

ANN- 原子参数法预报合金相晶型及晶格常数 *

姚树文 郭 进 王学业 陈念贻

(中国科学院上海冶金研究所, 上海 200050)

摘要 运用人工神经网络方法, 以二元合金组成元素的电子结构为基本特征, 对二元合金相晶型作了区分, 进一步对其晶格常数作了预报, 结果令人满意。

关键词: 人工神经网络, 原子结构, 晶型, 晶格常数

我们曾用化学键参数和模式识别方法相结合, 研究合金相的规律, 取得较好的结果, 并预报合成了一系列新的合金相 (EuNi₂, EuFe₂, LaPd₅ 等)^[1,2]。但所用参数 (如元素的电负性等) 系半经验参数, 其物理意义和数值的准确性都有不够严密之处。在本工作中, 我们试图直接用人工神经网络 (Artificial Neural Network, ANN) 方法研究组成元素的原子结构与其合金相性质的关系。

1 原理方法

人工神经网络是一种数据处理的有力工具, 理论上已证明三层人工神经网络能描述任何一种数学关系^[3], 它能从实验数据中总结出复杂的数学规律, 因此是从大量实测数据中总结非线性关系的有效方法。简单的人工神经网络结构如图 1。

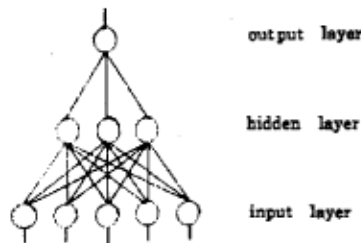


图 1 一个典型的人工神经网络结构

Fig.1 A typical neural network model

三层人工神经网络包括输入层, 隐节层和输出层。输入层的节点数等于输入变量的个数, 输出层的节点数等于输出变量数, 隐节层节点数可以改变, 输入层各节点与隐节层各节点以及隐节层各节点与输出层分别由权重联接。三层人工神经网络隐节层节点个数的改变以及各个权重相对大小的不同可以描述不同数学关系。

从基本意义上说, 组成元素的电子结构是物质性质的基本决定因素, 例如, 影响合金相晶格的三大因素由组成元素的结构决定: 价电子数决定电子能带, d 电子、 f 电子决定电子转移, 而元素的原子半径是几何构型的决定因素。这里, 我们试图直接用人工神经网络方法关联组成元素的电子结构与其合金相晶型、晶格常数的关系。

人工神经网络用 BP 算法, 传递函数为 $\tanh x$, 在 586 微机上计算。合金相数据取自文献 [4,5], 输入参数为 z_1, z_2 (组成元素的价电子数), d_1, d_2 (组成元素的 d 电子数), n_1, n_2 (组成元素的最外层电子的主量子数) 以及元素的 f 电子数 (仅一个元素有 f 电子)。

2 结果与讨论

2.1 用人工神经网络关联组成元素的电子结构与其合金相的关系

2.1.1 过渡 - 非过渡元素组成的二元合金相区分

以 z_1 、 z_2 、 d_1 、 d_2 、 n_1 、 n_2 、 f 为人工神经网络的输入, 以 1986 年以前发表的合金相 AlB_2 型、Laves Phase 以及 $CuAl_2$ 型为训练集. 为了区分三种不同的晶型, 我们假设 AlB_2 型的输出值为 -1, Laves Phase 为 0, 而 $CuAl_2$ 为 1. 以 $LaGa_2$ 、 $CeGa_2$ 、 $LaHg_2$ 等 10 个 AlB_2 型, $EuMg_2$ 、 $TbMg_2$ 等 10 个 Laves 相以及 $FeSn_2$ 、 $CoSn_2$ 等 20 个 $CuAl_2$ 型合金相为训练集, 训练人工神经网络, 拟合效果很好. 为了检验人工神经网络的可靠性, 我们收集了 1986 年以后发表的二元合金相作未知预报, 结果如表 1.

表 1 过渡 - 非过渡二元合金相晶型预报

Table 1 The prediction of binary alloy phases with transition-non-transition metals

Alloy	ANN prediction value
DyMg ₂	0.002115
LuAl ₂	-0.012168
NdMg ₂	0.002115

DyMg₂、LuAl₂、NdMg₂ 的预报值均接近 0, 应为 Laves Phase, 预报结果与实验一致.

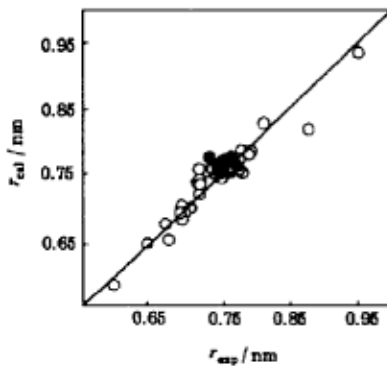


图 2 Laves 相晶格常数预报

Fig.2 The prediction of lattice constants of Laves phases

r_{cal} , r_{exp} is calculated value and experimental value of lattice constant respectively

NdHg、SmHg、AuPr、AuTm、AuNd、AuLu、AuHo、AgYb、AuTb、AuYb 合金相神经网络的输出值均接近零, 因此应为 CsCl 型, 与实验结果一致.

