

doi:10.11835/j.issn.1000-582X.2019.12.004

基于 MIVM 神经网络模型对合金组元活度的预测

周兰花^a, 曾富洪^b

(攀枝花学院 a, 钒钛学院; b, 智能制造学院, 四川 攀枝花 617000)

摘要:为了使用分子相互作用体积模型(molecular interaction volume model, MIVM)准确便捷预测出合金溶液中组元的活度,建立了活度预测的 BP(back propagation)神经网络模型和算法,模型的输入层为合金溶液中组元的实验活度系数,输出层为分子对位能相互作用参数,隐含层设定为一层。采用遗传算法优化 BP 神经网络模型各结构参数,在遗传算法中使用合金溶液中组元的无限稀活度系数的实验值和理论值的偏差作为适应度函数,以偏差最小为目标进行优化以保证 BP 神经网络的有效性。最后以 Pb-Bi, Sn-Bi, Sn-Pb, Fe-Cu 二元合金溶液中组元活度预测为例对 BP 神经网络模型和算法进行验证。结果表明:组元活度预测值与实验值之间的平均相对误差均小于 4%,绝对偏差小于 0.78,能满足工程计算要求。

关键词:活度;分子相互作用体积模型;遗传算法;BP 神经网络

中图分类号:TF02

文献标志码:A

文章编号:1000-582X(2019)12-034-07

Prediction of component activity in alloys by neural network model based on MIVM

ZHOU Lanhua^a, ZENG Fuhong^b

(a. Faculty of Vanadium and Titanium; b. Faculty of Intelligent Manufacturing, Panzhihua University, Panzhihua 617000, Sichuan, P. R. China)

Abstract: A back propagation (BP) algorithm of the neural network was established so as to use Molecular Interaction Volume Model (MIVM) to predict the components activity in alloy solution accurately and conveniently. Its input layer is the experimental activity coefficient of components in alloy solution, output layers are molecular pair energy interaction parameters and hidden layer is set to one layer. The structural parameters in BP neural network model were optimized via genetic algorithms, where the deviation between the experimental and theoretical values of the infinite dilution activity coefficient as fitness function. The optimization was carried out with minimum deviation so as to ensure the validity of BP neural network. Finally, the BP neural network model and algorithm were validated by taking the binary alloy solutions of Pb-Bi, Sn-Bi, Sn-Pb and Fe-Cu as examples. The results show that the average relative errors between the predicted and experimental values of components activity in the alloys are less than 4% and the absolute deviation less than 0.78, which can meet the requirements of engineering calculation.

Keywords: activity; Molecular Interaction Volume Model; genetic algorithm; BP neural network

收稿日期:2019-07-20

基金项目:国家自然科学基金资助项目(51164032)。

Supported by National Natural Science Foundation of China(51164032).

作者简介:周兰花(1969—),女,攀枝花学院教授,博士,主要从事冶金资源综合利用研究,(E-mail)zhoulanhuazk@163.com。

活度是溶液重要的热力学性质,在冶金过程中有广泛的应用。对于高温冶金溶液,活度的实验测定十分困难。为解决这一问题,以及将二元系组元活度复合出多元系组元活度, α 函数法^[1]、周国治法^[2-3]、新一代溶液模型^[4]、MIVM(molecular interaction volume model)模型^[5]等活度预测模型不断被提出,其中,MIVM 模型在预测一些合金组元活度时表现有良好的效果^[5-7]。

