

改进的 Wasserstein 生成式对抗网络用于氧化物玻璃电学性能的 数据增强建模

田 静¹, 李 苑¹, 官 敏², 郑际杰³, 储静远², 刘 涌¹, 韩高荣^{1,4}

(1. 浙江大学材料科学与工程学院, 杭州 310058; 2. 中国建材国际工程集团有限公司, 上海 200063;
3. 玻璃新材料创新中心(安徽)有限公司, 安徽 蚌埠 233000; 4. 浙江大学宁波国际科创中心, 浙江 宁波 315100)

摘 要: 随着氧化物玻璃在电子信息领域的应用日益广泛, 其电学性能作为关键性指标也愈发受到重视。尽管数据驱动的机器学习方法在玻璃性能预测中已取得显著进展, 但其在小数据集场景下的应用仍面临挑战。针对氧化物玻璃电学性能数据不足的核心问题, 引入带梯度惩罚项和组分惩罚项的改进 Wasserstein 生成式对抗网络(WGAN-GP-CP), 构建了适用于玻璃材料的数据增强框架, 并设计了新型样本质量评估方式。该框架在生成器损失函数中引入组分惩罚项, 能够生成高质量的合成样本, 有效扩展现有数据集。对比研究表明, 数据增强显著缓解了模型过拟合问题, 同时显著提升其泛化能力。基于建立的组分-性能预测模型, 通过 SHAP 单特征分析和特征交互分析进一步揭示了氧化物组分特征对玻璃电学性能的影响机制及特征间的交互作用。以上结果不仅为氧化物玻璃电学性能预测提供了可靠的模型支持, 更为数据稀缺场景下高性能数据驱动模型的开发提供了新思路。

关键词: 氧化物玻璃; 电学性能; 机器学习; 数据增强; SHAP 分析

中图分类号: TQ171; TP181 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2025)10-2766-11

网络出版时间: 2025-07-02



氧化物玻璃作为一类重要的无机非晶态材料, 在先进制造与新型功能器件领域持续发挥着关键作用。近年来, 随着材料基因组计划(Materials Genome Initiative)的推进^[1]和玻璃材料数据库的建立和完善^[2], 数据驱动的机器学习方法已经渗透到玻璃材料领域, 如有关玻璃材料物理性能^[3-10](如玻璃转变温度、膨胀系数、黏度等)、机械性能^[3, 5-7, 9-16](如硬度、弹性模量等)和光学性能^[3, 5, 7, 9-10, 17-18](如折射率、阿贝数等)的预测模型构建研究已取得了显著进展。然而, 在电子信息产业快速迭代的背景下, 氧化物玻璃在高端芯片封装、高频通信器件及全固态电解质等尖端领域的应用场景不断拓展^[19-21], 其电学性能(如体电阻率、相对介电常数、介电损耗等)已成为决定器件可靠性的关键指标。因此, 构建氧化物玻璃电学性能的高精度预测模型, 突破传统试错法的低效性, 已成为加速氧化物玻璃在电子信息

领域应用的关键科学问题。

作者调研发现, 目前仅有 3 篇研究报道涉及玻璃电学性能的机器学习建模^[9-10, 15]。这些研究建模使用的样本量约为 2000~5000 个, 特征数在 7 个到 98 个之间。尽管当前科研界对于大数据和小数据的界定尚未形成广泛认同的量化指标^[22-23], 但上述研究采用的数据集规模显然不符合大众认知中的大数据范畴。正如相关文献指出, 数据质量与规模作为机器学习的核心基础, 直接决定模型性能, 而数据稀缺会严重制约模型泛化能力^[23-24]。然而, 现有研究普遍忽视了数据样本量不足对模型性能的潜在影响。Cassar 等^[9]和 Shih 等^[15]在研究中采用了基于材料科学先验知识的建模策略, 通过引入元素物理化学性能特征, 构建物理化学知情的机器学习模型, 但是 Shih 等^[15]的研究结果表明, 使用少量关键元素物理化学性能描述符训练的玻璃体电阻率模型, 其

收稿日期: 2025-04-15。 修订日期: 2025-04-29。

基金项目: 国家“十四五”重点研发计划(2022YFB3603300); 上海市
2022 年度科技创新行动计划国际科技合作项目(22520730500)。

第一作者: 田 静(1998), 女, 博士研究生。

通信作者: 刘 涌(1979), 男, 副教授。

Received date: 2025-04-15. Revised date: 2025-04-29.

First author: TIAN Jing (1998-), female, Doctoral candidate.

E-mail: 12326039@zju.edu.cn

Correspondent author: LIU Yong (1979-), male, Ph.D., Associate Professor.

E-mail: liuyong.mse@zju.edu.cn

泛化能力并未优于仅基于化学组分含量的建模方案。这一现象暗示, 单纯依赖物理化学特征工程的策略存在局限性, 数据规模与质量或许是比特征类型更基础的优化方向。在样本量有限的小数据场景下, 如何突破数据不足带来的模型表现瓶颈成为亟待解决的关键问题。

近年来, 生成式人工智能(Generative AI)凭借其突破性的数据学习与生成能力持续引发跨学科领域的广泛关注与应用, 其核心优势在于突破传统判别模型的“模式识别”局限, 实现从“数据拟合”到“创造性生成”的范式升级^[25]。针对氧化物玻璃电学性能建模中数据稀缺这一关键挑战, 创新性地引入生成式人工智能技术进行数据增强。基于带梯度惩罚项的 Wasserstein 生成对抗网络模型(WGAN-GP)框架, 在生成器损失函数中特别设计了组分惩罚项(CP), 同时设计了新型样本质量评估方式, 实现了现有训练数据集规模的有效扩展。基于增强后的模型, 利用 SHAP 单特征分析和特征交互分析进一步揭示了组分特征对氧化物玻璃电学性能的影响及组分特征之间的协同或拮抗效应。

1 研究方法

1.1 数据收集及预处理

针对氧化物玻璃的 3 个电学性能, 即室温体电阻率(R_{20})、相对介电常数(ϵ)和介电损耗($\tan\delta$), 涉及的玻璃组分和性能的真实训练数据均来自 SciGlass 数据库^[26]。在进行数据提取时, 将 O 含量(摩尔分数) $\geq 30\%$ 且不含 H, C, N, F, S, Cl, Br, I, Se 元素的样本界定为氧化物玻璃, 并按照文献报道的规则进行数据清洗^[27]。在数据清洗的过程中, 为了消除室温体电阻率和介电损耗性能数据在线性直方分布上表现出的严重左偏态, 本研究选择对两个性能数据进行取对数操作, 调整性能数据的分布, 以 $\lg(R_{20})$ 和 $\lg(\tan\delta)$ 的形式进行建模。处理后的 3 个氧化物玻璃电学性能数据集详情见表 1。其中介电损耗数据集中的样本量最少(1997 个), 室温体电阻率数据集中的样本量最多(5403 个)。

表 1 数据预处理后的氧化物玻璃室温体电阻率、相对介电常数及介电损耗数据集中的样本数及特征数

Table 1 Number of samples and features in the preprocessed datasets of room-temperature bulk resistivity, relative dielectric constant, and dielectric loss of oxide glasses

Property/Unit	Number of samples	Number of features
$\lg((R_{20})/(\Omega \cdot m))$	5403	36
ϵ	2607	32
$\lg(\tan\delta)$	1997	26

