



Al 基非晶合金表征参数的支持向量回归分析

徐燕¹, 张玉凤¹, 高 湑¹, 张 研², 张惠然², 刘永生¹

(1. 上海电力学院 数理学院, 上海 201399;

2. 上海大学 计算机工程与科学学院, 上海 200444)

摘 要: 根据一系列 Al 基非晶合金薄带实测数据集, 应用粒子群优化支持向量回归方法(PSO-SVR), 建立一个通过相关表征参数来预测 Al 基非晶合金晶化温度(T_x)的模型。利用该模型对不同类型铝基非晶合金的晶化温度(T_x)进行建模和预测研究, 并与反向传播神经网络(BPNN)预测方法进行比较。结果表明: 基于留一交叉验证法(LOOCV)的 PSO-SVR 模型预测的晶化温度误差要比 BPNN 模型预测的小得多, 这说明模型中所采用的特征参数能很好地描述该系列 Al 基非晶合金的晶化行为和热稳定性。

关键词: Al 基非晶合金; 晶化温度; 支持向量回归; 粒子群优化

中图分类号: TB34

文献标志码: A

非晶合金, 俗称“金属玻璃”, 与金属相比具有长程无序、短程有序的结构, 因而具有独特而优异的物理、化学及力学性能, 使其极具生产应用的优势。其中, Al 基非晶合金是一种高强度低密度的材料, 且 Al 基非晶纳米晶复合材料的比强度与工程陶瓷的接近, 具有很大的应用潜力^[1-3]。这使得近年来快速发展的 航空航天以及交通工具的轻型化的需求得以满足。但在晶化过程中金属间化合物的析出会导致复合材料的强度降低, 还会使材料由韧变脆^[4], 因此, Al 基非晶合金的晶化行为值得深入研究^[5], 找出晶化温度与其它相关表征参数之间的关系也很有意义。

LISBOA 等^[6]提出将 Al 基合金分为纳米晶合金、纳米玻璃合金、玻璃合金 3 大类, 并且利用拓扑不稳定参数 λ 来说明晶化初生相与合金类型之间的关系。拓扑不稳定参数 λ 的核心思想是当溶质原子和溶剂原子的体积错配达到一定程度时, 由此引起的应力将导致晶体结构的失稳, 最终形成非晶^[7]。然而, 即使是同一体系的合金, 也很难有确定的 λ 值将 3 种类型的合金分类^[8]。

除了拓扑不稳定参数 λ , 研究者也试图通过其他一些参数来说明相关关系。ZHANG 等^[9]提出可以用体系电负性的偏差 Δe 值来确定 Al 基非晶合金的类型。

JIA 等^[10]提出了一个准等价团簇模型 $(Al_5TM)_x-(Al_{10}RE)_y$, 即对于 TM 和 RE 摩尔分数分别为 x 和 y 的 $Al_{100-x-y}TM_xRE_y$ 合金, 参数 $(6x+11y)$ 可以预判 Al-TM-RE 非晶合金的类型。与 λ 一样, 很难找到一个临界 Δe 和 $(6x+11y)$ 来区分合金的晶化类型^[11]。同时, 在同一 Al-TM-RE 系中合金组元间的化学混合焓 ΔH^{mix} 直接反应了异类原子之间相互作用的强弱以及混乱程度, 以往许多工作业已表明 T_x 与 ΔH^{mix} 存在较好的线性关系^[11-12]。但是, 对不同体系的 Al-TM-RE 非晶合金而言, 区分其合金类型的临界 λ' 以及 ΔH^{mix} 值并不是固定的, 而是随 RE 原子的半径和电负性的变化而变化。

对于 Al 基非晶合金中如此复杂的表征参数, 数据挖掘可从大量的、存在噪声的、冗余的和缺损的数据中提取蕴藏其中有用的知识。目前, 关于 Al 基非晶合金晶化行为和热稳定性的研究, 还只是简单地通过图表法去分析它们之间的相关性^[11]。统计分析只能研究同一体系中这些参数与晶化温度之间的关系, 而无法根据这些特征参数去预测 T_x 值。而在不同 Al-TM-RE 系的研究中, 统计方法却不能得到很好的结论。机器学习方法^[13]可以研究不同体系中相关特征参数与 T_x 之间的关系, 而前人在 Al 基非晶合金的研究中则很

基金项目: 上海市教委科研创新资助项目(12ZZ174); 上海市教育发展基金会晨光计划资助项目(12CG63)