神经网络系统于 20 世纪 40 年代后出现,具有大规模并行处理、分布式信息存储及良好的自组织自学习能力等特点,在求解化工、冶金、机械等生产中的复杂工程问题时有强大的优势^[8-12]。BP 神经网络是一种多层前向型神经网络模型^[13-14],3 层神经网络具有良好的函数逼近功能,结合遗传算法,能在给定区域寻优,也能预测网络下的最优值,所得结果更可靠、稳定^[15]。MIVM 模型是建立在统计热力学基础上的计算模型,可以用它预测合金溶液热力学性质,由于一些热力学数据的缺乏,模型中的瓶颈参数 B_{ij} , B_{ji} (i - j 、 j - i 分子对位能相互作用参数)求取困难,会制约模型的使用。但 B_{ij} , B_{ji} 和活度之间存在着复杂的非线性关系,而 BP 神经网络能完成这种非线性映射关系,据此笔者基于 MIVM 建立 BP 3 层神经网络模型,以溶液中组元的实验活度系数为输入值,用 BP 神经网络完成输出 B_{ij} , B_{ji} 的映射,结合遗传算法分析优选 B_{ij} , B_{ji} , 进一步预测合金溶液中组元活度。

1 基于 MIVM 的神经网络拓扑结构

结合 MIVM 模型特点^[16]建立如图 1 所示的 BP 3 层神经网络拓扑结构。图 1 中 $\gamma_{11}, \gamma_{12}, \dots, \gamma_{u2}$ 为 BP 神经网络的输入值,对应于 u 组实验活度系数; B_{ij} 和 B_{ji} 为 BP 神经网络的输出值,对应于 MIVM 模型中的 B_{ij}, B_{ji} ; h_t ($t=1, 2, \dots, l$) 为隐藏层节点阈值; b_k ($k=i, j$) 为输出层节点阈值; w_{st} 为输入层到隐藏层间的神经网络权值, w_{tk} 为隐藏层到输出层间的神经网络权值,其中隐藏层节点数由式(1)确定。

$$h_n = \sqrt{i_n \times o_n}, \quad (1)$$

式中: h_n 为隐含层节点数; i_n 为输入层节点数; o_n 为输出层节点数。

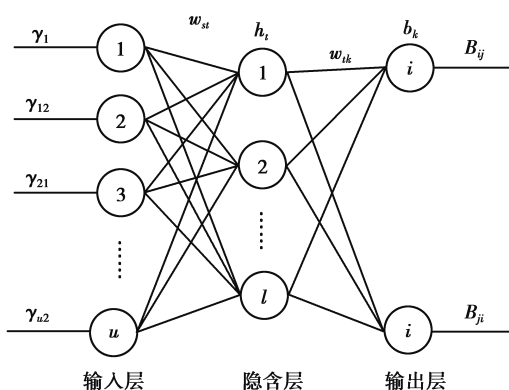


图 1 BP 神经网络的拓扑结构

Fig. 1 Topological Structure of BP Neural Network

2 基于 MIVM 模型的 BP 神经网络优化算法模型

MIVM 模型计算较复杂,初始确定的神经网络模型很难满足输出结果的精度要求,为此采用遗传算法(genetic algorithms, GA)对神经网络模型进行优化。GA 是模拟自然界遗传机制和生物进化论而成的一种并行随机搜索最优化方法,它以求解问题参数为依据设计染色体编码并构成种群,以适应度为目标函数,通过遗传中的选择、交叉和变异对种群进行进化迭代,从而得到问题优化的过程^[8]。基于 MIVM 的 BP 神经网络优化算法模型如图 2 所示,其本质是优化 BP 神经网络的权值和阈值。

