

# Analysis for Mechanical Properties of Nanoporous Metal Based on Neural Network

Yan Lei, Ercai Zhuo

School of Power and Mechanical Engineering, Wuhan University, Wuhan Hubei  
Email: yappee@126.com

Received: Nov. 8<sup>th</sup>, 2019; accepted: Nov. 22<sup>nd</sup>, 2019; published: Nov. 29<sup>th</sup>, 2019

---

## Abstract

Porous materials with controllable pore size and diverse morphology have been widely used in catalysis, detection, protection, environmental protection and other industrial fields. As an important branch of porous materials, nanoporous metal (NPMs) has nano-level three-dimensional connected pore structure and high specific surface area, which has attracted extensive attention from domestic and foreign academia and industry. Of particular importance is the mechanical integrity and reliability which play a vital role in many applications. However, the influencing factors of the preparation process and measurement process of NPMs are very complex and changeable, resulting in the instability of test results. These factors will inevitably lead to a series of disadvantages such as large fluctuation of experimental data, low accuracy of conclusion, large workload, long time and high cost in the research process. For this reason, the research method of artificial intelligence has been introduced into the field of materials science increasingly widely, but the research on nanoporous materials and their mechanical properties has hardly been reported. The main purpose of this paper is to establish a backpropagation neural network model and predict the mechanical properties of nanoporous gold nanoparticles with the input of ligament size and relative density.

## Keywords

Nanoporous Gold, Mechanical Properties, Neural Network, Ligament Diameter, Relative Density

---

# 基于人工神经网络的纳米多孔金力学性能分析

雷 燕, 卓尔偲

武汉大学动力与机械学院, 湖北 武汉  
Email: yappee@126.com

收稿日期: 2019年11月8日; 录用日期: 2019年11月22日; 发布日期: 2019年11月29日

## 摘要

多孔材料孔径可控、形貌多样, 已广泛应用于催化、检测、防护、环保等工业领域。纳米多孔金属(Nano Porous Metals, NPMs)作为多孔材料的一个重要分支, 内部具有纳米级三维连通孔洞结构和高比表面积, 引起了国内外学术界和工业界广泛的关注。其中, 尤为重要的是在许多应用中起着至关重要的作用的力学完整性和可靠性。然而, NPMs制备过程和测量过程的影响因素十分复杂多变, 造成试验结果的不稳定, 这些因素必然会导致研究过程中的实验数据波动大、结论准确性低、工作量大、时间长、成本高等一系列缺点。为此, 人工智能研究方法引入材料科学研究领域日趋广泛, 但应用于纳米多孔材料及其力学性能研究几乎未见报道。本文的主要目的是建立神经网络模型, 以韧带尺寸和相对密度为输入对纳米多孔金的力学性能进行测试实验。

## 关键词

纳米多孔金, 力学性能, 神经网络, 韧带尺寸, 相对密度

Copyright © 2019 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

自然界中, 拥有纳米孔洞结构的生物材料包括羽毛、鹿角、皮质骨和硅藻等, 这些结构对它们的功能起到了至关重要的作用[1]。自 20 世纪 20 年代, 美国工程师 M. Raney 发现了雷尼镍之后, 多孔金属就引起了全世界科学家的关注。近些年来, 纳米多孔金属的发展更是突飞猛进, 作为一类新型纳米材料, 纳米多孔金属孔径在 0.1~100 nm 之间, 其纳米级的双连续孔洞结构和巨大的比表面积, 使得它们兼具泡沫材料的结构和纳米材料的功能特性: 特别的物理、化学和机械性能、优越的催化性能、表面增强拉曼散射、应变可逆性和高屈服强度, 在传感、催化、燃料电池等领域具有广阔的应用前景[2]。

随着工业发展, 人类社会对资源的需求不断增加。资源的可持续利用变得越来越重要。资源短缺问题, 引起了人们对绿色化工的重视, 尤其是对生产条件更环保且原料成本更低、更易获取的化工产品的生产与加工工艺的重视。相比于传统的催化剂, 纳米多孔金具有更高的比表面积以及更多的化学活性位, 同时金元素无毒且具有优异的耐腐蚀性, 低温下具有良好的催化效果, 是一种理想催化系统, 对于现代工业技术的革新来说具有重要意义。

能量储存是现代面临的一项重大问题。为了解决全球变暖和不可再生化石燃料日益短缺等问题, 开发低成本、高效率 and 更环保的能源转换、储存设备迫在眉睫。设备的性能与材料的性能密切相关, 因此材料技术的突破是开发新一代储能和转换设备的关键。近年来纳米技术的发展表明, 纳米材料用作锂电池、燃料电池和超级电容器的电极或电解液, 表现出独特的性能[3]。纳米多孔材料用作超级电容器电极材料的关键问题, 是在比表面积(确保高电容)和孔径分布(方便电解液流通)之间找到平衡。因此, 具有高表面积、高孔隙率和良好导电性的纳米多孔金属, 是理想的超级电容器电极材料。

