

搜索



中国科学院沈阳分院

SHENYANG BRANCH, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

(<http://www.syb.cas.cn/>)

MENU

[首页](#) (</>) >> [院地合作](#) (</>) >> [科技动态](#) (</>)

科技动态

金属所研究人员在Science期刊发表利用机器学习进行材料筛选研究的述评文章

撰稿：金属研究所 发布时间：2022-10-09 【大小】

根据应用环境需求，定制合金材料的成分及工艺，突破“试错法”高成本、低效率的材料设计瓶颈，是材料科学家的终极梦想。近20年来，合金成分由单主元传统合金发展到多主元高熵合金，极大拓展了合金的成分空间。如何从近乎无限的成分空间中高效筛选出具有特定性能的合金成分，是材料研究者所面临的巨大挑战。近年来，机器学习在材料的成分筛选和性能优化中的应用发展迅速。中国科学院金属研究所胡青苗研究员和杨锐研究员应Science期刊邀请，发表了题为《对更好合金的无尽寻索》的述评文章，对利用机器学习进行材料筛选的研究现状进行了评论和展望。该述评文章于10月6日在线发表(Vol. 378, Issue 6615, pp. 26-27.)。

机器学习方法一般利用人工神经网络，对现有成分-性能数据进行训练，快速获得成分-性能关系，进而筛选出具有目标性能的成分。机器学习的效率和精度依赖于用于训练的成分-性能数据集。相对于近乎无限的成分空间，已有的成分-性能数据往往相当稀少。因此，对机器学习算法进行适当优化和策略设计尤为重要。目前，机器学习方法在因瓦高熵合金、铁电材料、压电材料等的成分筛选中都有了较为成功的应用范例。特别是德国马普学会钢铁研究所Dierk Raabe课题组在最近一期Science上发表的研究工作，结合机器学习、第一性原理及热力学计算和实验验证，高效地从百万种可能成分组合中筛选出17种Fe-Co-Cr-Ni及Fe-Co-Cr-Ni-Cu因瓦高熵合金。

述评文章指出，机器学习方法目前大多应用于功能材料的筛选。原因是这类材料的目标性能主要决定于材料成分，对显微组织并不敏感。然而，结构材料的力学性能如强度、韧塑性等不仅受成分影响，且具有高度的显微组织敏感性，而显微组织又决定于合金成分及制备工艺，这使得结构材料力学性能的影响因素错综复杂。另一方面，实际应用中，往往同时对结构材料的多种性能有一定要求。这些因素大大增加了机器学习在结构材料设计中应用的难度。

文章最后总结，随着机器学习算法的发展、实验数据的积累以及对成分-工艺-组织-性能关系机理理解的深化，有望实现面向指定性能需求的定制化材料成分及工艺优化设计。

全文链接(<https://doi.org/10.1126/science.ade5503>)



(<http://www.cas.cn/>)



(<http://bszs.conac.cn/sitmethod=show&id=08D>)

© 2021 中国科学院沈阳分院 辽ICP备05000863号-1 (<https://beian.miit.gov.cn/#/Integrated/index>) 网站标识码:bm48000029

电话: 024-23983359 传真: 024-23983343 邮箱: syb@mail.syb.ac.cn

地址: 辽宁省沈阳市和平区三好街24号 邮编: 110004

