

引用格式: 张思雨, 李日. 机器学习在轻质合金研究中的应用[J]. 中国材料进展, 2025, 44(11): 1009-1017.

ZHANG S Y, LI R. Applications of Machine Learning in Lightweight Alloy Research[J]. Materials China, 2025, 44(11): 1009-1017.

# 机器学习在轻质合金研究中的应用

张思雨, 李日

(河北工业大学材料科学与工程学院, 天津 300401)

**摘要:** 轻质合金以其低密度和高强度特性在航空航天、汽车、电子和建筑等领域具有重要应用。然而, 传统的基于经验的“试错法”和基于理论的模拟计算方法, 需要进行大量实验, 周期长、成本高, 难以满足现代轻质合金的发展需求。随着人工智能和数据驱动技术的迅猛发展, 机器学习作为目前人工智能领域应用最广泛、发展最快的分支之一, 已广泛应用于材料科学, 显著加速了新材料的发现和优化。对机器学习计算在轻质合金研究中的应用进展进行了综述, 介绍了机器学习在材料研究中的工作流程, 阐述了机器学习在轻质合金性能预测、成分设计以及工艺优化方面的研究进展及应用实例。最后, 对当前机器学习在轻质合金领域的研究中面临的挑战进行了总结, 并对其发展前景进行了展望。

**关键词:** 机器学习; 轻质合金; 性能预测; 成分设计; 工艺优化

**中图分类号:** TP181; TG146.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1674-3962(2025)11-1009-09

## Applications of Machine Learning in Lightweight Alloy Research

ZHANG Siyu, LI Ri

(School of Materials Science and Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China)

**Abstract:** Lightweight alloys, with their low density and high strength characteristics, hold significant applications in aerospace, automotive, electronics and construction fields. However, traditional experience-based “trial and error” methods and theoretical simulation methods require a large number of experiments, which are time-consuming and costly, making it difficult to meet the demands of modern lightweight alloy development. With the rapid development of artificial intelligence and data-driven technologies, machine learning, as one of the most widely used and fastest-growing branch of artificial intelligence, has been extensively applied in materials science, significantly accelerating the discovery and optimization of new materials. This paper reviews the progress of machine learning calculations in the research of lightweight alloys, introduces the workflow of machine learning in materials research, and elucidates the research progress and application examples of machine learning in predicting the properties, composition design and process optimization of lightweight alloys. Finally, the challenges faced by current machine learning research in the field of lightweight alloys are summarized, and the development prospects are discussed.

**Key words:** machine learning; lightweight alloys; performance prediction; composition design; process optimization

### 1 前言

轻质合金是指具有低密度和高强度特性的金属合金, 主要包括铝合金、镁合金和钛合金。这些合金凭借其卓越的力学性能和轻质特性, 在航空航天、汽车、电子和

建筑等关键领域发挥着极为重要的作用<sup>[1]</sup>。随着社会的进步和科学技术的发展, 人们对轻质合金提出了更高的要求, 开始追求具有更高性能和更广泛应用潜力的新型轻质合金。然而, 传统的基于经验的“试错法”和基于理论的模拟计算方法, 需要进行大量实验, 周期长、成本高, 难以适应当代工业迅猛发展的需求<sup>[2, 3]</sup>。

近年来, 随着人工智能和大数据技术的迅猛发展, 机器学习作为人工智能领域应用最广泛、发展最迅速的分支, 已被广泛应用于医学<sup>[4, 5]</sup>、化工<sup>[6, 7]</sup>、材料<sup>[8]</sup>等众多领域, 并取得了巨大的成功。关于机器学习在材料领域的研究进展, 研究者已从不同的角度进行了归纳、综

收稿日期: 2024-06-26 修回日期: 2024-08-08

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51975182)

第一作者: 张思雨, 男, 1997年生, 硕士研究生

通讯作者: 李日, 男, 1966年生, 教授, 博士生导师,

Email: sdzllr@163.com

DOI: 10.7502/j.issn.1674-3962.202406028

述<sup>[9-11]</sup>。例如,王海伟等<sup>[12]</sup>综述了机器学习在钢铁研究中的应用,赵鼎祺等<sup>[13]</sup>简述了机器学习在辅助高熵合金进行合金设计的应用,王雅哲等<sup>[14]</sup>对机器学习在复合材料中的应用进展进行了汇总和展望,曾小勤等<sup>[15]</sup>对第一性原理计算和机器学习在镁合金研究中的应用以及亟待解决的问题进行了展望。

本文以轻质合金为重点关注对象,从“机器学习在材料研究中的工作流程”、“机器学习在轻质合金研究中的应用”、“机器学习在轻质合金研究中的挑战与展望”等 3 个方面进行综述,旨在为轻质合金研究人员提供创新思路和参考。

## 2 机器学习在材料研究中的工作流程

在当今材料科学研究中,机器学习已成为一种革命性的工具,极大地加速了新材料的发现和现有材料性能的优化。通过分析大量数据,机器学习揭示了材料属性与其组成和加工过程之间的复杂关系,为材料设计提供科学依据和预测工具。本节主要介绍机器学习在轻质合金研究中的应用流程,包括确定研究目标、数据收集与预处理、模型选择及模型应用。图 1 展示了机器学习在轻质合金研究中的主要流程。

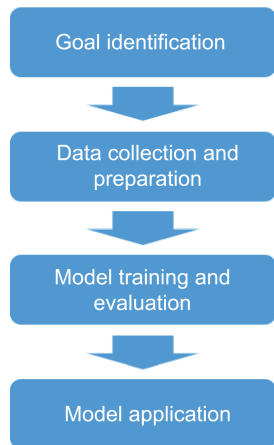


图 1 机器学习在轻质合金研究中的主要流程

Fig. 1 Main workflow of machine learning in lightweight alloy research

### 2.1 确定研究目标

在轻质合金研究领域,任何机器学习技术的初始步骤都是确定与轻质合金特性相关的研究目标,这通常依赖于专家经验、领域知识和轻质合金开发的具体需求<sup>[16]</sup>。这一阶段至关重要,因为目标特性必须能够从现有数据中提取。此外,目标特性还必须根据实验或模拟进行明确定义。因此,在选择机器学习工具之前,识别合金的目标特性至关重要。

