



# 机器学习在非晶合金原子重排事件研究中的应用

徐艺莹, 冯士东\*, 王利民, 刘日平

燕山大学, 亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室, 先进结构材料中心, 秦皇岛 066004

\*联系人, E-mail: shidongfeng@ysu.edu.cn

收稿日期: 2024-08-29; 接受日期: 2024-12-09; 网络出版日期: 2025-03-11

国家自然科学基金(编号: 52271154, 52271155, 52471185)、国家重大科研仪器研制项目(编号: 52127808)、河北省百人计划(编号: E2020050018)和国家重点研发计划(编号: 2018YFA0703602)资助

**摘要** 非晶合金作为一种新型亚稳态金属材料, 具有高强度和高耐磨性等优点. 然而, 室温脆性限制了其应用范围. 非晶合金的变形通常以剪切带的形式出现, 并伴随大量原子重排. 为了克服非晶合金在室温下的脆性, 准确识别原子重排事件成为关键挑战. 近年来, 机器学习技术在该领域研究中展现出巨大的潜力. 本文综述了人工神经网络(ANN)、支持向量机(SVM)、梯度提升决策树(GBDT)和极端梯度提升树(XGBoost)等机器学习算法在非晶合金原子重排事件研究中的应用进展, 探讨了它们在揭示材料微观机制中的作用, 并展望了未来机器学习技术非晶合金变形研究中的发展方向. 将机器学习方法与传统材料科学研究相结合, 为非晶合金的优化设计和性能预测提供新的思路.

**关键词** 非晶合金, 机器学习, 原子重排

**PACS:** 61.43.Fs, 02.70.-c, 71.55.Jv

## 1 引言

机器学习的研究可以追溯到20世纪40年代, 当时 McCulloch 和 Pitts<sup>[1]</sup>对人工神经网络层次模型的研究, 为机器学习发展奠定了基础. 1958年, Rosenblatt<sup>[2]</sup>提出了感知机算法, 这一算法模拟了人类大脑的神经网络, 是现代人工智能发展的核心起点. 从此, 人工神经网络逐渐兴起, “机器学习”这一术语也应运而生. 同一时期, 统计学家开始研究损失函数最小化问题, 为机器学习的发展提供了理论支持. 20世纪80年代, 机器学习迎来了全球范围的兴起和快速发展. 经典的决策树

等算法在此期间出现, 机器学习框架初步成型, 并广泛应用于分类和回归问题中. 1986年, 反向传播算法问世, 这是最简单的神经网络算法, 推动了神经网络研究的复苏和深入<sup>[3]</sup>. 进入20世纪90年代后, 多种浅层机器学习模型相继问世, 在预测效率上表现出显著的优越性, 统计学理论的完善也大幅推动了机器学习的发展. 然而, 数据量不足和计算能力有限的问题限制了这一时期机器学习的发展. 进入21世纪, 随着数据量的积累, 大数据与机器学习得到了快速发展, 迎来了繁荣时期. 2006年, “深度学习模型”被提出, 该模型具有多个隐藏层, 模拟了人脑神经网络的连接方式, 通

**引用格式:** 徐艺莹, 冯士东, 王利民, 等. 机器学习在非晶合金原子重排事件研究中的应用. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2025, 55: 286105

Xu Y Y, Feng S D, Wang L M, et al. Application of machine learning in the study of atomic rearrangement events in amorphous alloys (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2025, 55: 286105, doi: 10.1360/SSPMA-2024-0362

过逐层初始化提高训练效率,使模型具备强大的学习能力<sup>[4]</sup>. 基于深度神经网络的机器学习取得了飞跃性的发展,并在多个领域产生了卓越的研究成果. 例如,在围棋比赛中,谷歌公司开发的AlphaGo机器人战胜了人类选手;卷积神经网络可对医学影像有效分类和检测,提高医学诊断效率<sup>[5]</sup>;机器学习在金融领域也有应用,它能够预测市场趋势,进行风险评估<sup>[6]</sup>;自动驾驶作为一项新技术,依赖于机器学习进行,通过机器学习感知环境,决策和规划路线<sup>[7]</sup>. 此外,机器学习在计算机视觉和自然语言处理等领域也有广泛应用并取得显著成效,如机器翻译、文本分类、语音识别和对话系统等<sup>[8]</sup>. 2022年,ChatGPT聊天机器人由OpenAI公司正式发布,掀起了又一波人工智能热潮. ChatGPT是专注于自然语言处理的聊天工具,能够实现阅读文字,识别图像,生成文本结果等功能. 截至2024年8月,OpenAI称其热门聊天机器人ChatGPT每周活跃用户超过2亿,AI技术与社会的深度融合正在逐步实现. 2024年,诺贝尔物理学奖授予John J. Hopfield和Geoffrey E. Hinton,以表彰他们利用人工神经网络实现机器学习的奠基性发现和发明. 机器学习正在开启一个数据驱动的新时代,其发展充满无限可能.

在材料科学的发展过程中,出现了多种研究方法. 早期的研究多依赖于以经验为基础的试错法进行,研究者们通过实践不断改进材料的制备工艺,提高其性能. 此后,材料的研究逐渐转向更系统和科学的方法,过渡到基于知识驱动和物理理论的研究方式,发展出一系列经典的理论,为预测材料的性能提供了坚实的科学基础,并为推动新材料的设计提供有力的理论依据,如描述材料在不同应力条件下行为的位错的热激活理论、解释物质扩散的菲克定律以及与电子在周期性势场中运动相关的能带理论等. 然而,试错法往往耗时耗力,且难以在微观角度解释材料性能背后的机制;基于物理驱动的理论模型往往具有平均场意义,给研究带来一定的局限性. 20世纪以来,材料微观结构表征设备的研发成功以及计算模拟手段的应用,使得材料科学进入快速发展阶段. 随着信息技术的不断进步和大数据时代的到来,科研人员希望从海量数据中挖掘有用的信息,机器学习应运而生. 机器学习由于具有高效、低成本和功能强大的优点,逐渐受到了材料科学研究者的青睐. 过去几十年里,材料科学领域的数据积累量急剧增加,为基于大数据的机器学习提供

了发展的契机. 相较于传统的基于经典理论的研究,机器学习方法具有解决复杂、多体、多维度数据,并从中厘清物理规律的优势. 机器学习为材料科学研究提供了提取信息的强大工具<sup>[9-12]</sup>. 值得注意的是,机器学习的成功依赖于高质量的数据和算法. 通过机器学习,研究者能够建立材料微观结构、成分、工艺与宏观性能之间的关系,推动数据驱动、特征搜索与材料设计的新范式,为材料科学研究带来新的机遇.

## 2 常用机器学习算法简介

机器学习是人工智能的一个分支,它通过算法和大量数据进行学习,无需明确的人工编码和干预. 简而言之,机器学习能够让计算机从大量数据中自主学习,并根据所学经验对新数据做出预判和决策. 机器学习主要包括监督学习、无监督学习和强化学习,具体如图1所示. 监督学习依赖已标记的数据进行模型训练,可分为分类和回归两类. 与之相反,无监督学习不对数据进行标记,而是让机器自行分析并推断数据结构,通常应用于降维和聚类. 强化学习则通过与环境的交互进行学习,常应用于无人驾驶等领域. 无论采用何种学习方式,机器都能从海量数据中提取有用信息,并训练一套特定的规则. 这些规则像是存放在黑箱中的内容,只有机器能够理解并将其用于科学研究.

