

## 粒子群算法对织构分析改进最大熵法的改进 \*

王大鹏<sup>1)</sup> 王大志<sup>2)</sup> 武宝林<sup>1)</sup> 左良<sup>3)</sup> 王福<sup>3)</sup> 梁志德<sup>3)</sup>

1) 沈阳航空工业学院材料科学与工程学院, 沈阳 110136

2) 东北大学信息科学与工程学院, 沈阳 110004

3) 东北大学材料与冶金学院, 沈阳 110004

**摘要** 将粒子群算法 (PSO) 成功地应用于改进最大熵法 (MMEM), 使用两张或单张部分极图数据, 即可测算出多组具有宏观对称的冷轧纯铜片样品的完整晶粒取向分布 (ODF). 这一改进保留了原 MMEM 的特长, 用较少的实验数据即可计算出样品的真 ODF, 而又消除了原法在求解非线性方程组时需要选取特定初解的困难, 从而使 MMEM 更具普适性和实用性.

**关键词** 粒子群算法, 织构, 晶粒取向分布, 改进最大熵法

中图分类号 TG335.19

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2009)01-0063-04

## IMPROVEMENT ON THE MODIFIED MAXIMUM ENTROPY METHOD FOR TEXTURE ANALYSIS BY PARTICLE SWARM OPTIMIZATION

WANG Dapeng<sup>1)</sup>, WANG Dazhi<sup>2)</sup>, WU Baolin<sup>1)</sup>, ZUO Liang<sup>3)</sup>, WANG Fu<sup>3)</sup>, LIANG Zhide<sup>3)</sup>

1) School of Materials Science and Engineering, Shenyang Institute of Aeronautical Engineering, Shenyang 110136

2) College of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang 110004

3) School of Materials and Metallurgy, Northeastern University, Shenyang 110004

Correspondent: WANG Dapeng, associate professor, Tel: (024)81216323,

E-mail: wangdp-neu@yahoo.com.cn

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.50771067) and Doctorate Research

Project of Shenyang Institute of Aeronautical Engineering (No.BY2009-2953)

Manuscript received 2008-04-23, in revised form 2008-06-25

**ABSTRACT** The particle swarm optimization (PSO) was successfully applied for the modified maximum entropy method (MMEM) of the quantitative texture analysis. Using two incomplete pole figures or only one incomplete pole figure, the complete orientation distributions of pure copper samples can be obtained. Such an improvement has been verified to keep the merits of primary MMEM, *i.e.*, the complete orientation distribution function (ODF) of samples can be calculated using lesser experimental data, furthermore, the difficulty to choose a set of purposely initial solutions has also been overcome when solving the nonlinear equation, which makes the MMEM more versatile and practicable.

**KEY WORDS** particle swarm optimization, texture, orientation distribution function, modified maximum entropy method

在材料织构真 ODF(C-ODF, 包括奇次项及无负值区) 测求的各方法中, 直接以实测极图数据  $q_k^M(\chi, \eta)$  为约束条件, 按信息熵最大原则建立的改进最大熵法 (MMEM)<sup>[1]</sup>, 以其缜密的逻辑演绎见称. 该法不仅能克服

重叠衍射峰的干扰, 而且也消除了那些难以测得足够实验数据, 不能准确计算出 ODF 级数系数而引入的误差. 但是, 该法也要解一非线性方程组, 且在求解时, 初解的选取较之原最大熵法<sup>[2]</sup> 更困难, 因而往往导致求解失败. 故至今尚未得到广泛应用.

鉴于粒子群算法 (PSO)<sup>[3]</sup> 在织构分析中的应用<sup>[4]</sup>, 尤其是在最大熵法 (MEM) 定量织构分析中的成功应用<sup>[5]</sup>, 促使本文作者进一步尝试把 PSO 引入 MMEM 中以考察其应用效果. 该方法以实测的部分极图数据  $q_k^M(\chi, \eta)$  为约束条件, 求解非线性方程组. 为此, 研制了

\* 国家自然科学基金项目 50771067 和沈阳航空工业学院博士研究基金项目 BY2009-2953 资助

收到初稿日期: 2008-04-23, 收到修改稿日期: 2008-06-25

作者简介: 王大鹏, 男, 1972 年生, 副教授

测算数模及相应程序,并测算了多个具有宏观对称的冷轧纯铜片样品的完整晶粒取向分布.结果表明,当实测的部分极图数目从 3 张变为 1 张时,几乎获得同样的结果;而且织构类型和分布状况的不同,对测算结果均无影响.这表明 PSO 对 MEM 也适用.它的引入,避免了特定初始解选取的繁琐和困难,从而使 MEM 更具普适性和实用性.