只有在确定研究目标后,才能根据这一目标来确定

需要收集的数据类型和机器学习模型需要预测的结果。通常情况下,需要收集的数据应包含影响研究目标的相关参数以及研究目标对应属性参数,而模型的输出通常为与研究目标相关的属性参数,如合金的抗拉强度、延伸率等力学性能或合金的相种类。

### 2.2 数据收集与预处理

数据可以从公开的文献、数据库和计算模拟等途径获取。通常,数据包括模型的输入(特征)和输出(目标性能)。输入一般包括合金成分、元素组成、原子参数、结构参数及工艺参数,而输出通常包括硬度、导电性、抗拉强度、延伸率及相结构。

数据是机器学习的基础,决定了机器学习预测能力的上限<sup>[17]</sup>。机器学习模型的性能与所收集数据的数量和质量密切相关。数据量的要求通常与选择的机器学习算法有关,深度学习和神经网络算法往往需要更大的数据集,而支持向量机、决策树、K 最近邻等较简单的机器学习算法更适用于小规模数据集<sup>[18]</sup>。此外,数据集的质量与数据的不确定性有关,数据的误差通常来源于实验或计算过程中的误差。为了减少原始数据中的误差和噪声,需要对数据进行预处理,以获得可靠的数据集<sup>[19]</sup>。数据预处理一般包括删除错误或不兼容的数据、对原始数据进行归一化或正则化处理、检查出版物和数据库数据来源的真实性和可靠性等。除了这些常规步骤,还需要进行特征处理环节,包括特征相关性分析、设计和选择。通过计算不同特征之间的皮尔逊相关系数,识别出对预测目标有显著影响的特征,并去除冗余或相关性较低的特征<sup>[20]</sup>。基于原始特征构造二次特征,如特征的平方、交互项和对数变换等,以捕捉更复杂的特征关系,从而提升模型的预测能力<sup>[21, 22]</sup>。此外,在材料研究中,常用的特征构造方法还有将元素物理化学参量与材料的元素含量相结合来构造特征均值因子、特征方差因子<sup>[3, 23]</sup>和平均原子尺度参数<sup>[24]</sup>。应用特征选择算法(如递归特征消除、过滤式特征选择、嵌入式特征选择等)<sup>[25, 26]</sup>保留对预测目标最有贡献的特征,减少特征数量,避免模型过拟合,同时确保所选特征具有物理意义和可解释性。

### 2.3 模型训练与评估

根据“没有免费午餐”定理<sup>[27]</sup>,由于不同算法基于不同的数学原理,且具有不同的模型结构,算法对数据的契合程度决定了模型的预测能力。因此,选择最优的机器学习模型是机器学习过程中的关键步骤之一。

在模型选择过程中,常用的方法包括随机分割法、K 折交叉验证法和留一交叉验证法。随机分割法将数据集随机分为训练集和测试集,例如 70% 的数据用于训练

模型, 30%的数据用于测试模型。其优点在于实现简单、速度较快, 缺点是评估结果不够稳定, 且数据利用率较低。K 折交叉验证法将数据集划分为  $k$  个互斥子集, 每次用其中  $k-1$  个子集训练模型, 剩下的 1 个子集用于测试, 重复  $k$  次, 最终结果为这  $k$  次评估结果的平均值。这种方法的优点是评估结果稳定、数据利用率高, 一般情况下  $k$  取 5 或 10。留一交叉验证法是 K 折交叉验证法的特例, 其中  $k$  等于数据集的大小, 每次留一个数据点作为测试集, 其余数据点作为训练集, 重复  $k$  次 ( $k$  为数据集大小)。这种方法的数据利用率最高, 评估结果非常

可靠, 但计算开销极大, 因此适用于数据量较少的情况。

根据问题的性质(回归问题或分类问题), 选择相应的评价指标。对于回归问题, 常用的评价指标包括均方误差(MSE)、均方根误差(RMSE)和决定系数( $R^2$ )<sup>[28]</sup>; 对于分类问题, 则可以使用准确率、召回率、F1 分数和混淆矩阵等指标, 表 1 为回归问题和分类问题中常用的评价指标。通过这些评价指标可以确定最优模型, 并进一步优化模型的超参数, 从而选择表现最好的模型, 确保其具有最佳的泛化能力和预测准确性。

表 1 机器学习算法及主要原理

Table 1 Machine learning algorithms and their main principles

Algorithm	Category	Task	Core Principle
Decision tree	Supervised learning	Classification	Predicts class labels by learning decision rules based on data features
Random forest	Supervised learning	Classification	Performs classification using a voting mechanism across multiple decision trees to improve accuracy
K-nearest neighbors	Supervised learning	Classification	Classifies data by voting based on the classes of the nearest $k$ neighboring data points
Support vector machine	Supervised learning	Regression	Finds a function that can accurately predict target values
Linear regression	Supervised learning	Regression	Models the linear relationship in data by minimizing the sum of squared errors
Ridge regression	Supervised learning	Regression	An improved version of linear regression that prevents overfitting by adding an L2 regularization term
K-means	Unsupervised learning	Clustering	Divides data into $k$ clusters to minimize the variance within each cluster
Hierarchical clustering	Unsupervised learning	Clustering	Builds a hierarchical structure of clusters by gradually merging or splitting groups
Principal component analysis	Unsupervised learning	Dimensionality Reduction	Converts data with multiple variables into linearly independent variables through orthogonal transformation
Autoencoder	Unsupervised learning	Dimensionality Reduction	Uses a neural network to compress high-dimensional data into low-dimensional data

## 2.4 模型应用

机器学习建模的最终目标是指导材料的设计和开发。通过构建输入特征与目标性能之间的映射关系, 利用机器学习模型预测未知样本的目标性能, 从而帮助探索最佳的材料组成和加工方法<sup>[29]</sup>。此外, 机器学习模型可以与优化算法结合, 允许在更广泛的全局范围内高效探索, 实现材料设计的优化。采用这些方法得到的最优材料设计结果需通过实验验证, 以确保设计的可靠性。

