

## 激光与光电子学进展

## 基于 X 射线荧光和极端梯度提升的渗铝层厚度预测模型

李卓越, 汪诚\*, 李秋良, 郭振平, 李彬, 李鑫

空军工程大学基础部, 陕西 西安 710051

**摘要** 渗铝作为航空发动机涡轮叶片高温防护的重要手段,其质量与飞行安全密切相关。渗铝层厚度是评估渗层性能的重要因素,但目前的无损检测方法难以对其进行准确测量。针对该问题,将 X 射线荧光技术与极端梯度提升(XGBoost)算法相结合,通过 Pearson 相关系数筛选(PCCS)提取特征元素,构建渗铝层厚度预测模型。将该模型与 K 近邻回归、线性回归、支持向量机、随机森林模型预测结果的平均相对误差进行对比。结果表明,相比其他模型,PCCS-XGBoost 模型预测渗层厚度的平均相对误差最小,为 1.60%。该研究为渗铝层厚度的无损检测提供了一种新的预测方法。

**关键词** X 射线光学; 厚度检测; 极端梯度提升; 涡轮叶片

中图分类号 TL817

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP202259.2134001

## Prediction Model of Aluminized Layer Thickness Based on X-Ray Fluorescence and Extreme Gradient Boosting

Li Zhuoyue, Wang Cheng\*, Li Qiuliang, Guo Zhenping, Li Bin, Li Xin

Fundamentals Department, Air Force Engineering University, Xi'an 710051, Shaanxi, China

**Abstract** As an important means of high-temperature protection for aero-engine turbine blades, the quality of aluminized coatings is closely related to flight safety. The thickness of the aluminized layer is an essential factor in evaluating its performance. However, it is not easy to measure it accurately by current nondestructive testing methods. For this problem, the X-ray fluorescence technology is combined with the extreme gradient boosting (XGBoost) algorithm, and the feature element extraction by Pearson correlation coefficient screening (PCCS) is used to build a prediction model for the thickness of the aluminized layer. The average relative error of the prediction results is compared with K nearest neighbor regression, linear regression, support vector machine, and random forest models. The results show that the PCCS-XGBoost model had the smallest average error of 1.60% in predicting thickness compared with other models. The study provides a new prediction method for nondestructive testing of the thickness of the aluminized layer.

**Key words** X-ray fluorescence; thickness detection; extreme gradient boosting; turbine blade

## 1 引言

随着航空发动机不断更新换代,对推重比要求提高的同时,涡轮部件环境也愈加恶劣。为提高叶片在高温环境下的抗氧化、抗腐蚀性能,通常在叶片表面进行 Al、Al-Si、Al-Cr、Al-Si-Y、Pt-Al 等渗层涂覆<sup>[1-2]</sup>。Al 渗层具有抗氧化、抗腐蚀、耐磨性高以及成本低廉的优势,被广泛应用于航空发动机涡轮叶片的高温防护<sup>[3]</sup>。涂渗层质量会影响叶片的疲劳性能以及断裂行为,严重时危及飞行安全。渗层厚度是决定叶片涂渗层质量的重要因素<sup>[4]</sup>,因此,实现叶片表面渗层厚度无损检

测至关重要。但目前的无损检测手段如显微观察法、超声波法、磁粉法、涡流法受基材与渗层扩散效应的制约,难以准确测量渗层厚度<sup>[5-6]</sup>。

X 射线荧光(XRF)分析作为一种能量化特定元素含量的无损检测技术<sup>[7]</sup>,在涂镀层厚度检测中得到了广泛应用。Laguitton 等<sup>[8]</sup>基于 XRF 的基本参数法,利用 LaMa 程序进行双曲迭代以测定合金膜成分及质量厚度等参数,得到与电子探针显微分析准确度相当的预测结果。Jain 等<sup>[9]</sup>提出了一种不需要标样的校准曲线,通过测定涂层元素的综合质量吸收系数,利用荧光方程计算涂层厚度的理论,并验证了其可行性。曹立

收稿日期: 2021-09-15; 修回日期: 2021-10-12; 录用日期: 2021-10-26

基金项目: 陕西省科研计划(SKJH20070405)

通信作者: \*valid\_01@163.com

国等<sup>[10]</sup>为了测量薄层厚度,提出了表层特征 X 射线吸收法、底层特征 X 射线吸收法及表层特征 X 射线计数率法,相比 $\beta$ 射线测厚法,这些方法的灵敏度更高、适应范围更广。在 XRF 测厚研究中,除基本参数法、经验系数法等传统方法外,还有基于数学模型的研究。如: de Almeida 等<sup>[11]</sup>使用能量色散 XRF 多变量方法测定聚合物薄膜厚度;刘吉超等<sup>[12]</sup>基于 XRF 建立一元和多元回归模型测定扩散渗铝层厚度,预测结果的平均相对误差为 3.2%;Chen 等<sup>[13]</sup>提出了一种极端梯度提升(XGBoost)算法。XGBoost 是一类具有正则化、稀疏性感知、内置交叉验证、可并行计算等特点的有监督机器学习算法,广泛应用于图像分类<sup>[14]</sup>、光谱识别<sup>[15]</sup>、遥感<sup>[16]</sup>等领域,这也为 XGBoost 算法在 XRF 测厚领域的应用提供了借鉴意义。