## 1 原理

按文献 [5—7],将 Euler 空间的无对称区共分成  $J$  个取向元,并令第  $j$  个取向元的样品的体积分数 (%) 为  $V_j$ , 则

$$V_j = \exp(-1 - \lambda_0 - \sum_{r=1}^R \lambda_r A_{rj}) \quad (1)$$

式中,  $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_R$  为 Lagrangian 待定系数;且

$$A_{rj} = \frac{1}{4\pi^2} Z_{lmn}(\cos \theta_j) e^{im\psi_j} e^{in\varphi_j} \quad (2)$$

式中,  $Z_{lmn}(\cos \theta_j)$  为推广 Jacobi 多项式,  $\{\theta_j, \psi_j, \varphi_j\}$  为第  $j$  个取向元的 Euler 空间角.

而在 MEM 中,以实测极图数据  $q_k^M(\chi, \eta)$  为约束条件,无需再计算 ODF 级数的第  $lmn$  项系数  $W_{lmn}$ . 将实测的极图数据  $q_k^M(\chi, \eta)$  乘上它的待定归一化因数  $N_k$  后,再施以最小二乘法,得到目标函数  $S$ .

$$\begin{aligned} \min S = & \sum_{k=1}^{k_{\max}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\chi_f} \left\{ N_k q_k^M(\chi, \eta) - 2\pi \cdot \right. \\ & \sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}} \left[ \left( \frac{2}{2\ell+1} \right)^{1/2} \sum_{m=-\ell}^{\ell} P_{\ell}^m(\cos \chi) e^{-im\eta} \times \right. \\ & \left. \left. \sum_{n=-\ell}^{\ell} W_{lmn} P_{\ell}^n(\cos \Theta_k) e^{in\Phi_k} \right] \right\}^2 \sin \chi \, d\chi \, d\eta \quad (3) \end{aligned}$$

式中,  $(\chi, \eta)$  为实测极图数据的极角和幅角,  $k_{\max}$  为所用极图的数目,  $\chi_f$  为极图测量时的最大极角,  $(\Theta_k, \Phi_k)$  分别为第  $k$  张极图晶面  $(hkl)$  法线在晶体坐标中的极角和幅角,  $P_{\ell}^m(\cos \chi)$  和  $P_{\ell}^n(\cos \Theta_k)$  是连带 Legendre 多项式.

将式 (1) 代入式 (3) 后得到下式:

$$\begin{aligned} \min S = & \sum_{k=1}^{k_{\max}} \left\{ \int_0^{2\pi} \int_0^{\chi_f} \left[ N_k q_k^M(\chi, \eta) - \right. \right. \\ & \left. \left. \sum_{j=1}^J B_{tjk} \exp(-1 - \lambda_0 - \sum_{r=1}^R \lambda_r A_{rj}) \right]^2 \sin \chi \, d\chi \, d\eta \right\} \quad (4) \end{aligned}$$

式中

$$\begin{aligned} B_{tjk} = & 2\pi \sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}} \left( \frac{2}{2\ell+1} \right)^{1/2} \sum_{m=-\ell}^{\ell} P_{\ell}^m(\cos \chi) e^{-im\eta} \cdot \\ & \sum_{n=-\ell}^{\ell} P_{\ell}^n(\cos \Theta_k) e^{in\Phi_k} A_{rj} \quad (5) \end{aligned}$$

从而形成一个用 MEM 求解  $R+1(=D)$  个  $\lambda$  值的方程组. 而采用 PSO<sup>[8,9]</sup>, 其目标函数  $S$  则变为

$$\begin{aligned} \min S = & \left( 1 - \sum_{j=1}^J V_j \right)^2 + \sum_{r=1}^R f_r \cdot \\ & \sum_{k=1}^{k_{\max}} \left\{ \int_0^{2\pi} \int_0^{\chi_f} \left[ N_k q_k^M(\chi, \eta) - \right. \right. \\ & \left. \left. \sum_{j=1}^J B_{tjk} \exp(-1 - \lambda_0 - \sum_{r=1}^R \lambda_r A_{rj}) \right]^2 \sin \chi \, d\chi \, d\eta \right\} \quad (6) \end{aligned}$$

式中,  $f_r$  为控制测量极图数据对  $S$  的影响参数 ( $r=1, 2, 3, \dots, R(=58)$ ), 同文献 [5] 宜选  $f_r < 1$ . 用 PSO 优化算法, 求出  $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_R$  和  $N_k$  值, 再代回式 (1), 即得到待求的真 ODF 值.