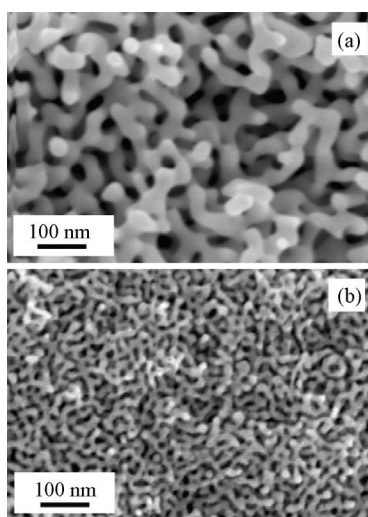
与其他材料一样, 在将纳米多孔金属推向大规模工业应用之前, 对其力学性能和力学可靠性进行研究是必不可少的环节。目前, 人们已经从实验现象上对纳米多孔金属的力学性能有了一定的知识积累, 并且以泡沫金属的研究为基础, 对其破坏机理和力学行为等领域开展了一些理论研究。

纳米多孔金属的性能表征主要通过试验和理论分析两种手段进行研究,前者需要花费大量人力、物力和财力;后者由于成分、结构的可设计性和制备工艺、加工方法的差异,使得纳米多孔金属的性能数据呈现出极大的分散性,其性能是多种因素互相影响和作用的结果,而材料力学性能与影响因素之间通常是典型的非线性关系,难于用数学模型予以描述。并且,纳米多孔金属的设计与应用主要取决于材料的性能,材料的性能又受到许多复杂因素的影响,这给材料的性能测试带来很大的困难。

随着人工智能技术不断地成熟与发展,该技术在纳米多孔金属力学性能建模方面越来越显示出明显的优越性。利用已得的试验数据,将人工智能技术应用于纳米多孔金属的力学性能测试之中,力求以较少的试验量获得充分可靠的信息,从而为降低纳米多孔金属的试验和设计成本,减少投资,缩短研制周期,为扩大其应用提供一种新的思路。

## 2. 纳米多孔金属的结构与力学性质

纳米多孔金属材料骨架的微观尺寸处于纳米尺度,大多数制得的纳米材料呈现出由尺寸大小不一的开孔构成的双连续微观结构,如图1所示,其具有体积比高、导电性好、化学稳定性好、生物相容性好、渗透性好等优点。2001年,Erlebacher等[5]通过实验与计算机模拟结合的方法,发现纳米多孔结构的形成是一个内在动力学过程。在纳米多孔结构形成过程中,电位差驱动的活泼原子溶解,惰性原子在界面上的扩散,材料表面积的不断增大,三个因素同时作用。制备纳米多孔金属的主要方法有:模板法、电化学法以及脱合金法等。除了通过实验方法对制备的多孔金属进行力学分析测试外,Newman等人[6]通过模拟由A和B两种组分组成的二元流体混合物的旋态分解得到的模型与纳米多孔金属微观结构非常相似,可以在分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟用于深度研究纳米多孔金属变形机制和力学性能。



**Figure 1.** SEM micrographs of dealloyed 25% Au foam by (a) Free corrosion and (b) Potentiostatically driven [4]

**图 1.** (a) 自由腐蚀和(b) 恒电势驱动下脱合金 25%纳米多孔金的 SEM 照片[4]

为了探索纳米多孔材料的性能,人们进行了大量的实验和理论研究。特别是纳米孔金(nanoporous gold, np-Au, NPG),具有制备简单、抗腐蚀、抗氧化稳定性好[7]等优点,是研究纳米孔金属力学行为的理想选择。np-Au是一种孔洞介于2 nm和10 μm之间的双连续孔洞可调材料,大多数的研究现状表明[8] [9],其弹性模量在5~13 GPa之间,相对密度和屈服强度的取值范围分别是0.25~0.40和16~150 MPa。Biener

等人[8]的实验表明,即使相对质量密度低至 0.25, np-Au 的承载能力(如屈服强度)仍然远远大于大块 Au。众所周知,若材料的尺寸小于 10  $\mu\text{m}$ ,其力学性能与宏观大尺寸情况下相比有明显改变。其主要原因是在微观情况下,位错、孪晶、晶界滑移等塑性变形[10]受到长度尺度如晶粒尺寸、试样大小、大应变梯度、钝化层和位错源的缺失等因素[11]的直接影响。到目前为止,对纳米多孔材料力学性能的理论研究大多基于 Gibson-Ashby 模型,然而 Gibson-Ashby 模型并不能解释微观结构的尺寸效应,因此,一些研究通过实验和计算对方程进行了修正[9] [12]。此外, Feng 等人[13]提出了一种考虑表面能和残余表面应力影响的单细胞微力学模型来测试纳米孔材料的尺寸依赖弹性性能, Xia 等[14]从理论上研究了实验中观察到的具有分层结构的纳米多孔材料的力学性能。