图2展示了常见的监督学习和无监督学习模型的基本原理. 监督学习包括人工神经网络(Artificial Neural Network, ANN)、支持向量机(Support Vector Ma-

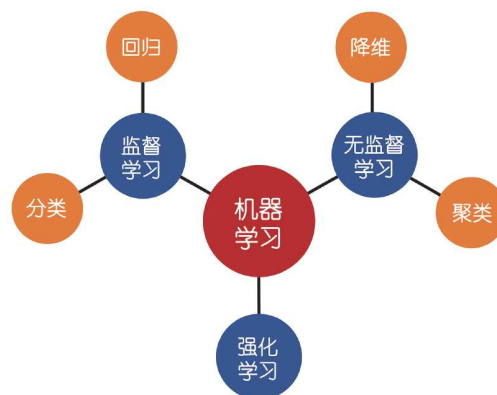


图1 (网络版彩图)机器学习分类  
Figure 1 (Color online) Machine learning classification.

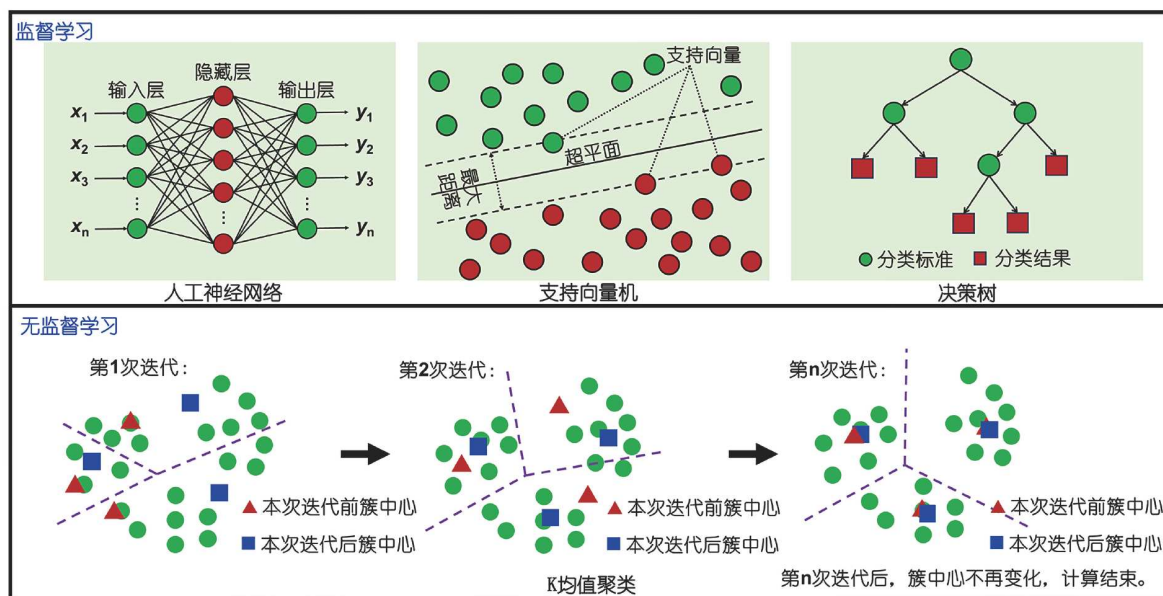


图 2 (网络版彩图)常用机器学习模型. (a) 人工神经网络; (b) 支持向量机; (c) 决策树; (d) K均值聚类

**Figure 2** (Color online) Common machine learning models. (a) Artificial neural networks; (b) support vector machines; (c) decision trees; (d) K-means clustering.

chine, SVM)和决策树(Decision Tree)等模型, 无监督学习中最具代表性的是K均值聚类(K-means).

人工神经网络模型<sup>[13,14]</sup>通过正向传播和反向传播两个阶段进行训练. 在正向传播阶段, 数据经过各层神经元处理, 最终在输出层生成预测结果. 接着, 通过计算预测值与真实值之间的损失, 评估模型的准确性, 并在反向传播中通过梯度下降法调整网络中的权重和偏置值, 以优化模型参数. 随着训练的进行, 损失逐渐减小, 直至达到预定的阈值或趋于稳定, 训练完成.

支持向量机<sup>[15]</sup>的核心在于寻找一个最佳分类超平面, 以有效区分不同类别的数据点. 对于线性可分问题, 可以直接找到分类超平面; 而对于线性不可分问题, 则引入软间隔, 允许一定量的错误以实现更好的分类效果. 对于非线性问题, 使用核函数将低维空间中的数据映射到高维空间, 在高维空间中进行分类. 由于数据的复杂性, SVM在实际应用中可能无法正确分类所有样本, 此时需引入惩罚因子来调节分类效果<sup>[16]</sup>.

决策树<sup>[17]</sup>是一种通过树状结构将复杂问题分解为多个简单问题的机器学习模型. 它由多个节点组成, 通过每个节点进行条件判断, 最终通过树的分支输出分类结果. 当问题足够简单或节点深度达到预设值时,

决策过程终止. 这种自上而下的决策方式能在短时间内处理大量数据并得出可行性结果. CART (Classification and Regression Trees)是常见的决策树算法之一.

K均值聚类<sup>[18]</sup>是一种无监督学习方法, 通过计算样本间的距离, 将样本分为K个簇. 该方法不需要任何先验知识. K-means算法首先随机选择K个样本作为初始簇的中心, 然后将每个样本分配到最近的簇, 计算每个簇中所有点的均值并作为新的簇中心. 重复该过程, 直至簇中心不再改变为止. 该方法简单高效, 但它对初始聚类中心的选择较为敏感, 同时需要合理设定K值的大小.

### 3 机器学习在原子重排事件研究中的应用

非晶合金, 也称为金属玻璃, 是一种内部结构由金属键连接的特殊金属材料. 与含有离子键或共价键的材料不同, 由于金属键的存在, 金属材料通常难以自然形成玻璃态结构, 因此非晶合金的天然生成极为困难<sup>[19]</sup>. 1960年, Au-Si非晶合金的意外发现, 标志着非晶合金研究的重大进展, 并推动了该领域的迅速发展<sup>[20]</sup>.

通常情况下, 金属高温熔体在自然冷却时会形成



具有有序晶体结构的金属材料. 然而, 在快速冷却条件下, 原子来不及有序排列, 从而形成非晶合金<sup>[21,22]</sup>. 非晶合金的结构具有长程无序、短程有序的特征. 传统晶体金属材料具有有序的结构, 变形通常通过位错滑移来耗散外加应力, 因此表现出良好的塑性. 然而, 由于非晶合金的无序结构, 其变形主要依赖于剪切带, 并伴随大量原子的重排<sup>[23]</sup>. 剪切带内的原子结构不稳定, 容易在外加载荷下失稳, 导致脆性断裂, 进而影响材料的安全性, 这严重制约了非晶合金在工程领域的应用<sup>[24]</sup>.

在探索非晶合金变形机制的过程中, 几种经典理论应运而生, 其中最具代表性的是自由体积(Free Volume)理论<sup>[25]</sup>和剪切转变区(Shear Transformation Zone, STZ)理论<sup>[26]</sup>. 自由体积理论将单个原子的跃迁视为变形的基本单元, 认为非晶合金中的自由体积在外加应力下降低了原子跃迁所需克服的能垒. 自由体积的聚集导致局部区域的软化, 进而引发变形. 剪切转变区理论则认为, 原子团簇作为变形单元, 在外加应力作用下发生局部流动, 从而引发更多STZ的形成, 并最终导致宏观尺度上的剪切带产生. 这些理论为解释非晶合金的变形机制奠定了重要基础. 然而, 这些理论在实际应用中存在一定的局限性. 例如, 自由体积理论缺乏明确的自由体积定义, 难以精确量化; 而剪切转变区理论则未能充分揭示局域流变与微观结构及性能之间的关系.