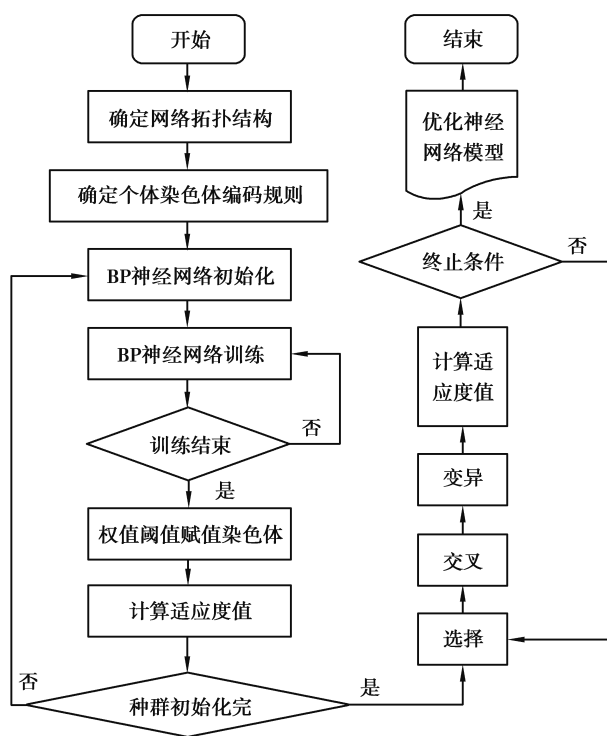


图 2 BP 神经网络优化算法模型

Fig. 2 BP Neural Network Optimization Model

2.1 染色体编码与种群初始化

初始种群中的每个个体都包含 BP 神经网络所有权值和阈值, 染色体结构如图 3 所示。染色体基因位编码方法为实数编码, 每个个体均为实数串, 由输入层与隐含层连接权值、隐含层阈值、隐含层与输出层连接权值以及输出层阈值 4 部分组成。

染色体的长度为: $i_n \times h_n + h_n + h_n \times o_n + o_n$ 。单个个体的形成过程如下。

首先根据经验确定输出层对应的分子对位能相互作用参数(B_{ij}, B_{ji})值范围, 以此为依据随机生成一定数量的 B_{ij} 和 B_{ji} 作为输出值, 以 B_{ij} 和 B_{ji} 为基础, 再由 MIVM 中的计算式(2)和(3)求取组元 i, j 的无限稀活度系数 r_i^0, r_j^0 。

$$r_i^0 = 1 - \ln\left(\frac{V_{mj}B_{ji}}{V_{mi}}\right) - \frac{V_{mi}B_{ij}}{V_{mj}} - \frac{1}{2}(Z_i \ln B_{ji} + Z_j B_{ij} \ln B_{ij}), \quad (2)$$

$$r_j^0 = 1 - \ln\left(\frac{V_{mi}B_{ij}}{V_{mj}}\right) - \frac{V_{mj}B_{ji}}{V_{mi}} - \frac{1}{2}(Z_j \ln B_{ij} + Z_i B_{ji} \ln B_{ji}), \quad (3)$$

式中: V_{mi}, V_{mj} 为组元 i, j 的摩尔体积, m^3/mol ; B_{ij}, B_{ji} 值为 $i-j, j-i$ 分子对位能相互作用参数; Z_i, Z_j 为分子 i, j 的第一配位层的配位数。

当 x_i, x_j (x_i, x_j 为组元 i, j 的摩尔分数) 分别有 9 个时, 对应的输入节点数为 18 个。

其次以输入数据和输出数据作为训练数据, 训练 BP 神经网络, 在训练过程中根据网络预测误差调整网络的权值和阈值, 并将训练后的权值和阈值赋予个体的染色体, 从而得到种群个体, 如此反复直至种群个体达到设定规模完成种群初始化。

2.2 适应度函数

设计的 BP 神经网络模型的主要功能是由有限的无限稀活度系数实验值得到其分子对位能相互作用参数(B_{ij}, B_{ji})。模型的精度是由无限稀活度系数的实验值与式(2)(3)计算出的理论值的偏差确定。适应度函数如式(4)所示, 适应度值 f 越小模型精度越高。

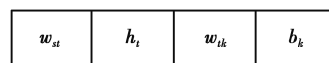


图 3 染色体结构示意图

Fig. 3 Chromosome structure sketch

$$f = \frac{100 \times [abs(r_{i(E)}^0 - r_{i(C)}^0) + \times abs(r_{j(E)}^0 - r_{j(C)}^0)]}{abs(r_{i(E)}^0) + \times abs(r_{j(E)}^0)}, \quad (4)$$

式中: $r_{i(E)}^0, r_{j(E)}^0$ 分别为溶液中组元 i, j 的无限稀活度系数实验值; $r_{i(C)}^0, r_{j(C)}^0$ 分别为溶液中组元 i, j 的无限稀活度系数计算值。

