

基于改进型 S 算子 BP 神经网络的钢材大气腐蚀影响因子评估模型

栾瑞鹏¹ 贲可荣¹ 萧彧星^{1,2} 田立业¹

(1. 海军工程大学计算机工程系 武汉 430033; 2. 海军工程大学兵器新技术应用研究所 武汉 430033)

摘要: 通过对双曲正切 -S 算子的改进, 提出了一种用于钢的大气腐蚀影响因子评估的 BP 神经网络模型, 采用零均值标准化使输入数据符合模型要求, 引入贝叶斯正则化算法解决了小样本泛化问题。仿真试验表明, 该模型能在无任何先验知识的情况下较好的反映诸因子对大气腐蚀的影响。

关键词: 双曲正切 -S 算子 BP 神经网络 贝叶斯正则化 大气腐蚀

中图分类号: TG174.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-4537 (2010) 03-0227-05

1 前言

钢的大气腐蚀是我军两栖装甲装备选材与护养的重要参考, 为此我们需要了解诸影响因子, 包括钢的成分、所在地区环境等与腐蚀率之间的关系。目前, 相关研究^[1,2]多采用线性回归方法, 需要对先验知识有一定的掌握。BP 神经网络具有不需先验知识的规律函数拟合能力, 这一点可由 Kolmogorov 定理^[3]得到保证: 任一连续函数可以精确的用一个三层 BP 神经网络来实现。在此理论上, 模型首先通过零均值标准化数据处理和贝叶斯正则化算法使网络完成对规律函数的拟合, 再利用改进型双曲正切 -S 算子的特殊性质进行近似意义下的推导公式变形, 得出一个反映输入因子与输出关系的处理矩阵。仿真试验表明, 该矩阵能较好的评估输入因子对最终输出的影响。模型继承了神经网络结构性、鲁棒性和并行性等优点, 拓展了神经网络在腐蚀研究领域的应用范围, 同时由于不需要先验知识, 故在海水、土壤腐蚀等多个相似领域存在一定的推广价值。

2 评估模型的建立

2.1 训练样本集的建立

训练样本来自中国环境腐蚀试验研究网站对 17 种钢在青岛、广州、琼海和万宁 4 地区 5 个周期 16a 大气腐蚀监测数据, 由钢种所含成分、各地环境参数

和钢种在各地年度腐蚀率数据组成。选取青岛 08Al 型钢、广州 Q235 型钢、琼海 06CuPCrNiMo 型钢和万宁 16MnQ 型钢作为泛化检验样本, 其余所有钢成分与环境组合数据作为训练样本集的输入, 共计 64 组。根据文献^[2]所述, 钢的大气腐蚀规律短期与长期有所不同, 故将不同钢种在相应地区 16a 腐蚀率情况分为两个阶段: 初期腐蚀阶段用 1a、2a 平均腐蚀率表示, 中后期腐蚀阶段用 4a、8a、16a 平均腐蚀率表示, 将初期与中后期的两个平均腐蚀率作为训练样本集的输出。

2.2 模型的网络结构

模型采用 3 层 BP 神经网络结构, 隐含层传递函数使用如下改进型双曲正切 -S 函数, $\tan \text{sig}G(x) = (ae^{bx} - e^{-bx}) / (e^{bx} + e^{-bx})$, 其中 a, b 是调整参数, e 是自然对数, 输出层传递函数选择对数 -S 型函数 $\log \text{sig}(x)$ 。网络输入为合金钢 C、Mn、Si、P、S、Cr+Ni+Mo 6 种主要成分因子, 加所在地平均温度、相对湿度、润湿时间、降雨量、日照时数、Cl⁻、SO₃、NH₃ 和 pH 九种环境影响因子, 即输入神经元数为 15。输出为相应钢种在某地区初期平均腐蚀率和中后期平均腐蚀率, 即输出神经元数为 2。参考文献^[4]给出的设定原则, 经反复试验, 确定本模型隐含层神经元数为 31, 即网络结构为 15-31-2, 如图 1 所示。

2.3 数据的零均值标准化

模型的输入有 15 个因子, 由于统计要求不同, 变量间的数值差距较大, 如“日照时数”等因子数值上可以达到数千, 而“pH 值”小于 10。使用未经处理的数据进行训练将导致网络对小数据不敏感, 同时使网络产生振荡^[5], 严重影响整体性能。这里采用零均值标准化方法对数据进行预处理, 将数据映射到 [-1,1] 之间, 再对结果数据进行反向复原, 保证计