在合金成分和工艺参数的优化设计中, 实验是迭代设计过程中不可或缺的一环。实验验证应采用与数据收集相同的实验条件和方法, 以最小化实验系统误差, 确保结果的准确性和可靠性。通过这种方式, 机器学习不仅能加速材料发现, 还能通过实验验证进一步优化材料性能, 从而实现高效、可靠的材料设计和开发。

## 3 机器学习在轻质合金研究中的应用

### 3.1 机器学习在轻质合金性能预测中的应用

在材料科学中, 轻质合金的性能、成分和工艺是密切相关的 3 个方面, 成分和工艺决定了合金的性能。然而, 轻质合金成分复杂、加工工艺多变, 给预测轻质合金的性能带来了很大的困难。目前, 使用拉伸、压缩、剪切等实验方法测试性能存在着成本高、耗时长以及操作复杂等缺点。通过机器学习中的回归算法, 可以建立轻质合金性能与成分、加工工艺之间的关系, 从而可以迅速预测其性能。

人工神经网络是较早应用于轻质合金研究中用于探索成分、工艺与性能之间关系的机器学习模型。Lan 等<sup>[30]</sup>采用工业 A380 铝合金数据集, 以合金成分、工艺

参数为输入,建立了预测铝合金力学性能的人工神经网络模型,并用粒子群算法对神经网络进行优化,具体优化过程如图 2 所示,所建立的 PSO-BPNN 模型具有较高的可靠性和泛化性,其预测抗拉强度的均方根误差为 6.19 MPa,预测延伸率的均方根误差为 0.08%。Zhao

等<sup>[31]</sup>基于神经网络的钛合金纤维组织识别模型和性能预测模型,通过模型融合建立了钛合金成分-组织-性能异构数据模型,成功实现了利用钛合金成分和微观组织图像预测对应的应力-应变曲线。

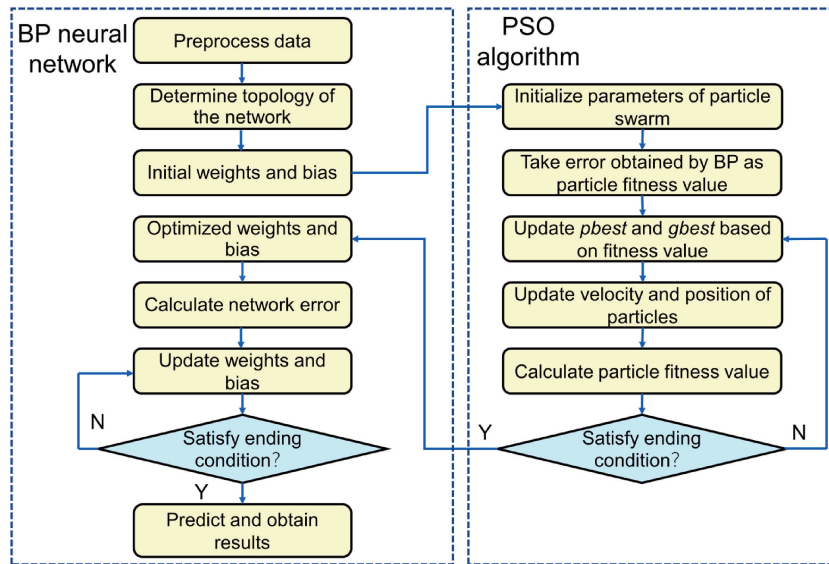


图 2 粒子群算法优化 BP 神经网络原理图<sup>[30]</sup>

Fig. 2 Schematic diagram of particle swarm optimization for BP neural networks<sup>[30]</sup>

在轻质合金性能预测方面,如何使用尽可能少的数据进行高精度预测是具有挑战性的问题。近年来,随着人工智能技术的迅速发展,出现了支持向量机、决策树、随机森林等新的机器学习算法,这些算法具有高效的数据处理能力和优越的泛化性能,已经可以用来解决此问题。Orme 等<sup>[32]</sup>基于镁合金中的孪晶可以调控其强度和塑性的特点,采用决策树模型来预测 AZ31 镁合金中孪晶的形核情况,以此来判断合金的强度和塑性。所建立的决策树模型在预测性能上表现出色,正确率高达 75%,然而未对不同组织的样品进行评估,因此在普适性方面有待进一步验证。Bhat 等<sup>[33]</sup>首先采用无监督机器学习算法对所收集到的数据进行分类,在分类结果的基础上对分类得到的数据子集采用随机森林模型建立预测铝合金力学性能的回归模型,结果表明采用分类后数据所建立的随机森林模型能够根据铝合金成分和加工工艺参数实现对铝合金力学性能的准确预测。这种先分类后进行回归预测的方法为提高预测准确性提供了可行的路径。

除了上述传统的机器学习研究方法,分子动力学(molecular dynamics, MD)和密度泛函理论(density functional theory, DFT)是计算材料科学中的核心工具,为材料科学研究提供了新的方法。分子动力学模拟可以捕捉材料在不同条件下的微观行为,提供精确的物理性质数

据;密度泛函理论则通过量子力学计算提供材料的电子结构信息。将分子动力学和密度泛函理论与机器学习结合,可以利用高精度数据训练机器学习模型,从而建立更加精确和高效的性能预测模型<sup>[34-36]</sup>。这不仅提高了建模效率和模型精度,还减少了实验成本和时间,同时在实验前提供了可靠的理论指导,从而加速了新材料的开发。