现有的变形机理仍然存在局限性, 这增加了理解非晶合金变形行为的难度. 非晶合金的变形过程中伴随着大量原子的重排, 因此, 研究这些原子重排事件成为揭示其变形机制的关键之一. 材料科学中“结构决定性能”的范式已被广泛接受. 非晶合金独特的结构与性能吸引了众多科学家的关注. 然而, 由于非晶合金结构的模糊性, 研究其重排事件面临诸多挑战. 幸运的是, 基于大数据的机器学习方法为非晶合金重排事件的研究提供了新的途径和机遇. 各种机器学习方法在原子重排事件研究中都得到了应用, 尤其是人工神经网络、支持向量机和基于决策树的梯度提升决策树(Gradient Boosting Decision Tree, GBDT)<sup>[27]</sup>及极端梯度提升树(eXtreme Gradient Boosting, XGBoost)<sup>[28]</sup>算法在识别原子重排方面应用最为广泛. 此外, 集成机器学习模型在玻璃研究中也已被广泛应用. 本节将简要介绍这些机器学习方法在识别原子重排中的应用.

### 3.1 ANN与原子重排

在机器学习领域, ANN通过模拟生物大脑神经元之间的连接方式而建立起模型. ANN模型基本结构按照输入信息是否有反馈可分为前馈神经网络和反馈神经网络. 在前馈神经网络中, 数据从输入层出发, 经过每一层神经元的加工处理, 逐层传播直至到达输出层. 在此过程中, 每层神经元只接收来自前一层的信息, 并将结果传递至下一层, 而不会将信息传递给同层或其他层的神经元. 卷积神经网络(Convolutional Neural Networks, CNN)<sup>[29]</sup>、全连接神经网络(Fully Connected Neural Network, FCN)<sup>[30]</sup>以及多层感知机(Multilayer Perceptron, MLP)<sup>[31]</sup>是几种经典的前馈神经网络模型. 在反馈神经网络中, 神经元不仅能够接收来自其他神经元的输入, 还能够接收来自自身的反馈信息. 与前馈神经网络不同, 反馈神经网络的神经元具备记忆能力, 这意味着它们在不同的时间点可以呈现出多种状态. 循环神经网络(Recurrent Neural Network, RNN)<sup>[29]</sup>和长短期记忆网络(Long Short-Term Memory, LSTM)<sup>[32]</sup>等隶属于反馈神经网络.

Fan和Ma<sup>[33]</sup>使用称为高斯加权空间密度的多维结构函数描述原子局域结构, 并将这种结构表示方法与CNN结合, 以高度准确性在二维和三维模型玻璃中识别出具有高重排倾向的原子. 对比具有极高和极低重排倾向原子的局域结构特征, 揭示了影响局部力学响应及其各向异性的关键原子堆积特征, 即具有高重排倾向的原子周围壳层更分散且强度不均匀, 而重排倾向低的原子周围壳层更锐利且强度更均匀. 此外, 这些模型还可以推广到不同加工历史和不同组成的非晶合金样本上, 显示出良好的适用性.

Jung等人<sup>[34]</sup>受物理原理启发, 仅从初始结构计算粗粒化局域密度、粗粒化势能、局域Voronoi周长和势能的局域方差作为特征, 预测玻璃转变过程中的动力学异质性. 训练使用包含三个隐藏层的MLP模型, 并将其称为GlassMLP. GlassMLP的隐藏层分别含有2, 10和10个神经元, 使用随机梯度下降算法, 采用了Adam优化器更新模型的权重, 在较短的时间内完成了训练. 在不同时间尺度下分析动力学异质性, 短时间内动力学活跃区域较小且分散, 随着时间的推移, 这些区域会增长并合并成更大的活跃集群. 且随着温度的降低, 动力学异质性的结构来源增加, 异质性增强. GlassMLP仅通过系统初始状态的结构信息, 就能预测

出在玻璃化转变过程中的活跃区域以及这些区域的形状和分布情况; 定量预测四点动力学相关性, 在玻璃化转变过程中理解和预测系统的动态行为; 在预测长时间动力学方面与实际动力学定量一致; 具有跨系统尺寸的可转移性, 能够有效地探测空间动态相关性随温度的演化, 揭示随着温度变化重排区域几何形状的变化, 这些都是许多现有技术难以实现的. 将物理启发的与结构相关的特征输入与神经网络相结合, 有助于深入理解玻璃转变过程.

### 3.2 SVM与原子重排

支持向量机是一种二分类模型, 特别适用于将非晶合金中的重排原子与非重排原子区分开来. 许多研究已经利用SVM探讨原子重排事件, 一些研究将结构特征作为SVM的输入参数来识别重排原子, 而另一些研究则综合考虑结构、热力学和动力学特征作为输入参数.

#### 3.2.1 结构作为SVM的特征参量

$G_a(i; r) = \sum_{j \in a} e^{-(r_{ij}-r)^2/2\sigma^2}$  是描述原子径向分布信息的有效参数, 通过对中心原子周围径向密度进行高斯加权得到<sup>[35,36]</sup>. 具体来说,  $r_{ij}$  表示中心原子  $i$  与原子  $j$  之间的距离,  $\sigma$  是高斯分布的标准差, 通常与距离区间相关,  $r$  为径向距离. 它能够全面捕捉原子  $i$  的局域环境信息. Wu 等人<sup>[37]</sup> 利用  $G_a(i; r)$  提取原子  $i$  的空间结构信息, 选择径向距离为 2–10 Å,  $\sigma$  为 0.1 Å, 每个原子获得 160 个结构参数作为 SVM 的特征参量. 使用  $p_{\text{hop}}(i; t) = \sqrt{\left\langle \left( r_i - \langle r_i \rangle_B \right)^2 \right\rangle_A \left\langle \left( r_i - \langle r_i \rangle_A \right)^2 \right\rangle_B}$  从动力学角度识别原子是否发生重排<sup>[38,39]</sup>, 其中  $\langle \dots \rangle_A$  和  $\langle \dots \rangle_B$  分别表示区间  $A$  和  $B$  上的平均值. 如果在区间  $A$  和  $B$  之间没有发生重排, 则  $\langle \dots \rangle_A$  和  $\langle \dots \rangle_B$  将近似相等, 导致  $p_{\text{hop}}$  值极小. 如果发生重排, 平均位置将发生明显变化,  $p_{\text{hop}}$  值增大. 研究者将  $p_{\text{hop}}$  值排在前 1% 的原子视为重排原子, 并设置标签  $y = 1$ , 其余原子标签为  $y = -1$ . 他们利用 SVM 构建了结构与重排事件之间的关联, 定义了“软度”, 从而有效区分了重排原子与非重排原子. 随后进行了结构分析, 结果表明, 系统内存在一个明显的特征长度  $r_c = 2.85$  Å, 这与系统对分布函数(RDF)的第一个峰值位置近似相等. 当距离低于  $r_c$  时, 重排原子具有更

多的近邻, 而当距离高于  $r_c$  时, 重排原子分布松散. 且软度随着局部结构各向异性( $|\mathbf{u}|$ )的增加而增加, 高软度值原子表现出更高层次的局域结构畸变, 重排倾向更大.