### 3. 基于神经网络的力学性能分析

实际的工程应用问题往往是非线性的, Gibson-Ashby 及其修正的模型都不能很准确的刻画出 np-Au 的力学性能,反向传播(backpropagation, BP)神经网络研究方法已经广泛应用于材料科学研究的各个领域,然而用于 np-Au 力学性能定量研究的神经网络模型却未见有报道。究其原因在于影响 np-Au 力学性能的因素较多且量化较为困难,而 BP 神经网络通过自身的自学习自适应性,不需要任何的先验函数或者既定公式,它直接作用于已经获得的样本数据,用训练好的网络模型进行 np-Au 力学性能的推理测试,从而对 np-Au 的力学性能进行准确的预报,减少了大量繁琐的步骤和工作量,缩短了研究时间,为 np-Au 的研究提供了新的思路和方法。

#### 3.1. 人工神经网络的特点

人工神经网络对不确定的非线性关系可以不断学习和适应,来不断的完成自身网络,进而可以学习处理和识别相似的图像和数据,呈现出非常强的自主学习能力。

BP 神经网络即目前神经网络模型中,运用的最多的、最具有代表性的误差反向传播多层前馈式网络。BP 神经网络一般由输入层(Input layer)、隐藏层(Hidden layer)和输出层(Output layer)三层结构组成,隐层可以有一层或多层。BP 算法包括信号的前向传播和误差的反向传播两个部分。正向传播即为输入信号通过隐藏层作用于输出神经元,经过非线性函数变换,产生输出信号。通过计算输出与期望输出的误差,则进入了反向传播过程:输出误差经由隐藏层向输入层逐层反向传播,逐层修改权重值,使得误差沿梯度方向下降,经过反复学习训练,最终获得一个使得误差尽量小的网络参数(权值和阈值),训练结束。BP 神经网络具有非常优秀的非线性映射能力,可以通过最简单的三层网络以极高的精度逼近非线性连续函数,对于工程上面临绝大多数的高度非线性映射和不确定性的实际问题有着良好的应用前景。然而, BP 神经网络也有如下一些缺点,如:算法可能陷入局部极值,收敛速度慢,学习复杂性高等。

#### 3.2. BP 神经网络参数的选择

在实现 NPG 力学模型的过程中,需要自行设置的超参数一共有:

1) 隐藏层层数,设置为 3 层。一般的 BP 神经网络构输入层 - 隐藏层 - 输出层。隐藏层数的多少决定了神经网络的精度和计算量大小,然而实际问题的绝大多数均可以由三层 BP 神经网络来完成,任意的连续函数都可以使用其进行收敛运算。因此在建立 NPG 力学模型时采用三层神经网络;

2) 隐藏层神经元的数量,设置为 8。若隐含神经元数太少,会使神经网络误差过大,失去了模型建立的意义。隐含神经元数过多,会使得计算量过大训练时间太长甚至不能收敛从而形成死循环。一些经验公式可用于确定隐含层神经元  $m$ :

$$m = \begin{cases} n + 0.618(n - t) \\ t - 0.618(t - n) \end{cases} \quad (1)$$

$$m = \sqrt{n+t} + \alpha \quad (2)$$

$$m = \sqrt{nt} \quad (3)$$

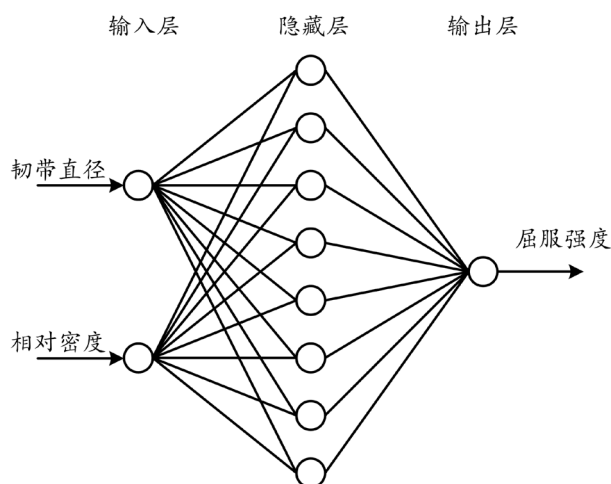
$$m = 2n+1 \quad (4)$$

公式中  $n, t, \alpha$  分别代表输入量个数、输出量个数和小于 10 的非负常数。

确定 BP 神经网络隐含层的方法一般除了上述的经验公式外还可以根据计算神经网络的均方根误差  $J$  来确定, 具体的计算公式为:

$$J = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})^2 \quad (5)$$

公式中  $m$  为样本个数,  $\hat{y}$  为期望输出值,  $y$  为 BP 网络实际输出值。经过多次计算得出当隐含层数神经元为 8 时, BP 神经网络模型的均方根误差最小。因此, 最终确定神经网络结构为 2-8-1 三层全连接 BP 神经网络结构如图 2 所示。



