

文章编号: 1673-5196(2009)02-0005-04

基于 MATLAB 的灰色算法对 304 不锈钢腐蚀行为的预测

杨瑞成, 王 彬, 张天云

(兰州理工大学 甘肃省有色金属新材料重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

摘要: 采用灰色理论模型, 用 MATLAB 语言编程, 对 304 奥氏体不锈钢的腐蚀失重试验数据进行分析、检验, 进而预测出未来时段的腐蚀量。一致性检验结果表明, 预测模型的计算值与实际测定值非常接近, 说明灰色预测方法可以真实地反映腐蚀失重的实际情况。该方法可进一步预测试样的腐蚀趋势。

关键词: 灰色预测; GM(1, 1)模型; MATLAB; 失重法

中图分类号: TG174.3 **文献标识码:** A

Prediction of corrosive behavior of stainless steel 304 by using grey algorithm and MATLAB

YANG Rui-cheng, WANG Bin, ZHANG Tian-yun

(State Key Lab. of Gansu Advanced Non-ferrous Metal Materials, Lanzhou Univ. of Tech., Lanzhou 730050, China)

Abstract: The data of weight-loss of stainless steel 304 was checked and analyzed by using the model on grey theory and programming with MATLAB language, so that the corrosion amount at other times could be predicted. The result of consistence examination showed that the evaluation of corrosive data with this prediction model was very close to that with actual measurement, showing that the grey prediction method could predict actual corrosive weight-loss and predict further the trend of corrosion for the test sample.

Key words: grey prediction; GM(1, 1) model; MATLAB; weight-loss method

腐蚀是材料,特别是金属材料的一种重要失效形式,材料一旦被腐蚀,其强度、塑性等主要力学性能指标显著下降,降低了构件的耐久性和安全性,更严重的后果就是直接导致事故。统计表明,美国空军1997年的直接腐蚀维护费用高达8亿美元,还不包括飞机非战备状态的无形或间接损失费用。因此,探讨材料耐腐蚀性能显得极为重要,但考虑到材料种类的繁杂性以及使用环境的多样性,就需要对材料进行大量的相关实验,而腐蚀实验的周期往往较长,同时需要消耗大量的人力物力。于是,如何利用有限的材料腐蚀数据进行分析 and 预测具有十分重要的实用价值。

一般来说,在现阶段的科技条件下,具体腐蚀数据是可以测量的^[1],具有所谓“白”特征。同时,引起材料腐蚀变化的影响因素主要是材料的内部结构

及组分,也包括使用环境等外部因素,由于其复杂性以及理论和技术手段的欠缺,往往没有办法准确测定,可以认为腐蚀的影响因素具有所谓“灰”特征。这样,很难建立腐蚀过程影响因素到腐蚀数据的精确映射关系。但是,作为一个统一的系统,材料的腐蚀数据与影响因素之间存在着明显的逻辑因果关系,腐蚀数据的发展在质变之前应该保持一定的规律性,是可以进行外推预测的,关键在于如何选择一种合理有效的预测方法^[2-3]。考虑到腐蚀现象中“灰”影响因素与“白”测量数据的特点,本文就如何利用灰色理论^[4]建立预测系统进行研究,并且完成了程序编制。

1 灰色模型理论与方法

1.1 GM(1, 1)的建立

灰色系统预测模型 GM(1, 1)是灰色理论应用的一种重要方法,其基本思路是,对一个随时间变化的数据列通过 1-AGO 处理,生成新的数据列,建

收稿日期: 2008-08-23

基金项目: 甘肃省研究生导师科研基金(0511204)

作者简介: 杨瑞成(1946-),男,江苏宝应人,教授,博导。

立相应白化微分方程求解, 还原后得灰色 GM(1, 1) 预测模型.

建立 GM(1, 1) 只需一个数列 $x^{(0)}$, 其基本算式如下:

对原始数据

$$x^{(0)} = (x^{(0)}(1), x^{(0)}(2), \dots, x^{(0)}(n))$$

作 1-AGO 处理, 即

$$x^{(1)}(k) = \sum_{r=1}^k x^{(0)}(r)$$

有

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= (x^{(1)}(1), x^{(1)}(2), \dots, x^{(1)}(n)) = \\ &= (x^{(0)}(1), x^{(0)}(1) + x^{(0)}(2), \dots, \\ &= x^{(0)}(n-1) + x^{(0)}(n)) \end{aligned}$$

$x^{(1)}$ 可以建立下述白化形式的方程:

$$\frac{dx^{(1)}}{dt} + ax^{(1)} = u \quad (1)$$

这是一个一阶单变量的微分方程的模型, 可以记为 GM(1, 1).

