

文章编号: 1000-4750(2009)06-0010-06

计算智能在微尺度力学研究中的应用

*舒 阳¹, 舒思齐²

(1. 天津大学建筑工程学院, 天津 300072; 2. 中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘 要: 微尺度力学的研究常遇到力学模型分析、复杂本构方程求解和跨尺度计算等问题, 而传统的数学方法很难给出所研究的微尺度力学问题的解析解。该文探讨运用计算智能方法(主要包括人工神经网络、遗传算法和模糊数学等知识)对微尺度材料的力学行为进行研究。首先, 采用人工神经网络建立微尺度材料的纳米压痕硬度随压痕深度变化的力学模型, 并用其预测氧化镁材料的纳米压痕硬度; 其次, 运用遗传算法对 A533-B 号钢的球形压痕的载荷-位移曲线进行反分析, 进而获取其力学参数。

关键词: 尺度效应; 微尺度力学; 计算智能; 纳米压痕; 反问题

中图分类号: O34 **文献标识码:** A

THE APPLICATION OF COMPUTING INTELLIGENCE ON THE RESEARCH OF MICRO-SCALE MECHANICS

*SHU Yang¹, SHU Si-qi²

(1. Construction Engineering College, Tianjin University, Tianjin 300072, China;

2. Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract: Based on the traditional mathematical methods, the analysis solutions for micro-scale mechanics problems are not usually solved properly for the building of a mechanical model, the solving of comprehensive constitutive equations and multi-scale computing need to be dealt with. In the present paper, computing intelligence, which includes artificial neural network, genetic algorithm, fuzzy mathematics and others, is used to study the mechanical behaviors of micro-scale materials. First, the mechanical model built with artificial neural network, which describes the variety of hardness to the indentation depth, is used to predict the nanoindentation hardness of MgO. Second, the load-depth curves of A533-B steel of indentation with spherical indenter are inversely analyzed by using genetic algorithm.

Key words: size effect; micro-scale mechanics; computing intelligence; nanoindentation; inverse problem

宏观尺度材料试样的力学性能和力学行为通常可采用传统的连续介质力学理论进行有效的表征; 而细观和微观尺度材料由于受到材料微结构、材料缺陷以及表面能等因素的制约, 材料将表现出明显的尺度效应等力学性能。然而, 用传统连续介质力学理论将不能很好的解释此现象。因此, 国际上许多学者对微观材料的力学性能进行研究: Fleck-Hutchinson 提出了基于传统弹塑性理论的塑

性应变梯度理论^[1]; Nix-Gao 提出了基于位错理论的塑性应变梯度理论^[2]; Gao-Huang 提出基于机制的塑性应变梯度理论^[3]; Gerberich 等提出了基于比表面能微尺度材料尺度效应理论^[4]。这些理论都在一定程度上解释了微尺度材料的尺度效应现象。但是, 这些理论常遇到力学模型分析、复杂本构关系求解和跨尺度计算等问题, 而传统的数学方法很难给出这些问题的解析解。

收稿日期: 2006-12-20; 修改日期: 2009-03-30

作者简介: *舒 阳(1965—), 男, 江苏人, 研究员级高工, 博士, 总工, 从事结构工程研究(E-mail: shuyang6769@163.com);

舒思齐(1976—), 男, 江苏人, 博士, 从事固体力学研究(E-mail: sqshuhk@hotmail.com).

计算智能是以模型(计算模型、数学模型)为基础、以分布并行计算为特征的模拟人的智能求解问题的理论与方法^[5]。近些年来,计算智能(主要包括神经网络、进化计算和模糊数学等)的蓬勃发展给我们进行微尺度力学的研究提供了新的思路。**Muliana**^[6]采用神经网络方法建立预测纳米压痕载荷-位移曲线的力学模型。**Huber**^[7-8]采用神经网络方法对均质材料和薄膜系统的压痕曲线进行反分析获得所研究材料的力学参数。舒思齐等人^[9]采用神经网络方法对薄膜脱胶进行研究并对神经网络方法和专家系统方法在微尺度材料力学研究中的应用作展望。