2.3 遗传操作

1) 选择操作。以每个个体适应度为基础,采用轮盘赌法进行选择,操作过程为:对上代群体中所有个体的适应度进行累加得适应度之和 $\sum f$;根据各个体的适应度值的大小,将各个体与 $[0, \sum f]$ 上某区域建立对应关系;在 $[0, \sum f]$ 范围内产生一个随机数;随机数所在区域的个体被选择。其实是适应度大的个体被选择作为下一代个体的概率大。

2) 交叉操作。交叉采用实数交叉法,第 k 个染色 a_k 和第 l 个染色体 a_l 在 t 位的交叉操作方法如式(5)所示,式中, b 是 $[0, 1]$ 间的随机数。

$$\begin{cases} a_{kt} = a_{kt}(1-b) + a_{lt}b, \\ a_{lt} = a_{lt}(1-b) + a_{kt}b. \end{cases} \quad (5)$$

3) 变异操作。采用实数变异操作法,当对 s 个个体的第 t 个基因 a_{st} 进行变异时操作方法如式(6)所示。

$$a_{st} = \begin{cases} a_{st} + (a_{st} - a_{\max}) \times f(g) & \lambda_2 > 0.5; \\ a_{st} + (a_{\max} - a_{st}) \times f(g) & \lambda_2 \leq 0.5; \\ f(g) = \lambda_2(1 - \lambda_2)^g. \end{cases} \quad (6)$$

式中: a_{\max} 为基因 a_{st} 的上界; a_{\min} 为基因 a_{st} 的下界; g 为当前迭代次数; G_{\max} 为最大进化次数; λ_2 是 $[0, 1]$ 间的随机数。

4) 迭代终止。遗传操作以世代进化次数达到规定值作为终止条件。达到终止条件后取适应度最小的染色体基因位对应值作为神经网络的权值和阈值,从而完成神经网络优化。在此神经网络模型中输入活度实验值,得到 B_{ij}, B_{ji} ;利用式(7)(8)计算出不同浓度下合金中组元 i, j 的活度值 a_i, a_j 。

$$a_i = x_i \exp \left\{ \ln \left(\frac{V_{mi}}{x_i V_{mi} + x_j V_{mj} B_{ji}} \right) + x_j \left(\frac{\frac{V_{mj} B_{ji}}{x_i V_{mi} + x_j V_{mj} B_{ji}}}{-\frac{V_{mi} B_{ij}}{x_j V_{mj} + x_i V_{mi} B_{ij}}} \right) - \frac{x_j^2}{2} \left(\frac{Z_i B_{ji}^2 \ln B_{ji}}{(x_i + x_j B_{ji})^2} + \frac{Z_j B_{ij} \ln B_{ij}}{(x_j + x_i B_{ij})^2} \right) \right\}, \quad (7)$$

$$a_j = x_j \exp \left\{ \ln \left(\frac{V_{mj}}{x_j V_{mj} + x_i V_{mi} B_{ij}} \right) + x_i \left(\frac{\frac{V_{mi} B_{ij}}{x_j V_{mj} + x_i V_{mi} B_{ij}}}{-\frac{V_{mj} B_{ji}}{x_i V_{mi} + x_j V_{mj} B_{ji}}} \right) - \frac{x_i^2}{2} \left(\frac{Z_j B_{ij}^2 \ln B_{ij}}{(x_j + x_i B_{ij})^2} + \frac{Z_i B_{ji} \ln B_{ji}}{(x_i + x_j B_{ji})^2} \right) \right\}. \quad (8)$$

3 应用实例

为验证上述模型和算法的实用性,利用 Matlab 软件按图 2 编程计算 Pb-Bi, Sn-Bi, Sn-Pb, Fe-Cu 溶液中组元活度。Pb-Bi 中组元活度计算操作过程如下。

