航空科学技术
Aeronautical Science & Technology
Jun. 25 2025 Vol. 36 No.6 58-69

深度学习辅助的纳米薄膜材料压痕力学性能反演与预测

于鹏举，隗嘉慧，代岩伟，秦飞
北京工业大学，北京 100124

摘　要：准确高效地测定纳米金属薄膜的力学性能对于评价材料的服役可靠性至关重要。本文以人工智能技术与科学技术领域的交叉融合为驱动力，借助深度学习技术，利用试验和仿真中的数据信息，针对典型的包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银材料的纳米压痕力学性能表征问题开展研究。首先通过纳米压痕测试得到被测材料的载荷-位移曲线，并以此为基础进行有限元反演获得其幂指数型应力-应变关系。基于所提取的数据集和贝叶斯优化算法构建了人工神经网络（ANN）模型与卷积神经网络（CNN）模型，成功实现了对纳米薄膜材料压痕力学性能的高精度预测。结果表明，ANN模型计算效率较高，但因对应数据集关键参数较少所以预测效果较差；而CNN模型的预测效果良好且预测结果的决定系数为0.99，预测精度远高于ANN模型，其准确性和鲁棒性表现出巨大优势，很好地弥补了由于其效率低造成的性能短板。为测定航空工业中纳米金属薄膜的机械性能提供了一种通用方法，也为深度学习方法在预测其他材料的机械性能方面的应用提供了思路。

关键词：卷积神经网络；纳米压痕；反演预测；纳米烧结银；包镍碳纳米管

中图分类号：V240.2　　**文献标识码：**A　　DOI：10.19452/j.issn1007-5453.2025.06.007

纳米金属薄膜由于尺度效应及多晶/非晶结构特征使其能够获得极高的原子反应活性及迁移能力，加之纳米薄膜因其纳米尺寸的厚度而具有不同于块体材料的机械、光学、电学等性质，因此得到广泛关注[1-2]。纳米金属薄膜在航空航天装备表面热防护、舰载装备腐蚀防护、航空微电子与微机电系统互连等各领域展现了优异的性能，表现出极大的应用潜力。以航空发动机中的抗冲蚀纳米涂层薄膜为例，飞机在飞行、起飞和降落过程中，发动机会不可避免地吸入空气中的沙粒、火山灰、冰晶等杂质，在高速气流作用下，杂质与高温多相冲蚀流体共同作用，对发动机热端部件造成各类冲蚀损伤，甚至形成裂纹，影响装备安全服役性能，严重的甚至引发航空装备安全事故[3]。因此，提高纳米薄膜热机械承载能力，对于提高航空装备材料涂层系统可靠性、服役寿命，乃至航空装备服役安全性意义重大。

纳米薄膜力学性能的精确表征是提高纳米薄膜热机械承载能力的前提。由于纳米薄膜特征尺寸通常在微纳米尺度，囿于微纳米尺度测试方法和手段的匮乏，纳米薄膜的力学表征问题一直是本领域的难点问题[4]。目前，纳米压痕测试是测量纳米薄膜材料力学性能的一种主要方法。该方法可以提供压头压入材料后高精度的载荷-位移曲线，并结合压头的形状直接得到该压头和被测材料之间的接触面积，进而反演得到被压物的力学性能参数。

烧结纳米银作为一种典型的多孔纳米金属，因具有高热导率、高熔点和无压烧结等性能，在航空航天、新能源汽车和电力电子等领域有着广泛的应用前景和潜力。烧结纳米银的典型厚度尺寸通常为几十微米到一百微米。烧结纳米银的宏观力学性能严重依赖于工艺参数，如烧结温度、烧结时间和烧结氛围等。因此，对烧结纳米银不同环境和不同工况条件下力学性能的获得一直是该领域关注的焦点问题。Leslie等[5]分别采用球形压头和Berkovich压头对无压烧结条件下的黏塑性（蠕变）压痕力学性能进行了研究，同时探讨了压痕压头类型对多孔纳米金属压痕力学性能反演的影响。西工大龙旭课题组[6-9]针对不同工艺和SiC添加物下烧结银的本构曲线反演开展了系列工作。Zhang Hao

收稿日期：2024-11-02；退修日期：2025-01-06；录用日期：2025-03-03
基金项目：国家自然科学基金（12272012）；航空科学基金（2022Z057075001）
引用格式：Yu Pengju, Wei Jiahui, Dai Yanwei, et al. Deep learning-assisted inverse extraction and prediction of nanoindentation mechanical properties of nanofilm materials[J]. Aeronautical Science & Technology, 2025, 36(6): 58-69. 于鹏举，隗嘉慧，代岩伟，等. 深度学习辅助的纳米薄膜材料压痕力学性能反演与预测[J]. 航空科学技术, 2025, 36(6): 58-69.

等[10]对不同工艺条件下烧结银的压痕弹性模量、塑性和初始蠕变行为进行了研究。Kolbinger等[11]重点分析了腐蚀条件下烧结纳米银的压痕力学行为，并认为腐蚀导致烧结银的孔隙率增加，进而导致压痕硬度和弹性模量的增加。姚尧团队[12]针对微米烧结银的蠕变行为开展压痕试验，并建立了相应的蠕变损伤本构模型。考虑到热循环对烧结纳米银力学行为的影响，秦飞团队[13]专门针对不同热循环周次之后的纳米压痕力学行为进行了表征，探讨了热循环工况对烧结纳米银屈服行为的影响。为了获得可靠性更高的烧结纳米银，本课题组重点围绕不同工艺条件对烧结纳米银压痕力学行为的影响进行了深入探讨，重点研究不同工艺[14]和典型镍包覆碳纳米管添加烧结纳米银[15]的压痕力学行为。上述工作展示了纳米压痕方法在表征烧结纳米银力学行为中的可行性和适用性。

然而，为了获得最终被测物的纳米压痕曲线，通常需要借助有限元对被压入物体的应力应变进行反演。所谓反演分析是在未知被测材料弹塑性参数的情况下，根据假设被压物的本构关系，再依据具体的纳米压痕载荷位移曲线并结合有限元数值模拟、量纲分析等手段，将被测材料的弹塑性参数反向分析得到。传统框架下，反演分析需要进行较多的有限元计算与迭代，同时对量纲分析基本理论的掌握程度有较高的要求，是纳米压痕技术中的关键技术难点之一。

随着人工智能技术的发展，尤其是以深度学习为代表的人工智能技术极大推进了人工智能与科学和技术领域的交叉研究进展，利用人工智能技术解决工程实际中的科学问题也越来越多地得到关注[16-17]。在此趋势下许多学者也通过多种机器学习算法很好地缓冲了传统纳米压痕反演方法存在的难点问题，Weng Jian等[18]基于网格式纳米压痕试验与有限元仿真数据，构建了相应的支持向量回归（SVR）模型，并通过粒子群优化（PSO）算法进行参数自动寻优，最终成功预测了灰口铸铁的塑性本构参数，极大提高了材料应力-应变关系测定的效率，但其他算法模型是否会有更好的表现还需要进一步研究。Konstantopoulos等[19]根据k-means聚类算法处理后的纳米压痕数据，就碳纤维复合材料的增强机制识别问题对人工神经网络（ANN）模型、分类树（classification trees）模型和支持向量机（SVM）模型的预测能力进行了综合考量，最终证明了SVM模型在迁移学习潜力、准确率和计算效率方面的优势。除此之外，越来越多的算法模型与数据处理方法被开发应用，Park等[20]基于由拉丁超立方体采样（LHS）得到的有限元仿真数据集，将深度神经网络（DNN）模型与纳米压痕技术进行融合。经验证，由有限元数据发展的DNN模型在试验数据上也能展现出优异预测性能。龙旭等[21]发展了一种基于卷积神经网络（CNN）模型的薄膜材料弹塑性本构参数的回归方法，并借助多种模型性能评价指标得到了最优CNN构型，但是因所采用数据集的规模的局限性，导致该模型预测精度未能得到进一步提升。