收稿日期: 2015-08-11; **修订日期:** 2015-11-28

通信作者: 徐 燕, 讲师, 博士; 电话: 18918778925; E-mail: xuyan@shiep.edu.cn

少使用这种方法方法。本文作者则是将 PSO-SVR 方法与 Al 基非晶合金热稳定性研究相结合,通过特征参数 λ 、 Δe 、 $(6x+11y)$ 、 ΔH^{mix} 、 λ' 等来预测 T_x 值,为进一步实验提供理论指导,减少实验的盲目性。

1 原理与方法

1.1 PSO-SVR 方法

20 世纪 90 年代, VAPNIK^[14] 在求解分类问题时候提出了支持向量机(Support vector machine, 简称 SVM)理论, 它以统计学习理论中的 VC 维理论和结构风险最小原理为基础, 利用有限的样本信息在模型的复杂性(对特定训练样本的分类精度)和学习能力(无错误地识别任意样本的能力)之间寻求最佳折衷, 以获得最好的分类性能和推广能力。经过不断发展, SVM 已经在解决实际问题中得到了广泛应用^[15-17]。与其他机器学习方法如遗传算法人工神经网络等方法相比, SVM 具有更好的学习能力和泛化能力, 因而引起了人们对这一领域的极大关注。支持向量回归(SVR)是 SVM 的一种延伸, 可以有效地完成非线性拟合^[14, 18-19]。针对不满足线性关系的样本集 $(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)$, 通过输入空间到输出空间的非线性映射 Φ , 将样本集中的数据 x 映射到高维空间 F , 并在特征空间 F 中用下述函数 $f(x)$ 进行线性回归:

$$f(x) = \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) k(x, x_i) + b_i \quad (1)$$

式中: l 为训练样本个数; α_i 和 α_i^* 是拉格朗日乘子; $k(x, x_i) = \Phi(x) \cdot \Phi(x_i)$ 是一个核函数; b 是阈值。本文作者采用径向基核函数, SVR 的详细原理可以参考^[14]。

粒子群优化算法(Particle swarm optimization, PSO)是一种进化计算技术(Evolutionary computation), 它是由 Kennedy 博士和 Eberhart 教授于 1995 提出的^[20], 其设想是模拟鸟群觅食的过程, 每个优化问题的解都是搜索空间中的一只鸟, 即所谓的粒子。所有的粒子都有一个由被优化的函数决定的适应值, 每个粒子还有一个速度以决定它们飞翔的方向和距离, 然后粒子们就跟踪当前的最优粒子在解空间中的搜索。粒子在搜索的过程中会不断地用当前个体值和全局极值来更新自己, 直到找到全局最优解为止。PSO 是一个很好的参数优化工具, 在本实验中, PSO 被用来寻找 SVR 的最优参数 (C, γ) 。根均方差(E_r)作为适应度函数:

$$E_r = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - y_i)^2} \quad (2)$$

式中: m 为训练样本数; y_i 和 $\hat{y}$ 分别表示训练样本的实验测量值和预测值。

1.2 泛化性能评估

两个指标, 也就是平均绝对误差(E_{ma})和平均相对误差(E_{map})被用来作为泛化性能评估。它们的公式如下:

$$E_{\text{ma}} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |\hat{y}_j - y_j| \quad (3)$$

$$E_{\text{map}} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left| \frac{\hat{y}_j - y_j}{y_j} \right| \quad (4)$$

2 预测模型的建立

本实验中所用实验数据集源自文献^[11]。该数据集总共有 66 个数据样本, 包含晶化温度 T_x , 化学混合焓 ΔH^{mix} 、拓扑不稳定参数 λ 、电负性差 Δx 、参数 $(6x+11y)$ 以及用有效原子半径修正后的拓扑不稳定参数 λ' 等 6 维数据向量。相关数据如表 1 所列。

张章等^[11]指出, 非晶合金的晶化过程需要进行原子的扩散, 影响非晶合金热稳定性的主要因素来自两个方面: 电负性和原子尺寸。电负性的大小能反映化学键的强弱和混合热的大小, 而溶剂原子与溶质原子尺寸大小也能影响热稳定好坏, 因此非晶晶化温度 T_x 与其组元密切相关。统计结果表明: 同一 Al-Ni-RE 系非晶合金的 λ' 、 ΔH^{mix} 等参数的两个临界值可以将其分为纳米晶、纳米玻璃、玻璃合金三类^[8]。然而, 对于不同体系的 Al-Ni-RE 非晶合金, 却不再有明显的临界值。同时, 统计方法无法通过这些特征参数来计算得出一个确定的 T_x 值, 而只能得到一些相关的线性关系。机器学习方法却可以使用训练样本训练一个模型, 然后通过该模型预测得到一个在一定精度范围内的 T_x 值, 这就很好地解决了统计学习方法无法解决的问题。