输入初始参数:Pb 摩尔体积(v_{mi})为 $0.9633 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol}$, Bi 摩尔体积(v_{mj})为 $2.1180 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol}$, Pb 配位数(z_i)为 8.944, Bi 配位数(z_j)为 8.987, Pb 无限稀活度系数实验值($r_{i(E)}^0$)为 0.467, Bi 无限稀活度系数实验值($r_{j(E)}^0$)为 0.49^[17-18]。

BP 神经网络的拓扑结构为 18-6-2 三层结构,其中输入层有 18 个节点,隐含层有 6 个节点,输出层有 2 点,共有 $18 \times 6 + 6 \times 2 = 120$ 个权值, $6 + 2 = 8$ 个阈值,设置染色体个体编码的长度为 $120 + 8 = 128$ 。

依据经验,随机生成 4 000 对在 $[0, 2]$ 间的 B_{ij} 和 B_{ji} 作为输出值。对应每对 B_{ij} 和 B_{ji} 值,分别取 Bi 的摩尔分数(x_i)为 $[0.1, 0.2, \dots, 0.9]$, Pb 的摩尔分数(x_j)为 $[0.1, 0.2, \dots, 0.9]$,由式(2)(3)计算得到 18 个值,作为一组输入向量,共计获得 4 000 组输入向量。以这些数据训练 BP 神经网络,训练时设置最大训练次数为

20, 训练精度为 0.000 1, 学习率为 0.1; 训练完成后的网络权值和阈值赋予个体的染色体, 从而得到种群一个个体, 每个个体对应一个神经网络, 并计算个体的适应度, 如此反复直至个体达到种群的规模, 种群规模取值为 40。

个体适应度计算以 Pb-Bi 的无限稀活度系数实验数据为测试数据, 利用个体对应的神经网络得到 B_{ij}, B_{ji} ; 再用公式(4)计算得到适应度值。

种群的选择依据适应度的大小采用轮盘赌法; 种群交叉采用实数交叉法, 交叉概率选择为 0.3; 种群变异采用实数变异操作法, 变异概率选择 0.1; 迭代终止代数取 100。

迭代计算过程如图 4 所示。迭代完成后得到优化的神经网络, 优化得到的神经网络的权值和阈值见表 1。由图 4 可见, 进化迭代 64 次后适应度函数数据收敛于 2.4%。

基于 MIVM 优化完成的神经网络, 通过神经网络模型计算得到 Pb-Bi 二元合金溶液的 $B_{ij}=1.037, B_{ji}=1.095$; 然后利用式(7)(8)计算 Pb, Bi 活度理论值, 并按式(9)(10)计算活度理论值与实验值之间的平均相对误差(R_i)和平均绝对误差(A_i), 以判断基于 MIVM 的 BP 神经网络模型预测 Pb-Bi 合金溶液中组元活度的效果。

$$R_i = \pm \frac{1}{y} \sum_{i=1}^y \left| \frac{a_{i(C)} - a_{i(E)}}{a_{i(E)}} \right|, \quad (9)$$

$$A_i = \pm \frac{1}{y} \sum_{i=1}^y |a_{i(C)} - a_{i(E)}|, \quad (10)$$

式中: $a_{i(C)}, a_{i(E)}$ 分别为组元 i 的活度计算值和实验值; y 为组元 i 的活度实验测定次数。

计算结果列入表 2、图 5 中。其余二元合金溶液的 B_{ij} 和 B_{ji} 及组元活度计算类似上述过程, 结果列入表 2、图 6~8 中。

由表 2 可知, Pb-Bi, Sn-Bi, Sn-Pb, Fe-Cu 合金中组元活度理论值和实验值间的平均相对误差为 0.55%~3.76%, 低于 4.00%, 绝对误差为 0.003~0.772, 能满足工程计算要求。