#### 3.2.2 结构、热力学和动力学作为SVM的特征参量

结构是描述重排事件的关键, 但结构对成分具有强依赖性, 且不同的结构可能表现出相似的性能<sup>[40]</sup>. 因此, 仅从结构角度来描述重排事件既单调又具有挑战性. 热力学和动力学参数在重排事件的描述中同样起着至关重要的作用. 在热力学参数中, 熵被认为是与重排事件密切相关的关键量, 用于表征体系的无序程度. 高熵区域在变形过程中更容易发生剪切转变, 并且这些区域倾向于聚集形成剪切带. 振动熵是一个重要的热力学参数, 直接与材料的刚度相关<sup>[41]</sup>. 动力学参数在重排事件的研究中也至关重要. 非晶合金中存在大量低频振动模式<sup>[42,43]</sup>, 过冷液体中的不可逆重排起源于低频振动软模式, 而低频振动参与度较高的区域更倾向于发生原子重排<sup>[44,45]</sup>. 振动均方位移是另一个关键的动力学参数, 用于描述原子振动偏离平衡位置的程度. 高振动均方位移值的区域具有更高的重排事件发生概率<sup>[46]</sup>. 此外, 表示原子在相邻势能谷底之间跨越所需的激活能也是关键的动力学参数. Wang 等人<sup>[47]</sup> 的研究发现, 低激活能的局部结构对应着高非仿射形变位移, 从而增加了重排事件发生的概率.

Lu 等人<sup>[48]</sup> 在研究中使用 SVM 对比了不同参数作为机器学习特征参量在识别原子重排能力上的表现. 他们使用受试者工作特征曲线(Receiver Operating Characteristic curve, ROC)下面积(Area Under Curve, AUC)来评估 SVM 模型的分类能力<sup>[49]</sup>, AUC 值为 1 时表示全部分类正确; AUC 值为 0.5 时表示随机分类, 分类能力较差. AUC 值越大, SVM 的分类能力越强. 图 3 中的参数包括 Voronoi 多面体体积<sup>[50,51]</sup>、基于 Voronoi 多面体计算得到的局域五重对称性( $f_5$ )<sup>[52]</sup>、两体过剩熵( $S_2$ )<sup>[53]</sup>、激活能( $E_{\text{act}}$ )<sup>[54]</sup>、振动熵( $S_{\text{vib}}$ )、低频振动参与度( $PF$ )<sup>[55]</sup>、振动均方位移( $vMSD$ )<sup>[46]</sup>和柔性体积( $v_{\text{flex}}$ )<sup>[56]</sup>. 从图 3 可见, 传统结构参数得分普遍较低, 而热力学和动力学参数的得分较高. 研究还通过粗粒化处理这些参数来识别原子重排, 获得了更高的得分. 这表明热力学和动力学信息对于原子重排的识别具有

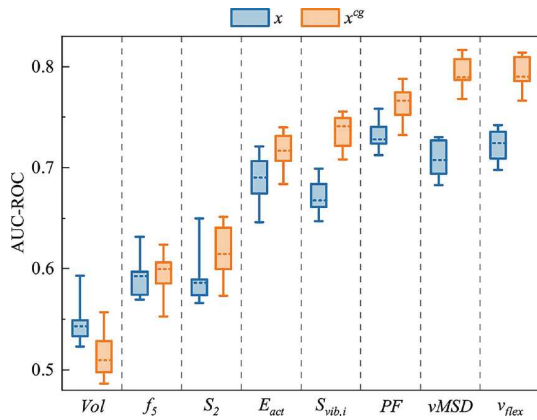


图 3 (网络版彩图)不同参数( $x$ )及其相应粗粒度指标( $x^{cg}$ )的 AUC-ROC 评分. 图片取自文献[48], 已获授权

**Figure 3** (Color online) AUC-ROC scores of different indicators ( $x$ ) and their corresponding coarse-grained indicators ( $x^{cg}$ ). Reprinted with permission from ref. [48].

重要的作用。

此外, Yang 等人[53]充分考虑了原子振动特性和拓扑空间信息, 使用径向对称函数和两体过剩熵作为结构信息, 使用不同温度下平衡的振动均方位移作为热力学参数, 激活能作为动力学参数, 并利用 SVM 构建了“集成玻璃缺陷(IGD)”参数来识别原子重排. 图4(a)展示了 IGD 的空间分布, 白色气泡表示重排事件的位置.  $\Delta D_{\min}^2$  是非仿射位移的定量度量, 可以定量反映原子重排的程度, 气泡大小与  $\Delta D_{\min}^2$  值的大小成比例. 由图可见, 重排原子更倾向于出现在 IGD 值较高的红色区域. 图4(b)显示 IGD 与  $\Delta D_{\min}^2$  成正相关, 证明了 IGD 识

别原子重排的有效性. 此外, IGD 还可以用作非晶合金短时低频振动异常(玻色峰强度)以及长时  $\alpha$  弛豫和扩散不均匀性的度量.

Xu 等人[57]通过研究势能图谱(PEL)来探讨非晶合金中结构、热力学和动力学在原子重排过程中的作用. 原子重排通常会导致 PEL 内部固有结构的改变[58], 这表明在变形过程中, 微观结构的演变与原子无序水平及熵的变化密切相关, 特别是振动熵与重排事件密切相关. 激活能是非晶合金中的重要参数[59,60], 原子在相邻势能谷之间的跃迁需要跨越能量障碍, 而激活能的大小反映了原子发生不可逆重排的难易程度[61]. 微观结构作为变形的载体, 热力学熵则可以指示剪切带的形成, 而动力学激活能影响剪切转变的激活过程. 在对 Cu-Zr 体系的非晶合金进行研究时, 计算了结构 ( $G_a(i; r)$  提取的原子径向分布信息)、热力学(振动熵)和动力学(激活能)作为特征参数, 其中径向距离取 1–8 Å,  $\sigma$  为 0.2 Å, 每个原子获得 70 个结构参数, 1 个振动熵参数和 1 个激活能参数, 最终形成输入至 SVM 模型的特征参量  $X_i = \{x_1, x_2, \dots, x_{72}\}$ . 通过绝热准静态剪切来计算非仿射形变量 ( $D^2$ ) 作为力学响应, 并将这些特征作为 SVM 模型的输入参数. 模型中的原子标签  $y_i$  通过  $D^2$  值确定, 当应变达到总应变的 2% 时, 将  $D^2$  值排在前 10% 的原子标记为重排原子, 其余标记为非重排原子. 重排原子标签设为  $y_i = 1$ , 非重排原子标签设为  $y_i = -1$ , 最终构建了结构原子重排 ( $S_{AR}$ ) 参数.

图5展示了  $S_{AR}$  与结构的关联. 结构分析采用 Voronoi 多面体法[62], 发现二十面体结构 ((0 0 12 0)) 及类二

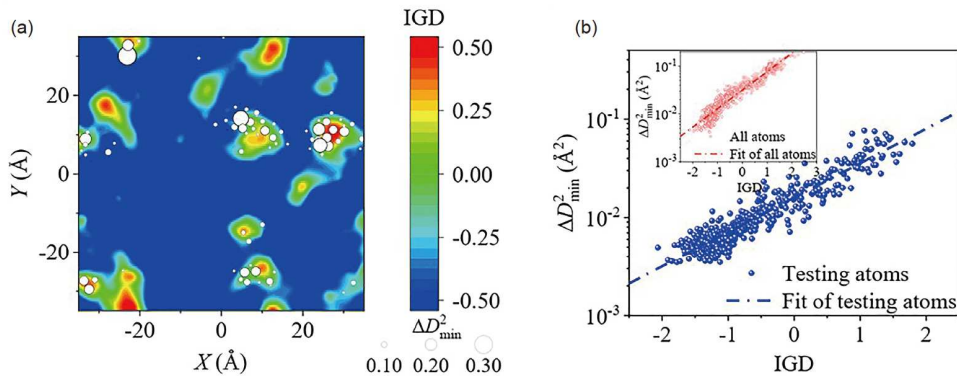


图 4 (网络版彩图) IGD 预测非热剪切转变的能力[53]. (a) IGD 的等高线图; (b) IGD 与  $\Delta D_{\min}^2$  之间的相关性. 插图包括训练集和测试集. 图片取自文献[53], 已获授权

**Figure 4** (Color online) Capacity of IGD in predicting athermal shear transformations. (a) Contour map of IGD; (b) correlation between IGD and  $\Delta D_{\min}^2$ . The inset includes both training and testing set. Reprinted with permission from ref. [53].