记参数列为

$$\hat{a} = \begin{bmatrix} a \\ u \end{bmatrix}$$

按最小二乘法求 \hat{a} , 得

$$\hat{a} = (B^T B)^{-1} B^T y_N \quad (2)$$

式中

$$B = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}[x^{(1)}(1) + x^{(1)}(2)] & 1 \\ -\frac{1}{2}[x^{(1)}(2) + x^{(1)}(3)] & 1 \\ \vdots & \vdots \\ -\frac{1}{2}[x^{(1)}(n-1) + x^{(1)}(n)] & 1 \end{bmatrix}$$

$$y_N = [x^{(0)}(2), x^{(0)}(3), \dots, x^{(0)}(n)]^T$$

从而解出 a, u 值.

白化形式微分方程的解为

$$x^{(1)}(k+1) = (x^{(0)}(1) - \frac{u}{a})e^{-ak} + \frac{u}{a} \quad (3)$$

作一次累减生成, 得到还原值

$$\hat{x}^{(0)}(k) = \hat{x}^{(1)}(k+1) - x^{(1)}(k)$$

1.2 选用 GM(1, 1) 模型条件

GM(1, 1) 模型要求原始数列 x 应具有非负性、单调性等变化态势. 模型具有可延伸性(预测性), 需要数列维数 $n \geq 4$, 一般取 4~6 个数据建模. 当所求 GM(1, 1) 模型的发展系数 $|a| \geq 2$ 时, 一步预测误差过大, GM(1, 1) 模型失去意义.

1.3 GM(1, 1) 模型的检验^[5]

灰色 GM(1, 1) 模型建立之后, 为保证其预测的可靠性, 必须对该模型进行精确性检验. 一般需要检

验 3 项指标, 包括相对误差, 均方差比值以及小误差概率.

对于原始数列

$$x^{(0)} = (x^{(0)}(1), x^{(0)}(2), \dots, x^{(0)}(n))$$

得到相应模拟数列

$$\hat{x}^{(0)} = (\hat{x}^{(0)}(1), \hat{x}^{(0)}(2), \dots, \hat{x}^{(0)}(n))$$

1) 计算相对误差

先求残差序列

$$\epsilon^{(0)} = x^{(0)} - \hat{x}^{(0)}$$

从而可得到相对误差

$$\Delta = \epsilon^{(0)} / x^{(0)} \times 100\% \quad (4)$$

而相对误差均值为

$$\bar{\Delta} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \Delta_k \quad (5)$$

2) 计算均方差比值

先求原始数据列的均值

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x^{(0)}(k)$$

原始数据列的方差

$$s_1^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (x^{(0)}(k) - \bar{x})^2$$

再求残差序列的均值

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \epsilon(k)$$

残差序列的方差

$$s_2^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (\epsilon(k) - \bar{\epsilon})^2$$

从而得均方差比值

$$C = s_2 / s_1 \quad (6)$$

而小误差概率为

$$P = P\{|\epsilon(k) - \bar{\epsilon}| < 0.6745 s_1\} \quad (7)$$

如果 $\bar{\Delta}, C, P$ 都在允许范围之内, 则可以计算预测值, 如果不在允许范围之内则需要残差修正. 给定 $\bar{\Delta}, C, P$ 的一组取值, 就确定了检验模型精度的一个等级. 常用的精度等级见表 1.

表 1 模型精度判断标准

Tab. 1 Judgment standards of model precision

精度等级	相对误差限	C	P
一级	0.01	0.35	0.95
二级	0.05	0.5	0.80
三级	0.10	0.65	0.70
四级	0.20	0.80	0.60

1.4 GM(1, 1) 的改进模型

灰色系统模型中 dx/dt 所对应的背景值 $z(k)$ 对预测精度有很大的影响, 以往认为, 在 $\Delta t=1$ 的很短时间内, 变量 $x^{(1)}(k) \rightarrow x^{(1)}(k+\Delta t)$ 不会出现突

量, 为此, 在 Δt 很短时间内, dx/dt 的背景值取其平均值, GM (1. 1) 模型中背景值选取如下:

$$z^{(1)}(k) = [x^{(1)}(k) + x^{(1)}(k + 1)] / 2 \tag{8}$$

加权灰色预测模型——PGM (1. 1) 模型引入了一种新的背景值计算方法, 背景值的确定不是取其平均值, 而是依据 $x^{(1)}(k)$ 、 $x^{(1)}(k + 1)$ 的影响用加权的方式来确定, 即

$$z^{(1)}(k) = px^{(1)}(k) + (1 - p)x^{(1)}(k + 1) \tag{9}$$

式中: p 称为背景值最佳生成系数 (也称为 p 权), p 值的取值为 $[0, 1]$. 建立预测模型时, 通过一定的优化算法, 可确定最佳的生成系数, 使原始值与模型预测值之差的平均模拟相对误差达到最小, 即由下式确定 p :

$$\Delta_{\min} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \left| \frac{\varepsilon(k)}{x^{(0)}(k)} \right|$$

进而由式 (9) 得到合理的背景值, 建立更高精度的灰色预测模型. 这里选择的算法是迭代法^[6].