本文在阐述计算智能的基本原理的基础上,以神经网络和遗传算法为例探讨计算智能在微尺度力学中的应用,并开发了用于微尺度力学研究的智能分析平台。

1 计算智能原理及其在微尺度力学研究中的应用

自从贝兹德克(Bezdek)于1992年首次提出计算智能的定义后,计算智能的理论、技术及其应用得到全面的发展;其研究内容包括神经网络控制、进化计算与遗传算法、模糊控制、人工免疫系统、专家系统、学习控制系统、DNA计算与基于DNA的软计算、粗集理论、混沌控制与同步等方面的理论、技术与应用^[10]。

本研究以计算智能中神经网络和遗传算法里两种工具为例探讨计算智能在微尺度力学研究中的应用,即借助计算智能研究微尺度力学中的跨尺度计算、力学模型分析和复杂本构方程求解等问题。本节在介绍神经网络和遗传算法基本原理的基础上,以下述几个应用为例介绍其在微尺度力学的应用及发展前景:基于实验数据借助神经网络模型建立微纳米材料纳米压痕力学模型;基于遗传算法和经验公式对球形压痕的试验曲线进行反分析获取微尺度材料的材料参数;智能微尺度力学分析平台的介绍。

1.1 基于人工神经网络模型的纳米压痕力学模型建立

1.1.1 人工神经网络原理和特征^[11]

人工神经网络(或神经网络)是用一定的简单数学模型对生物神经网络结构进行描述,并在一定算法指导下,使其能在某种程度上模拟生物神经网

络所具有的智能行为,并解决用传统算法所不能胜任的智能信息处理问题。迄今为止,人类已发明多种神经网络模型,其中误差反向传播神经网络(BPNN)应用最为广泛。本文将以BPNN为例简单介绍神经网络工作原理。神经网络通常由多层组成,每层有若干个神经元。(图1)每个神经元都与前层和后层神经元用可调整的权值连接。每个神经元有多个输入值和单个输出值。网络的第一层和最后一层的神经元数分别等于网络的输入值和输出值个数。

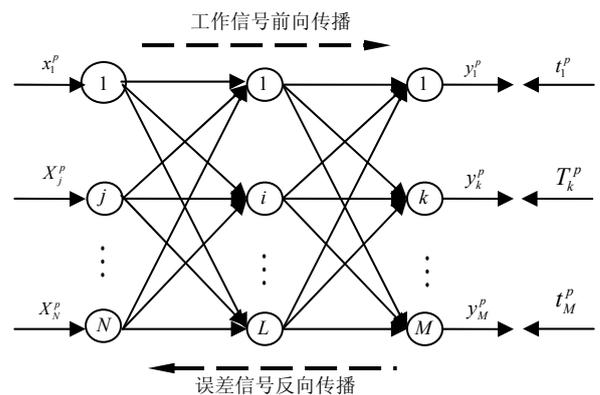


图1 反向传播神经网络结构图

Fig.1 A schematic representation of the back-propagation neural network

网络的输入值通过如下运算可转化成输出值:

$$v_i = \sum w_{ij} y_j + b_i \quad (1)$$

$$y_i = f(v_i) \quad (2)$$

式中: y_j 、 y_i 分别代表前层第 j 个神经元的输出值及后层第 i 个神经元的输出值; v_i 表示从前一层到第 i 个神经元的输入值的加权和; w_{ij} 是可调整权值; b_i 为域值。神经元输入值加权和通过激活函数转化为其输出值。本文中,隐层激活函数采用反正切函数:

$$f(v_i) = \arctan(v_i) \quad (3)$$

图1中,神经网络模型输入层有 N 个神经元,输出层有 M 个神经元,共有 P 个训练样本。通过调整神经网络中神经元之间的连接权值来获得网络输入值和输出值之间的映射关系。通常采用误差平方和最小化方法来调整神经元间的连接权值。BPNN神经网络计算输出值和目标值之间误差平方和可写为:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^P \sum_{i=1}^M (t_i^p - y_i^p)^2 = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^P (\varepsilon^p)^2 \quad (4)$$

与传统的数学计算方法相比, 神经网络模型具有结构化、并行性、分布式、全息性和鲁棒性以及非线性映射逼近能力等优点。

1.1.2 基于神经网络的纳米压痕力学模型的建立

目前, 纳米压痕技术广泛应用于薄膜涂层、特殊功能材料和生物组织等微结构材料的力学性能研究中。随着研究的深入, 人们试图运用纳米压痕技术探求微结构材料的材料参数与力学性能之间的联系, 并希望以此来指导新材料的设计。