在使用实验中所提到的预测方法训练和建模过程中, 以化学混合焓 ΔH^{mix} 、拓扑不稳定参数 λ 、电负性差 Δx 、参数 $(6x+11y)$ 以及用有效原子半径修正后的拓扑不稳定参数 λ' 等五维数据向量为输入变量, 以 T_x 为输出向量进行训练学习。首先, 这 66 条样本数据要进行规范化处理, 未经预处理的样本数据各维特征差异较大, 若直接用于机器学习方法, 将会极大地影响其

表 1 Al 基非晶晶化温度和相关参数^[11]Table 1 Crystallization temperature T_x and relevant parameters of Al-based amorphous alloys^[11]

Sample No.	Alloy	$ \Delta H^{\text{mix}} /(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	Δe	6x+11y	λ	λ'	T_x/K
1	Al _{85.5} Ni ₉ La _{5.5}	14.45	0.1497	114.5	0.0996	0.1273	536.5
2	Al ₈₅ Ni _{9.5} La _{5.5}	14.78	0.1512	117.5	0.1013	0.1305	542.7
3	Al ₈₆ Ni _{8.5} La _{5.5}	14.13	0.1482	111.5	0.0979	0.124	527.3
4	Al ₈₅ Ni ₁₀ La ₅	14.48	0.1483	115	0.0967	0.1275	538.3
5	Al ₈₆ Ni ₇ La ₇	14.98	0.1559	119	0.1115	0.1331	538.1
6	Al _{85.5} Ni ₈ La _{6.5}	15.03	0.155	119.5	0.1087	0.1333	542.9
7	Al ₈₅ Ni ₉ La ₆	15.07	0.1539	120	0.1058	0.1335	545.5
8	Al _{84.5} Ni ₁₀ La _{5.5}	15.09	0.1526	120.5	0.103	0.1338	548.6
9	Al ₈₄ Ni ₁₁ La ₅	15.11	0.1512	121	0.1001	0.134	549
10	Al _{87.5} Ni ₅ La _{7.5}	14.23	0.1532	112.5	0.111	0.1264	527.2
11	Al ₈₇ Ni ₆ La ₇	14.3	0.1526	113	0.1081	0.1266	529.2
12	Al _{86.5} Ni ₇ La _{6.5}	14.37	0.1519	113.5	0.1053	0.1268	529.5
13	Al ₈₆ Ni ₈ La ₆	14.42	0.1509	114	0.1024	0.127	531
14	Al _{84.5} Ni ₁₁ La _{4.5}	14.49	0.1466	115.5	0.0939	0.1277	40.5
15	Al _{85.5} Ni _{9.5} La ₅	14.16	0.1468	112	0.095	0.1243	525.4
16	Al ₈₆ Ni ₉ La ₅	13.83	0.1453	109	0.0933	0.121	516.8
17	Al ₈₆ Ni _{9.5} La _{4.5}	13.53	0.1422	106.5	0.0888	0.118	511.4
18	Al _{86.5} Ni _{8.5} La ₅	13.5	0.1437	106	0.0916	0.1178	508.3
19	Al _{85.5} Ni ₁₀ La _{4.5}	13.86	0.1437	109.5	0.0905	0.1213	517.9
20	Al _{86.5} Ni ₉ La _{4.5}	13.21	0.1407	103.5	0.0871	0.1148	497.6
21	Al ₈₇ Ni ₈ La ₅	13.17	0.1421	103	0.0899	0.1145	493
22	Al ₈₇ Ni ₉ La ₄	12.57	0.1359	98	0.0808	0.1085	478
23	Al ₈₈ Ni ₈ La ₄	11.89	0.1326	92	0.0774	0.102	456
24	Al ₈₉ Ni ₅ La ₆	12.38	0.1409	96	0.0922	0.1076	494.1
25	Al _{85.5} Ni _{9.5} Y ₅	14.24	0.1268	112	0.0819	0.1111	495.4
26	Al ₈₆ Ni ₉ Y ₅	13.91	0.1251	109	0.0802	0.1079	485.1
27	Al ₈₆ Ni _{9.5} Y _{4.5}	13.6	0.1236	106.5	0.0769	0.1062	476.7
28	Al ₈₆ Ni _{8.5} Y _{5.5}	14.2	0.1265	111.5	0.0834	0.1096	471.7
29	Al ₈₆ Ni ₈ Y ₆	14.49	0.1278	114	0.0867	0.1113	481.9
30	Al _{86.5} Ni _{8.5} Y ₅	13.57	0.1234	106	0.0785	0.1046	463.2
31	Al _{86.5} Ni ₉ Y _{4.5}	13.27	0.1219	103.5	0.0752	0.1029	459.1
32	Al ₈₇ Ni ₈ Y ₅	13.23	0.1216	103	0.0768	0.1014	444.9
33	Al _{85.5} Ni ₉ Y _{5.5}	14.53	0.1282	114.5	0.0851	0.1128	481.5
34	Al ₈₆ Ni ₁₀ Y ₄	13.29	0.122	104	0.0737	0.1045	444.5
35	Al ₈₈ Ni ₄ Y ₈	14.2	0.1241	112	0.0928	0.1051	465
36	Al ₈₅ Ni ₁₀ Y ₅	14.56	0.1284	115	0.0836	0.1144	502.3
37	Al ₈₅ Ni ₉ Y ₆	15.15	0.1312	120	0.0901	0.1178	506.7
38	Al ₈₅ Ni ₆ Y ₉	16.79	0.1371	135	0.1095	0.128	557
39	Al ₈₅ Ni ₅ Y ₁₀	17.28	0.1383	140	0.116	0.1314	560
40	Al _{86.5} Ni _{4.5} Y ₉	15.76	0.1314	126	0.1044	0.1183	526
41	Al ₈₅ Ni ₇ Y ₈	16.27	0.1355	130	0.103	0.1246	540.6