针对目前的研究现状，本文提出了一种以深度学习模型为辅助的碳纳米管增强烧结纳米银压痕力学性能反演与预测方法。首先根据传统的反演方法对不同含量包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银进行纳米压痕测试，以测试得到的载荷-位移曲线为基准进行有限元反演分析，进而得到包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的幂指数型应力-应变关系，完成数据集的提取。而后基于数据集构建ANN模型与CNN模型来进行材料屈服应力预测，并讨论了两模型的性能、优劣与潜力。

1 基于ANN与CNN的数据驱动框架

基于深度学习模型的纳米压痕力学性能预测框架如图1所示。首先采用纳米压痕仪对不同含量包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的力学性能进行测试，通过连续刚度法测量了材料的弹性模量和硬度等参数，并基于测试得到的载荷-位移曲线进行有限元反演分析，进而得到包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的幂指数型应力-应变关系。而后以纳米压痕测试和有限元反演得到的数据集为基础进行ANN模型与CNN模型的构建，再通过各项统计指标对于进行贝叶斯优化算法调参后的两模型性能进行综合考量。

2 烧结纳米银的纳米压痕测试

2.1 纳米压痕的测试设备、条件与结果

本文纳米压痕测试所用的纳米压痕仪如图1所示，该仪器配备了准静态和动态接触单元两种压入系统，两系统的压头行程均为2mm，各自的最大载荷达到15000mN和10mN，对应的载荷分辨率分别为50nN和1nN。两系统的最大压痕深度为500μm和15μm，在压入方向上对应的位移分辨率分别为0.01mm和0.0002mm，可进行高精度及高载荷的纳米压痕测试。在纳米压痕弹塑性测试后，所得到的包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的典型载荷-位移曲线如图2所示，该图较为直观地体现了纳米压痕测试的全过程。

首先在加载阶段，随着压头逐渐压入被测材料，被测材料首先发生弹性变形，之后逐渐产生塑性变形，所以加载曲

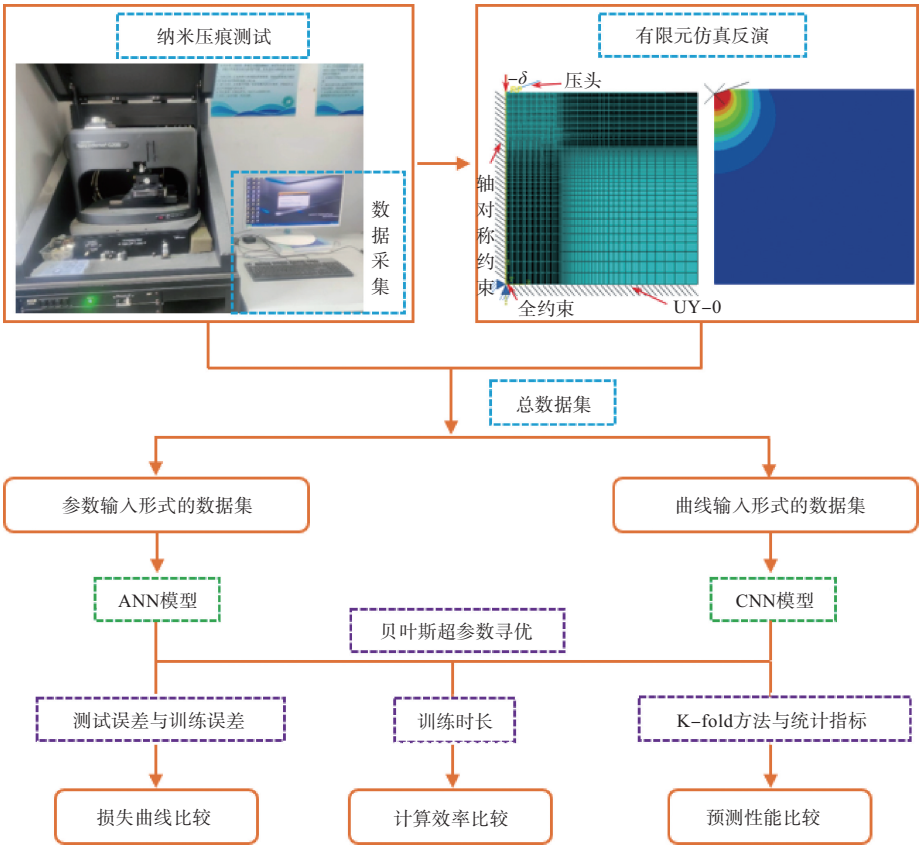


图1 基于深度学习模型的纳米压痕力学性能预测框架

Fig.1 Framework for predicting mechanical properties of nanoindentaion based on neural network model

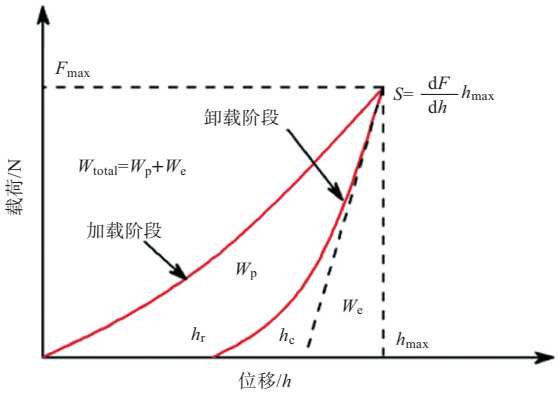


图2 纳米压痕测试典型载荷-位移曲线

Fig.2 Representative load indentation-depth curve for nanoindentation test

线中载荷呈非线性增加。当载荷和压入深度都达到最大值后，系统随即进入卸载阶段，被测材料的弹性变形逐渐恢复，之后压头逐渐脱离被测材料，载荷完全卸载，纳米压痕测试结束。

2.2 纳米压痕的弹塑性测试原理

通过Oliver-Phar方法[22]对第2.1节得到的纳米压痕载荷-位移曲线进行处理分析，即可获得被测材料的弹性模量、硬度等力学性能参数，其中被测材料硬度H是通过在加载过程中单位压痕投影面积上所承受的载荷计算得到的，其计算公式为

$$H=\frac{F_{max}}{A} \tag{1}$$

式中，F_{max}为最大压入载荷，A为压头投影接触面积。被测材料弹性模量E的计算公式为

$$\frac{1}{E_r}=\frac{1-v^2}{E}+\frac{1-v_i^2}{E_i} \tag{2}$$

式中，E_r为等效弹性模量，v为被测材料的泊松比，E为被测材料的弹性模量，v_i为压头的泊松比，E_i为压头的弹性模量。其中，金刚石压头的弹性模量为E_i=1141GPa，v_i=0.07。而等效弹性模量E_r可由式(3)计算得到

$$E_r=\frac{\sqrt{\pi}\,S}{2\beta\sqrt{A}} \tag{3}$$

式中，S为接触刚度，β是与压头有关的几何常数，对于Berkovich压头，其β=1.034。采用Oliver-Phar方法中的幂指数模型拟合纳米压痕载荷-位移曲线中的卸载曲线，其表