然而, 微结构材料的纳米压痕力学性能与宏观材料的力学性能间存在显著的差异。Fleck 等人^[1]曾指出: 纳米压痕试验中金属材料力学性能存在尺度效应现象, 即随压痕深度减少, 材料硬度在增加; 当压痕深度小到亚微米量级时, 尺度效应表现的尤为显著。这种现象常被解释为浅压痕深度将产生大的应变梯度, 且应变梯度和几何必须位错是相关的。传统的连续介质力学理论不能解释纳米压痕的尺度效应现象; 国际上许多学者在探索揭示微结构材料纳米压痕尺度效应的本质。近年来, 有两种理论解释此现象: 一种为基于传统连续介质理论的塑性应变梯度理论; 另一种为基于位错理论的塑性应变梯度理论。

基于位错理论, 本研究运用神经网络方法研究纳米压痕产生的尺度效应的力学模型, 并与 Nix-Gao 模型进行比较。

Nix 和 Gao^[2]认为压痕试验产生的几何必需位错导致了微压痕试验中的尺寸效应, 并建立了 Nix-Gao 模型, 如图 2 所示。该模型认为纳米压痕产生的几何必需位错位于以压头与材料的接触半径为半径的半球内(纳米压痕过程中无挤出和沉陷发生)。

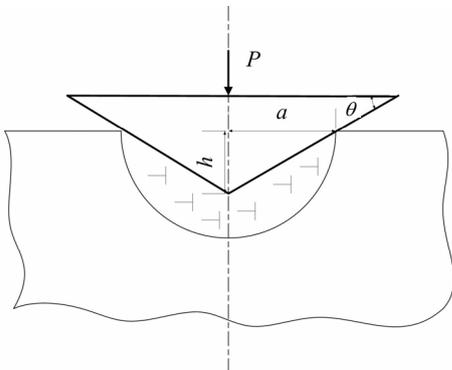


图 2 锥形压头产生的几何必需位错区示意图

Fig.2 A schematic representation of geometrical necessary dislocation caused by a cone indenter

纳米压痕中产生的位错总长为 $\lambda = \pi ha / b$, b 为 Burgers 矢量。几何必需位错所占体积为 $V = \frac{2\pi a^3}{3}$, 且均匀分布在该半球内, 则几何必需位错的密度为:

$$\rho_G = \frac{\lambda}{V} = \frac{3}{2bh} \tan^2 \theta \quad (5)$$

运用 Taylor 模型 $\tau = \alpha \mu b \sqrt{\rho_T} = \alpha \mu b \sqrt{\rho_s + \rho_G}$, Mises 流动法则 $\sigma = \sqrt{3} \tau$, Tabor 系数 3, 以及公式(5), 可得 Nix-Gao 模型公式, 即材料纳米压痕硬度随深度的关系, 如式(6):

$$H = H_0 \sqrt{1 + \frac{L}{h}} \quad (6)$$

式中: H_0 代表材料的宏观硬度; L 表示材料的微尺度特征长度。

纳米压痕过程中, 材料表面经常表现有挤出和沉陷现象。然而 Nix-Gao 模型中没考虑这些现象。所以在浅压痕, 尤其当压痕深度为几百纳米或更小时, Nix-Gao 模型将不能很好的反映真实的实验现象。

随着科技的发展, 纳米压痕实验设备和实验技能进一步提高, 人们积累了丰富的纳米实验数据。本研究将采用神经网络方法对纳米压痕进行力学建模, 描述浅压痕时纳米压痕的尺度效应现象。

纳米压痕试验中, 影响载荷-压痕深度或硬度-压痕深度关系的量有材料弹性模量 E , 屈服强度 σ_Y , 幂硬化指数 n , 微尺度特征长度 L 。材料的硬度和材料参数及几何参量间的关系可表示如下:

$$H = f_1(E, \sigma_Y, \nu, n, L, h, \theta) \quad (7)$$

由量纲分析可得:

$$H = \sigma_Y \Pi \left(\frac{E}{\sigma_Y}, \frac{L}{h}, \nu, n, \theta \right) \quad (8)$$