## 2 实际应用

本工作系针对有宏观对称的立方晶系多晶材料的织构, 为此,  $J$  值选取 1296 ( $=72 \times 18$ ); PSO 中的参数亦同文献 [9], 控制前次速度影响的惯性权重因子  $\omega=0.7$ ; 适选的加速系数  $c_1=c_2=1.6$ ; 考虑到  $R$  多达 58, 故粒子数  $I$  取到 200.

两样品分别是冷轧纯铜和退火处理的纯铜片. 衍射数据测量采用 PANalytical 的 X'Pert 织构测角仪 ( $\text{CuK}\alpha$ ). 测定 111, 200 和 220 这 3 张部分极图 ( $\alpha=0^\circ-70^\circ, \beta=0^\circ-360^\circ, \Delta\alpha=\Delta\beta=5^\circ$ ) 后, 再采用“两步法”<sup>[10]</sup> 计算出简 ODF(如图 1).

从简 ODF 图上可见, 两样品虽然成分相同, 但主要织构组分完全不同: 一个以强的 C-{112}<111> 和较弱的 Bs-{110}<112> 为主(图 1a), 最大峰值强度  $\omega_{\max}=11.50$ ; 而另一个以 {001}<110> 为主(图 1b),  $\omega_{\max}=8.27$ , 并有负值区.

用 3 张类似上述极图数据, 按 PSO 优化的 MEM 计算的真 ODF( $\varphi=45^\circ$ ) 截面如图 2 所示. 与图 1 比较, 图 2 中织构的类型和分布状况与图 1 完全相同, 但峰值强度  $\omega$  显著增大 ( $\omega_{\max}=30.01$ (图 2a),  $\omega_{\max}=22.78$ (图 2b)); 同时, 原有的弱峰和负值区不再出现, 峰的漫散明显缩小. 这表明算得的真 ODF 值真实可信.

为检验用较少实验数据按 PSO 优化的 MEM 的分析能力, 从上述 2 样品中分别任选 2 张部分极图 (111) 和 (200) 数据以及单张部分极图 (111) 数据进行真 ODF 求算, 所得结果分别绘成图 3 ( $\omega_{\max}=24.35$ (图 3a),  $\omega_{\max}=19.44$ (图 3b)) 和图 4 ( $\omega_{\max}=21.64$ (图 4a),  $\omega_{\max}=17.28$ (图 4b)). 上述结果的织构类型和分布状况与图 1, 2 基本相同, 原有的弱峰和负值区也皆未出现, 仅峰值强度稍有改变 (而这在实际织构分析中并无重要意义).

应当指出, 由于实测数据减少导致计算值的游移是原

MMEM<sup>[10]</sup> 的必然结果, 这与 PSO 的引入无关; 只要 PSO 迭代次数足够, 则计算结果是稳定且适用的<sup>[5]</sup>. 至

于用重叠峰解算, 由于立方系材料缺乏选用实例, 有待试用其它晶系材料.

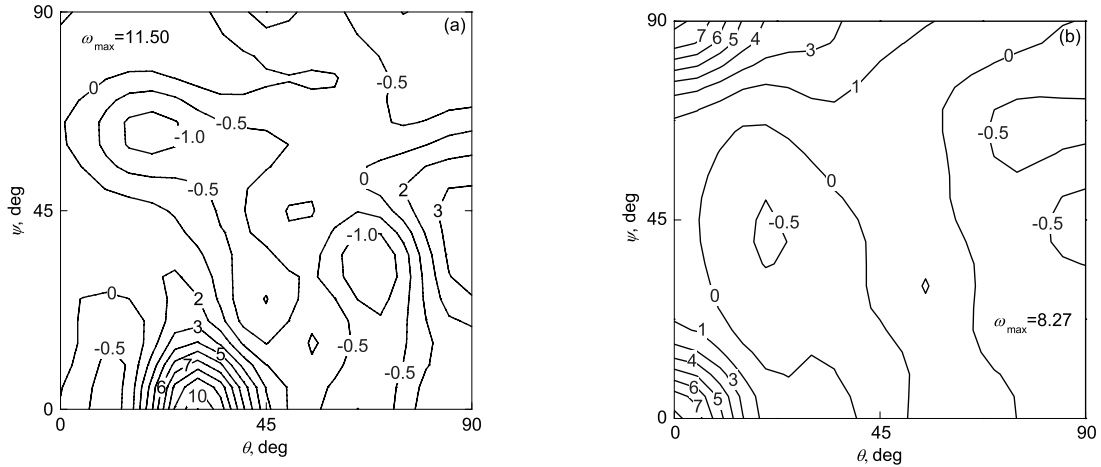


图 1 纯铜样品的简 ODF( $\varphi=45^\circ$ ) 的截面图

Fig.1 Experimental R-ODF sections ( $\varphi=45^\circ$ ) of pure copper samples as cold rolled (a) and annealed (b) using three incomplete pole figures of (111), (200) and (220)