上述研究大多针对密度均匀的涂镀层,而渗铝层沿深度方向的元素组成及密度等参数会不断变化,

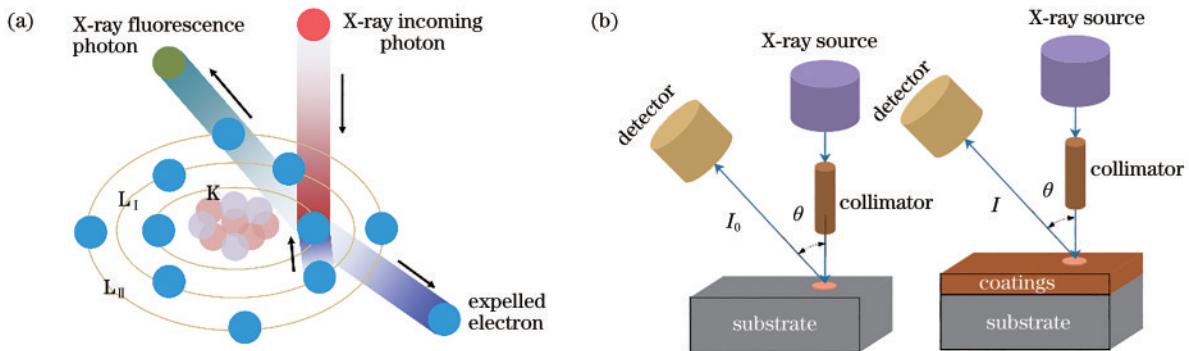


图 1 测厚原理的示意图。(a)微观;(b)宏观

Fig. 1 Schematic diagram of thickness measuring principle. (a) Microscopic; (b) macroscopic

初级 X 射线经准直器后入射在基体或涂层表面, X 射线光子与基体元素相互作用产生的 XRF 被探测器吸收,如图 1(b)所示。有、无涂层待测物的基体元素被激发产生的 XRF 强度分别为  $I$  和  $I_0$ ,对于理想的均匀涂镀层,二者的关系<sup>[18]</sup>可表示为

$$I = I_0 \exp(-\mu_m d_m / \cos \theta), \quad (1)$$

式中: $\mu_m$ 为质量吸收系数,其值由 XRF 波长、涂层密度及被激发元素的原子序数决定; $d_m$ 为涂层的质量厚度; $\theta$ 为入射光方向与探测方向的夹角,测试过程中探测器的位置及其与样品表面的距离不变,即  $\cos \theta$  为常数。对于理想均匀涂镀层,在相同的测试环境下, XRF 波长及涂层密度不变,对于某一特定的被激发元素,其质量吸收系数  $\mu_m$  为常数。从式(1)可以发现, XRF 强度比的对数  $\ln(I/I_0)$  与涂层质量厚度  $d_m$  呈线性关系,通过建立  $\ln(I/I_0)$  与  $d_m$  的线性回归模型,就能实现涂层厚度的测量。

对于渗铝层,基体元素与渗层元素相互扩散会增强或减弱 XRF 的强度,同时,渗层密度受元素扩散的影响,也会随着渗层厚度方向发生变化,使质量吸收系数  $\mu_m$  发生变化,导致 XRF 强度通过涂层的衰减并不

XRF 经过渗层后的变化规律也更为复杂。针对该问题,本文将叶片多个主要基体元素的 XRF 强度值作为输入特征,采用 Pearson 相关系数筛选(PPCS)方法提取特征元素,并将其对应的渗层厚度作为标签值,构建 PPCS-XGBoost 模型。利用网格搜索和交叉验证方法进行参数调优,达到预测渗层厚度的目的,并将该模型的性能与常用的机器学习算法模型进行对比。

## 2 基本原理

### 2.1 X 射线荧光测厚原理

图 1 为测厚原理的示意图。初级 X 射线光子照射金属基体时会与基体内原子相互作用,当其能量大于某一电子轨道的结合能时,该层电子被驱逐形成空穴,如图 1(a)所示。外层电子向空穴跃迁时,伴随的能量释放产生了 XRF。XRF 通过涂层时,产生光电效应、热效应等现象,导致进入探测器的 XRF 发生衰减<sup>[17]</sup>。

完全按照式(1)的规律变化。此外,涡轮叶片的基体材料为镍基高温合金,元素种类众多,不同元素的原子序数不同,其质量吸收系数  $\mu_m$  也不同。基体表面多个特征元素 XRF 强度比的对数与渗层厚度之间成复杂的多变量非线性关系,采用常规的线性回归方法难以获得其变化趋势,因此,利用 XGBoost 算法从数据特征中寻找 XRF 强度比的对数与渗铝层厚度之间的关系,以达到预测渗层厚度的目的。

### 2.2 XGBoost 算法

XGBoost 是基于梯度提升决策树(GBDT)的一种算法,在 GBDT 的基础上进行了二阶泰勒公式展开、引用正则项优化、采用 Blocks 存储结构优化损失函数,避免了过拟合,实现并行计算。