达式为

$$F_u = C\left(h_{max} - h_r\right)^m \tag{4}$$

式中，F_u为卸载载荷，h_{max}为最大压入深度，h_r为残余深度，C和m为拟合参数。接触刚度S由式(4)微分后获得，其表达式为

$$S = \frac{dF}{dh} = Cm\left(h_{max} - h_r\right)^{m-1} \tag{5}$$

理想的Berkovich压头的面积函数的表达式为

$$A = 24.56h_c^2 \tag{6}$$

式中，h_c为接触深度，其计算公式为

$$h_c = h_{max} - \varepsilon\frac{F_{max}}{S} \tag{7}$$

式中，ε是一个与压头形状有关的常数，对于Berkovich压头，其值取ε=0.72。

3 基于纳米压痕测试的有限元反演方法

纳米压痕测试只能得到基本的弹性模量、硬度等参数，但对于包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的热机械可靠性而言，其塑性性能参数更为重要，即建立包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银相应的弹塑性应力-应变关系更有意义。虽然包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的塑性性能不能通过纳米压痕测试直接获得，但可以结合有限元数值模拟和量纲分析方法，对纳米压痕测试进行反演分析，进而可以确定不同含量包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的塑性性能参数及其相应的弹塑性本构关系。

3.1 反演流程

反演分析是相对正向分析而言的，正向分析是将材料已知的弹塑性参数输入有限元软件中进行模拟，以达到取代真实的物理试验的目的。而反演分析则是在未知被测材料弹塑性参数的情况下，依据具体的物理试验并结合有限元数值模拟、量纲分析等手段，将被测材料的弹塑性参数反向拟合得到。本文纳米压痕的反演分析主要是根据特征应力σ_r和特征应变ε_r的概念展开。Dao Ming等[23]给出了特征应力σ_r和特征应变ε_r的概念，即当被测材料的弹性模量相同时，如果其应力-应变关系中的特征应力和特征应变相同，则得到的有限元数值模拟结果与试验结果相同，而被测材料的力学性能参数与其纳米压痕测试结果之间的无量纲函数由文献[24]所建立。

对于待反演的包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银，本文采用金属材料常用的幂指数型弹塑性应力-应变关系来进行其本构关系的测定，如图3所示，其所对应的关系式为

$$\sigma = \begin{cases} E\varepsilon,\ \sigma \leqslant \sigma_y \\ R\varepsilon^{n_p} = \sigma_y\left(1 + \dfrac{E}{\sigma_y}\varepsilon_p\right)^{n_p},\ \sigma > \sigma_y \end{cases} \tag{8}$$

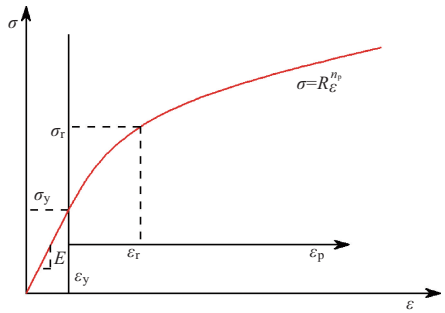


图3 弹塑性幂强化模型应力-应变关系

Fig.3 The power law elasto-plastic stress-strain behavior

式中，R为强度系数，n_p为应变强化指数，σ_y为屈服强度，ε为发生的总应变，它分为弹性应变ε_y和塑性应变ε_p。

$$\varepsilon = \varepsilon_y + \varepsilon_p = \varepsilon_y + \varepsilon_r \tag{9}$$

特征应变ε_r是指被测材料在弹性应变后某一点的塑性应变，如式(9)所示。特征应力σ_r则是指与特征应变ε_r相对应的应力，如式(10)所示

$$\sigma_r = \sigma_y\left(1 + \frac{E}{\sigma_y}\varepsilon_r\right)^{n_p} \tag{10}$$

特征应变和特征应力(ε_r, σ_r)在被测材料幂指数型应力-应变关系中对应的点如图3所示。为了确定不同含量包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的幂指数型应力-应变关系，本文按照图4所示流程进行反演分析。

具体流程为：(1)对不同含量包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银试样进行纳米压痕测试，得到其各自的弹性模量E、硬度H以及载荷-位移曲线等测试结果。(2)基于纳米压痕测试的结果，对包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的特征应力σ_r进行初始估值[25]。首先，令应变强化指数n_p=0，将式(8)所示的包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的弹塑性本构模型代入有限元软件中进行计算。将有限元计算的最大载荷F_{max}^{FEM}与测试的最大载荷F_{max}^{EXP}进行对比，通过不断地调整特征应力σ_r的值并代入有限元计算，最终使F_{max}^{FEM}与F_{max}^{EXP}之间的相对误差小于0.5%，从而确定出包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的特征应力σ_r。(3)基于文献[23]提出的无量纲函数，并结合纳米压痕测试得到的载荷-位移曲线，就可以确定包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的应变强化指数n_p。(4)对包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的特征应变ε_r进行初始估值，同样将确定的包镍多壁碳纳米管

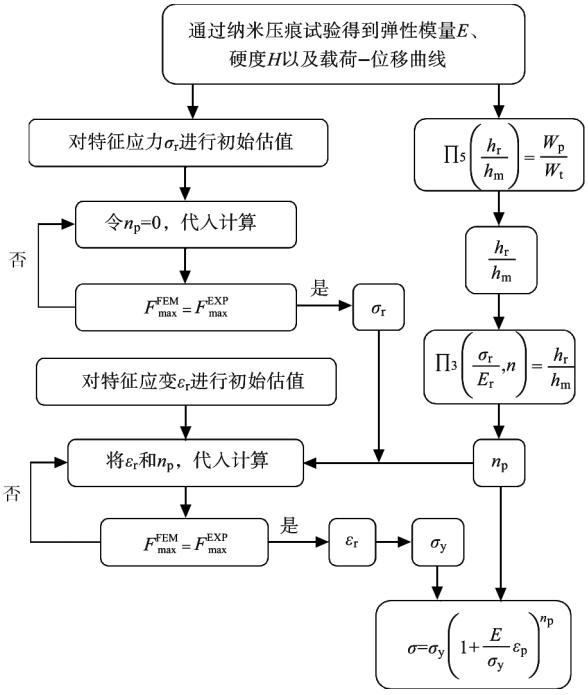


图4 幂指数型弹塑性本构方程的反演流程

Fig.4 Reverse analysis algorithm for prediction of the power law elasto-plastic constitution

增强烧结纳米银的弹塑性本构模型输入有限元软件中进行计算。通过F_{max}^{FEM}与F_{max}^{EXP}的对比，不断调整特征应变ε_r的数值最终使F_{max}^{EXP}与F_{max}^{EXP}之间的相对误差小于0.5%，从而确定出包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的特征应变ε_r。(5)根据确定好的特征应力σ_r、应变强化指数n_p和特征应变ε_r，即可求出包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的屈服应力σ_y，将这些参数代入式(8)中，便最终确定了包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的弹塑性应力-应变关系。