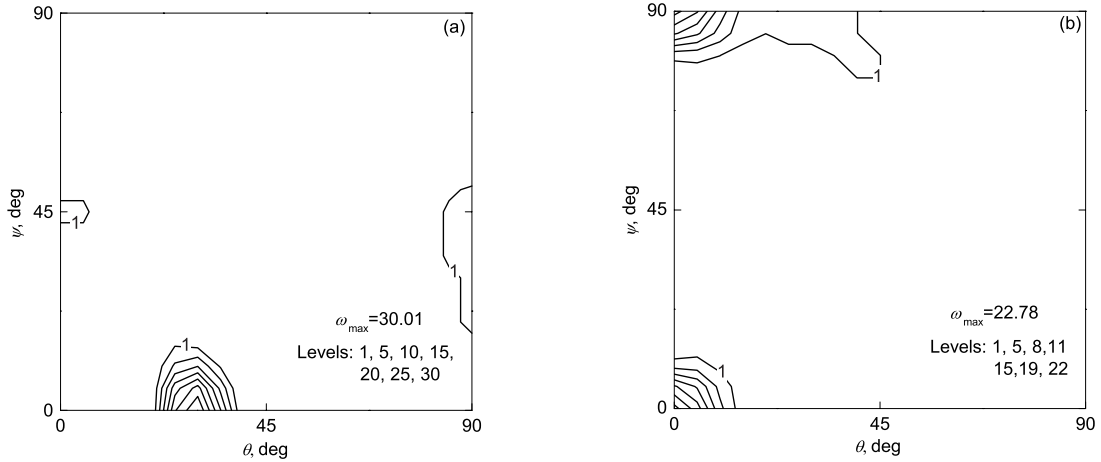


图 2 借助 3 张部分极图 ((111), (200) 和 (220)) 按 PSO 解算的真 ODF( $\varphi=45^\circ$ ) 的截面图

Fig.2 Recalculated C-ODF sections ( $\varphi=45^\circ$ ) of pure copper samples as cold rolled (a) and annealed (b) with PSO algorithm using three incomplete pole figures of (111), (200) and (220)

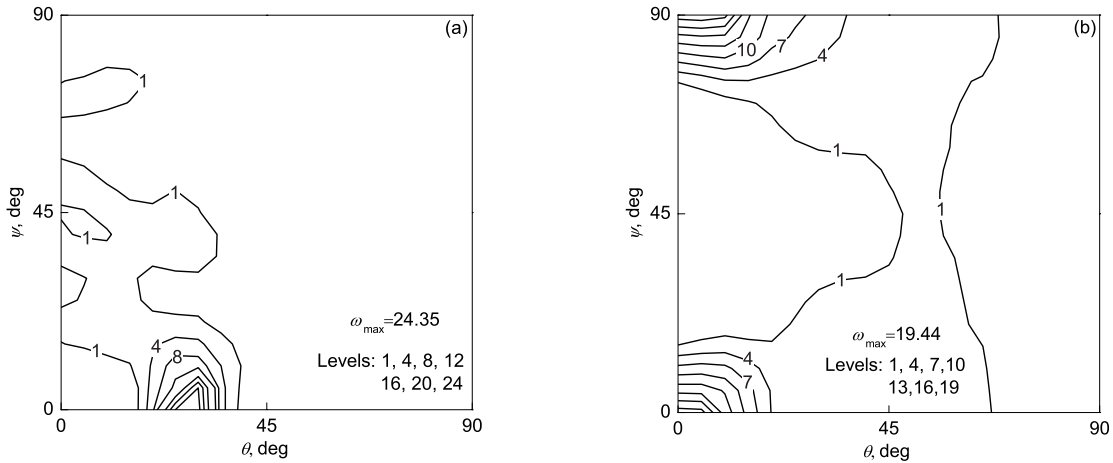


图 3 借助 2 张部分极图 ((111) 和 (200)) 按 PSO 解算的真 ODF( $\varphi=45^\circ$ ) 的截面图

Fig.3 Recalculated C-ODF sections ( $\varphi=45^\circ$ ) of pure copper samples as cold rolled (a) and annealed (b) with PSO algorithm using two incomplete pole figures of (111) and (200)