Mokhtari 等<sup>[37]</sup>利用分子动力学模型生成了 150 条数据,这些数据涵盖了不同变形温度、应变速率和镁含量对铝镁合金抗拉强度的影响。随后,他们使用这些数据训练了多种机器学习模型。通过对 18 种机器学习模型的全面比较,发现多项式回归模型和梯度增强树模型在预测合金的强度和刚度方面表现最佳。这项研究不仅填补了铝镁合金性能预测模型的空白,还展示了将分子动力学模拟与机器学习相结合在材料研究中的可行性和优势。同时, Fernández 等<sup>[38]</sup>利用分子动力学模拟获得的高精度数据(输入为加载状态,输出为牵引力矢量)来训练人工神经网络。最终结果表明,基于分子动力学模拟数据训练的人工神经网络模型能够有效捕捉晶界的本构行为。这项研究展示了人工神经网络在处理和理解复杂材料行为方面的潜力,以及分子动力学模拟数据在训练高性能机器学习模型中的价值。王园园等<sup>[39]</sup>采用第一性原理模拟的方法来构建包括钛合金的晶体结构参数、体积模量、

剪切模量和弹性模量的数据集。随后采用随机森林算法进行特征重要性排序来进行特征选择, 最终选出 9 个特征(晶格常数  $a$ 、 $b$ 、 $c$ 、晶胞体积  $V$ 、体积模量  $B$ 、密度  $D$ 、弹性常数  $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{44}$ )作为模型的输入变量, 弹性模量  $E$  作为模型的预测输出值。最后通过模型训练与评估发现, GA-BP 模型的预测效果最佳, 与两组验证合金的预测误差均为 1%。这说明通过该方法可以实现钛合金结构到性能的预测, 大大节省材料的研发成本, 适用于高性能材料的筛选。

### 3.2 机器学习在轻质合金设计中的应用

目前机器学习在轻质合金设计中最广泛的应用是建立轻质合金成分-工艺-性能之间的“盲盒”关系, 然后穷举所有可能的合金成分和工艺, 并用所建立的模型对性能进行预测, 选择符合目标性能的轻质合金进行实验验证。刘笑达等<sup>[40]</sup>根据相关文献建立数据集, 采用 K 折交叉验证, 在线性回归、多层感知器和支撑向量机这 3 种算法中筛选出支撑向量机模型来指导镁合金阳极材料设计。根据支撑向量机的预测结果快速开发出一种性能优异的镁基海水电池用阳极材料, 该材料性能优于商用镁合金阳极材料 AZ61。这不仅缩短了新合金开发周期, 还提高了合金性能预测的准确性, 但是支撑向量机作为一种黑箱模型, 其内部的决策机制仍不是完全透明的。

虽然穷举法能够尽可能全面准确地发现未知成分空间中某些具有潜力的合金, 但是当新合金的成分空间巨大时, 则需要长时间的计算, 计算成本高, 可能导致过度搜索和产生过多的无效实验, 采用启发式优化算法, 通过有限特征空间局部搜索最优解, 可以实现轻质合金的

高效设计。赵婉辰等<sup>[41]</sup>将机器学习模型与 Bayesian 优化测量结合, 确定了高硬度铝合金的最佳成分配比。Zhang 等<sup>[42]</sup>首先基于收集到的铝合金成分与抗拉强度的样本数据建立克里金模型, 随后采用 EGO 优化算法通过 4 次迭代优化, 设计出较数据集中最高抗拉强度高 60 MPa 的新型 2XXX 系铝合金。Salvador 等<sup>[43]</sup>利用 Materials Project 提供的现有弹性数据, 建立了随机森林模型, 并结合密度泛函理论分析, 成功发现了一种具有低弹性模量和高稳定性的钛合金, 其成分为 Ti-14.8Nb-22Zr (质量分数)。

在实际工程应用中, 轻质合金性能的影响因素众多, 性能间交互作用复杂, 比如合金的抗拉强度和延伸率, 强度和导电率等, 往往是相互矛盾、此消彼长的关系。因此, 设计综合性能最优的轻质合金, 一直是合金设计领域的难题。但是机器学习在多目标设计中仍然取得了巨大的成功。Shen 等<sup>[44]</sup>在建立的预测铝合金抗拉强度、屈服强度和延伸率的支撑向量机的基础上, 通过构造关联 3 种力学性能的期望函数  $MOEI = EI_{UTS} \times EI_{YS} \times EI_{EL}$  ( $MOEI$  表示抗拉强度、屈服强度和延伸率的共同期望提升,  $EI_{UTS}$ 、 $EI_{YS}$  和  $EI_{EL}$  分别表示抗拉强度、屈服强度和延伸率的期望提升), 采用贝叶斯算法对构造的期望函数进行寻优, 最终设计出了一种抗拉强度为 432 MPa、屈服强度为 356 MPa、延伸率为 17.4% 的高强度、高塑性铝合金, 实现了对铝合金 3 种性能的同时优化设计。Mi 等<sup>[45]</sup>创新性地使用粒子群优化算法来优化人工神经网络的输入, 从而实现了从目标性能到成分和工艺的反向设计, 具体流程如图 3 所示。首先在建立的 UTS-ANN、YS-ANN 和 EL-ANN 的基础上, 将 3 个人工神经网络(人工神