1.5 具体计算步骤

对于具体数据, GM (1. 1) 方法对原始数据进行一次累加生成, 再由式 (2) 求出 a, u 值, 其中所需参

数 B, y_N 已在 1. 1 节中给出, 这样即建立起 GM (1. 1) 的白化形式解, 如式 (3), 式 (3) 的解再经过一次累减生成, 即还原为模拟值.

PGM (1. 1) 方法多出了求 p 值的预处理过程, 求出 p 值后代入式 (9), 求得新的背景值 $z^{(1)}(k)$, 之后的具体计算步骤与 GM (1. 1) 方法相似.

2 304 奥氏体不锈钢腐蚀试验数据的预测

对 304 奥氏体不锈钢在质量分数为 60% 的 H_2SO_4 溶液中进行全浸法挂片实验, 腐蚀评定方法采用失重法, 得到的实验数据见表 2.

表 2 不锈钢失重法腐蚀试验数据

Tab. 2 Test data of corrosion test with weightless method for stainless steel 304

腐蚀时间/h	12	24	36	48
失重量/g	0.077 6	0.120 7	0.160 5	0.189 2

注: 温度为 40 ℃.

建立 GM (1, 1) 模型, 用 MATLAB 编程^[7, 8], 预测下一时段的腐蚀量, 预测情况见图 1.

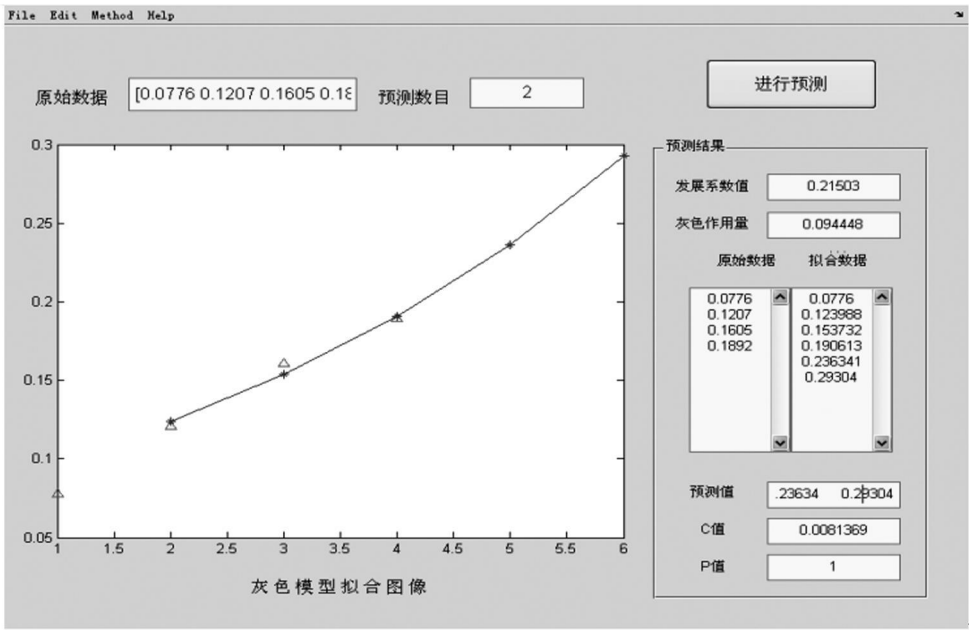


图 1 灰色预测软件界面
Fig. 1 Interface of grey prediction software

程序 GUI 提供了合理的人机交互接口, 使用者不必理解专业的算法理论, 只需提供合适的初始数据, 即可得到灰色方法计算的预测值, 还可以得到均方差比值 C , 小误差概率 P 等相关数据, 并且提供了灰色模型的拟合图像. 图中三角点代表原始数据, 星号点代表模拟数据, 模拟数据的连线反映模型的

预测趋势. 表 3 为原始数据列和模拟数据列的对比, 各检验精度和规定的精度值对比可知, GM (1, 1) 模型完全符合精度的要求, 说明该模型具有较高的预测精度, 可用于预测未来的腐蚀量. 而接下来对试样进行 72 h 的腐蚀试验, 得到腐蚀量为 0.263 1 g, 同样证明了预测模型的可行性.

进一步由上述试验数据, 建立 PGM (1, 1)模型, 经计算得到的优化背景值生成系数 p 值为 0. 48, 模拟数据与原 GM (1, 1)模型所得结果比较见表 3.