3.2 有限元模型

本文采用有限元软件对纳米压痕测试进行数值计算。考虑到纳米压痕是一种局部测试的方法，基于圣维南原理，在有限元建模时，只需取被压点附近区域即可。为降低模型的复杂程度，将测试中使用的Berkovich压头简化为半锥角为70.3°的圆锥压头[26]，而且由金刚石制成的压头刚度和硬度均远远地大于烧结纳米银，因此，将压头简化为解析刚体。同时基于压头和被测材料的对称性，可将三维模型简化为二维轴对称模型，这样不仅符合精度要求，且计算效率较高。为避免边界条件对压痕结果的影响，所建二维模型的高度需大于最大压入深度的30倍，宽度大于最大接触半径的15倍，因此模型的长宽均设置为90μm，最终建立的二维轴对称模型如图5所示。

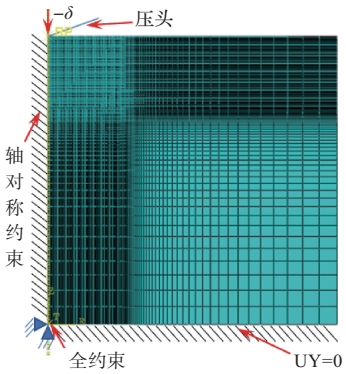


图5 纳米压痕轴对称有限元模型

Fig.5 Nanoindentation axisymmetric finite element model

为了进一步降低计算规模，将包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银模型中距压入点长宽30μm内的区域进行网格细化，其单元类型为CAX3，其余部分的单元类型为CAX4R，共计27889个单元。在模型底部施加y方向约束，左侧对称轴上施加轴对称约束，对称轴底部角点施加全约束，对压头采用位移控制的加载方式，约束压头x方向的移动和转动，使其只能沿y方向运动。基于上述有限元数值模拟和Dao Ming等[23]建立的量纲函数，以纳米压痕测试得到的载荷-位移曲线为依据，对纳米压痕加载过程进行反演分析，进而得到包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的幂指数型应力-应变关系。

4 基于ANN与CNN的烧结纳米银纳米压痕参数预测

4.1 数据集的构建

为了更好地改善传统的纳米压痕参数反演工作所带来的复杂度高、计算规模大等问题，本文希望利用收集到的数据集，结合特定的神经网络模型，发展出可由被测材料参数、纳米压痕测试参数直接预测材料屈服应力σ_y的方法，从而节省用于复杂反演和计算过程的时间成本。

基于对前节反演工作所获取的数据形式进行分析，发现在进行神经网络模型的搭建时，既可由各项参数(最大压入深度h_{max}、最大压入载荷F_{max}、材料硬度H、接触刚度S、等效弹性模量E_r、被测材料的弹性模量E、被测材料的泊松比v)作为输入，也可由各项参数的数据源头，即纳米压痕测试结果得到的载荷-位移曲线作为输入，输出参数即屈服应力。以参数为输入形式的优势在于其数据量少可节省计算资源，同时对应的网络结构简单方便搭建，但可能存在信息丢失导致的计算精度丧失。以曲线为输入形式的优势有两

个，一个是直接选用测试中的源头数据，节省了再次计算的人力和数据处理时间。第二个即充分利用了曲线数据，通过选用合适的神经网络可以建立从曲线数据到预测参数的复杂非线性关系，避免计算公式推导时造成的误差或信息丢失，但曲线输入较参数输入需要更多的计算资源和更为复杂的网络结构。

为了获得上述两种输入形式的数据集进行后续神经网络的构建，基于第3.1节中确定幂指数型弹塑性本构方程的反演分析流程，结合仿真方法，在不同特征应力σ_r、应变强化指数n_p和特征应变ε_r下，计算包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银的纳米压痕有限元模型仿真结果，得到了纳米压痕测试的载荷–位移曲线对应的屈服应力σ_y。同时在压头处提取了经多次有限元迭代后的载荷–位移曲线，与纳米压痕测试得到纳米压痕载荷–位移曲线的拟合效果如图6所示。最终根据测试结果和仿真结果共得到143组数据，通过载荷–位移曲线计算得到的屈服应力σ_y大小分布如图7所示。

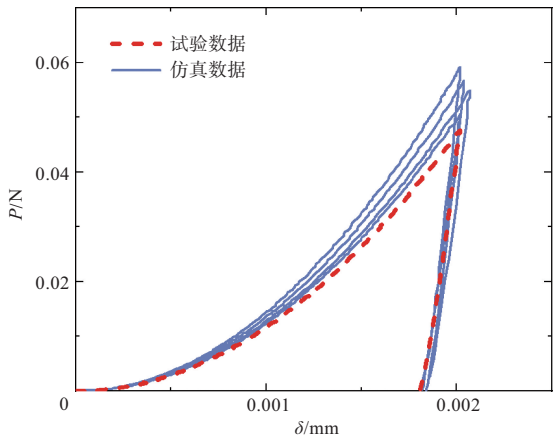


图6　纳米压痕载荷与位移曲线

Fig.6　Load versus displacement curves for nanoindentation

从有限元仿真与纳米压痕测试二者对应的载荷–位移曲线的良好拟合效果来看，本次所获取的数据集的准确性得到了检验。同时对于用作输出参数的屈服应力σ_y，图7直观地展示了其参数跨度与频率分布的饱满性，为将要构建的神经网络模型的鲁棒性与泛化性提供了良好支撑。

4.2 神经网络模型的构建

本节针对两种输入形式进行网络选择，参数输入模型由于数据结构简单，可以选用基础的ANN模型，其由多个全连接层组成，即每个神经元都与前一层的所有神经元相连如图8所示，每条神经元之间的连线表示一个权重系数w，同时每个神经元对应一个偏置b。该模型具有三个隐藏

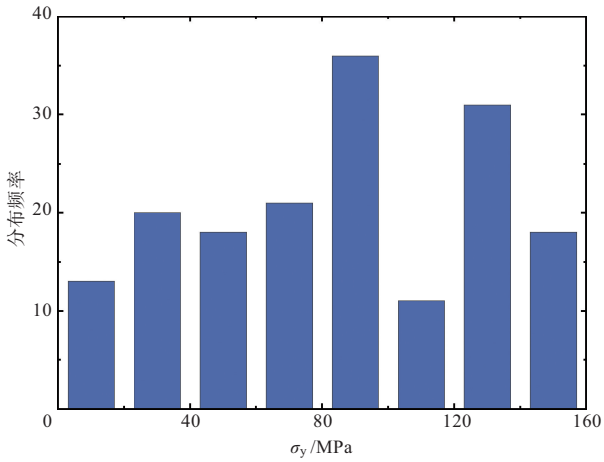


图7　反演分析方法得到屈服应力σ_y数据集

Fig.7　Data-set of obtained yield stress σ_y with reverse analysis method

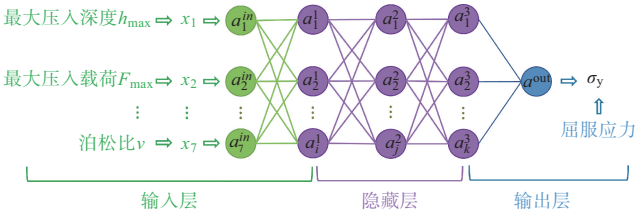


图8　人工神经网络结构示意图

Fig.8　Artificial neural network structure diagram

层，每个隐藏层的神经元个数分别为i、j、k，由n层神经元组成的ANN输出公式如下

$$a_i^l=\sigma\left(z_i^l\right)=\sigma\left(\sum_{j=1}^{n}w_{ij}^l a_j^{l-1}+b_i^l\right) \tag{11}$$