续表 1

42	Al ₈₅ Ni ₈ Y ₇	15.72	0.1336	125	0.0966	0.1212	520
43	Al ₈₄ Ni _{7.5} Y _{8.5}	17.19	0.1399	138.5	0.1097	0.1328	557.4
44	Al _{83.5} Ni _{5.5} Y ₁₁	18.75	0.1449	154	0.1276	0.1445	576
45	Al ₈₃ Ni _{9.1} Y _{7.9}	17.51	0.1421	141.5	0.1092	0.1372	560.6
46	Al ₈₇ Ni ₈ Ce ₅	13.19	0.1386	103	0.0808	0.1054	496.2
47	Al _{86.5} Ni ₉ Ce _{4.5}	13.22	0.1374	103.5	0.0789	0.1066	498.9
48	Al ₈₆ Ni ₁₀ Ce ₄	13.25	0.136	104	0.0769	0.1077	497.4
49	Al ₈₇ Ni ₉ Ce ₄	12.58	0.1329	98	0.0735	0.1012	468.2
50	Al ₈₇ Ni _{8.67} Ce _{4.33}	12.77	0.1348	99.65	0.0759	0.1026	486
51	Al _{86.5} Ni _{8.5} Ce ₅	13.52	0.1402	106	0.0825	0.1087	507.3
52	Al ₈₆ Ni ₉ Ce ₅	13.85	0.1418	109	0.0842	0.1119	517.8
53	Al ₈₆ Ni _{9.5} Ce _{4.5}	13.55	0.139	106.5	0.0806	0.1098	516.7
54	Al ₈₇ Ni ₇ Ce ₆	13.76	0.1437	108	0.0881	0.1096	517
55	Al ₈₄ Ni ₁₀ Ce ₆	15.73	0.153	126	0.0983	0.1291	560
56	Al ₈₃ Ni ₁₁ Ce ₆	16.34	0.1559	132	0.1017	0.1356	592
57	Al ₈₅ Ni _{7.5} Ce _{7.5}	15.93	0.1567	127.5	0.1058	0.1289	558
58	Al ₈₄ Ni _{10.67} Ce _{5.33}	15.33	0.1496	122.65	0.0934	0.1263	553
59	Al _{85.5} Ni _{9.5} Ce ₅	14.19	0.1433	112	0.0859	0.1152	537.5
60	Al ₈₆ Ni _{8.5} Ce _{5.5}	14.15	0.1444	111.5	0.0879	0.114	527.4
61	Al ₈₅ Ni ₁₀ Ce ₅	14.5	0.1448	115	0.0876	0.1184	540.6
62	Al _{85.5} Ni ₉ Ce _{5.5}	14.47	0.146	114.5	0.0896	0.1173	541.9
63	Al ₈₆ Ni ₈ Ce ₆	14.43	0.1469	114	0.0915	0.1161	535.1
64	Al ₈₅ Ni ₉ Ce ₆	15.09	0.15	120	0.0949	0.1226	552.8
65	Al ₈₅ Ni ₈ Ce ₇	15.66	0.1546	125	0.1022	0.1268	557.8
66	Al ₈₃ Ni ₁₀ Ce ₇	16.92	0.1606	137	0.109	0.1398	594