表 3 两种模型结果对比

Tab. 3 Comparison of prediction between two models

序号	原始数据/g	GM (1, 1)模型结果		PGM (1, 1)模型结果	
		模拟数据/g	残差/g	模拟数据/g	残差/g
2	0. 120 7	0. 124 0	- 0. 003 3	0. 123 4	- 0. 002 7
3	0. 160 5	0. 153 7	0. 006 8	0. 152 9	0. 007 6
4	0. 189 2	0. 190 6	- 0. 001 4	0. 189 4	- 0. 000 2
5		0. 236 3		0. 234 6	
6		0. 293 0		0. 290 6	

对表 3 中 GM (1, 1) 模型的原始数据与模拟数据相对误差变量项, 即 $\sum_{k=1}^n |x^{(0)}(k) - x^{(0)}(k)|$ 进行计算, 结果为 0. 011 5 g, 而对 PGM (1, 1) 模型相对误差计算的结果为 0. 010 5 g, 可见虽然精度同样达到了一级, 但是 GM (1, 1) 模型精度比 PGM (1, 1) 模型精度低; 同时, 对模型的预测值进行比较, PGM (1, 1) 模型预测值更接近实测值 0. 263 1 g.

3 讨论

经过灰色预测方法处理的结果和实际情况比较吻合, 证明灰色预测方法作为一种节省时间, 提高效率的建模方法, 可以对材料腐蚀数据进行预测. 而且能够推广到其它材料性能数据的预测中. 因为材料的许多性能都具备明显的灰色系统特征, 并且材料领域特别是材料的工程应用领域的数据往往由于条件限制具有小样本特征, 而灰色理论恰恰是研究较少数据的建模方法, 最少只需原始数据 4 个以上即可建立模型, 进行预测, 有效地节约了试验费用和工程成本. 但是应该注意到, 灰色预测方法偏重于整体信息的把握, 而对局部信息的反映有所欠缺.

实际操作过程中, 针对灰色预测方法的一些不足^[9], 还可以对模型进行一些改进^[10], 如在原始数据中追加新数据. 按新数列建模得到的模型称为新信息模型. 新信息模型体现了系统的最新信息, 对邻近域的预测可得到更高的精度. 但随着时间的推移, 原始数据越来越多, 计算量越来越大, 对此可采取增

加新数据与去掉旧数据同时进行的方式建立模型, 进行增加项和去除项数目相等的等维更新变换来处理, 这种建模方法称为新陈代谢建模法.

4 结论

1) 根据灰色理论模型, 应用 MATLAB 编制了预测软件, 通过程序可对材料腐蚀试验数据进行分析预测.

2) 对于 304 不锈钢在质量分数为 60% 的 H₂SO₄ 溶液中的失重试验数据, 经过灰色预测方法处理的结果和实际情况比较吻合, 证明灰色预测方法可以比较真实地反映腐蚀失重量的实际情况及未来时间段内的变化趋势.

3) 通过实例计算的结果可知, PGM (1, 1) 模型比 GM (1, 1) 模型具有更高的模型拟合精度, 而且模型的预测精度也优于 GM (1, 1) 模型.

参考文献:

[1] 杨瑞成, 余世杰, 张天云. 等. 耐腐蚀材料选材数据库系统的设计与实现 [J]. 兰州理工大学学报, 2007, 33(4): 10-12.

[2] CHU C H, WIDJAJA D. Neural network system for forecasting method selection [J]. Decision Support Systems, 1994, 12 (3): 13-24.

[3] 肖庭延. 实用预测技术及应用 [M]. 武汉: 华中理工大学出版社, 1993.

[4] 李金换, 江 林, 王国文. 灰色理论及其在材料研究中的应用 [J]. 陶瓷, 2007, 4(4): 50-52.

[5] 刘思峰, 郭天榜. 灰色系统理论及其应用 [M]. 北京: 科学出版社, 1999.

[6] 周世健, 赖志坤, 藏德彦. 等. 加权灰色预测模型及其计算实现 [J]. 武汉大学学报, 2002, 27(5): 451-455.

[7] 孟范栋, 李 斌. 基于 VC. NET 与 Matlab 混合编程的灰色数列预测 [J]. 兵工自动化, 2006, 25(11): 87-88.

[8] 张春华, 刘泽功. 基于 MATLAB 的灰色预测系统及其对抽采瓦斯钻孔流量的数值模拟 [J]. 中国安全科学学报, 2007, 4(4): 52-55.

[9] 吉培荣, 黄巍松, 胡翔勇. 灰色预测模型特性的研究 [J]. 系统工程理论与实践, 2001, 9(9): 105-108.

[10] LI U Sifeng, DE NG Julong. GM (1, 1) coding for exponential series [J]. The Journal of Grey System, 1999, 2(2): 147-152.