研究表明, 泊松比大小对材料硬度影响较小, 常取 0.3; 对于 Berkovich 压头, $\theta = 70.3^\circ$ 。则由上述力学模型分析, 可建立锥形压头纳米压痕试验, 硬度和材料参数间的神经网络模型。神经网络的输入值为 $\sigma_Y, \frac{E}{\sigma_Y}, \frac{L}{h}, n$; 神经网络的输出值为材料的硬度值 H 。并用收集到的单晶(多晶)铜, 单晶(多晶)银等单质金属, 以及氧化物的纳米压痕试验数据对该神经网络进行 5000 步训练, 网络输出误差为 0.001。可获得神经网络输入值和输出值之间的映射关系。该神经网络模型只适用于金属单质及

其氧化物的纳米压痕硬度的预测。本研究中,把氧化镁材料纳米压痕试验的试验数据^[12]输入该神经网络模型可得氧化镁材料纳米压痕硬度-深度曲线。并与 Nix-Gao 模型的载荷-深度曲线进行比较,如图 3 所示。

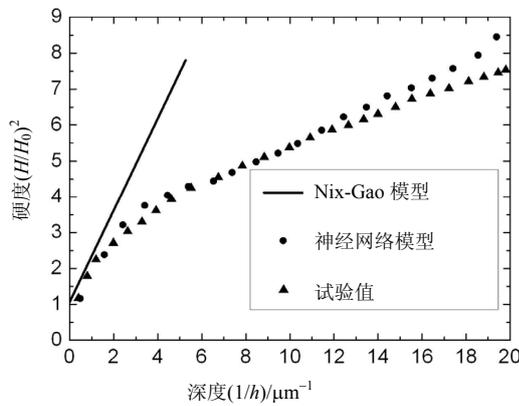


图 3 神经网络预测硬度值与 Nix-Gao 模型计算值及实验测量值间的比较

Fig.3 A comparison among the hardness from neural network, Nix-Gao model and experiments respectively

图 3 中,纵坐标为材料的硬度,横坐标为纳米压痕深度的倒数;图 3 中,直线为 Nix-Gao 模型预测值,曲线为真实试验过程中获得的硬度和压痕深度间的关系。三角形符号为神经网络预测的氧化镁材料的纳米压痕硬度-压痕深度间的值。从图 3 可以看出,与 Nix-Gao 模型相比,用神经网络建立的纳米压痕硬度-压痕模型预测的值与试验曲线更吻合。

本文主要研究晶体材料纳米压痕的尺度效应现象,且神经网络的训练样本来源于经常用于纳米压痕研究的金属材料及其氧化物等晶体材料的纳米压痕试验,所以用该神经网络建立的模型只能预测晶体材料的纳米压痕尺度效应问题。然而,随着训练样本数量的增多和分布范围的增加,该神经网络预测的材料广度将增加且预测的精度将进一步得到提高。

1.2 基于遗传算法的微结构材料参数的反问题研究

1.2.1 遗传算法原理和特征^[13]

遗传算法是模拟生物在自然环境中的遗传和进化过程而形成的一种自适应全局优化概率搜索算法。通过使用遗传算子作用于群体 $P(t)$ 上,进行选择、交叉、变异操作,可得到新一代群体 $P(t+1)$ 。

遗传算法的运算过程如图 4 所示。

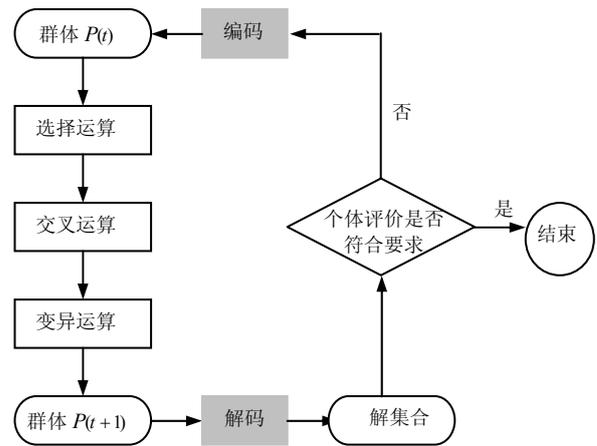


图 4 遗传算法运算过程流程图

Fig.4 A flowchart of genetic arithmetic

传统的反问题方法常借助于拟牛顿法、共轭梯度法、爬山法、枚举法和随机搜索法等优化方法求函数最优解来求反问题的解。然而,拟牛顿法、共轭梯度法、爬山法等优化方法常依赖给定解的初始值且容易陷入局部最优解而找不到全局最优解,用这些方法很难对具有多峰的高度非线性问题进行分析;枚举法和随机搜索法只适用于搜索范围小以及少参数的小型问题的求解,而现实问题通常是多参数且搜索空间大,所以枚举法和随机搜索法等优化方法很难得到广泛采用。然而,具有较好鲁棒性、并行性及全局极值搜索能力的遗传算法能有效的克服传统函数最优解搜索方法的缺点,进而更适用于反问题的研究。