表 1 神经网络的权值和阈值

Table 1 Weights and thresholds values of neural networks

w_{st}					h_t		w_{tk}		b_k
-1.37	-2.43	6.71	0.41	2.13	-1.92	2.39	-1.36	0.60	2.01
-2.36	0.09	-13.65	-0.13	0.40	-0.78	0.22	0.12	0.00	-0.83
-0.65	-1.79	0.58	0.86	1.62	-3.25	-4.63	1.07	-0.83	
2.25	1.24	5.49	0.67	1.77	2.23	-1.90	0.85	0.75	
			...			-1.31	-0.22	-0.09	
-1.96	-1.76	-3.46	-0.06	-0.17	3.99	-6.66	-0.61	0.56	

说明: 1~6 列为 w_{st} , 8~9 列为 w_{tk} ; w_{st} 共 18×6 行 = 108 行, $w_{st} \in [-6.88, 5.91]$ 。

表 2 二元合金的 B_{ij}, B_{ji} 及组元活度预测的相对误差和绝对误差

Table 2 B_{ij} and B_{ji} of binary alloy and relative and absolute error between predicted and experimental value of activity

体系($i-j$)	温度/K	B_{ij}	B_{ji}	$\pm R_i / \%$	$\pm R_j / \%$	$10^3 A_i$	A_j	x_i, x_j 范围
Pb-Bi	900	1.037	1.095	3.48	3.40	7.000	0.404	0.1~0.9
Sn-Bi	700	1.070	0.869	2.20	2.37	6.000	0.502	0.1~0.9
Sn-Pb	1 050	1.262	0.501	0.55	0.63	3.000	0.598	0.1~0.9
Fe-Cu	1 873	0.794	0.817	3.76	2.96	2.800	0.772	0.1~0.9

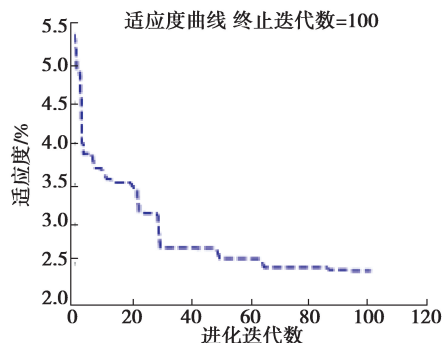


图 4 迭代计算过程

Fig. 4 Iterative computing process

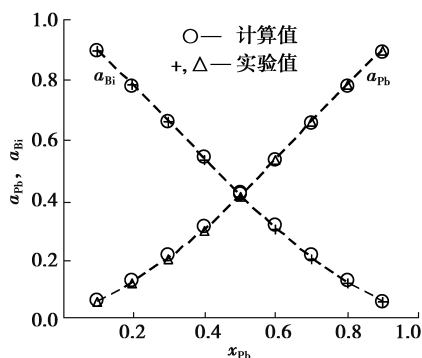


图 5 900 K 下 Pb-Bi 合金中组元活度计算值与实验值对比

Fig. 5 Comparison of calculation and measured values of activity of components in Pb-Bi liquid alloys at 900 K

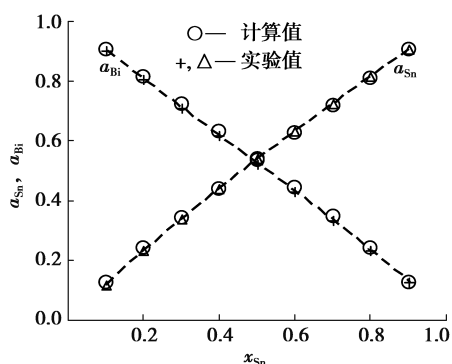


图 6 700 K 下 Sn-Bi 合金中组元活度计算值与实验值对比

Fig. 6 Comparison of calculated and measured values of activity of components in Sn-Bi liquid alloys at 700 K

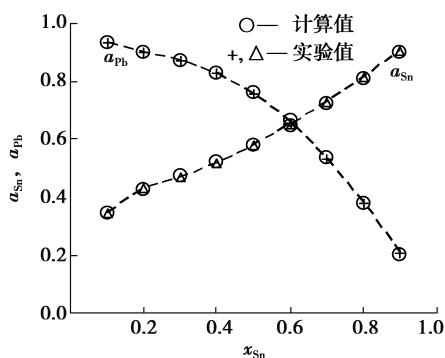


图 7 1 050 K 下 Sn-Pb 合金中组元活度计算值与实验值对比

Fig. 7 Comparison of calculated and measured values of activity of components in Sn-Pb liquid alloys at 1 050 K