1.2 预测模型训练

采用 XGBoost (eXtreme Gradient Boosting)算法^[28]构建机器学习模型, 借助成熟的 XGBoost Python 库实现。采用内循环结合外循环的模型训练评估模式, 即首先将清洗后的性能数据集按照 80 : 20 的比例划分为训练集和测试集; 随后在训练集上采用 5-fold 交叉验证的方式进行内循环超参数寻优。寻优过程考虑到的超参数及其对应的参数范围如下: 决策树最大深度(max_dept): [1,20], 学习率(learning_rate): [0.01,0.5], 决策树数量($n_estimators$): [100,2000], 最小分割损失(gamma): [0,0.5], 叶子节点中最小样本权重和(min_child_weight): [1,10], 训练每棵树时使用的样本比例(subsample): [0.1,1], 训练每棵树时使用的特征比例(colsample_bytree): [0.1,1]。寻优过程借助 Hyperopt Python 库中的 Tree-structured Parzen Estimator 算法^[29], 对 500 组来自超参数空间的候选组合进行迭代筛选, 以验证集上的平均模型表现(平均绝对误差 MAE)为评价指标; 而后采用表现最好的超参数组合在整个数据集上通过 5-fold 交叉验证的方式进行外循环模型泛化能力评估, 以测试集上的平均模型表现(决定系数(R^2))、平均绝对误差(MAE)、均方根误差(RMSE)和平均绝对百分比误差(MAPE))为评价指标^[30]; 上述过程平行进行 3 次, 得到泛化最优的超参数组合。最后, 基于该最优超参数组合在整个数据集上训练模型并保存。模型训练过程的流程图如图 1 所示。

以上模型训练过程中涉及的各评价指标的数学计算公式如下:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (1)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (2)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (3)$$

$$MAPE = \frac{100\%}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \quad (4)$$

其中: n 表示样本数; y_i 表示样本 i 的目标真实值; $\hat{y}_i$ 表示样本 i 的目标预测值; $\bar{y}$ 表示数据集中所有样本的目标平均值。 R^2 越接近于 1, 并且 MAE、RMSE 和 MAPE 越小, 表示模型的拟合效果越好。

1.3 基于 WGAN-GP-CP 模型的数据增强

生成式对抗网络(Generative Adversarial Networks, GAN)^[31]是由 Goodfellow 等于 2014 年首次提出的一

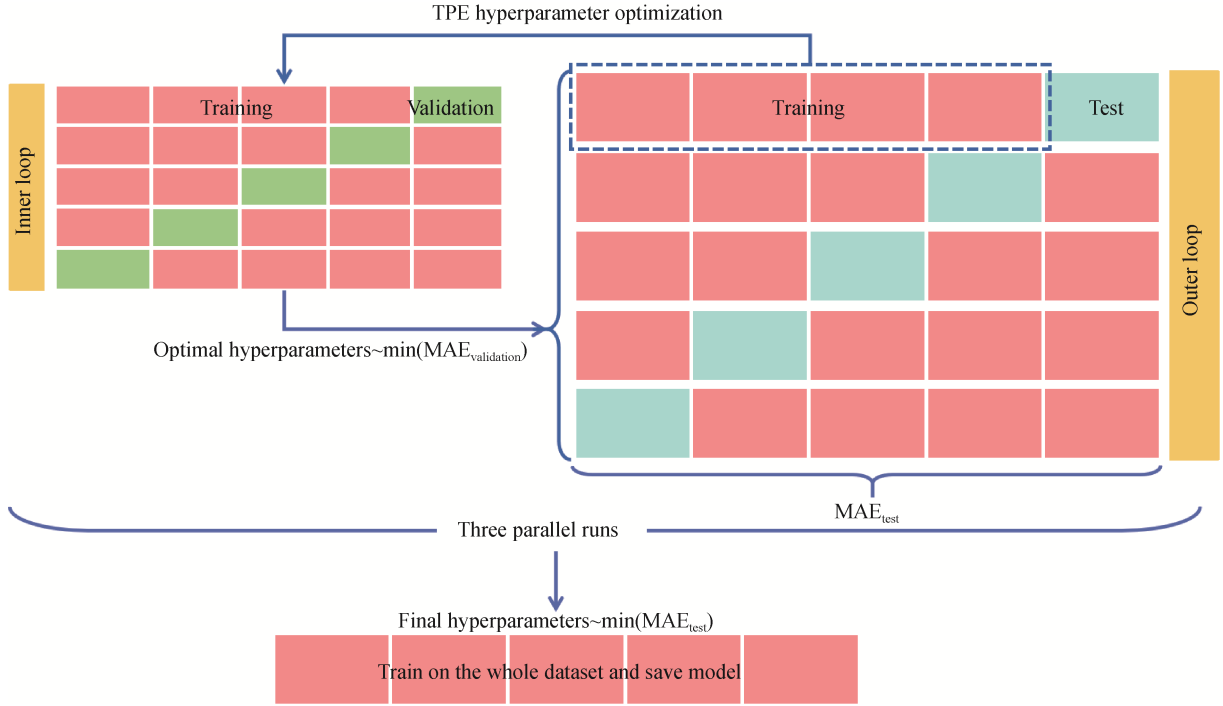


图 1 模型训练流程图

Fig. 1 Model training flowchart

种无监督深度学习模型，它由两个模块构成：一个是生成模块(生成器 G)，其功能为捕获数据分布和生成合成数据；另一个是判别模块(判别器 C)，用于评估样本属于生成分布或真实数据分布的概率。GAN 的训练过程本质上是这两个模块间的极大极小零和博弈，这种对抗机制驱动双方协同进化，直至生成器能够生成高度逼近真实数据分布的样本。针对 GAN 在训练中采用 Jensen-Shannon 散度作为损失函数时引发的梯度消失问题，Arjovsky 等^[32]于 2017 年提出 WGAN，采用了基于 Wasserstein 距离的新型损失函数。在此基础上，Gulrajani 等^[33]进一步在判别器的损失函数中引入梯度惩罚项(WGAN-GP)，通过直接约束梯度范数，显著提升了模型训练的稳定性与生成性能。WGAN-GP 中生成器与判别器的损失函数定义如下：

$$\text{Loss}_C = \mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}} \sim \mathbb{P}_g} [C(\tilde{\mathbf{x}})] - \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim \mathbb{P}_r} [C(\mathbf{x})] + \lambda \mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}} \sim \mathbb{P}_{\tilde{\mathbf{x}}}} [(\|\nabla_{\tilde{\mathbf{x}}} C(\tilde{\mathbf{x}})\|_2 - 1)^2] \quad (5)$$

$$\text{Loss}_G = -\mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}} \sim \mathbb{P}_g} [C(\tilde{\mathbf{x}})] \quad (6)$$

其中： $\mathbb{P}_g$ ， $\mathbb{P}_r$ 和 $\mathbb{P}_{\tilde{\mathbf{x}}}$ 分别表示生成数据($\tilde{\mathbf{x}}$)，真实数据($\mathbf{x}$)以及混合数据($\hat{\mathbf{x}}$)的分布， $C(\mathbf{x})$ 表示判别器对真实数据的输出 $\mathbf{x}$ ， $\mathbb{E}$ 表示数学期望 $\mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}} \sim \mathbb{P}_g} [C(\tilde{\mathbf{x}})] - \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim \mathbb{P}_r} [C(\mathbf{x})]$ ，被用来评估真实

数据与生成数据之间的 Wasserstein 距离， $\mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}} \sim \mathbb{P}_{\tilde{\mathbf{x}}}} [(\|\nabla_{\tilde{\mathbf{x}}} C(\tilde{\mathbf{x}})\|_2 - 1)^2]$ 表示梯度惩罚项， λ 表示梯度惩罚项系数。

对于氧化物玻璃数据集来说，由于样本组分含量归一化的隐式规则难以学习，生成器在生成样本时效率较低。为了提升样本生成效率，本工作在生成器损失函数中设计加入了一个额外的组分惩罚项，以此来约束样本的生成：

$$\text{Loss}_G = -\mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}} \sim \mathbb{P}_g} [C(\tilde{\mathbf{x}})] + \alpha \mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}} \sim \mathbb{P}_g} [\|\sum_{j=1}^n (\tilde{\mathbf{x}}^{\text{DN}})_j - 100\|] \quad (7)$$