式中，a_i^l为ANN中第l层第i个神经元，w_{ij}^l为第l–1层的第j个神经元到第l层的第i个神经元的权重系数。b_i^l为第l层的第i个神经元对应的偏置。用矩阵的形式表达，式子可以简化为

$$a^l=\sigma\left(z^l\right)=\sigma\left(W^l a^{l-1}+b^l\right) \tag{12}$$

而曲线输入模型的输入数据较长，数据长度达到539，因此，可以通过CNN模型中的卷积操作对数据进行缩短和关键信息的提取。图9为两通道数值输入的一维CNN模型，在这个CNN模型中，由三个卷积层、三个特征映射层和一个全连接层组成，通过卷积数值运算，完成了特征提取。由于载荷–位移曲线的输入数据只需要进行一维卷积运算，因此，卷积运算只需要在一维条件下进行。在每个卷积操作层中，都有三个卷积核，通过卷积层和最大池化层可以减少数据集的长度。然而，由于每次卷积和池化计算对数据

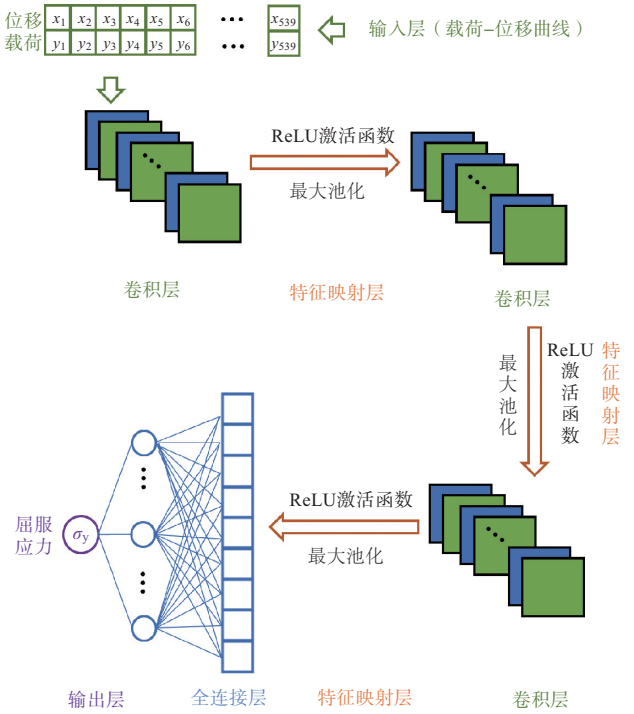


图9 卷积神经网络结构示意图

Fig.9 Convolutional neural network structure diagram

长度的影响是固定的，所以在输入数据中的载荷–位移曲线的长度仍需要是相同的。

考虑到CNN模型对数据集规模的要求较高，因此，借助插值方法将由测试结果和仿真结果得到的143组数据通过线性插值的方式扩充为572组曲线数据，以其作为CNN模型的输入。

4.3 超参数寻优

4.3.1 贝叶斯优化算法

两种模型选用了认可度最为广泛的Adam优化器，且均引入ReLU激活函数使得各自的输入输出满足非线性关系，并以MSE为损失函数。在超参数寻优时采用贝叶斯寻优这一全局优化算法[27]进行最优超参数的确定，相较于其他调参方式，它具有方便快捷且保证精度的优势，因此得到了广泛认可。“贝叶斯”源于著名的“贝叶斯定理”[28]，该算法包括概率代理模型和采集函数两个核心部分。

$$p(f\,|\,D)=\frac{p(D|\,f)p(f)}{p(D)} \tag{13}$$

式中，f为未知目标函数，D为已观测的取样点集合，$p(f\,|D)$为f的后验概率分布，即根据贝叶斯公式得到的包含最新评估点观测值的概率代理模型。采集函数是根据后验概率分布构造的，通过最大化采集函数依次选择最有“潜力”的评估点构成序列，使总的损失值Loss最小。

$$\mathrm{Loss}=\sum_{i=1}^{n}\left|y^{*}-y_{i}\right| \tag{14}$$

式中，y^*表示当前评估点的最优解。

贝叶斯优化算法的具体计算过程如图10所示，它将高斯过程应用于目标函数的后验分布中，通过不断添加样本点来更新后验分布直至其与真实分布基本吻合，该方法整合了上一次的样本信息以调整当前样本点，使下一次采样得到最大化收益。

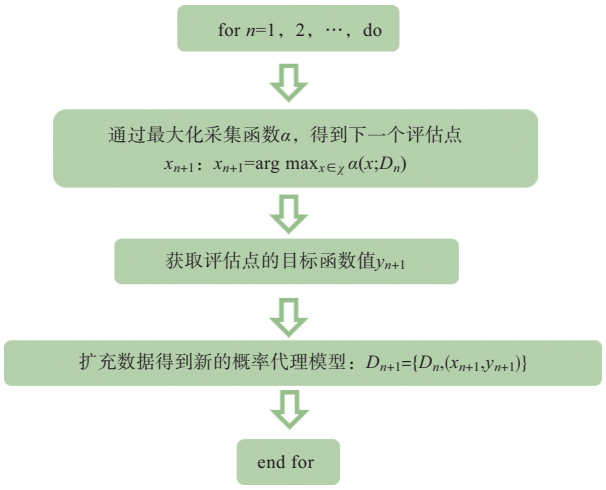


图10 贝叶斯优化算法计算过程

Fig.10 Bayesian optimization algorithm calculation process

4.3.2 参数寻优结果

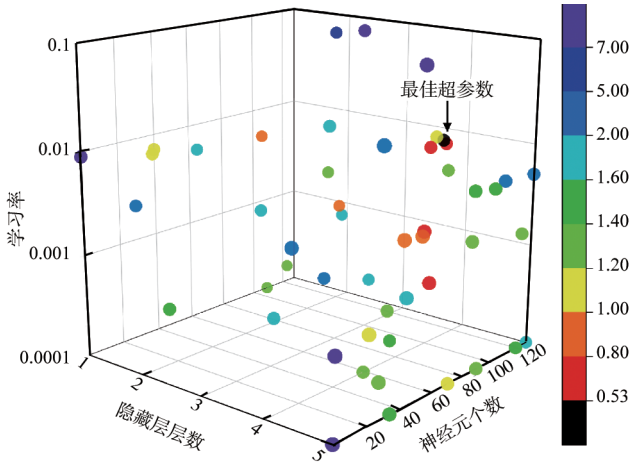
ANN模型需调节的超参数包括隐藏层层数、神经元个数以及学习率l_r，CNN模型需调节的超参数包括卷积核数量、卷积核大小以及卷积层层数，按照训练经验学习率l_r设置为0.001（经后文训练结果验证，该学习率在本文搭建的CNN网络中效果良好）。两种模型的超参数训练结果如图11所示。