由于微纳米材料力学参数的反问题研究具有复杂非线性特征,本研究采用遗传算法对微纳米材料的球形压头的压痕曲线进行反分析,进而获得所研究微纳米材料的力学参数。

1.2.2 微结构材料的材料参数反分析

随着压痕深度的增加,球形压头压痕试验中试验材料的力学特征将发生显著变化。所以球形压头压痕试验常被人们用来反分析被压材料的力学参数,图 5 所示。

当球形压头的压痕深度大于十几个微米时,材料的尺寸效应就变得不明显。球形压头的载荷位移曲线可用宏观材料的经验公式表示。由 Tabor 关系,材料硬度和材料等效应变有如下关系:

$$H = c\sigma_0(\epsilon_r) \quad (9)$$

式中:

$$c = \frac{60}{2+n} \left(\frac{40}{9\pi} \right)^n, \quad h > 0.1R \quad (10)$$

$$H = \frac{P}{\pi a^2} \quad (11)$$

$$\sigma(\varepsilon_r) = E \varepsilon_y^{1-n} \varepsilon_r^n \quad (12)$$

$$\varepsilon_r = \frac{8}{9\pi} \left(1 + \frac{n}{2} \right)^{(-1/n)} \left(\frac{a}{R} \right) \quad (13)$$

$$a = \sqrt{2Rh - h^2} \quad (14)$$

由上述经验公式可得载荷-压痕深度间的函数关系式:

$$P = \pi(2Rh - h^2) \frac{60}{2+n} \left(\frac{40}{9\pi} \right)^n E \left(\frac{\sigma_y}{E} \right)^{(1-n)} \left(\frac{8}{9\pi} \left(1 + \frac{n}{2} \right)^{(-1/n)} \frac{\sqrt{2Rh - h^2}}{R} \right)^n \quad (15)$$

那么, 遗传算法运算中, 目标函数可写为:

$$y = \sum_{i=1}^n (P_i |_{\text{试验}} - P_i)^2 \quad (16)$$

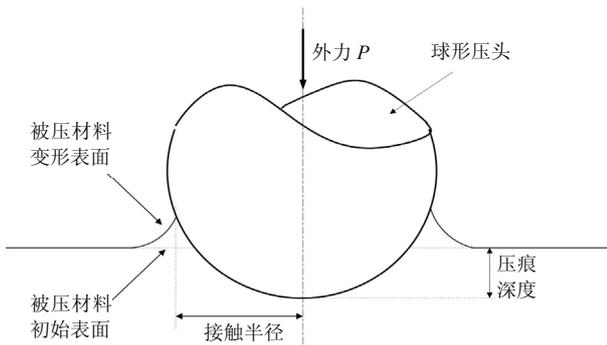


图 5 球形压头压痕示意图

Fig.5 A schematic representation of spherical indentation

用遗传算法对 Taljat B 和 Zacharia T 的 A533-B 号钢的球形压痕试验的载荷位移曲线(图 6)进行反

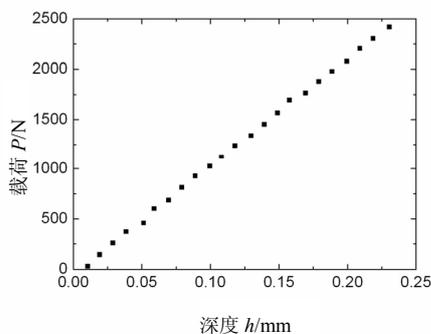


图 6 A533-B 钢的载荷-深度曲线

Fig.6 A load-depth curve of the A533-Btype steel

问题研究^[14]。遗传算法运算中, 初始种群随机选用 80 个个体。经过 300 代后可得 A533-B 号钢的应力-应变曲线, 并与试验结果进行比较, 如图 7 所示。用遗传算法获得的应力-应变曲线与试验结果吻合较好。