预测准确率。在本实验中,使用简单的数据归一化方法进行处理,之后,给定的样本数据集被分为两类:训练集和测试集。这 66 条样本数据被 BPNN 方法和 PSO-SVR 方法进行训练建模,调整模型的正确性以及预测处理。本文作者使用留一交叉验证法(LOOCV)^[21]划分数据集,即使用其中 65 条数据为训练集,剩下的一条数据为测试集,并且这 66 条数据逐一作为测试集。一旦预测模型训练完成,测试集将会用来评估这个预测模型。测试集作为这个已完成训练的预测模型的输入,得到的结果将被计算该模型的预测精度以及泛化能力。

3 结果与分析

表 2 所示为使用 BPNN 及基于 LOOCV 的 PSO-SVR 两种回归方法对 Al 基非晶合金 T_x 进行预测所得的计算结果和误差。

从表 2 中可以看出,在 PSO-SVR 预测的 66 个样本中,所有样本的绝对误差都小于 4.2%。其中,绝大多数样本(52/66=78.8%)的绝对误差小于 2%。而 BPNN 模型的计算结果中,只有 56.1%(37/66)样本的绝对误差小于 2%,且最大误差高达 13.4%。在横向比较中,采用 PSO-SVR 方法时 56.1%(37/66)的样本预测误差比 BPNN 方法预测的要小。该结果表明:在大多数样本中,PSO-SVR 方法比 BPNN 方法具有更好的预测精度。

图 1 所示为 Al 基非晶合金 T_x 实测值和通过 PSO-SVR 方法以及 BPNN 方法得到的预测值的对比。从图 1 可以直观地看出,绝大多数样本的 PSO-SVR 预测值都落在最优拟合线上或线的附近,比 BPNN 方法的预测值更接近实测值。且与实测值相比,BPNN 模型的计算误差普遍明显偏高。这些结果再次表明:与 BPNN 方法相比,PSO-SVR 方法预测结果更接近实测值,且具有更高的预测精度以及更好的泛化能力。

表 2 Al 基非晶 T_x 测量结果与 BPNN 和基于 LOOCV 的 PSO-SVR 预测结果的对比Table 2 Comparison between experimental and predicted values of T_x by using BPNN and PSO-SVR methods

Sample No.	Measured T_x/K	BPNN calculated T_x/K	BPNN calculated error/%	PSO-SVR predicted T_x/K	PSO-SVR predicted error/%
1	536.5	534.4894	-0.37476	533.9733	-0.47096
2	542.7	518.3875	-4.47992	543.4727	0.142381
3	527.3	524.0878	-0.60918	527.976	0.1282
4	538.3	518.6	-3.65967	536.6858	-0.29987
5	538.1	518.4313	-3.65521	544.3015	1.152481
6	542.9	518.3594	-4.52028	548.3925	1.011696
7	545.5	549.2143	0.680898	551.1837	1.041925
8	548.6	550.7982	0.400693	549.2142	0.111958
9	549	553.8573	0.884754	550.2018	0.218907
10	527.2	518.4344	-1.66267	528.3128	0.211077
11	529.2	518.7437	-1.97587	533.4347	0.800208
12	529.5	530.3789	0.165987	535.1028	1.05813
13	531	518.6797	-2.32021	531.8887	0.167363
14	40.5	518.4806	-4.07389	536.7488	-0.69402
15	525.4	518.5953	-1.29515	526.0729	0.128074
16	516.8	516.7362	-0.01235	517.7995	0.193402
17	511.4	519.1844	1.522174	507.9601	-0.67264
18	508.3	519.3172	2.16746	509.1548	0.168168
19	517.9	519.2156	0.254026	516.4953	-0.27123
20	497.6	498.8579	0.252793	499.3851	0.358742
21	493	498.2369	1.062252	504.1403	2.259696
22	478	520.0781	8.80295	479.9181	0.401276
23	456	508.9658	11.61531	461.1855	1.137171
24	494.1	520.4047	5.32376	481.9105	-2.46701
25	495.4	519.6967	4.904461	487.7915	-1.53583
26	485.1	470.4216	-3.02585	481.0526	-0.83434
27	476.7	464.0036	-2.66339	470.0884	-1.38695
28	471.7	481.0706	1.986559	486.1154	3.056053
29	481.9	520.35	7.978834	493.3491	2.375825
30	463.2	511.6179	10.45291	466.7776	0.772366
31	459.1	520.8391	13.44785	450.3824	-1.89885
32	444.9	468.1516	5.226253	459.267	3.229265
33	481.5	492.2102	2.224341	495.7455	2.958567
34	444.5	462.5316	4.056603	463.0392	4.170799
35	465	467.5029	0.538258	480.3146	3.293462
36	502.3	520.06	3.535736	497.4209	-0.97135
37	506.7	510.9562	0.839984	511.804	1.007302
38	557	548.106	-1.59677	545.2034	-2.11788
39	560	559.8067	-0.03452	553.2716	-1.2015
40	526	523.4046	-0.49342	516.8867	-1.73257
41	540.6	518.5844	-4.07244	535.6902	-0.90821