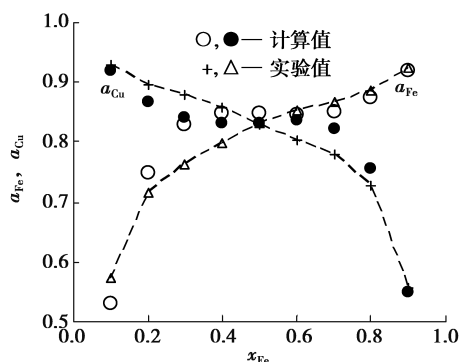


图 8 1 873 K 下 Fe-Cu 合金中组元活度计算值与实验值对比

Fig. 8 Comparison of calculated and measured values of activity of components in Fe-Cu liquid alloys at 1 873 K

4 结 论

1) 针对 MIVM 模型预测合金溶液中组元活度时模型中的 B_{ij}, B_{ji} 求取困难问题, 依据神经网络系统思想, 设计了 BP 3 层神经网络模型。输入层中种群初始化的拓扑结构设计 4 层、18 个输入节点。隐含层中采用合金中组元无限稀活度系数的计算值与实验测定值之间的偏差为适应度函数。

2) 遗传操作中, 依据适应度大小采用轮盘赌法、实数交叉法、实数变异法。交叉概率 0.3、变异概率 0.1、迭代终止代数 100 次条件下, 适应度函数具有良好的收敛性, 最小值为 2.4%。

3) 以 Pb-Bi, Sn-Bi, Sn-Pb, Fe-Cu 为例, 使用设计的基于 MIVM 的 BP 3 层神经网络模型计算了 Pb-Bi, Sn-Bi, Sn-Pb, Fe-Cu 合金溶液的参数 B_{ij}, B_{ji} 值, 并预测了组元活度, 预测值与实验值间的平均相对误差为 0.55%~3.76%、绝对误差为 0.003~0.772。表明所设计的基于 MIVM 的 BP 3 层神经网络模型可合理有效便捷求解热力学参数 B_{ij}, B_{ji} , 以及溶液中组元的活度。

参考文献:

[1] 魏寿昆. 活度在冶金物理化学中的应用[M]. 北京: 中国工业出版社, 1964: 63-65.

WEI Shoukun. Application of activity in metallurgical physicochemistry [M]. Beijing: China Industry Press, 1964: 63-65.

[2] 周国治. 三元系中两相边界上的活度[J]. 中国科学, 1978, 5 (3): 312-324.