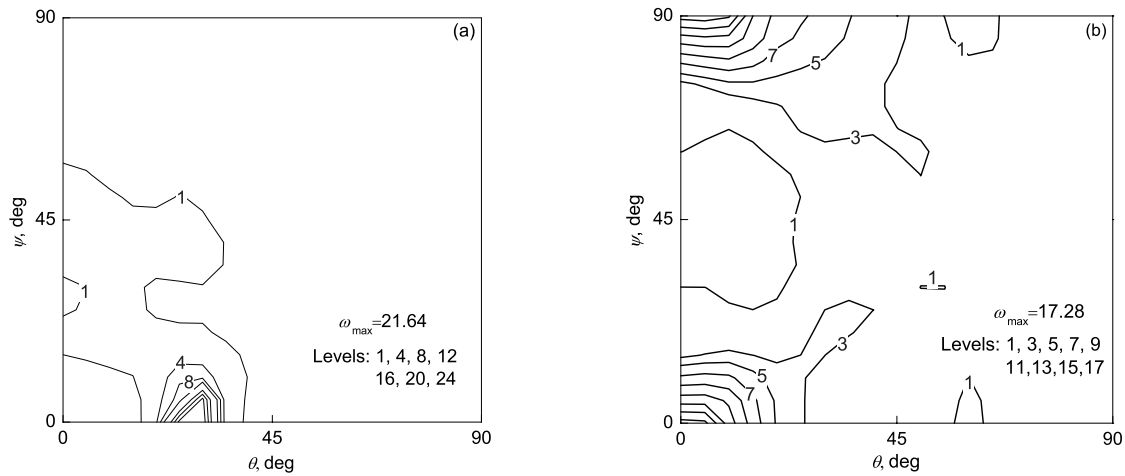


图 4 借助单张部分极图 (111) 按 PSO 解算的真 ODF( $\varphi=45^\circ$ ) 的截面图

Fig.4 Recalculated C-ODF sections ( $\varphi=45^\circ$ ) of pure copper samples as cold rolled (a) and annealed (b) with PSO algorithm using one incomplete pole figure of (111)

### 3 结论

在立方系材料结构的真 ODF 测算中, 将 PSO 引入 MMEM 实施解算. 在求解非线性方程组时, 无需选取特定的初解, 从而使 MMEM 更具普适性和实用性.

#### 参考文献

- [1] Liang Z D. *Acta Metall Sin*, 1997; 33: 133  
(梁志德. 金属学报, 1997; 33: 133)
- [2] Wang F, Xu J Z, Liang Z D. *Textures Microstruct*, 1992; 19: 55
- [3] Kennedy J, Eberhart R. *Proc IEEE Int Conf Neural Networks*. Piscataway, NJ: IEEE Service Center, 1995: 1942
- [4] Tang J G, Zhang X M, Deng Y L, Xuan Y, Chen Z Y. *Mater Sci Forum*, 2007; 546: 1009
- [5] Wang D Z, Wang D P, Wang D W, Zuo L, Wang F, Liang Z D. *Acta Metall Sin*, 2008; 44: 183
- (王大志, 王大鹏, 汪定伟, 左良, 王福, 梁志德. 金属学报, 2008; 44: 183)
- [6] Wang Y D, Xu J Z, Liang Z D. *Textures Microstruct*, 1998; 26-27: 103
- [7] Jiang J X, Wang F, Liu Y S, Liang Z D. In: Liang Z D, Zuo L, Chu Y Y, eds., *Proc 11th Int Conf Textures of Materials*, Part 1, Beijing: International Academic Publishers, 1996: 112
- [8] Shi Y, Eberhart R. *IEEE Int Conf Evolutionary Computation*, Piscataway, NJ: IEEE Service Center, 1998: 69
- [9] Trelea I. *Inf Process Lett*, 2003; 85: 317
- [10] Liang Z D, Xu J Z, Wang F. *Three Dimensional Orientation Analysis of Textured Materials-ODF Analysis*. Shenyang: Northeastern University of Technology Press, 1986: 116  
(梁志德, 徐家祯, 王福. 织构材料的三维取向分析术—ODF 分析. 沈阳: 东北工学院出版社, 1986: 116)