十面体结构(如 $\langle 0\ 2\ 8\ 1 \rangle$ ,  $\langle 0\ 2\ 8\ 2 \rangle$ 等)含量越多的局部区域, 其结构稳定性越高, 原子越不易发生重排, 这些区域通常具有更高的屈服强度. 数据显示, 随着 $S_{AR}$ 的增加, 稳定结构如二十面体和类二十面体减少, 而不稳定的类液态结构增多, 这表明高 $S_{AR}$ 原子类似于流动性较高的液态原子, 局部区域结构更为松散.

图6进一步分析了 $S_{AR}$ 与热力学及动力学的关联性. 将 $S_{AR} > 0$ 的原子视为软原子,  $S_{AR} < 0$ 的原子视为硬原子. 结果显示, 软原子相较于硬原子, 具有更低的激活能和更高的振动熵. 研究还提出, 可以通过识别类液态结构、低激活能及高振动熵区域来揭示原子重排事件的起源.

### 3.3 GBDT, XGBoost与原子重排

GBDT和XGBoost均属于梯度提升算法的范畴. 这类算法的核心思想是将多个弱学习器的预测结果加权

合并, 以提升模型的预测精度. 弱学习器通常按顺序构建, 每个新的弱学习器都试图修正前一个模型的残差. GBDT的弱学习器通常是CART决策树, 它通过迭代的方式, 每次新增一个弱学习器, 新树的目标是减小上一轮残差的平方误差. 每棵树都是基于前一棵树的预测误差来进行训练, 最终将所有树的预测结果加权平均得到最终的预测值. XGBoost是对GBDT的扩展, 它通过引入正则化控制模型的复杂度, 减少过拟合的风险, 采用多阶导数优化来加快算法的收敛速度. 此外, XGBoost还支持并行处理, 能够自动处理数据中的缺失值, 具有更多的参数调节选项, 能够进一步提高模型的性能和适用性.

Wang和Jain<sup>[63]</sup>基于GBDT识别非晶合金中的原子重排现象. 通过对Cu-Zr体系的异质性结构进行了详细编码, 并在短程和中程范围内提取特征, 使用间隙分布结构信息作为GBDT的特征输入, 以非仿射形变量作

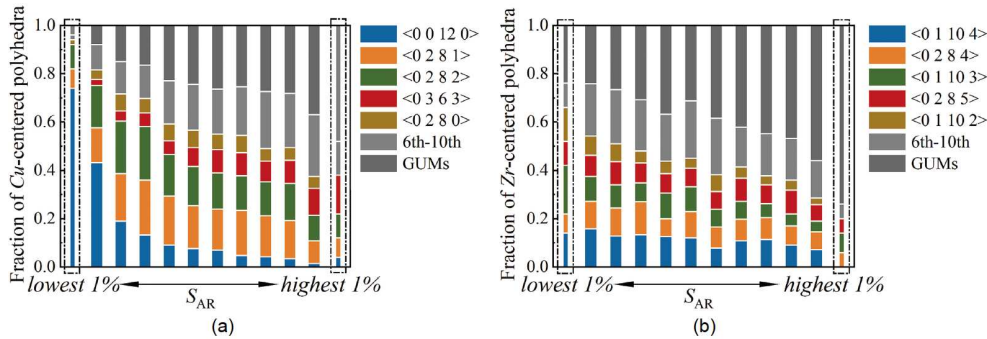


图 5 (网络版彩图)  $S_{AR}$ 与局域原子堆积结构的相关性<sup>[57]</sup>. (a) 以Cu原子为中心; (b) 以Zr原子为中心. 图片取自文献<sup>[57]</sup>, 已获授权

**Figure 5** (Color online) Correlation between  $S_{AR}$  and local atomic packing structure. (a) Centered on the Cu atoms; (b) centered on the Zr atoms. Reprinted with permission from ref. <sup>[57]</sup>.

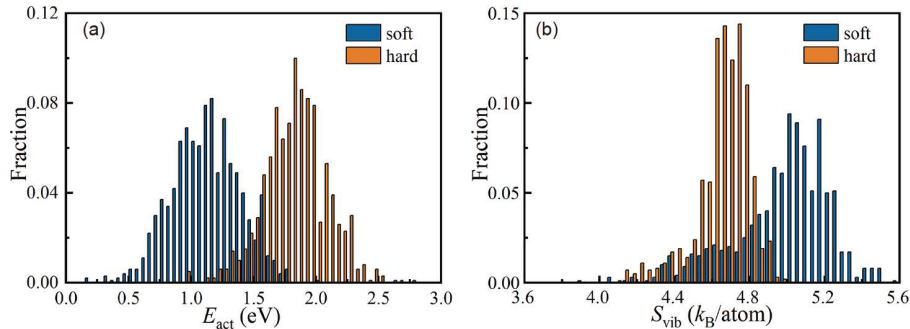


图 6 (网络版彩图)  $S_{AR}$ 识别软原子和硬原子的激活能分布与振动熵分布<sup>[57]</sup>. (a) 激活能分布; (b) 振动熵分布. 图片取自文献<sup>[57]</sup>, 已获授权

**Figure 6** (Color online) Distribution of activation energy and vibrational entropy for soft and hard atoms identified by  $S_{AR}$ . (a) Distribution of activation energy; (b) distribution of vibrational entropy. Reprinted with permission from ref. <sup>[57]</sup>.

为变形的动态响应, 构建了“淬火软度”(QS)参数, 用于识别原子重排的位点. 图7(a)展示了应变为4.0%时 $\text{Cu}_{65}\text{Zr}_{35}$ 非晶合金非仿射形变量的空间分布, 白色圆圈表示 $\text{QS} > 0.5$ 原子的位置, 即机器学习预测的原子重排位点. 可以看出, 原子重排倾向于发生在QS较大的区域. 由于引入了SRO之外的特征而增加了长度尺度, QS的分布也捕捉到了重排原子的一些聚集趋势. 图7(b)显示了当使用未变形构型作为输入时, 原子被机器学习预测为重排原子的可能性. 随着 $D^2$ 值的增加, 这种可能性增大. 利用未变形结构预测大应变下原子重排的能力, 解释了淬火结构中异质性的长期遗传性. 这一发现表明, 在剪切带形成之前, 弹性范围内的大部分重排事件由初始结构的QS分布决定. 因此, 改变非晶合金的加工历史可以影响QS分布, 从而影响随后的变形响应. 此外, 严格的泛化测试表明, 使用间隙分布作为结构特征的机器学习模型, 不仅能有效识别特定Cu-Zr体系中的原子重排, 还能在不重新训练的情况下推广到不同的成分, 甚至不同的化学体系(如Al-Sm, Ni-Nb和Fe-P), 同样取得了良好效果.