给定训练数据集  $D = \{(x_1, y_1), \dots, (x_i, y_i), \dots, (x_n, y_n)\}$ ,  $\mathbf{x}_i \in (x_i^{(1)}, \dots, x_i^{(v)})$ 。其中: $\mathbf{x}_i$  为第  $i$  个渗铝试样; $v$  为特征数量,即选取的主要元素数量; $y_i$  为第  $i$  个渗铝试样对应的渗层厚度。构建的 XGBoost 目标函数可表示为

$$O_{bj}(\varphi) = \sum_i l(y_i, \hat{y}_i) + \sum_k \Omega(f_k), \quad (2)$$

式中： $O_{bj}(\varphi)$ 为目标函数； $\sum_i l(y_i, \hat{y}_i)$ 为损失函数； $\Omega(f_k)$ 为正则化项； $k$ 为树的数量； $y_i$ 为试样 $x_i$ 的渗层厚度真实值； $\hat{y}_i$ 为试样 $x_i$ 的渗层厚度预测值； $f_k$ 为第 $k$ 棵树的模型。 $\hat{y}_i$ 可用GBDT梯度提升树表示为

$$\hat{y}_i = \sum_{k=1}^k f_k(x_i) = \hat{y}_i^{(t-1)} + f_i(x_i), \quad (3)$$

式中， $t-1$ 为迭代次数。将式(3)代入目标函数中，得到

$$O_{bj}^{(t)}(\varphi) = \sum_{i=1}^n l[y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_i(x_i)] + \sum_k \Omega(f_k). \quad (4)$$

目标函数的优化步骤<sup>[13]</sup>如下。

1) 进行二阶泰勒展开，去除常数项，优化损失函数项。目标函数的二阶泰勒展开式为

$$O_{bj}^{(t)} = \sum_{i=1}^n [l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)}) + g_i f_i(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_i^2(x_i)] + \sum_k \Omega(f_k), \quad (5)$$

式中： $g_i$ 为损失项的一阶导数 $l'(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)})$ ； $f_i$ 为损失项的二阶导数 $l''(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)})$ 。

2) 对式(5)进行正则化项展开，去除常数项，得到简化正则化项的目标函数为

$$O_{bj}^{(t)} = \sum_{i=1}^n [g_i f_i(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_i^2(x_i)] + \Omega(f_i). \quad (6)$$

3) 合并一次项、二次项系数。先重新定义一棵树，叶子结点的权重向量为 $\omega$ ，映射关系为 $q$ ，树的表达式为

$$f_i(x) = \omega_q(x), \omega \in R^T, q: R^d \rightarrow \{1, \dots, T\}, \quad (7)$$

式中， $T$ 表示这棵树有 $T$ 个叶子结点。树的复杂度由叶子结点的数量和叶子结点权重向量的L2范数组成，

可表示为

$$\Omega(f_i) = \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T \omega_j^2, \quad (8)$$

式中： $\gamma$ 为叶子树惩罚正则项； $\lambda$ 为叶子权重惩罚正则项； $j$ 为第 $j$ 个叶子结点。将式(7)和式(8)代入目标函数式(6)中，对节点进行分组，得到

$$O_{bj}^{(t)} = \sum_{j=1}^T [G_j \omega_j + \frac{1}{2} (H_j + \lambda) \omega_j^2] + \gamma T, \quad (9)$$

式中： $G_j = \sum_{i \in I_j} g_i$ ； $H_j = \sum_{i \in I_j} h_i$ 。通过构建一元二次方程，得到最优目标值为

$$O_{bj} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^T \frac{G_j^2}{H_j + \lambda} + \gamma T. \quad (10)$$

### 3 数据准备与建模

#### 3.1 仪器参数

采用DK7725H型电火花线切割机切割渗铝叶片，用TESCAN VEGA COMPACT型扫描电镜(SEM)观察和标定渗铝层厚度。采用以元素W为X射线源靶材的XAU-4CS型能量色散X射线荧光(EDXRF)光谱仪采集试样中选定特征元素的XRF强度值。测试参数：管压为40 kV；管流(电源提供给X射线光管的电流)为1000  $\mu$ A；准直器的直径为1.3 mm；单点测试时间为30 s，单点采样3次取平均值。采用PyThon3.7.0的XGBoost包对模型进行训练。

#### 3.2 试样

实验采用的试样为某型发动机涡轮叶片。该叶片基材为DZ22镍基合金，表面进行了渗铝防护处理。DZ22合金主要化学成分的质量分数如表1所示。

表1 DZ22合金的质量分数

Table 1 Mass fraction of main elements in DZ22 alloy

unit: %

Element	Content	Element	Content	Element	Content	Element	Content
C	0.120-0.160	W	11.5-12.5	Nb	0.750-1.25	Cu	$\leq 0.1000$
Cr	8.00-10.0	Al	4.75-5.25	Hf	1.40-1.80	Si	$\leq 0.1500$
Ni	balance	Ti	1.75-2.25	B	0.0100-0.0200	S	$\leq 0.0150$
Co	9.00-11.0	Fe	$\leq 0.200$	Mn	$\leq 0.0150$	P	$\leq 0.0100$

根据XRF原理可知，元素的原子序数较小、在合金中的质量分数较低时，其XRF强度不明显，因此不考虑DZ22合金中质量分数低于2%的元素。DZ22合金是以Ni为基底，加入多种其他元素合成的高温合金，Ni的质量分数在54.58%~63.12%之间。从表1可以发现，除Ni元素外，加入元素质量分数高于2%的有Cr、Co、W、Al、Ti元素。由于Al的原子序数 $Z=13$ ，XRF强度不明显，且Al作为渗层的主要元素，会对基体DZ22合金中Al元素的XRF强度造成较大影响，因此，选取Ni、Cr、Co、W、Ti五种元素作为XRF测试的元素。

