非线性函数 $c_i S(a_i x + b_i) + d_i$ 描述, 则图 4 的函数 $y = f(x)$ 可用 4 个基本 S 型非线性

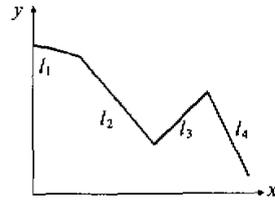


图4 材料性能显示

函数的和 $\sum_{i=1}^4 [c_i S(a_i x + b_i) + d_i]$ 去近似, 即 $y = f(x) \approx \sum_{i=1}^4 [c_i S(a_i x + b_i) + d_i]$. 显然, 近似的良好与否决定于参量集 $\{a_i, b_i, c_i, d_i\}$ 的选择, 还要最佳参量选择的结果是否符合函数 $y = f(x)$ 的图形.

2 最佳参量的确定及其算法

在材料性能试验中, 由选取 x_1, x_2, \dots, x_n , 得出因变量的值 y_1, y_2, \dots, y_n , 这一组点 $(x_\mu, y_\mu), \mu = 1, 2, \dots, n$ 确定一个未知函数, $y_\mu = f(x_\mu), \mu = 1, 2, \dots, n$ 的图形, 现在要求 $\{y_\mu\}$ 用非线性 S 型函数 $g(x) = \sum_{i=1}^m [c_i S(a_i x + b_i) + d_i] = \sum_{i=1}^m [c_i S(a_i x + b_i)] + d$, $d = \sum_{i=1}^m d_i$ 去逼近, 显然有

$$y_\mu = f(x_\mu) \approx \sum_{i=1}^m [c_i S(a_i x_\mu + b_i)] + d = g(x_\mu) \tag{2}$$

在点 y_μ 的误差为 $\sum_{i=1}^m [c_i S(a_i x_\mu + b_i) + d_i] - y_\mu = g(x_\mu) - y_\mu$ (3), 由于共有 n 个试验点 y_1, y_2, \dots, y_n , 均方根误差为

$$E = \left\{ \frac{1}{n} \sum_{\mu=1}^n [g(x_\mu) - y_\mu]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \tag{4}$$

本文的任务是要选取参量 $(a_i, b_i, c_i, d_i); i = 1, 2, \dots, m$. 使得 E 最小, 从而使 $\sum_{i=1}^m [c_i S(a_i x + b_i) + d_i]$ 最密切接近于 $y_\mu = f(x_\mu)$, 对 $\mu = 1, 2, \dots, n$ 成立, 这里一般取 $m = 2 \sim 4$.

由式(4)有 $E = E(\{a, b, c, d\})$, 故

$$\Delta E = \sum_{i=1}^m \left[\left(\frac{\partial E}{\partial a_i} \Delta a_i + \frac{\partial E}{\partial b_i} \Delta b_i + \frac{\partial E}{\partial c_i} \Delta c_i \right) \right] + \frac{\partial E}{\partial d} \Delta d \quad (5)$$

多变量函数 $E(\{a, b, c, d\})$ 关于 $\{a, b, c, d\}$ 为极小的必要条件是: $\partial E / \partial a_i = 0, \partial E / \partial b_i = 0, \partial E / \partial c_i = 0, \partial E / \partial d = 0 (i = 1, 2, \dots, m)$, 原则上此解 $3m + 1$ 个非线性联立的方程组而求 $3m + 1$ 个参量 $\{a, b, c, d\}$, 而本文用梯度下降法解决此问题.

因为要 $\Delta E \rightarrow$ 最小, 可由 $\partial E / \partial a_i, \partial E / \partial b_i, \partial E / \partial c_i, \partial E / \partial d \rightarrow 0$ (对所有 i 成立) 而达到, 故可按 $\partial E / \partial a_i, \partial E / \partial b_i, \partial E / \partial c_i, \partial E / \partial d$ 的负方向搜索 $\{a, b, c, d\}$, 即采用

$$\begin{aligned} \Delta d_i &= -\alpha (\partial E / \partial d), \text{ 或 } d(k+1) = d(k) - \alpha (\partial E / \partial d)|_k \\ \Delta c_i &= -\alpha (\partial E / \partial c_i), \text{ 或 } c_i(k+1) = c_i(k) - \alpha (\partial E / \partial c_i)|_k \\ \Delta b_i &= -\alpha (\partial E / \partial b_i), \text{ 或 } b_i(k+1) = b_i(k) - \alpha (\partial E / \partial b_i)|_k \\ \Delta a_i &= -\alpha (\partial E / \partial a_i), \text{ 或 } a_i(k+1) = a_i(k) - \alpha (\partial E / \partial a_i)|_k \end{aligned} \quad (6)$$