随后, Wang等人<sup>[47]</sup>使用XGBoost算法, 基于间隙分布特征研究了非晶合金中的热激活 $\beta$ 事件. 非晶合金中存在大量 $\beta$ 事件<sup>[64,65]</sup>, 从势能图谱的角度来看, 这些事件对应着原子在亚能谷之间的跳跃, 激活能是描述这些热激活 $\beta$ 事件的关键参量. Wang等人将原子分类为 $p_h$  (原子属于高激活能类别的概率)和 $p_l$  (原子属于

低激活能类别的概率), 成功预测了热激活 $\beta$ 事件, 并将预测结果推广到原子重排事件. 结果如图8(a)所示,  $p_l$ 与 $D^2$ 之间有显著的正相关性, 表明低激活能区域更易于发生原子重排. 图8(b)展示了使用 $p_l$ 识别最大5%  $D^2$ 的剪切转变区时的AUC值, 该值达到0.810, 表明间隙分布预测热激活 $\beta$ 事件的有效性可以推广到原子重排事件, 这两类事件可能具有相同的结构起源. 这种定量转移测试能够将同一机器学习模型扩展到更多的性质研究, 对非晶合金研究具有重要的推动作用. 通过将相同的结构参数和机器学习模型应用于更多任务, 并在更广泛范围内进行定量测试, 有助于深化对非晶合金中结构与性质之间关系的理解.

以上研究创新性地使用了短程和中程间隙分布作为结构特征, 基于GBDT和XGBoost两种机器学习模型识别原子重排, 实现了任务间的转移. 这两种模型在识别非晶合金原子重排事件中起到了关键作用, 成为研究非晶合金结构与性质之间关系的桥梁.

### 3.4 集成算法与原子重排

除单独的机器学习模型外, 集成机器学习模型在玻璃研究中的应用. 集成模型通常可以捕捉数据中更多的信息和模式, 比单一模型更准确. 并且集成模型因结合了多个模型的预测, 在未见过的数据上往往具有更好的泛化能力. Amazon研发的AutoGluon库弱化了初学者对于机器学习使用的困难, 简化了训练和

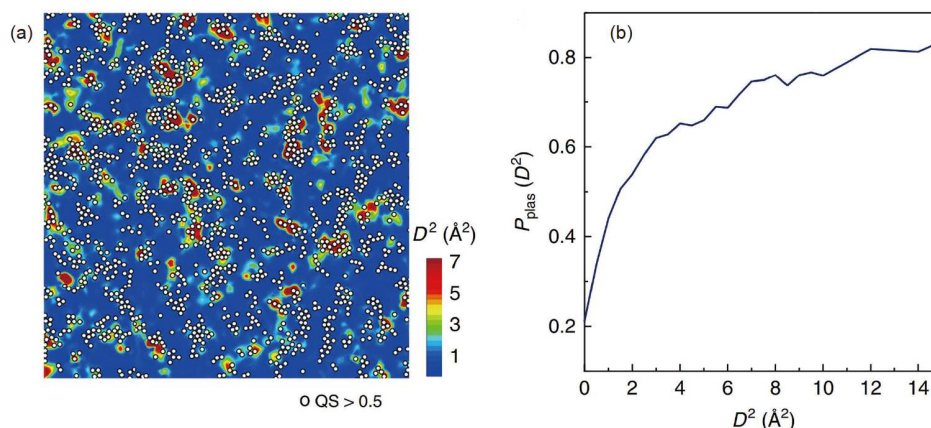


图7 (网络版彩图)使用间隙特征和机器学习预测重排原子<sup>[63]</sup>. (a) 机器学习模型预测的重排原子(白色圆圈)与 $D^2$ 分布之间的关系; (b) 由ML模型预测的重排原子(QS > 0.5)比例与在4.0%应变下的实际 $D^2$ 值的函数关系. 图片取自文献<sup>[63]</sup>, 已获授权

**Figure 7** (Color online) Predicting rearranged atoms using interstice features and machine learning. (a) Relationship between the rearranged atoms predicted by the ML model (white circle) and the  $D^2$  distribution; (b) the fraction of rearranged atomic (QS > 0.5) predicted by the ML model as a function of the actual  $D^2$  value at 4.0% strain. Reprinted with permission from ref. <sup>[63]</sup>.



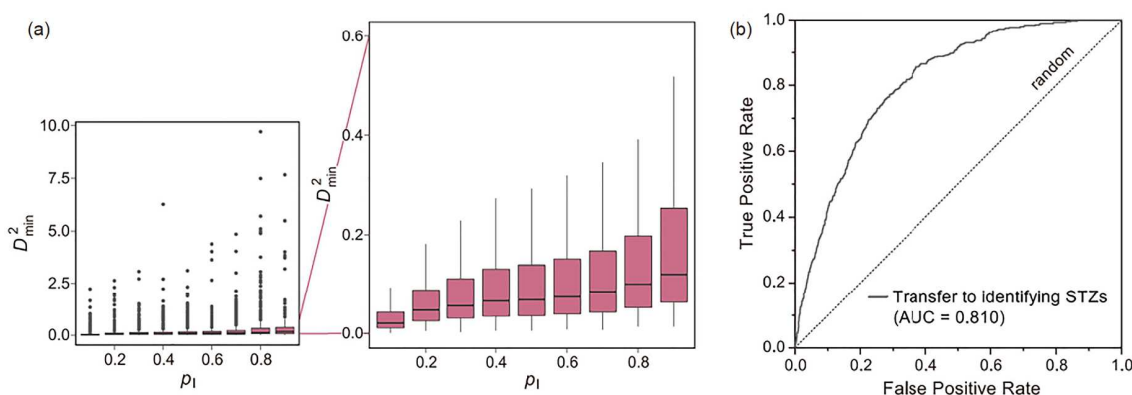


图 8 (网络版彩图)转移机器学习模型识别STZs<sup>[47]</sup>. (a)  $L-E_{\text{act}}$ 模型的概率估计值 $p_l$ 与 $D_{\min}^2$ 之间的相关性; (b) 当使用 $p_l$ 识别最大 5%  $D_{\min}^2$ 的STZs时, 受试者工作特征(ROC)曲线和曲线下面积(AUC). 图片取自文献<sup>[47]</sup>, 已获授权

**Figure 8** (Color online) Transferring ML model to identifying STZs. (a) Correlation between the probability estimates,  $p_l$ , from the  $L-E_{\text{act}}$  model and the  $D_{\min}^2$ , (b) ROC and AUC when using the  $p_l$  to identify STZs with the largest 5%  $D_{\min}^2$ . Reprinted with permission from ref. <sup>[47]</sup>.

调优过程, 并通过其自动化的特性和强大的模型集成能力, 使构建高性能的机器学习模型成为可能.

玻璃材料在低温下表现出的热力学和动力学性质与晶体材料有很大不同. 这些性质受到结构缺陷的控制, 尤其是罕见的量子隧道双能级系统(Two-Level Systems, TLS)在非常低的温度下主导玻璃的物理特性. TLS涉及原子在局部区域内的重新排列, 这种重新排列在玻璃的势能景观中形成了双井(Double Well, DW)势. 由于TLS的密度极低, 直接在计算模拟中识别它们非常困难. Ciarella等人<sup>[66]</sup>基于超稳态玻璃, 使用一对固有结构(Inherent Structure, IS)计算的能差和位移等信息作为输入, 基于AutoGluon库进行机器学习, 使用不同机器学习模型(如CatBoost, LightGBM和ExtraTree等)的集成, 预测双井势和量子分裂(Quantum Splitting, QS), 进而有效识别TLS. 并计算Shapley值, 评估每个输入参数对于模型的贡献, 对机器学习模型做出合理解释. 两个IS之间的能差是量子分裂的主要预测因子; 最大单粒子位移也是重要信息, 用于判断两个IS是否相似; 此外, 总位移也是识别TLS的重要信息. 集成算法不仅提高了识别TLS的效率, 还为研究玻璃的微观结构和宏观性质之间的关系提供了新的工具.