其中： $\mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}} \sim \mathbb{P}_g} [\|\sum_{j=1}^n (\tilde{\mathbf{x}}^{\text{DN}})_j - 100\|]$ 表示组分惩罚项 (CP)， n 表示对应数据集中组分特征的数量， $\tilde{\mathbf{x}}^{\text{DN}}$ 表示经过反归一化后的生成数据， α 表示组分惩罚项系数。图 2 展示了本文采用的生成式模型的整体架构，我们将其命名为 WGAN-GP-CP。本文构建的生成器和判别器均为具有 3 个隐藏层的全连接神经网络模型。将组分特征和相应的性能特征合并，并在进行特征归一化处理后将其作为训练数据。生成器模型的最后一层采用了 Sigmoid 激活函数，以确保生成数据的特征值与训练数据具有相同的取值范围。判别器则通过最后的线性层直接输出一个无界实数。生成器和判别器的结构及模型训练细节如表 2 所示，且均基于 PyTorch 框架实现。

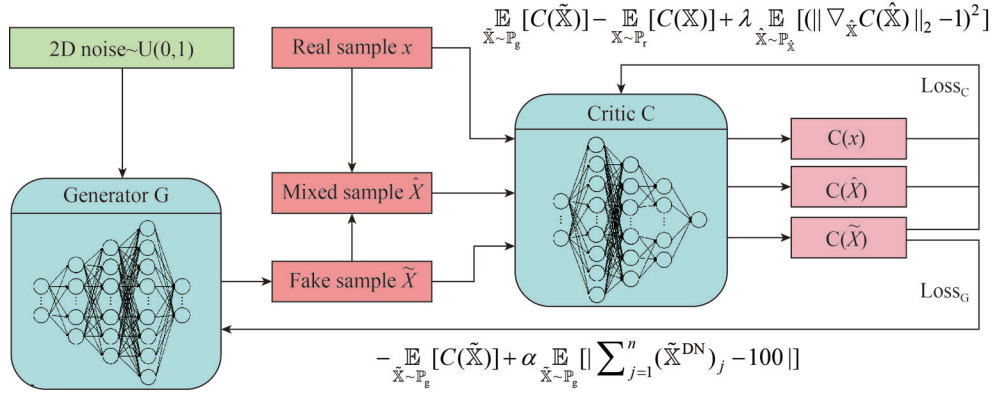


图 2 WGAN-GP-CP 模型架构

Fig. 2 WGAN-GP-CP model architecture

表 2 WGAN-GP-CP 架构中生成器与判别器的结构和训练超参数

Table 2 Structure and training hyperparameters of generator and critic in WGAN-GP-CP architecture

Critic C	
Input-Dimension of real data	
512, LeakyReLU (negative_slope=0.02), Dropout=10%	
256, LeakyReLU (negative_slope=0.02), Dropout=10%	
128, LeakyReLU (negative_slope=0.02), Dropout=10%	
Output—one	
Generator G	
Input-Dimension of real data=Dimension of noise data	
128, ReLU, Dropout=10%	
256, ReLU, Dropout=10%	
512, ReLU, Dropout=10%	
Sigmoid activation	
Output-Dimension of real data	
Training parameters	
Adam optimizer (Learning rate: 0.000 1, betas=0.5, 0.999)	
Batch_size: 128 (lg(R_20)), 64 (ε, lg(tanδ))	
Epochs: 80 000 (lg(R_20), ε), 50 000 (lg(tanδ))	
α: 0.1	
λ: 10	
n_critic: n_generator=5:1 (Train the critic first)	

1.4 基于 SHAP 的模型可解释性分析

尽管复杂模型在数据拟合方面表现出色,但其内部机制往往难以被人类理解。SHAP 作为一种基于博弈论 Shapely 值的强大可解释机器学习算法^[34-35],能够通过计算特征对模型预测的边际贡献有效应对这一问题。单个特征的 Shapely 值 ϕ_i 被定义为:

$$\phi_i = \sum_{S \subseteq \{1, \dots, M\} \setminus \{i\}} \frac{|S|!(M-|S|-1)!}{M!} [f(x_{S \cup \{i\}}) - f(x_S)] \quad (8)$$

其中: M 表示特征总数; $|S|$ 表示特征子集 S 的尺寸; $x_{S \cup \{i\}}$ 表示由特征子集 S 和特征 i 组成的输入特征向量; $f(x_{S \cup \{i\}})$ 表示由特征子集 S 和特征 i 组成的输入数据重新训练的模型。SHAP 分析可以对模型进行局部和全局解释,并且为各类机器学习模型提供了特定的解释器(Explainers)以便于计算 Shapely 值。

采用树解释器(TreeExplainer)和蜂群图(Beeswarm plots)分析氧化物玻璃中各组分对其电学性能的影响。

除此之外,SHAP 还可以进行特征交互分析,通过揭示复杂的特征依赖关系来提高模型的可解释性,这对于深入了解特征对如何相互作用共同影响模型的输出很有帮助。特征 i 与 j 的交互值 ϕ_{ij} 定义为特征 i 存在与否时特征 j 的 Shapely 值之差,其绝对值越大,表明两特征的交互作用越强。数学上,特征交互值的计算如下:

$$\phi_{ij} = \sum_{S \subseteq \{1, \dots, M\} \setminus \{i, j\}} \frac{|S|!(M-|S|-2)!}{2(M-1)!} [f(x_{S \cup \{i, j\}}) - f(x_{S \cup \{i\}}) - f(x_{S \cup \{j\}}) + f(x_S)] \quad (9)$$

采用热图与特征依赖图来展示特征对在氧化物玻璃电学性能上的交互影响。

2 结果与讨论

2.1 数据集可视化分析

各数据集中目标性能的分布如图 3 所示。经过对数变换的氧化物玻璃室温体电阻率和介电损耗性能数据分布呈现近似正态分布,相对介电常数性能数据表现出轻微的左偏态。氧化物玻璃的室温体电阻率主要分布在 10^4 到 $10^9 \Omega \cdot m$ 之间,相对介电常数主要分布在 7 到 10 之间,损耗角正切主要分布在 $10^{-3.1}$ 到 $10^{-2.5}$ 之间。除此之外,3 个数据集中氧化物组分特征分布如图 4 所示,采用小提琴图嵌套散点图的可视化方式,其中特征根据相应数据集中每个特征的非零值数量从上到下按降序排列。特征分布图显示 3 个数据集均呈现稀疏特性,且以往涉及玻璃室温体电阻率的研究或应用场景中,玻璃体系倾向于包含 P_2O_5 、 B_2O_3 、 SiO_2 、 Li_2O 、 V_2O_5 、 Na_2O 、

Fe_2O_3 、 Al_2O_3 、 PbO 、 K_2O 等组分；涉及相对介电常数时，玻璃体系倾向于包含 SiO_2 、 B_2O_3 、 K_2O 、 Al_2O_3 、 CaO 、 BaO 、 Na_2O 、 ZnO 、 PbO 、 TiO_2 等组

分；涉及介电损耗时，玻璃体系倾向于包含 SiO_2 、 K_2O 、 B_2O_3 、 Al_2O_3 、 Na_2O 、 BaO 、 CaO 、 PbO 、 TiO_2 、 SrO 等组分。

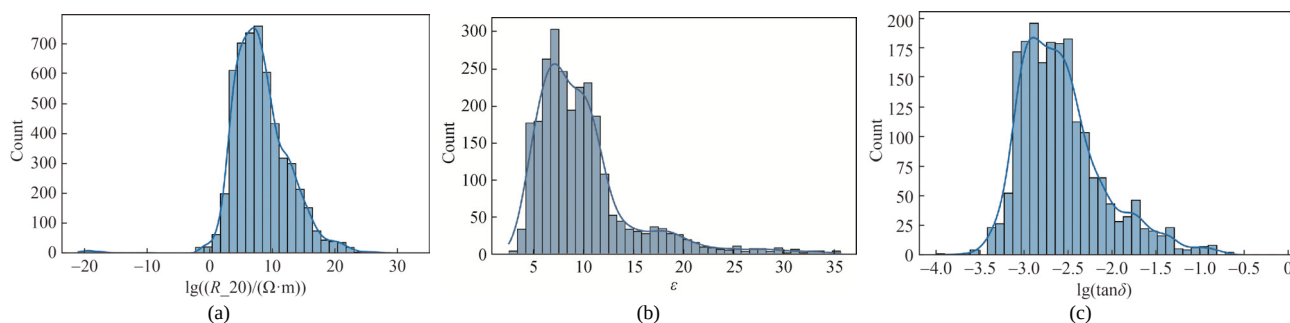


图3 数据集中(a)室温体电阻率, (b)相对介电常数和(c)介电损耗性能值的分布直方图(蓝色实线表示分布核密度曲线)