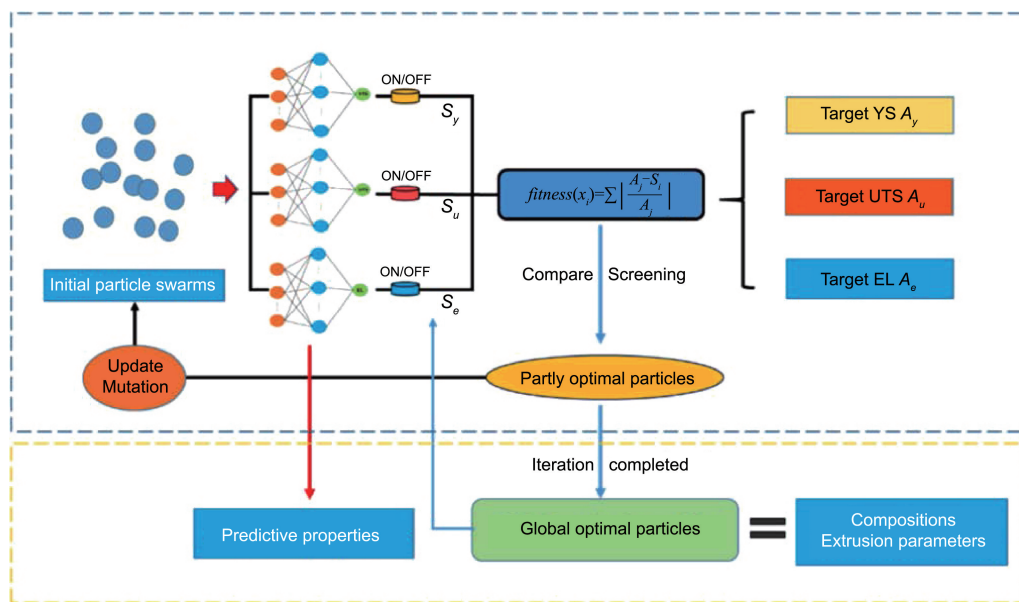


图 3 粒子群算法优化神经网络实现成分设计流程示意图<sup>[45]</sup>

Fig. 3 Schematic diagram of component design process based on neural network optimized by particle swarm optimization algorithm<sup>[45]</sup>

经网络的输出为  $S_j$ ) 并联, 根据需求设定目标性能 ( $A_j$ ), 通过构造适应度函数(式(1)), 采用粒子群算法对输入 ( $x_i$ ) 进行优化, 以达到最小的适应度值, 即获得与目标性能最接近的成分:

$$fitness(x_i) = \sum \left| \frac{A_j - S_j}{A_j} \right| \quad (1)$$

根据设计结果结合实验验证最终设计出 4 款新型镁合金, 它们的力学性能如图 4 所示, 其中包括一种抗拉强度为 400 MPa 且延伸率为 20% 的高强度高塑性镁合金和一种延伸率为 60% 的高塑性镁合金。

Wang 等<sup>[29]</sup> 借鉴生成-对抗策略, 提出了面向性能要求的机器学习设计系统 (machine learning design system, MLDS), 如图 5 所示。该系统包括 3 个子系统, 分别为模型训练、成分设计和性能预测。在模型训练系统中, 包括一个成分预测性能的 C2P 模型和一个性能预测成分的 P2C 模型。在成分设计系统中, 利用 P2C 模型设计符合目标性能要求的成分, 将设计的成分作为 C2P 模型的输入, 将 C2P 模型的预测性能与目标性能进行比较, 判断设计的成分是否符合设计要求, 如果不符合要求, 则重新进行成分设计, 直至设计出满足目标要求的合金成分。随后将 MLDS 用于高强高韧铝合金的设计, 通过系统设计结合实验验证, 逆向研发出 3 种典型候选的高强

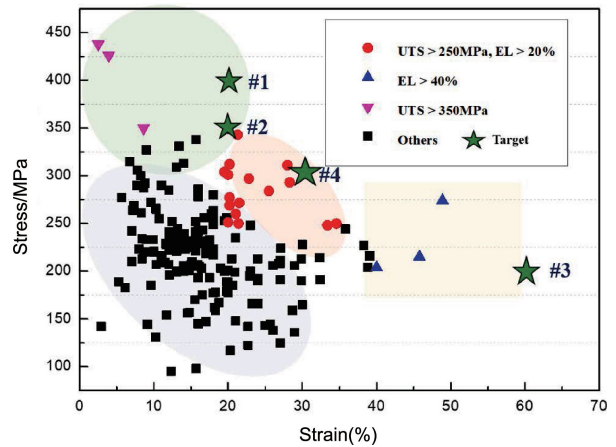


图 4 粒子群优化神经网络所设计的 4 种镁合金的力学性能<sup>[45]</sup>  
Fig. 4 Mechanical properties of four magnesium alloys designed by particle swarm optimization-neural network<sup>[45]</sup>

高韧的新型铝合金, 3 种候选铝合金性能如表 2 所示, 与当前航空航天工业中常用的 AA7136 铝合金性能相当。Jiang 等<sup>[46]</sup> 将 MLDS 系统用于多元铜合金设计, 基于公开文献中的数据样本, 开发出了满足高端集成电路引线框架的高强高导电铜合金, 其抗拉强度高达 800 MPa、导电率为 50% IACS。这也说明了 MLDS 系统作为一种新的合金设计框架, 在合金设计方面具有一定的普适性。

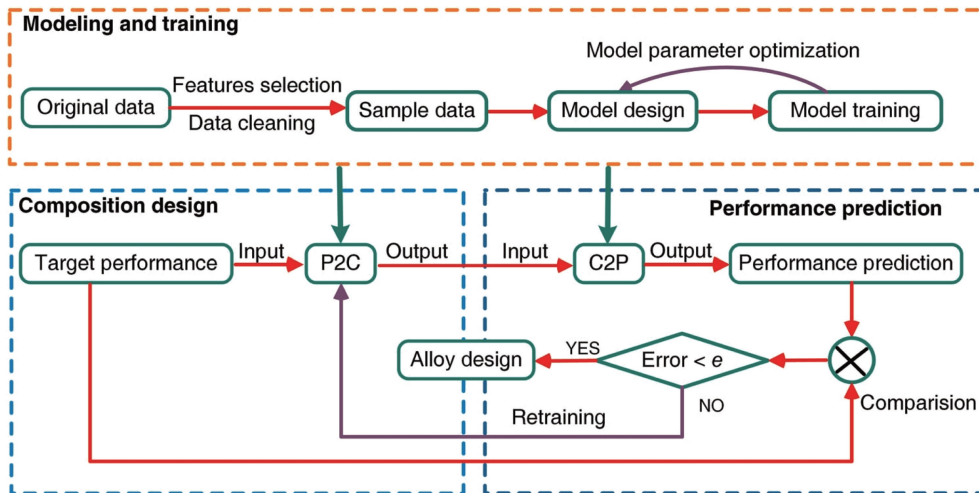


图 5 机器学习设计系统 (MLDS) 流程图<sup>[29]</sup>

Fig. 5 Flowchart of machine learning design system (MLDS)<sup>[29]</sup>

表 2 机器学习设计系统 (MLDS) 设计的 3 种铝合金的力学性能<sup>[29]</sup>  
Table 2 Mechanical properties of three aluminum alloys designed by machine learning design system (MLDS)<sup>[29]</sup>