为获得不同厚度的DZ22渗铝试样，利用线切割机将3个叶片切成条状，然后将其截面磨抛至光滑，并对各个条状涡轮叶片切片的叶背、叶尖等部位的渗铝

层厚度进行SEM观察及标定。图2为渗层厚度的标定示例图。其中，叶片表面分为四层，第I层为 $\beta$ -NiAl

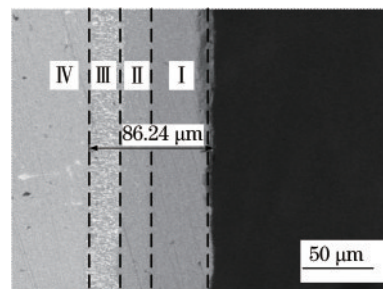


图2 渗铝层厚度测量的区域标定

Fig. 2 Area calibration for thickness measurement of aluminized layer

相,第 II 层为富 Ni 的  $\beta$ -NiAl 相,第 III 层为互扩散层,第 IV 层为 DZ22 合金基体。表 2 为标定得到 40 个渗铝试

样的厚度值。可以发现,渗铝试样厚度在 60.60~97.25  $\mu\text{m}$  之间。

表 2 渗铝试样的厚度值

Table 2 Thickness value of aluminized sample

unit:  $\mu\text{m}$

No.	Thickness	No.	Thickness	No.	Thickness	No.	Thickness	No.	Thickness
1	60.60	9	79.76	17	83.93	25	87.61	33	90.25
2	65.78	10	80.21	18	85.75	26	87.75	34	90.85
3	68.79	11	81.36	19	86.02	27	88.46	35	92.75
4	69.93	12	81.88	20	86.24	28	88.55	36	93.50
5	75.96	13	81.91	21	86.29	29	88.79	37	94.20
6	77.94	14	82.59	22	86.64	30	88.88	38	95.95
7	78.46	15	83.60	23	87.08	31	89.98	39	96.20
8	78.93	16	83.68	24	87.45	32	90.00	40	97.25

### 3.3 特征元素的选取

特征元素的 XRF 光谱如图 3 所示。可以发现:在

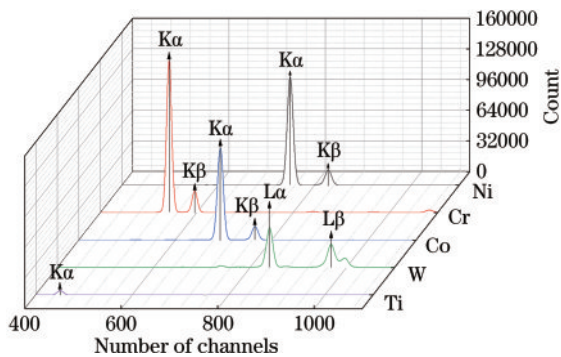


图 3 各元素的 XRF 光谱

Fig. 3 XRF spectra of each element

通道数为 400~1000 时, Ni、Cr、Co 元素的 XRF 光谱峰均为  $K\alpha$  和  $K\beta$ , 且  $K\alpha$  峰的计数率大于  $K\beta$ ; W 元素的 XRF 光谱峰为  $L\alpha$  和  $L\beta$ , 且  $L\alpha$  峰的计数率大于  $L\beta$  峰; Ti 元素仅有  $K\alpha$  峰较明显。因此, 基于谱峰计数率高、通道数相对集中的原则, 对 W 元素选取  $L\alpha$  峰, 其余四种元素均选取  $K\alpha$  峰进行 XRF 强度值的采集。

图 4(a) 为涡轮叶片切片的横截面。可以发现, 该截面无渗层涂覆, 可以收集该截面表面 Ni、Cr、Co、W、Ti 元素的 XRF 强度值, 作为无渗层表面的 XRF 强度  $I_0$ 。用相同的方法收集图 4(b) 中测试点的 XRF 强度值, 作为有渗层表面的 XRF 强度  $I$ 。XRF 采集的过程中, 保持 EDXRF 光谱仪的管压、管流、滤光片、准直器、测试时间等条件不变, 确保无渗层截面 XRF 强度  $I_0$  与有渗层表面 XRF 强度  $I$  在相同环境下获得。

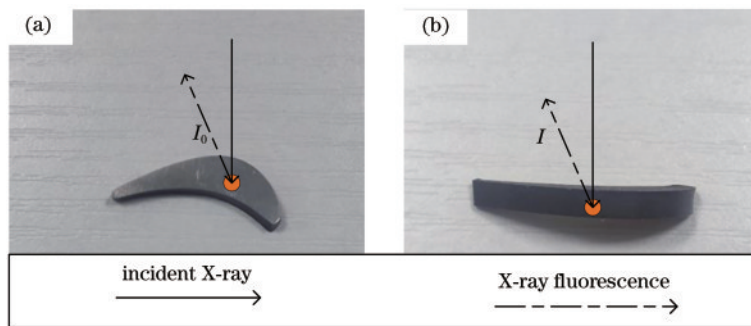


图 4 叶片表面 XRF 强度值的采集。(a) 无渗层; (b) 有渗层

Fig. 4 Collection of XRF intensity value on blade surface. (a) Uncoated; (b) coatings

根据式(1)计算 XRF 强度比的对数  $R$ , 可表示为

$$R = \ln(I/I_0). \quad (11)$$

将采集的各元素 XRF 强度绝对值通过式(11)计算 XRF 强度比对数  $R$ , 再对  $R$  进行归一化处理, 得到 XRF 强度的相对值, 以提高采集数据的可信度, 使数据更集中。图 5 为经预处理后各特征元素 XRF 强度数据与渗层厚度的关系。整体来看, XRF 强度并未随渗层厚度的增加而线性衰减, 无明显线性变化规律。原因是基体元素与渗层元素相互扩散, 渗层内存在的