续表 2

42	520	518.6781	-0.25421	524.7841	0.920019
43	557.4	555.385	-0.3615	557.1745	-0.04046
44	576	588.8361	2.22849	579.2784	0.569167
45	560.6	566.2152	1.001641	566.7053	1.089065
46	496.2	494.0018	-0.44301	499.6416	0.693591
47	498.9	498.2055	-0.13921	493.9043	-1.00134
48	497.4	499.6407	0.450483	492.5699	-0.97107
49	468.2	481.5227	2.845515	474.2445	1.291008
50	486	510.6611	5.0743	480.7747	-1.07516
51	507.3	519.7297	2.450168	504.0459	-0.64145
52	517.8	519.2328	0.276709	511.529	-1.21109
53	516.7	519.0859	0.461757	503.1045	-2.63122
54	517	519.0984	0.40588	513.4836	-0.68015
55	560	566.3007	1.125125	562.2826	0.407607
56	592	575.3418	-2.81389	574.3901	-2.97465
57	558	568.0218	1.796022	569.1891	2.005215
58	553	563.4254	1.885244	554.462	0.264376
59	537.5	526.6825	-2.01256	521.8741	-2.90714
60	527.4	518.5783	-1.67268	529.7448	0.444596
61	540.6	536.4464	-0.76833	530.1383	-1.9352
62	541.9	518.3689	-4.34233	531.0385	-2.00434
63	535.1	534.6483	-0.08441	530.555	-0.84937
64	552.8	563.2167	1.884352	547.6777	-0.92661
65	557.8	563.374	0.999283	562.6194	0.864001
66	594	581.8342	-2.04811	585.9335	-1.358

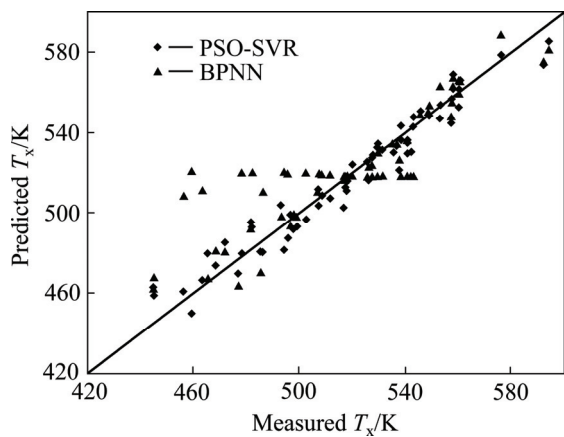


图 1 通过 PSO-SVR 和 BPNN 得到的预测值与实测值对比图

Fig. 1 Comparison of experimental values vs predicted values by BPNN and PSO-SVR

表 3 列出了使用 BPNN 和 PSO-SVR 两种方法得到的评价指标值。从表 3 可以看出, PSO-SVR 预测结果的 E_t (7.6597 K)、 E_{ma} (6.081 K)和 E_{map} (1.1935%)分别

都比 BPNN 的(E_t =18.1325 K、 E_{ma} =12.6657 K、 E_{map} =2.5254%)要小得多。这些结果再次表明,在 Al 基非晶合金数据集上, PSO-SVR 与 BPNN 相比,具有更高的预测精度以及更强的泛化能力。

表 3 两种回归方法预测性能的比较

Table 3 Comparison of prediction performance between BPNN and PSO-SVR

Method	E_t /K	E_{ma} /K	E_{map} /%
BPNN	18.1325	12.6657	2.5254
PSO-SVR	7.6597	6.081	1.1935

在不同 Al-TM-RE 系中,使用统计学方法很难得到确定的化学混合焓 ΔH^{mix} 、拓扑不稳定参数 λ 、电负性差 Δx 、参数(6x+11y)以及用有效原子半径修正后的拓扑不稳定参数 λ' 等参数来区分合金的晶化类型。而 PSO-SVR 方法解决了使用 Al 基非晶参数不能准确分析其热稳定性的问题。以上结果表明: PSO-SVR 能用