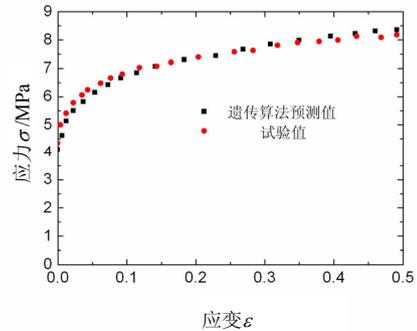


图 7 A533-B 钢的应力-应变曲线

Fig.7 The stress-strain curves of the A533-B type steel

2 结论

计算智能的发展为微尺度力学的研究提供了一个新的机遇。本文以两个例子探讨了计算智能在微尺度力学研究中的应用, 即:

(1) 基于纳米压痕试验数据, 本文运用神经网络方法建立了预测金属单质及其氧化物的纳米压痕硬度的力学模型。

(2) 用遗传算法对 Taljat B 和 Zacharia T 的 A533-B 号钢的球形压痕试验的载荷位移曲线(图 6)进行反问题研究^[14], 获得其应力-应变曲线。

随着数值计算能力提高和分子动力学模拟技能提高, 可把计算智能学科中的神经网络、遗传算法等工具和数值计算或分子动力学模拟结合起来对微尺度力学进行研究, 以推动微尺度力学研究的发展。本文仅是作者运用计算智能知识对微尺度力学研究的一个开端。我们还需对其作进一步深入的研究。

参考文献:

- [1] Fleck N A, Hutchinson J W. A phenomenological theory for strain gradient effects in plasticity [J]. Journal of Mechanics and Physics of Solids, 1993, 41(12): 1825—1873.
- [2] Nix N D, Gao H. Indentation size effects in crystalline materials: a law for strain gradient plasticity [J]. Journal of Mechanics and Physics of Solids, 1998, 46: 411—425.
- [3] Gao H, Huang Y, Nix W D, Hutchinson J W.

- Mechanism-based strain grain gradient plasticity-I. Theory [J]. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 1999, 47: 1239—1263.
- [4] Gerberich W W, Tymiak N I, Grunlan J C. Interpretations of Indentation size effects [J]. *Journal of Applied Mechanics*, 2002, 69: 433—442.
- [5] 徐宗本. 计算智能: 模拟进化计算[M]. 北京: 高等教育出版社, 2005.
Xu Zongben. Computational intelligence: simulating evolutionary computation [M]. Beijing: High Education Press, 2005. (in Chinese)
- [6] Muliana A, Steward R, Haj-Ali RM, Saxena A. Artificial neural network and finite element modeling of nanoindentation tests [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A-Physical Metallurgy and Materials Science*, 2002, 33(7): 1939—1947.
- [7] Huber N, Tyulyukovskiy E. Determination of constitutive properties from spherical indentation data using neural network. Part I: the case of pure kinematic hardening in plasticity laws [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1999, 47: 1569—1588.
- [8] Huber N, Tyulyukovskiy E, Kraft O. On the analysis of the stress-strain behaviour of thin metal films on substrates using nanoindentation [J]. *Philosophical Magazine*, 2006, 86(33-35): 5505—5519.
- [9] 舒思齐, 杜莹, 魏悦广. 神经网络专家系统在微结构材料力学中的应用[J]. *工程力学*, 2003, III(增刊): 604—607.
- Shu Siqi, Du Ying, Wei Yueguang. The application of Neural Network and Expert system on the micro-structure material mechanics [J]. *Engineering Mechanics*, 2003, III (Supplement): 604—607. (in Chinese)
- [10] 丁永生. 计算智能—理论、技术及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2004.
Ding Yongsheng. Computational intelligence – theory, technique and application [M]. Beijing: Science Press, 2004. (in Chinese)
- [11] 阎平凡. 人工神经网络与模拟进化计算[M]. 北京: 清华大学出版社, 2000.
Yan Pingfan. Artificial neural network and simulating evolutionary computation [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2000. (in Chinese)
- [12] Gang Feng, William D. Nix. Indentation size effect in MgO [J]. *Scripta Materialia*, 2004, 51: 599—603.
- [13] 周明. 遗传算法原理及应用[M]. 北京: 国防工业出版社, 1999.
Zhou Ming. Genetic algorithm principle and application [M]. Beijing: National Defence Industry Press, 1999. (in Chinese)
- [14] Taljat B, Zacharia T, Kosel F. New analytical procedure to determine stress-strain curve from spherical indentation data international [J]. *Journal of Solid and Structures*, 1998, 35(33): 4411—4426.