定稿日期: 2009-04-13

基金项目: 两栖装甲装备海洋环境适应性研究项目 (海装办 LD0701C) 资助

作者简介: 栾瑞鹏, 男, 1981 年生, 硕士, 研究方向为人工神经网络、模式识别

通讯作者: 贲可荣, E-mail: benkerong08@21cn.com

算精度的同时有效地降低了变量间数值差距对网络的影响。具体方法如下:

(1) 计算输入向量 $X = [x_1, x_2, \dots, x_p]^T$ 的平均值和均方差

$$\text{平均值 } \bar{a} = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p x_i$$

$$\text{均方差 } \overline{\text{std}} = \sqrt{\frac{1}{p} \sum_{i=1}^p (x_i - \bar{a})^2}$$

式中 $i = 1, 2, \dots, p$ 是输入向量维数, T 是矩阵转置标志。

(2) 所有位置上的值减去均值再除以均方差

$$x'_i = \frac{x_i - \bar{a}}{\overline{\text{std}}}; i=1, 2, \dots, p.$$

(3) 重新组成输入向量 $X = [x'_1, x'_2, \dots, x'_p]$ 。

3 贝叶斯正则化训练算法 [7]

训练样本和网络结构确定后, 最重要的就是训

Table 1 Chemical compositions of the tested steels (mass%)

steel	C	Mn	Si	P	S	Cr+Ni+Mo
Q235	0.20	0.6	0.3	0.015	0.009	0.00
3C	0.14	0.9	0.4	0.035	0.027	0.08
20	0.25	0.5	0.3	0.013	0.027	0.40
08Al	0.08	0.4	0.1	0.008	0.025	0.00
16Mn	0.16	1.4	0.4	0.009	0.025	0.00
16MnQ	0.17	1.4	0.3	0.030	0.023	0.07
D36	0.14	1.4	0.4	0.022	0.018	0.05
15MnMoVN	0.19	1.5	0.4	0.026	0.004	0.50
14MnMoNbB	0.15	1.5	0.3	0.022	0.010	0.60
09MnNb	0.10	1.2	0.2	0.027	0.024	0.00
09CuPTiXt	0.08	0.4	0.3	0.089	0.019	0.29
10CrMoAl	0.09	0.5	0.4	0.012	0.002	1.39
10CrCuSiV	0.10	0.3	0.6	0.010	0.002	1.15
12CrMnCu	0.13	0.8	0.3	0.011	0.022	0.80
09CuPCrNi	0.11	0.4	0.3	0.080	0.019	0.67
09CuPCrNiA	0.08	0.4	0.5	0.070	0.023	1.31
06CuPCrNiMo	0.07	0.4	0.5	0.090	0.023	1.44

Table 2 Environmental factors table

	T(average)	humidity	humidity hour	precipitation	sun	Cl ⁻	SO ₃	NH ₃	pH
	(average)				shine time				
	/°C	/%	/h·a ⁻¹	/mm·a ⁻¹	/h·a ⁻¹	/mg·100cm ⁻² ·d ⁻¹	/mg·m ⁻³		
QD(qingdao)	12.549	71.091	3678.500	604.600	2077.900	0.2148	0.5570	0.0380	6.100
GZ(guangzhou)	22.400	77.778	5046.333	1494.400	1636.009	0.0235	0.1068	0.0352	5.800
QH(qionghai)	24.482	86.455	6313.714	1881.136	2116.200	0.1988	0.1497	0.0077	5.900
WN(wanning)	24.609	86.000	6736.857	1563.273	2047.955	0.3874	0.0597	0.0045	5.000

练算法。本模型的特殊性在于, 与网络规模相比, 训练样本数量明显偏小, 如果采用传统算法如 LM 算法 [6] 等, 必将导致严重的“过拟合”(overfitting), 丧失泛化能力。为此, 这里引入贝叶斯正则化算法 [7] (Bayesian-Regularization, 简称 BR), 通过修正性能函数并自动调整网络规模解决这一问题。