时, 由式(5)有

$$\begin{aligned} \Delta E &= \sum_{i=1}^m (-1) \alpha \left[\left(\frac{\partial E}{\partial a_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial E}{\partial b_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial E}{\partial c_i} \right)^2 \right] + (-1) \alpha \left(\frac{\partial E}{\partial d} \right)^2 = \\ &= \frac{-1}{\alpha} \sum_{i=1}^m [\Delta a_i^2 + \Delta b_i^2 + \Delta c_i^2] + \left(\frac{-1}{\alpha} \right) \Delta d^2 < 0 \end{aligned} \quad (7)$$

其中 α 为常数, $0 < \alpha < 1$, 控制着在 $\partial E / \partial a_i, \partial E / \partial b_i, \partial E / \partial c_i, \partial E / \partial d$ 负方向下降的速度以搜索 $\{a, b, c, d\}$, 当 $\Delta a_i, \Delta b_i, \Delta c_i, \Delta d \rightarrow 0$ 时, 由式(6)可见 $\partial E / \partial a_i, \partial E / \partial b_i, \partial E / \partial c_i, \partial E / \partial d \rightarrow 0$, 而在这个过程中, 由式(7)可见误差 $\Delta E \rightarrow 0$. 式(6)为求得 $\{a, b, c, d\}$ 极值的算法.

对于均方根误差函数 E (见式(4)), 具体计算后有

$$\begin{aligned} \Delta d &= -\alpha \frac{\partial E}{\partial d} = \left(\frac{-\alpha}{n} \right) e^{-1/2} \sum_{\mu=1}^n (g(x_\mu) - y_\mu) \\ \Delta c_i &= -\alpha \frac{\partial E}{\partial c_i} = \left(\frac{-\alpha}{n} \right) e^{-1/2} \sum_{\mu=1}^n (g(x_\mu) - y_\mu) S(a_i x_\mu + b_i) \\ \Delta b_i &= -\alpha \frac{\partial E}{\partial b_i} = \left(\frac{-\alpha}{n} \right) e^{-1/2} \sum_{\mu=1}^n (g(x_\mu) - y_\mu) c_i S'(a_i x_\mu + b_i) \\ \Delta a_i &= -\alpha \frac{\partial E}{\partial a_i} = \left(\frac{-\alpha}{n} \right) e^{-1/2} \sum_{\mu=1}^n (g(x_\mu) - y_\mu) c_i x_\mu S'(a_i x_\mu + b_i) \end{aligned} \quad (8)$$

此处 $e = \frac{1}{n} \sum_{\mu=1}^n (g(x_\mu) - y_\mu)^2, S'(a_i x_\mu + b_i) = S(a_i x_\mu + b_i) (1 - S(a_i x_\mu + b_i))$, 算法(8)的迭代表达为

$$\begin{aligned} d_i(k+1) &= d(k) - \frac{\alpha}{ne^{1/2}} \sum_{\mu=1}^n (g(x_\mu) - y_\mu)_k \\ c_i(k+1) &= c_i(k) - \frac{\alpha}{ne^{1/2}} \sum_{\mu=1}^n [(g(x_\mu) - y_\mu) S(a_i x_\mu + b_i)]_k \\ b_i(k+1) &= b_i(k) - \frac{\alpha}{ne^{1/2}} \sum_{\mu=1}^n [(g(x_\mu) - y_\mu) c_i S(a_i x_\mu + b_i) (1 - S(a_i x_\mu + b_i))]_k \\ a_i(k+1) &= a_i(k) - \frac{\alpha}{ne^{1/2}} \sum_{\mu=1}^n [(g(x_\mu) - y_\mu) c_i x_\mu S(a_i x_\mu + b_i) (1 - S(a_i x_\mu + b_i))]_k \end{aligned} \quad (9)$$