基体元素会增强 XRF 强度, 而基体内存在的渗层元素会减弱 XRF 强度, 且渗层密度会随渗层厚度的变化而变化。对于涡轮叶片的不同位置, 渗层厚度相同时, 基体元素与渗层元素的扩散形式一致, 激发产生的 XRF 强度值也一致, 从而得到 XRF 强度值与渗层厚度的对应关系。从物理角度来看, 要得到  $R$  随渗层厚度的变化规律, 需要先分析元素扩散分布随渗层厚度的变化规律, 确定元素位置后, 考虑吸收增强效应, 再通过理论计算得到 XRF 强度值。该过程冗长、复杂, 且  $R$  随

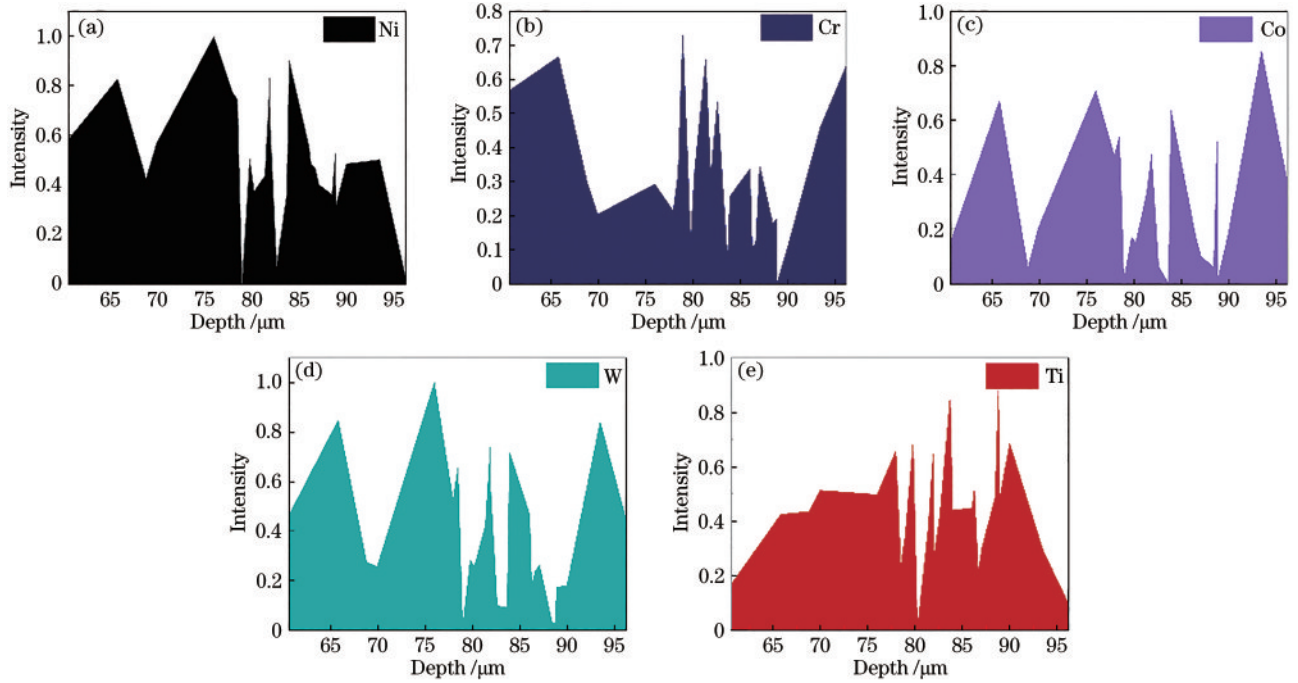


图 5 XRF 强度随渗层厚度的变化。(a) Ni; (b) Cr; (c) Co; (d) W; (e) Ti

Fig. 5 Variation of XRF intensity with the thickness of the infiltrated layer. (a) Ni; (b) Cr; (c) Co; (d) W; (e) Ti

渗层厚度的变化规律呈复杂的多变量非线性关系。因此,利用 XGBoost 算法从数据中挖掘规律,预测渗层厚度。

对于回归问题,输入变量之间的高度相关性会导

致回归系数估计值的稳定性变差<sup>[19]</sup>。因此,在建立 XGBoost 模型之前,先对各输入变量间的相关性进行检验。图 6 为各特征元素 XRF 强度之间的散点图矩阵。可以发现,Co 和 W 元素之间存在着较强的线性