ANN模型超参数训练时隐藏层层数的取值范围为1~5层，神经元个数的取值范围为1~128，学习率l_r的取值范围为1×10^{-4}~0.1且按照指数分布，图11(a)中贝叶斯训练的最优结果为4个全连接层，每个全连接层有110个神经元，学习率为0.00989，对应的MSE数值为0.526。CNN模型超参数训练时卷积核数量的取值范围为1~16个，卷积核大小的取值范围为3~10，卷积层层数的取值范围为1~5，图11(b)中贝叶斯训练的最优结果卷积核数量为14、卷积核大小为6、卷积层层数为5，对应的MSE数值为0.00731，最终两种数据驱动模型的超参数取值见表1。

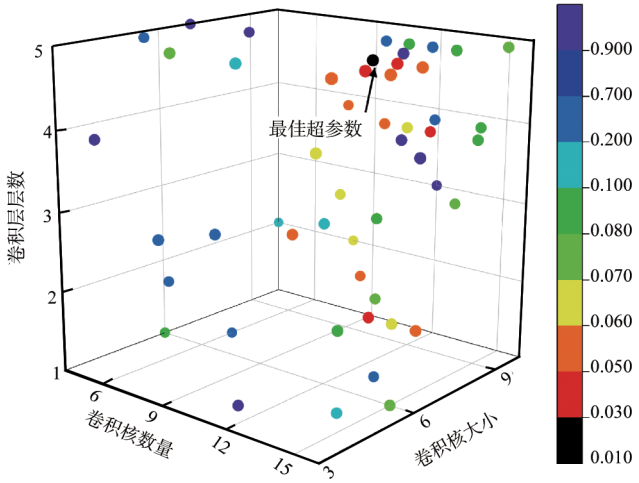
4.4 结果与分析

4.4.1 模型损失表现

基于纳米压痕测试与有限元反演收集的数据集对于已完成超参数寻优的ANN、CNN模型进行训练，这一过程中



(a) ANN模型超参数训练结果



(b) CNN模型超参数训练结果

图11　超参数的贝叶斯优化结果

Fig.11　Hyperparameter Bayesian optimization results

表1　两种数据驱动模型的参数

Table 1　Parameters of two data driven models

参数名称	ANN	CNN
输入数据	7×143	2×539×572
输出数据	1×143	1×572
激活函数	ReLU	ReLU
卷积核数量	—	14
卷积核尺寸	—	6
卷积层数	—	5
全连接层数	4	1
神经元个数	110	64
优化器	Adam	Adam
损失函数	MSE	MSE

在训练集和测试集上关于输出参数(屈服应力σ_y)的损失曲线如图12、图13所示。

由图12可以看出，在训练初期，ANN模型训练集和测试集上的误差均快速下降，但测试集的误差在200个周期左右下降趋势变缓，且开始大于训练集误差。在2000个周期后，测试集误差产生一定程度的上升趋势，而训练集误差下降趋势平滑且在3000个训练周期后趋于稳定。对于ANN模型在训练过程中其测试集误差远大于训练集误差的情况，存在几种潜在原因，一是数据集形式与模型要求不匹配，二是由于模型超参数选择不当，但数据集是严格按照ANN模型特点进行处理的，同时所搭建的ANN模型超参数已经由贝叶斯优化算法完成调优，所以排除以上原因。三是数据集包含的因素不足，如果仍存在能影响输出数据变化的未知参数但该参数却因无法提取或并不单一存在，致使其不在数据集中，那么模型可能会学到错误的输入输出关系，从而产生不准确的预测结果，致使该模型在对测试

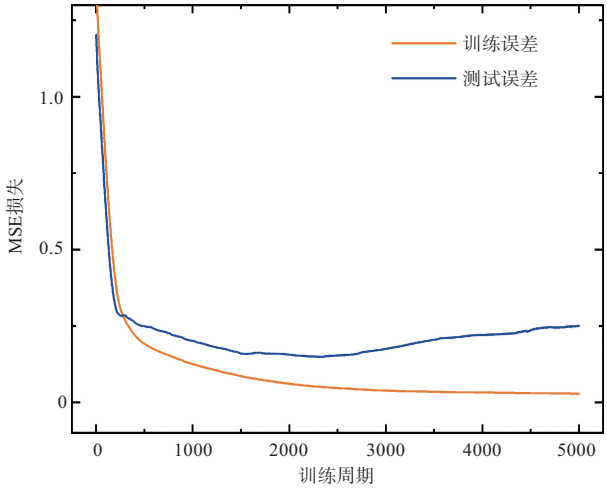


图12　ANN模型损失曲线

Fig.12　Loss curves of the ANN

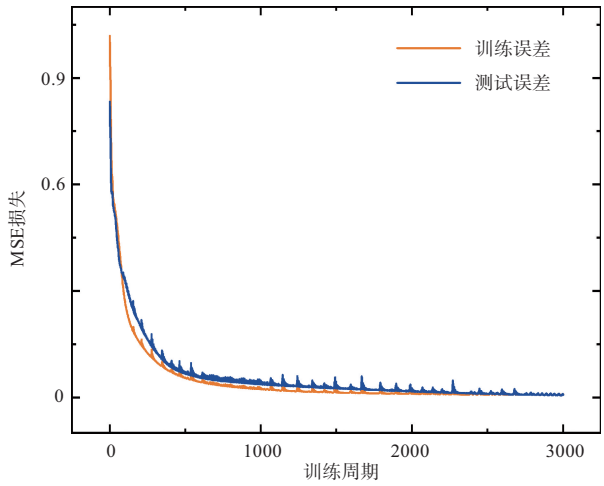


图13　CNN模型损失曲线

Fig.13　Loss curves of the CNN

集输出的预测中产生了不可消除的偏差。综上所述，这可能是使ANN模型损失函数异常的主要原因。

与ANN模型损失函数的异常情况形成鲜明对比的是CNN模型损失函数良好的收敛趋势，由图13可以看到，在训练初期训练集和测试集误差均快速下降，且趋势相同，在1000个后训练集和测试集误差均趋于平缓。值得注意的是，在整个训练过程中，测试误差总是略大于训练误差，这是正确的训练过程特点之一。由于模型将通过训练集学习到的规律应用到陌生数据的测试集中，会有轻微的精度下降，但又由于训练集和测试集均来源于同一个数据集，所以精度差异不会太大，且随训练周期的增加这种差异会进一步减小，说明模型学习到的规律逐渐具有更好的泛化能力。

经二者训练过程中的损失函数对比不难看出，虽然CNN模型在训练过程中存在一些小的突变，但总的来说CNN模型在损失曲线方面表现更好。

4.4.2 模型训练效率

除此之外，训练过程中的计算效率也是需要考虑的一个重要因素。基于同一个计算平台，选择5次训练进行计时，两个模型各自训练时间的直接比较见表2。

表2 两种模型训练时长对比

Table 2 Comparison of training duration of two models

模型名称	ANN	CNN
第一次训练时长/s	5.12	177.51
第二次训练时长/s	4.98	185.92
第三次训练时长/s	6.24	168.14
第四次训练时长/s	5.54	194.46
第五次训练时长/s	5.67	187.49
平均训练时长/s	5.51	182.70