Fig. 3 Distribution of (a) room temperature bulk resistivity, (b) relative dielectric constant, and (c) dielectric loss in collected datasets, with the blue line representing the kernel density curve

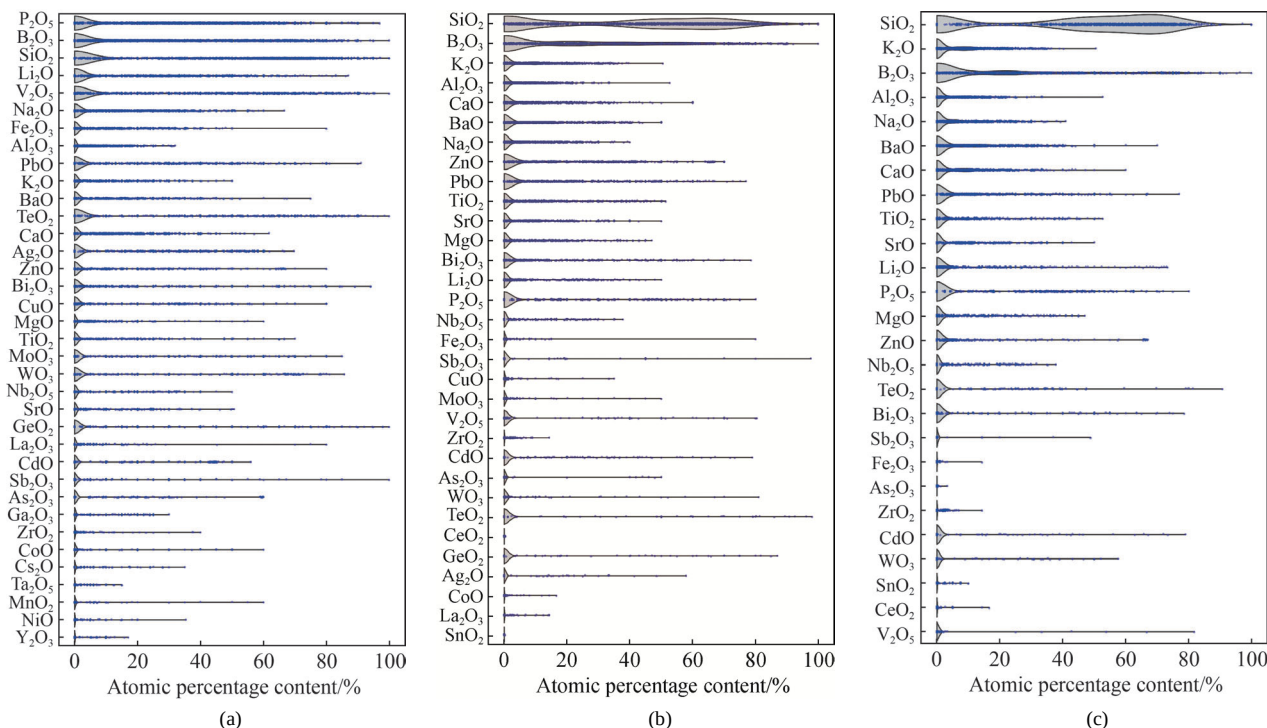


图4 (a)室温体电阻率, (b)相对介电常数和(c)介电损耗数据集中的氧化物特征分布

Fig. 4 Distribution of oxide features in the datasets of (a) room temperature bulk resistivity, (b) relative dielectric constant, and (c) dielectric loss

2.2 基于真实数据的模型训练

首先在真实数据集上采用最优超参数组合训练预测模型，模型在训练集和测试集上的表现见表3(相应的散点图见图5)。所构建的3个预测模型在训练集上均表现出近乎完美的拟合能力，但在测试集上均出现显著衰减，表明3个模型均存在严重的过拟合及泛化能力较差的问题。这种现象不仅与训练数据集中的样本数量不足有关，也与由玻璃室温电阻率测量易受接触电阻干扰、相对介电常数和介电

损耗测试具有频率依赖性导致的测量偏差和较差的数据一致性有关。

2.3 数据增强

基于相同的网络架构为3个电学性能数据集分别训练了WGAN-GP-CP模型(具体细节见表2)。因篇幅限制，此处仅展示室温体电阻率模型的相关数据用以说明。其生成器与判别器的训练过程及损失函数曲线如图6a所示。判别器的损失逐渐收敛至0，表明生成数据与真实数据间的Wasserstein距离极

小, 即生成数据分布已高度逼近真实数据分布。利用训练好的生成器模型生成与各性能真实数据集中样本数量相同的合成样本, 并在将其用于数据增强前, 从多样性、准确性和唯一性 3 个维度对合成样本的质量进行了评估:

多样性: 如图 6b 所示, 采用重叠小提琴图对合

成样本与真实样本的组分特征分布进行可视化检验。图中红色散点与黄色小提琴图代表合成样本的特征分布, 蓝色散点与灰色小提琴图代表真实样本的特征分布。合成样本的特征分布与真实样本几乎完全重叠, 表明这些模型未出现模式崩溃(Mode Collapse), 且合成样本表现出丰富的多样性。

表 3 基于真实数据和增强数据的三个氧化物玻璃电学性能 XGBoost 模型的表现

Table 3 Performance of three XGBoost models for electrical properties of oxide glasses trained on real and augmented data

Evaluation indicators		Trained with real datasets			Trained with augmented datasets		
		$\lg(R_{20})$	ε	$\lg(\tan\delta)$	$\lg(R_{20})$	ε	$\lg(\tan\delta)$
R^2	Train	0.994±0.000	0.997±0.000	1.000±0.000	0.981±0.001	0.999±0.000	0.979±0.000
	Test	0.784±0.028	0.862±0.036	0.801±0.056	0.838±0.021	0.897±0.015	0.861±0.011
MAE	Train	0.260±0.007	0.195±0.002	0.001±0.000	0.367±0.006	0.086±0.002	0.047±0.000
	Test	1.223±0.038	0.896±0.061	0.131±0.008	1.071±0.015	0.738±0.025	0.114±0.004
RMSE	Train	0.356±0.011	0.271±0.004	0.001±0.000	0.589±0.015	0.150±0.021	0.070±0.001
	Test	2.185±0.139	1.868±0.235	0.216±0.022	1.733±0.076	1.535±0.111	0.179±0.009
MAPE*	Train		2.262±0.027	0.022±0.000		1.078±0.018	2.074±0.027
	Test		8.616±0.987	6.121±0.873		7.520±0.376	5.069±0.354

*The presence of zero values in the $\lg(R_{20})$ dataset results in a null MAPE due to division-by-zero errors in the denominator calculation.