2.2 用人工神经网络关联组成元素的电子结构与合金相晶格常数关系

以 1980 年以前发表的合金相 Laves Phase 为训练集, 以 z_1 、 z_2 、 d_1 、 d_2 、 n_1 、 n_2 、 f 为人工神经网络的输入参数, 以相应的晶格常数为输出值. 训练集包括下列合金相 (图 2 上以空心圆表示): $NaAu_2$ 、 $CeCo_2$ 、 $BaPd_2$ 、 $CeFe_2$ 、 $BaPt_2$ 、 $CeIr_2$ 、 $TiBe_2$ 、 $CeNi_2$ 、 KBi_2 、 $CeOs_2$ 、 ZrW_2 、 YRh_2 、 YPt_2 、 ZrV_2 、 $SrPt_2$ 、 $SrPd_2$ 、 $SrRb_2$ 、 $PrOs_2$ 、 $PrNb_2$ 、 $PrIr_2$ 、 $NdIr_2$ 、 $GdMn_2$ 、 $LaPt_2$ 、 $LaIr_2$ 、 $LaMg_2$ 、 $LaAl_2$ 、 HfV_2 、 $GdRb_2$ 、 $GdPt_2$ 、 $GdIr_2$ 、 $IrFe_2$ 、 $GdFe_2$ 、 $CuBe_2$ 、 $IrCr_2$ 、

2.1.2 过渡 - 过渡元素组成的二元合金相区分

以 z_1 、 z_2 、 d_1 、 d_2 、 n_1 、 n_2 、 f 为人工神经网络的输入, 以 1986 年以前发表的 CsCl 型、CuAu 型以及 CrB 型合金相为训练集. 为了区分三种不同的晶型, 我们假设 CrB 型的输出值为 -1, CuAu 型为 1, 而 CsCl 型为 0. 以 FeTi、CoTi 等 20 个 CsCl 型, NiDy、NiEr 等 20 个 CrB 以及 AgTi、NiMn 等 20 个 CuAu 型合金相为训练集, 训练人工神经网络, 拟合结果很好, 表明人工神经网络能正确区分三种不同的晶型, 它已掌握了形成不同晶型的数学规律. 为了进一步检验寻找的规律可靠性, 我们找到了一些 1986 年后发表的合金相, 预报其晶型, 结果如表 2.

TiCr₂, NbCr₂, ZrCo₂, TiCo₂, TaCo₂, CePt₂, CeRh₂, CeRu₂, HfCo₂. 进一步, 我们收集了 1980 年发表的数个 Laves Phase 作未知, 预报它们的晶格常数, 预报集包括下列合金相 (图 2 上以实心圆表示): EuIr₂, ErIr₂, LuIr₂, ScIr₂, Tblr₂, ThIr₂, Vlr₂, LaOs₂, 预报结果令人满意.

表 2 过渡 - 过渡元素组成的二元合金相晶型预报

Table 2 The prediction of binary alloy phases with transition-transition metals

Alloy	ANN value	Alloy	ANN value
NdHg	- 0.089666	SmHg	0.099220
AuPr	0.207840	AuTm	- 0.177598
AuNd	0.161301	AuLu	- 0.231492
AuHo	- 0.082468	AgYb	- 0.205599
AuTb	- 0.047187	AuYb	- 0.205599

3 结论

以上计算结果说明: 以组成元素的电子结构为特征, 人工神经网络能够描述形成不同合金相晶型的规律, 并且定量预报合金相的晶格常数.

参 考 文 献

- 1 Chen Nianyi. *Anal. Chim. Acta.*, **1988**, **210**:175
- 2 Ning Yuantao, Chen Nianyi. *J. Less-Common Met.*, **1988**, **197**:167
- 3 Hopfield J J. *IEEE Circuit and Devices Mag.*, **1988**, **11**:3
- 4 Taylor A, Kagle B J. *Crystallographic Data on Metal and Alloy Structures*. New York: Dover Publication Inc., 1963
- 5 Massalski T B. *Binary Alloy Phase Diagrams*. Metal Park: American Society for Metals, 1986

ANN-Atomic Parameter Method Applied to Prediction of Crystal-type and Lattice Constants of Alloy Phases

Yao Shuwen Guo Jin Wang Xueye Chen Nianyi

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

Abstract Artificial neural network method has been applied to the computerized prediction of the crystal type and lattice constants of binary alloy phases by using atomic parameters of the constituent elements, the results obtained are satisfactory.

Keywords: Artificial neural network, Atomic structure, Crystal type, Lattice constant