经统计，ANN模型以平均5.51s的时间完成了整个训练，而CNN模型则需要以平均182.70s的时间，可见CNN模型在训练过程中消耗了更高的计算成本。

4.4.3 模型预测性能

为了进一步验证ANN模型和CNN模型的鲁棒性，本文采用K-fold方法来考量这三种数据驱动模型的预测性能。K-fold是一种典型的交叉验证方法，参数K是指给定数据样本要分割的组的数量，对数据进行分割后，进行K次训练。每次训练将分割后的数据中的一份作为测试数据，其余作为训练数据，即经过K次训练后每份数据均在测试集中出现过一次。经K取10的K-fold方法验证后，两种模型针对屈服应力的预测值与计算值如图14、图15所示。

对于ANN模型，虽然模型对一部分数据点的预测结果

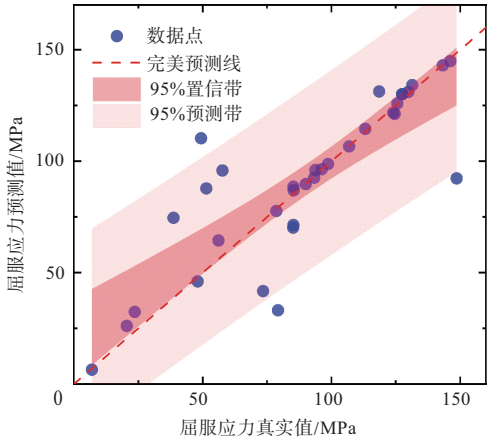


图14 ANN模型预测结果

Fig.14 Prediction results of ANN model

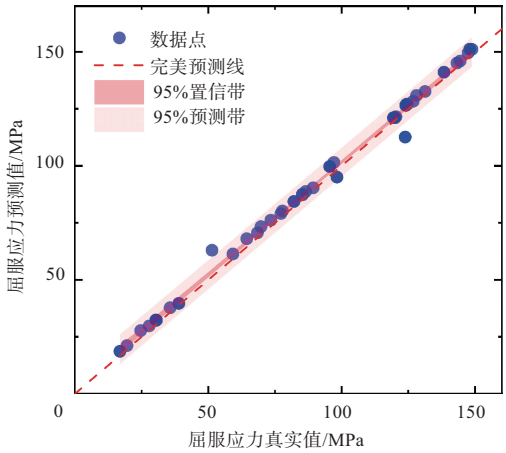


图15 CNN模型预测结果

Fig.15 Prediction results of CNN model

较好，但仍存在一些误差较大的点，距离完美预测线较远，致使图14中拟合的95%预测带和95%置信带较宽，说明ANN模型对屈服应力的预测精度较差。

相较于ANN模型的表现，CNN模型的数据点则均紧密地分布在完美预测线附近，其95%预测带和95%置信带区域面积狭窄与完美预测线高度相符，说明CNN模型对屈服应力的预测精度很高。同时为了量化两种模型的预测精度，还引入了多个统计指标对其各自的预测精度进行了表征[29]

$$\mathrm{MSE}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-y_i^*)^2 \tag{15}$$

$$\mathrm{RMSE}=\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-y_i^*)^2} \tag{16}$$

$$\mathrm{MAPE}=\frac{100\%}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{y_i-y_i^*}{y_i}\right| \tag{17}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i^*)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2} \tag{18}$$

$$R = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i^* - \overline{y^*})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i^* - \overline{y^*})^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}} \tag{19}$$

式中，y_i和y_i^*分别为第i个真实值和预测值，$\bar{y}$和$\overline{y^*}$是真实值和预测值的均值，n为样本数量。在上述指标中，均方误差（MSE）、均方根误差（RMSE）、平均绝对百分比误差（MAPE）的值越小则证明对应模型的预测结果越准确。而决定系数R^2表示回归模型与实际数据之间的拟合程度，相关系数R则表示输出数据和目标数据之间的相关性强度和方向，二者越接近1时，表示模型与实际数据拟合得越好。两种模型预测结果的统计指标见表3，各个指标值均可以验证CNN模型的预测精度远高于ANN模型。

表3 不同模型预测屈服应力的统计指标对比

Table 3 Comparisons of different statistical indicators on predicting yield stress with different models

指标名称	ANN	CNN
MSE	438.578	12.6214
RMSE	20.9422	3.5526
MAPE/%	19.1927	4.0452
R	0.8364	0.9971
R^2	0.6996	0.9943

5 结论

本文通过纳米压痕测试中获取的材料参数以及载荷–位移曲线结合有限元反演分析，构建两种输入形式的数据集，并基于该数据集搭建ANN和CNN两种神经网络模型，进行包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银试样的屈服应力的预测。通过研究，得出以下结论：

（1）以参数作为模型输入形式的ANN模型对于数据处理方式简单且计算效率较高，但是对不同碳纳米管添加含量的烧结纳米银屈服应力的预测效果较差，在对其超参数进行调优后，ANN的损失曲线仍不收敛，最终预测值决定系数仅为0.70，经分析是因为仅由7个相关参数组成的输入数据集包含的信息不充分，还可能存在除现有输入参数以外的其他影响因素，因此，参数输入的ANN模型不能完全实现对不同碳纳米管添加含量的烧结纳米银屈服应力的准确预测。

（2）以载荷–位移曲线作为模型输入形式的CNN模型对不同碳纳米管添加含量的烧结纳米银屈服应力的预测效果良好，在对其超参数进行调优后，预测结果的决定系数为0.99，预测精度远高于参数输入的ANN模型。尽管曲线输入的CNN模型计算速度较慢，平均训练时长为182.70s，但其准确性和鲁棒性上表现出巨大优势。

综合考虑后相比于参数输入的ANN模型，曲线输入的CNN模型更适用于包镍多壁碳纳米管增强烧结纳米银材料的对屈服应力的预测。后续如果增设更多的纳米压痕测试参数作为输入参数，可能会在ANN模型上收获更可观的效果。同样越来越多的机器学习算法被投入应用或亟待开发，未来还可进一步对其他的算法的适用性进行深入探索。

参考文献

[1] 林路禅, 刘磊, 邹贵生, 等. 基于结构纳米薄膜的微纳连接技术研究进展[J]. 机械工程学报, 2022, 58(2): 17-25.
Lin Luchan, Liu Lei, Zou Guisheng, et al. Research progress of structured nano thin-films based micro/nanojoining technologies[J]. Journal of Mechanical Engineering, 2022, 58(2): 17-25. (in Chinese)

[2] 梅云辉, 冯晶晶, 王晓敏, 等. 采用纳米银焊膏烧结互连技术的中高压IGBT模块及其性能表征[J]. 高电压技术, 2017, 43(10): 3307-3312.
Mei Yunhui, Feng Jingjing, Wang Xiaomin, et al. Medium and high voltage IGBT module using nanosilver paste sintering technology and its performance characterization[J]. High Voltage Engineering, 2017, 43(10): 3307-3312. (in Chinese)

[3] 刘雨菲, 崔秀芳, 房永超, 等. 航空发动机冲蚀损伤及防护涂层研究进展[J]. 中国表面工程, 2022, 35(3): 31-47.
Liu Yufei, Cui Xiufang, Fang Yongchao, et al. Research progress on erosion damage and protective coating for aircraft engine[J]. China Surface Engineering, 2022, 35(3): 31-47. (in Chinese)

[4] 王赵鑫, 赵宏伟. 微纳米压痕测试技术: 发展与应用[J]. 航空学报, 2021, 42(10): 137-156.
Wang Zhaoxin, Zhao Hongwei. Micro- and nanoindentation testing techniques: Development and application[J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2021, 42(10): 137-156. (in Chinese)

[5] Leslie D, Dasgupta A, Morillo C. Viscoplastic properties of pressure-less sintered silver materials using indentation[J]. Microelectronics Reliability, 2017, 74: 121-130.