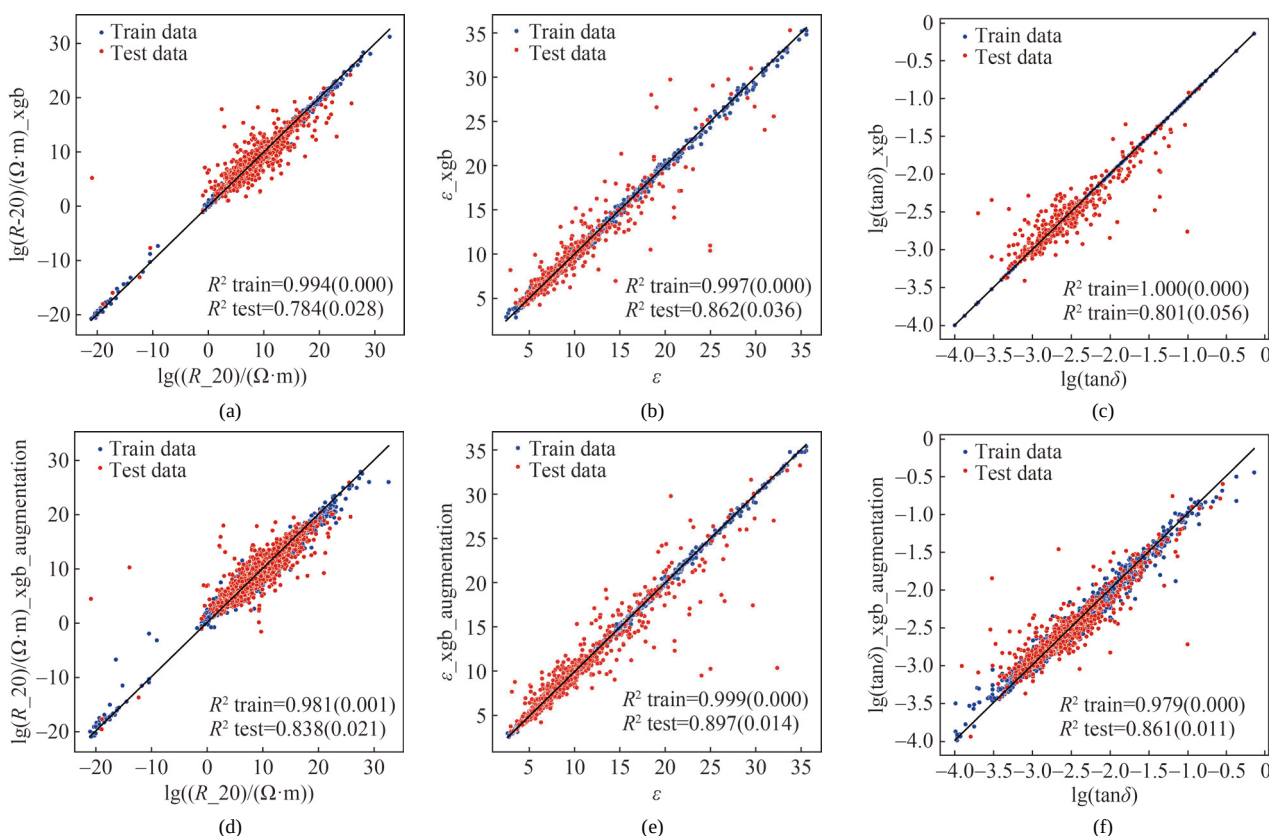


图 5 基于真实数据训练的(a)室温体电阻率, (b)相对介电常数和(c)介电损耗模型及基于增强数据训练的(d)室温体电阻率, (e)相对介电常数和(f)介电损耗模型在训练集和测试集上的实验值与预测值分布(黑色实线为实验值等于预测值的参考线)

Fig. 5 Experimental vs. predicted values of (a) room temperature bulk resistivity, (b) relative dielectric constant, and (c) dielectric loss models trained on real datasets, and (d) room temperature bulk resistivity, (e) relative dielectric constant, and (f) dielectric loss models trained on augmented datasets on the training and test sets, with black solid lines representing the reference line where experimental values equal predicted values

准确性: 通过特征相关性热图对合成样本与真实样本的内部特征关系进行对比,如图 6c 所示,它们在特征关联模式上的高度相似性清楚地表明,合成样本已准确地捕捉到了真实样本的特征关联关系。此外,合成样本的性能值与基于真实数据训练的性能预测模型的预测值之间的平均绝

对误差(MAE)计算结果如下: $MAE_{lg(R_{20})}=1.209$, $MAE_{\epsilon}=0.816$, $MAE_{lg(\tan\delta)}=0.130$, 均小于对应真实数据模型在测试集上的泛化 MAE 值(见表 3),表明这些生成器模型已正确学习到真实数据组分与性能之间的复杂关系,所生成的样本具有足够的准确性。

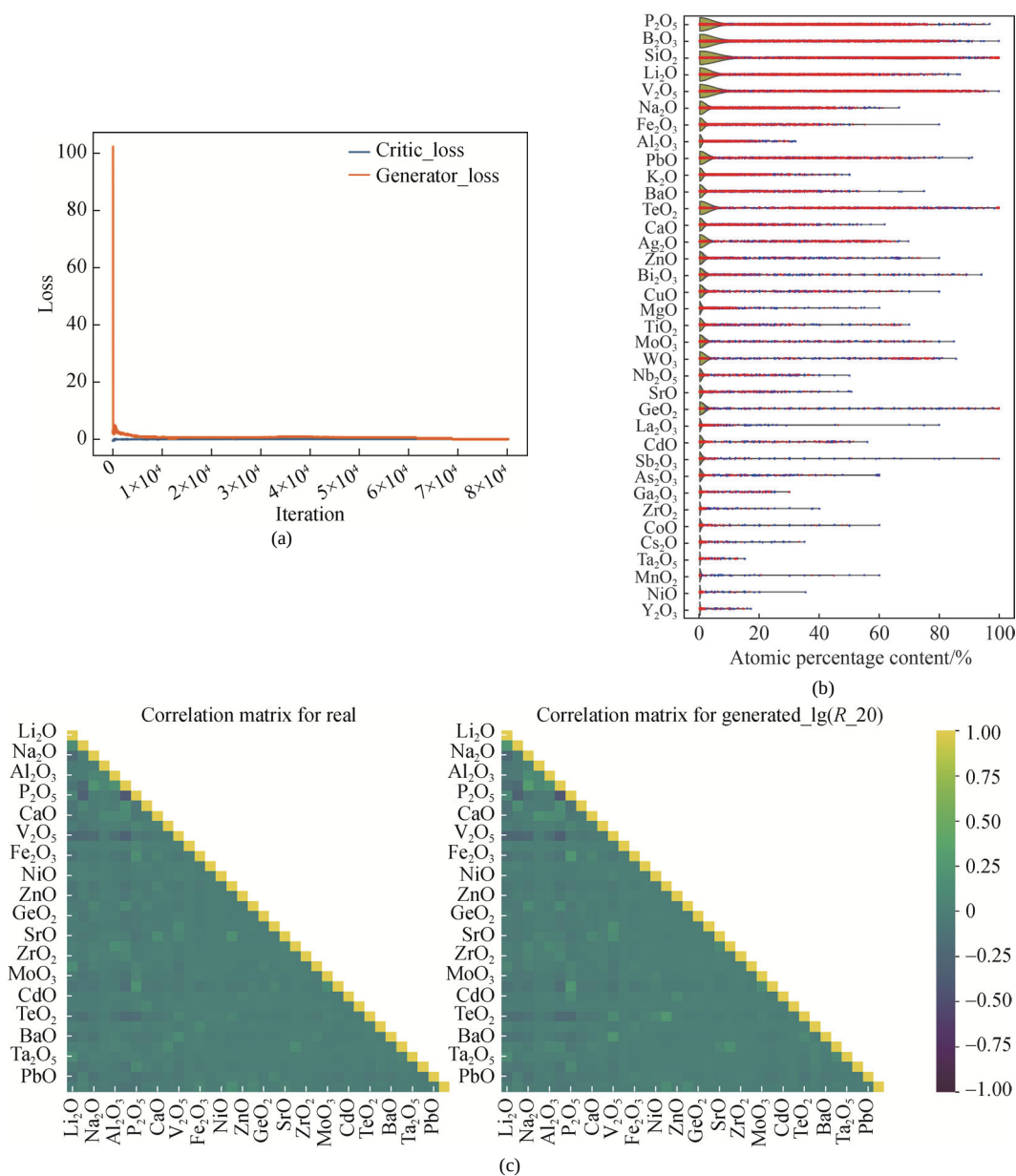


图 6 室温体电阻率 WGAN-GP-CP 模型的训练及生成样本多样性和准确性评估。(a)生成器和判别器的损失函数曲线; (b)生成样本与真实样本的特征分布; (c)生成样本与真实样本的特征相关性热图

Fig. 6 Training process of room temperature bulk resistivity WGAN-GP-CP model and assessment of diversity and accuracy of generated samples. (a) Loss function curves of the generator and critic; (b) feature distributions of generated and real samples; (c) feature correlation heatmaps between generated and real samples