Experience alloys	UTS/MPa	EL/%
E1	707.5	9.5
E2	726.5	8.5
E3	736.5	7.8

### 3.3 机器学习在轻质合金加工工艺优化中的应用

机器学习可以对轻质合金的工艺参数进行优化, 包括生产工艺参数、热处理工艺参数以及实际应用过程中的加工参数, 这些工艺参数能够显著影响合金的微观结构、最终性能以及服役情况。采用机器学习进行加工工艺优化, 能够快速选择最优工艺参数, 大大缩短研发周期, 减少试验数量。

Guo 等<sup>[47]</sup>针对 7XXX 系列大型铝合金直接冷却铸造过程中容易出现开裂、冷隔等铸造缺陷的问题，考虑到铸造工艺参数控制的复杂性以及传统实验方法成本高且耗时长的难点，采用数值模拟技术将铸造工艺参数对铸锭的模糊区形状、热量传输、残余应力和晶粒组织的影响进行量化。基于数值模拟数据获得铸造工艺参数进而预测铸锭的凝固特性，然后基于预测结果对铸造工艺参数进行优化，结果表明优化后铸锭的缺陷明显减少，具体流程如图 6 所示。然而，他们的研究主要集中在特定类型的铝合金，未来可考虑扩展至其它成分的合金和不同尺寸的铸锭，以验证其广泛适用性。

刘彬等<sup>[48]</sup>采用参数全排列法来优化人工神经网络的超参数，利用 AZ31 镁合金退火工艺参数和力学性能的实验数据来训练人工神经网络。通过参数全排列法确定当隐藏层神经元个数为 8 时(结构示意图如图 7 所示)，模型具有最优性能，其平均相对误差仅为 2.91%，能够准确预测

AZ31 镁合金在不同退火工艺参数下进行热处理后的力学性能，根据模型的预测结果可以对 AZ31 镁合金的退火工艺参数进行优化，以提高退火后合金的力学性能。

孙业东等<sup>[49]</sup>建立了以激光粉末熔床的工艺参数为输入，合金的致密度和表面粗糙度为输出的高斯回归模型，利用该模型确定了高致密度( $\geq 99.5\%$ )且表面粗糙度小于  $10\ \mu\text{m}$  的合金的工艺参数。不仅提高了激光粉末床熔融工艺的效率和质量，还为其他合金的增材制造工艺优化提供了参考，具有较高的实际应用价值和理论意义。赵传营等<sup>[50]</sup>基于正交试验产生的磁粒研磨工艺参数，用于建立结构为 4-12-1 的 BP 神经网络，使用遗传算法(GA)对工艺参数进行寻优，使用寻优得到的工艺参数进行试验，有效提高了 TC4 钛合金加工后的表面质量，优化前后加工效果对比如图 8 所示。该研究尤其是利用正交试验获取的少量数据，成功结合智能算法，实现了精确的工艺优化，为工业应用提供了新的解决方案。

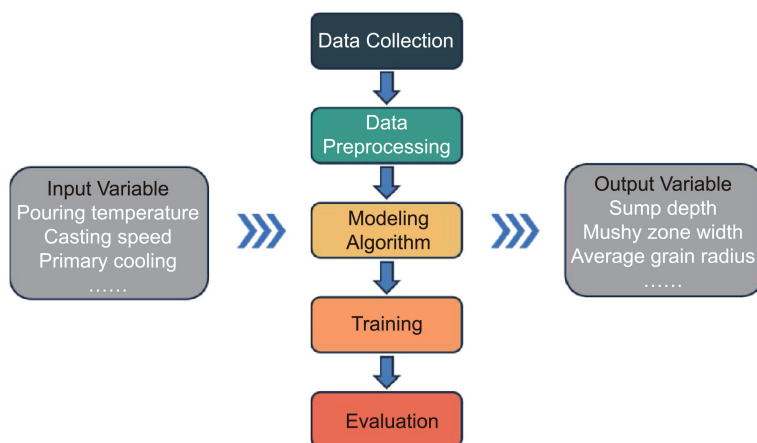


图 6 机器学习预测铸锭凝固特征流程图<sup>[47]</sup>

Fig. 6 Flowchart for predicting ingot solidification characteristics via machine learning<sup>[47]</sup>

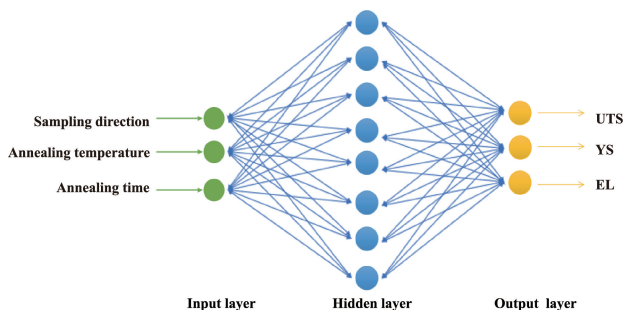


图 7 基于退火工艺参数预测 AZ31 镁合金力学性能的神经网络结构示意图<sup>[48]</sup>

Fig. 7 Schematic of neural network architecture for predicting mechanical properties of AZ31 magnesium alloy based on annealing process parameters<sup>[48]</sup>

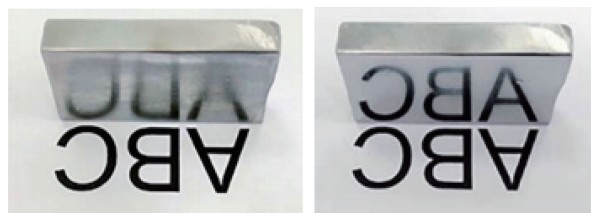


图 8 加工工艺优化前后加工效果对比<sup>[50]</sup>

Fig. 8 Comparison of processing effects before and after process optimization<sup>[50]</sup>