**Figure 2.** Prediction BP network model for Nanoporous gold  
**图 2.** NPG 屈服强度 BP 网络模型

- 3) 训练样本和检测样本的划分比例, 本文将总数据集 60% 的样本作为训练集;
- 4) 训练方法的选择, 可以选择的训练方法有梯度下降法、RMSProp、Momentum 和 Adam 优化算法等, 本文采用梯度下降法对网络模型进行训练;
- 5) 训练次数, 训练次数设定为 5000 次。

### 3.3. 样本数据

本文所搜集的数据均来自于实验, 均为毫米尺寸 NPG 样品的微拉伸实验和纳米压痕实验所得。NPG 的宏观弹性模量和流动应力依赖于韧带尺寸、相对密度和微观结构。本文总共搜集了 34 组数据, 包括实际和模拟的 NPG 的相对密度、韧带尺寸、弹性模量和屈服强度。

对数据的统计分析情况如下:

- 1) 相对密度: 指的是 NPG 的密度与密实块体金的密度之比, 考虑了体积收缩效应。其中, 通过脱合金制备和相场法模拟所得的 NPG 的相对密度都在 20%~40% 之间。
- 2) 韧带尺寸: 如图 3, 某一纳米多孔金样品的韧带尺寸并不是统一的, 常用韧带直径的平均值来表示韧带尺寸。不同的脱合金方法可以制造不同韧带尺寸的 NPG, 其中常用  $\text{HNO}_3$ 、 $\text{HCl}/\text{NaOH}$  对  $\text{Au-Ag}$ 、

Al-Au 进行化学脱合金, 其中 Au-Ag 脱合金所制得的 NPG 韧带大小平均值为 15 nm, Al-Au 所制得的韧带大小平均值在 10~80 nm 之间。

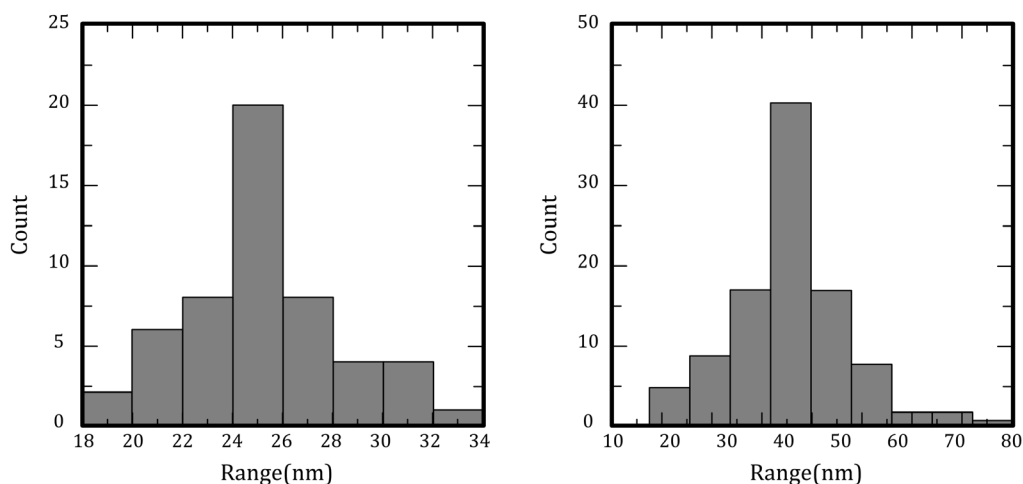


Figure 3. Distribution of ligament diameter [9]  
图 3. 韧带直径分布示意[9]

表 1 是对收集到的 NPG 样本数据的统计表, 其中相对密度用小数表示, 韧带尺寸用韧带直径表示, 单位为 nm, 屈服强度的单位为 MPa。

Table 1. Statistical table of NPG sample data  
表 1. NPG 样本数据的统计表

	相对密度	韧带直径(nm)	弹性模量(GPa)
最大值	0.35	65.3	86.79
最小值	0.2	20.0	8.27
样本均值	0.34	42.58	22.34

3) 屈服强度, 这里主要讨论实验所得的屈服强度数据。实验所得的屈服强度包括微拉伸所得和纳米压痕所得。纳米压痕中直接获得的数据是 np-Au 的硬度而非屈服强度, 由于应力集中等, 其与屈服强度之间的差异是可以预料的, 所以需要纳米压痕实验所得硬度数据进行处理。