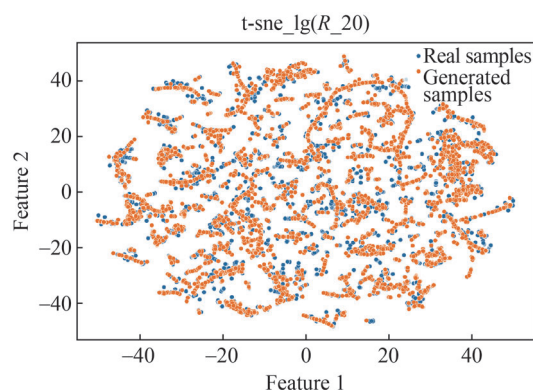
唯一性: 表 4 统计了每个合成样本与其最近邻真实样本之间的欧氏距离, 结果显示未出现重叠样本。

此外, 图 7 的 t-SNE 降维可视化结果表明, 生成器倾向于优先在真实样本的邻近区域生成合成样本。

表 4 合成样本与其最近邻真实样本之间欧氏距离的平均值、标准差和分布范围

Table 4 Mean, standard deviation, and range of Euclidean distances between generated samples and their nearest real samples

Property	Mean $\pm$ std	Range
$\lg(R_{20})$	4.640 $\pm$ 4.631	[0.054, 39.948]
ε	3.930 $\pm$ 2.674	[0.146, 21.638]
$\lg(\tan\delta)$	3.323 $\pm$ 2.527	[0.078, 24.612]

图 7 室温体电阻率生成样本与真实样本的 t-SNE 降维图
Fig. 7 t-SNE dimensionality reduction plot for generated and real samples of room temperature bulk resistivity

将合成样本与对应真实样本合并, 形成 3 个新的增强数据集。采用与之前完全相同的训练策略, 得到基于增强数据集的增强模型, 其在训练集和测试集上的表现见表 3 (散点图见图 5)。显然, 数据增强后, 模型的过拟合程度均有所缓解, 且泛化能力均明显提升。其中, 真实数据量最少的介电损耗模型的泛化能力提升最为显著, 其次是仅基于真实数据训练的模型中表现最差的室温体电阻率模型。这些表现均反映了本研究提出的数据增强方案的有效性, 并且这种有效性主要来自样本数量、质量与覆盖率三方面的协同作用, 其中数据规模的扩大为模型训练提供了更多的学习案例, 合成数据的高质量则确保了学习案例的有效性, 合成数据对原始样本空间稀疏区域的填补, 推动着模型从局部学习转向全局学习, 并尤其改善了对边缘样本的适用性, 很好地将前两者的优势转化为泛化能力的提升。

2.4 模型可解释性分析

采用树解释器对增强后的模型进行 SHAP 分析, 包括单特征分析及特征交互分析(见图 8)。单特征分析通过蜂群图可视化呈现: 图 8 中每个点代表 1 个样本, 颜色反映对应氧化物在样本中的含量, 点的水平位置为其 Shapely 值, 具有相同 Shapely 值的点垂直堆叠。左侧氧化物按特征重要性(特征在所有样本中的平均绝对 Shapely 值)从上到下排序, 此

处仅展示前 15 个最重要的氧化物。特征交互分析则通过热图可视化特征交互矩阵来呈现: 图中特征对的交互作用越强, 橙红色越深。此外, 重点关注交互作用最强的两特征之间的交互关系, 因此将进一步通过特征依赖图探索它们之间的交互作用: 图中每个点代表 1 个样本, 横轴为样本中 1 个特征的含量, 纵轴为该特征的 Shapely 值(表示该特征对该样本性能的贡献), 色标表示样本中另一特征的含量。

对于氧化物玻璃的室温体电阻率, 图 8a 表明高含量的 SiO_2 、 B_2O_3 、 BaO 、 TeO_2 会增大氧化物玻璃的室温体电阻率, 高含量的 V_2O_5 、 Li_2O 、 Ag_2O 、 Fe_2O_3 会减小氧化物玻璃的室温体电阻率, 而 K_2O 、 PbO 、 P_2O_5 、 Na_2O 、 ZnO 、 Bi_2O_3 、 Al_2O_3 则表现出混合效应, 即高含量的这些特征既可能增大又可能减小氧化物玻璃的室温体电阻率, 表明这些氧化物在玻璃网络中的作用非常复杂。图 8d 表明, 在氧化物玻璃室温体电阻率上表现出较强交互作用的特征对为: SiO_2 - V_2O_5 、 SiO_2 - Li_2O 、 SiO_2 - K_2O 、 SiO_2 - P_2O_5 、 SiO_2 - Na_2O 。对其中交互作用最强的 SiO_2 - K_2O 对作特征依赖图, 如图 8g 所示。高含量的 SiO_2 会强化 K_2O 对氧化物玻璃室温体电阻率的减小作用, 主要表现为在 K_2O 含量相同的样本中, SiO_2 含量较高的样本其 K_2O 的 Shapely 值更倾向于远离 0。同样, 高含量的 K_2O 会强化 SiO_2 对氧化物玻璃室温体电阻率的增大作用。

对于氧化物玻璃的相对介电常数, 图 8b 表明高含量的 Bi_2O_3 、 PbO 、 Nb_2O_5 、 TiO_2 、 BaO 、 Fe_2O_3 会增大氧化物玻璃的相对介电常数, 高含量的 SiO_2 、 B_2O_3 、 Al_2O_3 、 K_2O 会减小氧化物玻璃的相对介电常数, 而 P_2O_5 、 Na_2O 、 ZnO 、 TeO_2 、 CaO 、 V_2O_5 、 Li_2O 、 CdO 、 MgO 、 MoO_3 表现出混合效应。图 8e 表明, 在氧化物玻璃相对介电常数上表现出较强交互作用的特征对为: SiO_2 - B_2O_3 、 SiO_2 - PbO 、 SiO_2 - K_2O 、 B_2O_3 - Al_2O_3 。对其中交互作用最强的 SiO_2 - B_2O_3 对作特征依赖图, 如图 8h 所示。高含量的 B_2O_3 会弱化 SiO_2 对氧化物玻璃相对介电常数的减小作用, 高含量的 SiO_2 会强化 B_2O_3 对氧化物玻璃相对介电常数的减小作用。

对于氧化物玻璃的介电损耗, 图 8c 表明高含量的 Na_2O 、 K_2O 、 Li_2O 、 P_2O_5 、 TiO_2 、 Nb_2O_5 、 TeO_2 、 WO_3 、 V_2O_5 、 MgO 会增大氧化物玻璃的介电损耗, 高含量的 BaO 、 SrO 、 CdO 、 As_2O_3 会减小氧化物玻璃的介电损耗, 而 CaO 、 PbO 、 SiO_2 、 B_2O_3 、 Al_2O_3 、