于预测 Al 基非晶合金的 T_x 值, 并具有很好的预测精度和泛化能力。

4 结论

1) 将机器学习方法与材料研究相结合, 根据 Al 基非晶合金的表征参数, 采用基于 LOOCV 的 PSO-SVR 预测方法, 对不同体系 Al 基非晶合金的 T_x 进行建模和预测研究, 并将其预测结果与 BPNN 模型的预测结果进行了比较。其中 PSO-SVR 预测结果的 E_r (7.6597 K)、 E_{ma} (6.081 K)和 E_{map} (1.1935%)分别都比 BPNN 的 (E_r =18.1325 K、 E_{ma} =12.6657 K、 E_{map} =2.5254%)要小得多。

2) 由于 PSO-SVR 的预测方法比 BPNN 方法具有更高的预测精度和更强的泛化能力, 而面向 Al 基非晶合金的数据集的实验结果也同样证明了这个结论。因此, PSO-SVR 预测方法对该方向的物理实验具有一定的指导意义和实用价值。

REFERENCES

- [1] GLORANT T, GREER A L. Al-based nanocrystalline composites by rapid solidification of Al-Ni-Sm[J]. Nanostructured Materials, 1998, 10: 389–396.
- [2] SAHOO K L, SAHU R, GHOSH M, CHATTERJEE S. Studies on crystallization behavior and mechanical properties of Al-Ni-La metallic glasses[J]. Bulletin of Materials Science, 2008, 31(3): 433–439.
- [3] 盈 亮, 戴明华, 胡 平, 闫巧云. 6061-T6 铝合金高温本构模型及温成形数值模拟[J]. 中国金属有色学报, 2015, 25(7): 2815–2821.
YING Liang, DAI Ming-hua, HU Ping, YAN Qiao-yun. Thermal constitutive model and numerical simulation of hot forming for 6061-T6 aluminum alloy[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2015, 25(7): 2815–2821.
- [4] ZHONG Zhen-chen, JIANG Xiang-yang, GREER A L. Micro structure and hardening of Al-based nanophase composites[J]. Materials Science and Engineering A, 1997, 226: 531–535.
- [5] 李永飞, 王英敏, 耿遥祥, 王传龙, 韩凯明, 羌建兵, 高晓霞, 米少波, 王 清, 董 闯, 孙继忠. $Ni_{60}Nb_{40}$ 与 $Ni_{40}Nb_{60}$ 非晶合金的低温晶化行为[J]. 中国金属有色学报, 2014, 24(10): 2588–2593.
LI Yong-fei, WANG Ying-min, GEN Yao-xiang, WANG Chuan-long, HAN Kai-ming, QIANG Jian-bing, GAO Xiao-xia, MI Shao-bo, WANG Qing, DONG Chuang, SUN Ji-zhong. Low-temperature crystallization behavior of $Ni_{60}Nb_{40}$ and $Ni_{40}Nb_{60}$ metallic glasses[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2014, 24(10): 2588–2593.
- [6] LISBOA R D S, BOLFARINI C, BOTTA W J F. Topological instability as a criterion for design and selection of aluminum-based glass-former alloys[J]. Applied Physics Letters, 2005, 86(21): 211904.
- [7] EGAMI T, WASEDA Y. Atomic size effect on the formability of metallic glasses[J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 1984, 64(1/2): 113–134.
- [8] ZHANG Zhang, ZHOU Wei, XIONG Xian-zhong, KONG Ling-tao, LI Jin-fu. Glass forming ability and primary crystallization behavior of Al-Ni-Ce alloys[J]. Intermetallics, 2012, 24: 1–6.
- [9] ZHANG Long, ZHANG Fan, YANG Xi, LONG Guan-kui, WU Ying-peng, ZHANG Peng-fei, LENG Kai, HUANG Yi, MA Yan-feng, YU Ao, CHEN Yong-sheng. Porous 3D graphene-based bulk materials with exceptional high surface area and excellent conductivity for supercapacitors[J]. Scientific Reports, 2013, 3: 1408.
- [10] JIA Ran, BIAN Xiu-fang, LUE Xiao-qian, SONG Kai-kai, LI Xue-lian. The relationship between viscosity and glass forming ability of Al-(Ni)-Yb alloy systems[J]. Science China Physics, Mechanics and Astronomy, 2010, 53(3): 390–393.
- [11] 张 章, 熊贤仲, 乙姣姣, 李金富. Al-Ni-RE 非晶合金的晶化行为和热稳定性[J]. 物理学报, 2013, 62(13): 136401.
ZHANG Zhang, XIONG Xian-zhong, YI Jiao-jiao, LI Jin-fu. Crystallization behavior and thermal stability of Al-Ni-RE metallic glasses[J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(13): 136401.
- [12] BOER F R, PERRIFOR D G. Cohesion in metals[M]. Netherlands: Elsevier Science Publishers, 1988: 20–35.
- [13] 徐 戎, 李落星, 张立强, 朱必武, 卜晓兵. 金属型铸造界面换热系数峰值预测模型的建立和验证[J]. 中国金属有色学报, 2014, 24(4): 950–957.
XU Rong, LI Luo-xing, ZHANG Li-qiang, ZHU Bi-wu, BU Xiao-bing. Development and validation of prediction models of heat transfer coefficient peak value during metal casting process[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2014, 24(4): 950–957.
- [14] VAPNIK V N. The nature of statistical learning theory[M]. New York: Springer-Verlag, 1995: 53–64.
- [15] CAI Cong-zhong, WANG Wan-lu, SUN Li-zhi, CHEN Yu-zong. Protein function classification via support vector machine approach[J]. Mathematical Biosciences, 2003, 185(2): 111–122.
- [16] 温玉锋, 蔡从中, 裴军芳, 朱星键, 肖婷婷. R_2O - MO - Al_2O_3 - SiO_2 玻璃配方与热膨胀系数关系的支持向量回归研究[J]. 功能材料, 2009, 40(1): 66–70.
WEN Yu-feng, CAI Cong-zhong, PEI Jun-fang, ZHU Xing-jian, XIAO Ting-ting. Study on the relationship between thermal expansion coefficient and oxide composition of R_2O - MO - Al_2O_3 - SiO_2 system glass via support vector regression approach[J]. Journal of Functional Materials, 2009, 40(1): 66–70.