BR 算法中, 网络性能函数表示为如下形式

$$E = \alpha \cdot E_w + \beta \cdot E_D$$

式中 $E_w = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N W_j^2$ 是网络权重的平方和 (W 是网络权值), E_D 是网络响应和目标值的残差平方和, α 与 β 控制着其它参数 (权值和偏置) 的分布, 被称为超参数。超参数的大小决定着网络的训练目标, 若 $\alpha \ll \beta$, 则训练算法目的是尽量减小网络误差; 如果 $\alpha \gg \beta$, 则训练算法目的在于使网络产生更为平滑的响应, 即尽可能减小有效的网络参数, 以弥补网络误差。这样, 就在保证网络训练误差尽可能小的情况下使网络的有效权值尽可能少, 这实际上相当于自动缩小了网络的规模。常规的正则化方法很难确定比例系数 α 、 β 的大小, 而 BR 方法根据 LM 优化理论 [6] 对网络的权值和阈值进行调整, 在网络训练中自适应地调节目标函数参数 α 、 β 的大小, 并使其达到最优。

首先认为网络权值是随机变量, 训练集和权值的先验概率符合高斯分布, 根据贝叶斯准则, 由后验概率最大化, 在目标函数的最小点处求得最佳的 α 和 β , 即

$$\alpha^{MP} = \frac{\gamma}{2E_w(W^{MP})} \quad \beta^{MP} = \frac{n - \gamma}{2E_D(W^{MP})} \quad (1)$$

其中 $\gamma = N - 2\alpha^{MP} \text{tr}(A)^{-1}$ 表示有效的网络参数数目, A 是 $(F)W^{MP}$ 的 Hessian 矩阵, γ 的取值范围为 0 到 N , 反映网络的实际规模, N 是网络所有参数的数目。

BR 算法是个迭代过程, 初始设置 α 、 β 后, 采用 LM 算法求得 $F(W)$ 的极小值, 按 α^{MP} 、 β^{MP} 求

值公式对 α 、 β 进行更新，获得后验分布最大意义上的最优值，然后再对新 $F(W)$ 求极小值，反复迭代直至收敛。

4 评估矩阵推导分析

双曲正切 -S 算子是神经网络中常用的传递函数，即 $\tan \operatorname{sig}(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$ 。这里引入改进型双曲正切 -S 算子 [8] 为

$$\tan \operatorname{sig}G(x) = a \frac{e^{bk} - e^{-bk}}{e^{bk} + e^{-bk}}, \text{ 其中 } a=1.7159, b=\frac{1}{2}$$

改进型双曲正切 -S 算子在 $[-1, 1]$ 区间具有如下优良性质 (如图 2) 为

- (1) 反对称性, $\tan \operatorname{sig}G(-x) = -\tan \operatorname{sig}G(x)$
- (2) $\tan \operatorname{sig}G(1) = 1, \tan \operatorname{sig}G(-1) = -1$
- (3) 函数在原点的斜率较接近于 1, 即 $\tan \operatorname{sig}G(0) = ab = 1.7159 \times 2/3 = 1.1424$

在前面的简介中已经提到, BP 神经网络输入到输出的计算过程是个正向传播的过程, 对于已经训练好的网络, 设第 n 层的权值矩阵为 W^n 、偏置值为 b^n 、传递函数为 $f^n(x)$, 网络输入 p 是一个 $m \times 1$ 正常数矩阵, 则三层 BP 网络输入 p 与输出 a 之间的关系可表示为

$$a = f^2(W^2 f^1(W^1 p + b^1) + b^2) \quad (2)$$

这里 $f^1(x) = \tan \operatorname{sig}G(x)$, 结合零均值处理后 P 的数据特征以及 W^1 、 b^1 的具体值, 应用 $\tan \operatorname{sig}G(x)$ 函数在 $[-1, 1]$ 区间的特殊性质, 可以近似得到以下析式

$$a = f^2(W^2 W^1 p + W^2 b^1 + b^2) \quad (3)$$

其中 $W^2 b^1 + b^2$ 是一个 2×1 常数矩阵, 令其两个元素分别为 b_1 、 b_2 ; $W^2 W^1$ 是一个 $2 \times m$ 矩阵 (m 为输入神经元个数), 令其行向量分别为 w_1 、 w_2 ; 输出 a 的两个元素 a_1 、 a_2 分别代表初期平均腐蚀率和中后期平均腐蚀率, 则得到式

$$a = f^2(W^2 W^1 p + W^2 b^1 + b^2) = f^2 \left(\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} p + \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \right) = f^2 \left(\begin{bmatrix} w_1 p + b_1 \\ w_2 p + b_2 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} f^2(w_1 p + b_1) \\ f^2(w_2 p + b_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \quad (4)$$