在纳米压痕试验过程中, 通常会对纳米多孔金属的行为进行假设: 纳米多孔金属的压痕可以认为相当于多孔材料的正常压缩。对于相对密度小于 0.3 的泡沫材料, Wilsea 等人[15]确定材料在压头穿过程中不会横向膨胀, 并会容纳施加的位移, 因为孔隙只是在压头下方塌陷。这一行为对应于近似于零的塑性泊松比(塑性变形时压头下的横向应变与轴向应变之比)的假设, 这将代表一种直至韧带塌陷和致密化完全可压缩的材料。这是一个典型的假设, 即在塑性变形过程中, 多孔结构不受周围环境的约束, 所以, 屈服强度通常被假定为与测量的硬度相等。一些计算研究发现, 多孔材料的塑性泊松比接近于 0, 但这些研究中的相对密度范围一般在 0.1 以下。同时, 随着塑性泊松比从 0 增加到 0.5, 硬度与屈服强度比从 1 迅速上升到 3 (塑性流动过程中不可压缩的致密材料的典型特征: 硬度与屈服强度之比接 3)。综上所述, 如果纳米多孔金属的纳米压痕直接等效于传统多孔材料压缩试验, 那么对于单轴压缩的 np-Au 试样, 应测量非常近似为零的塑性泊松比。

然而, 这一假设并不成立。Volkert 等人[16]报道, 在压缩 np-Au 微柱时, 测定了非零的泊松比: 在

测试前后分别测量微柱的直径, 并假设在压缩过程中(试样变形主要为塑性)保持恒定, 他们计算出平均塑性泊松比为 0.20。此外, Nicolas 等人的两项[17] [18]研究表明, 在毫米尺度的拉伸和压缩试验中, 连续测量到了弹性状态下的非零泊松比。在单晶 np-Au 的研究中, 弹性下的平均弹性泊松比为 0.22, 这个值非常类似于由 Volkert 等人确定的 0.20 塑性泊松比。由于 np-Au 宏观极脆, 无法直接测量毫米试样在拉伸作用下的塑性变形, 因此无法通过拉伸试验确定塑性泊松比。根据 Shaw 等[19]报道的塑性泊松比与硬度-屈服强度比的演化关系, 平均泊松比为 0.22, 表明 np-Au 的硬度-屈服强度比为 2.65。

将该值作为校正因子, 类似于文献[20]中较早的校正, 将该因子应用于本研究中获得的纳米压痕结果, 可以得到一组新的屈服强度值。这些新值可以与毫米级拉伸试验结果进行比较。

### 3.4. BP 神经网络训练结果

用上述条件所形成的训练方案, 建立相应的纳米多孔金的屈服强度(Yield Strength, YS)的 BP 神经网络模型, 进行训练得到以下结果。

实验样本数据为微拉伸实验和纳米压痕实验所得, 已经归一化处理, 处理公式为:

$$x_{\text{scaled}} = \frac{x - x_{\text{min}}}{x_{\text{max}} - x_{\text{min}}} \quad (6)$$

式中:  $x_{\text{scaled}}$  为归一化后的数据,  $x$  为样本数据,  $x_{\text{min}}$  和  $x_{\text{max}}$  分别样本最小值和最大值。

在神经元层数为 3 层(1 层输入层, 1 层隐藏层, 1 层输出层), 隐藏层神经元数为 8, 训练集占总数据集 60%, 学习率为 0.2。训练模型表示通过有标签样本来学习(确定)所有权重和偏差的理想值。在监督式学习中, 机器学习算法通过检查多个样本并尝试找出可最大限度地减少损失的模型, 损失是对糟糕预测的惩罚。也就是说, 损失是一个数值, 表示对于单个样本而言模型预测的准确程度。如果模型的预测完全准确, 则损失为零, 否则损失会较大, 训练模型的目标是从所有样本中找到一组平均损失“较小”的权重和偏差。本模型采用的是公式(5), 也就是均方差(或者 L2)作为损失函数, 在训练次数为 5000 次的条件下, 训练得到训练集均方误差为 0.0013101, 损失曲线如图 4, 测试集均方误差为 0.00290034。