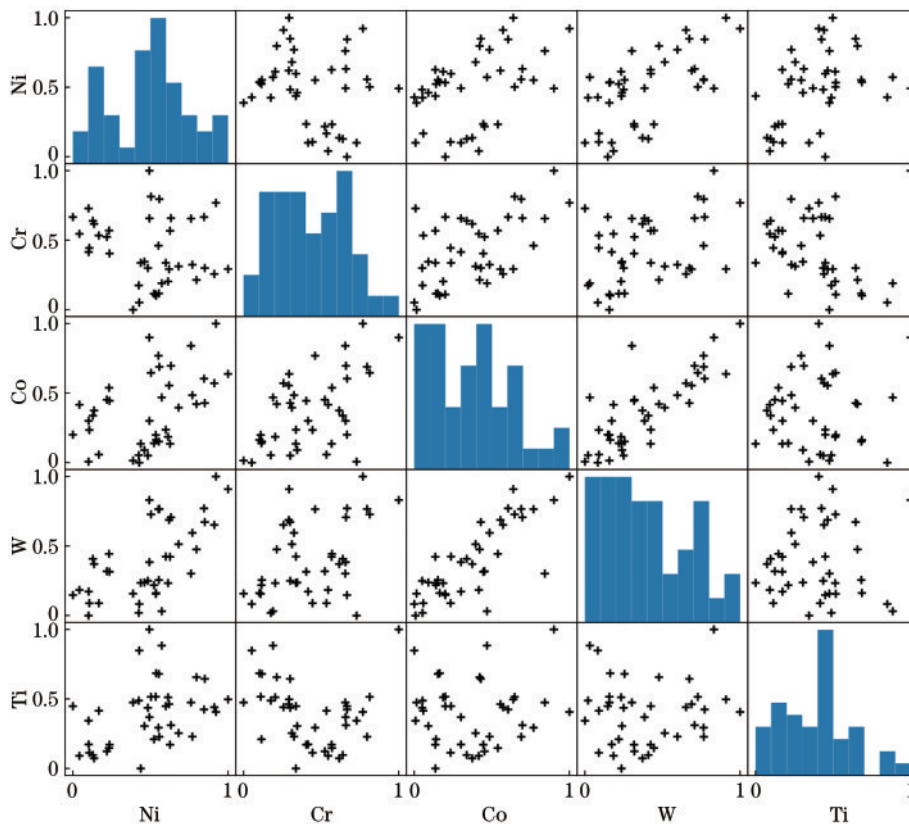


图 6 各特征元素 XRF 强度的相关性检验

Fig. 6 Correlation test of XRF intensity of each feature element

关系,其余元素之间的线性关系较弱。表 3 为各特征元素之间的 Pearson 相关系数( $\rho$ ),一般认为, $|\rho| \geq 0.6$ 时,两变量间强相关<sup>[20]</sup>。可以发现,Co 和 W 元素的 Pearson 相关系数为 0.811,Ni 和 W 元素的 Pearson 相关系数为 0.629,其余变量间的 Pearson 相关系数均小于 0.6,因此建模过程中剔除 W 元素,以减弱变量间的相关性。

表 3 各特征元素的 Pearson 相关系数

Table 3 Pearson correlation coefficient of each feature element

$\rho$	Ni	Cr	Co	W	Ti
Ni	1.000	-0.193	0.438	0.629	0.398
Cr	-0.193	1.000	0.553	0.430	-0.225
Co	0.438	0.553	1.000	0.811	0.067
W	0.629	0.430	0.811	1.000	-0.046
Ti	0.398	-0.225	0.067	-0.046	1.000

### 3.4 PCCS-XGBoost 建模

经 PCCS 得到特征元素后,进行 XGBoost 模型的训练:首先,以 4:1 的训练集和测试集样本数比例建立默认参数的 XGBoost 模型;然后,以拟合优度  $R^2$  为评价基准,利用网格搜索和五折交叉验证的方法依次对 max\_depth、min\_child\_weight、Gamma、subsample、colsample\_bytree 等参数进行调优;最后,通过减小学习率、增加树数量的方式提高模型拟合优度,得到 PCCS-XGBoost 模型。PCCS-XGBoost 模型的超参数如表 4 所示。

表 4 PCCS-XGBoost 模型的超参数

Table 4 Hyperparameter of the PCCS-XGBoost model

Hyperparameter	Value
Booster	gbtree
learning_rate	0.25
max_depth	3
min_child_weight	1
Gamma	0
subsample	0.75
colsample_bytree	0.8

## 4 结果与分析

除上述训练集用到的叶片外,重新采集 5 个涡轮叶片测试点的 XRF 强度作为验证集,对 PCCS-XGBoost 模型进行验证。得到的厚度预测结果及相对误差如表 5 所示。可以发现,预测结果的绝对误差( $A_e$ )最大为 3.59  $\mu\text{m}$ ,最小为 0.11  $\mu\text{m}$ ,平均绝对误差为 1.40  $\mu\text{m}$ ,相对误差( $R_e$ )最大为 3.85%,最小为 0.126%,平均相对误差为 1.60%。此外,相比文献[12]中测试模型的平均相对误差(3.20%),该模型的平均相对误差也有所减小。这表明该模型的预测结果满足渗层厚度的测试需求。

表 5 厚度预测结果

Table 5 Thickness prediction results

No.	Predicted thickness / $\mu\text{m}$	Actual thickness / $\mu\text{m}$	Absolute error / $\mu\text{m}$	Relative error / %
1	81.60	80.00	1.60	2.00
2	89.26	89.15	0.11	0.13
3	89.66	93.25	3.59	3.85
4	93.82	92.85	0.97	1.05
5	93.47	94.20	0.73	0.78
Average error			1.40	1.60

PCCS-XGBoost 模型对各特征元素的重要性评分如图 7 所示。其中, $F$  score 为基于分裂节点次数(weight)的特征重要性评分。可以发现,重要性评分从高到低依次是 Ni、Cr、Co、Ti 元素,与四种元素在 DZ22 合金中质量分数的排序相吻合。这表明元素在合金中的质量分数越高,其 XRF 强度越大,不同渗层厚度经吸收和增强后的荧光强度的差异也会越大,其在 PCCS-XGBoost 模型中的重要性评分也更高。