## 4 总结与展望

在非晶合金研究领域, 原子重排事件的识别一直

是理解变形机制的核心挑战之一. 本文探讨了ANN, SVM, GBDT, XGBoost以及集成机器学习算法在原子重排事件研究中的应用. 这些算法利用结构、热力学和动力学参数, 有效识别了原子重排事件, 并揭示了变形的微观机制. 具体而言, ANN通过结构特征识别重排原子. SVM通过结合微观结构、振动熵和激活能等参数, 成功预测了变形的潜在区域. GBDT和XGBoost算法通过编码间隙分布结构特征, 对重排事件进行有效识别, 并将其扩展到不同非晶合金体系中. 集成算法则从量子角度对玻璃态材料的原子重排事件进行识别.

机器学习在识别非晶合金原子重排方面展现出广阔的应用前景, 但也面临着数据质量、模型可解释性和泛化能力等挑战. 展望未来, 随着机器学习算法的不断更新, 计算能力的不断进步, 通过结合数据驱动技术、结构搜索方法和优化算法, 有望在非晶合金的变形研究中开发出更为有效的预测模型, 并对模型进行合理解释. 这不仅将深化我们对原子尺度下变形机制的理解, 还将为非晶合金设计和性能优化开辟新的路径, 进而实现对其稳定性和性能长期影响的更精确控制. 未来的研究可以引入更多结构和动力学特征参量, 并尝试整合不同机器学习算法, 进一步提升模型的预测能力、泛化性以及可解释性. 机器学习正在推动非晶合金原子重排事件识别领域的研究进展, 为理解和预测材料的变形行为提供了全新的工具和方法.

## 参考文献

- 1 McCulloch W S, Pitts W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bull Math Biophys*, 1943, 5: 115–133
- 2 Rosenblatt F. The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain. *Psychol Rev*, 1958, 65: 386–408
- 3 Rumelhart D E, Hinton G E, Williams R J. Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, 1986, 323: 533–536
- 4 Hinton G E, Salakhutdinov R R. Reducing the dimensionality of data with neural networks. *Science*, 2006, 313: 504–507
- 5 Esteva A, Robicquet A, Ramsundar B, et al. A guide to deep learning in healthcare. *Nat Med*, 2019, 25: 24–29
- 6 Mashrur A, Luo W, Zaidi N A, et al. Machine learning for financial risk management: A survey. *IEEE Access*, 2020, 8: 203203–203223
- 7 Zhu Z, Zhao H. A survey of deep RL and IL for autonomous driving policy learning. *IEEE Trans Intell Transp Syst*, 2022, 23: 14043–14065
- 8 Alharbi S, Alrazgan M, Alrashed A, et al. Automatic speech recognition: Systematic literature review. *IEEE Access*, 2021, 9: 131858–131876
- 9 Butler K T, Davies D W, Cartwright H, et al. Machine learning for molecular and materials science. *Nature*, 2018, 559: 547–555
- 10 Schmidt J, Marques M R G, Botti S, et al. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science. *npj Comput Mater*, 2019, 5: 83
- 11 Wu Z W, Li R. Revisiting the breakdown of stokes-einstein relation in glass-forming liquids with machine learning. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2020, 63: 276111
- 12 Yu L, Guo X, Wang G, et al. Extracting governing system for the plastic deformation of metallic glasses using machine learning. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2022, 65: 264611
- 13 Goh G B, Hodas N O, Vishnu A. Deep learning for computational chemistry. *J Comput Chem*, 2017, 38: 1291–1307
- 14 Zhang G P. Neural networks for classification: A survey. *IEEE Trans Syst Man Cybern C*, 2000, 30: 451–462
- 15 Cortes C, Vapnik V. Support-vector networks. *Mach Learn*, 1995, 20: 273–297
- 16 Chang C C, Lin C J. LIBSVM: A library for support vector machines. *ACM Trans Intell Syst Technol*, 2011, 2: 1–27
- 17 Safavian S R, Landgrebe D. A survey of decision tree classifier methodology. *IEEE Trans Syst Man Cybern*, 1991, 21: 660–674
- 18 Ralambondrainy H. A conceptual version of the K-means algorithm. *Pattern Recogn Lett*, 1995, 16: 1147–1157
- 19 Wang W H. Brief history, present and future of metallic glasses (in Chinese). *Chin J Nat*, 2022, 44: 173–181 [汪卫华. 金属玻璃的过去、现在和未来. *自然杂志*, 2022, 44: 173–181]
- 20 Klement W, Willens R, Duwez P. Non-crystalline structure in solidified gold-silicon alloys. *Nature*, 1960, 187: 869–870
- 21 Wang W H. The nature and properties of amorphous matter (in Chinese). *Prog Phys*, 2013, 22: 177–351 [汪卫华. 非晶态物质的本质和特性. *物理学进展*, 2013, 22: 177–351]
- 22 Chen H S, Miller C E. A rapid quenching technique for the preparation of thin uniform films of amorphous solids. *Rev Sci Instrum*, 1970, 41: 1237–1238
- 23 Feng S D, Wang L M, Liu R P. Correlation between microstructure and deformation of metallic glasses (in Chinese). *J Yanshan Univ*, 2020, 44: 247–253 [冯士东, 王利民, 刘日平. 金属玻璃微观结构与变形的关联性. *燕山大学学报*, 2020, 44: 247–253]
- 24 Feng S D, Li L, Liu Y D, et al. Heterogeneous microstructure of  $Zr_{46}Cu_{46}Al_8$  nanoglasses studied by quantifying glass-glass interfaces. *J Non-Crystalline Solids*, 2020, 546: 120265
- 25 Spaepen F. A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses. *Acta Metall*, 1977, 25: 407–415
- 26 Argon A S. Plastic deformation in metallic glasses. *Acta Metall*, 1979, 27: 47–58
- 27 Friedman J H. Greedy function approximation: A gradient boosting machine. *Ann Stat*, 2001, 29: 1189–1232
- 28 Qi C T, Guesrin C. XGBoost: A scalable tree boosting system. In: *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. San Francisco: ACM, 2016. 785–794
- 29 LeCun Y, Bengio Y, Hinton G. Deep learning. *Nature*, 2015, 521: 436–444
- 30 Scabini L F S, Bruno O M. Structure and performance of fully connected neural networks: Emerging complex network properties. *Phys A-Stat Mech Appl*, 2023, 615: 128585
- 31 Popescu M C, Balas V E, Perescu-Popescu L, et al. Multilayer perceptron and neural networks. *WSEAS Trans Circ Syst*, 2009, 8: 579–588
- 32 Lindemann B, Müller T, Vietz H, et al. A survey on long short-term memory networks for time series prediction. *Procedia CIRP*, 2021, 99: 650–655
- 33 Fan Z, Ma E. Predicting orientation-dependent plastic susceptibility from static structure in amorphous solids via deep learning. *Nat Commun*,