由于 $f^2(x) = \operatorname{logsig}(X)$ 是一个单调递增函数, 不改变 $W_1 + B_1$ 有效增益的符号, 若 W_1 中某元素为正值, 则与之对应相乘的 p 向量元素对输出 a_1 的

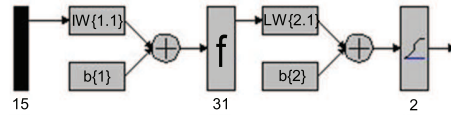


Fig.1 Neural network structure of the model

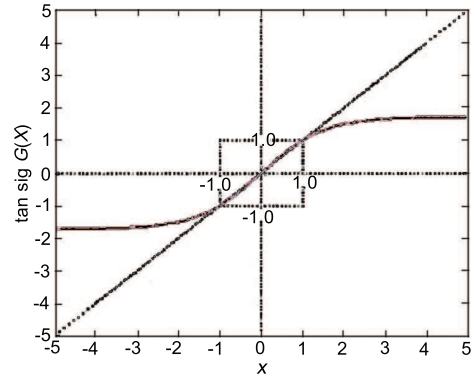


Fig.2 Curve of $\tan \operatorname{sig}G(x)$

贡献一定是“增长”的; 反之, 若 w_1 中某元素为负值, 则与之对应相乘的 p 向量元素对输出 a_1 的贡献一定是“降低”的。故可提出如下假设: w_1 向量中元素的符号及绝对值反映了输入 p 中各输入因子对网络 (规律) 输出的影响。以 w_1 为例, w_1 中的正值元素表示对应输入因子将使 q_1 值 (初期平均腐蚀率) 增长, 即相应因子有腐蚀作用; w_1 中的负值元素表示对应输入因子将使值 (初期平均腐蚀率) 降低, 即相应因子起到抗腐蚀作用; w_1 中某元素的绝对值越大, 表示对应输入因子所起的作用 (腐蚀或抗腐蚀) 越强。 w_1 、 w_2 两向量中相同位置元素之间的变化, 体现了对应输入因子在初期、中后期腐蚀中所起作用的变化。

当然, 只有通过 BP 训练算法对规律函数完成了正确拟合, 其 w 才是可信的, 下面结合仿真试验及已有研究成果 [2] 加以说明。

5 仿真试验分析

使用 MatLab 神经网络工具箱实现模型设计, 并设定训练步数 100000, 输出系统目标误差取 10^{-5} , 使用制定好的训练样本集及贝叶斯正则化算法完成训练, 当结果显示 Maximum MU reached, 表明算法已收敛, 模型训练完毕。按照上一节所示的方法计算得到如表 3 所示。

从表 3 中数据符号、绝对值及 w_1 、 w_2 之间的变化, 可以得出如下结论:

(1) 成分方面: S 是最有害的, 初期、中后期均起着较强腐蚀作用 (0.6413、0.4175 两个正值); P 的抗腐蚀性初期比中后期明显 (-1.2955 到 -0.6308), 可能的原因是偏聚在材料表面上的磷原子在水和氧的作用下水解, 生成一种致密性较高磷酸盐, 并且能均匀

Table 3 Cause-factors evaluation vector

cause factors	w_1	w_2
C	-0.2033	-0.7273
Mn	-0.6729	-0.9866
Si	-0.4677	-0.1391
P	-1.2955	-0.6308
S	0.6413	0.417
Cr+Ni+Mo	-0.8694	-2.6450
TP (average temperature)	-0.4455	-0.0320
RH (relative humidity)	-0.6896	0.0906
WT (wetting time)	-0.4403	0.2586
RT (rain time)	-0.8224	-0.3220
ST (sunny time)	-0.6975	0.2637
Cl ⁻	0.2384	0.9842
SO ₃	0.1015	0.0840
NH ₃	0.6181	-0.3306
pH	-0.7421	-1.0063

覆盖在基体表面的空洞和裂纹处, 阻碍了水和氧的通过, 而一旦进入中后期, 锈蚀穿透了磷酸盐膜, 磷的抗腐蚀性将有所降低^[2]; 而 Mn 则相反, 在于 Mn 形成的内锈层非常致密, 中后期防腐性能更明显 (-0.6729 到 -0.9866); 稀有金属 (Cr、Ni、Mo) 的抗腐蚀效能中后期将非常突出 (-0.8694 到 -2.6450), 达到 -2.6450, 远高于其它因子, 很多数据也表明, 含 Cr、Ni、Mo 等成分较高的钢材, 对环境因素不敏感, 抗腐蚀性很强。