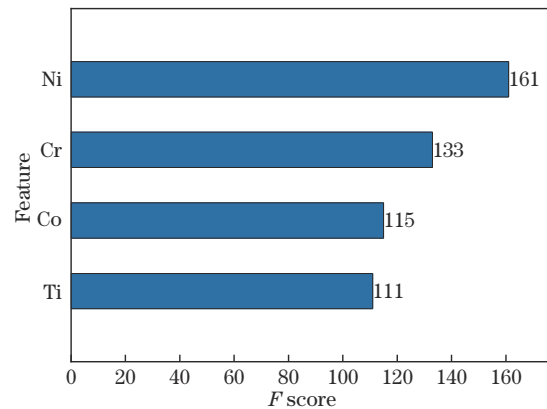


图 7 PCCS-XGBoost 模型的特征评分

Fig. 7 Feature importance score of the PCCS-XGBoost model

为了验证使用 PCCS 提取特征元素的有效性,将未经 PCCS 的五个元素全部作为输入变量,利用相同的训练集、验证集和参数调优方法建立 XGBoost 模型,得到的模型平均误差如表 6 所示。可以发现,经 PCCS 提取的特征元素建立的 PCCS-XGBoost 模型与不筛选建立的 XGBoost 相比,平均绝对误差从 2.07  $\mu\text{m}$  减小到了 1.40  $\mu\text{m}$ ,平均相对误差从 2.42% 减小到了 1.60%。这表明 PCCS 可以有效避免输入变量间的强相关性对回归计算的影响。

表 6 XGBoost 与 PCCS-XGBoost 模型的误差对比

Table 6 Error comparison between XGBoost and PCCS-XGBoost models

Model	Average absolute error / $\mu\text{m}$	Average relative error / %
XGBoost	2.07	2.42
PCCS-XGBoost	1.40	1.60

图 8 为 XGBoost 模型的特征重要性评分。可以发现, W 元素的重要性评分最低。原因是 W 元素是 EDXRF 中初级 X 射线产生的靶材, 在渗铝叶片的测试过程中, 收集的 W 元素 XRF 部分来自源射线, 这也进一步证明用 PCCS 去掉 W 元素的正确性。

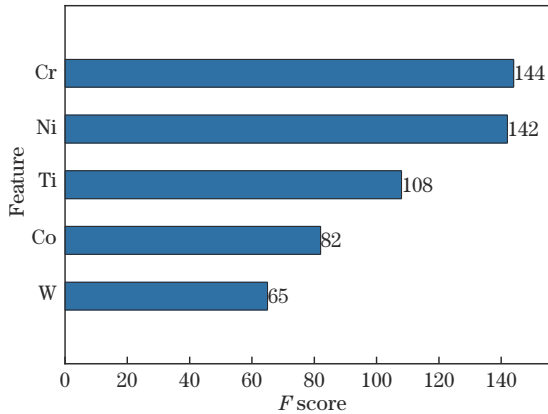


图 8 XGBoost 模型的特征评分

Fig. 8 Feature importance score of the XGBoost model

为更好地评价 PCCS-XGBoost 模型对渗铝层厚度预测的能力, 引入了 K 近邻回归 (KNN)、线性回归 (LR)、支持向量机 (SVM) 以及随机森林 (RF) 四种常用模型进行对比。用相同的训练集进行训练和参数调优, 不同模型在相同验证集上的测试结果如表 7 所示。可以发现: LR 模型和 RF 模型的预测误差较大, 平均相对误差大于 5%; KNN 模型、SVM 模型及 PCCS-XGBoost 模型的预测误差较小, 平均相对误差都在 5% 以内。此外, PCCS-XGBoost 模型在渗铝层厚度预测中表现最好, 预测误差最小, 平均相对误差为 1.60%。

表 7 不同模型的平均相对误差

Table 7 Average relative errors of different models

Model	Average absolute error / $\mu\text{m}$	Average relative error / %
KNN	2.74	3.08
LR	8.25	9.05
SVM	4.49	5.00
RF	5.64	6.19
PCCS-XGBoost	1.40	1.60

## 5 结 论

利用 EDXRF 光谱仪测试涡轮叶片特征元素的 XRF 强度, 结合 XGBoost 算法构建了渗铝层厚度预测模型: 首先, 对 DZ22 合金主要元素进行 XRF 光谱分析以及 Pearson 相关系数筛选, 选取 4 种特征元素的荧光强度作为输入变量, 避免了输入变量间的高度相关性对分析结果的影响; 然后, 利用网格搜索和五折交叉验证法进行参数调优, 构建 PCCS-XGBoost 模型, 确保模型的拟合优度和泛化能力; 最后, 基于渗层厚度预测

结果的平均误差, 将建立的模型与 KNN、LR、SVM 以及 RF 模型进行对比, 验证了该模型的精确性。实验结果表明, PCCS-XGBoost 模型预测渗铝层厚度的平均绝对误差为 1.40  $\mu\text{m}$ , 平均相对误差为 1.60%, 相比传统的回归模型泛化能力更好、精度更高, 为渗层无损检测的计算预测模块提供了一种新思路。