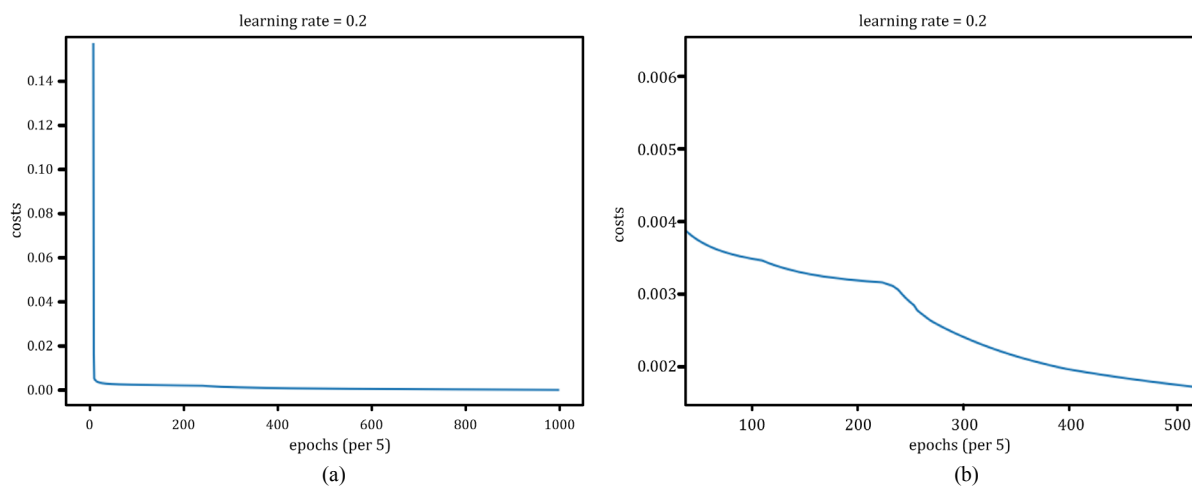


Figure 4. Loss function value of testing set

图 4. 训练集损失值变化

训练集损失值变化曲线如图 4, 其中(a)是损失曲线的整体下降趋势, (b)为损失值下降细节, 可以见到, 神经网络的损失值在训练初期下降很快, 在训练不到 100 次的情况下, 就从初始的~0.14 下降到  $4 \times 10^{-3}$  以下, 训练 200 次后损失值保持稳定并略有上升, 但很快又降低, 训练 500 次后, 下降趋于平缓, 收敛

速度变慢。

图 5 是训练集数据的真实值和测试值的比较, 其中蓝色圆点为真实值, 红色折线为测试值的连线。图 6 是将训练好的神经网络参数用于测试集所得到的测试值和真实值的比较, 其中蓝色线条为测试值构成的折线, 橙色线条表示真实值。从图 5 可以看出, 神经网络对训练集的拟合效果并不好, 但相对来说, 图 6 所示的测试集的拟合效果反而表现得不错, 训练集和测试集的损失都在  $10^{-3}$  数量级, 误差都大于一般所要求的小于  $10^{-5}$ 。阅读表 2, 最小误差为 3.0%, 预测值的平均值非常接近真实值, 但同时也看到误差绝对值最大达到了 43.04%, 回看训练数据, 依旧可以发现第 2、3、10、14 组等数据在数据集中为孤例, 若去除误差值在 10% 以上的孤例, 可得到 9.12% 的误差, 误差可降低 6.24 个百分点。从另一个方面来看, BP 神经网络作为数据驱动方法的一个分支, 其做出精准预测的基础是较大数量的样本数据, 本文收集到的数据有限, 可以从某种程度上对本文的方法进行验证, 然而样本数据量偏少对本文的预测的准确性也有一定的影响。

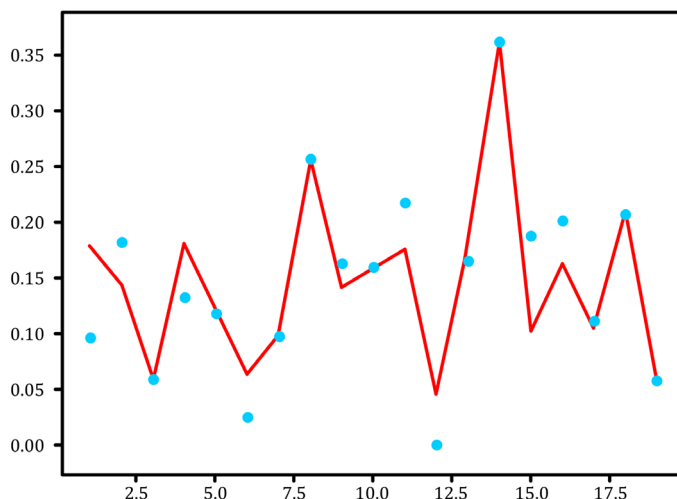


Figure 5. Real value and test value of training set

图 5. 训练集的真实值和测试值

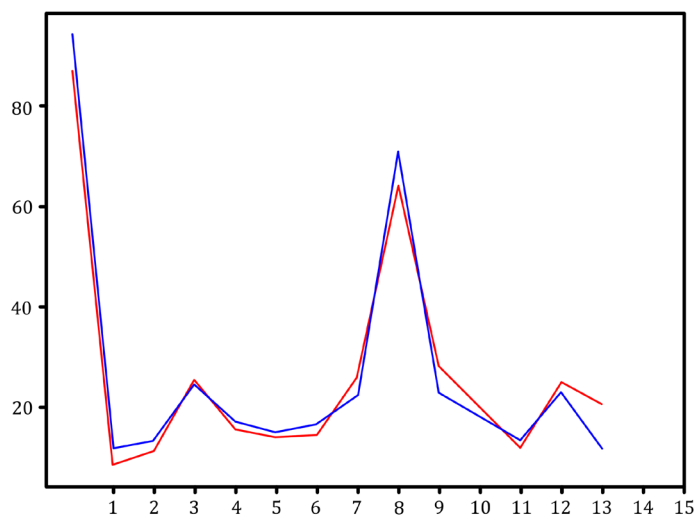


Figure 6. Real value and test value of testing set

图 6. 测试集的真实值和预测值



**Table 2.** Comparison between predict value based on BP neural network and real value of yield strength for NPG  
**表 2.** BP 神经网络模型 NPG 屈服强度预测值和真实值的比较