- 2021, 12: 1506
- 34 Jung G, Biroli G, Berthier L. Predicting dynamic heterogeneity in glass-forming liquids by physics-inspired machine learning. *Phys Rev Lett*, 2023, 130: 238202
- 35 Cubuk E D, Schoenholz S S, Rieser J M, et al. Identifying structural flow defects in disordered solids using machine-learning methods. *Phys Rev Lett*, 2015, 114: 108001
- 36 Schoenholz S S, Cubuk E D, Sussman D M, et al. A structural approach to relaxation in glassy liquids. *Nat Phys*, 2016, 12: 469–471
- 37 Wu Y, Wang W H, Guan P, et al. Identifying packing features of atoms with distinct dynamic behaviors in metallic glass by machine-learning method. *Sci China Mater*, 2021, 64: 1820–1826
- 38 Smessaert A, Rottler J. Distribution of local relaxation events in an aging three-dimensional glass: Spatiotemporal correlation and dynamical heterogeneity. *Phys Rev E*, 2013, 88: 022314
- 39 Candelier R, Widmer-Cooper A, Kummerfeld J K, et al. Spatiotemporal hierarchy of relaxation events, dynamical heterogeneities, and structural reorganization in a supercooled liquid. *Phys Rev Lett*, 2010, 105: 135702
- 40 Wang Y J, Wei D, Han D, et al. Does structure determine property in amorphous solids (in Chinese)? *Chin J Theor Appl Mech*, 2020, 52: 303–317 [王云江, 魏丹, 韩懂, 等. 非晶态固体的结构可以决定性能吗? *力学学报*, 2020, 52: 303–317]
- 41 Fultz B. Vibrational thermodynamics of materials. *Prog Mater Sci*, 2010, 55: 247–352
- 42 Ding J, Patinet S, Falk M L, et al. Soft spots and their structural signature in a metallic glass. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2014, 111: 14052–14056
- 43 Ghosh A, Chikkadi V, Schall P, et al. Connecting structural relaxation with the low frequency modes in a hard-sphere colloidal glass. *Phys Rev Lett*, 2011, 107: 188303
- 44 Mosayebi M, Ilg P, Widmer-Cooper A, et al. Soft modes and nonaffine rearrangements in the inherent structures of supercooled liquids. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 105503
- 45 Chen K, Manning M L, Yunker P J, et al. Measurement of correlations between low-frequency vibrational modes and particle rearrangements in quasi-two-dimensional colloidal glasses. *Phys Rev Lett*, 2011, 107: 108301
- 46 Widmer-Cooper A, Harrowell P, Fynewever H. How reproducible are dynamic heterogeneities in a supercooled liquid? *Phys Rev Lett*, 2004, 93: 135701
- 47 Wang Q, Ding J, Zhang L, et al. Predicting the propensity for thermally activated  $\beta$  events in metallic glasses via interpretable machine learning. *npj Comput Mater*, 2020, 6: 194
- 48 Lu X, Feng S, Li L, et al. Depicting defects in metallic glasses by atomic vibrational entropy. *J Phys Chem Lett*, 2023, 14: 6998–7006
- 49 Bradley A P. The use of the area under the ROC curve in the evaluation of machine learning algorithms. *Pattern Recogn*, 1997, 30: 1145–1159
- 50 Feng S D, Zhao W, Jiao W, et al. Effect of Voronoi volume on fluctuation at initial deformation of amorphous alloys. *J Appl Phys*, 2014, 116: 133520
- 51 Slotterback S, Toiya M, Goff L, et al. Correlation between particle motion and Voronoi-cell-shape fluctuations during the compaction of granular matter. *Phys Rev Lett*, 2008, 101: 258001
- 52 Peng H L, Li M Z, Wang W H. Structural signature of plastic deformation in metallic glasses. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 135503
- 53 Yang Z Y, Wei D, Zaccane A, et al. Machine-learning integrated glassy defect from an intricate configurational-thermodynamic-dynamic space. *Phys Rev B*, 2021, 104: 064108
- 54 Ding J, Li L, Wang N, et al. Universal nature of the saddle states of structural excitations in metallic glasses. *Mater Today Phys*, 2021, 17: 100359
- 55 Yang J, Wang Y J, Ma E, et al. Structural parameter of orientational order to predict the boson vibrational anomaly in glasses. *Phys Rev Lett*, 2019, 122: 015501
- 56 Ding J, Cheng Y Q, Sheng H, et al. Universal structural parameter to quantitatively predict metallic glass properties. *Nat Commun*, 2016, 7: 13733
- 57 Xu Y, Feng S, Lu X, et al. Identification of atomic rearrangements in amorphous alloys based on machine learning. *J Mater Res Tech*, 2023, 27: 7864–7870
- 58 Fan Y, Iwashita T, Egami T. Energy landscape-driven non-equilibrium evolution of inherent structure in disordered material. *Nat Commun*, 2017, 8: 15417
- 59 Chu W, Wang Z, Ren N, et al. Entropy-driven atomic activation in supercooled liquids and its link to the fragile-to-strong transition. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2023, 66: 246112



- 60 Ding Y, Song L, Wang Z, et al. Unveiling the time-temperature dependence of metastability of supercooled liquid using nano-calorimetry. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2024, 67: 236113
- 61 Wei D, Yang J, Jiang M Q, et al. Revisiting the structure-property relationship of metallic glasses: Common spatial correlation revealed as a hidden rule. *Phys Rev B*, 2019, 99: 014115
- 62 Ma E. Tuning order in disorder. *Nat Mater*, 2015, 14: 547–552
- 63 Wang Q, Jain A. A transferable machine-learning framework linking interstice distribution and plastic heterogeneity in metallic glasses. *Nat Commun*, 2019, 10: 5537
- 64 Xing G H, Hao Q, Zhu F, et al. Correlating dynamic relaxation and viscoelasticity in metallic glasses. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2024, 67: 256111
- 65 Zhang L, Wang Y, Yang Y, et al. The anelastic origin of mechanical cycling induced rejuvenation in the metallic glass. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2023, 66: 286111
- 66 Ciarella S, Khomenko D, Berthier L, et al. Finding defects in glasses through machine learning. *Nat Commun*, 2023, 14: 4229

## Application of machine learning in the study of atomic rearrangement events in amorphous alloys

XU YiYing, FENG ShiDong<sup>\*</sup>, WANG LiMin & LIU RiPing

*Center for Advanced Structural Materials, State Key Laboratory of Metastable Materials Science and Technology, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China*

*\*Corresponding author (email: [shidongfeng@ysu.edu.cn](mailto:shidongfeng@ysu.edu.cn))*

Amorphous alloys, as a novel class of metastable metallic materials, are characterized by high strength and excellent wear resistance. However, their brittleness at room temperature limits their practical applications. Deformation in amorphous alloys typically occurs through shear bands, accompanied by extensive atomic rearrangements. Overcoming the brittleness of amorphous alloys at room temperature hinges on the accurate identification of these atomic rearrangement events, which remains a significant challenge. In recent years, machine learning has shown great promise in this area. This review highlights the progress made in applying machine learning algorithms, such as artificial neural network (ANN), support vector machines (SVM), gradient boosting decision trees (GBDT), and extreme gradient boosting (XGBoost), to the study of atomic rearrangement events in amorphous alloys. It explores their role in uncovering the underlying micro-mechanisms and anticipates future developments in the application of machine learning to amorphous alloy deformation studies. By integrating machine learning with traditional materials science approaches, new insights are offered for the optimized design and performance prediction of amorphous alloys.

**amorphous alloy, machine learning, atomic rearrangement**

**PACS:** 61.43.Fs, 02.70.-c, 71.55.Jv

**doi:** [10.1360/SSPMA-2024-0362](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2024-0362)