- ZHOU Guozhi. Activities on boundaries of two-phase region in ternary systems[J]. Science China, 1978, 5 (3): 312-324. (in Chinese)
- [3] 周国治. 新一代的溶液几何模型及其今后的展望[J]. 金属学报, 1997, 33(2): 126-132.
ZHOU Guozhi. New generation solution geometrical model and its further development[J]. Acta Metallurgica Sinica, 1997, 33(2): 126-132. (in Chinese)
- [4] Chou K C, Wei S K. A new generation solution model for predicting thermodynamic properties of a multicomponent system from binaries[J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 1997, 28(3): 439-445.
- [5] Tao D P. A new model of thermodynamics of liquid mixtures and its application to liquid alloys[J]. Thermochimica Acta, 2000, 363(1/2): 105-113.
- [6] 周兰花, 陶东平, 曾富洪. 基于遗传算法的 MIVM 预测合金溶液组元活度[J]. 稀有金属, 2011, 35(4): 531-536.
ZHOU Lanhua, TAO Dongping, ZENG Fuhong. Prediction of activity of component in liquid alloys by MIVM based on genetic algorithm[J]. Chinese Journal of Rare Metals, 2011, 35(4): 531-536. (in Chinese)
- [7] 周兰花, 曾富洪, 高仕忠. MIVM 参数的算法研究[J]. 材料科学与工程学报, 2011, 29(3): 366-370.
ZHOU Lanhua, ZENG Fuhong, GAO Shizhong. Algorithm research on the parameters from the MIVM[J]. Journal of Materials Science and Engineering, 2011, 29(3): 366-370. (in Chinese)
- [8] 冯智莉, 易国洪, 李普山, 等. 并行化遗传算法研究综述[J]. 计算机应用与软件, 2018, 35(11): 1-7, 80.
FENG Zhili, YI Guohong, LI Pushan, et al. Review of parallel genetic algorithm[J]. Computer Applications and Software, 2018, 35(11): 1-7, 80. (in Chinese)
- [9] Melkonian V. An integer programming model for the KenKen problem[J]. American Journal of Operations Research, 2016, 6(3): 213-225.
- [10] Chebil K, Khemakhem M. A dynamic programming algorithm for the Knapsack Problem with Setup[J]. Computers & Operations Research, 2015, 64: 40-50.
- [11] 徐星, 李垣志, 田坤云, 等. ACPSO-BP 神经网络在矿井突水水源判别中的应用[J]. 重庆大学学报, 2018, 41(6): 91-101.
XU Xing, LI Yuanzhi, TIAN Kunyun, et al. Application of ACPSO-BP neural network in discriminating mine water inrush source[J]. Journal of Chongqing University, 2018, 41(6): 91-101. (in Chinese)
- [12] 谢桂兰, 贺礼财, 肖春芽. 基于 BP 网络的蜂窝铝芯力学性能预测与灵敏度分析[J]. 材料导报, 2014, 28(24): 144-148.
XIE Guilan, HE Licai, XIAO Chunya. Mechanical properties prediction and sensitivity analysis for aluminum honeycomb core structure based on BP neural network[J]. Materials Review, 2014, 28(24): 144-148. (in Chinese)
- [13] Yang J, Yang W, Wu W. A remark on the error-backpropagation learning algorithm for spiking neural networks[J]. Applied Mathematics Letters, 2012, 25(8): 1118-1120.
- [14] 李静, 李方义, 周丽蓉, 等. 基于 BP 神经网络的产品生命周期评价敏感性分析[J]. 计算机集成制造系统, 2016, 22(3): 666-671.
LI Jing, LI Fangyi, ZHOU Lirong, et al. Sensitivity analysis for life cycle assessment of product based on back propagation neural network[J]. Computer Integrated Manufacturing Systems, 2016, 22(3): 666-671. (in Chinese)
- [15] 尹斐, 杨洁红, 方雨晨, 等. 基于 2 种分析方法的补阳还五汤中有效成分提取工艺优化研究[J]. 中草药, 2018, 49(1): 135-141.
YIN Fei, YANG Jiehong, FANG Yuchen, et al. Optimization of extraction process of main active ingredients in Buyang Huanwu Decoction based on two analytical methods[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2018, 49(1): 135-141. (in Chinese)
- [16] 陶东平. 分子相互作用体积模型的基本特征和应用[J]. 昆明理工大学学报(自然科学版), 2004, 29(4): 15-22.
TAO Dongping. Basic features and applications of the molecular interaction volume[J]. Journal of Kunming University of Science and Technology(Science and Technology), 2004, 29(4): 15-21(in Chinese).
- [17] 陶东平. 液态合金和熔融炉渣的性质[M]. 昆明: 云南科技出版社, 1997: 314-315.
TAO Dongping. The properties of liquid alloys and molten slags[M]. Kunming: Yunnan Science and Technology Press, 1997: 314-315.(in Chinese)
- [18] Hultgren R, Dessi P D, Hawkins D T, et al. Selected values of the thermodynamic properties of binary alloys[M/OL]. ASM. Metals Park, OH, 1973[2019-8-27]. https://www.researchgate.net/publication/235214871_Selected_Values_of_Thermodynamic_Properties_of_Metal_Alloys.