## 4 结 语

近年来，以历史实验数据为基础的机器学习辅助轻质合金的研究已经取得了显著进展，但仍面临数据获取

和预处理困难、模型选择与优化繁杂以及模型的可解释性不足的问题。此外，多目标优化和实验验证的高成本和耗时也是主要的问题。

未来，机器学习在轻质合金研究中的应用前景广阔。首先，通过多种途径获取高质量数据，并采用大语言模型高效处理和分析文本数据，能够整合不同来源的数据，从而提高数据的质量和完整性<sup>[51-53]</sup>。其次，结合多种建模方法和多尺度模拟技术，有助于实现从轻质合金组成到性能的全面预测。此外，增强模型的可解释性，使研究者能够理解模型的决策过程，将提高模型的可信度和实用性。多目标优化算法的发展，可以在多个性能指标之间找到最佳平衡，实现综合性能最优的设计。建立高通量自动化实验平台<sup>[54-56]</sup>，快速验证模型预测结果，并将实验数据反馈到模型中进行迭代优化，进而显著提高轻质合金设计的效率和准确性。采用可解释性模型，并结合 SHAP 方法、符号回归等解释工具，能够有效提高模型的透明性和理解度。其中，SHAP 方法可量化各特征对模型预测结果的贡献，符号回归则能生成与材料行为直接相关的数学公式<sup>[57-59]</sup>，帮助研究者直观理解材料内在规律。跨学科合作将推动机器学习在轻质合金研究中的广泛应用，集成材料科学、计算科学和人工智能领域的知识和技术，推动新合金的快速发现和开发。通过共同努力，机器学习将在轻质合金研究中发挥更大的作用，推动材料科学的快速发展。

## 参考文献 References

- [1] 杨甄鑫, 廖抒华. 汽车零部件[J], 2021(1): 107-113.  
YANG Z X, LIAO S H. Automobile Parts[J], 2021(1): 107-113.
- [2] 何兴群. 新型银合金电接触材料的设计、制备与电接触行为研究[D]. 北京: 北京科技大学, 2023.  
HE X Q. A Study on the Design, Preparation and Electrical Contact Behaviour of Novel Silver Alloy Electrical Contact Materials[D]. Beijing: University of Science and Technology Beijing, 2023.
- [3] 何兴群, 付华栋, 张洪涛, 等. 金属学报[J], 2022, 58(6): 816-826.  
HE X Q, FU H D, ZHANG H T, *et al.* Acta Metallurgica Sinica[J], 2022, 58(6): 816-826.
- [4] AHMAD F, MAHMOOD A, EL AZAB I H, *et al.* Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry[J], 2024, 453: 115670.
- [5] SPIJKERBOER F L, OVERDYK F J, DAHAN A. Journal of Clinical Monitoring and Computing[J], 2024, 38: 915-925.
- [6] LANGE J J, ANELLI A, ALSENZ J, *et al.* Molecular Pharmaceutics[J], 2024, 21: 3343-3355.
- [7] CHUNG J, LI J, SAIMON A I, *et al.* Scientific Reports[J], 2024, 14(1): 12131.
- [8] HU X, WANG J, WANG Y, *et al.* Computational Materials Science [J], 2018, 155: 331-339.
- [9] 张闰, 薛德祯, 辛社伟, 等. 中国材料进展[J], 2025, 44(4): 319-329+318.  
ZHANG Y, XUE D Z, XIN S W, *et al.* Materials China[J], 2025, 44(4): 319-329+318.
- [10] 冯建发, 王畅畅, 苏航, 等. 中国材料进展[J/OL], 2025. (2025-08-28) [2025-10-27]. <https://link.cnki.net/urlid/61.1473.tg.20250827.1701.002>.  
FENG J F, WANG C C, SU H, *et al.* Materials China[J/OL], 2025. (2025-08-28) [2025-10-27]. <https://link.cnki.net/urlid/61.1473.tg.20250827.1701.002>.
- [11] 崔壮, 刘满平, 曾迎, 等. 稀有金属材料与工程[J], 2024, 53(8): 2375-2389.  
CUI Z, LIU M P, ZENG Y, *et al.* Rare Metal Materials and Engineering[J], 2024, 53(8): 2375-2389.
- [12] 王海伟, 叶波, 冯晶, 等. 中国材料进展[J], 2023, 42(10): 806-813.  
WANG H W, YE B, FENG J, *et al.* Materials China[J], 2023, 42(10): 806-813.
- [13] 赵鼎祺, 乔珺威, 吴玉程. 中国材料进展[J], 2021, 40(7): 508-517.  
ZHAO D Q, QIAO J W, WU Y C. Materials China[J], 2021, 40(7): 508-517.
- [14] 王雅哲, 马其华. 工程塑料应用[J], 2023, 51(9): 167-174.  
WANG Y Z, MA Q H. Engineering Plastic Applications[J], 2023, 51(9): 167-174.
- [15] 曾小勤, 谢天, 应韬, 等. 中国材料进展[J], 2020, 39(1): 1-11+30.  
ZENG X Q, XIE T, YING T, *et al.* Materials China[J], 2020, 39(1): 1-11+30.
- [16] CHEN C, ZUO Y, YE W, *et al.* Advanced Energy Materials[J], 2020, 10: 1903242.
- [17] 申海杰, 李彩虹, 边倩, 等. 微型电脑应用[J], 2024, 40(2): 33-37.  
SHEN H J, LI C H, BIAN Q, *et al.* Microcomputer Applications[J], 2024, 40(2): 33-37.
- [18] TAO Q, XU P, LI M, *et al.* npj Computational Materials[J], 2021, 7: 23.
- [19] GEE R, LINDSEY R. Propellants, Explosives, Pyrotechnics [J], 2023, 48: e202380431.
- [20] ZHANG H T, FU H D, HE X Q, *et al.* Acta Materialia[J], 2020, 200: 803-810.
- [21] LIU C C, LU Y C, FENG J F, *et al.* Materials Today Communications [J], 2024, 38: 107667.
- [22] WEN C, WANG C X, ZHANG Y, *et al.* Acta Materialia[J], 2021, 212: 104195.
- [23] ZHU Y L, DUAN F M, YONG W, *et al.* Computational Materials Science[J], 2022, 211: 111560.
- [24] YUAN H, CAO B, YOU K D, *et al.* SCIENTIA SINICA Technologica