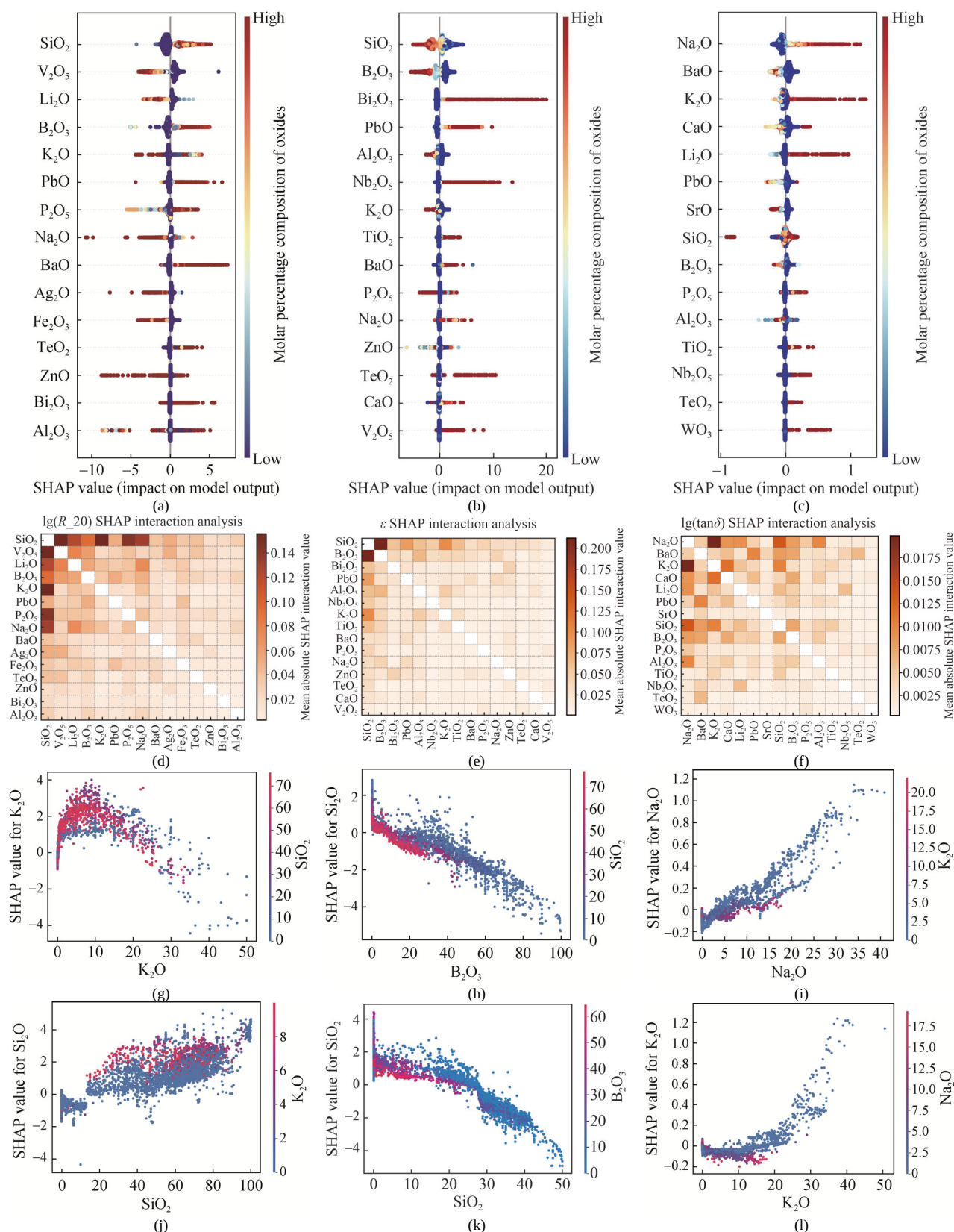


图 8 SHAP 分析可视化。基于树模型的(a, d, g, j)室温体电阻率, (b, e, h, k)介电常数, 和(c, f, i, l)介电损耗增强模型的特征重要性蜂群图、特征交互作用热图和具有最强交互作用的特征对之间的特征依赖图(蜂群图中仅展示了前 15 个最重要的特征对电学性能的影响, 热图中也仅展示了前 15 个最重要的特征对之间的交互作用关系)

Fig. 8 SHAP analysis visualization. Feature importance swarm plots, feature interaction heatmaps, and feature dependence plots for the most strongly interacting feature pairs in the augmented models of (a,d,g,j) room temperature bulk resistivity, (b,e,h,k) relative dielectric constant, and (c,f,i,l) dielectric loss (Swarm plots display only the effects of the top 15 most important features, while heatmaps show interaction relationships only among the top 15 most important feature pairs)

Bi_2O_3 表现出混合效应。图 8f 表明, 在氧化物玻璃介电损耗上表现出较强交互作用的特征对为: $\text{Na}_2\text{O}-\text{K}_2\text{O}$ 、 SiO_2 、 $\text{Na}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{K}_2\text{O}-\text{CaO}$ 、 $\text{K}_2\text{O}-\text{SiO}_2$ 、 $\text{BaO}-\text{PbO}$ 。对其中交互作用最强的 $\text{Na}_2\text{O}-\text{K}_2\text{O}$ 对作特征依赖图, 如图 8i 所示。高含量的 K_2O 会弱化 Na_2O 对氧化物玻璃介电损耗的增大作用, 高含量的 Na_2O 会强化 K_2O 对氧化物玻璃介电损耗的增大作用。

总体而言, SHAP 分析结果与氧化物玻璃电学性能的经典物理化学认知基本一致: 体电阻率与玻璃网络中的离子迁移能力有关, 网络形成体通过构建致密共价键网络抑制离子迁移从而提高体电阻率, 碱金属离子作为网络修饰体, 通过破坏网络结构形成离子迁移通道而降低体电阻率; 相对介电常数与玻璃中离子的极化能力有关, 高极化率阳离子通过电子位移极化提升相对介电常数, 而强共价键结构限制极化能力从而降低相对介电常数; 介电损耗与玻璃网络的电导和弛豫有关, 碱金属离子因低迁移活化能主导电导损耗, 碱土金属离子通过填充网络间隙抑制迁移而降低损耗, 含极性基团(如 $\text{P}=\text{O}$) 在电场下由于偶极子弛豫而加剧损耗。在此基础上, SHAP 分析揭示的一些有趣的混合效应和交互作用也值得进一步的实验证实和研究。SHAP 单特征分析与交互分析提供的这些见解, 不仅为研究者提供了新的研究视角, 还为氧化物玻璃电学性能的调控提供了精准的理论指导。

3 结论

针对氧化物玻璃电学性能的智能化预测需求, 本研究创新性地构建了基于 WGAN-GP-CP 模型的数据增强框架, 成功训练了氧化物玻璃室温体电阻率、相对介电常数及介电损耗的可靠预测模型。该方法通过生成高质量的合成样本, 实现了训练数据集的有效扩展, 显著改善了模型的过拟合问题并提升了模型的泛化能力。此外, 从 SHAP 单特征分析和特征交互分析中获得的见解和知识为更深入地理解氧化物玻璃组分与性能之间的关系提供了重要指导。以上结果推动了氧化物玻璃电学性能优化从传统经验试错模式向基于数据驱动的科学设计范式转变, 为电子信息领域高性能玻璃材料的开发奠定了基础。

(第二十七届中国科协年会学术论文)

参考文献:

[1] DE PABLO J J, JACKSON N E, WEBB M A, et al. New frontiers for the materials genome initiative[J]. NPJ Comput Mater, 2019, 5: 41.
[2] PRIVEN A I, MAZURIN O V. Glass property databases: Their history, present state, and prospects for further development[J]. Adv Mater Res,