- 66–70.
- [17] ABUOMAR O, NOURANIAN S, KING R, RICKS T M, LACY T E. Comprehensive mechanical property classification of vapor-grown carbon nanofiber/vinyl ester nanocomposites using support vector machines[J]. *Computational Materials Science*, 2015, 99: 316–325.
- [18] MAJID A, KHAN A, JAVED G, MIRZA A M. Lattice constant prediction of cubic and monoclinic perovskites using neural networks and support vector regression[J]. *Computational Materials Science*, 2010, 50(2): 363–372.
- [19] OWOLABI T O, AKANDE K O, OLATUNJI S O. Development and validation of surface energies estimator (SEE) using computational intelligence technique[J]. *Computational Materials Science*, 2015, 101: 143–151.
- [20] CORTES C, VAPNIK V. Support-vector networks[J]. *Machine Learning*, 1995, 20(3): 273–297.
- [21] PENG Si-hua, XU Qiang-hua, LING Xuefeng-bruce, PENG Xiao-ning, DU Wei, CHEN Liang-biao. Molecular classification of cancer types from microarray data using the combination of genetic algorithms and support vector machines[J]. *FEBS Letters*, 2003, 555(2): 358–362.

Parameters analysis of Al-based amorphous alloys using support vector regression

XU Yan¹, ZHANG Yu-feng¹, GAO Tian¹, ZHANG Yan², ZHANG Hui-ran², LIU Yong-sheng¹

(1. School of Mathematics and Physics, Shanghai University of Electric Power, Shanghai 201399, China;

2. School of Computer Engineering and Science, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

Abstract: According to the experimental data of Al-based amorphous alloys, a model to predict the crystallization temperature T_x of Al-based amorphous alloys by using particle swarm optimization combined with support vector regression (PSO-SVR) was established. Based on this model, crystallization temperature T_x can be predicted, and then compared with the method of back-propagation neural network (BPNN). The results show that the prediction error is smaller by using PSO-SVR. This means that the crystallization behavior and thermal stability of Al-based amorphous alloys can be well described by the parameters used in PSO-SVR model. Moreover, the PSO-SVR model could provide an important theoretical and practical guidance to the research on Al-based amorphous alloys.

Key words: Al-based amorphous alloy; crystallization temperature; support vector regression; particle swarm optimization

Foundation item: Project(12ZZ174) supported by Innovation Program of Shanghai Municipal Education Commission, China; Project(12CG63) supported by Shanghai Educational Development Foundation of Chenguang Program, China

Received date: 2015-08-11; **Accepted date:** 2015-11-28

Corresponding author: XU Yan; Tel: +86-18918778925; E-mail: xuyan@shiep.edu.cn

(编辑 龙怀中)