[6] Long Xu, Hu Bo, Feng Yihui, et al. Correlation of microstructure and constitutive behaviour of sintered silver particles via nanoindentation[J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2019, 161: 105020.

[7] Long Xu, Jia Qipu, Shen Ziyi, et al. Strain rate shift for constitutive behaviour of sintered silver nanoparticles under nanoindentation[J]. Mechanics of Materials, 2021, 158: 103881.

[8] Long Xu, Jia Qipu, Li Zhen, et al. Reverse analysis of constitutive properties of sintered silver particles from nanoindentations[J]. International Journal of Solids and Structures, 2020, 191: 351-362.

[9] Long Xu, Li Zhen, Lu Xiuzhen, et al. Mechanical behaviour of sintered silver nanoparticles reinforced by SiC microparticles [J]. Materials Science and Engineering: A, 2019, 744: 406-414.

[10] Zhang Hao, Liu Yang, Wang Lingen, et al. Indentation hardness, plasticity and initial creep properties of nanosilver sintered joint[J]. Results in Physics, 2019, 12: 712-717.

[11] Kolbinger E, Kuttler S, Wagner S, et al. Investigation of the mechanical properties of corroded sintered silver layers by using nanoindentation[J]. Microelectronics Reliability, 2020, 114: 113889.

[12] Gong He, Wu Hongcheng, Yao Yao. Creep of sintered porous micron-silver: nanoindentation experiment and theoretical analysis[J]. Journal of Materials Science, 2021, 56(32): 18281-18299.

[13] Qin Fei, Zhao Shuai, Dai Yanwei, et al. Indentation tests for sintered silver in die-attach interconnection after thermal cycling[J]. Journal of Electronic Packaging, 2022, 144(3): 031012.

[14] Dai Yanwei, Zan Zhi, Zhao Libo, et al. Nanoindentation elastoplastic and creep behaviors of sintered nano-silver doped with nickel-modified multiwall carbon nanotube filler[J]. Journal of Electronic Materials, 2024, 53(2): 1035-1057.

[15] Dai Yanwei, Zhao Libo, Qin Fei, et al. Elastoplastic nanoindentation behaviors of sintered nano-silver under various sintering parameters[J]. Soldering & Surface Mount Technology, 2025,37(2):150-162

[16] 何昆鹏, 赵瑾玥, 周琪, 等. 基于LSTM神经网络的机载光纤陀螺温度冲击误差补偿技术[J]. 航空科学技术, 2024, 35(2): 31-38.
He Kunpeng, Zhao Jinyue, Zhou Qi, et al. Temperature shock error compensation technology for airborne fiber optic gyroscopes based on LSTM neural networks[J]. Aeronautical Science & Technology, 2024, 35(2): 31-38.(in Chinese)

[17] 马云红, 李欣怡, 王泽霖, 等. 基于数据驱动的机动目标跟踪[J]. 航空科学技术, 2024, 35(4): 97-103.
Ma Yunhong, Li Xinyi, Wang Zelin, et al. Maneuvering target tracking based on data-driven[J]. Aeronautical Science & Technology, 2024, 35(4): 97-103.(in Chinese)

[18] Weng Jian, Lindvall R, Zhuang Kejia, et al. A machine learning based approach for determining the stress-strain relation of grey cast iron from nanoindentation[J]. Mechanics of Materials, 2020, 148: 103522.

[19] Konstantopoulos G, Koumoulos E P, Charitidis C A. Classification of mechanism of reinforcement in the fiber-matrix interface: application of machine learning on nanoindentation data [J]. Materials & Design, 2020, 192: 108705.

[20] Park S, Marimuthu K P, Han G, et al. Deep learning based nanoindentation method for evaluating mechanical properties of polymers[J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2023, 246: 108162.

[21] Long Xu, Lu Changheng, Shen Ziyi, et al. Identification of mechanical properties of thin-film elastoplastic materials by machine learning[J]. Acta Mechanica Solida Sinica, 2023, 36 (1): 13-21.

[22] Oliver W C, Phar G M. An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments[J]. Journal of Materials Research, 1992, 7(6): 1564-1583.

[23] Dao M, Chollacoop N, Van Vliet K J, et al. Computational modeling of the forward and reverse problems in instrumented sharp indentation[J]. Acta Materialia, 2001, 49(19): 3899-3918.

[24] Cheng Y T, Cheng C M. Scaling, dimensional analysis, and indentation measurements[J]. Materials Science and Engineering: R, 2004, 44(4-5): 91-149.

[25] Antunes J M, Fernandes J V, Menezesl F, et al. A new approach for reverse analyses in depth-sensing indentation using numerical simulation[J]. Acta Materialia, 2007, 55(1): 69-81.

[26] Choi Y, Lee H S, Kwon D. Analysis of sharp-tip-indentation

load-depth curve for contact area determination taking into account pile-up and sink-in effects[J]. Journal of Materials Research, 2004, 19(11): 3307-3315.

[27] Shin S, Lee Y, Kim M, et al. Deep neural network model with Bayesian hyperparameter optimization for prediction of NO_x at transient conditions in a diesel engine[J]. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 2020, 94: 103761.

[28] Shahriari B, Swersky K, Wang Ziyu, et al. Taking the human out of the loop: a review of bayesian optimization[J]. Proceedings of the IEEE, 2015, 104(1): 148-175.

[29] Su Miao, Peng Hui, Yuan Ming, et al. Identification of the interfacial cohesive law parameters of FRP strips externally bonded to concrete using machine learning techniques[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2021, 247: 107643.

Deep Learning-Assisted Inverse Extraction and Prediction of Nanoindentation Mechanical Properties of Nanofilm Materials

Yu Pengju, Wei Jiahui, Dai Yanwei, Qin Fei

Beijing University of Technology, Beijing 100124, China

Abstract: Accurate determination of the mechanical properties of nanometallic thin films is crucial for reliability evaluation. The advancement of artificial intelligence, or deep learning, has been utilized widely to strengthen and help to find more unknown solutions for the science and technology fields. This paper used nanoindentation testing and finite element inverse extraction to characterize the mechanical properties of nickel-coated multi-walled carbon nanotubes reinforced sintered nano-silver. Bayesian tuning algorithm was used for hyperparameters determination in ANN and CNN models in predicting yield stress, highly accurate prediction of the indentation mechanical properties of nanofilm materials has been successfully realized. The CNN model, despite with lower training efficiency, showed higher prediction accuracy and robustness with a coefficient of determination of 0.99. The ANN model is not that well performed, due to the lack of more input features. This could provide a versatile method for determining the mechanical properties of nanometallic thin films in the aviation industry and also give some hints on the applications of deep learning methods in predicting mechanical properties for other materials.

Key Words: CNN; nanoindentation; inverse prediction; sintered nano-silver; nickel modified multiwall carbon nanotubes

Received: 2024-11-02； **Revised:** 2025-01-06； **Accepted:** 2025-03-03

Foundation item: National Natural Science Foundation of China (12272012)；Aeronautical Science Foundation of China (2022Z057075001)