- [J], 2023, 53(11): 1962–1974.
- [25] 林轩杰, 江汉同, 李倩, 等. 工程科学学报[J], 2024, 46(6): 1120–1129.  
LIN X J, JIANG H T, LI Q, *et al.* Chinese Journal of Engineering [J], 2024, 46(6): 1120–1129.
- [26] YANG C, REN C, JIA Y, *et al.* Acta Materialia [J], 2022, 222: 117431.
- [27] ZHANG Y, WEN C, WANG C X, *et al.* Acta Materialia [J], 2020, 185: 528–539.
- [28] LIAN Z H, LI M J, LU W C. International Journal of Fatigue [J], 2022, 157: 106716.
- [29] WANG C S, FU H D, JIANG L, *et al.* npj Computational Materials [J], 2019, 5: 87.
- [30] LAN Q, WANG X, SUN J, *et al.* Materials Today Communications [J], 2022, 31: 103301.
- [31] ZHAO P, WANG Y, JIANG B, *et al.* Materials Science and Engineering: A [J], 2023, 879: 145202.
- [32] ORME A D, CHELLADURAI I, RAMPTON T M, *et al.* Computation Materials Science [J], 2016, 124: 353–363.
- [33] BHAT N, BARNARD A S, BIRBILIS N. Computational Materials Science [J], 2023, 228: 112270.
- [34] YIN X Y, YAO Q, LIU J J, *et al.* Bulletin of Materials Science [J], 2020, 43(1): 241–250.
- [35] HUANG J, XUE J, LI M, *et al.* Materials (Basel) [J], 2023, 16(20): 6757.
- [36] WANG Y Y, XIE T, TANG Q L, *et al.* Journal of Magnesium and Alloys [J], 2024, 12(4): 1406–1418.
- [37] MOKHTARI M A, NIKZAD M H. Materials Today Communications [J], 2024, 40: 109476.
- [38] FERNÁNDEZ M, REZAEI S, MIANROODI J R, *et al.* Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences [J], 2020, 7: 1.
- [39] 王园园, 武川, 彭志伟, 等. 精密成形工程 [J], 2024, 16(1): 33–42.  
WANG Y Y, WU C, PENG Z W, *et al.* Journal of Netshape Forming Engineering [J], 2024, 16(1): 33–42.
- [40] 刘笑达, 侯建鹏, 阴明, 等. 火力与指挥控制 [J], 2020, 45(9): 52–57+62.  
LIU X D, HOU J P, YIN M, *et al.* Firepower and Command and Control [J], 2020, 45(9): 52–57+62.
- [41] 赵婉辰, 郑晨, 肖斌, 等. 金属学报 [J], 2021, 57(6): 797–810.  
ZHAO W C, ZHENG C, XIAO B, *et al.* Acta Metallurgica Sinica [J], 2021, 57(6): 797–810.
- [42] ZHANG Y B, ZHANG P, LI J H, *et al.* Materials Research Express [J], 2023, 10: 016518.
- [43] SALVADOR C A F, ZORNIO B F, MIRANDA C R. ACS Applied Materials & Interfaces [J], 2020, 12(51): 56850.
- [44] SHEN Q, YIN Q, ZHAO H, *et al.* Computational Materials Science [J], 2024, 242: 113107.
- [45] MI X X, TIAN L J, TANG A T, *et al.* Computational Materials Science [J], 2022, 201: 110881.
- [46] JIANG L, WANG C S, FU H D, *et al.* Journal of Materials Science & Technology [J], 2022, 98(3): 33–43.
- [47] GUO G, YAO T, LIU W, *et al.* Materials [J], 2024, 17(6): 1409.
- [48] 刘彬, 汤爱涛, 潘复生, 等. 重庆大学学报 [J], 2011, 34(3): 44–49.  
LIU B, TANG A T, PAN F S, *et al.* Journal of Chongqing University [J], 2011, 34(3): 44–49.
- [49] 孙业东, 姜夕义, 李昊卿, 等. 中国有色金属学报 [J], 2022, 32(10): 3085–3095.  
SUN Y D, JIANG X Y, LI H Q, *et al.* The Chinese Journal of Non-ferrous Metals [J], 2022, 32(10): 3085–3095.
- [50] 赵传营, 赵玉刚, 刘宁, 等. 表面技术 [J], 2020, 49(2): 316–321.  
ZHAO C Y, ZHAO Y G, LIU N, *et al.* Surface Technology [J], 2020, 49(2): 316–321.
- [51] KAMNIS S. Materials Letters [J], 2024, 358: 135871.
- [52] 刘英莉, 李武亮, 牛琛, 等. 材料科学与工程学报 [J], 2022, 40(4): 640–645+667.  
LIU Y L, LI W L, NIU C, *et al.* Journal of Materials & Engineering [J], 2022, 40(4): 640–645+667.
- [53] 闫姿霓, 饶梓元, 曾小勤. 中国材料进展 [J], 2025, 44(5): 409–423+450.  
YAN Z N, RAO Z Y, ZENG X Q. Materials China [J], 2025, 44(5): 409–423+450.
- [54] VECCHIO K S. Current Opinion in Solid State and Materials Science [J], 2024, 31: 101164.
- [55] BRESNAHAN B L, POERSCHKE D L. Metals [J], 2024, 14(5): 558.
- [56] 吴佳奇, 连利仙, 李雯静, 等. 稀有金属材料与工程 [J], 2025, 54(9): 2273–2280.  
WU J Q, LIAN L X, LI W J, *et al.* Rare Metal Materials and Engineering [J], 2025, 54(9): 2273–2280.
- [57] ZHOU S W, YANG B, XIAO S N, *et al.* Chinese Journal of Mechanical Engineering [J], 2023, 36: 40.
- [58] ZHANG N, FU H, LIU P, *et al.* Materialia [J], 2023, 32: 101904.
- [59] SHEN J L, VENKATESH V, NORAAS R, *et al.* Acta Materialia [J], 2023, 252: 118929.