## 参 考 文 献

- [1] Liu R D, Jiang S M, Yu H J, et al. Preparation and hot corrosion behaviour of Pt modified AlSiY coating on a Ni-based superalloy[J]. Corrosion Science, 2016, 104: 162-172.
- [2] Zagula-Yavorska M, Sieniawski J. Cyclic oxidation of palladium modified and nonmodified aluminide coatings deposited on nickel base superalloys[J]. Archives of Civil and Mechanical Engineering, 2018, 18(1): 130-139.
- [3] Smith A B, Ng S M. Aluminide diffusion coatings on Ni-base superalloys[J]. Transactions of the IMF, 1996, 74 (2): 64-65.
- [4] 陶敏, 欧阳雪珍, 王晓娟, 等. 发动机低压 I 级涡轮叶片榫头断裂分析与预防[J]. 失效分析与预防, 2018, 13 (6): 393-396.  
Tao M, Ouyang X Z, Wang X J, et al. Analysis and prevention of tenon fracture of grade I low pressure turbine blade in engine[J]. Failure Analysis and Prevention, 2018, 13(6): 393-396.
- [5] Dwivedi S K, Vishwakarma M, Soni P A. Advances and researches on non destructive testing: a review[J]. Materials Today: Proceedings, 2018, 5(2): 3690-3698.
- [6] Kumar S, Mahto D. Recent trends in industrial and other engineering applications of non destructive testing: a review[J]. Social Science Electronic Publishing, 2016, 157(12): 1055-1065.
- [7] 陈颖, 张灿, 肖春艳, 等. 基于 GWO-SVR 的土壤镉元素含量含水率校正预测模型研究[J]. 光学学报, 2020, 40(10): 1030002.  
Chen Y, Zhang C, Xiao C Y, et al. Study on prediction model of soil cadmium content moisture content correction based on GWO-SVR[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(10): 1030002.
- [8] Laguiton D, Parrish W. Simultaneous determination of composition and mass thickness of thin films by quantitative X-ray fluorescence analysis[J]. Analytical Chemistry, 1977, 49(8): 1152-1156.
- [9] Jain S K, Gupta P P, Eapen A C. An X-ray fluorescence method for coating thickness measurement[J]. X-Ray Spectrometry, 1979, 8(1): 11-13.
- [10] 曹利国, 丁益民, 敖奇. 用 X 射线荧光方法测定薄层样品、镀层和涂层的厚度[J]. 成都地质学院学报, 1992, 19 (1): 106-114.  
Cao L G, Ding Y M, Ao Q. The thickness measurement of layers based on XRF[J]. Journal of Chengdu University of Technology (Sci & Technol Ed), 1992, 19(1): 106-114.
- [11] de Almeida E, Melquiades F L, Marques J P R, et al. Determination of the polymeric thin film thickness by energy dispersive X-ray fluorescence and multivariate

- analysis[J]. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2020, 167: 105818.
- [12] 刘吉超, 汪诚, 戴鹏里. 基于 X 射线荧光的扩散渗铝层厚度测量研究[J]. *核技术*, 2020, 43(2): 62-69.  
Liu J C, Wang C, Dai P L. Study of the measurement of the thickness of diffusion aluminizing layer based on X-ray fluorescence[J]. *Nuclear Techniques*, 2020, 43(2): 62-69.
- [13] Chen T Q, Guestrin C. XGBoost: a scalable tree boosting system[C]//KDD '16: Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, August 13-17, 2016, San Francisco, CA, USA. New York: ACM Press, 2016: 785-794.
- [14] 赵心驰, 胡岸明, 何为. 基于卷积神经网络和 XGBoost 的摔倒检测[J]. *激光与光电子学进展*, 2020, 57(16): 161024.  
Zhao X C, Hu A M, He W. Fall detection based on convolutional neural network and XGBoost[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2020, 57(16): 161024.
- [15] 陶孟琪, 刘家祥, 吴越, 等. XGBoost 在气体红外光谱识别中的应用[J]. *光学学报*, 2020, 40(7): 0730002.  
Tao M Q, Liu J X, Wu Y, et al. Application of XGBoost in gas infrared spectral recognition[J]. *Acta Optica Sinica*, 2020, 40(7): 0730002.
- [16] 张爱武, 董喆, 康孝岩. 基于 XGBoost 的机载激光雷达与高光谱影像结合的特征选择算法[J]. *中国激光*, 2019, 46(4): 0404003.  
Zhang A W, Dong Z, Kang X Y. Feature selection algorithms of airborne LiDAR combined with hyperspectral images based on XGBoost[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2019, 46(4): 0404003.
- [17] Kadachi A N, Al-Eshaikh M A. Limits of detection in XRF spectroscopy[J]. *X-Ray Spectrometry*, 2012, 41(5): 350-354.
- [18] 赵越, 屈国普, 胡创业, 等. 透射式特征 X 射线测厚技术实验研究[J]. *核电子学与探测技术*, 2009, 29(1): 81-83, 104.  
Zhao Y, Qu G P, Hu C Y, et al. Research on the technique of transmission characteristic X-ray thickness measurement[J]. *Nuclear Electronics & Detection Technology*, 2009, 29(1): 81-83, 104.
- [19] 王惠文. 偏最小二乘回归方法及其应用[M]. 北京: 国防工业出版社, 1999.  
Wang H W. Partial least-squares regression-method and applications[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1999.
- [20] Schober P, Boer C, Schwarte L A. Correlation coefficients: appropriate use and interpretation[J]. *Anesthesia and Analgesia*, 2018, 126(5): 1763-1768.