组别	本构参数		真实值	屈服强度	
	相对密度	韧带直径(nm)		预测值	误差(%)
1	0.35	18.9	86.79	94.19	8.52
2	0.27	43.0	8.35	11.58	38.69
3	0.28	43.0	11.06	13.16	18.98
4	0.33	33.4	25.30	25.54	3.00
5	0.3	50.0	15.39	16.84	9.41
6	0.29	43.0	13.78	14.75	7.04
7	0.3	43.0	14.38	16.33	13.59
8	0.33	58.7	25.80	22.23	13.84
9	0.33	19.1	64.15	71.03	10.73
10	0.34	43.0	27.86	22.66	18.67
11	0.31	43.0	19.60	17.91	8.62
12	0.28	43.0	11.74	13.16	12.11
13	0.33	65.3	24.90	22.72	8.77
14	0.27	41.0	20.33	11.58	43.04
平均值	0.31	41.96	26.39	26.69	15.36

Xia [14]和 Nicolas [20]的研究表明, 屈服强度随韧带直径的变化呈幂律关系, 与相对密度之间呈近似线性关系, Nicolas 还给出了用微拉伸实验和纳米压痕实验数据推导所得的屈服强度公式:

$$\sigma^* = 1.939\sigma_s \left( \frac{\rho^*}{\rho_s} \right)^2, \sigma_s = 0.0328l^{-0.551} \quad (7)$$

式中\*表示泡沫性能,  $s$  表示固体性能,  $\rho^*/\rho_s$  为相对质量密度,  $l$  为韧带直径。

本文和文献[17]数据来源都是微拉伸实验和纳米压痕实验数据, 同样对纳米压痕的数据都采用 2.65 的校正因子, 表 3 中列出了通过公式(7)计算的屈服强度值, 同时也列出了相同参数下利用 BP 神经网络预测的数据, 通过表中的数据可以看出, 本文 BP 神经网络的平均误差值为 7.56%, 而式(7)所预测的屈服强度误差平均值高达 65.17%, 也从一个侧面反映了 BP 神经网络的有效性。

**Table 3.** Comparison of result from equation and BP neural network  
**表 3.** BP 神经网络和公式预测值对比

组别	本构参数		真实值	预测值	屈服强度		
	相对密度	韧带直径(nm)			误差(%)	公式计算值	误差(%)
1	0.35	18.9	86.79	94.19	8.52	73.37	15.47
4	0.33	33.4	25.30	25.54	3.00	45.96	81.64
5	0.3	50.0	15.39	16.84	9.41	28.67	86.28
6	0.29	43.0	13.78	14.75	7.04	28.51	106.88
11	0.31	43.0	19.60	17.91	8.62	33.95	73.19
13	0.33	65.3	24.90	22.72	8.77	31.76	27.56
平均值	0.32	42.3	30.96	31.99	7.56	40.37	65.17

## 4. 结论

本文选用 BP 神经网络模型分析纳米多孔金的屈服强度, 通过搜集整理 34 组力学性能数据样本, 建立纳米多孔金以相对密度和韧带直径为输入, 屈服强度为输出的三层 BP 网络预测模型, 测试集均方根误差数量级为 0.145830 (模拟数据)、0.00290034 (实验数据), 屈服强度平均误差控制在 10% 以内。

通过对纳米多孔金力学性能的模拟和研究分析, 可以得出以下结论:

1) 纳米多孔金的力学性能是由其相对密度、韧带尺寸甚至是微观结构决定的, 在相同结构条件下, 结合纳米多孔金的相对密度和韧带直径典型数据可以用 BP 神经网络拟合其屈服强度的经验公式。

2) BP 神经网络进行纳米多孔金力学性能的预测, 与公式推导相比, 不需要研究其力学性能和本构参数之间线性关系或者幂律关系, 为研究纳米多孔金属的力学性能提供了一个新的思路。

3) 同时可以看到, 对纳米多孔金力学性能的研究缺乏有效的数据库, 所搜集到的数据比较少, 通过 BP 神经网络作基础性研究, 其可靠性和精度还需要大量的数据作为支撑。