3 几个实例的建模计算

从工程材料性能手册中查到的试验数据作为例子进行建模计算. 图5是合金钢中 Mn 元素的质量分

数与合金钢强度增加因子的关系曲线^[1]，其中 $w(\text{Mn})$ 为 0.5、1.0、1.5、2.0、2.4；抗拉强度增加因子 F 为 1.0、1.11、1.25、1.43、1.68、2.0。通过前述算法求得，当误差 $E \leq 0.113$ 时， $d = 0.321\ 026\ 2$ ， $c = 7.544\ 378$ ， $b = -3.658\ 328$ ， $a = 0.816\ 962\ 1$ ；这时非线性函数(2)逼近实际曲线非常良好。

另一个例子是一种灰铁(gray iron)的应力-应变试验结果^[1]。应变 x 数据：-1.0、-0.8、-0.6、-0.4、-0.2、0、0.2、0.4、0.6、0.7；应力 y 数据：-550、-520、-470、-390、-225、0、175、225、280、290。当误差 $E \leq 0.026\ 9$ 时，参量值 $d = -535.437\ 9$ ， $c = 833.141\ 2$ ， $b = 0.603\ 309$ ， $a = 5.496\ 853$ ，这时试验数据所形成的曲线与模拟计算出的数据吻合得很好。

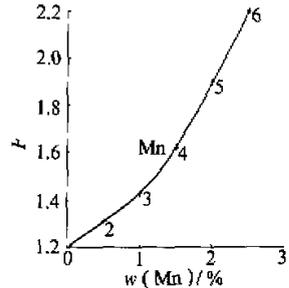


图5 $w(\text{Mn})$ 随钢强度增强的效果图

4 材料性能的预测

建模是要求得到一个函数，它能使此函数的自变量与因变量的数据与真实的试验数据吻合或逼近得很好。然而即使曲线吻合得比较好，建模的任务还未完成，更重要的实际问题是：由于材料性能试验有时候是很复杂，试验费时又费钱，要从有限次的试验数据中，推断或预测未做过的试验情况。显然这有重要的实际意义。现通过前面两个例子说明。

取前面6次试验中的前5次数据建模，预测第6次试验的情况。先用试验数据进行函数逼近或曲线拟合。用前述算法求得 $d = 0.716\ 739\ 5$ ， $c = 7.544\ 477$ ， $b = -3.236\ 672$ ， $a = 0.656\ 376\ 1$ (当 $E \leq 0.003\ 189\ 99$ 时)，第6次的试验数据是 $x = 2.4$ ， $y = 2.0$ ；实际预测数据 $x = 2.4$ ， $y = 1.92$ 。在前第2个性能试验中，用了10个数据中的8个 (x_i ：-1.0、-0.8、-0.6、-0.2、0.0、0.2、0.4、0.6； y_i ：-550、-520、-470、-225、0、175、255、280) 进行函数逼近而建模，求得 $d = -532\ 716\ 9$ ， $c = 814.065\ 7$ ， $b = 0.629\ 477\ 7$ ， $a = 5.699\ 917$ (注意未采用 $A(x, y) = (-0.4, -390)$ 与 $B(x', y') = (0.7, 290)$)，设 $x = -0.4$ 及 $x' = 0.7$ 时的试验未做，用上述参量 a, b, c, d 的值代入非线性函数，计算当 $x = -0.4$ 及 $x' = 0.7$ 时；分别得 $y = -390$ (试验值 -400)， $y' = 283.304$ (试验值 290)，结果曲线吻合 (如图1)。证明采用的非线性函数及算法是合适的。

5 更复杂的情况及多元函数的建模

一般，用非线性函数 $y = (c / (1 + e^{-ax-b})) + d$ 去进行工程和科学中的很多情况的建模是很合适的；当试验数据的曲线有很多拐点的时候，就不一定适用了。本文已讨论过基本的非线性函数 $y = c / (1 + e^{-ax-b}) + d$ 的线性组合

$$y = \sum_{j=1}^m \left[\frac{c_j}{1 + e^{-a_j x - b_j}} + d_j \right] = \sum_{j=1}^m \frac{c_j}{1 + e^{-a_j x - b_j}} + d$$