(2) 环境方面: 降雨始终起着防腐的作用, 因为腐蚀是从杂质污染物在钢表面的附着开始的, 丰富的雨水冲刷使薄锈层中的污染物不能积累, 而一旦进入中后期锈层已形成, 降雨的防腐能力将有所降低 (-0.8224 到 -0.3220); 相对湿度、润湿时间和日照时数三项环境因子在 w_1 、 w_2 中出现了由负值到正值的变化, 符合如下规律: 在腐蚀初期, 强烈日照能使钢表面长期保持干燥状态, 有效降低污染物附着, 相对湿度较高状态下的电解液膜腐蚀性和导电性不高, 三者都起着较强防腐作用; 而一旦进入中后期, 锈层已经形成, 丰富的雨水冲不进锈层内部, 日照受到屏蔽, 高的润湿时间又使其不易被干燥, 即积累了污染物质又提供了腐蚀所必须的浸润状态, 三项因素由初期的防腐因子演变成中后期主要的腐蚀原因^[2]; Cl⁻ 是影响腐蚀的主要污染因素, 尤其在中后期 (0.2384 到 0.9842); 相反 SO₃ 对中后期的腐蚀影

响不大 (0.1015 到 0.0840); 整体上看, 海洋大气环境中大量存在的 Cl⁻ 是值得关注的要点, 而保持钢表面的清洁、干燥是初期防腐的有效手段。

6 结论

(1) 模型具备对绝大多数影响因子的评估能力。

(2) 模型对个别影响因子如“平均温度”因子的仿真数据存在问题, 可能的原因主要是训练样本与网络规模相比数量太少, 对规律函数的拟合精度不够, 贝叶斯正则化算法仅能在现有样本数条件下兼顾泛化和拟合精度, 提高拟合精度的瓶颈仍然是训练样本数量。

(3) 相似的腐蚀研究领域都存在采样周期长而导致的样本数量过少问题, 故如何在保证样本充分性、可靠性的前提下进行适当的样本扩容与降维, 将是今后研究的主要方向。

参考文献

- [1] Liang C F, Hou W T. The effect of alloying on atmospheric corrosion resistance of carbon and low alloy steels [J]. J. Chin. Soc. Corros. Prot., 1997, 17(2): 87-92
(梁彩凤, 侯文泰. 合金元素对碳钢和低合金钢在大气中耐腐蚀性的影响 [J]. 中国腐蚀与防护学报, 1997, 17(2): 87-92)
- [2] Liang C F, Hou W T. Prediction of atmospheric corrosion for steels [J]. J. Chin. Soc. Corros. Prot. 2006, 26(3): 129-135
(梁彩凤, 侯文泰. 钢的大气腐蚀预测 [J]. 中国腐蚀与防护学报, 2006, 26(3): 129-135)
- [3] Wu D Q. Impact factors and model comparison of summer stomatal conductance of six common greening species in cities of northern China [J]. Acta Ecol. Sin., 2007, 27(10): 4141-4148
(吴大千. 中国北方城市常见绿化植物夏季气孔导度影响因素及模型比较 [J]. 生态学报, 2007, 27(10): 4141-4148)
- [4] Pandey C. Multilayer perceptron indamage detection of bridge structures [J]. Comp. Struct., 1995, 28(5): 96-103
- [5] Szewczyk Z, Hajela P. Neural network based damage detection in structure [J]. ASCE J. Eng. Mech. Civil Eng., 1994, 8(2): 163-178
- [6] Zhao H. Neural network supervised control based on Levenberg-Marquardt algorithm [J]. J. Xi'an Jiaotong Univ. 2002, 36(5): 523-527
(赵弘. 基于 Levenberg-Marquardt 算法的神经网络监督控制 [J]. 西安交通大学学报, 2002, 36(5): 523-527)
- [7] Mackay D J C. Bayesian interpolation [J]. Neural Comp., 1992, 4(3): 415-447
- [8] Le Cun Y. Generalization and network design strategies, Technical Report CRG-TR-89-4 [D]. Department of Computer Science, University of Toronto, Canada.

(下转第 235 页)