## 基金项目

国家自然科学基金(51401148)。

## 参考文献

- [1] Sun, X., Xu, G., Li, X., *et al.* (2013) Mechanical Properties and Scaling Laws of Nanoporous Gold. *Journal of Applied Physics*, **113**, Article ID: 23505. <https://doi.org/10.1063/1.4774246>
- [2] 李元伟, 张猛, 王小健, 等. 纳米多孔金属的制备方法及其力学性能的研究进展[J]. 航空材料学报, 2018, 38(5): 10-23.
- [3] Attard, G.S., Bartlett, P.N., Nicholas, R.B.C., *et al.* (1997) Mesoporous Platinum Films from Lyotropic Liquid Crystalline Phases. *Science*, **278**, 838-840. <https://doi.org/10.1126/science.278.5339.838>
- [4] Hodge, A.M., Hayes, J.R., Caro, J.A., *et al.* (2006) Characterization and Mechanical Behavior of Nanoporous Gold. *Advanced Engineering Materials*, **8**, 853-857. <https://doi.org/10.1002/adem.200600079>
- [5] Erlebacher, J., Aziz, M.J., Karma, A., *et al.* (2001) Evolution of Nanoporosity in Dealloying. *Nature*, **410**, 450-453. <https://doi.org/10.1038/35068529>
- [6] Newman, R., Corcoran, S., Erlebacher, J., *et al.* (1999) Alloy Corrosion. *MRS Bulletin*, **24**, 24-28. <https://doi.org/10.1557/S0883769400052660>
- [7] Biener, J., Hodge, A.M., Hayes, J.R., *et al.* (2006) Size Effects on the Mechanical Behavior of Nanoporous Au. *Nano Letters*, **6**, 2379-2382. <https://doi.org/10.1021/nl061978j>
- [8] Biener, J., Hodge, A.M., Hamza, A.V., *et al.* (2005) Nanoporous Au: A High Yield Strength Material. *Journal of Applied Physics*, **97**, Article ID: 24301. <https://doi.org/10.1063/1.1832742>
- [9] Hodge, A.M., Biener, J., Hayes, J.R., *et al.* (2007) Scaling Equation for Yield Strength of Nanoporous Open-Cell Foams. *Acta Materialia*, **55**, 1343-1349. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2006.09.038>
- [10] Lee, D., Wei, X., Zhao, M., *et al.* (2007) Plastic Deformation in Nanoscale Gold Single Crystals and Open-Celled Nanoporous Gold. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **15**, S181-S192. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/15/1/S15>
- [11] Gupta, G., Thorp, J.C., Mara, N.A., *et al.* (2012) Morphology and Porosity of Nanoporous Au Thin Films Formed by Dealloying of Au<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>. *Journal of Applied Physics*, **112**, Article ID: 94320. <https://doi.org/10.1063/1.4764906>
- [12] Mangipudi, K.R., Epler, E. and Volkert, C.A. (2018) On the Multiaxial Yielding and Hardness to Yield Stress Relation of Nanoporous Gold. *Scripta Materialia*, **146**, 150-153. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2017.11.033>
- [13] Feng, X., Xia, R., Li, X., *et al.* (2009) Surface Effects on the Elastic Modulus of Nanoporous Materials. *Applied Physics Letters*, **94**, Article ID: 11916. <https://doi.org/10.1063/1.3067999>
- [14] Xia, R., Feng, X. and Wang, G. (2011) Effective Elastic Properties of Nanoporous Materials with Hierarchical Structure. *Acta Materialia*, **59**, 6801-6808. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.07.039>
- [15] Wilsea, M., Johnson, K.L. and Ashby, M.F. (1975) Indentation of Foamed Plastics. *Mechanical Sciences*, **17**, 457. [https://doi.org/10.1016/0020-7403\(75\)90044-2](https://doi.org/10.1016/0020-7403(75)90044-2)

- 
- [16] Volkert, C.A., Lilleodden, E.T., Kramer, D., *et al.* (2006) Approaching the Theoretical Strength in Nanoporous Au. *Applied Physics Letters*, **89**, Article ID: 61920. <https://doi.org/10.1063/1.2240109>
- [17] Briot, N.J., Kennerknecht, T., Eberl, C., *et al.* (2014) Mechanical Properties of Bulk Single Crystalline Nanoporous Gold Investigated by Millimetre-Scale Tension and Compression Testing. *Philosophical Magazine*, **94**, 847-866. <https://doi.org/10.1080/14786435.2013.868944>
- [18] Balk, T.J., Eberl, C., Sun, Y., *et al.* (2009) Tensile and Compressive Microspecimen Testing of Bulk Nanoporous Gold. *JOM*, **61**, 26-31. <https://doi.org/10.1007/s11837-009-0176-6>
- [19] Shaw, M.C. and Sata, T. (1966) The Plastic Behavior of Cellular Materials. *Mechanical Science*, **8**, 469-478. [https://doi.org/10.1016/0020-7403\(66\)90019-1](https://doi.org/10.1016/0020-7403(66)90019-1)
- [20] Briot, N.J. and Balk, T.J. (2015) Developing Scaling Relations for the Yield Strength of Nanoporous Gold. *Philosophical Magazine*, **95**, 2955-2973. <https://doi.org/10.1080/14786435.2015.1078512>