去进行复杂情况的建模， $m = 2 \sim 4$ 。然而当试验数据 (x, y) 较大时，使指数 e^{-ax-b} 很大，在计算机上运行时，往往因计算数据太大而溢出， $y = S(ax) = 1 / (1 + e^{-ax})$ 的值在 0 与 1 之间。既然

$$y = \sum_{j=1}^m \frac{c_j}{1 + e^{-a_j x - b_j}} + d$$

由上述分析可充分逼近常见函数关系，故将其再次投放 S 型函数中作为自变量，而有

$$y = S\left(\sum_{j=1}^m \frac{c_j}{1 + e^{-a_j x - b_j}} + d\right)$$

它应也包含有必要的信息，而不影响复杂情况的函数逼近，为此取得焊锡的熔点与铅质量分数的试验关系数据^[2]：铅质量分数 $x = 0, 10, 20, 25, 30, 35, 40, 50, 70, 80, 90$ ；熔点 $y = 232, 216, 198, 189, 184, 184, 191, 220, 260, 275, 295$ 。其中试验数据 $A(x, y) = (60, 240)$ ； $B(x', y') = (100, 322)$ 以备作预测。作者用

$$y = S \left(\sum_{j=1}^m \frac{c_j}{1 + e^{-a_j x - b_j}} + d \right)$$

作曲线拟合, 得到很好的结果(见图6)。但要注意这时数据 x 与 y 皆预处理置放在区间 $[0, 1]$, 这很容易通过 $y' = (y - y_{\min}) / (y_{\max} - y_{\min})$ 及 $x' = (x - x_{\min}) / (x_{\max} - x_{\min})$ 而做到, 用所得 y' 不难得到 y , 用 $(x, y) = (60, 240)$; $(x', y') = (100, 322)$, 也得很好的预测结果。

多元未知函数 $z = f(x, y)$ 的建模很易推广得出。因为当 x 为常数时, $z = f(x, y)$ 应为 S 型函数形式; 当 y 为常数时, $z = f(x, y)$ 也应为 S 型函数形式, 故 $z = f(x, y)$ 可以近似表示 $z = c / (1 + e^{-ax - by - w}) + d$ 作者正进一步模拟计算研究材料的二元函数性能的建模。

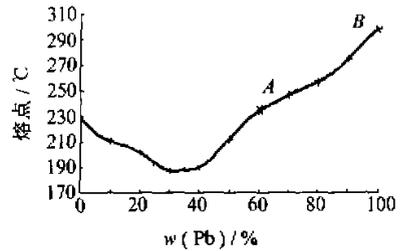


图6 $w(\text{Pb})$ 与熔点的关系

6 结束语

材料性能的理论计算, 以及计算材料科学现正受到关注, 而一些材料结构太复杂, 纯粹从物理、数学的基础上计算其性能比较困难, 因而在试验数据基础上建模是必要的。建模是要找出一个函数, 确定其参量, 使得出函数的自变量与因变量的关系符合试验数据。更重要的是由此函数能预测与推断出未进行试验的结果。

本文承蒙材料学院材料科学部陈光华老师指导, 在此表示诚挚感谢。

参考文献:

- [1] WHITE C V. Metal Handbook: Vol 1, 10th ed[M]. Ohio: ASM International, 1990. 20.
- [2] FINK D G, BEATY H W. Standard Handbook of Electrical Engineers. 13th ed[M]. New York: McGraw-Hill, 1993. 4-79.

Modeling Method for Material Behavior

WANG Si-zhao

(College of Material Science and Engineering, Beijing Polytechnic University, Beijing 100022, China)

Abstract: A modeling method of predicting material behavior by the linear combination of nonlinear functions is proposed. On the basis of analyzing its mathematical principle, the mathematical methods to decide parameters are given. Otherwise, the modeling results of five practical examples are shown. The experimental data are in good agreement with the theoretical calculation. Therefore the model can, to some extent, predict the material behavior. The modeling of multivariate function is also discussed.

Key words: material behavior; modeling method; curve fitting; behavior prediction