2008, 39–40: 147–152.
[3] BISHNOI S, BADGE S, JAYADEVA, et al. Predicting oxide glass properties with low complexity neural network and physical and chemical descriptors[J]. J Non-Cryst Solids, 2023, 616: 122488.
[4] CASSAR D R, DE CARVALHO A C P L F, ZANOTTO E D. Predicting glass transition temperatures using neural networks[J]. Acta Mater, 2018, 159: 249–256.
[5] RAVINDER R, SRIDHARA K H, BISHNOI S, et al. Deep learning aided rational design of oxide glasses[J]. Mater Horiz, 2020, 7(7): 1819–1827.
[6] BISHNOI S, RAVINDER R, GROVER H S, et al. Scalable Gaussian processes for predicting the optical, physical, thermal, and mechanical properties of inorganic glasses with large datasets[J]. Mater Adv, 2021, 2(1): 477–487.
[7] CASSAR D R, MASTELINI S M, BOTARI T, et al. Predicting and interpreting oxide glass properties by machine learning using large datasets[J]. Ceram Int, 2021, 47(17): 23958–23972.
[8] CASSAR D R. ViscNet: Neural network for predicting the fragility index and the temperature-dependency of viscosity[J]. Acta Mater, 2021, 206: 116602.
[9] CASSAR D R. GlassNet: A multitask deep neural network for predicting many glass properties[J]. Ceram Int, 2023, 49(22): 36013–36024.
[10] BHATTOO R, BISHNOI S, ZAKI M, et al. Understanding the compositional control on electrical, mechanical, optical, and physical properties of inorganic glasses with interpretable machine learning[J]. Acta Mater, 2023, 242: 118439.
[11] BISHNOI S, SINGH S, RAVINDER R, et al. Predicting Young's modulus of oxide glasses with sparse datasets using machine learning[J]. J Non-Cryst Solids, 2019, 524: 119643.
[12] YANG K, XU X Y, YANG B, et al. Predicting the Young's modulus of silicate glasses using high-throughput molecular dynamics simulations and machine learning[J]. Sci Rep, 2019, 9(1): 8739.
[13] DENG B H. Machine learning on density and elastic property of oxide glasses driven by large dataset[J]. J Non-Cryst Solids, 2020, 529: 119768.
[14] ZAKI M, JAYADEVA, ANOOP KRISHNAN N M. Extracting processing and testing parameters from materials science literature for improved property prediction of glasses[J]. Chem Eng Process - Process Intensif, 2022, 180: 108607.
[15] SHIH Y T, SHI Y F, HUANG L P. Predicting glass properties by using physics- and chemistry-informed machine learning models[J]. J Non-Cryst Solids, 2022, 584: 121511.
[16] MANNAN S, ZAKI M, BISHNOI S, et al. Glass hardness: Predicting composition and load effects via symbolic reasoning-informed machine learning[J]. Acta Mater, 2023, 255: 119046.
[17] CASSAR D R, SANTOS G G, ZANOTTO E D. Designing optical glasses by machine learning coupled with a genetic algorithm[J]. Ceram Int, 2021, 47(8): 10555–10564.
[18] ZAKI M, VENUGOPAL V, BHATTOO R, et al. Interpreting the optical properties of oxide glasses with machine learning and Shapely additive explanations[J]. J Am Ceram Soc, 2022, 105(6): 4046–4057.
[19] 张兴治, 田英良, 赵志永, 等. 玻璃基板在芯片封装中的应用和性能要求[J]. 硅酸盐通报, 2025, 44(2): 707–716.
ZHANG Xingzhi, TIAN Yingliang, ZHAO Zhiyong, et al. Bull Chin Ceram Soc, 2025, 44(2): 707–716.
[20] 陈俊伟, 王超凡, 张章龙, 等. 玻璃在 5G 通讯中的应用[J]. 电子元件与材料, 2023, 42(8): 899–906.
CHEN Junwei, WANG Chaofan, ZHANG Zhanglong, et al. Electron Compon Mater, 2023, 42(8): 899–906.
[21] VIALLET V, SEZNEC V, HAYASHI A, et al. Glasses and glass-ceramics for solid-state battery applications[M]//Springer Handbook of Glass. Cham: Springer International Publishing, 2019: 1697–1754.
[22] FARAWAY J J, AUGUSTIN N H. When small data beats big data[J].

- Stat Probab Lett, 2018, 136: 142–145.
- [23] XU P C, JI X B, LI M J, et al. Small data machine learning in materials science[J]. npj Comput Mater, 2023, 9: 42.
- [24] PEI X L, PEI J Q, HOU H, et al. Optimizing casting process using a combination of small data machine learning and phase-field simulations[J]. NPJ Comput Mater, 2025, 11(1): 27.
- [25] BANDI A, ADAPA P V S R, KUCHI Y E V P K. The power of generative AI: A review of requirements, models, input–output formats, evaluation metrics, and challenges[J]. Future Internet, 2023, 15(8): 260.
- [26] SciGlass[EB/OL]. <https://github.com/epam/SciGlass>.
- [27] 田静, 黄依平, 苗恩新, 等. 基于机器学习的轻质低膨胀幕墙玻璃组分设计研究[J]. 硅酸盐通报, 2023, 42(7): 2603–2612.
TIAN Jing, HUANG Yiping, MIAO Enxin, et al. Bull Chin Ceram Soc, 2023, 42(7): 2603–2612.
- [28] CHEN Tianqi, GUESTRIN C E. XGBoost: A scalable tree boosting system[C]//Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, San Francisco, California, USA, 2016: 785–794.
- [29] BERGSTRA J, BARDENET R, BENGIO Y, et al. Algorithms for hyper-parameter optimization[C]//Proceedings of the 24th International Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS'11), New York, USA, 2011: 2546–2554.
- [30] WANG H X, DUAN Z Q, GUO Q W, et al. Machine learning design of aluminum-lithium alloys with high strength[J]. Comput Mater Contin, 2023, 77(2): 1393–1409.
- [31] GOODFELLOW I J, POUGET-ABADIE J, MIRZA M, et al. Generative adversarial nets[C]//Proceedings of the 28th International Conference on Neural Information Processing Systems - Volume 2, Montreal, Canada, 2014: 2672–2680.
- [32] ARJOVSKY M, CHINTALA S, BOTTOU L. Wasserstein generative adversarial networks[C]// Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning - Volume 70, Sydney, NSW, Australia, 2017: 214–223.
- [33] GULRAJANI I, AHMED F, ARJOVSKY M, et al. Improved training of wasserstein GANs[C]//Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS'17), New York, USA, 2017: 5769–5779.
- [34] LUNDBERG S M, ERION G, CHEN H, et al. From local explanations to global understanding with explainable AI for trees[J]. Nat mach intell, 2020, 2(1): 56–67.
- [35] LUNDBERG S M, LEE S-I. A unified approach to interpreting model predictions[C]//Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems, Long Beach, California, USA, 2017: 4768–4777.

Modeling Electrical Properties of Oxide Glass via Improved Wasserstein Generative Adversarial Network for Data Augmentation

TIAN Jing¹, LI Yuan¹, GUAN Min², ZHENG Jijie³, CHU Jingyuan², LIU Yong¹, HAN Gaorong^{1,4}

(1. School of Material Science and Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China; 2. China Triumph International Engineering Co., Ltd., Shanghai 200063, China; 3. Innovation Center for Advanced Glass Materials (Anhui) Co., Ltd., Bengbu 233000, Anhui, China; 4. Ningbo Innovation Center, Zhejiang University, Ningbo 315100, Zhejiang, China)

Extended Abstract

Introduction With the advancement of the Materials Genome Initiative and the establishment and improvement of the glass database, data-driven machine-learning methods penetrate the field of glass materials, and remarkable progress is made in the modeling of the physical, mechanical, and optical properties of glass materials. In recent years, oxide glasses have found increasingly widespread applications in the field of electronic applications, and their electrical properties as critical indicators have attracted much attention. However, modeling on the electrical properties of oxide glasses remains a challenge, and insufficient data suppress the model's performance. To address the issue of limited data availability on the electrical properties of oxide glasses, this work was to propose a data augmentation framework named WGAN-GP-CP tailored for glass materials.

Methods Based on the Wasserstein generative adversarial network with gradient penalty (WGAN-GP) model, an additional composition penalty term (CP) was added to the generator's loss function, and a method for evaluating sample quality was proposed, which could assess the quality of the generated samples from three aspects, *i.e.*, diversity, accuracy, and uniqueness. Moreover, the XGBoost algorithm was employed for model training, and the model was interpreted through SHAP single-feature analysis and feature interaction analysis.

Results and discussion The trained generators can generate high-quality synthetic samples, expanding the existing datasets effectively. The results of comparative studies demonstrate that the data-augmented models exhibit mitigated overfitting and significantly enhanced generalization capability. The generalization performances of the room-temperature bulk resistivity, relative dielectric constant, and dielectric loss models increase from 0.784 to 0.838, 0.862 to 0.897, and 0.801 to 0.861, respectively. The results obtained from SHAP analysis are generally consistent with the classical physicochemical understanding of the electrical properties of oxide glasses. In addition, some interesting mixing effects and interactive relationships are also revealed.

Conclusions The data augmentation framework proposed in this work offered a strategy for developing high-performance data-driven models under data scarcity conditions. The insights from SHAP single-feature analysis and feature interaction analysis could provide an important guidance for a deeper understanding of the relationship between the composition and electrical properties of oxide glasses. This research shifted the optimization of oxide glass electrical properties from empirically driven trial-and-error methods to data-driven scientific design frameworks, laying a foundation for the development of high-performance glass materials in the field of electronic applications.

Keywords oxide glasses; electrical properties; machine learning; data augmentation; SHAP analysis